

# 康普顿散射虚拟仿真实验

吴渝睿 18300180079

## 一、实验目的

- 了解  $\gamma$  射线与物质的相互作用过程，熟悉闪烁体探测器谱仪的工作原理，测量多种放射源  $\gamma$  能谱并计算物质对不同  $\gamma$  射线能量的吸收系数；
- 掌握符合测量技术，并验证康普顿散射的  $\gamma$  光子能量及微分截面与散射角的关系。

## 二、实验原理

1923 年，A. H. Compton 在研究 X 射线通过物质发生的散射现象时，发现散射光中除有原波长  $\lambda_0$  的 X 光外，还产生波长  $\lambda > \lambda_0$  的 X 光，其增量随散射角的不同而变化。用经典理论解释此效应遇到了困难，Compton 借助 A. Einstein 的光子理论，从电子与光子相碰撞的角度对此现象进行了解释。

### 1. $\gamma$ 射线与物质相互作用

当  $\gamma$  射线射入物体时，主要发生光电效应、康普顿效应和电子对效应三种过程。对于低能  $\gamma$  射线和原子序数高的物质，光电效应占优；对于中能  $\gamma$  射线和原子序数低的物质，康普顿效应占优；对于高能  $\gamma$  射线和原子序数高的物质，电子对效应占优。

**光电效应**  $\gamma$  光子与原子相互作用时，其被电子吸收。该电子获得能量后发射离开原子成为光电子。光电子的能量等于入射光子能量减去电子结合能。

**康普顿效应**  $\gamma$  光子与外层电子（可视为自由电子）发生弹性碰撞，光子只将部分能量传递给电子，使电子脱离束缚从原子中射出，光子本身改变运动方向。发射出的电子称为康普顿电子。光子的散射与入射方向的夹角称为散射角  $\theta$ 。康普顿电子的出射方向与光子入射方向的夹角称为反冲角  $\phi$ 。散射后的光子能量为：

$$E_{\gamma'} = \frac{E_{\gamma}}{1 + \frac{E_{\gamma}}{m_e c^2} (1 - \cos\theta)} \quad (1)$$

式中，散射角  $\theta$  可取值为  $[0^\circ, 180^\circ]$ ，入射光子的能量为  $E_{\gamma}$ ，电子的静能为  $m_e c^2$ 。康普顿散射的微分截面为：

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{r_0}{2} \left( \frac{E_{\gamma'}}{E_{\gamma}} \right)^2 \left( \frac{E_{\gamma}}{E_{\gamma'}} + \frac{E_{\gamma'}}{E_{\gamma}} - \sin^2\theta \right) \quad (2)$$

式中， $r_0 = 2.818 \times 10^{-23} \text{cm}$ ，为电子的经典半径。

**电子对效应** 能量大于 1.022MeV 的  $\gamma$  光子从原子核旁经过时可能转变为正反电子对。光子的能量转变为电子对的静能 (1.022MeV) 以及动能。产生的正电子可能会与负电子结合湮灭，重新产生  $\gamma$  射线。

## 2. $\gamma$ 能谱的构成及分析

粒子能谱是指粒子计数或粒子束流强度随粒子能量的分布。利用谱仪可以测得当前环境下粒子在探测器中的沉积能量分布情况，从而定量分析粒子能谱。图 1和图 2分别给出了 $^{137}\text{Cs}$  和  $^{60}\text{Co}$  放射源的能谱。一般情况下， $\gamma$  射线能谱主要包含以下结构：

**全能峰** 全能峰是指  $\gamma$  粒子全部的能量都沉积在探测器内所形成的峰。理论上全能峰应该是一条单能谱线，但因为谱仪的能量分辨能力有限，全能峰被展宽成高斯形状的峰。全能峰的能量等于入射光子的能量  $E_\gamma$ 。

**康普顿平台** 康普顿平台是一个强度近乎不变的连续区域，主要源于发生了康普顿散射的  $\gamma$  粒子。因此其能量即为发生康普顿散射后光子的能量  $E_{\gamma'}$ 。

**背散射峰** 某些  $\gamma$  光子可能在进入探测器前已经历过一次或多次康普顿散射，这种现象在能谱上形成一个峰结构，这个峰大多源于经过约  $180^\circ$  散射后的  $\gamma$  光子，因此称其为背散射峰。其能量大致等于全能峰减去康普顿平台边界的能量。

