

现代仪器分析

马登龙 副教授

第六章 红外吸收光谱法

Infrared Absorption Spectroscopy, IR

6.1 概述

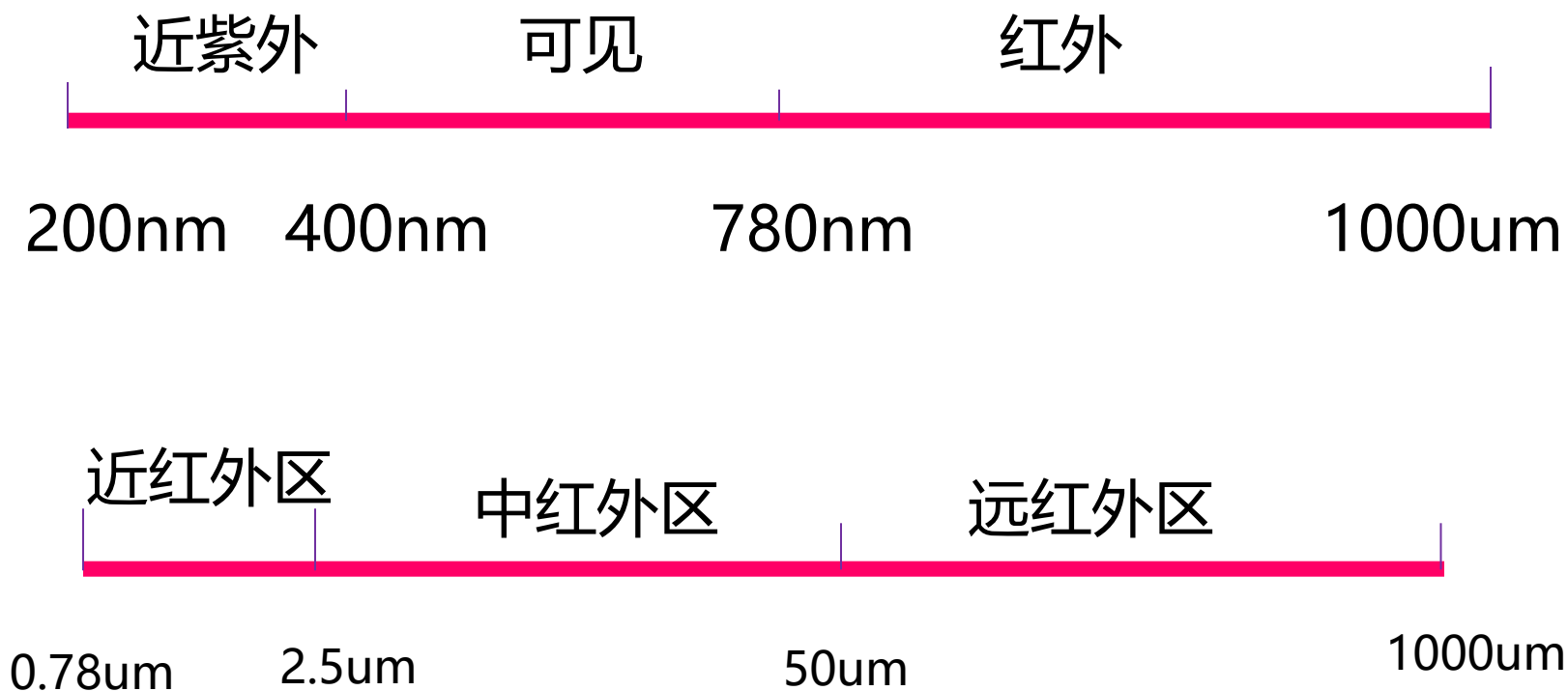


William Herschel
1738 -1822

- 1800年英国科学家赫谢尔 (Friedrich Wilhelm Herschel) 发现红外线;
- 1892,朱利叶斯 (Julius) 用岩盐棱镜及测热辐射计获得了20多种有机化合物红外吸收光谱

- 1936年世界第一台棱镜分光单光束红外光谱仪制成
- 1946年制成双光束红外光谱仪
- 1960年代制成以光栅为色散元件的第二代红外光谱仪
- 1970年代制成傅立叶变换红外光谱仪，使扫描速度大大提高
- 1970年代末，出现了激光红外光谱仪，共聚焦显微红外光谱仪等

红外光谱的范围



不同参数换算：

波段	波长(λ , μm)	波数(ν , cm^{-1})	频率(ν , Hz)
近红外	0.78~2.5	12,800~4,000	3.8×10^{14} ~ 1.2×10^{14}
中红外	2.5~50	4,000~200	1.2×10^{14} ~ 6.0×10^{12}
远红外	50~1000	200~10	6.0×10^{12} ~ 3.0×10^{11}
常用区域	2.5~25	4,000~400	1.2×10^{14} ~ 1.2×10^{13}

