

РАЗВИТИЕ И ОСВОЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА ВЕЩЕСТВА В НЕФТЕГАЗОВОМ ДЕЛЕ

М.Ф. Каримов

Бирская государственная социально-педагогическая академия

Рассмотрена краткая история становления и развития атомного и молекулярного спектрального анализа вещества. Выделены содержание, формы и методы вузовского обучения основам анализа спектров атомов и молекул газов и жидкостей, находящих применение в нефтегазовой промышленности. Оценена дидактическая эффективность изучения на занятиях по физике и химии принципов и методов атомного и молекулярного спектрального анализа на профессиональную подготовку будущих исследователей природы и создателей новых технологий.

Основные положения и методы фундаментальной и прикладной науки, изучаемые студентами в высшей профессиональной школе, служат для будущих и работающих исследователей и преобразователей природной и технической действительности необходимым интеллектуальным базисом для успешного проектирования и реализации технологий промышленного производства.

Молекулярная спектроскопия – составная часть физики и химии, имеющая фундаментальную научную задачу исследования и интерпретации спектров простых и сложных молекул, находит себе практическое применение во многих отраслях материального производства, в том числе и в нефтегазовом деле.

Становление и развитие молекулярной спектроскопии как плодотворного метода изучения строения молекул и межмолекулярных взаимодействий посредством получения и анализа спектров излучения и поглощения газов и жидкостей происходило через определенные этапы.

Выдающийся английский физик и математик И.Ньютон (1643-1717) – основоположник классической физики [1] и математического анализа [2] первым открыл явление дисперсии света с соответствующим спектром в виде разложения белого света на семь цветов при помощи трехгранной стеклянной призмы, о чем сообщил на заседании Лондонского королевского общества 6 февраля 1672 года [3].

Астроном – самоучка Ф.В.Гершель (1738-1822) в 1800 г. открыл и исследовал инфракрасную часть спектра [4], за которым в 1801 г. последовало обнаружение И.В.Риттером (1776-1810) и ультрафиолетовой части спектра излучения вещества [5].

В 1802 г. У.Х.Волластон (1766-1828) первый обратил внимание исследователей природы на темные линии в спектре Солнца и открыл линейчатый спектр светящихся газов [6].

Работы И.Фраунгофера (1787-1826) по обнаружению в спектре пламени сальной свечи двух близко расположенных ярких желтых линий, отчетливо выделяющихся на фоне сплошного спектра, по изобретению и использованию дифракционной решетки из параллельных нитей в исследованиях спектров излучения вещества и по составлению рисунка солнечного спектра [7,8], обозначая наиболее интенсивные линии латинскими буквами от А до Н, знаменуют один из важных этапов в становлении и развитии спектроскопии.

Прочный фундамент новой физико-химической науки – спектроскопии и её практического применения – спектрального анализа вещества был заложен трудами Г.Р.Кирхгофа (1824-1887) и Р.В.Бунзена (1811-1899), опубликованными в период с 1859 по 1862 годы [9-12].

С помощью разработанного метода спектрального анализа Г.Р.Кирхгоф и Р.В.Бунзен открыли два новых химических элемента: цезий Cs (1860 г.) и рубидий Rb (1861 г.). Вывод Г.Р.Кирхгофа о возможности исследования химического состава достаточно удаленных небесных тел относится к числу фундаментальных в естествознании. Газовая горелка Р.В.Бунзена, служившая источником света в исследованиях по спектральному анализу вещества, и разработанные им точные методы газового анализа положили начало регулярного и систематического применения достижений спектроскопии в решении задач химического анализа газов, жидкостей и твердых тел, поставленных в исследовательских и заводских лабораториях.

Основанные на законе об индивидуальности линейчатых эмиссионных спектров для каждого химического элемента, сформулированном в 1859 г. Г.Р.Кирхгофом и Р.В.Бунзеном, систематические спектральные исследования, проведенные во второй половине девятнадцатого и первой половине двадцатого веков, привели физиков и химиков к открытию 14 новых элементов (Cs, Rb, Tl, In, He, Ga, Ge, Pr, Nd, Sm, Ho, Tm, Yb и Lu), представленных в настоящее время в соответствующих ячейках периодической таблицы химических элементов Д.И.Менделеева (1834-1907) [13].

Разработчики метода спектрального анализа Г.Р.Кирхгоф и Р.В.Бунзен в своих работах [9-12] указывали на то, что, хотя большинство разнообразных соединений, вводимых в пламя бунзеновской газовой горелки, обычно давало спектр металла, входящего в соединение, в общем случае атомный спектр не совпадает с молекулярным и химическое соединение обнаруживает иные спектральные линии, нежели химические элементы.