**单、双逃逸峰** 入射  $\gamma$  光子能量高于两倍电子静能 ( $1.022\text{MeV}$ ) 时，可能发生电子对效应。由此产生的正负电子湮灭后会产生两个  $511\text{keV}$  的次级  $\gamma$  光子。它们可能全部被探测器探测到；或是其中一个逃离探测器，从而产生能量为  $E_\gamma - 511\text{keV}$  的峰，称为单逃逸峰；又或是二者均逃离了探测器，从而产生能量为  $E_\gamma - 1022\text{keV}$  的峰，称为双逃逸峰。

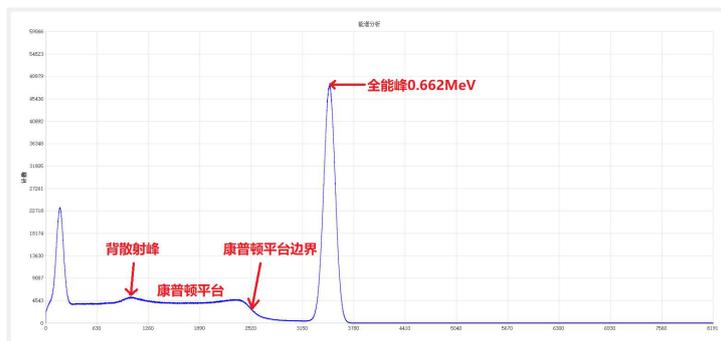


图 1:  $^{137}\text{Cs}$  放射源的能谱示意图

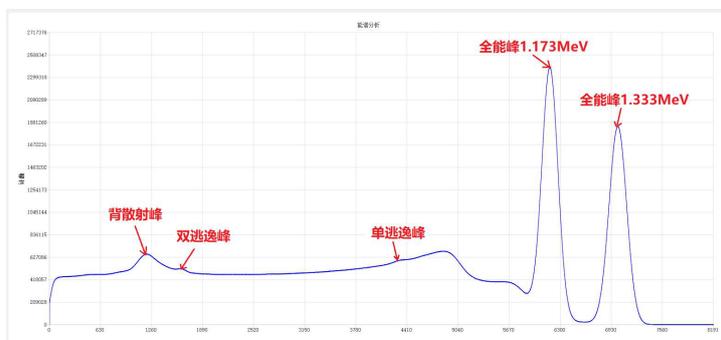


图 2:  $^{60}\text{Co}$  放射源的能谱示意图

### 3. 物质对 $\gamma$ 射线的吸收规律

$\gamma$  射线穿过物质时，会与物质作用损失能量，从而其强度  $I$  会逐渐减弱，这种现象被称为  $\gamma$  射线的吸收，即：

$$I = I_0 e^{-\mu x} = I_0 e^{-\sigma_\gamma N x} \quad (3)$$

式中， $x$  是  $\gamma$  射线通过物质的厚度，是三种相互作用效应的截面之和， $N$  是吸收物质中单位体积的原子数，是吸收系数。反映了物质吸收  $\gamma$  射线的的能力。

### 4. 微分散射截面

根据微分散射截面的定义，有  $N_0$  个光子入射时，与物质中  $N_e$  个电子发生作用，若忽略多次散射自吸收，则散射到  $\theta$  方向  $\Omega$  立体角里的光子数  $N(\theta)$  应为：

$$N(\theta) = \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} N_0 N_e \Omega f \quad (4)$$

式中  $f$  是散射样品的自吸收因子。为验证康普顿散射的  $\gamma$  光子的微分截面与散射角的关系，可利用谱仪能够测出某角度的散射光子数，从而得到相对微分截面：

$$\frac{d\sigma(\theta)/d\Omega}{d\sigma(\theta_0)/d\Omega} = \frac{N_a(\theta)/\epsilon(\theta)}{N_a(\theta_0)/\epsilon(\theta_0)} \quad (5)$$

式中， $N_a$  是能谱的计数率，即散射光子数， $\epsilon(\theta)$  是散射探测器的本征探测效率。 $\epsilon$  可由物质对  $\gamma$  射线的吸收规律而得，若已知探测器材料及厚度  $t$ ，则只要已知其对于能量为  $E_\theta$  的光子的吸收系数  $\mu(E_\theta)$ ，就可以得到探测器的本征效率：

$$\epsilon(\theta) = 1 - e^{-\mu(E_\theta)t} \quad (6)$$

## 三、实验仪器设备

### 1. 软件平台

“核技术探测及应用综合实验”虚拟仿真实验教学软件和管理平台

### 2. 虚拟仿真软件中的数字化实验仪器设备

- (1) 放射源库： $^{137}\text{Cs}$ 、 $^{60}\text{Co}$ 、 $^{22}\text{Na}$ 、 $^{152}\text{Eu}$ 、 $^{54}\text{Mn}$
- (2) 吸收片库：Fe、Al、Cu、Pb、NaI
- (3) 探测器库：NaI(Tl) 闪烁体探测器、塑料闪烁体探测器等
- (4) 高压电源
- (5) 线性脉冲放大器
- (6) 单道分析器
- (7) 多道分析器
- (8) 康普顿散射旋转平台
- (9) 移动式  $\gamma$  谱仪

