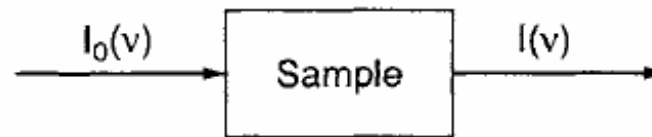
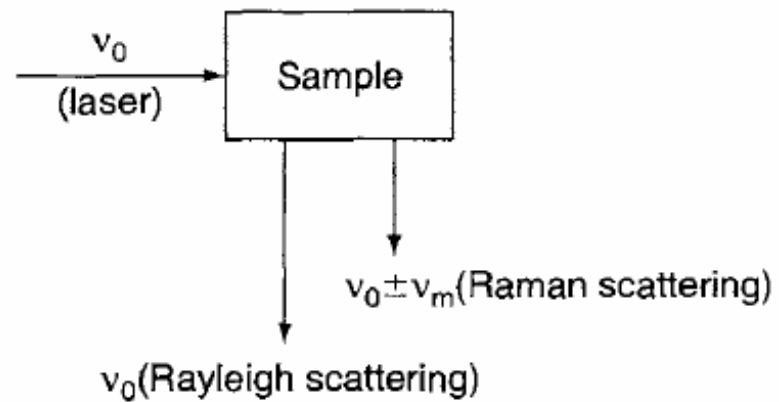


# Ngũn g c ph Raman

IR



Raman





[www.mientay.vn.com](http://www.mientay.vn.com)

Cường độ biến thiên của chùm sáng kích thích :  $E = E_0 \cos 2\pi \nu_0 t$

Momen lưỡng cực :  $P = \alpha E = \alpha E_0 \cos 2\pi \nu_0 t$

Dao động của hạt nhân :  $q = q_0 \cos 2\pi \nu_m t$

Dao động nhỏ :  $\alpha = \alpha_0 + \left( \frac{\partial \alpha}{\partial q} \right)_0 q + \dots$

$$\Rightarrow P = \alpha E_0 \cos 2\pi \nu_0 t = \alpha_0 E_0 \cos 2\pi \nu_0 t + \left( \frac{\partial \alpha}{\partial q} \right)_0 q E_0 \cos 2\pi \nu_0 t$$

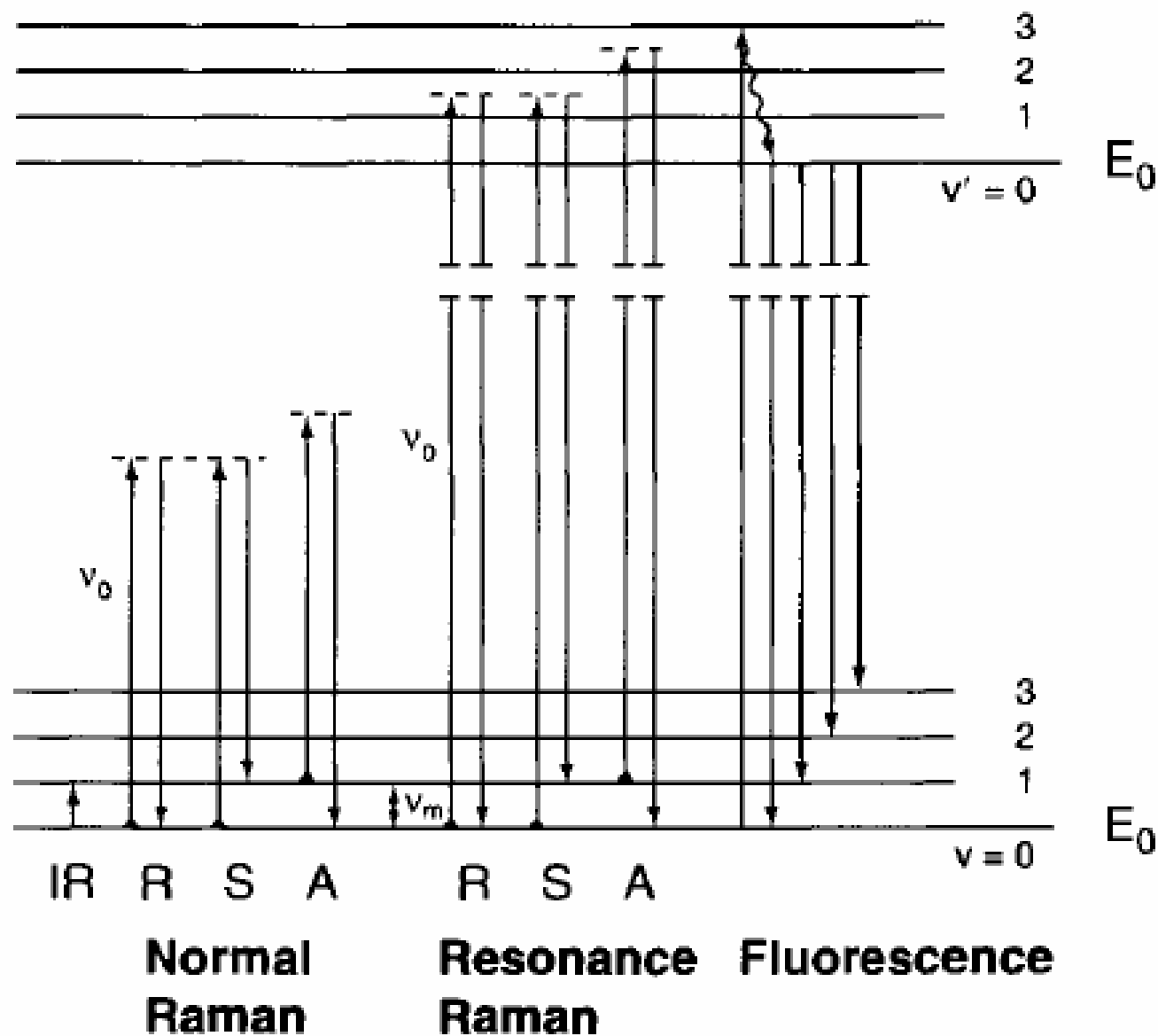
$$P = \alpha_0 E_0 \cos 2\pi \nu_0 t + \left( \frac{\partial \alpha}{\partial q} \right)_0 q_0 E_0 \cos 2\pi \nu_0 t \cdot \cos 2\pi \nu_m t$$