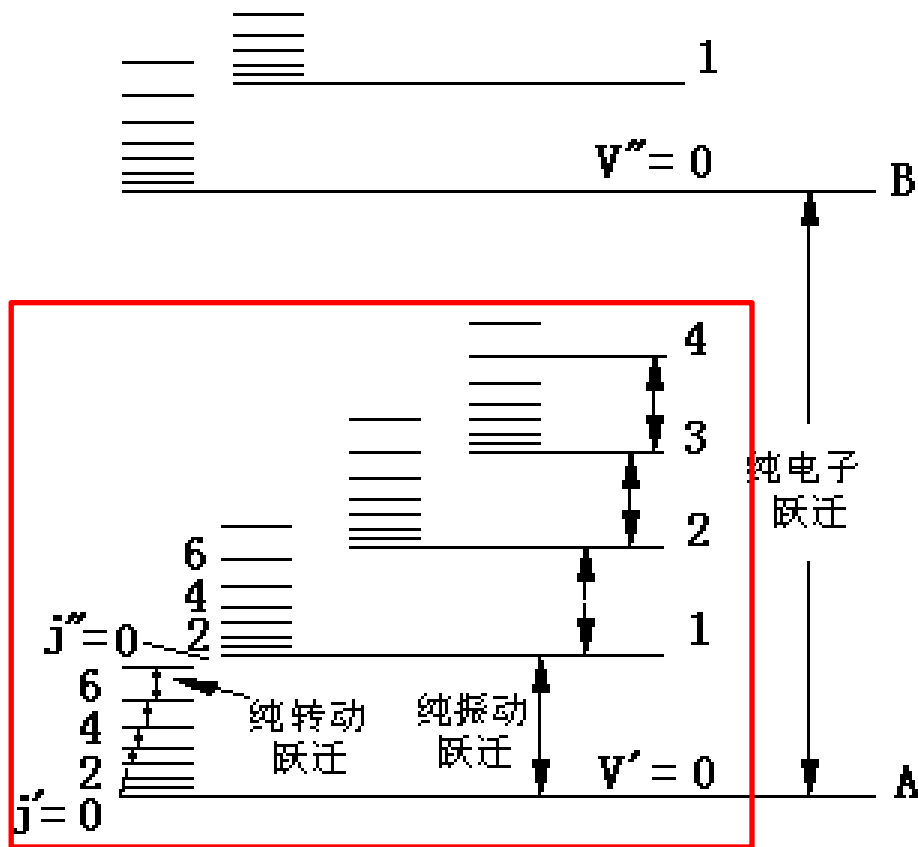
6.2 红外吸收光谱法的基本原理

6.2.1 红外吸收光谱的产生

➤ **红外吸收光谱产生：**分子的振动能量比转动能量大，当分子发生振动能级跃迁时，不可避免地伴随着分子转动能级的跃迁。

➤ **分子的振动 - 转动光谱称为红外吸收光谱**，是具有一定频率范围的带状光谱，其吸收峰是有一定宽度的吸收带。

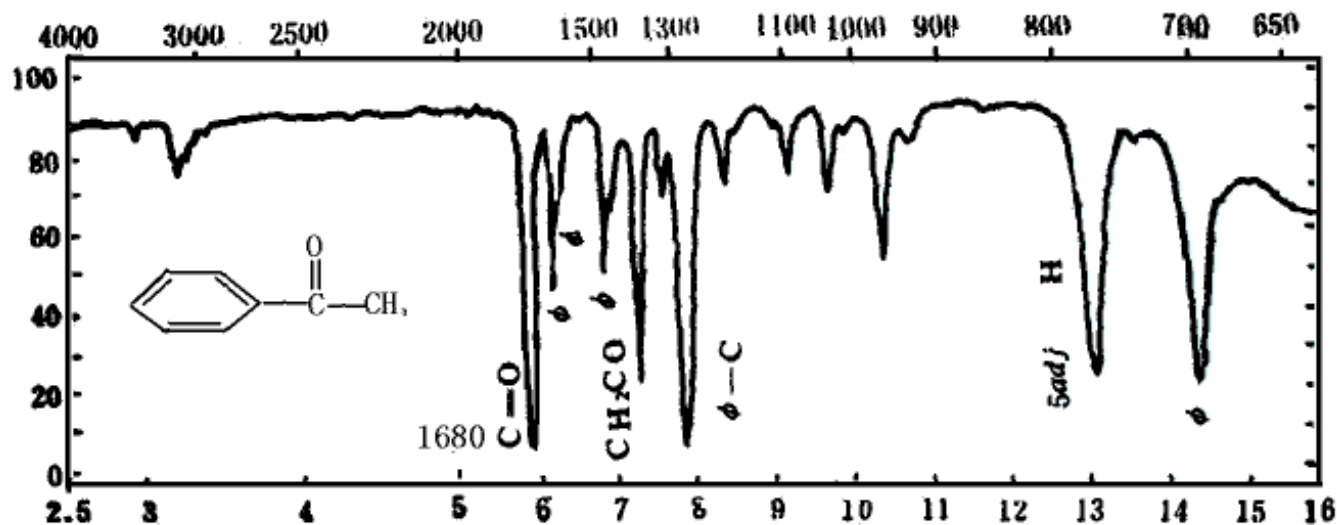
➤ **紫外-可见吸收光谱？**



双原子分子的三种能级跃迁示意图

波数

透光率



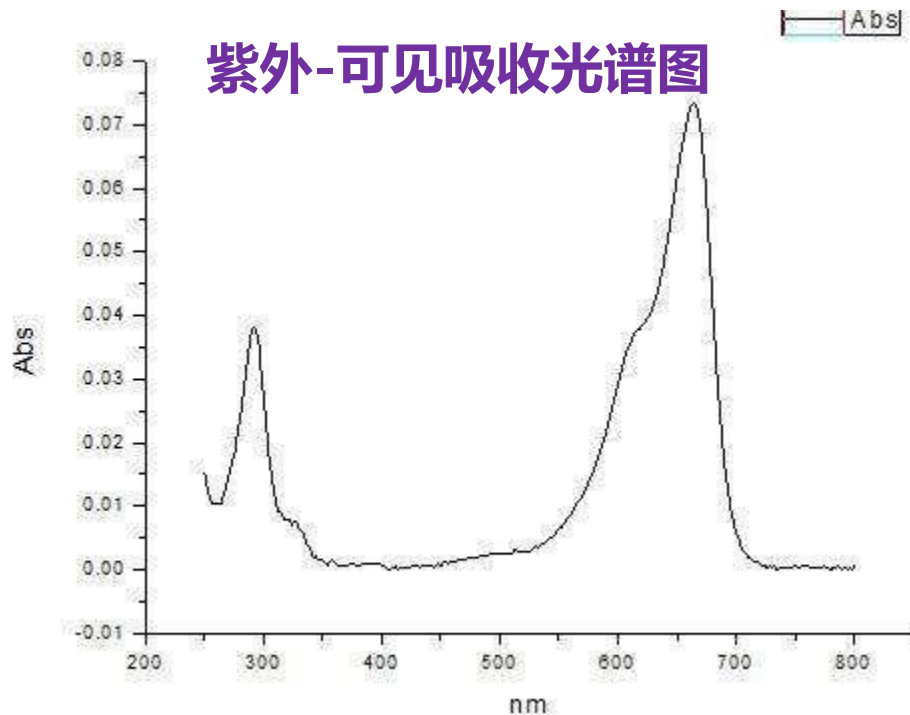
红外吸收光谱图

波长

- 多个窄吸收峰; (基频, 倍频)
- 波数-透光率;
- 频率范围低;

应用: 有机化合物的结构解析。
定性: 基团的特征吸收频率;
定量: 特征峰的强度;

紫外-可见吸收光谱图



IR与UV-Vis的比较

	IR	UV-Vis
光谱产生	分子振转能级的跃迁	电子能级的跃迁
研究对象	在振动中伴随着偶极距变化的化合物	不饱和化合物尤其是具有共轭体系的有机化合物
分析功能	既定性又定量，结构分析，非破坏性分析	既定性又定量，有时是试样破坏性分析

红外光谱的缺点：

- 不太适合水溶液和含水物质分析；
- 复杂化合物需要结合其它波谱分析数据才能做出判断；

产生红外吸收的条件

- (1) 红外辐射能量刚好**等于**振动跃迁所需的能量；
- (2) **偶极矩发生变化的振动**形式才能吸收红外辐射，即辐射与物质间有相互偶合作用。

对称
双原子分子

没有偶极矩，辐射不能引起共振，
无红外活性。

N_2

O_2

对称
多原子分子

没有偶极矩，但某些振动形式可以
产生偶极矩变化，具有红外活性。

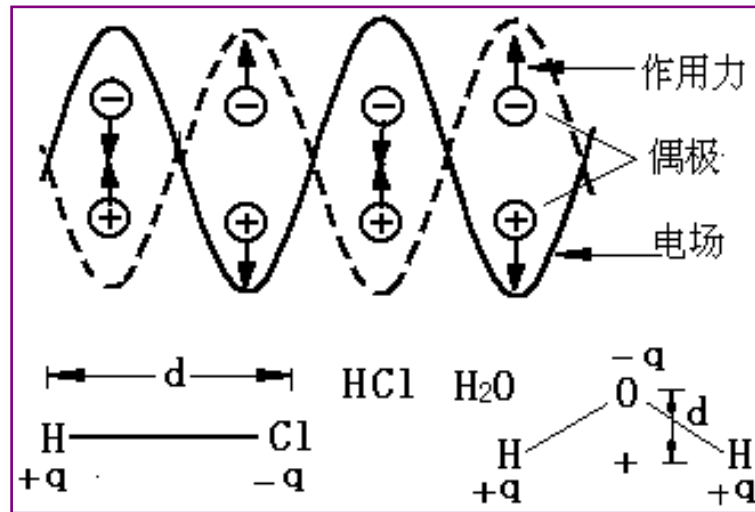
CO_2

非对称
分子

有偶极矩，具有红外活性。

H_2O

HCl

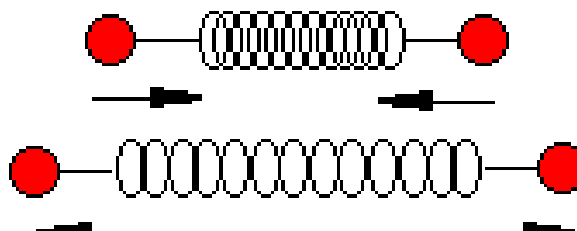


偶极子在交变电场中的作用示意图

- 红外跃迁是**偶极矩诱导**的，即能量转移的机制是通过**振动过程**所导致的**偶极矩的变化**和与其**频率匹配的交变的电磁场**（红外线）相互作用才能发生；
- 具有**红外活性的分子**才能吸收红外辐射。

6.2.2 双原子分子振动

- 双原子分子中原子以平衡点为中心，以非常小的振幅作周期性伸缩振动。最简单化学键的振动类似于连接两个小球的弹簧。



虎克定律

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = c \cdot \sigma$$

$$\Delta E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = 1307 \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

K 化学键力常数，与键能和键长有关

μ 双原子的折合质量

将两个原子由平衡位置伸长至单位长度时的恢复力

- ✓ 发生振动能级跃迁需要能量的大小取决于键**两端原子的折合质量和键的力常数**，即取决于分子的结构特征。

表 某些键的伸缩力常数 K (N/cm)

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = 1307 \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

键	分子	k	键	分子	k
H—F	HF	9.7	H—C	CH ₂ —CH ₂	5.1
H—Cl	HCl	4.8	H—C	CH≡CH	5.9
H—Br	HBr	4.1	C—Cl	CH ₃ Cl	3.4
H—I	HI	3.2	C—C		4.5 ~ 5.6
H—O	H ₂ O	7.8	C=C		9.5 ~ 9.9
H—S	H ₂ S	4.3	C≡C		15 ~ 17
H—N	NH ₃	6.5	C—O		12 ~ 13
H—C	CH ₃ X	4.7 ~ 5.0	C=O		16 ~ 18

- 键类型 $\text{—C}\equiv\text{C—} > \text{—C}=\text{C—} > \text{—C—C—}$
- 力常数 15 ~ 17 9.5 ~ 9.9 4.5 ~ 5.6
- 峰位 4.5 μm 6.0 μm 7.0 μm
 (2062 cm⁻¹) (1683 cm⁻¹) (1190 cm⁻¹)

✓ 化学键键强越强（即键的力常数 K 越大）原子折合质量越小，化学键的振动频率越大，吸收峰将出现在高波数区。

- 对于简单的双原子分子的振动我们可以通过这个公式计算出它的波数，就大致知道它所吸收的红外光的波数。
- 而实际上，原子间距离是随着振动而改变，化学键力常数也会改变，分子振动并不是严格的简谐振动，故计算出的**波数是大于实测值的**。

6.2.3、多原子分子的基本振动形式

1. 两类基本振动形式

✓ 伸缩振动

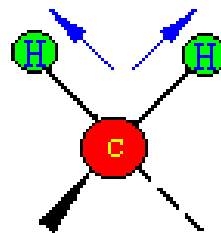
亚甲基:

变形振动产生的吸收峰的波数小于伸缩振动产生的吸收峰的波数。
-低波数区

✓ 变形振动

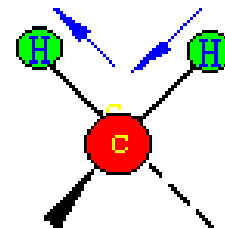
亚甲基

不对称伸缩运动产生的吸收峰波数高于对称伸缩运动产生的吸收峰波数-高波数区



对称伸缩振动

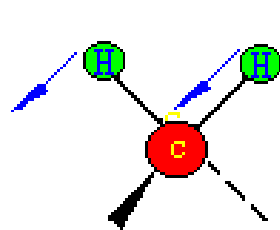
$\sigma_s: 2853 \text{ cm}^{-1}$



反对称伸缩振动

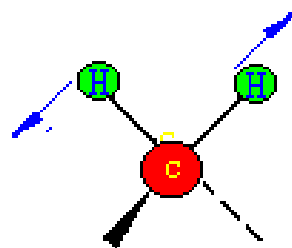
$\sigma_{as}: 2926 \text{ cm}^{-1}$

(强吸收 S)



摇摆 (面外)