В разрешении научной проблемы установления точных значений длин волн солнечного излучения большое значение имела экспериментальная работа А.Й.Ангстрема (1814-1874) [14], составившего в 1868 г. первый атлас спектральных линий Солнца. Поэтому в честь А.Й.Ангстрема названа спектроскопическая единица измерения длины.

Открытие эмпирических закономерностей, связывающих спектральные линии атомов исследуемых веществ, и первые попытки интерпретировать атомные спектры принадлежат И.Я.Бальмеру (1825-1898) [15] и И.Р.Ридбергу (1854-1919) [16].

Президент русского физико-химического общества, основатель советской научной школы спектроскопистов, действительный член АН СССР, создатель и руководитель Государственного оптического института, профессор Ленинградского государственного университета Д.С. Рождественский (1876-1940) предложил метод «скрещивания» интерферометра со спектрографом с призмой или дифракционной решеткой, обладающей большой дисперсией [17], открыл метод крюков, реализовав возможность изменения наклона интерференционной полосы, вводя в первое плечо интерферометра слой исследуемого вещества и второе плечо – стеклянную пластинку [18], исследовал спектральные закономерности в излучении атомов и ионов [19] и развил теорию и практику оптических и спектральных приборов [20].

На основе спектроскопических данных в 1913 г. Н.Х.Бор (1885-1962) построил теорию водородоподобного атома [21], исходя из идеи М.Планка (1858-1947) о квантовании энергии [22] и предполагая наличие в атоме стационарных разрешенных орбит, двигаясь по которым электрон, вопреки законам классической электродинамики, не излучает энергию, но может скачком перейти на более близкую к ядру атома разрешенную орбиту, испустив квант энергии в виде электромагнитного излучения, имеющего соответствующую спектральную линию.

В нефтяной и газовой промышленности, имеющей дело с углеводородным сырьем и продуктами, изготовленными из него, актуальными являются постановка и решение фундаментальных задач естест-

вознания о природе химической связи, образовании молекул из атомов, строение и свойства самих молекул.

Лауреаты Нобелевской премии по физике, основоположники квантовой механики М.Борн (1882-1970), В.К.Гейзенберг (1901-1976) и будущий руководитель Лос-Аламосской научной лаборатории по созданию и испытанию первой атомной бомбы Р.Оппенгеймер (1904-1967) построили в двадцатые годы двадцатого века первые квантовые модели молекул [23,24].

Будущий лауреат Нобелевской, Ленинской и Государственных премий СССР по физике, профессор Московского государственного университета Л.Д.Ландау (1908-1968) в 1926 году построил теорию спектров двухатомных молекул [25].

Один из разработчиков метода молекулярных орбиталей Ф.Хунд (1896-1997), предложивший в 1927 г. эмпирический способ (правила Хунда) определения размещения энергетических уровней в мультиплетах, заложил в это же время основы теории молекулярных спектров [26].

Выпускники Мюнхенского университета В.Г.Гайтлер (1904-1981) и Г.Ф.Лондон (1900-1954) в 1927 г. выполнили первый приближенный расчет молекулы водорода [27], чем положили начало развитию квантовой химии молекул.

Дважды лауреат Нобелевской премии, преподаватель – ученый Калифорнийского технологического института Л.К.Полинг (1901-1994) в 1928 г. разработал основы теории химических связей в молекулах [28].

В органических соединениях, синтезируемых на основе углерода, атом которого в свободном состоянии имеет электронную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^2$, четыре ковалентные связи образуются благодаря возникновению энергетически возбужденной конфигурации $1s^2 2s^2 2p^3$. В простых ординарных σ -связях атома углерода электронное облако располагается вдоль направления связи и обладает симметрией вращения. Двойные и тройные связи атома углерода образуются π -электронами, облако которых имеет форму гантели и располагается перпендикулярно линии, соединяющей связываемые атомы.

Электронные переходы в органических соединениях, находящих применение в нефтегазовом деле, в настоящее время классифицируют в зависимости от типа химической связи, обусловливаемой характером связывающих орбиталей:

1. У насыщенных соединений с σ -связью переходы электронов типа σ (простая орбиталь) – σ^* (разрыхляющая орбиталь) сопровождаются поглощением квантов соответствующих высокой энергии в

дальней ультрафиолетовой области спектра и фиксируются с помощью вакуумных спектрофотометров.

