МЕТОДЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ И НАНОСТРУКТУР

ЛЕКЦИЯ 05

Колебательная спектроскопия: FTIR и Raman

Основы измерений, чтение спектров и ограничения методов

Кратко: Колебания атомов в молекуле имеют дискретные энергетические уровни.

Цель лекции и ожидаемые результаты

Понимать

Объяснить: Колебательные уровни энергии. Колебания атомов в молекуле имеют дискретные энергетические уровни.

Сопоставлять

Объяснить: Устройство Raman-спектрометра. Лазер возбуждает образец, оптика собирает рассеянное излучение, спектрограф...

Применять

Объяснить: Ограничения спектроскопии. Флуоресценция, нагрев лазером, поглощение подложки и загрязнения...

В этой лекции научные определения связываются с измеряемыми величинами, схемами и примерами обработки данных.

Колебательные уровни энергии

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 01 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Колебания атомов в молекуле имеют дискретные энергетические уровни.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Положение спектральных линий зависит от массы атомов и силовых постоянных связей.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Физическая основа FTIR

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 02 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

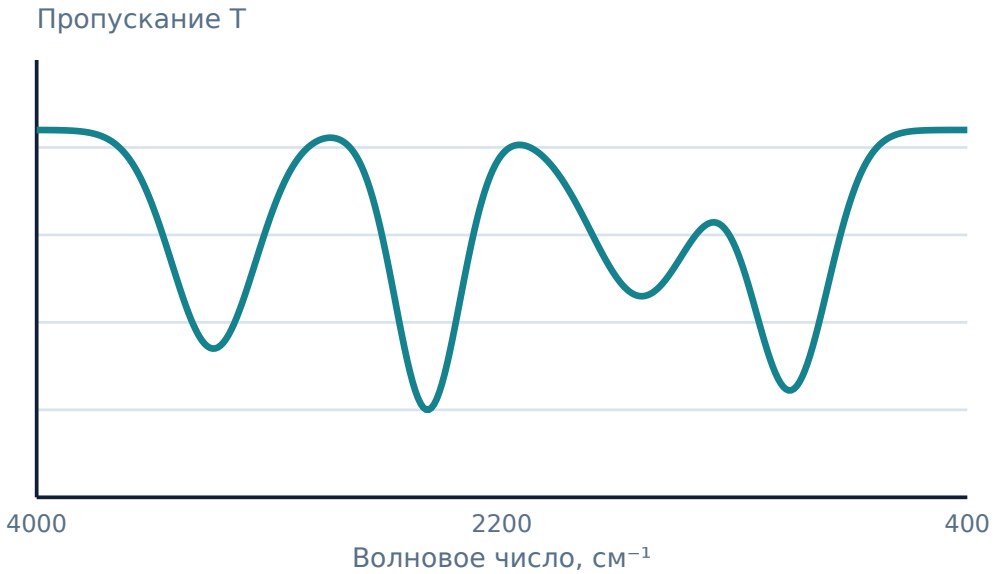
Инфракрасное поглощение наблюдается для колебаний с изменением дипольного момента.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

FTIR-спектрометр восстанавливает спектр из интерферограммы преобразованием Фурье.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



FTIR: полосы поглощения МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Физическая основа Raman

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 03 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Комбинационное рассеяние возникает при неупругом взаимодействии света с колебаниями вещества.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Раман-активность определяется изменением поляризуемости при колебании.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



D 1350 · G 1580 · 2D 2700 см⁻¹

МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Оптический тракт FTIR

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 04 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

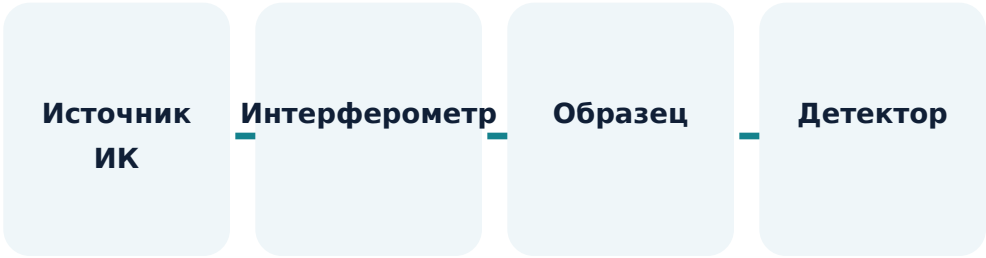
Излучение проходит через интерферометр и образец, после чего попадает на детектор.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Фон и образец измеряют при сопоставимых условиях, чтобы получить корректный спектр.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Особенности ATR-FTIR

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 05 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

ATR использует затухающую волну на границе призмы с образцом.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Глубина проникновения зависит от длины волны, показателей преломления и угла падения.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Устройство Raman-спектрометра

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 06 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Лазер возбуждает образец, оптика собирает рассеянное излучение, спектрограф разделяет длины волн.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Фильтры подавляют интенсивный упругий сигнал Рэлея.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Формула рамановского сдвига

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 07 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Рамановский сдвиг определяется разностью волновых чисел возбуждающего и рассеянного излучения.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

При расчёте в $см^{-1}$ длины волн, выраженные в нанометрах, требуют множителя 10^7.

