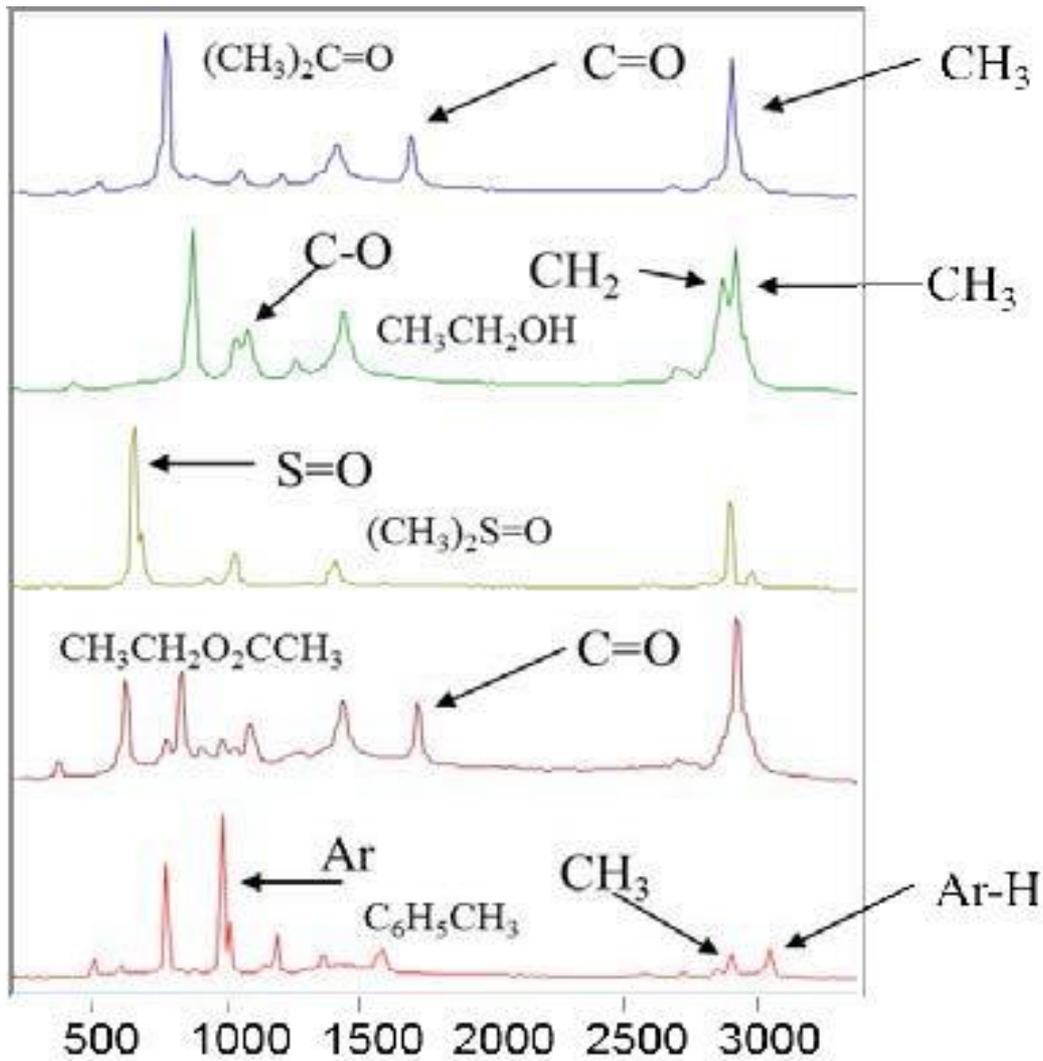


# Спектроскопия комбинационного рассеяния (Рамановская спектроскопия)

Курсовая работа



Рамановские спектры  
разных молекул

Аналитические  
исследования

Искусство,  
криминалистика,  
загрязнения

Материаловедение

Углерод, двумерные  
наноматериалы, нано-  
технологии, полупро-  
водники, фотоволь-  
таика, технология про-  
изводства батарей,  
катализ

