

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ
СПЕКТРАЛЬНЫХ КРИВЫХ ПРИ СОПОСТАВЛЕНИИ ВЫЧИСЛЕННЫХ
И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИК СПЕКТРОВ С
РАЗРЕШЕННОЙ СТРУКТУРОЙ.**

Д.И. Потешный, И.В. Михайлов

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН

Возможность использования ИК спектров для идентификации индивидуальных веществ и компонент их смесей и количественного определения их концентраций без использования образцов стандартного состава предполагает наличие методов сопоставления вычисленных и экспериментальных кривых распределения коэффициентов поглощения, пропускания или оптической плотности. Уже указывалось [1], что такие методы могут базироваться на сравнении спектральных кривых в заданных частотных диапазонах, охватывающих сразу несколько полос. Мерой математического сходства спектров может служить коэффициент корреляции, но при этом необходимы специальные способы "сглаживания" кривых.

В данной работе исследовались особенности двух методов обработки спектральных кривых – интервального уширения с помощью одной аппаратной функции (гауссовой функции с относительно большой полушириной) и интегрального сглаживания всей кривой с применением заданной аппаратной функции к спектральным "высотам", которые берутся с малым шагом по частоте (1 см^{-1}), и последующим суммированием результатов её (функции) действия.

Применение указанных методик к теоретическим (DFT/B3LYP/6-311G**) и экспериментальным (с известными характеристиками получения: длинами оптических путей и концентрациями) спектрам 20 органических молекул позволило определить оптимальные параметры процедур "сглаживания", приводящие к значительному (иногда на порядок) возрастанию коэффициента корреляции, но сохраняющие при этом достаточную различимость спектров разных молекул. Исследованные методы обработки спектральных кривых могут стать составной частью проводимых в автоматическом режиме вещественного анализа соединений и количественного определения состава смесей по их ИК спектрам.

1. Грибов Л.А., Баранов В.И., Эляшберг М.Е. Безэталонный молекулярный спектральный анализ. Теоретические основы. М.: Изд. Эдиториал УРСС, 2002. 320 с.