2. У ароматических соединений с сопряженными π -связями осуществляются электронные переходы типа π (двойная орбиталь) – π^* (разрыхляющая орбиталь) сопровождаются поглощением квантов средней энергии в окрестностях границы между ближней и дальней ультрафиолетовой областями спектра и регистрируются спектрофотометром.

3. У органических соединений с гетероатомами (Cl, N, S, O и др.) переходы электронов типа n (несвязывающая орбиталь) – π^* (разрыхляющая орбиталь) сопровождаются поглощением квантов малой энергии в ближней ультрафиолетовой области и выделяются с помощью серийных спектрофотометров.

В 1922 г. профессор и ассистент Геттингенского университета М.Борн (1882-1970) и Э.Хюккель (1896-1980) провели исследование вращательно - колебательных спектров многоатомных молекул, что нашло отражение в научной периодической печати [29].

В коротковолновом диапазоне (0,75 – 2,5 микрон) или ближайшей области инфракрасного спектра расположены полосы, соответствующие обертонам и составным частотам основных колебаний молекул. Здесь же располагаются линии и полосы электронно-колебательного спектра атомов и молекул.

В средневолновом участке (2,5 – 50 мкм) инфракрасного спектра сосредоточены полосы, отвечающие основным колебательным частотам легких молекул и отдельных атомных групп.

В длинноволновой или дальней области (50 – 1000 мкм) инфракрасного спектра локализованы полосы поглощения и испускания излучения, соответствующие изменению вращательной энергии молекул газов и паров. Здесь же размещаются низкочастотные колебательные полосы тяжелых молекул.

В 1928 году профессора Московского государственного университета, будущие действительные члены АН СССР Г.С.Ландсберг (1890-1957) и Л.И.Мандельштам (1879-1944) открыли явление комбинационного рассеяния света в кварце, при котором в рассеянном свете оказались частоты световых колебаний, отличные от частоты колебаний падающего на вещество света [30].

Постановка и решение действительными членами АН СССР, профессорами Д.С. Рождественским, Л.И. Мандельштамом и Г.С. Ландсбергом задач атомной и молекулярной спектроскопии осуществлялся, как показывает анализ их трудов, в рамках универсального метода познания и преобразования объектов, процессов и явлений -

информационного моделирования действительности с этапами постановки задачи, построения модели, разработки и исполнения алгоритма, анализа результатов и формулирования выводов [31].

В связи с этим отдельно выделим этап построения информационной модели явления комбинационного рассеяния света в веществе.

Элементы простой квантовой теории, объясняющей основные признаки явления комбинационного рассеяния света в кристаллах и жидкостях, сводятся к следующему. Рассеяние света веществом следует упрощенно рассматривать как упругие и неупругие столкновения световых квантов – фотонов с молекулами, в результате которых фотоны рассеиваются в различные стороны. При упругом столкновении фотонов с молекулами энергия молекулы и частота ν_0 фотона не меняются, что соответствует рэлеевскому рассеянию света [32]. В процессе неупругого столкновения энергия фотона увеличивается или уменьшается на величину $h\nu_i$, являющуюся значением энергии молекулы, находящейся в колебательном состоянии. Дополнительные спектральные линии на спектрограммах представляют собой линейные комбинации типа $\nu_0 \pm n\nu_i$ (при целочисленном значении n) из частоты падающего света ν_0 и собственных частот инфракрасных колебаний ν_i молекул рассеивающего вещества. Отсюда происходят названия «комбинационное рассеяние света» и «комбинационный резонанс».

Из представленной информационной модели – элементарного объяснения видно, как тесно связано явление комбинационного рассеяния света с молекулярной структурой рассеивающего вещества. В этой связи рассеяние света является наиболее эффективным средством оптического исследования строения вещества, позволяющим выявить особенности структуры молекул твердых тел, жидкостей и газов.

В настоящее время метод комбинационного рассеяния света используется в большинстве физических и химических лабораторий учебных и научных учреждений многих стран нашей планеты и освещению вопросов с ним связанных посвящено в мировой научной литературе десятки тысяч теоретических и практических работ.

Академик Г.С. Ландсберг вместе со своими сотрудниками и коллегами - химиками по Академии наук Советского Союза поставил и выполнил большой цикл научных исследований по спектрам комбинационного рассеяния света в индивидуальных углеводородах, которые были обобщены и опубликованы в коллективной монографии [33].

Молекулярный анализ по спектрам комбинационного рассеяния света в веществе, применяемый для качественного и количественного

определения состава и структуры сложных органических смесей, являющихся сырьем или продуктом в нефтегазовой промышленности, имеет следующие особенности.

