

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان

بررسی کوانتومی پدیده رامان بر روی بلورهای مختلف

دانشجو:

حسین قربانی

استاد راهنما:

دکتر محمد طالبیان

دکتر مهدی امنیت طلب

۱۳۸۹/۹/ ۸

حق چاپ و تکثیر برای دانشگاه ارومیه محفوظ است.

کتابخانه مرکزی ارومیه
تاسیس ۱۳۸۹

۱۴۶۴۲۱

پایان نامه آقای حسن رضا

به تاریخ ۱۹، ۴، ۲۰

شماره ۱۷، ۵ مورد پذیرش هیات محترم داوران با رتبه بسیار خوب و نمره ۱۷، ۵ قرار گرفت.

۱- استاد راهنما و رئیس هیئت داوران: دکتر محمد علی

۲- استاد مشاور: دکتر —

۳- داور خارجی: دکتر سول صالح

۴- داور داخلی: دکتر اکبر حقیر

۵- نماینده تحصیلات تکمیلی: دکتر حبیب ازاخیلر

انسان

تقدیم به:

روح پدرم و مادر عزیزتر از جانم که وجود بهشتی اش همیشه برایم پناهگاهی از آرامش است.

و

تقدیم به:

همسر و فرزند عزیزم

تقدیر و تشکر:

خداوند بزرگ را سپاس می گویم به خاطر تمامی نعمت هایش و به خاطر لطف بی کرانش ، چه بارها که رشته زندگی ام به مویی رسید ولی به خاطر الطاف بی کران یگانه هستی بخش هرگز گسسته نشد.

حال که این پایان نامه به اتمام رسیده است بر خود لازم می دانم از زحمات بی پایان استادانی که این نگارش مرهون دانش آنان است، سپاسگذاری کنم.

نخست از آقایان دکتر محمد طالبیان و دکتر مهدی امنیت طلب، استاد راهنمای پایان نامه که با بصیرت و مهربانی ایشان مشکلات فراروی این تحقیق هموار شد. در طول مدت تحصیل همواره از راهنمایی های ارزشمند ایشان بهره برده ام و بر خود می بالم و به شاگردی ایشان مفتخرم .

جا دارد از اعضای هیات علمی گروه فیزیک مراتب سپاس و قدردانی خود را ابراز دارم.

همچنین از زحمات مدیر محترم گروه زمین شناسی آقای دکتر صمد علیپور و همچنین از آقای علی عبدی نهایت تقدیر و تشکر را دارم.

از زحمات دوست عزیزم جناب آقای مقصود سعادت نیاری که در طول مدت این پایان نامه در کنار من بودند نهایت تقدیر و تشکر را دارم.

از همه کارکنان دانشکده علوم دانشگاه ارومیه و دوستان عزیزم، که در کنار آنها بودن تحمل سالهای غربت را برایم آسان نمود.

کمال تشکر را دارم.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
I.....	فهرست مطالب
.....	فهرست اشکال
.....	فهرست جداول
۱.....	چکیده
۲.....	مقدمه
۴.....	فصل اول: روشهای طیف سنجی
۵.....	۱-۱ مقدمه
۷.....	۲-۱ طیف
۷.....	۳-۱ انواع طیف
۸.....	۴-۱ طیف اتمی
۹.....	۵-۱ علل پهن شدگی خطوط طیفی در طیف اتمی
۹.....	۱-۵-۱ عدم قطعیت هایزنبرگ
۱۰.....	۲-۵-۱ اثر دوپلر
۱۱.....	۳-۵-۱ پهن شدگی فشاری
۱۱.....	۶-۱ طیف مولکولی
۱۳.....	۷-۱ طیف نواری ساده
۱۵.....	۸-۱ طیف بینی
۱۵.....	۹-۱ طیف بینی جذب اتمی
۱۵.....	۱-۹-۱ اصول جذب اتمی
۱۵.....	۲-۹-۱ طیف های جذب اتمی
۱۶.....	۳-۹-۱ دستگاه های طیف بینی جذب اتمی
۱۶.....	۵-۹-۱ موارد کاربرد جذب اتمی
۱۷.....	۱۰-۱ طیف بینی نشری
۱۸.....	۱۱-۱ پخش (پراکندگی)
۱۸.....	۱-۱۱-۱ پراکندگی رایلی
۱۹.....	۲-۱۱-۱ پراکندگی دبای
۱۹.....	۳-۱۱-۱ پراکندگی تیندال(می)
۱۹.....	۴-۱۱-۱ پراکندگی رامان
۲۰.....	۱-۴-۱۱-۱ دستگاه رامان
۲۱.....	۲-۴-۱۱-۱ کاربرد رامان در تجزیه