**Применение**

Биология

Клетки, ткани, микро-  
организмы

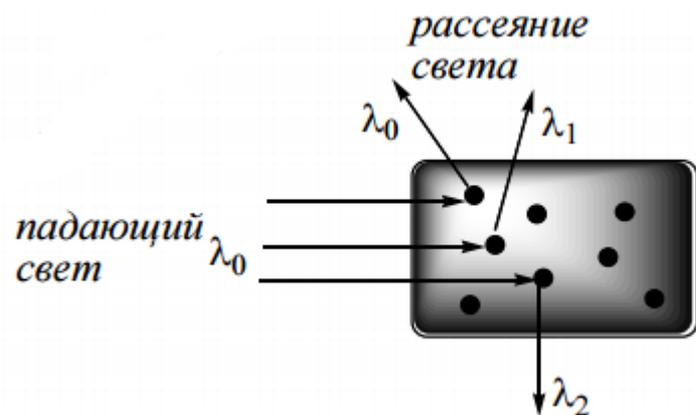
Химия

Фармацевтика,  
полимеры,  
химические вещества

Науки о Земле

Геология,  
геммология

**Рассеяние света** – совокупность физических явлений (отражение, преломление, дифракция и др.), которые влияют на направление распространения света в веществе и могут изменять длину волны света.



Типы рассеяния света:

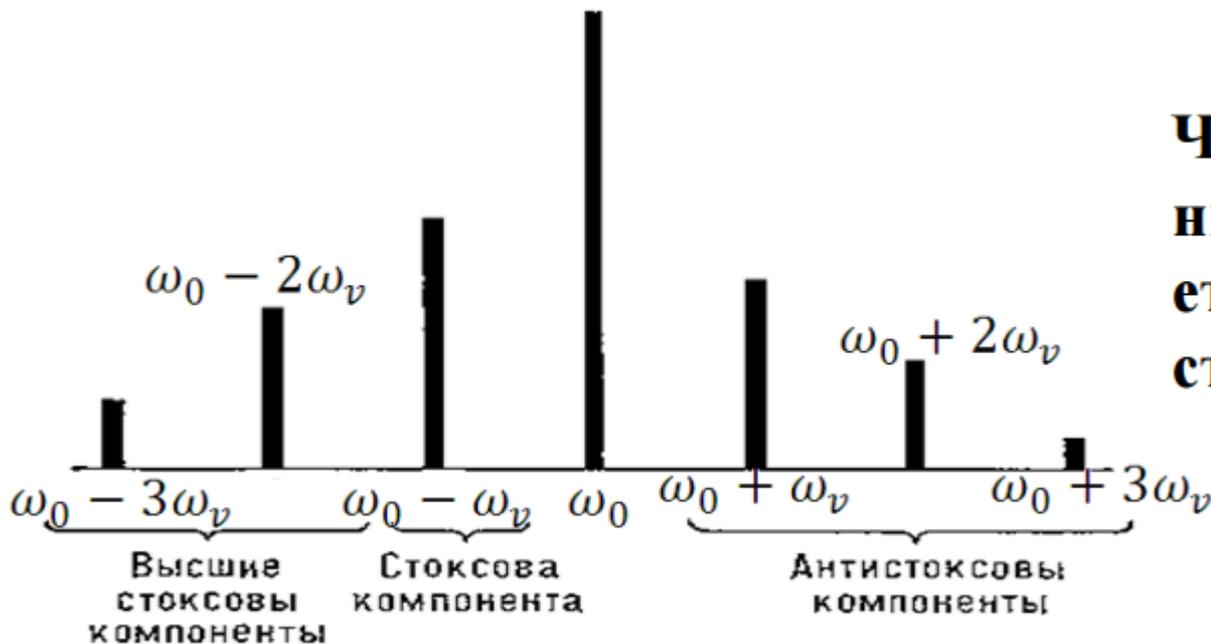
1. эластичное (упругое) релеевское – без изменения длины волны света;
2. неэластичное (неупругое) рамановское – с изменением длины волны света.

# Комбинационное рассеяние (эффект Рамана)

**Комбинационное рассеяние** – это неупругое рассеяние света, при котором в спектральном составе помимо частоты падающей волны  $\omega_0$  присутствуют линии, отличающиеся от нее на величину, равную или кратную частоте внутримолекулярных колебаний:

$$\omega_s = \omega_0 - m\omega_v, m = 1, 2, \dots$$

$$\omega_{as} = \omega_0 + m\omega_v, m = 1, 2, \dots$$



**Число и расположение линий определяется молекулярным строением вещества.**

## Элементарная теория эффекта Рамана

**В классической модели электрическое поле световой волны индуцирует переменный дипольный момент молекулы, которая дает соответствующий частотный спектр во всех направлениях.**

$$p(t) = \varepsilon_0 \alpha E, \text{ где } \alpha = \alpha_0 + \alpha_\omega \cdot \cos \omega t$$