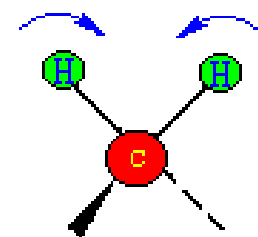
$\nu: 1306-1303 \text{ cm}^{-1}$



扭曲

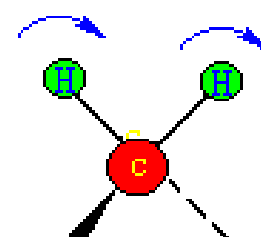
$\tau: 1250 \text{ cm}^{-1}$

(弱吸收 W)



剪式 (面内)

$\delta: 1468 \text{ cm}^{-1}$



摇摆

$\rho: 720 \text{ cm}^{-1}$

(中等吸收 II)

➤ 多原子分子振动形式的多少用**振动自由度**来表示:

✓ **非线性分子: $3n-6$** , 如 H_2O 有3个自由度;

✓ **线性分子: $3n-5$** , 如 CO_2 有4个自由度

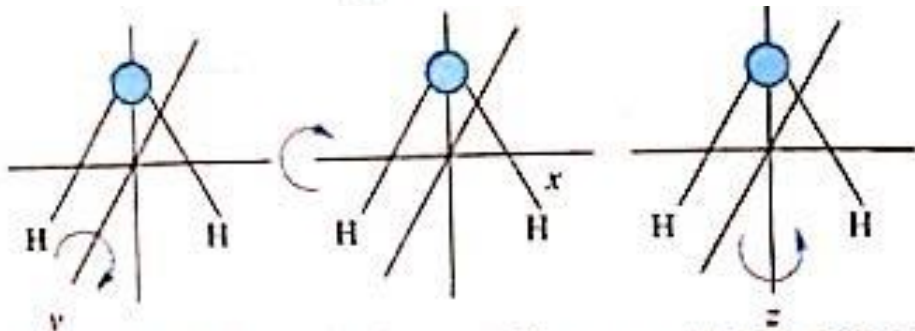


图 10-5 非直线形分子(H_2O)绕 x, y, z 轴转动示意图

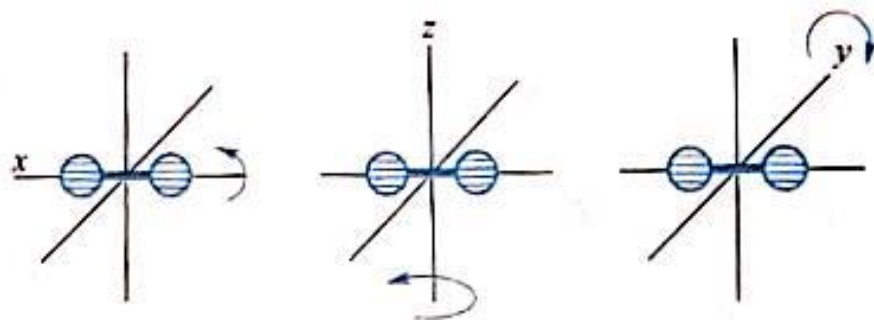


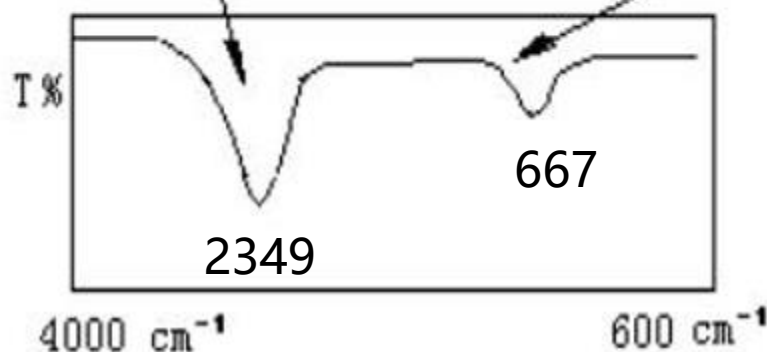
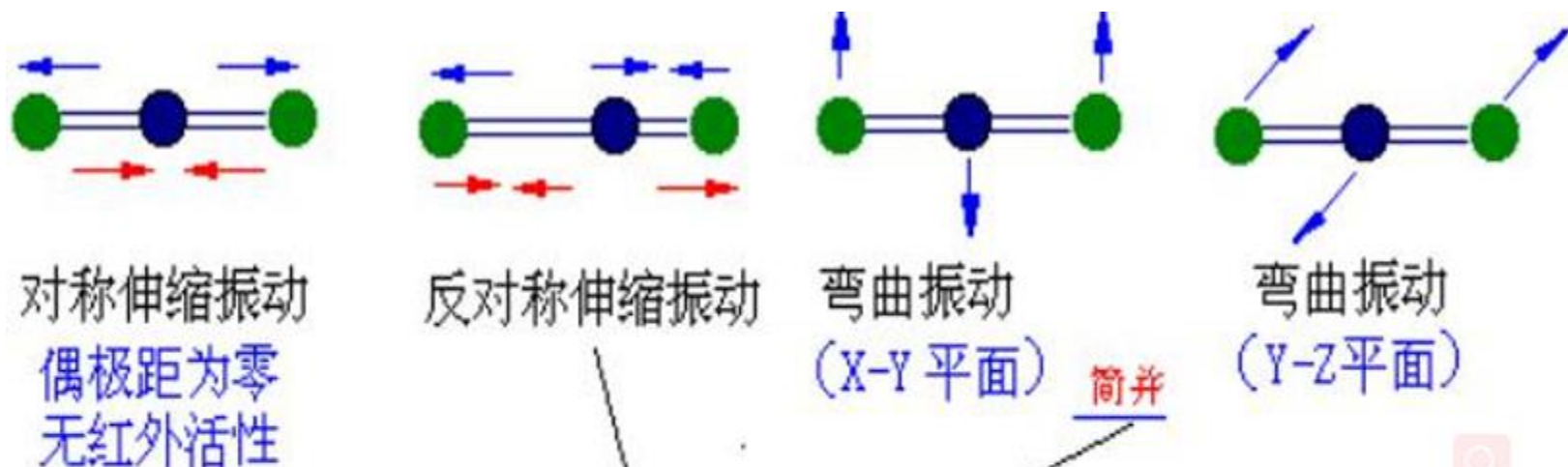
图 10-6 直线形分子绕 x, y, z 轴转动示意图

✓ x, y, z 3个方向 n 个原子, 总共 $3n$ 个方向, **减去平动和转动自由度即为振动自由度**;

✓ 沿3个轴的平动, 3个自由度;

✓ 绕3个轴的转动 (原子空间位置变化): 3 (非线性) 或2 (线性) 个自由度

例：CO₂分子 $N=3n-5=3\times 3-5=4$



一般观察到的振动数要少于简振振动数，因为：

- ✓ 偶极矩为0，不产生红外吸收；
- ✓ 能量相同，简并；
- ✓ 分辨率，灵敏度

6.3 红外吸收光谱与分子结构的关系

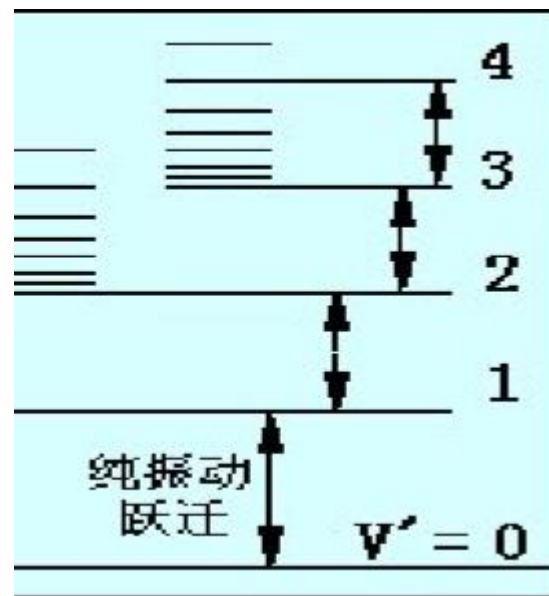
一、常用术语

1.特征峰：通常把能代表某种基团存在并具有较高强度的吸收峰称为特征吸收峰，简称特征峰。

2.相关峰：一个基团除了特征峰外，还有许多其它形式的吸收峰，它与特征峰可相互依存，又可相互佐证，这样的吸收峰称为相关峰。

3、**基频峰**：由基态振动能级 ($\nu=0$) 跃迁至第一振动激发态 ($\nu=1$) 时，所产生的吸收峰。这种跃迁发生的概率最大，吸收峰的强度最强，一般特征吸收峰都是基频吸收峰。

4、**倍频峰**：指由基态振动能级跃迁到第二、第三或更高的激发态时所产生的吸收峰。倍频吸收峰的波数往往不是基频吸收峰波数的整倍数，而是略小些。



以盐酸为例，说明基频吸收峰与倍频吸收峰的关系如下

	波数 (cm ⁻¹)	能量
基频吸收峰	2885.9	最强
二倍频吸收峰	5668.0	较弱
三倍频吸收峰	8346.9	很弱
四倍频吸收峰	10923.1	极弱
五倍频吸收峰	13396.5	极弱

