

# 红外光谱的测绘和定性分析

复旦大学

化学教学实验中心

任楠

# 实验目的

- 掌握固体试样红外光谱测定的薄膜法、压片法等制样技术
- 了解FT-IR光谱仪的工作原理和基本结构
- 掌握红外吸收光谱的测绘方法
- 掌握红外谱图的基本计算机处理与红外光谱的定性分析

# 实验原理

- 红外光谱的分析原理

物质在吸收红外辐射后，其分子发生转动能级间和振动能级间的跃迁，同时，红外辐射的能量发生消耗，通过仪器记录下不同波数下物质透射的红外辐射强度，就获得该物质的红外光谱图

## 问题1.

红外光谱主要反应分子中的哪一种信息？

# 实验原理

- 红外光谱分析的优点：

特征性高，分析时间短，需要试样量少，制样技术简单，可对大多数有机化合物进行定性分析

**问题2.**

红外光谱分析中最需要注意的是什么影响因素？

# 实验原理

- 红外固体试样的制备方法：
  1. 糊状法：将试样研磨成粉，分散于液体介质中
  2. 压片法：将研细的粉末分散于固体介质如KBr中（最主要的制备方法）
  3. 薄膜法：将固体试样制成薄膜后再用来测定（大多数高聚物采用此方法）

## 问题3.

压片法中，固体介质的选择有何要求？

# 实验原理

- 红外光谱常用的分析方法
  1. 用标准物质对照
  2. 查阅红外光谱图或采用数据库检索

# 实验原理

- 红外差谱分析法的特点及要求
  1. 大多使用在两种试样混合的体系
  2. 两种试样的相对含量具有可比性
  3. 严格保持已知物与混合物的红外光谱测定条件的一致性（浓度，压片厚度...等）

# 实验内容

- 用薄膜法测定聚苯乙烯的红外光谱
- 用压片法制备间硝基苯甲酸样品，测绘其红外谱图
- 用差谱分析法确定工业间硝基苯甲酸中的杂质

# 实验内容

- 实验的关键要素：
  1. 整个测试体系保持干燥
  2. 薄膜法制样需保持膜表面平整性及控制一定的厚度
  3. 压片法制样需确保样品研磨均匀并控制其厚度

# 思考题

- 为何要求将试样研磨至2微米左右？
- 差谱分析时，为何将图谱坐标转换成吸光度坐标？
- 差谱分析时，负峰的由来？
- 傅立叶红外光谱仪（FT-IR）与扫描型红外分光光度计在原理和结构上的不同及其优点是什么？
- 红外光谱能否进行定量分析？困难在哪？