*– поляризуемость молекулы.*

$$E(t) = A \cdot \cos \omega_0 t \Rightarrow$$

$$p(t) = \varepsilon_0 A \cdot \left( \alpha_0 \cos \omega_0 t + \frac{1}{2} \alpha_\omega \cos(\omega_0 - \omega) t + \frac{1}{2} \alpha_\omega \cos(\omega_0 + \omega) t \right)$$

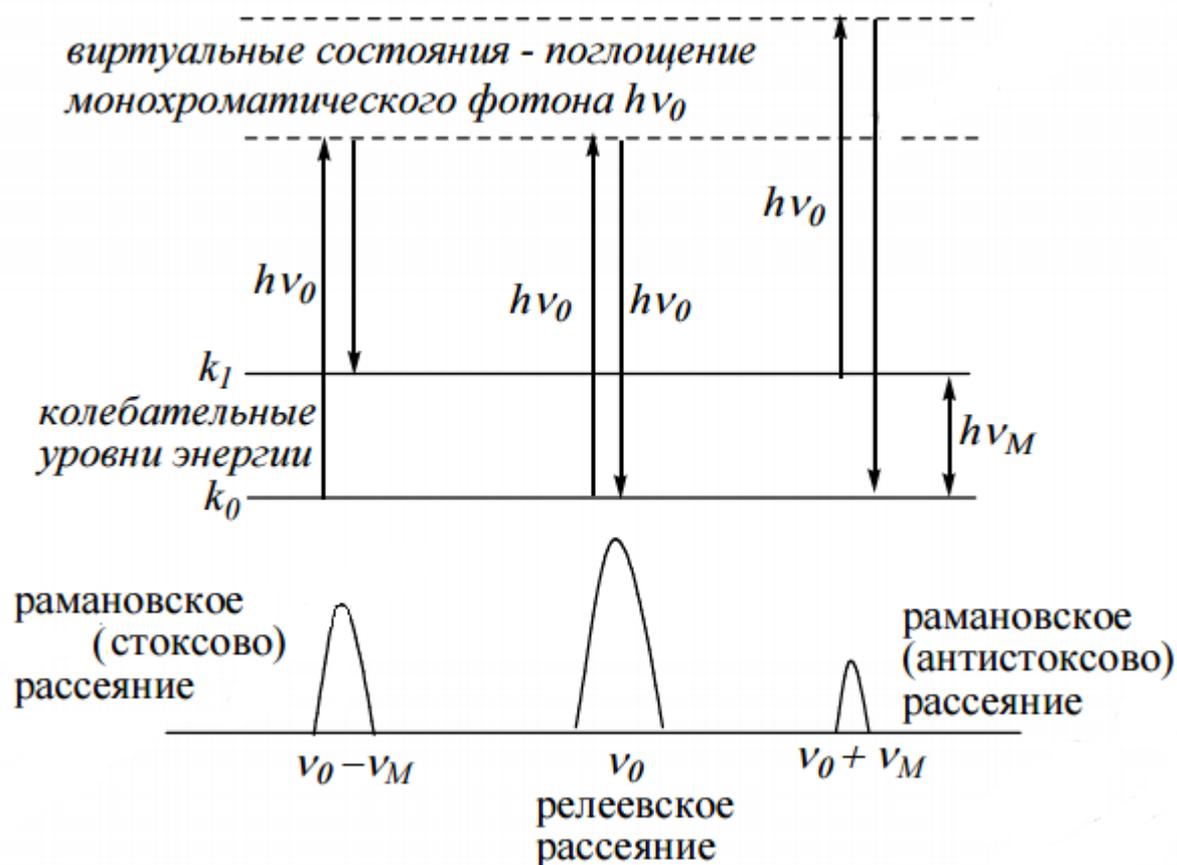
**Излучение  
на частоте  
падающей  
волны**

**Стоксова  
компонента**

**Антистоксова  
компонента**

# Квантовое представление

Рамановское рассеяние изменяет длину волны падающего света вследствие взаимодействия света с колебательными квантами рассеивающей молекулы.



**Стоксова рамановская линия** – переход молекулы с нижнего на верхний колебательный уровень в результате поглощения и рассеяния кванта света.