## 四、实验流程

1. 连接线路，熟悉仪器设备，调节仪器参数到工作的最佳状态；
2. 测量标准源  $^{137}\text{Cs}$  和  $^{60}\text{Co}$  的能谱，并对谱仪进行能量刻度；
3. 测量不同种类的放射源能谱并计算 NaI 对不同能量  $\gamma$  射线的吸收系数及探测效率；
4. 测量不同散射角下  $\gamma$  光子的能量，验证康普顿散射能量公式；
5. 根据测量结果获得不同散射角下  $\gamma$  光子的微分截面，验证康普顿散射微分截面公式。

## 五、实验数据处理

### 1. 标准源能谱与能量刻度

由于谱仪无法得到探测到的  $\gamma$  光子的绝对能量，因此需要利用已知的标准源的全能峰能量数据来对谱仪进行能量刻度。图 3 及图 4 即为两个标准源的未进行能量刻度的能谱图。图中可见全能峰，康普顿平台，背散射峰等结构。

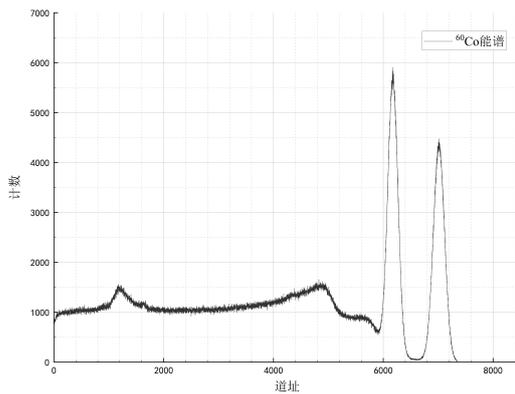


图 3:  $^{60}\text{Co}$  标准放射源的测量能谱

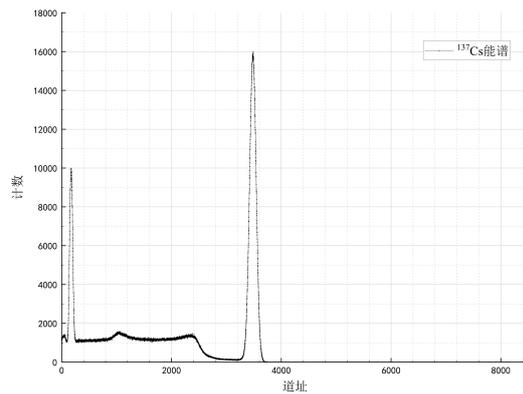


图 4:  $^{137}\text{Cs}$  标准放射源的测量能谱

已知两个放射源的三个全能峰的能量分别为 1173KeV，1333KeV，662KeV，通过软件的寻峰功能，得到全能峰对应的道址为 6173.0，7012.5，3481.0。对二者进行线性拟合，得到了道址与能量的对应关系，从而完成对谱仪的能量刻度，此时即可得到以能量表示的全能峰的峰位  $E$  以及半高全宽  $\Delta E$  数据。对于  $^{137}\text{Cs}$  的全能峰，其峰位为 659.93KeV，半高全宽为 26.30KeV。由此得到谱仪的能量分辨率为  $\Delta E/E = 3.985\%$ 。

### 2. NaI 对不同能量 $\gamma$ 射线的吸收系数

利用软件中提供的多种能量不同的辐射源以及共 5 块 NaI 吸收片，可以测得不同厚度的吸收片对不同能量的  $\gamma$  射线的吸收率。根据式 3，将同一能量不同厚度的吸收率数据与厚度进行指数拟合，即可求得不同能量下的吸收系数。再将吸收系数与能量进行指数拟合，得到吸收系数随能量变化的函数关系，并可利用式 6 计算出探测效率随能量的变化。

实验共采用五种  $\gamma$  射线，能量分别为：245KeV，344KeV，511KeV，662KeV，835KeV。实验采用的 NaI 吸收片厚度均为 1cm，分别测量片数从 0 至 5 的光子计数率。图 5 及图 6 为