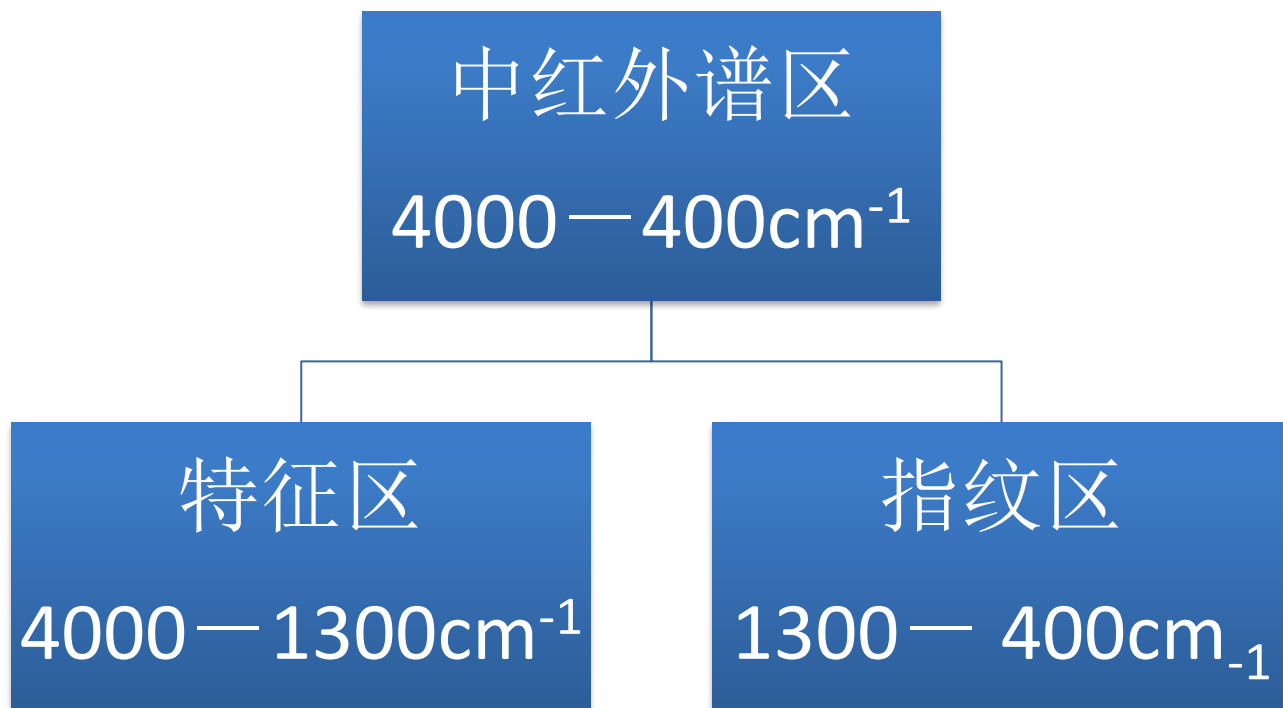
从二倍到五倍，产生的波数并不是基频的整数倍，而是略小些。产生跃迁的概率逐渐减小，所以吸收峰的强度也逐渐减弱，有时甚至不能测出

二、基团特征频率与红外谱区的关系

- ✓ **不同键或基团的不同分子，其简振数目和简振频率不同。**
- ✓ **相同的化学键或基团，在不同构型的分子中，其振动频率改变不大。**
- ✓ **物质的红外光谱是其分子结构的反映，谱图中的吸收峰与分子中各基团的振动形式相对应；**

二、基团特征频率与红外谱区的关系

- **红外光谱（中红外谱区）**的工作范 $4000\sim 400\text{cm}^{-1}$ ，常见的有机物官能团在这个区域会产生吸收带。



- **特征峰**：能代表基团存在、并有较高强度吸收的吸收谱带，称为**基团频率**，对应位置

1、特征区（官能团区）：4000 ~ 1300 cm^{-1}

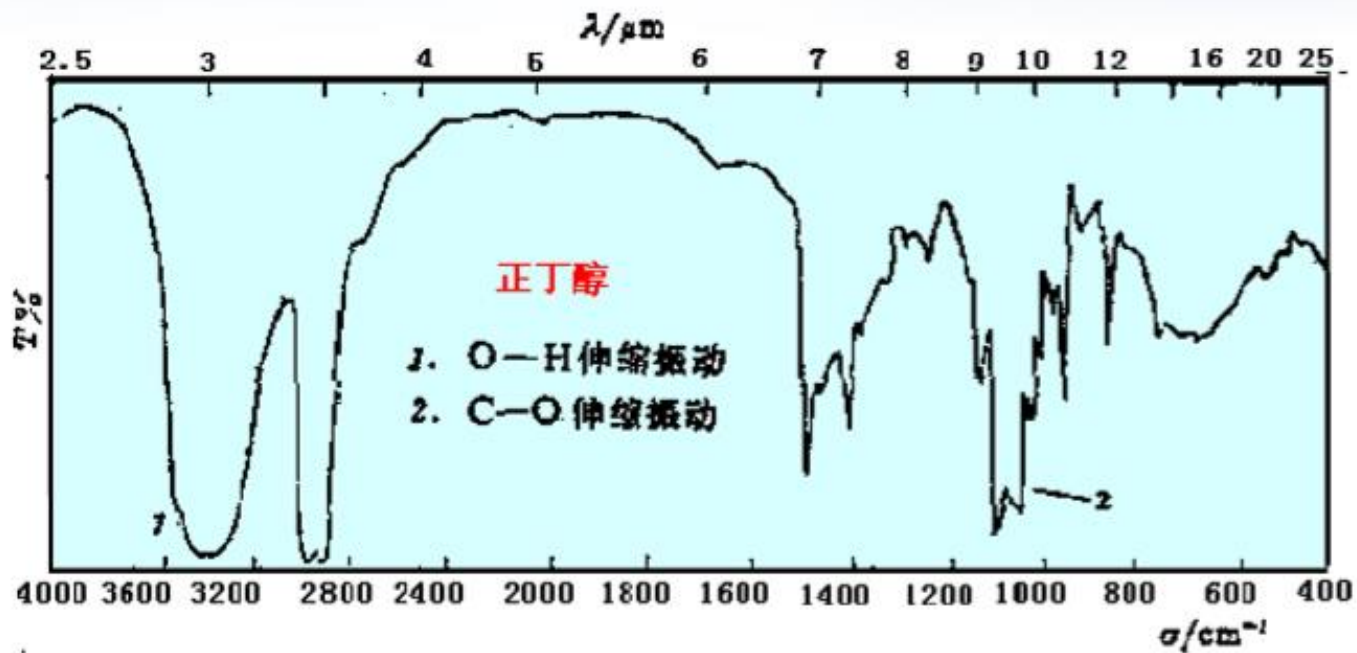
- ✓ 伸缩振动产生；
- ✓ 有机化合物**主要官能团**的特征吸收峰多在此区域。
- ✓ 该区吸收峰较稀疏，容易辨认。
- ✓ 通过该区域特征峰的查找，可以判断是否有某官能团存在。
- ✓ 它可以作为官能团定性的主要依据。
- ✓ 含氢官能团、含双键或三键的官能团, O-H, N-H, C=O

1、特征区 (官能团区) : 4000 ~ 1300cm⁻¹

- ✓ 4000 ~ 2500 cm⁻¹ X—H伸缩振动区 (X=O, N, C, S)
- ✓ 2500 ~ 2000 cm⁻¹ 三键, 累积双键伸缩振动区
- ✓ 2000 ~ 1500 cm⁻¹ 双键伸缩振动区
- ✓ 1500 ~ 1300 cm⁻¹ C—H变形振动区(CH₃,CH₂,...)

① 4000 ~ 2500 cm^{-1} X—H伸缩振动区 (X=O, N, C, S)

-O-H, 3650~3200 cm^{-1}



②2500 ~ 2000 cm^{-1} 三键, 累积双键伸缩振动区

(1) $-\text{C}\equiv\text{C}-$

$\text{RC}\equiv\text{CH}$ (2100 ~ 2140 cm^{-1})

$\text{RC}\equiv\text{CR}'$ (2190 ~ 2260 cm^{-1})