۲۲	۱۲-۱ تفرق (پراش)
۲۳	۱-۱۲-۱ پراش اشعه ایکس
۲۴	۲-۱۲-۱ دستگاه های طیف سنجی اشعه ایکس
۲۴	۳-۱۲-۱ کاربرد پراش اشعه ایکس
۲۵	۱۳-۱ فلونورسانس
۲۵	۱۴-۱ طیف سنجی جذبی مادون قرمز
۲۶	۱۴-۱-۱ دستگاه IR
۲۷	۱۴-۱-۲ دستگاه FT_IR
۲۸	۱۴-۱-۳ هات باندها در طیف IR
۲۸	۱۴-۱-۴ منابع نوری IR
۲۸	۱۴-۱-۵ کاربردهای طیف سنجی IR
۲۹	۱۵-۱ جمعیت سطوح انرژی
۲۹	۱۶-۱ منابع لیزری
۳۰	۱-۱۶-۱ لیزرهای حالت مایع (لیزرهای رنگینه)
۳۰	۲-۱۶-۱ اثرهای نوری غیر خطی با لیزرها
۳۲	فصل دوم: ارتعاشات مولکولها
۳۳	۱-۲ مقدمه
۳۴	۲-۲ جذب و پراکندگی
۳۵	۳-۲ گذارهای چرخشی
۳۶	۴-۲ گذارهای ارتعاشی - چرخشی
۳۷	۵-۲ انواع ارتعاشات مولکولی
۳۸	۶-۲ مدل کلاسیکی ارتعاشات کششی
۳۸	۷-۲ انرژی پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ
۴۱	۸-۲ فرکانس ارتعاشی
۴۲	۹-۲ ارتعاشات مولکولی
۴۲	۱۰-۲ طرز عمل کوانتومی ارتعاشات - نوسانگرهای هماهنگ
۴۴	۱۱-۲ قواعد گزینش
۴۵	۱۲-۲ نوسانگر هماهنگ
۴۶	۱۳-۲ مدهای ارتعاشی
۴۷	۱۴-۲ جفت شدن ارتعاشات
۴۹	۱۵-۲ ارتعاشات اورتن
۵۰	۱۶-۲ عوامل مؤثر در فرکانس ارتعاشات
۵۰	۱۷-۲ فونون

۵۷	فصل سوم: طیف سنجی رامان
۵۸	مقدمه
۵۹	۱-۳ پراکندگی
۶۰	۲-۳ روشهای پراکندگی
۶۰	۳-۳ نفلو متری و پراکندگی
۶۱	۱-۳-۳ دستگاه های اندازه گیری نفلو متری و کدري سنجی
۶۲	۲-۳-۳ کاربرد روشهای پراکندگی نفلومتری و کدري سنجی
۶۲	۲-۳-۳ پراکندگی رامان
۶۲	۱-۲-۳-۳ اگذارهایی که پیکهای رامان تولید می کنند
۶۴	۲-۲-۳-۳ مدهای ارتعاشی همراه با اثر رامان
۶۸	۳-۲-۳-۳ نسبت های واقطبش رامان
۶۹	۴-۲-۳-۳ شدتهای پیک های رامان
۷۰	۴-۳ طیف سنجی خطی رامان
۷۲	۵-۳ اثر رامان از دیدگاه کلاسیکی
۷۶	۶-۳ نظریه کوانتومی اثر رامان
۸۰	۷-۳ دستگاهوری رامان
۸۰	۱-۷-۳ منبع نور سلول
۸۲	۲-۷-۳ طیف نورسنجهای رامان
۸۲	۸-۳ دستگاه طیف سنجی رامان
۸۴	۹-۳ کاربردهای طیف سنجی رامان
۸۵	۱۰-۳ کاربردهای کمی طیف سنجی رامان
۸۶	فصل چهارم: ساختار بلورهای بریل و تیتان و بررسی طیف های XRD و پراکندگی رامان آن
۸۷	۱-۴ مقدمه
۸۷	۲-۴ ساختار بریل
۸۸	۳-۴ کاربرد بریل
۸۹	۴-۴ طیف سنجی XRD
۹۰	۵-۴ بررسی نمونه بریل توسط پراش اشعه X (XRD)
۹۱	۶-۴ بررسی طیف رامان بلور بریل
۹۴	۷-۴ تیتان
۹۴	۸-۴ ساختار و فازهای بلوری تیتان
۹۵	۱-۸-۴ فاز آاناتاز
۹۵	۲-۸-۴ فاز روتایل
۹۶	۳-۸-۴ فاز بروکایت
۹۷	۹-۴ خواص فیزیکی تیتان