五种射线的计数率  $R$  - 厚度  $t$  数据与拟合曲线  $R = R_0 + Ae^{-\mu t}$ , 图 7为吸收系数  $\mu$  - 能量  $E$  数据与拟合曲线  $\mu = aE^b + c$ , 表 1为具体的拟合结果。

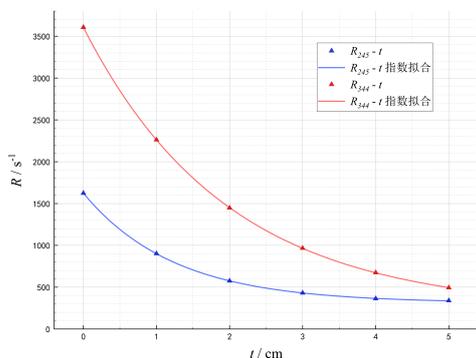


图 5: 245KeV, 344KeV 射线

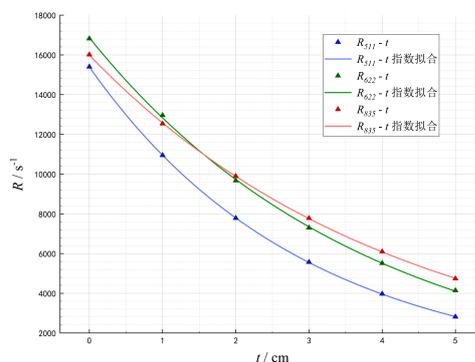


图 6: 511KeV, 662KeV, 835KeV 射线

	$\mu_{245}$	$\mu_{344}$	$\mu_{511}$	$\mu_{662}$	$\mu_{835}$	$a$	$b$	$c$
值	0.803	0.5086	0.342	0.263	0.237	-5.3	0.060	8.1
标准误差	0.004	0.0016	0.002	0.013	0.005	0.4	0.017	0.7
调整后 $R^2$	0.99998	1	0.99999	0.99961	0.99994	0.97568		

表 1: 计数率  $R$  与厚度  $t$  以及吸收系数  $\mu$  与能量  $E$  拟合结果

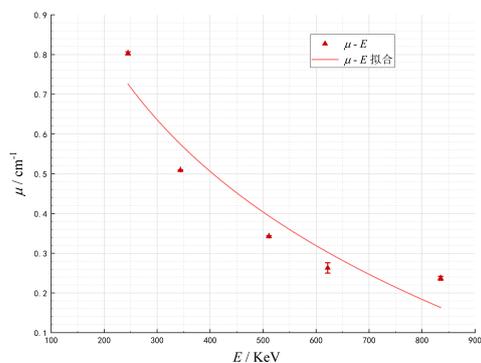


图 7: 吸收系数与能量的数据及拟合

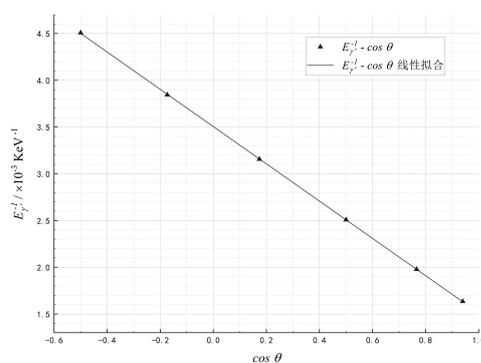


图 8: 能量倒数与散射角余弦的数据及拟合

可以观察到, 光强随厚度的关系的拟合结果均较好,  $\gamma$  射线在物质中的指数衰减得到了较为有效的证实。而吸收系数与能量的拟合并不是很精确。这可能是由于拟合的参数较多, 拟合函数较为复杂, 而数据点较少, 因此得到了没有那么理想的结果。

### 3. 康普顿散射能量公式的验证

使用软件中 NaI 探测器和旋转平台, 可测得在塑料闪烁体探测器上发生康普顿散射的光子的能量随散射角的变化。采用  $^{137}\text{Cs}$  放射源, 因此  $E_\gamma = 662\text{KeV}$ , 即散射角  $\theta = 0^\circ$  时,

全能峰能量为 662KeV。通过测量多个散射角上  $\gamma$  能谱的全能峰能量  $E_{\gamma'}$ ，并将数据与理论值对比，即可验证康普顿散射能量公式。由式 1 变形可得：

$$\frac{1}{E_{\gamma'}} = -\frac{\cos\theta}{E_{e0}} + \left(\frac{1}{E_{\gamma}} + \frac{1}{E_{e0}}\right) \quad (7)$$