$\text{R}=\text{R}'$ 时, 无红外活性

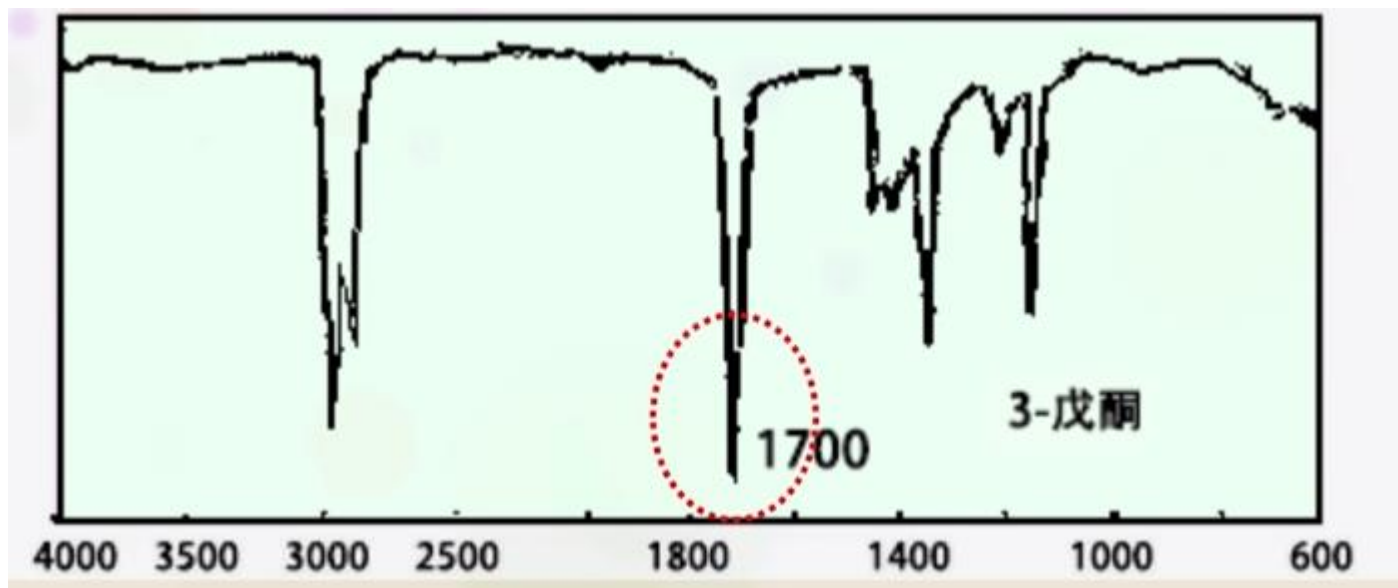
(2) $-\text{C}\equiv\text{N}$

非共轭 2240~2260 cm^{-1}

共轭 2220~2230 cm^{-1}

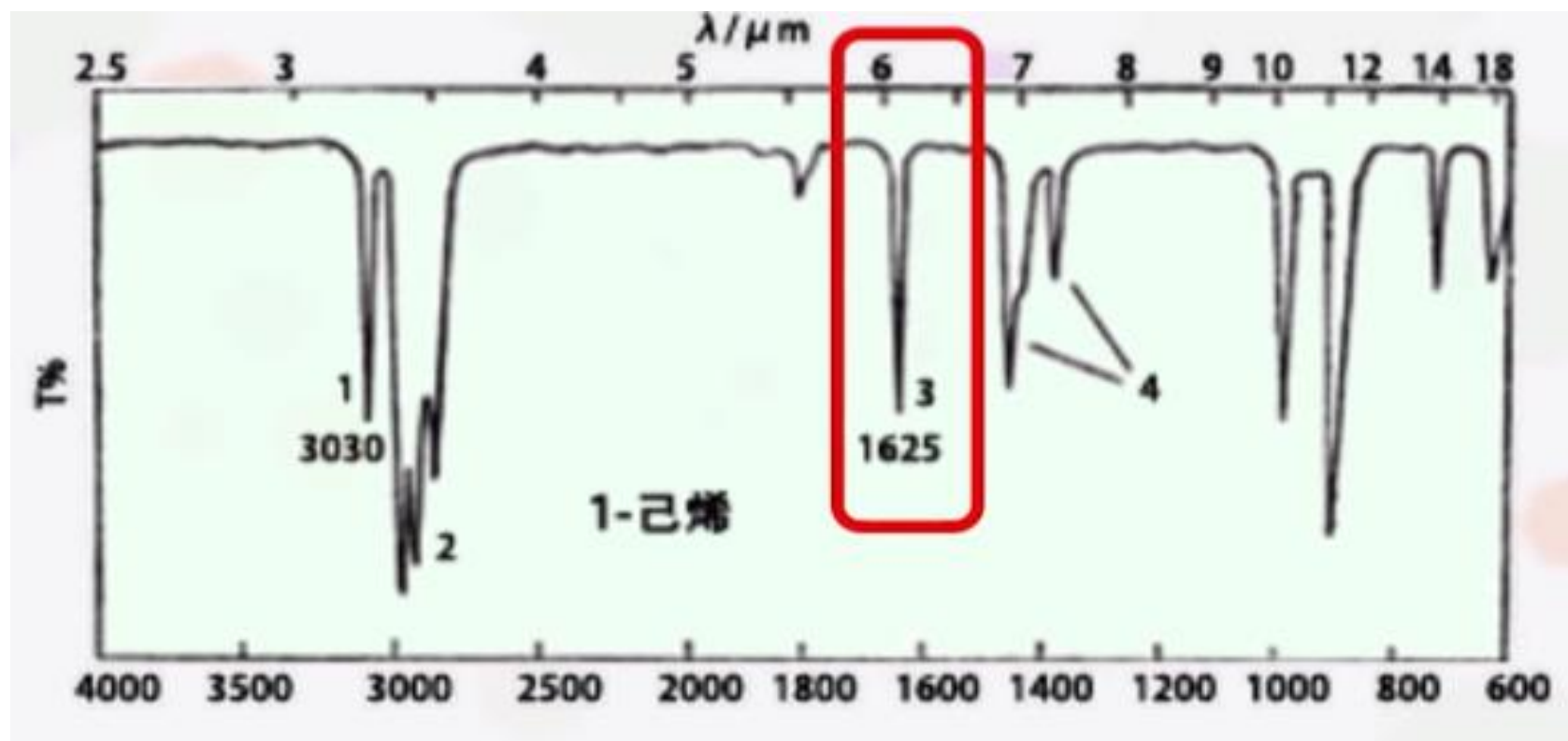
③ 2000 ~ 1500 cm^{-1} 双键伸缩振动区

C=O (1820~1600 cm^{-1})



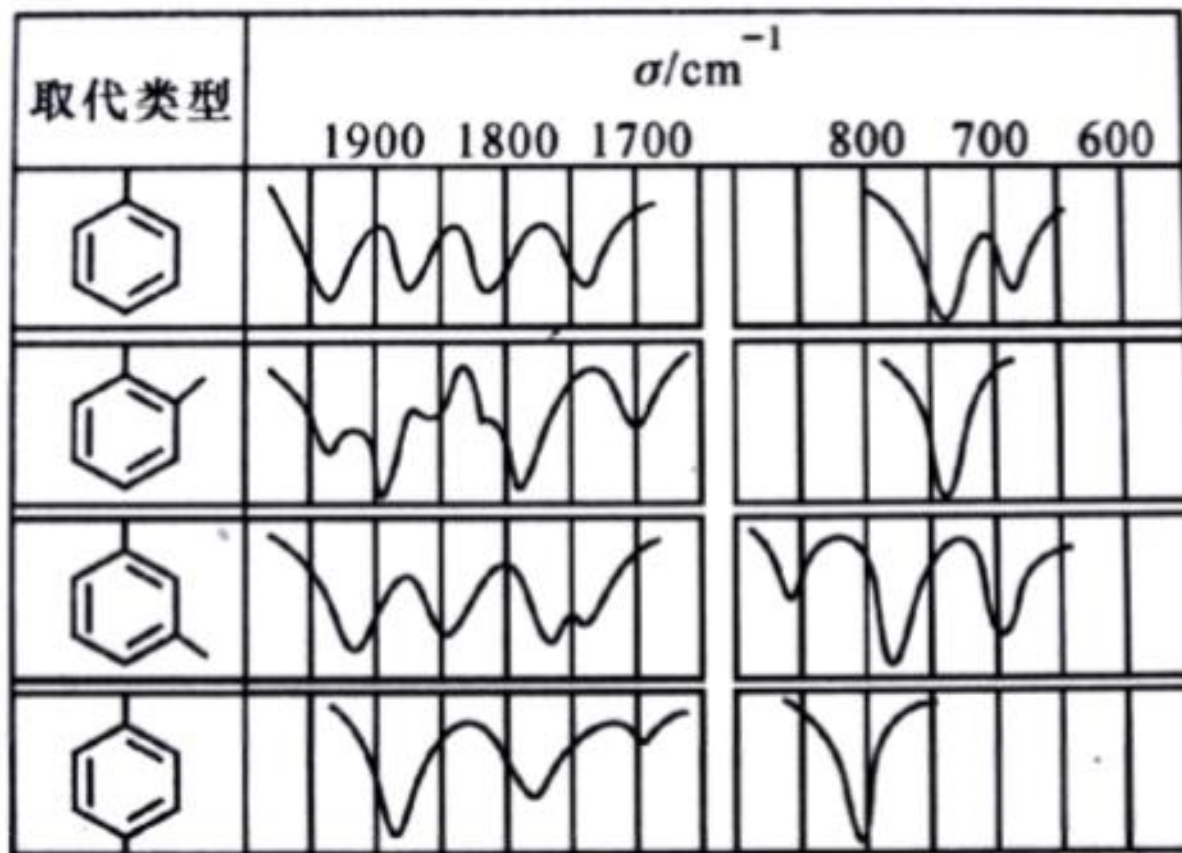
✓ 碳氧双键的**特征峰**，**强度大**，**峰尖锐**。红外吸收谱图中**最强**的峰，**无干扰**，**易辨别**！

$RC=CR'$ 1680~1620 cm^{-1}



✓ 强度弱, $R=R'$ (对称) 时, 无红外活性。

苯衍生物在 **2000~1667 cm^{-1}** 出现 C-H 面外弯曲振动泛频吸收 (强度弱), 结合 **900~600 cm^{-1}** C-H 面外弯曲振动, 可确定苯环取代基位置



④ 1500 ~ 1300 cm^{-1} C-H 弯曲振动区

- 甲基在**1380~1370 cm^{-1}** 有一个很特征的弯曲振动吸收峰，该位置很少受取代基影响，干扰少，可作为判断**甲基存在的依据**。
- 当一个碳原子上有两个甲基取代时，两个甲基弯曲振动互相偶合，**1370 cm^{-1}** 吸收峰分裂成两个相同强度的吸收峰。

2. 指纹区：1300 ~ 400 cm^{-1}

- 该区域内吸收峰 密集，多变复杂，犹如人的指纹。
- 通过在该区域查找相关吸收峰，进一步确定官能团的存在。它可以表征整个分子的结构特征。
- C-H、N-H的变形振动；C-O、C-X的伸缩振动；C-C骨架振动等。
- ✓ 各种单键强度大体相同；
- ✓ 相邻单键之间存在相互作用；
- ✓ 吸收光谱非常复杂，对结构上的微小变化（如同系物、同分异构体、空间构象等）非常敏感。

