

不同浓度比 CCl_4 拉曼光谱线强度的变化

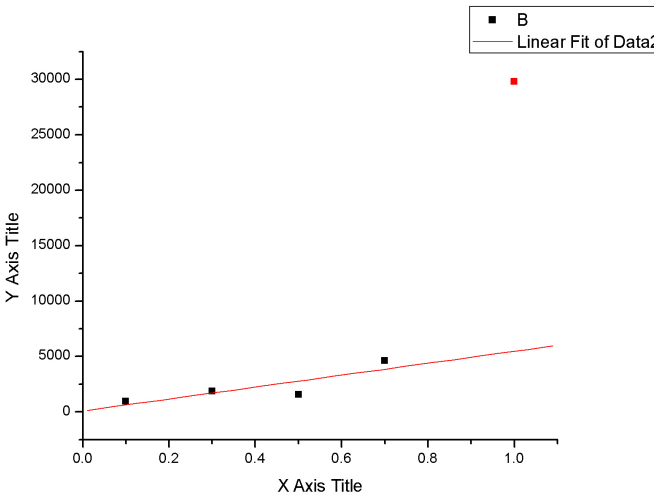
22 系 殷振宇 PB04203047

本试验将原来测纯样品的实验稍做改动，让两种样品按不同浓度比混合，再来测混合液的拉曼光谱，观察其中谱线的出现与消失，以及谱线强度的变化，并试图找出强度变化与浓度之间的关系。

CCl_4 不同浓度时各条谱线强度的变化（没有数据的为该谱线已经读不出来了）：

	511.2	519.0	523.3	525.8	537.9	541.0	545.2	554.6	555.3
1/10		267.5	326.0	361.2	935.8	1048.6	1559.1		
3/10		471.6	537.0	545.7	1472.5	1854.0	2768.5	405.5	
1/2		566.5	673.5	709.8	1577.4	1895.8	2927.7	397.0	398.0
7/10		1413.6	1409.4	1640.6	4616.5	5530.8	8882.1	1062.5	1092.1
1	580.0	8779.4	10514.0	13395.8	29804.6	32327.3	48200.0	6226.5	6056.5

对每条谱线的强度和样品浓度绘曲线图，发现随着浓度的增大，谱线强度先是线性缓慢变化，当配液前体积比超过 0.7 时，有指数上升趋势(波长 537.9nm)。

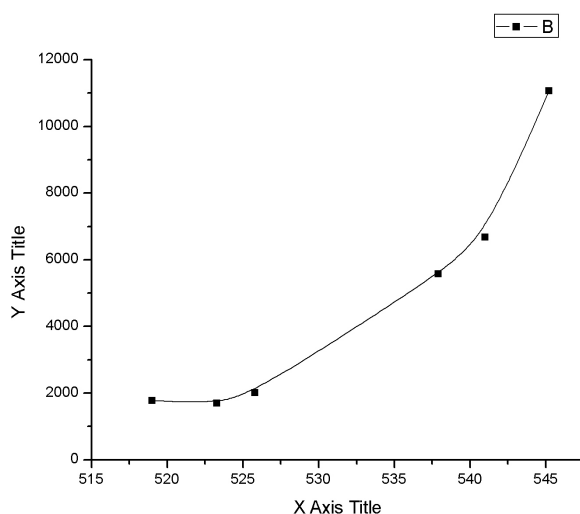


但是由于实验时间有限，纯 CCl_4 的拉曼光谱数据不是我们测出来的，而是从电脑里取自以前其他人所存数据，实验条件和我们不同，所以纯 CCl_4 谱线强度较其他浓度时很大不能判断是客观上确实存在还是不同操作者在不同操作条件下造成的，要判断拟合曲线后面是否存在指数上升关系，必须浓度比 0.7—1 之间再做几组实验，而本实验中没有这步操作，故舍去最后一组数据（即纯 CCl_4 的数据），只讨论浓度 0.7 之前谱线强度与浓度的关系。

各谱线强度与浓度作直线拟合后斜率的大小：

519. 0	523. 3	525. 8	537. 9	541. 0	545.2
1766.9	1693.35	2001.15	5573.5	6674.2	11064.1

发现前面还有规律可寻，到了斯托克斯线波段，斜率增大的非常快。作斜率随波长的变化曲线：



可以看出也有指数关系。

如此看似乎谱线强度的变化不紧与浓度相关，还与谱线本身相关，特别是斯托克斯线，谱线波长越大，其强度随浓度的变化越大。

故我们可以说，(浓度小于 0.7 时)拉曼光谱的强度与浓度成线性变化，但对于不同的谱线，其变化率是不同的，波长越大，即变化率越大，所以斯托克斯线对浓度的敏感性要高于反斯托克斯线。我们可以利用这一特性来测量混合液中 CCl_4 浓度的微小变化，当然要利用的是斯托克斯线。

实验中存在的误差：

1. 首先，样品液混合配比时由于没有好耗的清洗工具，以及时间较少清洗过程中做不到完全烘干，所以混合液中不可避免的会有水气、乙醇等杂质和一些气泡。另外，浓度的配比液不是十分精确，因为量具只有一根滴管。
2. 放置样品时没有每次都进行调节，所以每次放置时，样品位置都可能有偏差，导致谱线光强受影响。
3. 实验操作中有换人现象，比如浓度比 0.7 的那次是由不同人操作，该组数据相比其他组要大很多。
4. 实验仪器精度有限，每次瑞利线强度都有很大变化，这可能是由于不同浓度配比后折射率发生变化，并且样品对光的吸收能力也不同了，这同样会影响到斯托克斯线和反斯托克斯线的强度。
5. 数据有限，较大的误差不可避免，拟合过程可以看出，误差很大，拟合优度也不是很高，要精确分析，必须要再做很多组实验，获得更多的数据，仅有的这几组得出的很可能是错误的结论。
6. 此外，如果不舍去纯样品的数据，紧将其作为标准参照，用其他浓度谱线强度与纯样品的比值来反映变化，可以发现，其实每个浓度的各条谱线强度与纯样品相比，彼此之间的波动不是很大（除了 0.7 的那组数据），如果对每组的比值求平均后再绘曲线，会得到一条直线。