式中  $E_{e0}$  为电子的静能。此式说明康普顿光子能量的倒数与散射角的余弦成线性关系。图 8 以及表 2 是二者的拟合结果。

	截距	斜率	Pearson's r	调整后 $R^2$
值 ( $\times 10^{-6}$ )	3504	-1993	-0.999992	0.99998
标准误差 ( $\times 10^{-6}$ )	2	4		

表 2: 光子能量倒数与散射角余弦的拟合数据

由于  $|r|$  以及  $R^2$  均非常接近于 1，因此可以说明在本实验的精度范围内，式 7 表现的线性关系成立。根据电子的静能数据，可以计算斜率的理论值为  $-1957 \times 10^{-6}$ ，拟合结果与其相差 1.8%，较为准确。根据已知入射光子能量数据，可以计算截距的理论值为  $3468 \times 10^{-6}$ ，拟合结果相差 1.0%，较为准确。因此，康普顿散射能量公式在本实验的精度范围内得到了较为有效的证实。

#### 4. 康普顿散射微分截面公式的验证

利用式 5 和 6 以及拟合得到的吸收系数随能量的变化关系  $\mu = aE^b + c$ ，将测得的全能峰能量以及计数率数据代入，即可求得不同散射角下相对微分散射截面的测量值  $N_a(\theta)/\epsilon(\theta)$ 。而理论值由康普顿散射微分截面公式 2 给出。将康普顿光子能量的理论公式 1 代入，即可得到微分散射截面与散射角的理论关系。由于实验中无法求得微分散射截面的绝对值，因此不妨将相对微分散射截面在散射角为 0 时的理论值设为 2，由此得到相对微分散射截面的理论式。

另外，由于使用了  $N_a(\theta)/\epsilon(\theta)$  代表相对微分散射截面的测量，因此在比较理论和实验数据前需要进行比例调整。理论给出当  $\theta = 20^\circ$  时，相对微分散射截面为 1.62487。因此应当将所有的测量值等比例变化，使得 20 度的测量值为 1.62487。图 9 即为理论曲线以及实验数据。

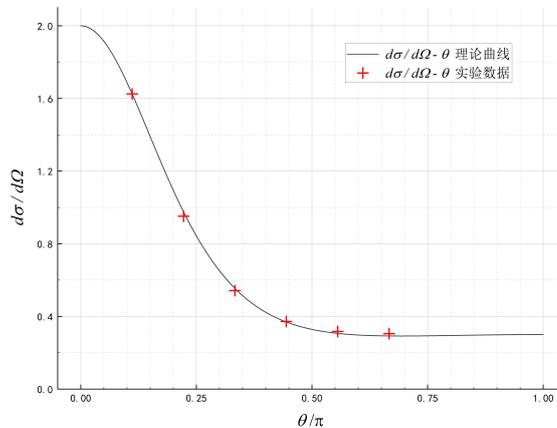


图 9: 相对微分散射截面随散射角变化的理论曲线与测量值

后五组数据相对于理论值的偏差分别为：-2.52%，-2.19%，0.77%，3.27%，4.20%。可见，在本实验精度范围内，实验得到的测量值较为符合微分截面公式。因此，康普顿散射微分截面公式得到了较为有效的验证。测量值的误差可能来源于吸收系数随能量的变化关系  $\mu = aE^b + c$ 。该关系的拟合结果并不是很好， $R^2 = 0.97568$ 。因此导致计算得的相对微分散射截面的测量值存在一定误差。

## 六、实验结论

- 利用谱仪观测了  $^{60}\text{Co}$  以及  $^{137}\text{Cs}$  标准放射源的能谱，观察到了全能峰，康普顿平台，背散射峰等典型结构。并以此为谱仪进行了刻度。测量得到谱仪的能量分辨率为 3.985%；
- 利用能量不同的辐射源及 NaI 吸收片，测量并拟合得到了 NaI 对于不同能量  $\gamma$  射线的吸收系数，并验证了  $\gamma$  射线强度在物质中指数衰减的规律。拟合得到的吸收系数分别为（单位均为  $\text{cm}^{-1}$ ）：

$$\begin{aligned}\mu_{245} &= 0.803 \pm 0.004 & \mu_{344} &= 0.5086 \pm 0.0016 \\ \mu_{511} &= 0.342 \pm 0.002 & \mu_{662} &= 0.263 \pm 0.013 & \mu_{835} &= 0.237 \pm 0.005\end{aligned}$$

