



БАЛТИЙСКИЙ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ИММАНУИЛА КАНТА

А. Ю. Зюбин

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
ОКАМЕНЕЛЫХ СМОЛ.
АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ, МЕТОДЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ**

Учебное электронное издание

**Калининград
2026**

БАЛТИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. И. КАНТА

А. Ю. Зюбин

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ
ОКАМЕНЕЛЫХ СМОЛ.
АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ, МЕТОДЫ, ПЕРСПЕКТИВЫ

Учебное пособие

Учебное электронное издание

Калининград
Издательство Балтийского федерального университета им. И. Канта
2026

© Оформление, БФУ им. И. Канта, 2026
ISBN 978-5-9971-1067-3

Рецензенты

А. Ю. Сетейкин, канд. физ.-мат. наук, доц.,
Балтийский федеральный университет им. И. Канта;
И. В. Алексеенко, канд. физ.-мат. наук,
Балтийский федеральный университет им. И. Канта

Автор

А. Ю. Зюбин, д-р физ.-мат. наук, доц., БФУ им. И. Канта

Зюбин, А. Ю.

Молекулярная оптическая спектроскопия окаменелых смол. Актуальные задачи, методы, перспективы : учебное пособие / А. Ю. Зюбин [Электронный ресурс] : учебное электронное издание. — Калининград : Издательство БФУ им. И. Канта, 2026. — <https://publish.kantiana.ru/catalog/non-periodical/uchebnye-posobiya/molekulyarnaya-opticheskaya-spektroskopiya-okamenelykh-smol-aktualnye-zadachi-metody-perspektivy/>

Изложены подходы к использованию спектроскопии комбинационного рассеяния света и гигантского комбинационного рассеяния света для задач спектрального анализа и выявления маркеров молекулярного состава окаменелых смол. Представлен детальный обзор работ по данной теме, также приводятся практические и авторские примеры и методики, основанные на использовании и применении методов колебательной спектроскопии при выполнении задач, связанных с поиском спектральных маркеров изменений молекулярной структуры окаменелых смол.

Предназначено для студентов старших курсов, магистров и аспирантов, занимающихся спектроскопией ископаемых органических и неорганических объектов, в том числе окаменелых смол. Пособие будет полезно специалистам в области оптической спектроскопии и спектрального анализа.

© Зюбин А. Ю., 2026

© Оформление, БФУ им. И. Канта, 2026
ISBN 978-5-9971-1067-3

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	4
Глава 1. Формирование выборки исследуемых образцов окаменелых смол.....	7
Глава 2. Спектральные методы установления различий по признакам, основанным на изменении компонент структуры окаменелых смол.....	14
Глава 3. Подходы к классификации спектральных маркеров окаменелых смол.....	24
Глава 4. Библиотека спектров ГКРС окаменелых смол	37
Заключение	59
Перспективные темы для курсовых и дипломных работ, аспирантских диссертаций.....	60
Список используемой и рекомендуемой литературы.....	61

ВВЕДЕНИЕ

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (далее — КРС) является эффективным инструментом анализа природных смол, позволяя достоверно устанавливать особенности их химического строения и отслеживать происходящие в нем изменения. Применение спектроскопии КРС для получения колебательных спектров окаменелых смол было впервые осуществлено в 2001 г. и достаточно активно ведется в настоящее время. Исследования проводились для образцов мексиканского происхождения, которые были далее сопоставлены с балтийскими аналогами [1; 2]. КРС-спектроскопия используется для изучения процессов фрагментации и деградации окаменелых смол [3], равно как и для выявления фальсификатов, в том числе при экспертизе археологических находок [4]. КРС-спектроскопия в последние годы комбинируется с хроматографией для осуществления более точной идентификации окаменелых смол [5—7]. Самые последние работы по применению КРС-методов для анализа окаменелых смол направлены на теоретическое моделирование спектральных составляющих смол [8] для выявления и уточнения спектрального профиля образцов из разных географических мест [9], для отслеживания окислительной динамики смол [10], а также для выявления температурно-индуцированных изменений молекулярной структуры смол [11].

Комбинированные ИК Фурье- и КРС-подходы используются для регистрации ароматических фрагментов [12] и особенностей молекулярной структуры ископаемой смолы [13]. Известны работы по установлению спектроскопических характеристик китайских янтарей (провинция Хайнань) с привлечением тандема ИК Фурье-спектрометрии и жидкостной хромато-

масс-спектрометрии. Авторами зафиксирована специфическая черта смол — полное отсутствие в составе янтарной кислоты [22]. С помощью ИК Фурье-спектроскопии исследовались стабильные изотопы (водород, углерод, сера) балтийского янтаря и предпринимались попытки увязать их соотношения с палеоклиматическими реконструкциями [14]. ИК-спектроскопия активно эксплуатируется для систематизации и характеристики янтаря [15; 16; 22]. Исследование ископаемых смол Канады средствами ИК-Фурье позволило выдвинуть гипотезу об их происхождении от представителей кипарисовых (*Cupressaceae*) [17]. На базе ИК Фурье-спектрометрии и при сортировке янтаря и композитных материалов довольно широко внедрен метод главных компонент (далее — PCA), дающий интегральную оценку различий между образцами [21].

В ходе анализа литературных источников обнаружено незначительное количество статей, посвященных корреляции колебательных спектров с возрастными параметрами янтаря. В нескольких публикациях [18; 19; 23; 24] описаны симуляционные опыты по термическому старению балтийского янтаря; исследователи прослеживают изменения колебательных мод по мере нарастания длительности нагрева, опираясь на результаты ИК Фурье- и КРС-спектроскопии. В статье [29] для дифференциации моравского янтаря трех возрастных когорт задействованы ИК Фурье-спектроскопия и аппарат математической статистики. Привязка колебательных мод к возрасту с использованием КРС-спектроскопии обсуждается лишь в одной работе, в которой предложен подход, базирующийся на соотношениях интенсивностей мод с одинаковой частотой, интерпретируемых как маркер геологического возраста и привязки к географическому происхождению. В настоящее время активно ведется поиск спектральных маркеров, специфичных для конкретных видов янтаря, например «балтийское плечо», характерное для балтийского янтаря [25].

Поиск единичных колебательных мод, идентифицирующих изменения в спектре, является сложной задачей, и в этом

случае один из подходов — усиление сигнала от компонент образца с помощью оптической сенсорики. В число таких перспективных направлений, широко применяющимся в мире, однако пока не для окаменелых смол, входит спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света (далее — ГКРС). Спектроскопия ГКРС позволяет усилить базовый сигнал КРС примерно в 10^{12} — 10^{14} раз и выделить дополнительные полосы спектра, которые не были разрешены ранее. Такие подходы в перспективе могут выявить не установленные ранее спектральные характеристики, соотносящиеся, например, с определением возраста или особенностями места географического местоположения смол.

В рамках настоящего учебного пособия рассмотрены современные подходы к поиску спектральных маркеров на основе применения спектроскопии комбинационного рассеяния света и статистических методов. Продемонстрированы подходы для оценки изменений молекулярного состава ископаемых окаменелых смол.