

<<拉曼谱学>>

图书基本信息

书名：<<拉曼谱学>>

13位ISBN编号：9787030367082

10位ISBN编号：7030367081

出版时间：2013-3

出版时间：科学出版社

作者：吴国祯

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<拉曼谱学>>

### 内容概要

《拉曼谱学：峰强中的信息（第二版）》的核心思想是从拉曼峰强的角度，来理解拉曼谱图背后的物理、化学过程和图像。

主要介绍作者所创立的从拉曼峰强求取键极化率的思路和方法。

《拉曼谱学：峰强中的信息（第二版）》的内容都是建立在实验的基础上的，我们的工作将表面增强拉曼和分子晶体拉曼相变的工作提高到一个定量的层面。

此外，还包括拉曼旋光、拉曼激发虚态及其弛豫过程中的电子结构信息。

《拉曼谱学：峰强中的信息（第二版）》适合物理、化学和谱学领域的理论和实验工作者、大学教师、研究生和高年级本科生阅读和参考。

## &lt;&lt;拉曼谱学&gt;&gt;

## 书籍目录

再版前言 初版前言 第1章 分子的核和电子运动 1.1 简正振动模 1.2 简正坐标 1.3 一般坐标和简正振动分析 1.4 休克尔观点下的电子波函数 参考文献 第2章 分子振动和电子波函数的对称性 2.1 分子的对称性与群的定义 2.2 有关群的一些概念 2.3 点群 2.4 群的表示 2.5 特征值 2.6 特征表 2.7 可约表示的约化 2.8 基 2.9 不可约表示基的寻找 2.10 表示的直积 2.11 小结 2.12 以简正坐标为基的表示 2.13 以原子位移为基的表示的约化 2.14 分子振动的分析 2.15 对称坐标 2.16 简正振动波函数的对称性 2.17 电子波函数的对称性 2.18 选择定则 2.19 相关 参考文献 第3章 拉曼散射 3.1 光的散射 3.2 拉曼效应 3.3 选择定则 3.4 极化率 3.5 沃肯斯坦键极化率理论 3.6 共振拉曼效应 参考文献 第4章 分子晶体的振动与群之相关 4.1 分子晶体的振动 4.2 单胞群、位群、平移群 4.3 分子点群、位群及单胞群之相关及其物理意义 参考文献 第5章 键极化率的理论 5.1 引言 5.2 分子键极化率的计算 5.3 表面增强拉曼峰强 5.4 表面增强吸附分子键极化率的计算 参考文献 第6章 电荷的转移 6.1 吡嗪 6.1.1 引言 6.1.2 峰强的分析 6.2 吡嗪 6.2.1 引言 6.2.2 谱峰的观察 6.2.3 键极化率的求取 参考文献 第7章 表面距离效应 7.1 引言 7.2 实验 7.3 实验结果和观察 7.4 结语 参考文献 第8章 SCN<sup>-</sup>和其Cr<sup>3+</sup>络合物的吸附态 8.1 引言 8.2 吸附在银表面的简正振动分析 8.3 键极化率 8.4 紫外的激发 8.5 简正振动分析 8.6 紫外条件下的键极化率 8.7 EHMO的理解 8.8 金电极表面514.5nm的拉曼谱 8.9 Cr<sup>3+</sup>和SCN<sup>-</sup>复合物在银电极上的拉曼增强谱峰 8.10 Cr<sup>3+</sup> / SCN<sup>-</sup> / Ag复合物的力常数 8.11 Cr<sup>3+</sup> / SCN<sup>-</sup> / Ag复合物的键极化率 8.12 结语 参考文献 第9章 紫晶的还原 9.1 引言 9.2 简正振动分析 9.3 键极化率的求取 9.4 推论 9.5 结语 参考文献 第10章 非电荷转移效应 10.1 引言 10.2 吡嗪在银电极上的键极化率 10.3 紫晶在银电极上的键极化率 10.4 金电极在1.06 μm激发下的键极化率 10.5 结语 参考文献 第11章 分子的内旋转 11.1 引言 11.2 谱峰的归属 