- 利用拟合得到的不同能量下的吸收系数  $\mu_E$ ，拟合得到了吸收系数随能量的关系： $\mu_E = aE^b + c$ ，其中  $a = -5.3 \pm 0.4$ ， $b = 0.060 \pm 0.017$ ， $c = 8.1 \pm 0.7$ ；
- 利用 NaI 探测器，旋转平台以及塑料闪烁体探测器，测量得到不同散射角下散射  $\gamma$  光子的能量。通过拟合验证了能量倒数与散射角余弦的线性关系，即康普顿散射能量公式。拟合得到的斜率与截距分别为  $(-1993 \pm 4) \times 10^{-6}$   $(3504 \pm 2) \times 10^{-6}$ ，与理论值分别相差 1.8% 与 1.0%；
- 利用测量得到的不同散射角下散射  $\gamma$  光子的能量以及计数率，计算得到不同角度的相对微分散射截面。同时利用理论求得相对微分散射截面的表达式，通过比较理论值与实验值，得到二者的偏差依次为-2.52%，-2.19%，0.77%，3.27%，4.20%，从而验证了康普顿微分截面公式。

# 拉曼光谱虚拟仿真实验

吴渝骞 18300180079

## 一、实验目的

- 了解拉曼散射的基本原理与基本实验技术；
- 掌握激光拉曼光谱仪以及处理实验数据软件的使用；
- 测量四氯化碳等分子的振动拉曼光谱图，认识振动拉曼光谱的主要特点及其与分子结构的联系。

## 二、实验原理

1928年，C.V.Raman 与 K.S.Krishnan 发现了拉曼散射效应。同年，Grigory Landsberg 与 Leonid Mandelstam 也发现了石英晶体的“联合散射”，其实质就是晶体的拉曼散射。将强单色光射入物质中，所产生的散射光除了含有频率未变的光，即瑞利散射，还含有相当弱的有频率增减的光，此即拉曼散射。拉曼散射光谱成对出现与瑞利散射两侧，二者与入射光子的频率差的绝对值相等。拉曼散射中包含与散射体结构和状态有关的信息。因此可以通过分析拉曼散射谱来推断散射体的结构与成分。

### 1. 光子与样品分子的相互作用

光子入射到样品上时，根据样品分子的能级不同，可能出现三种情况：

**瑞利散射** 入射光子被样品分子完全吸收，使其被激发或电离。之后样品分子又重新回到原能级上，并发射出光子。由于样品分子前后没有能量变化，出入射光子的能量也不会发生变化。即：

$$h\nu_R = h\nu_0 \Rightarrow \nu_R = \nu_0 \quad (8)$$

换言之，光子与样品分子发生的碰撞是弹性的，其频率不变，仅有光子的方向被改变。这一散射过程称为瑞利散射。

**斯托克斯散射** 入射光子被样品分子完全吸收，使其被激发或电离。之后样品分子并未重新回到原能级，而是落到了某一激发态上。激发态的能量比初始能级高  $h\nu_L$ 。仅从初末状态来看，该过程即为光子将分子激发到某一激发态上，因此出射光子的频率及能量要比入射光子低。即：

$$h\nu_S = h\nu_0 - h\nu_L \Rightarrow \nu_S = \nu_0 - \nu_L \quad (9)$$

换言之，光子与样品分子发生的碰撞是非弹性的，光子的部分能量转移到了分子能级上。这一散射过程称为斯托克斯散射。

**反斯托克斯散射** 入射光子被样品分子完全吸收，使其被激发或电离。若样品分子散射前并不处在基态，则散射后的分子有可能落到能量更低的能级。假设末态的能量比初始能级低  $h\nu_L$ ，则出射光子的能量要比入射光子高  $h\nu_L$ 。即：

$$h\nu_{AS} = h\nu_0 + h\nu_L \Rightarrow \nu_{AS} = \nu_0 + \nu_L \quad (10)$$

换言之，光子与样品分子发生的碰撞是非弹性的，分子的部分能量转移到了光子上。这一散射过程称为反斯托克斯散射。

斯托克斯散射以及反斯托克斯散射所产生的光谱线被统称为拉曼散射。

## 2. 斯托克斯散射与反斯托克斯散射

从前一部分的讨论可以看到（反）斯托克斯散射的频率与入射光频率之差是由样品分子的能级能量差所决定的。任一给定的分子能级差，都对对应着一对（反）斯托克斯散射谱线，两条谱线的能量差就等于两倍分子能级差，任一谱线的频率与入射光频率之差的绝对值就等于一倍分子能级差。另外，一般情况下位于能量更高的激发态上的分子数量更少，从而导致斯托克斯散射的发生概率要高于反斯托克斯散射。