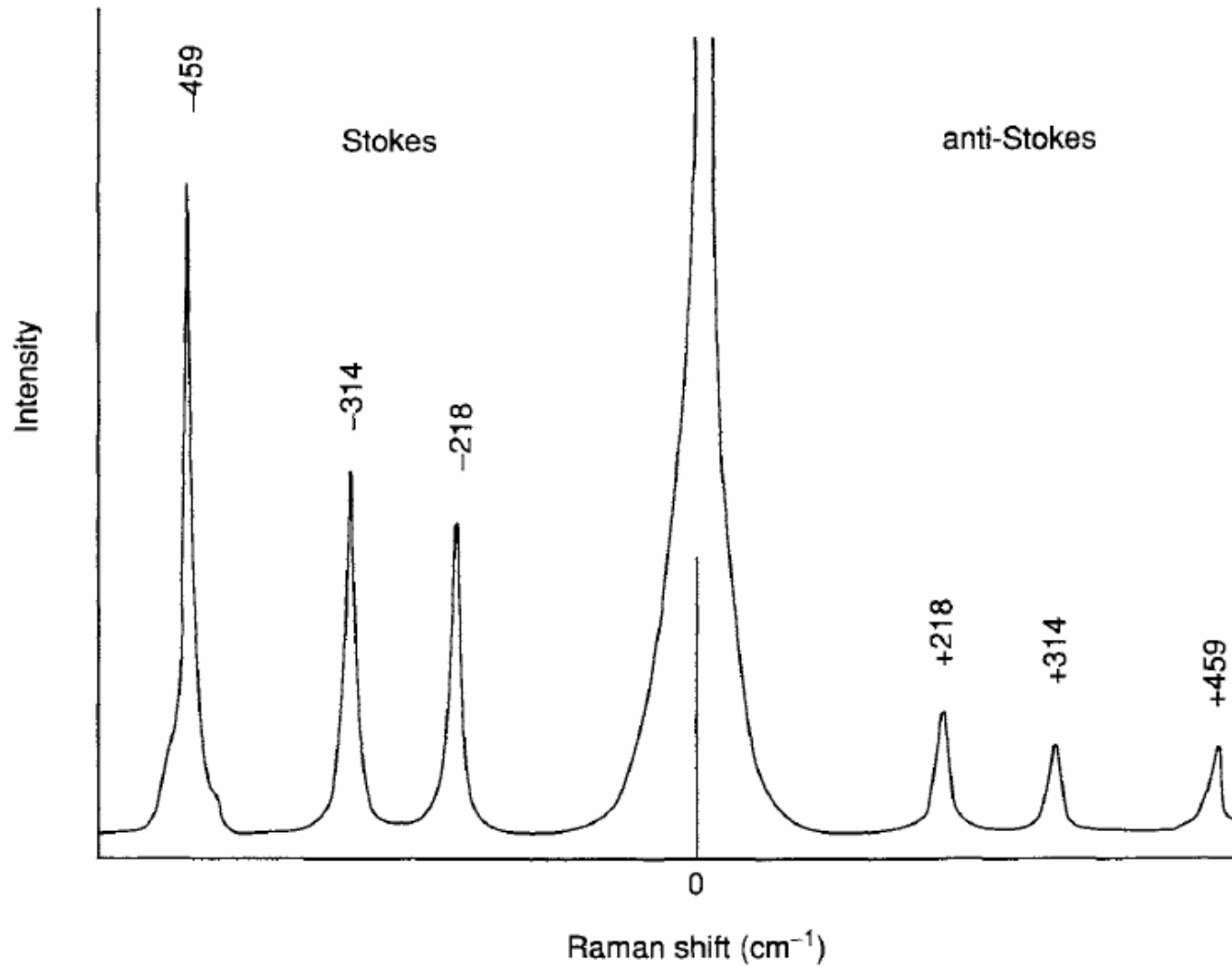
$$P = \alpha_0 E_0 \cos 2\pi \nu_0 t + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \alpha}{\partial q} \right)_0 q_0 E_0 \left[ \cos 2\pi (\nu_0 + \nu_m) t + \cos 2\pi (\nu_0 - \nu_m) t \right]$$