11.3 银电极上的机理 11.4 金电极上的机理 11.5 结语 参考文献 第12章 环境变化对构型的影响 12.1 引言 12.2 谱峰的观察 12.3 键力常数 12.4 键极化率 12.5 吸附构型 12.6 EHMO的理解 12.7 结语 12.8 溶液中的硫脲拉曼峰强分析 12.9 C—N键极化率随浓度的变化 参考文献 第13章 电荷转移的物理背景 13.1 引言 13.2 EHMO方法 参考文献 第14章 掺杂晶体相变拉曼峰强的临界行为 14.1 引言 14.2 KHF<sub>2</sub>和其氘代体系的相变 14.3 K<sup>+</sup>—NAarHF<sub>2</sub>体系 14.4 结语 参考文献 第15章 No模拉曼峰强的临界行为和其热力学解释 15.1 引言 15.2 临界指数的热力学分析 15.3 小结 15.4 分形的概念 15.5 氘代的例子 参考文献 第16章 临界指数的逾越现象 16.1 引言 16.2 掺杂对不同模式的  $\nu_1$  的影响 16.3 K<sup>+</sup>、Na<sup>+</sup>掺杂的比较 16.4 临界指数的逾越行为 16.5 结语 参考文献 第17章 掺杂离子的共振模及其标度性 17.1 引言 17.2 掺杂离子的特征间距以和其共振模 17.3  $\rho(\nu)$  随  $d/M$  的标度性 17.4 小结 17.5 NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>的负离子掺杂 17.6 正、负掺杂离子所在势场的比值 17.7  $\nu_1$ 模的标度性 参考文献 第18章 过饱和溶液的结构 18.1 引言 18.2 谱峰的观察 参考文献 第19章 关于拉曼激发虚态的电子结构 19.1 关于峰强在时间域的概念 19.2 关于拉曼激发虚态的电子结构 19.3 514.5 nm激发下, 2-氨基吡啶、3-氨基吡啶拉曼激发虚态键极化率的弛豫过程 19.4 在514.5 nm和632.8 nm激发下, 2-氨基吡啶键极化率的不同 19.5 亚乙基硫脲分子键极化率的求取 19.6 亚乙基硫脲分子吸附在银电极表面的键极化率: 电荷转移和电磁增强机制 19.7 嘧啶在632.8 nm激发下的键极化率 19.8 甲基紫分子在514.5 nm激发下的键极化率 19.9 甲基紫分子在514.5 nm激发下, 在银电极表面吸附的键极化率 19.10 液态和吸附在银电极表面六氢吡啶的拉曼键极化率 19.11 吡啶液体和吸附在银表面的键极化率 19.12 吡嗪吸附在银电极表面的键极化率 参考文献 第20章 拉曼旋光下的键极化率 20.1 拉曼旋光下的键极化率 20.2 (+) — (R) — methylloxirane (环氧丙烷) 的键极化率 20.3 (+) — (R) — methylloxirane在532 nm激发下的键极化率和微分键极化率 20.4 L — alanine (L — 丙氨酸) 在532 nm激发下的键极化率和微分键极化率 20.5 (S) — phenylethylamine (苯乙胺) 的键极化率和微分键极化率 20.6 反-2, 3-环氧丁烷的键极化率和微分键极化率 20.7 关于高斯G09W计算结果的键极化率的分析 20.8 手性分子2, 3-丁二醇 20.9 蒎烯的非对称性 参考文献 第21章 分子振动旋光的经典理论 21.1 引言 21.2 手性机制经典的理论 21.3 拉曼激发虚态的电荷分布 21.4 参与拉曼激发的电子数: methylloxirane的事例 参考文献 附录A Albrecht理论 A.1 引言 A.2 拉曼极化率 A.3 非共振拉曼极化率 A.4 共振拉曼极化率 A.5 M<sup>+</sup>TCNQ-的共振拉曼谱 参考文献 附录B 点群特征表