۹۸.....	۱۰-۴ خواص مکانیکی تیتان
۹۸.....	۱۱-۴ خواص شیمیایی تیتان
۹۸.....	۱۲-۴ خواص اپتیکی تیتان
۹۸.....	۱۳-۴ اثرهای فیزیکی و شیمیایی تیتان
۹۸.....	۱-۱۳-۴ اثر فوتو کاتالیستی
۹۹.....	۱-۱-۱۳-۴ چگونگی فرآیند فوتوکاتالیستی تیتان
۹۹.....	۱-۱۳-۴ عوامل موثر بر اثر فوتوکاتالیستی
۱۰۰.....	۱-۱۳-۴ اثر آب دوستی
۱۰۰.....	۱۴-۴ کاربردهای تیتان
۱۰۰.....	۱-۱۴-۴ کاربردهای زیست محیطی
۱۰۰.....	۲-۱۴-۴ کاربرد در سلولهای خورشیدی حساس شده توسط رنگینه
۱۰۱.....	۳-۱۴-۴ کاربرد تیتان در حسگرها
۱۰۱.....	۴-۱۴-۴ کاربردهای دیگر تیتان
۱۰۲.....	۱۵-۴ بررسی طیف XRD نمونه تیتان
۱۰۳.....	۱۶-۴ بررسی طیف رامان نمونه تیتان
۱۰۷.....	نتایج

فهرست اشکال

۷.....	شکل ۱-۱: نمونه ای از طیف
۸.....	شکل (۲-۱): طیف جذبی یا نشری اتمی
۱۲.....	شکل (۳-۱): ترازهای انرژی در یک مولکول
۱۲.....	شکل (۴-۱): طیف جذبی یا نشری مولکولی
۱۴.....	شکل (۵-۱): طیف نواری ساده
۱۶.....	شکل ۶-۱: نمودار شمایی لامپ کاتدی توخالی
۲۰.....	شکل (۷-۱): پراکندگی رایلی و رامان
۲۱.....	شکل (۸-۱): شمای دستگاه رامان
۲۲.....	شکل (۹-۱): پراش تابش تکفام به وسیله شکافها
۲۳.....	شکل (۱۰-۱): پراش اشعه X
۲۶.....	شکل (۱۱-۱): شمای دستگاه IR
۲۷.....	شکل (۱۲-۱): شمایی از تداخل سنج مایکلسون روشن شده با یک منبع تکفام
۳۷.....	شکل (۱-۲): انواع مختلف ارتعاشات
۴۰.....	شکل (۲-۲): نمودارهای انرژی پتانسیل
۴۸.....	شکل (۳-۲): ارتعاشات متقارن و نامتقارن کربن دی اکسید
۴۹.....	شکل (۴-۲): ارتعاشات قیچی وار کربن دی اکسید