↓  
Vạch Rayleigh

↓  
Vạch phân Stokes

↓  
Vạch Stokes





*Ph Raman của  $\text{CCl}_4$  với bước sóng kích thích 1064nm*

## Các thông số xác định dao động

Sóng : 
$$\bar{v} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

Hằng số c : 
$$K = 4\pi^2 c^2 \omega_e^2 \mu$$

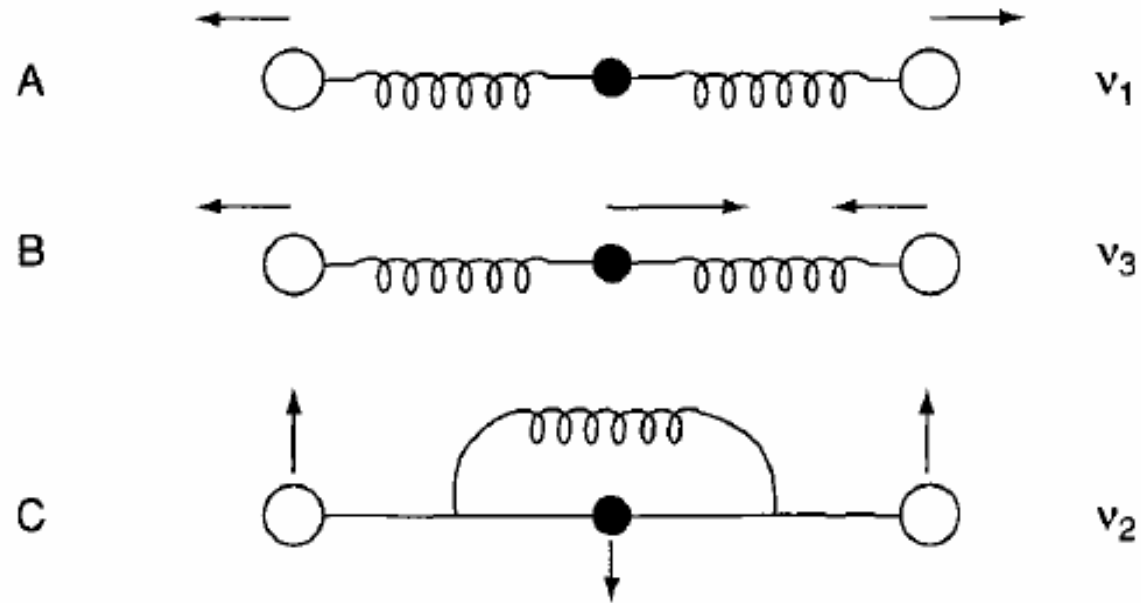
$$K = 4(3,14)^2 (3.10^{10})^2 \left( \frac{\mu}{6,025.10^{23}} \right) \omega_e^2 = 5,8883.10^{-2} \cdot \mu \omega_e^2$$