6.3 吸收谱带的强度

- 振动能级的**跃迁概率**和**偶极矩变化**是影响吸收谱带强度的两个主要因素；
- **偶极矩是否变化**：决定分子能否产生红外吸收。
- **偶极矩变化大小**：决定红外吸收谱带的强度；

- ✓ 根据量子化学理论，**红外吸收谱线强度与分子偶极矩变化的平方成正比。**
- ✓ **偶极矩变化与振动对称性有关：**对称性越高，振动中分子偶极矩变化越小，谱带强度也就越弱。
- ✓ **偶极矩变化与固有偶极矩有关：**一般极性较强的基团（如C=O，C-X等）振动，吸收强度较大；极性较弱的基团（如C=C、C-C、N=N等）振动，吸收较弱。

红外光谱的吸收强度一般定性地用很强(vs)、强(s)、中强(m)、弱(w)和极弱(vw)等表示。按摩尔吸光系数大小划分吸收峰强弱等级, 如下:

$\varepsilon > 100$: 极强峰(vs)

$20 < \varepsilon < 100$: 强峰(s)

$10 < \varepsilon < 20$: 中强峰(m)

$1 < \varepsilon < 10$: 弱峰(w)

$\varepsilon < 1$: 极弱峰(vw)

6.5 影响基团频率的因素

- 化学键的振动频率不仅与其性质有关，还受分子的**内部结构**和**外部因素**影响。
- 各种化合物中**相同基团**的特征吸收并不总在一个固定频率上。

表 10-4 诱导效应对 C=O 伸缩振动频率的影响

化合物	$\sigma_{C=O} / \text{cm}^{-1}$
<chem>CF3-C(=O)OCH3</chem>	1715 cm^{-1}
<chem>Cc1ccc(cc1)C(=O)C</chem>	1685 cm^{-1}
<chem>Cc1ccccc1C(=O)C</chem>	1660 cm^{-1}

引频增

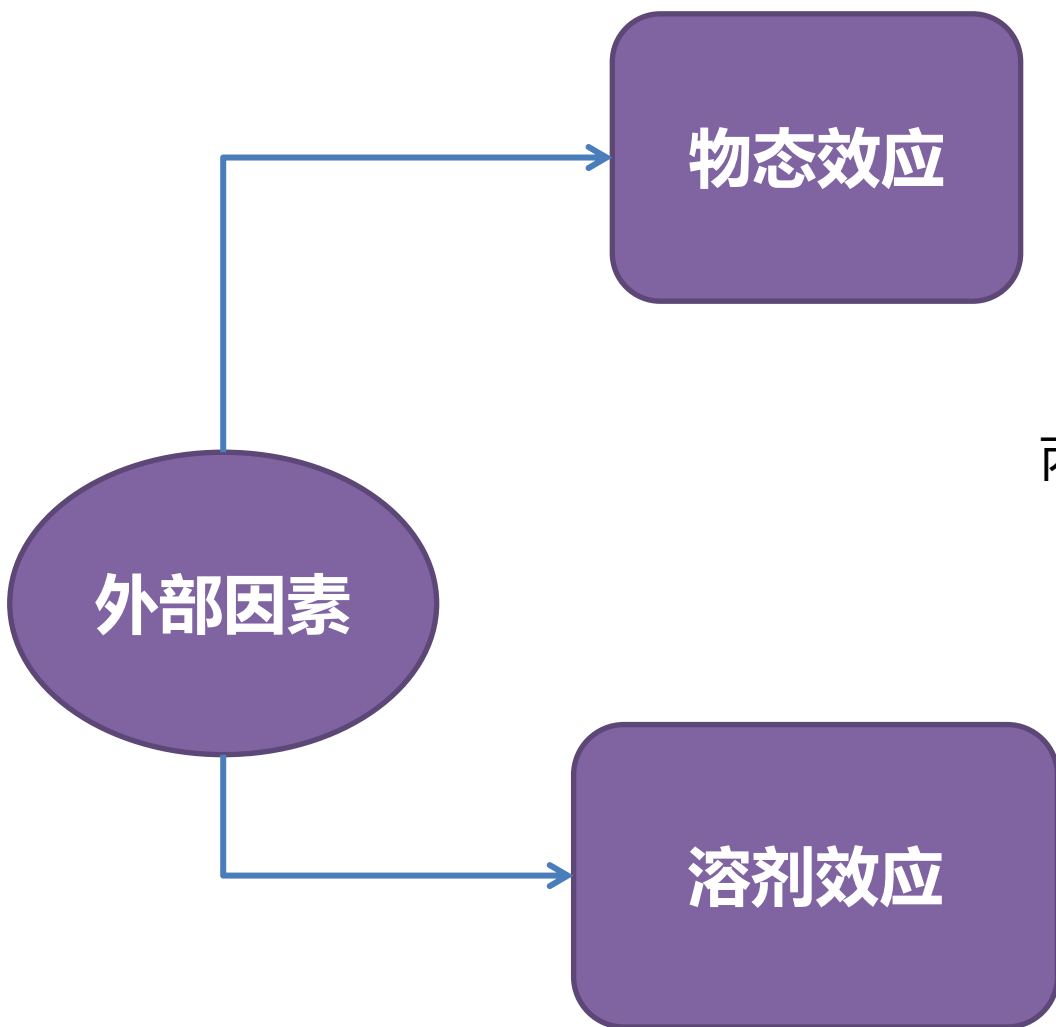
内部因素

其它内部因素还有：互变异构、振动耦合、Fermi共振

氢键效应

包括空间位阻、环张力等，对环内双键和环外双键的影响不同。当共轭体系的共平面性偏离或破坏时，空间位阻增大，体系不能很好地共平面，吸收频率向高波数方向移动；

氢键（分子内氢键；分子间氢键）：对峰位、峰强产生极明显影响，氢键使电子云密度平均化，参与氢键的原化学键力常数降低，吸收频率向低波数方向移动，谱带变宽。



- ✓ 物态不同，吸收峰的数目、峰形、峰位、峰强都有明显变化。
- ✓ **固态**红外光谱的吸收峰尖锐且多，定性最可靠。
- ✓ 晶形

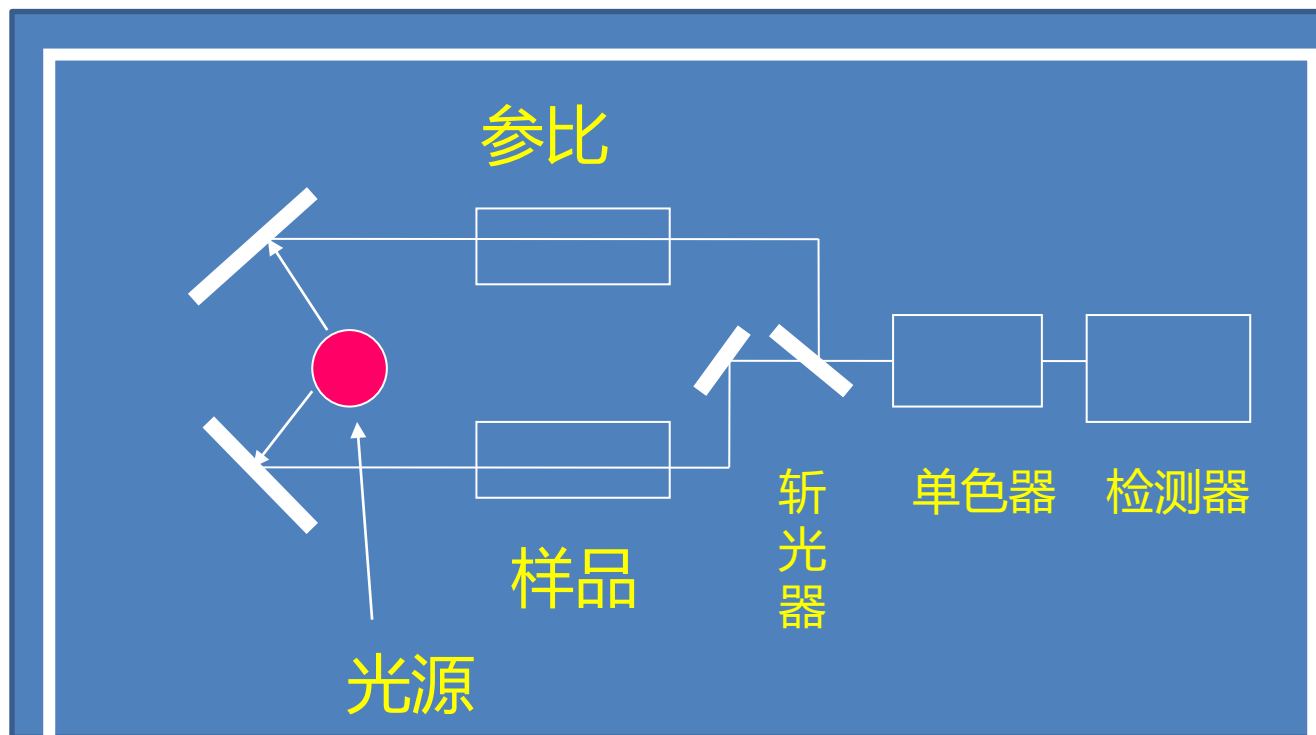
丙酮气态吸收峰：1742 cm^{-1} ；
液态：1728~1718 cm^{-1}

- ✓ 溶质极性基团的伸缩振动频率常随**溶剂极性增加而降低**，峰强增加。
- ✓ 形成氢键；
- ✓ 溶剂浓度也会引起光谱变化；
- ✓ 测定溶液光谱时，尽量在非极性稀溶液中测定；