1. Наличие простой зависимости между интенсивностями спектральных линий и концентрацией вещества для широкого класса химических соединений выделяет преимущество метода комбинационного рассеяния света перед другими методами молекулярного спектрального анализа жидкостей и газов.

2. Необходимость осуществления специальной очистки пробы для спектрального анализа от механических и люминесцентных примесей для четкого распознавания линий комбинационного рассеяния света в молекулах смесей углеводородов.

3. Перекрывание интенсивных спектральных линий одних классов углеводородов (ароматические углеводороды и шестичленные нафтены) со слабыми спектральными линиями других классов углеводородов (парафины и пятичленные нафтены) в сравнительно узком спектральном интервале с протяженностью не более 300 ангстрем.

Комбинированный метод физико-химического анализа бензинов, разработанный коллективом физиков под руководством академика Г.С.Ландсберга (1890-1957) и химиков под руководством Б.А.Казанского (1891-1973), позволяющий определить качественное и количественное содержание индивидуальных углеводородов в горючем материале, состоит из следующих действий: а) точная ректификация; б) хроматографическая адсорбция; в) дегидрогенизационный катализ; г) спектральный анализ фракций способом комбинационного рассеяния света.

Удостоенный Нобелевской премии по химии за работы по электронной структуре и геометрии молекул, особенно свободных радикалов, посредством экспериментального изучения спектров молекул в широком диапазоне электромагнитных волн, Г.Герцберг (1904-1999) разработал систематику физико-химических характеристик CP , CH , C^{+2} , C_3 , CH_2 , CH_3 , BH_2 , NH_2 , $HSiCl$, $HNCH$ и других образований [34], являющихся предметом диагностики в нефтегазовой промышленности.

Уникальное, не имеющее аналогов в мировой научной литературе, руководство по атомной и молекулярной спектроскопии [35] для начинающих и работающих исследователей природной действительности принадлежит профессору Белорусского государственного университета, действительному члену АН БССР М.А. Ельяшевичу (1908-1996), разработавшему основы качественной и количественной теории колебательных спектров многоатомных молекул [36].

Член-корреспондент АН СССР Г.Ф.Большаков (1932-1989) выделял инфракрасные спектры гетероорганических соединений как средство контроля качества нефти [37].

Профессор МГУ, член - корреспондент Российской академии наук Л.А.Грибов (р.1933), построивший общую количественную теорию оптических молекулярных спектров вещества в диапазоне от инфракрасного до ультрафиолетового излучения [38], поддерживает интеллектуальными усилиями и творческими достижениями своей научной школы опережающий уровень отечественных исследований в теоретической и прикладной атомной и молекулярной спектроскопии [30].

В целях недопущения снижения уровня фундаментальности отечественного высшего профессионального образования в области теории и практики спектрального анализа газов, жидкостей и твердых, находящихся применение в нефтегазовой промышленности, необходимо постоянно включать согласно общеметодологическим принципам объективизма, детерминизма, историзма и дидактическим принципам информативности, систематичности, научности, политехничности и интегративности в содержание теоретической, методической и практической подготовки будущих исследователей природы и создателей новых технологий на занятиях по физике и химии следующие темы.

1. Краткая история становления и развития спектроскопии. Разложение естественного солнечного света на семь цветов при помощи трехгранной стеклянной призмы. Явление дисперсии света как зависимость показателя преломления среды от частоты падающего электромагнитного излучения. Основы электронной теории нормальной и аномальной дисперсии света. Связь явления дисперсии света с поглощением электромагнитного излучения. Устройство и принцип действия спектроскопа.

2. Атомный спектральный анализ как наблюдение и измерение видимых и ультрафиолетовых спектров испускания и поглощения атомов вещества. Эмиссионный спектральный анализ, основанный на измерении интенсивности спектральных линий атомов вещества, нагретого до температур в несколько тысяч градусов. Получение и изучение эмиссионных спектров атомов вещества с помощью спектрографов со стеклянной и кварцевой оптикой.

3. Основы квантовой теории водородоподобного атома. Квантовые числа одноэлектронного атома и степень вырождения его энергетических уровней. Зависимость спектров одноэлектронных атомов от заряда и массы ядра. Тонкая структура уровней энергии атома и его

спектральных линий. Дублетная структура энергетических уровней атомов щелочных металлов.

4. Общая характеристика спектров атомов, имеющих два электрона во внешних оболочках. Получение и исследование спектров атомов гелия, щелочноземельных металлов, цинка, кадмия и ртути. Особенности спектров с заполняющимися и заполненными p – оболочками. Спектры атомов галоидов и инертных газов. Общая характеристика спектров атомов с достраиваемыми d - и f -оболочками. Учет обменных сил при расчете энергии стационарных состояний атомов.