Molecule	Obs. $\bar{\nu}$ (cm <sup>-1</sup> )	$\omega_e$ (cm <sup>-1</sup> )	$\mu$ (awu)	K (mdyn/Å)
H <sub>2</sub>	4,160	4,395	0.5041	5.73
HD	3,632	3,817	0.6719	5.77
D <sub>2</sub>	2,994	3,118	1.0074	5.77
HF	3,962	4,139	0.9573	9.65
HCl	2,886	2,989	0.9799	5.16
HBr	2,558	2,650	0.9956	4.12
HI	2,233	2,310	1.002	3.12
F <sub>2</sub>	892	—	9.5023	4.45
Cl <sub>2</sub>	546	565	17.4814	3.19
Br <sub>2</sub>	319	323	39.958	2.46
I <sub>2</sub>	213	215	63.466	1.76
N <sub>2</sub>	2,331	2,360	7.004	22.9
CO	2,145	2,170	6.8584	19.0
NO	1,877	1,904	7.4688	15.8
O <sub>2</sub>	1,555	1,580	8.000	11.8

Hằng số  $K$  là hằng số hằng số lực cân bằng:

$$K = \left( \frac{d^2V}{dq^2} \right)_{q \rightarrow 0}$$

# Dao động của phân tử nhị nguyên tử



Chuyển động của các nguyên tử trong dao động chu kỳ của  $\text{CO}_2$





S dao ng chu n t c c a phân t có N nguyên t :

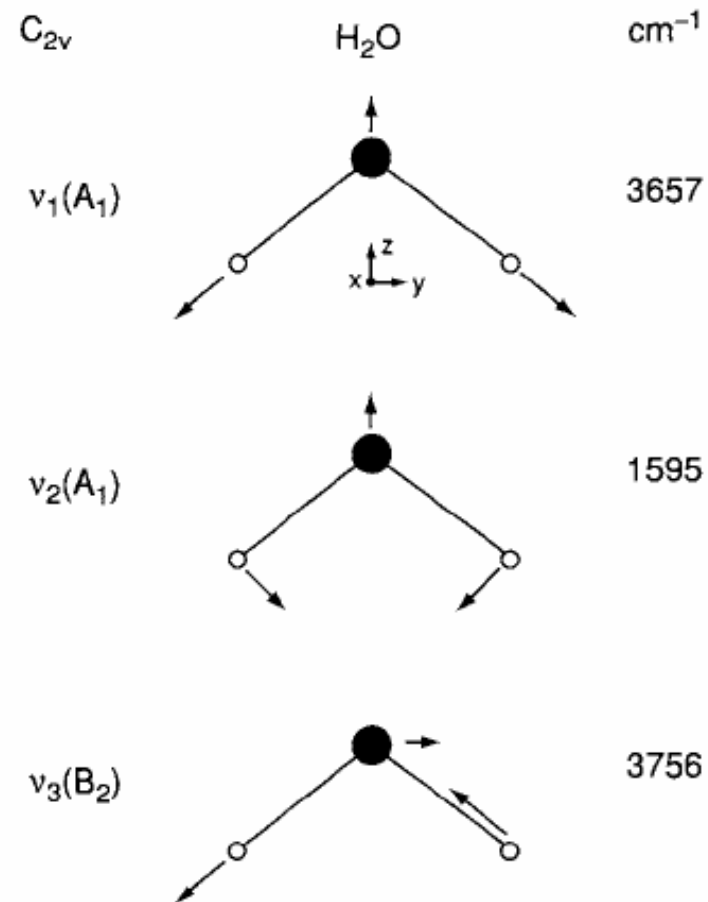
$D_{\infty h}$  • Phân t h n 2 nguyên t :  $3N-6$   $\text{cm}^{-1}$

$v_1(\Sigma_g^+)$  • Phân t 2 nguyên t :  $3N-5$  = 1340

$v_2(\Pi_u)$   $v_{2a}$   $v_{2b}$  } 667

$v_3(\Sigma_u^+)$  2350

Các dao ng chu n t c c a  $\text{CO}_2$



Các dao động chu n t c c a  $H_2O$