- شکل (۵-۲): ارتعاشات مولکول آب..... ۴۹
- شکل (۶-۲): منحنی پاشندگی یک موج کشسان..... ۵۱
- شکل (۷-۲): انرژی نوسانگر بر حسب دما..... ۵۲
- شکل (۸-۲): قسمتی از یک شبکه یک اتمی: پیکانها نشانگر جابجایی های اتمی از موضع تعادل خود هستند و فنرها نمایانگر نیروهای بین اتمها میباشند..... ۵۳
- شکل (۹-۲): منحنی پاشندگی برای یک شبکه یک بعدی که با نزدیکترین همسایگانش برهم کنش دارد..... ۵۳
- شکل (۱۰-۲): ناحیه $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$ برای اینکه طول موج یگانه‌ای برای همه نوسانهای فیزیکی در یک شبکه یک بعدی بدهد کافی است. (b) نواحی در فضای q که با پیکان به هم مرتبط شده اند و از لحاظ فیزیکی معادل یکدیگرند..... ۵۴
- شکل (۱۱-۲): دو شاخه پاشندگی یک شبکه دو اتمی (M_1 و M_2)..... ۵۶
- شکل (۱-۳): یک کدری سنجی ساده..... ۶۱
- شکل (۲-۳): منشا خطوط رامان..... ۶۳
- شکل (۳-۳): مقایسه طیف IR و رامان بریل..... ۶۵
- شکل (۴-۳): فعالیت رامان و مادون قرمز در مد ارتعاشی کربن دی اکسید (الف) متقارن، (ب) نامتقارن..... ۶۷
- شکل (۵-۳): واقطیش حاصل از پراکندگی رامان..... ۶۹
- شکل (۶-۳): (a) پراکندگی رایلی، (b) پراکندگی استوکس رامان، (c) پراکندگی آنتی استوکس..... ۷۱
- شکل (۷-۳): جابه جایی ارتعاشی A-B در نزدیکی موقعیت تعادل..... ۷۵
- شکل (۸-۳): قطبش پذیری A-B بر حسب جابه جایی ارتعاشی حول نقطه تعادل..... ۷۵
- شکل (۹-۳): سطوح انرژی ارتعاشی..... ۷۶
- شکل (۱۰-۳): پایستگی انرژی برای پراکندگی رامان (جابه جایی استوکس)..... ۷۷
- شکل (۱۱-۳): تحریک طیف های رامان (الف) لامپ کمان جیوه ای؛ (ب) تحریک با لیزر..... ۸۱
- شکل (۱۲-۳): دستگاه طیف سنج رامان در بخش فیزیک دانشگاه تربیت مدرس تهران..... ۸۳
- شکل (۱-۴): تصویر قسمتی از ساختار بریل در صفحه عمود بر محور C..... ۸۸
- شکل (۲-۴): دستگاه XRD دانشگاه ارومیه..... ۹۰
- شکل (۳-۴): طیف XRD مربوط به کانی بریل..... ۹۱
- شکل ۴-۴ (الف): طیف رامان مربوط به کانی بریل در دمای اتاق (ب) طیف رامان بریل گرفته شده در دانشگاه تربیت مدرس تهران..... ۹۲
- شکل (۵-۴): نمایش ساختار بلوری آناتاز..... ۹۵
- شکل (۶-۴): نمایش ساختار بلوری روتایل..... ۹۶
- شکل (۷-۴): نمایش ساختار بلوری بروکایت..... ۹۷
- شکل (۸-۴): طیف XRD گرفته شده در گروه فیزیک دانشگاه ارومیه..... ۱۰۳

شکل (۴-۹): مدهای ارتعاشی رامان فاز روتایل ۱۰۴

شکل ۴-۱۰ الف- طیف رامان تیتان مشاهده شده در مرجع [30] مربوط به دو نوع فاز آاناتاز و روتایل