**Антистоксова рамановская линия** – переход молекулы с верхнего на нижний колебательный уровень.

Интенсивность антистоксовых линий мала, т.к. вероятности перехода с верхних на нижние колебательные уровни малы, вследствие больших заселенностей нижних уровней.

В практике спектроскопии комбинационного рассеяния используют стоксовы линии.

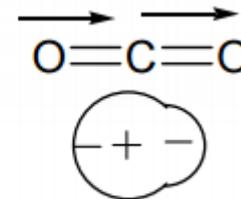
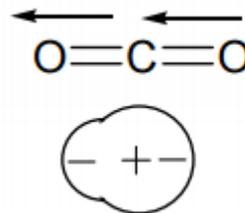
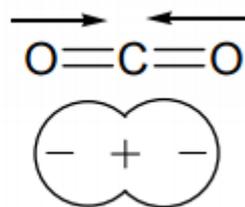
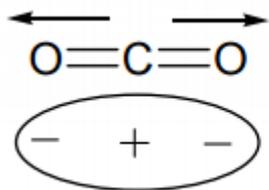
# Сравнение рамановского рассеяния и инфракрасной спектроскопии

В спектроскопии комбинационного рассеяния являются активными колебания связей, при которых происходит изменение поляризуемости ( $\alpha$ ) связи. В ИК спектроскопии – изменение дипольного момента ( $\mu$ ) связи.