СООТНОШЕНИЕ

$$\Delta\tilde{\nu} = 10^7(1/\lambda_0 - 1/\lambda_s),\ \lambda \text{ в нм}$$



D 1350 · G 1580 · 2D 2700 $см^{-1}$

МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Полосы Raman углеродных материалов

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 08 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Для многих sp^2-углеродных структур характерны полосы D, G и 2D.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Их положение, ширина и относительная интенсивность зависят от структуры и условий измерения.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



D 1350 · G 1580 · 2D 2700 см⁻¹

МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Интерпретация отношения I_D/I_G

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 09 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Отношение интенсивностей D и G связано с дефектностью и структурным порядком углерода.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Универсальная монотонная зависимость от плотности дефектов не существует для всех режимов.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



D 1350 · G 1580 · 2D 2700 см⁻¹

МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Функциональные группы по FTIR

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 10 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

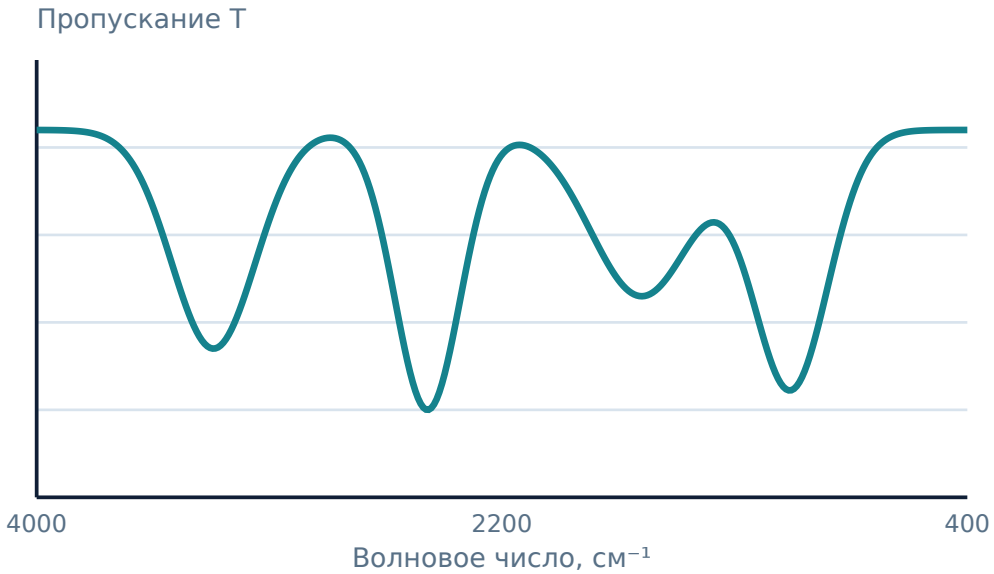
Полосы поглощения используют для распознавания типов химических связей и функциональных групп.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Назначение полос проверяют с учётом наложения сигналов и подложки.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



FTIR: полосы поглощения МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Последовательность обработки спектра

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 11 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Сначала выполняют коррекцию фона и проверяют калибровку волновых чисел.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Затем определяют положения пиков, их ширину и интенсивность с оценкой ошибок.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Сравнение FTIR и Raman

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 12 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

FTIR и Raman имеют разные правила отбора и часто дополняют друг друга.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Для слабых нанопокрытий результат ограничивается чувствительностью и вкладом подложки.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Ограничения спектроскопии

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 13 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Флуоресценция, нагрев лазером, поглощение подложки и загрязнения искажают спектры.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Отсутствие заметного пика не доказывает отсутствия соответствующего вещества.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Разбор расчётного примера: Расчёт рамановского сдвига

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Лазер $\lambda_0 = 532$ нм; стоксовская линия $\lambda_s = 580$ нм.

РЕШЕНИЕ

$$\Delta\tilde{\nu} = 10^7(1/532 - 1/580) \approx 1556 \text{ см}^{-1}.$$

КАК ПОНИМАТЬ РЕЗУЛЬТАТ

Это расчётный пример, а не измеренный спектр наноматериала.

Итоги лекции: главные выводы

Принцип

Комбинационное рассеяние возникает при неупругом взаимодействии света с колебаниями вещества. Раман-активность...

Применение

Для многих sp^2-углеродных структур характерны полосы D, G и 2D. Их положение, ширина и относительная...

Ограничения

Флуоресценция, нагрев лазером, поглощение подложки и загрязнения искажают спектры. Отсутствие заметного пика...

Главный итог: обоснованный научный вывод требует корректной физической модели и проверки измерений.

Контрольные вопросы и литература

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

1. Почему FTIR и Raman дополняют друг друга?
2. Какие полосы характерны для sp^2-углерода?
3. Почему отсутствие пика не доказывает отсутствие вещества?

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Bhagyaraj et al. Characterization of Nanomaterials, 2018

2. Srinivasan et al. Experimental Techniques, 2024

Материалы курса, 2026

Самостоятельное задание: назовите измеряемый параметр, предложите метод и укажите возможный источник ошибки.