## &lt;&lt;拉曼谱学&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：插图：总之，峰强的校正是很必需的。

否则，数据相差很大。

为了得到可靠的结果，我们通常只考虑相对的峰强，这样计算得到的就是相对的键极化率。

如此的数据，足够我们对物理体系理解的需要。

一般地说，（相对）峰强的误差少于20%，求得的（相对）键极化率的误差则少于10%。

现在的仪器质量有很大的进步，峰强的可靠性高，误差就很小了。

5.3 表面增强拉曼峰强 5.2 节所述的结果，自然可以用于令人感兴趣的体系上，不论是气态、液态还是固态。

对于一般的体系，相对的拉曼峰强一般是固定的。

体系受环境条件的变化如温度、酸度，只要不引起分子结构的变化，谱图中相对的峰强变化是很有限度的。

然而1974年发现了一种称为表面增强拉曼散射（surface enhanced Ramanscattering, SERS）的现象。

此现象是指在银、铜、金等粗糙的电极表面上吸附的分子，特别是含氮的杂环分子的拉曼散射截面比正常的拉曼散射截面大106倍的现象。

表面增强拉曼峰强的一个最大特点是谱峰的相对强度随电极电位的变化而变化。

相对峰强的变化，说明这个变化不是源自表面吸附分子的多少，而是吸附分子内禀性质的变化所致。

图5.1显示六氢吡啶（piperidine）峰强随电位（电位相对于SCE标准电极）变化的情形。

同时，谱峰的相对强度也和液态或水溶液中的不同。

要得到表面增强拉曼的谱峰并不很困难。

其中的一个窍门是金银的表面需要粗糙化。

一般的做法是将金银的表面在一定的电位下，使它氧化为如氯化物，然后再使它还原，这样就形成了粗糙的金属表面。

当然，这当中还有一些窍门，对不同的金属，会有不同的方法，使之达到最好的表面增强效应。

这些在文献中均有报道。

因为，此处我们主要关注从拉曼峰强求取键极化率，以及从键极化率随电位的变化来理解表面增强拉曼的机制，所以，就对一些实验的细节不做太多的描述。

至于溶液的配制，因为我们观察的是吸附在表面的分子，因此，溶液中溶质的浓度不需太高。

太高的溶质浓度反而干扰了表面增强拉曼谱。

例如，0.001 M 以下，就应可以了。

电位的控制一般使用恒电位仪，电池一般为三电极式，一为铂电极，二为参考电极，是标准的Calomel电极（简称为SCE），电位就以它为准。

三为金银的电极。

在银电极上，实验的电位范围为 $-1.0 \sim 0V$ 。

在金电极上，则为 $0 \sim 1.0V$ 。

使用的激光，一般为氩离子的514.5nm或488nm，氦氖的632.8nm。

Nd:YAG的红外 $1.06 \mu m$ 对金电极的效果较好。

氩镭激光器激发的325nm紫外激光也有使用。

至于拉曼谱仪则有多种模式。

早期的多为光电倍增管，单通道探测器，现多为CCD，多通道式的。

现在多采用notch filter过滤激光，效率高，仪器的灵敏度也提高很多。

现在的激光器的功率多很低，使用起来就很方便了。

所获得的谱峰，由于峰的重叠，经常需要加以分峰为洛伦兹（Lorentz）或高斯形的小峰。

这方面的软件现在的谱仪均带有，使用起来非常方便。

以上所叙述的是以后章节中，有关表面增强拉曼工作具有的共同部分。

在以后各章节的叙述中，就不再一一陈述了。



## <<拉曼谱学>>

### 编辑推荐

《拉曼谱学:峰强中的信息(第2版)》的核心思想是从拉曼峰强的角度,来理解拉曼谱图背后的物理、化学过程和图像。

主要介绍作者所创立的从拉曼峰强求取键极化率的思路和方法。

适合物理、化学和谱学领域的理论和实验工作者、大学教师、研究生和高年级本科生阅读和参考。

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>