6.6 红外吸收光谱仪

- 用于测量和记录待测物质的红外吸收光谱并利用红外光谱进行定性、定量及结构分析的仪器称为红外吸收光谱仪。
- 红外吸收光谱仪的两种类型：**色散型**、**干涉型**（傅里叶变换红外光谱仪）。

一、色散型红外吸收光谱仪的工作原理图



基本
结构

光源
吸收池
单色器
检测器

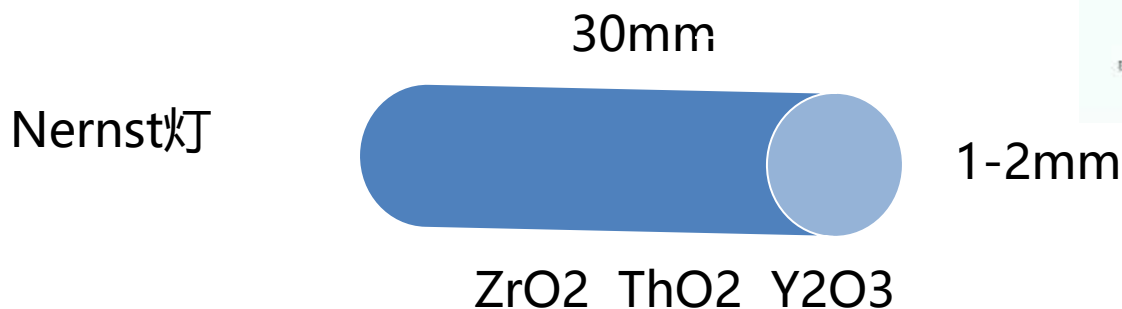
思考：怎么得到频率-透光率曲线？

(1) 光源

——Nernst灯

——碳化硅棒

——涂有稀土化合物的Ni-Cr螺旋灯丝



- ✓ 室温不导电
- ✓ 加热到700⁰C开始导电，同时产生连续红外辐射
- ✓ 工作温度：1750⁰C

(2) 单色器

- ✓ 可采用棱镜和光栅
- ✓ 为了使波长范围增宽，通常可采用几块光栅
- ✓ **由于红外辐射的强度低，狭缝不能太窄，因此单色性差。**

(3) 检测器

➤ **热检测器**——真空热电偶等

➤ **光检测器**

✓ ——热释电检测器，硫酸三苷肽 (TGS) 半导体热电效应

✓ ——碲镉汞 (MCT) 检测器，光电导和光伏效应；

✓ MCT检测器的灵敏度比TGS、热检测器高，但**需要冷却**（液氮，斯特林制冷器）。

课后作业：总结非制冷的红外光检测器类型？

能否用玻璃和石英？

(4) 吸收池

需采用可透过红外光的**NaCl**、**KBr**等材料。

(A) 固体样品

通常采用压片法，将KBr与样品充分研磨，混匀，压片后进行测定。

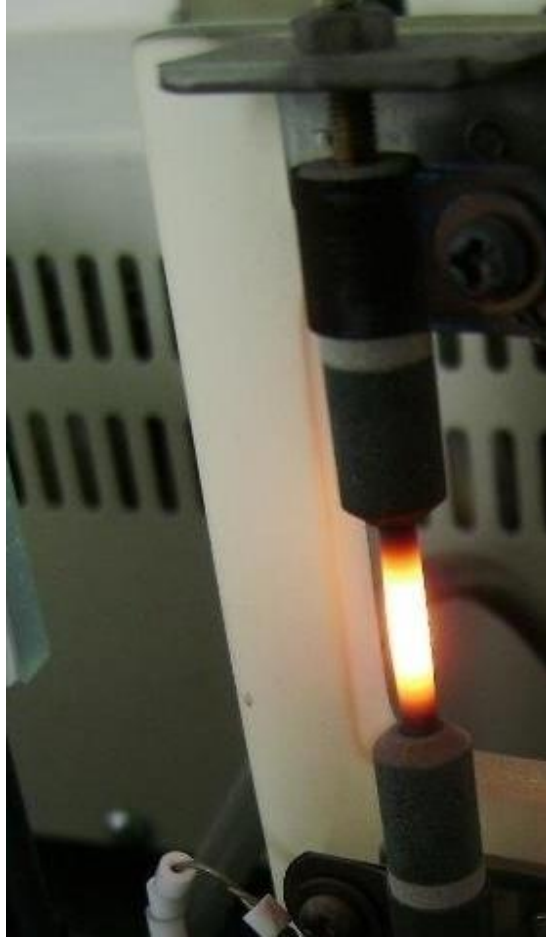
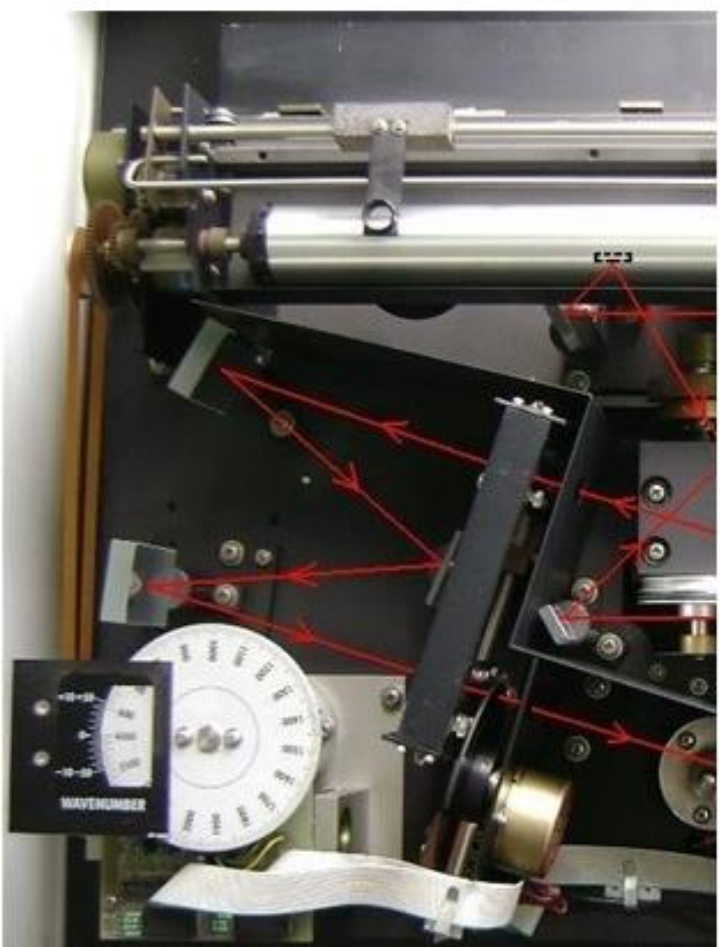
也可采用调糊法，将研细的样品用氟化煤油或重烃油调糊，夹在两盐片间测定。

(B) 气体和液体吸收池

因玻璃有红外吸收，因此吸收池通常采用盐类的单晶，如KBr、LiF等。这些材料易吸潮，故操作环境应干燥；

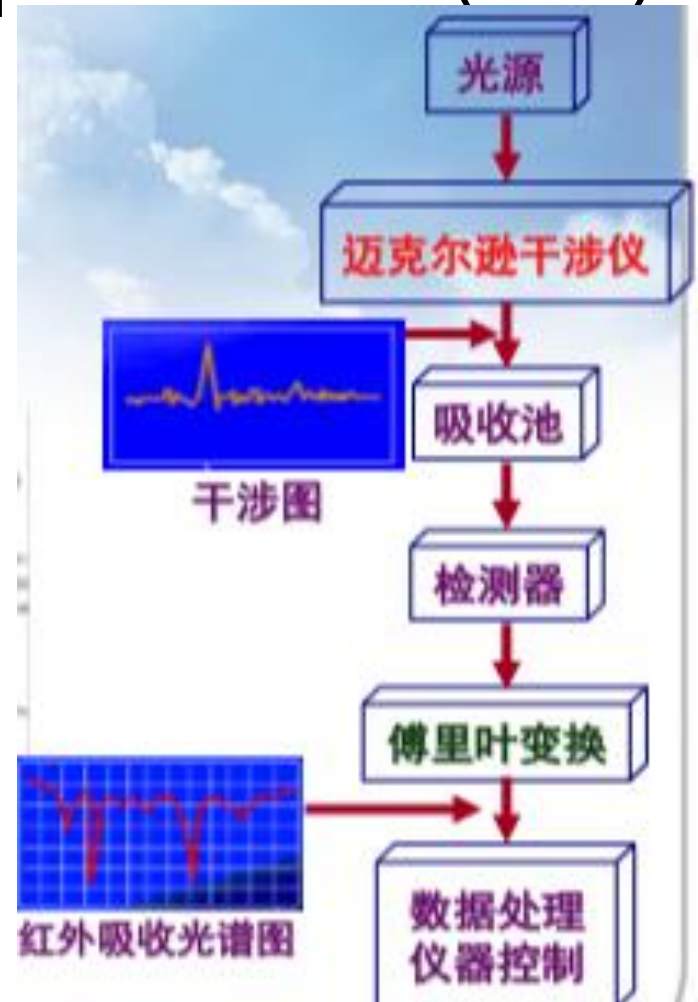
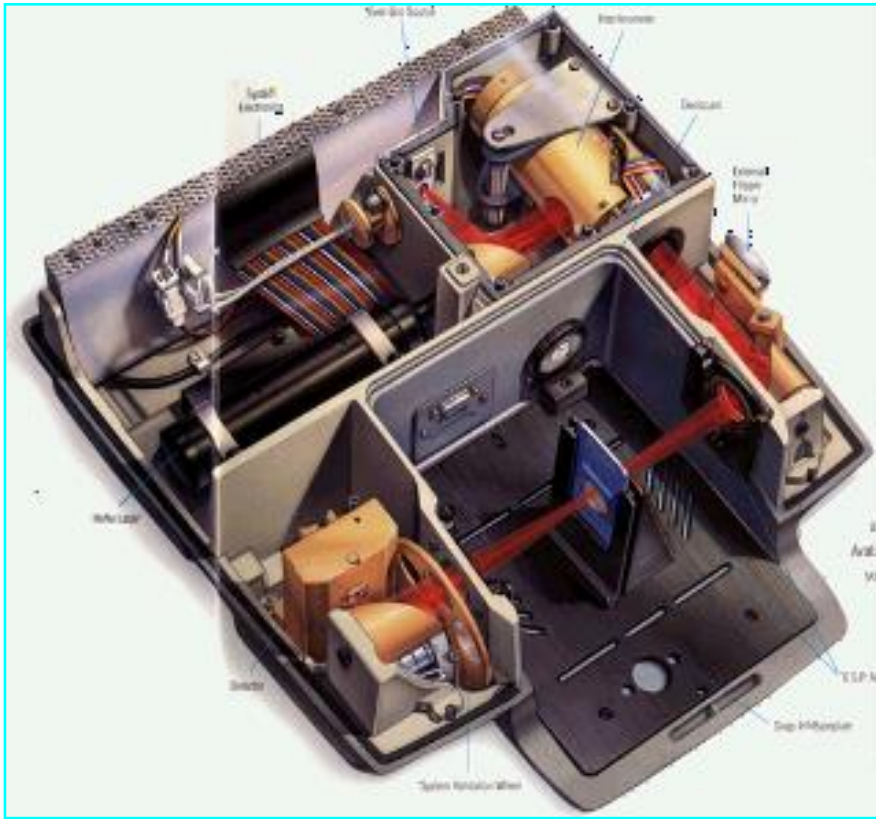
(C) 光声光谱