可以看出，（反）斯托克斯散射谱线，即拉曼线在以波数为变量的光谱图上有以下特征：

1. 对同一样品，同一对拉曼线的波数差与入射光波长无关；
2. 以入射光波数为中心点，斯托克斯线和反斯托克斯线对称地分裂在入射光的两边；
3. 斯托克斯的强度一般都大于反斯托克斯线的强度。

## 3. 拉曼光谱分析

从上述分析中可以看出，拉曼光谱的形成除了与分子能级有关外，不涉及其他任何属性。而分子的能级与分子的结构以及振动相关。因此可以推断出样品的拉曼光谱有以下特性：

1. 每一种分子的拉曼光谱都是其独有的；
2. 同一空间结构但原子成分不同的分子，其拉曼光谱的基本面貌是相似的；
3. 外界条件的变化会对分子结构和运动产生不同程度的影响，从而影响分子的拉曼光谱。

对应于以上特性，拉曼光谱分析法存在以下的应用：

1. 利用拉曼光谱的独特性可以鉴别和分析样品的化学成分；
2. 对比已知结构的分子的拉曼光谱，可以推断出光谱相似但结构未知的分子的结构；
3. 利用外界条件对拉曼光谱的影响可以研究样品浓度，外界温度及压力等对分子结构的影响。

### 三、实验仪器设备

本实验的虚拟仿真软件中包括以下的数字化实验仪器设备：

- (1) 激光器
- (2) 单色仪
- (3) 外光路系统及样品装置
- (4) 聚光部件与分光系统
- (5) 探测系统
- (6) 处理扫描结果的计算机与显示器

### 四、实验流程

1. 连接线路，熟悉仪器设备，调节仪器参数到工作的最佳状态；
2. 装入实验样品，调整聚光部件及入射狭缝；
3. 根据样品在计算机中调整测量参数，测量样品的散射光谱；
4. 对散射光谱进行谱峰分析，求出样品拉曼谱线的位移；
5. 分别测量并分析四氯化碳、苯、环己烷以及混合溶液的散射光谱以及拉曼谱线的位移。

### 五、实验数据处理

#### 1. 散射光谱分析

图 10-13 分别为四氯化碳、苯、环己烷以及苯，环己烷物质的量 1: 1 混合溶液的散射光谱图以及相关测量参数。

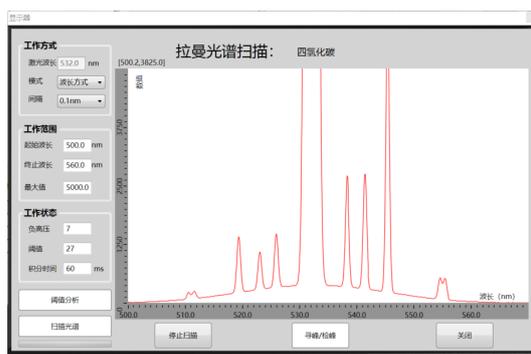


图 10: 四氯化碳的散射光谱

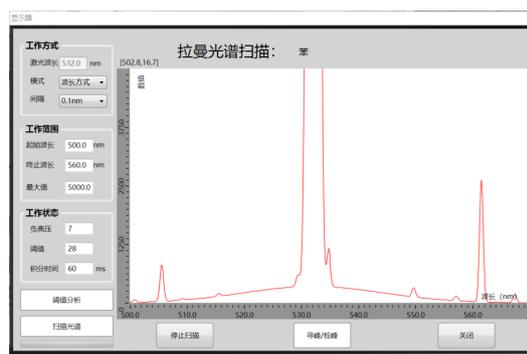


图 11: 苯的散射光谱

可以看出，四种样品的谱线都有相似的特性。谱线中央最高的峰为瑞利散射，其波长等于入射光的波长，即 532.0nm。瑞利散射两侧存在一系列的较矮的峰，此即为拉曼散射。可以观察到拉曼谱线的波长相对于瑞利散射波长是调和平均对称的，并且右侧的拉曼谱线强度均要比左侧波长相对称的谱线高。这正好与斯托克斯散射与反斯托克斯散射的特性相对应。