ب- طیف رامان گرفته شده در دستگاه طیف سنجی دانشگاه تربیت مدرس تهران ۱۰۵

فهرست جداول

جدول شماره (۱-۱): روشهای مختلف طیف سنجی ۶

جدول (۱-۲): ثابت نیروی پیوند (k) برای انواع مختلف پیوند ۴۴

جدول (۱-۴): نتایج حاصل از مدهای فعال در طیف رامان بریل ۹۴

جدول (۲-۴): خواص فیزیکی کلی دی اکسید تیتانیوم ۹۷

جدول (۳-۴): نتایج حاصل از مدهای فعال در طیف رامان تیتان ۱۰۶

چکیده

پراکندگی رامان که یک پراکندگی ناکشسان است، از برهم کنش فوتونها با فوتونها (ارتعاشات شبکه بلوری) ناشی می‌شود. در پراکندگی رامان پرتو تابش تکفام با انرژی $h\nu_0$ به مولکولهای مواد در حالت گازی یا مایعات شفاف عاری از گرد و غبار، یا جامدهای کاملاً شفاف نوری برخورد کرده و در این فرایند مولکولها مقداری از انرژی خود را از دست داده یا به دست می‌آورند. به بیان دیگر، با تابش فرودی بر ماده، انرژی تابشی بر ارتعاشات پیوندهای مولکول برهمکنش لحظه‌ای کرده، قطبش پذیری مولکول را تغییر داده و پراکندگی ناکشسان اتفاق می‌افتد که نتیجتاً تابش پراکنده، انرژی بیشتر یا کمتر از تابش فرودی خواهد داشت (پراکندگی پاد استوکس و استوکس).

در این پایان نامه ابتدا انواع طیف سنجی‌های اتمی و مولکولی را بیان کرده و علل پهن شدگی طیفها توضیح داده می‌شود. سپس طیف سنجی جذبی زیر قرمز (IR) که مکمل پراکندگی رامان است را توضیح داده و طیفهای آن با طیفهای رامان مقایسه می‌شود. همچنین انواع ارتعاشات شبکه بلوری را بررسی کرده، فوتونها را توضیح داده و قطبش پذیری و عوامل موثر بر آن بیان می‌گردد.

در ادامه، روشهای پراکندگی را توصیف کرده، دستگاهها و کاربردهای آنها بیان می‌شود. سپس به تفضیل، پدیده رامان را به صورت کلاسیکی و کوانتومی شرح می‌دهیم و طیف سنجی رامان و دستگاه مرتبط با آن را بررسی می‌کنیم. در پایان، توصیف نمونه‌های بلوری بریل و تیتان را ارائه می‌دهیم و سپس کاربردهای آنها را بیان کرده و طیف‌های XRD و رامان گرفته شده از این نمونه‌ها را با طیف‌های مشابه گزارش شده در مراجع، مقایسه و تفسیر می‌کنیم.

مقدمه

طیف سنجی یک اصطلاح کلی برای علمی است که با بر هم کنش انواع مختلف تابش با ماده سر و کار دارد. از نظر تاریخی بر هم کنشهای مورد نظر بین تابش الکترومغناطیسی و ماده بوده است. ولی امروزه طیف سنجی گسترش یافته و بر هم کنشهای بین ماده و سایر شکلهای انرژی مانند امواج صوتی و باریکه هایی از ذرات مثل یونها و الکترونها را شامل می شود. روشهای طیف سنجی بر اساس طیف سنجیهای اتمی و مولکولی استوارند.

اتمها در ساختار بلوری در مکانهای شبکه ای خود ساکن نیستند و به واسطه انرژی گرمایی شان، حول موقعیت خود نوسان می کنند. یک جسم جامد از اتمهای گسسته تشکیل شده است که در صورتی که طول موج خیلی بلند باشد می توان طبیعت اتمی را نادیده گرفت. ارتعاشاتی که اتمهای شبکه انجام می دهند به امواج کشسان موسومند. از آنجائیکه مدهای امواج کشسان و انرژی این امواج، کوانتیده هستند، بنابراین انرژی هر مد نیز کوانتیده و یکای آن $\hbar\omega$ می باشد. در مقایسه با انرژی یک میدان الکترومغناطیسی که به صورت ذره ای با معرفی فوتون بیان می شود، در امواج کشسان نیز موجود ذره ماندی که واحد انرژی میدان کشسان در یک مد بخصوص است، فونون نامیده می شود. پراکندگی رامان از بر هم کنش فوتونها با فونونها حاصل می شود که یک پراکندگی ناکشسان است. در پراکندگی رامان فرکانس نور تابیده با فرکانس نور پراکنده متفاوت است. با بررسی فوتونهایی که به طور ناکشسان پراکنده می شود، می توان طیف ارتعاشی مولکول را به دست آورد.