Колебания молекулы  $\text{CO}_2$

симметричное валентное колебание

асимметричное валентное колебание



есть изменение поляризуемости  $\alpha$

– КР активно

нет изменения дипольного

момента  $\mu$  - ИК не активно

нет изменения поляризуемости  $\alpha$  –

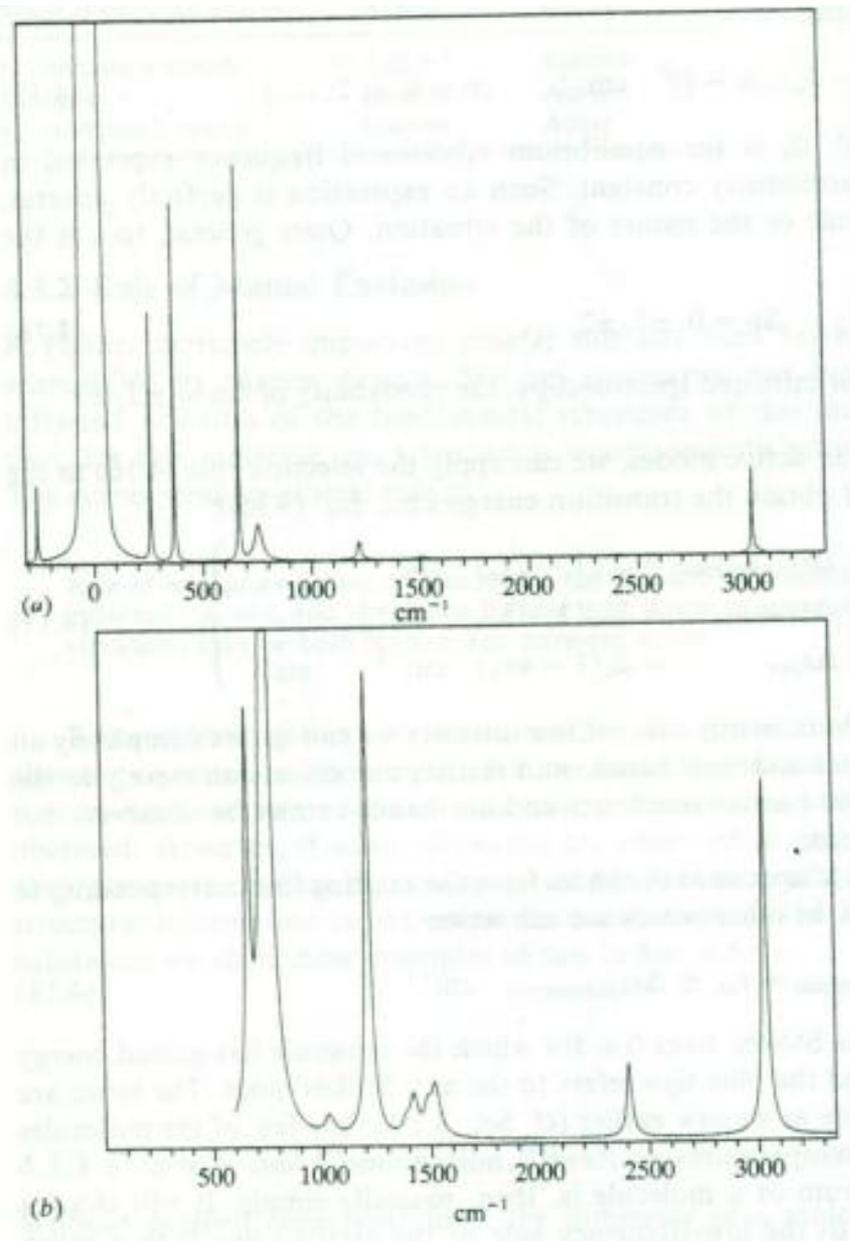
КР не активно

есть изменение дипольного

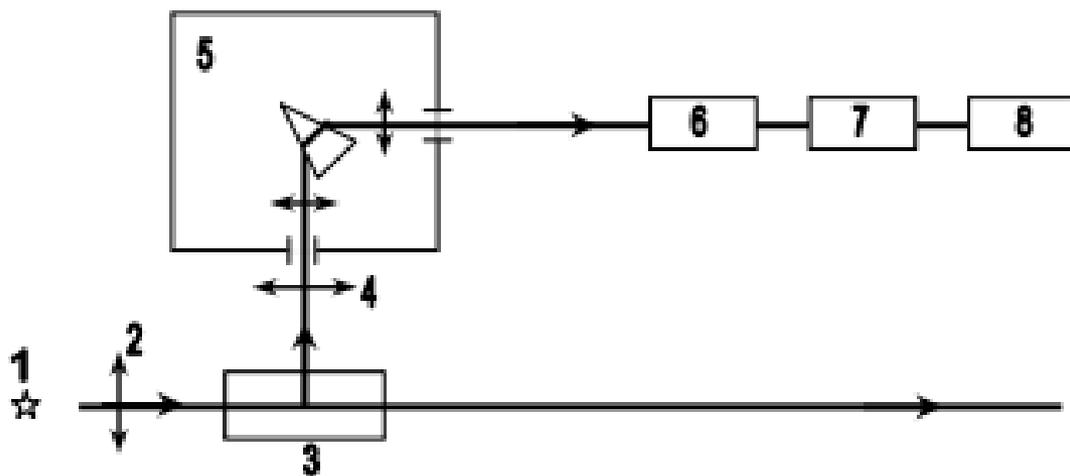
момента  $\mu$  - ИК активно

ИК- спектроскопия и КР – взаимодополняющие друг-друга методы! Колебания связей проявляются в обоих спектрах, но с разной интенсивностью.

Спектры ИК (внизу) и  
КР (вверху) хлороформа  $\text{CHCl}_3$



# Схема спектрометра КР



- 1 – источник излучения
- 2 – линза
- 3 – кювета с исследуемым веществом
- 4 – линза
- 5 – монохроматор
- 6 – приемник излучения
- 7 – усилитель
- 8 – регистрирующее устройство

# Научные журналы по рамановскому рассеянию

Комбинационное рассеяние света положило начало целому направлению в спектроскопии молекул и кристаллов — спектроскопии комбинационного рассеяния. Этот метод на сегодняшний день является одним из самых мощных методов исследования молекулярных структур, поэтому неудивительно, что существует ряд научных журналов, целиком посвящённых именно проблеме комбинационного (рамановского) рассеяния.

- **Journal of Raman Spectroscopy (Журнал рамановской спектроскопии)**
- **Surface Enhanced Raman Scattering Physics and Applications (Физика и применения поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии).**

Помимо этих журналов, множество статей, касающихся спектроскопии комбинационного рассеяния публикуются и в других общих и специализированных журналах.

# Вид современного прибора

Прибор в полной мере использует основные преимущества спектроскопии комбинационного рассеяния света, в том числе дает возможность работать непосредственно через прозрачные контейнеры и обладает нечувствительностью к полосе поглощения воды. Кроме того, компактные размеры прибора, мобильность и интуитивно понятный пользовательский интерфейс делают его идеальным решением для входного контроля, идентификации и проверки материалов, выборочной проверки в процессе производства, окончательного контроля, распознавания фальсифицированных лекарств, а также многих других приложений.



Спасибо за внимание!