



Title/标题 可见光发射光谱和吸收光谱的测定

8 班 12 号

Name/姓名 王天一 Student ID/学号 2023511044 Date/日期 2024/12/27 页码 1

一、预习思考题

1. 何为发射光谱? 何为吸收光谱? 请用简洁的语言描述

发射光谱: 物质先处于激发态, 随后电子跃迁回较低能级 (如基态) 时会释放出具有特征波长/能量的光, 这些光构成发射光谱。

吸收光谱: 当白光 (连续光谱) 通过某种物质时, 物质会选择性吸收与其原子或分子吸收峰对应的波长/能量, 从而使原本连续的光谱中出现暗线或吸收带, 这种现象对应的光谱称为吸收光谱。

2. 如何通过测定三氧化六氨合钴的吸收光谱, 判断其 6 个电子在八面体场中的排布?

三氧化六氨合钴(Ⅱ)中 $Co(II)$ 为 $3d^6$ 电子构型, 处于配位数为 6 的八面体场中。根据吸收光谱可观察其 $d \rightarrow d$ 电子跃迁吸收峰位置, 八面体场中 d 轨道会分裂为较低能量的 t_{2g} 轨道和较高能量的 e_g 轨道, 测得的吸收带对应 $t_{2g} \rightarrow e_g$ 的跃迁。由吸收峰的波长 λ , 可进一步计算跃迁能量 $E = \frac{hc}{\lambda}$, 从而推断分裂能大小和电子排布状况。

二、实验仪器和试剂

仪器及材料: FLA 5000+ 微型光纤光谱仪, 气灯, 荧光灯, 卤钨灯, LED 灯 (白光 450nm), 烧杯, 玻璃棒, 鳄鱼夹导线, 5 号电池, 电池盒

试剂: 三氧化六氨合钴, $CuInS_2$ 量子点, 正己烷 (A.R.)

三、实验内容和步骤

1. 发射光谱的测定

(1) 连接仪器并打开软件

① 打开电脑, 连接微型光纤光谱仪

② 右击桌面“晶飞光谱分析软件”, 以管理员身份运行。

③ 在软件界面中, 选择“文件”→“新建项目”→“光谱图”。

④ 设定横轴范围为 350-850nm。

(2) 测量发射光谱

① 将光纤正对欲测光源, 点击 F5 开始测试

② 若光谱强度溢出量程, 微调光纤与光源的距离或角度, 使信号在适宜范围。待光谱稳定后, 点击 F4 停止测试。

SIGNATURE/签字

DATE/日期



Title/标题 可见光发射光谱和吸收光谱的测定

8 班 12 号

Name/姓名 王天一 Student ID/学号 2023511044 Date/日期 2024/12/27 页码 2

③. 点击保存图标, 或右击图形空白处选择“属性”→“粘贴板和光谱表”, 设置起始波长 350 nm, 结束波长 850 nm → “确定”, 随后点击“光谱表(A)”查看数据表, 并可复制光谱数据到 Excel 保存。

④. 对以下光源分别测量并记录发射光谱: 荧光灯, 太阳, 气灯, LED (白光 450 nm), 白炽灯。

⑤. 在保存的光谱中标出各光源的特征峰位置和强度。

2. 吸收光谱的测定.

a. 三氯化六氨合钴吸收光谱

(1). 溶液的配置.

①. 在 100 mL 烧杯中称取 0.1 g $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$, 加入 20 mL 去离子水, 充分溶解。

②. 另取 100 mL 烧杯, 加入 20 mL 去离子水, 作为参比溶液。

(2). 软件设置

①. 在软件中选择“文件”→“新建项目”→“新建吸光度测试”。

②. 在光源和光纤之间放置参比溶液(去离子水), 在“设置参数向导”中点击“自适应”, 使当前峰值处于合适大小。

③. 点击“下一步”, 进入“保存参比光谱向导”, 点击“保存参比”(点亮的灯泡), 得参比谱图出现后, 点击“下一步”。

④. 保持光源和光纤位置不变, 关闭光源开关, 在保存暗背景向导“界面”, 点击“保存暗背景(暗的灯泡)”, 得暗背景谱图出现后, 点击“完成”。

⑤. 再将参比溶液换成被测溶液($[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$), 重新打开光源, 即可在“吸光度模式”下进行吸光度测试。测量过程与发射光谱类似。

(3). 数据处理

①. 在 350 nm ~ 850 nm 范围内记录吸光度与波长的对应关系。

②. 寻找吸收峰(或肩峰)的位置, 计算配合物分裂能 Δ 。

③. 与成对能 P 比较, 判断该配合物是高自旋还是低自旋, 并画出 d 电子排布图。

b. CuInS_2 量子点吸收光谱.

(1). 样品和参比溶液:

SIGNATURE/签字

DATE/日期

Title/标题 可见光发射光谱和吸收光谱的测定

8 班 12 号

Name/姓名 王天一 Student ID/学号 2023511044 Date/日期 2024/12/17 页码 3

①. 将 CuInS_2 量子点正己烷溶液倒入洁净的 25 mL 烧杯.

②. 另取正己烷作为参比.

(2). 测试步骤

测量方法与三氧化六氯合钴(IV)基本相同. 先测量正己烷作为参比光谱和暗背景, 再换成量子点样品的测定吸收光谱.

③. 数据处理

①. 在可见光区记录吸收峰的起峰点, 该波长对应量子点的带隙能量

②. 将该波长 λ 转化为能量 $E = \frac{hc}{\lambda}$ (单位 eV), 与本体材料带隙 1.50 eV 比较, 以判断是否出现量子尺寸效应. 如能量明显大于 1.50 eV, 则为量子点.

3. CuInS_2 量子点荧光光谱的测定

①. 用 450 nm 的 LED 光源从侧面照射 25 mL 烧杯中的量子点正己烷溶液

②. 将光纤置于与入射光源近似 90° 的方向, 采集其荧光发射光谱

③. 记录并保存荧光光谱, 分析荧光峰的位置和强度