در برخورد تابش الکترومغناطیسی تکفام با ماده، قسمت زیاد آن از ماده عبور کرده و بخش کوچکی از آن پراکنده می شود. اگر فرکانس تابش پراکنده با فرکانس تابش فرودی یکسان باشد، نوع پراکندگی، رابلی نامیده می شود. منشا پراکندگی رابلی، مراکز پراکنده کننده ای نظیر مولکولها هستند که ابعادشان خیلی کوچکتر از طول موج تابش اولیه است. اگر فرکانس تابش پراکنده متفاوت با فرکانس نور فرودی باشد، پراکندگی را به احترام رامان فیزیکدان هندی،

پراکندگی رامان نامیده می‌شود. پراکندگی رامان از انتقالات بین ترازهای انرژی ارتعاشی مولکولها ناشی می‌شود که در اثر فرایند قطبش در مولکول به وجود می‌آیند.

دسته‌ای از نوارهای رامان که فرکانس نور پراکنده آن کمتر از فرکانس تابش فرودی باشد، نوارهای استوکس و دسته ای دیگر که فرکانس نور پراکنده آنها بیشتر از فرکانس تابش اولیه است، نوارهای پاد استوکس نامیده می‌شوند.

پراکندگی رابلی، همیشه با پراکندگی رامان همراه و شدت آن چندین برابر بیشتر از رامان است و فرکانس مدهای ارتعاشی آن بسیار کوچک است. پراکندگی رامان یک پدیده نادری است که تنها یک در 10^6 تا 10^8 فوتون پراکنده را شامل می‌شود. نسبت شدتهای استوکس به آنتی استوکس بستگی به تعداد مولکولهایی دارد که در حالت ارتعاش پایه و برانگیخته باشند. چون تعداد زیادی از مولکولها در دمای اتاق احتمالاً در حالت پایه ارتعاشی هستند، لذا بیشتر پراکندگی رامان، پراکندگی رامان استوکس است.

از نظر تاریخی، پراکندگی رامان هم از جنبه کلاسیکی و هم از جنبه کوانتومی توصیف می‌شود. نظریه کلاسیکی مبنی بر نظریه کلاسیکی امواج نوری بوده و نمی‌تواند مدهای ارتعاشی طبیعی کوانتومی را محاسبه کند که این، با استفاده از نظریه کوانتومی توجیه می‌شود.

در این تحقیق طیفهای XRD و رامان گرفته شده از نمونه های بریل و تیتان را با هم مقایسه کرده و نتایج طیفها یکدیگر را تایید می‌کنند.

فصل اول

روش های طیف سنجی

۱-۱ مقدمه

روشهای طیف سنجی گروه بزرگی از روش های تجزیه ای هستند که بر اساس طیف سنجی اتمی و مولکولی استوارند. طیف سنجی یک اصطلاح کلی برای علمی است که با برهم کنش انواع مختلف تابش با ماده سروکار دارد. بطور کلی، برهم کنش های مورد نظر بین تابش الکترومغناطیسی و ماده می باشند. ولی امروزه طیف سنجی گسترش یافته و برهم کنش های بین ماده و سایر شکل های انرژی مانند امواج صوتی و باریکه هایی از ذرات، مثل یون ها و الکترون ها را نیز شامل می گردد.

طیف سنجی و روش های طیف سنجی با اندازه گیری شدت تابش با یک مبدل فوتو الکتریکی یا سایر انواع وسایل الکترونیکی اشاره دارند. متداولترین روشهای طیف سنجی بر اساس تابش الکترو مغناطیسی استوارند که نوعی از انرژی است که از درون فضا با سرعت بسیار زیاد عبور می کند و می تواند چندین شکل را به خود بگیرد. ساده ترین شکل قابل تشخیص تابش الکترو مغناطیسی، نور و گرمای تابشی می باشد. شکل های نا آشکار تر عبارتند از پرتو X و همچنین تابش فرا بنفش، ریز موج و تابش با فرکانس رادیویی.

در برهم کنش امواج الکترو مغناطیسی با گونه های اتمی و مولکولی، بسته به نوع برهم کنش تابش الکترومغناطیسی با ماده، روش های مختلف طیف سنجی مطابق جدول زیر ایجاد می گردد [1].