5. Электронные спектры поглощения ряда химических соединений и функциональных групп. Зависимость электронных спектров в неорганических соединениях от высокой поляризации атомов, входящих в молекулу вещества. Малоинтенсивные полосы поглощения в видимой области спектра у ионов переходных элементов, находящихся под влиянием поля лигандов в комплексных соединениях. Снятие спектра поглощения анализируемого вещества - раствора на спектрофотометре.

6. Возникновение электронных спектров у органических соединений, вызванные переходом электронов с основного на возбужденные энергетические уровни. Переходы электронов типа σ (простая орбиталь) – σ^* (разрыхляющая орбиталь) у насыщенных химических соединений. Электронные переходы типа π (двойная орбиталь) – π^* (разрыхляющая орбиталь) у ароматических соединений. Переходы электронов типа n (несвязывающая орбиталь) – π^* (разрыхляющая орбиталь) у органических соединений с гетероатомами.

7. Энергии, соответствующие различным видам взаимодействий в молекуле. Электронная, колебательная и вращательная составляющие уровней энергии молекулы. Электронно – колебательные уровни двухатомной молекулы. Принцип Д.Франка (1882-1964) – Э.Кондона (1902-1974) о сохранении относительного положения и скоростей атомов при электронных переходах у молекулы. Ангармоничность колебаний и схождение колебательных энергетических уровней к границе диссоциации молекулы. Колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул.

8. Колебания многоатомных молекул. Валентные и деформационные колебания молекул. Симметричные и антисимметричные валентные колебания молекул, при которых углы между связями атомов остаются неизменными. Плоскостные и внеплоскостные деформационные колебания молекул. Ножничный, веерный, крутильный и маятниковый типы деформационных колебаний молекул.

9. Инфракрасная спектроскопия вещества, использующая колебательные и вращательные спектры поглощения молекул. Коротковолновый диапазон (0,75 – 2,5 микрон) или ближайшая область инфракрасного спектра, соответствующая обертонам и составным частотам основных колебаний молекул. Средневолновый участок (2,5 – 50 мкм) инфракрасного спектра, отвечающий основным колебательным частотам легких молекул и отдельных атомных групп. Длинноволновая или дальняя область (50 – 1000 мкм) инфракрасного спектра, соответствующая изменению вращательной энергии молекул газов и паров.

10. Системно–структурно–функциональные модели спектрометров инфракрасной области спектра. Спектрофотометры для экспериментов в коротковолновом участке инфракрасного излучения с призмами из стекла или кварца, вольфрамовыми лампами и фотоспротивлениями. Применение призм из кристаллов щелочно-галогенидных солей и иодистого цезия, дифракционных решеток, накаливаемых электрическим током штифтов В.Ф.Нернста (1864-1941) или силитовых стержней - глобаров, металлических и полупроводниковых термоэлементов и оптикоакустических приемников излучения в спектрометрах, предназначенных для работы в средневолновой инфракрасной области. Однолучевые и двухлучевые спектрометры. Использование светосильных дифракционных решеток-эшелетт и асферической отражательной оптики больших размеров в аппаратуре длинноволновой инфракрасной спектроскопии.

11. Открытие комбинационного рассеяния света в веществе Г.С.Ландсбергом (1890-1957) и Л.И.Мандельштамом (1879-1944) в СССР, Ч.В.Раманом (1888-1970) и К.С.Кришнаном (1898-1961) в Индии в 1928 году. Появление новых возможностей для изучения колебательных и вращательных состояний молекул вещества с помощью метода комбинационного рассеяния света. Широкое применение в химии при изучении вращательно-колебательных состояний органических молекул вследствие возможности проведения экспериментов с помощью комбинационного рассеяния в области видимого спектра света.

12. Развитие теоретических исследований, основанных на квантовой механике с привлечением нового математического аппарата – теории групп, для установления правил отбора и расчета характеристических частот колебаний молекул различных химических соединений, используемых в выявлении строения простых и сложных молекул. Методика применения положений и средств колебательной спектроскопии к исследованию состава и строения химических соедине-

ний в газовой, жидкой и твердой фазах и в приповерхностных слоях. Современный спектрометр комбинационного рассеяния света, состоящий из лазера, дающего монохроматическое излучение, ячейки для образца и монохроматора, регистрирующего спектр электромагнитных волн.

