

拉曼光谱预习报告

王启骅 PB20020580

2023 年 4 月 3 日

1 实验目的

测量材料的拉曼光谱并进行分析。

2 实验原理

Raman 散射：非弹性碰撞；方向改变且有能量交换；

Raman 位移：Raman 散射光与入射光频率差 $\Delta\nu$

Raman 散射的两种跃迁能量差： $\Delta E = h(\nu_0 - \Delta\nu)$ 生 stokes 线；强；基态分子多； $\Delta E = h(\nu_0 + \Delta\nu)$ 产生反 stokes 线；弱；

2.1 Raman 光谱的特点

不同物质其拉曼光谱是不同的，就像人的指纹，可以用于光谱表征；

拉曼位移

对不同物质： $\Delta\nu$ 不同；

对同种物质： $\Delta\nu$ 与入射光频率无关，只与分子能级结构有关；

表征振动-转动能级的特征物理量；定性与结构分析的依据。

斯托克斯线和反斯托克斯线对称分布于瑞利线两侧，通常是测 stokes 线

$$\frac{I_{as}}{I_s} \propto T \quad (1)$$

拉曼散射与分子所处的状态无关

2.2 Raman 光谱与红外光谱比较

相似之处：两者都能提供分子振动频率的信息，对于一个给定的化学键，其红外吸收频率与拉曼位移相等，均代表第一振动能级的能量。

不同之处：a 红外光谱的入射光及检测光都是红外光，而拉曼光谱的入射光和散射光大多是可见光。拉曼效应为散射过程，拉曼光谱为散射光谱，红外光谱对应的是与某一吸收频率能量相等的（红外）光子被分子吸收，因而红外光谱是吸收光谱。b 机理不同：从分子结构性质变化的角度看，拉曼散射过程来源于分子的诱导偶极矩，与分子极化率的变化相关。通常非极性分子及基团的振动导致分子变形，引起极化率的变化，是拉曼活性的。红外吸收过程与分子永久偶极矩的变化相关，一般极性分子及基团的振动引起永久偶极矩的变化，故通常是红外活性的。c 制样技术不同：红外光谱制样复杂，拉曼光谱无需制样，可直接测试水溶液。

两者间的联系可用经验规则来判断分子的红外或拉曼活性：a 相互排斥规则：凡有对称中心的分子，若有拉曼活性，则红外是非活性的；若红外活性，则拉曼非活性。b 相互允许规则：凡无对称中心的分子，大多数的分子，红外和拉曼都活性。c 相互禁止规则：少数分子的振动，既非拉曼活性，又非红外活性。如：乙烯分子的扭曲振动，在红外和拉曼光谱中均观察不到该振动的谱带。

3 实验仪器

激光器：40MW 半导体激光器 532nm，最常用 Ar 激光器 488.0/514.5nm，频率高，拉曼光强大

试样室：发射透镜使激光聚焦在样品上，收集透镜使拉曼光聚焦在单色仪的入射狭缝。

单色仪：仪器心脏，1 个光栅，2 个狭缝，减少杂散收光

拉曼光谱仪（自搭）

单晶硅片，毛细管，载玻片

CCl₄(液)，YVO₄: Tm³⁺(粉末)，YVO₄: Er³⁺（粉末）

4 实验内容

- 1、了解 Raman 测试系统组成及要求。
- 2、学习使用拉曼谱仪并测量材料的拉曼光谱。
- 3、学习处理分析拉曼光谱数据。