جدول شماره (1-1): روشهای مختلف طیف سنجی

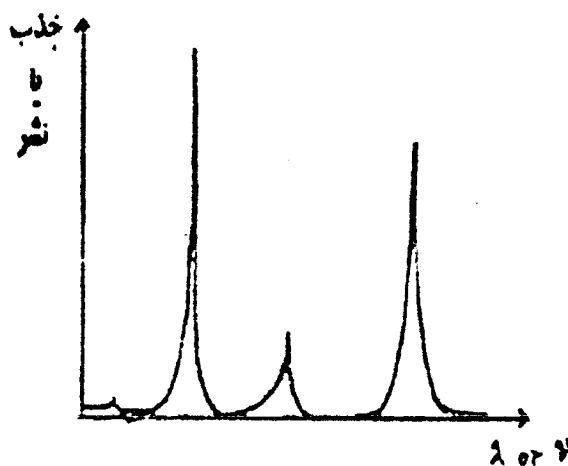
روش دستگاہی	نتیجه برهمکنش
طیف سنجی نشری (پرتو X, UV, مرئی, IR), فلورسانس, فسفرسانس روش های رادیو شیمیایی	نشر تابش
طیف سنجی نوری (X, UV, مرئی, IR), رنگ سنجی, جذب اتمی, ESR, NMR	جذب تابش
کدری سنجی, نفلومتری, طیف سنجی رامان	پراکندگی تابش
پراش الکترون, پراش اشعه ی X	پراش تابش
قطبش سنجی, پاشندگی چرخش نوری, دورنگ نمایی دورانی	چرخش تابش

در این فصل چون طیف سنجی رامان مربوط به پراکندگی تابش و اساس پراکندگی رامان نیز ارتعاشات شبکه مولکولها (فونون ها) است لذا، ابتدا طیف اتمی را توضیح داده و علل پهن شدگی طیف اتمی بیان می شود، سپس طیف مولکولی و طیف نواری ساده و در ادامه پراکندگی الاستیک و غیر الاستیک و انواع آن را تعریف و توضیح می دهیم. همچنین مختصری از پراش اشعه ایکس را بیان می کنیم. چون طیف سنجی مادون قرمز مشابه و مکمل طیف سنجی رامان است، به توضیح طیف سنجی مادون قرمز پرداخته و کاربردها و دستگاہوری¹ آن را توضیح می دهیم و در آخر از منابع لیزری تابش مختصری ارائه می دهیم.

۲-۱ طیف^۱

طیف عبارت است از نمودار تغییرات شدت جذب یا نشر بر حسب یکی از کمتهایی که تابش الکترو مغناطیسی را نشان می دهد، [2].

شکل (۱-۱) طیف فرضی برای یک ذره فرضی را نشان می دهد. در این طیف، محل پیک ها انرژی انتقال را نشان می دهد که مربوط به سطوح انرژی ذره است و سطوح انرژی یک ذره نیز از مشخصات یک ذره می باشد. در طیف های مختلف از روی ارتفاع پیک ها میتوان به مقدار ماده پی برد (تجزیه کیفی).



شکل ۱-۱: نمونه ای از طیف

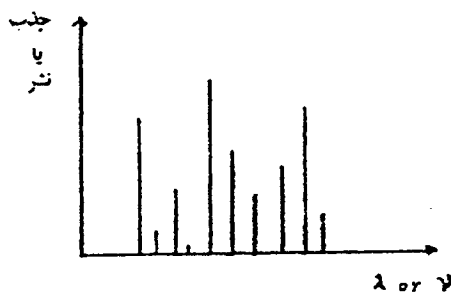
۳-۱ انواع طیف ها

نظر به اینکه اتم ها و مولکول ها می توانند انرژی الکترو مغناطیسی را جذب یا نشر نمایند، بنابراین طیفهای جذب اتمی و مولکولی و طیف های نشری اتمی و مولکولی را خواهیم داشت. در مورد اتم ها، طیف های خطی و در مورد رادیکالها و مولکول های ساده، طیف های نواری و در مورد مولکول های حقیقی، طیف های پیوسته جذبی و نشری حاصل می گردد.