13. Изучение вращательной структуры спектров комбинационного рассеяния света в газах. Определение моментов инерции молекул газообразных H_2 , N_2 , O_2 и HCl . Доказательство того, что ядро азота подчиняется квантовой статистике Ш.Бозе (1894-1974) – А.Эйнштейна (1879-1955) по чередованию интенсивностей во вращательном спектре молекулы N_2 . Развитие теории химической связи атомов молекул на основе анализа спектров комбинационного рассеяния света в веществе. Установление с помощью метода комбинационного рассеяния света научного факта о том, что длина двойной связи $C=C$ в аллене меньше, чем в этилене. Спектроскопические исследования радикалов OH и CN .

14. Получение и анализ спектров комбинационного рассеяния света в линейных молекулах типа ацетилен C_2H_2 и диацетилен C_4H_2 , в молекулах с симметрией волчка типа аллена C_3H_4 . Особенности спектров комбинационного рассеяния и инфракрасных спектров углеводородов с двойными связями - этилена C_2H_4 , аллена C_3H_4 и бутатриена C_4H_4 . Множество спектральных исследований химических соединений с тройными связями - ацетилена C_2H_2 , диацетилена C_4H_2 , диметилацетилена C_4H_6 и цианогена C_2N_2 . Исследование вращательных спектров кольцевых химических систем – бензола C_6H_6 и триазина $C_3N_3H_3$.

15. Два метода решения задачи об установлении связи между спектрами и строением сложных многоатомных молекул. Теоретический аналитический или численный с помощью компьютеров расчет частот колебаний молекул. Эмпирическое установление закономерностей проявляющихся при сопоставлении спектров ряда близких между собой химических соединений. Расчет частот валентных колебаний алкенов, карбонильных соединений, альдегидов, кетонов, карбоновых и ангидридных кислот, ацилгалогенидов, сложных эфиров и амидов. Вычисление частот деформационных колебаний монозамещенных, *o*-дизамещенных, *m*-дизамещенных и *n*-дизамещенных производных бензола. Определение фракционного, группового и структурно-группового состава, показателя ароматизированности и октановых чисел нефтепродуктов с помощью инфракрасного Ж.Б.Ж.Фурье (1768-1830) – спектрометра.

Основными организационными формами обучения студентов высших учебных заведений теории и практике атомного и молекулярного спектрального анализа вещества служат: 1) лекция; 2) семинар; 3) практикум; 4) консультация; 5) лабораторная работа; 6) самостоятельная работа студентов под руководством преподавателя; 7) экскурсии в научные организации и производственные предприятия; 8) учебно - исследовательская работа; 9) научно - исследовательская работа; 10) производственная практика; 11) составление и защита реферата; 12) выполнение и защита курсовой работы или проекта; 13) постановка, выполнение и защита дипломной или выпускной квалификационной работы.

На наш взгляд, следует отдельно выделить как форму организации занятий по спектральному анализу студентов высших учебных заведений их участие и выступление со стендовыми докладами на секционных заседаниях научно - теоретических, -методических, -практических конференций по атомной и молекулярной физике и химии газов, жидкостей и твердых тел с участием отечественных кандидатов и докторов физико-математических, химических, технических наук и зарубежных учёных.

Эффективное усвоение студентами высшей школы физико - математических моделей и алгоритмов решения задач атомного и молекулярного спектрального анализа вещества, построенных и разработанных на основе системно-структурно-функционального, статистического и синергетического подходов к изучению природной и технической действительности, обеспечивается, как показывает дидактический опыт, методами, связанными с логикой абстрактного мышления и научного познания реальности. Анализ указанного дидактического явления позволяет выделить элементы объема и содержания понятия «логические методы обучения и воспитания студентов вуза» [40].

Логические методы обучения и воспитания будущих исследователей и преобразователей действительности характеризуются детерминированным изложением и последовательным усвоением учебного и научного материала по изучаемым физико-математическим и химическим дисциплинам с различной степенью результата освоения в зависимости от объективной сложности и субъективной трудности решенных задач теоретической и прикладной спектроскопии и состояния потребности – мотивационной, эмоционально – ценностной и познавательной – волевой сфер преподавателей – ученых и студентов высших учебных заведений.

Выработке у студентов способности применять усвоенную теорию на нестандартной практике и готовности к расширению границ научного познания и преобразования действительности ориентированы эвристические способы методологической, творческой, теоретической, методической и практической подготовки будущих ученых, инженеров и учителей в условиях освоения и применения положений и приемов спектрального анализа вещества.