对比四氯化碳，苯以及环己烷的散射光谱，可以观察到前者与后两者的光谱相差较大，而后两者的光谱间差距较小。这反映出三者的结构差异。苯和环己烷都有相似的环结构，因

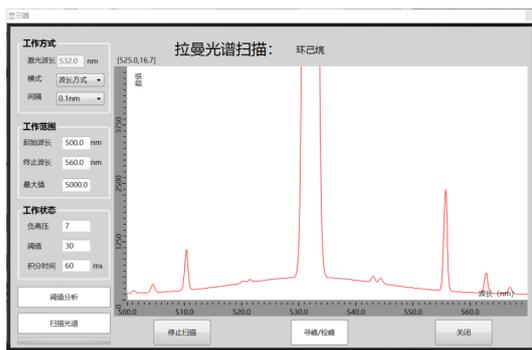


图 12: 环己烷的散射光谱

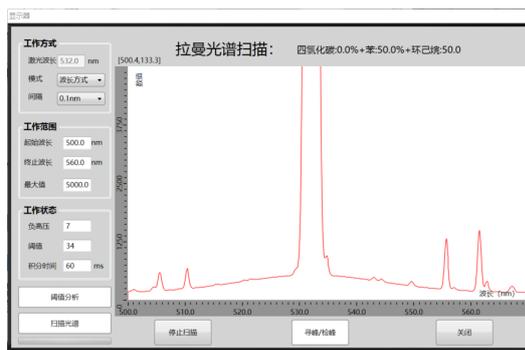


图 13: 混合溶液的散射光谱

此其散射光谱相似。而四氯化碳是四面体结构，与后两者差距很大，因此散射光谱差异也很大。因此可以利用拉曼光谱来推断分子的空间结构。

## 2. 光谱峰的分析

对于混合溶液，可以从光谱中大致看出其光谱是其成分苯与环己烷的散射光谱相加而得的。接下来可以通过分析光谱峰的方式更精确地表面混合溶液的散射光谱与苯和环己烷的光谱的关系。

表 3 中列举了四个散射光谱的峰位波长、峰值，以及相对应的两个峰的波长的调和平均。可以预见，波长的调和平均应该等于入射波长 532nm。

$\lambda_1$	CCl <sub>4</sub>	苯	环己烷	混合	$\lambda_2$	CCl <sub>4</sub>	苯	环己烷	混合	调和平均波长
500.8		69			567.3		187			531.98
501.0				227	567.1				299	532.00
501.2			87		566.9			165		532.03
504.5			219	284	562.7			469	402	532.01
505.5		817		593	561.4		2635		1494	531.99
509.2		95			557.0		148		266	532.03
510.3			957	679	555.6			2246	1314	531.99
510.6	233				555.3	527				532.01
511.5	248				554.5	540				532.13
515.5		206			549.6		330		404	532.00
519.3	1420				545.3	6725				531.98
520.3			287	427	544.3			346	452	532.03
521.5			318	454	543.0			395	488	532.03
523.0	1092				541.3	2761				531.99
525.9	1481				538.2	2709				531.98
529.4		605			534.7		1170		954	532.04

表 3: 四张散射光谱的峰位波长、峰值及一组峰的波长的调和平均波长

从表中可以观察到，同组峰的波长调和平均在一定精度范围内均等于入射波长  $\lambda_0=532\text{nm}$ ，该现象即表明拉曼谱线的频率相对于入射光频率左右相对称。

可以观察到混合溶液的峰基本上均与苯和环己烷的峰对应。然而在  $\lambda=501.0\text{nm}$  处，混合溶液的峰没有对应，同时  $\lambda=500.8\text{nm}$  的苯峰和  $\lambda=501.2\text{nm}$  的环己烷峰没有混合溶液的对应。这可能是因为实验中光谱的分辨能力有限，两个非常接近的峰在混合溶液中叠加成为了一个峰。类似的原因导致了  $\lambda=567.1\text{nm}$  的峰没有对应。 $\lambda=529.4\text{nm}$  没有对应的原因可能是其与瑞利散射谱线过于接近，而瑞利散射峰值又十分高，因此其峰被淹没了。同理

$\lambda=515.5\text{nm}$  的峰也被连续的光谱所淹没。

因此可以表明，混合溶液的拉曼谱线确实是组分的谱线叠加。因此，可以利用拉曼光谱来分辨物质中的分子组成成分。另外，从表中可以明显看出，右侧的峰值要显著高于左侧对应的峰值，这表明斯托克斯散射强度是要高于反斯托克斯散射强度的。

## 六、实验结论

本实验通过对四氯化碳、苯、环己烷以及混合溶液的散射光谱的分析，验证了拉曼散射光谱的有关特性。包括拉曼光谱波数的对称性，强度差异，与分子结构的关系等等。

测得了四氯化碳的拉曼谱线波数差（单位为  $\text{cm}^{-1}$ ）分别为：217, 323, 458, 763, 788；苯的波数差分别为：95, 602, 844, 984, 1170；环己烷的波数差分别为：381, 425, 798, 1026, 1157。