۱-۴ طیف اتمی

می دانیم که اتم فقط دارای ترازهای انرژی الکترونی است بنابراین، انرژی کل اتم برابر انرژی الکترونی است و سطوح انرژی آن فقط سطوح انرژی الکترونی است که بصورت کوانتیده می باشند. اگر یک تابش چندفام به سیستم حاوی اتم ها برخورد کند به علت تعداد کم حالت های انرژی ممکن در این اتم ها، فقط تعداد کمی از فرکانس های مشخص از طریق جذب، حذف می شوند. زیرا تحریک فقط از طریق فرایندهای الکترونی صورت می گیرد که در نتیجه آن، یک یا تعدادی از الکترون های اتم به تراز انرژی بالاتر ارتقا می یابند. به همین دلیل طیف های اتمی خطی می باشند و هیچ پهنایی ندارند (10^{-4} \AA).

از آنجائیکه ترازهای انرژی فاصله معین و ثابتی دارند بنابراین طول موج یا فرکانس مربوط به هر خط نیز معین می باشد. بنابراین محل خطوط طیفی، نشان دهنده ی نوع اتم می باشد و در تجزیه کیفی مورد استفاده قرار می گیرد. شدت جذب یا نشر نیز برای تجزیه ی کمی مناسب می باشد. طیف های در نواحی فرا بنفش و مرئی، هنگامی تولید می شوند که گونه های تابش دیده، ذرات اتمی منفردی اند که در فاز گازی کاملاً از یکدیگر جدا هستند. ذرات منفرد در یک گاز مستقل از یکدیگر عمل می کنند و طیف متشکل از یک سری خط تیز می باشد (شکل ۱-۲).



شکل (۱-۲): طیف جذبی یا نشری اتمی

طیف های خطی پرتو X نیز به وسیله ی گذارهای الکترونی تولید می شوند. با وجود این، الکترون های درگیر در این حالت، الکترون های موجود در درونی ترین اوربیتال ها هستند. بنابراین بر عکس نشر فرا بنفش و مرئی، طیف پرتو X

یک عنصر، مستقل از محیط اطراف آن است مثلاً طیف نثری برای مولیبدن، بدون توجه به اینکه نمونه برانگیخته فلز مولیبدن، مولیبدن سولفید جامد، یا محلول آبی از یک کمپلکس آنیونی فلز باشد، یکسان است.

۵-۱-۱ علل پهن شدن خطوط طیفی در طیف های اتمی

قبلاً اشاره کردیم که طیف های اتمی بصورت خطوط تیز می باشند ولی در عمل بنا به دلایل زیر کاملاً تیز نیستند و دارای پهنای می باشند.

۱-۵-۱-۱ عدم قطعیت هایزنبرگ^۱

مطابق اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، اگر سیستمی زمان معینی را در یک حالت انرژی سپری کند، انرژی آن حالت عدم اطمینانی برابر ΔE خواهد داشت. به عبارت دیگر حالت هایی با عمر معین دارای عدم اطمینانی در انرژی می باشند. (ΔE عدم قطعیت در انرژی تراز و Δt زمان لازم برای اندازه گیری می باشد)

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{h}{2\pi} \quad (1-1)$$

برای حالت پایه $\Delta t \equiv \infty$ (زیرا اتم همواره در حالت پایه است) و در نتیجه $\Delta E \equiv 0$ یعنی عدم قطعیتی در انرژی وجود ندارد. ولی با توجه به عمر کم حالت تحریک شده، عدم قطعیتی برابر ΔE در انرژی حالت تحریک شده وجود دارد که منجر به پیدایش یک پیک جذبی یا پهنای $\Delta \nu$ بر اساس روابط زیر می شود:

$$\Delta E \cdot \tau = \frac{h}{2\pi} \Rightarrow \Delta E = \frac{h}{2\pi\tau} \Rightarrow h \cdot \Delta \nu = \frac{h}{2\pi\tau} \Rightarrow \Delta \nu = \frac{1}{2\pi\tau} \quad (2-1)$$

*عدم قطعیت در انرژی حالت برانگیخته، در اختلاف انرژی بین حالت برانگیخته و حالت پایه اثر گذاشته و آن هم به نوبه ی خود باعث عدم قطعیت در طول موج می شود.