Эвристические методы обучения и творчества в вузе – это способы дидактического взаимодействия преподавателя – ученого и студентов, ориентированные на развитие интуитивного мышления и творческих потенциалов обучающихся в высшей школе, превращающие будущего специалиста в субъекта самостоятельной научной деятельности в области атомной и молекулярной спектроскопии с общественно значимыми результатами.

Дидактический опыт показывает, что преподаватели – ученые вузов Уральского региона, использующие в учебном процессе, протекающем в высшей школе, рассмотренные выше содержание, формы и методы обучения студентов теории и практике атомного и молекулярного спектрального анализа вещества с учетом производственных задач нефтяной и газовой промышленности, достигают заметного повышения уровня профессиональной подготовленности выпускников высших учебных заведений к проектированию и реализации самостоятельной научной и производственной деятельности.

На основе обобщения приведенного выше материала по развитию, использованию и освоению спектрального анализа газов и жидкостей, находящего применение в нефтяной и газовой промышленности, можно сформулировать следующие выводы:

1. Выявление хронологической последовательности открытий в области атомного и молекулярного спектрального анализа вещества с точным выделением входных данных работ их авторов ориентировано на более полное удовлетворение требований принципа историзма к представлению достижений материальной и духовной культуры человечества и направлено на обогащение научно – технических основ нефтегазового дела.

2. Описание, объяснение и предсказание явлений излучения и поглощения электромагнитной энергии в веществе на основе квантовой теории строения энергетических уровней в атомах и молекулах, осуществленные зарубежными и отечественными учеными в двадцатом веке, обеспечивают прочный фундамент для познания и преобразования природной и технической действительности и внедрения но-

вейших достижений науки и техники в области спектрального анализа газов и жидкостей в нефтяное и газовое производство.

3. Содержание, формы и методы обучения спектральному анализу вещества в высших учебных заведениях на основе современных достижений фундаментальной естественно – математической науки и нефтегазовой техники способствуют повышению уровня методологической, творческой, теоретической, методической и практической подготовки будущих исследователей природы и создателей новых промышленных технологий.

Литература

1. Newton I. Philosophiae naturalis principia mathematica. – Londini: G&J.Innys, 1726. – 530 p.
2. Newton I. Analysis per quantitatum series, fluxiones, ac differentias: cum emimeratione linearum tertii ordinis. – Londini: Ex Officina Pearsoniana, 1711. – 101 p.
3. Newton I. Opticks: or, A treatise of reflections, refractions, inflections & colour of light. Also two treatises of the species and magnitude of curvilinear figures. – London: Printed for S. Smith and B. Walford, 1704. – Part 1. – 144 p. – Part 2. – 213 p.
4. Hershel F.W. Experiments on the refrangibility on the invisible rays of the Sun// Philosophical Transactions. – 1800. - Vol. II. – P. 284 – 292.
5. Ritter J.W. Versuche über das Sonnenlicht // Gilberts Annalen. – 1803. – Bd.12. – S. 409 – 415.
6. Wollaston W.H. A method of examining refractive and dispersive powers by prismatic reflection // Philosophical Transactions. – 1802. - Vol. IV. – P. 365 – 380.
7. Fraunhofer J. Bestimmung des Brechungs und Farbzersteuungs vermögens vershidener Glassorten in Bezug auf die Vervollkommung achromatischer Fernröhre // Denkschrift der König Akademie der Wissenschaften zu München. – 1817. - Bd. 5. – S. 193 – 226.
8. Fraunhofer J. Neue Modifikation des Lichtes durch gegenseitige einwirkung undBeugung der Strahlen und Gesetze derselben // Denkschrift der König Akademie der Wissenschaften zu München. – 1821-1822. - Bd. 8. – S. 1 – 76.
9. Kirchhoff G. Ueber die Fraunhoferschen Linien // Monatsbericht der Berliner Akademie. – 1859. – S. 662 – 665.
10. Kirchhoff G., Bunsen R. Chemische Analyse durch Spektralbeobachtungen // Poggendorf`s Annalen. –1860.– Bd.110.–S. 160 – 189.

11. Kirchhoff G., Bunsen R. Chemische Analyse durch Spektralbeobachtungen // Poggendorf's Annalen. – 1860. – Bd. 113. – S. 337 – 381.
12. Kirchhoff G. Zur Geschichte der Spektralanalyse und der Analyse der Sonnenatmosphäre // Poggendorf's Annalen. – 1862. – Bd. 118. – S. 94 – 111.
13. Менделеев Д.И. Сочинения. Т. 14. Основы химии. Ч. 2. – М.: Изд-во АН СССР, 1949. – 943 с.
14. Angström A.J. Optische Untersuchungen // Poggendorf's Annalen. – 1855. – Bd. 94. – S. 141 – 165.
15. Balmer J.J. Notiz über Spektrallinien des Wasserstoffs // Wieder Annalen der Physik. – 1885. – Bd. 25. – S. 80 – 87.
16. Rydberg J.R. Recherches sur la constitution des Spectres d`emission des elements chimiques // Konglich Svenska Vetenskaps-Akademien Handling. – 1890. – Bd. 23. - № 11. – S. 155.
17. Рождественский Д.С. Аномальная дисперсия в парах натрия. Диссертация. – СПб.: Типография М.М. Стасюлевича, 1912. – 93 с.
18. Рождественский Д.С., Афанасьев А.А. Метод Вуда для нахождения закономерностей в спектрах // Журнал русского физико-химического общества. Часть физическая. – 1913. – Т. 45. – Вып. 3. – С. 151 - 161.
19. Рождественский Д.С. Спектральный анализ и строение атомов. Речь на годовом собрании Государственного оптического института в Петрограде 15-го декабря 1919 г. – Пг.: Государственное изд-во, 1920. – 87 с.
20. Рождественский Д.С. О разрешающей силе спектроскопов // Известия АН СССР. Отделение физико-математических наук. – 1930. - № 3. – С.425-436.
21. Bohr N. On the constitution of atoms and molecules // Philosophical Magazine. – 1913. – Vol. 26. – P. 1 – 25.
22. Planck M. Vorlesungen über die Theorie der Wärme strahlung. – Leipzig: Barth J.A., 1906. – 222 s.
23. Born M., Heisenberg W. The quantum theory of molecules // Annalen der Physik. – 1924. – Bd. 74. - № 9. – S. 1 – 31.
24. Born M., Oppenheimer R. Quantum theory of molecules // Annalen der Physik. – 1927. – Bd. 84. - № 20. – S. 457 – 484.
25. Landau L.D. The theory of the spectra of two-atom molecules // Zeitschrift fur Physik. – 1926. – Bd. 40. - № 8. – S. 621 – 627.
26. Hund F. On the explanation of molecular spectra. I. // Zeitschrift fur Physik. – 1926. – Bd. 40. - № 10. – S. 742 – 764.

27. Heitler W., London H.F. The origin of the homopolar electron – pair in H_2 // *Physik*. – 1927. – Bd. 44. – S. 455 – 461.
28. Pauling L. The Shared – Electron Chemical Bond // *Proceedings of the National Academy of the Sciences USA*. – 1928. – Vol. 14. – P. 359 – 362.
29. Born M., Huckel E. About a quantum theory of more atomic molecules // *Physikalische Zeitschrift*. – 1923. – Bd. 24. – S. 1 – 12.
30. Ландсберг Г.С., Мандельштам Л.И. Новое явление при рассеянии света // *Журнал русского физико-химического общества. Часть физическая*. – 1928. – Т. 60. – Вып. 4. – С. 535 - 548.
31. Каримов М.Ф. Информационное моделирование и физическое образование в средней школе // *Материалы научно – практической межвузовской конференции северо-западного отделения РАО «Теоретические проблемы физического образования»*. – СПб.: Изд-во «Образование», 1996. – С. 51 – 52.
32. Стрэтт Д.В. (лорд Рэлей) *Волновая теория света*. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 208 с.
33. Ландсберг Г.С., Казанский Б.А., Бажулин П.А. и др. Определение индивидуального углеводородного состава бензинов прямой гонки комбинированным методом. – М.: Изд-во АН СССР, 1959. – 363 с.
34. Herzberg G. *Molecular spectra and molecular structure: Vol. 1 – 3*. – New York: Prentice - Hall, 1939 – 1966.
35. Ельяшевич М.А. *Атомная и молекулярная спектроскопия*. – М.: Физматгиз, 1962. – 892 с.
36. Ельяшевич М.А. *Вращательно – колебательная энергия многоатомных молекул*. – Л.-М.: ОНТИ, 1938. – 33 с.
37. Большаков Г.Ф. *Азоторганические соединения нефти*. – Новосибирск: Наука, 1988. – 214 с.
38. Грибов Л.А., Дементьев В.А. *Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул*. – М.: Наука, 1981. – 356 с.
39. Gribov L.A., Orville-Thomas W.J. *Theory and methods of calculation of molecular spectra*. – New York: John Wiley and Sons, 1988. – 636 p.
40. Каримов М.Ф. *Подготовка будущих учителей – исследователей в информационном обществе: Монография*. – Челябинск: Изд-во ЧГПУ «Факел», 2002. – 612 с.