强吸收、高分散、不透明的样品，如煤等；

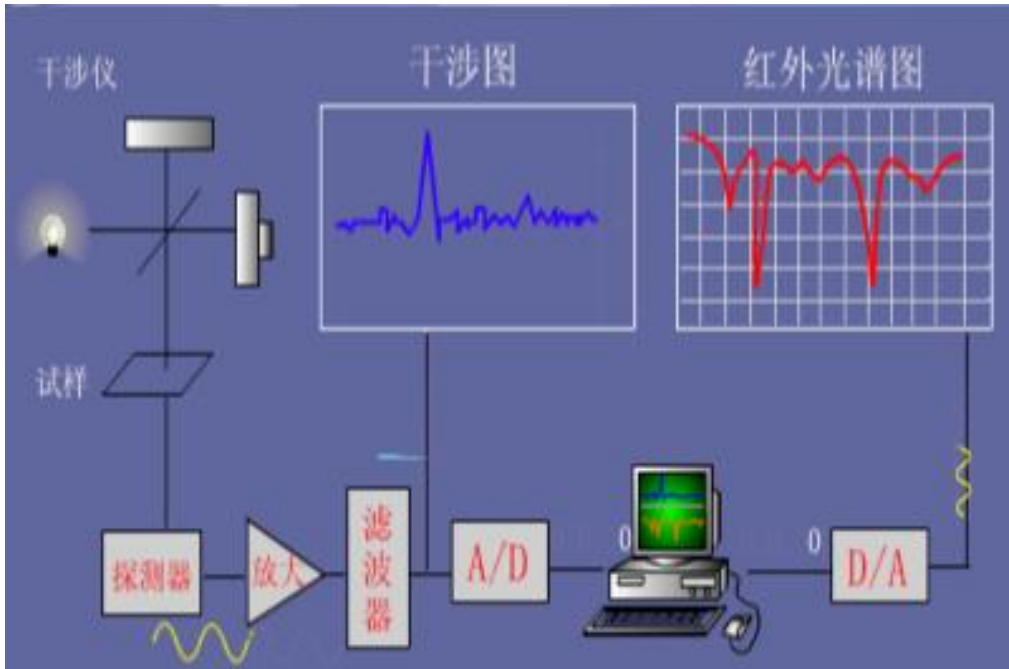


二、傅立叶变换红外光谱仪

Fourier Transform Infrared Spectrometer (FTIR)



- 是一种非色散型红外吸收光谱仪，其光学系统的主体是迈克尔逊（Michelson）干涉仪。
- 无单色器；
- 快速傅里叶变换；



➤ 光源辐射经干涉仪转变为干涉光通过试样，光信息经傅里叶变换解析成普通光谱图。

相差

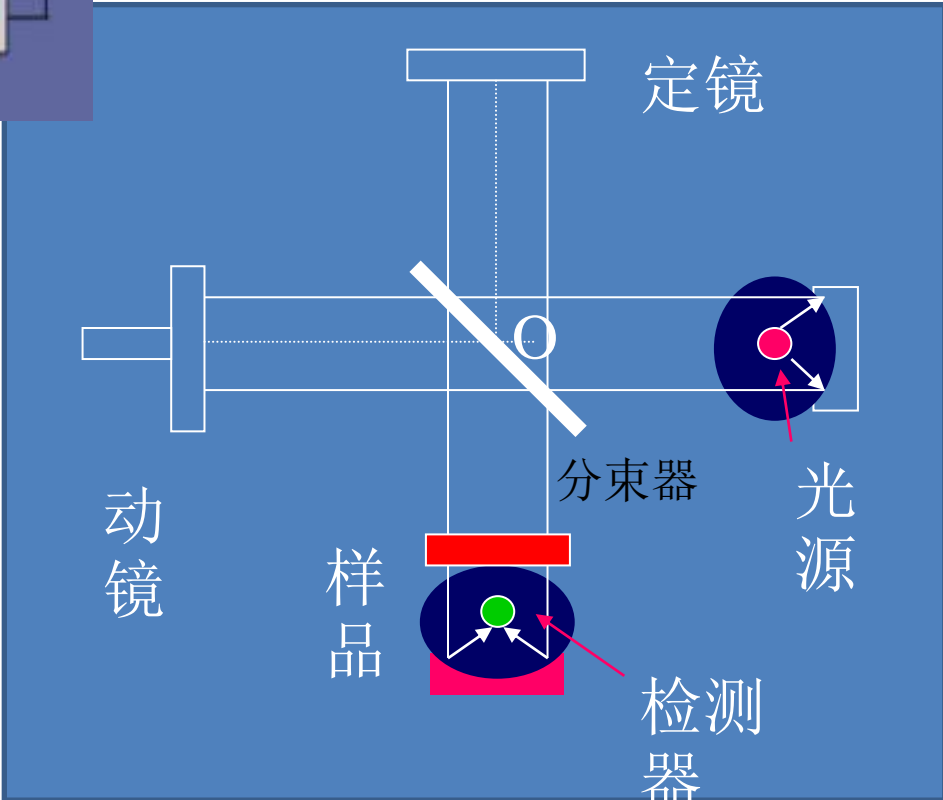
$$I(\delta) = \int 0.5I(\nu) \cos 2\pi\nu\delta d\nu$$

时域谱

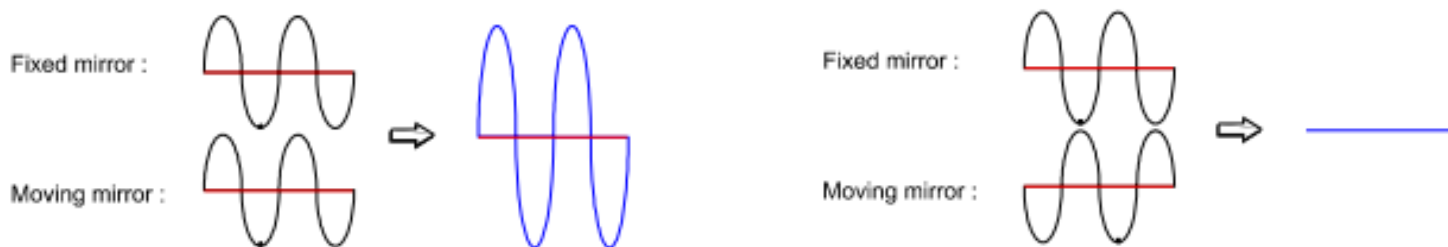
↓ 傅里叶变换

$$I(\nu) = \int I(\delta) \cos 2\pi\nu\delta d\delta$$

频域谱



- **FTIR光谱仪的核心是干涉仪，就是普通光学实验涉及到的干涉仪。**
- ✓ He-Ne光和红外光依次经过分束片，定镜（动镜），两路反射回的光产生干涉。得到的光强是和两路光之间的光程差相关的。设想最简单的单色光的情况，当两路光程相等（ $\delta=0$ ），干涉相长；光程差是 $\lambda/2$ ，干涉相消



- **光强I是随光程差变化的函数，按照恒定速度移动动镜就会扫描得到光强随时间的变化关系。**

$$I(\delta) = B \times \{1 + \cos 2\pi\delta/\lambda\}$$

$$I(t) = B \times \{1 + \cos 2\pi 2v_0 t/\lambda\} = B \times \{1 + \cos 2\pi 2v_0 t\nu\}$$

- **交流部分对应测到的干涉图**

$$I(\delta) = B \times \cos 2\pi\nu\delta \quad I(t) = B \times \cos 2\pi 2v_0 t\nu$$

- 实际的光源并不是单色的，所以对实际情况，要把各种频率的贡献加和在一起

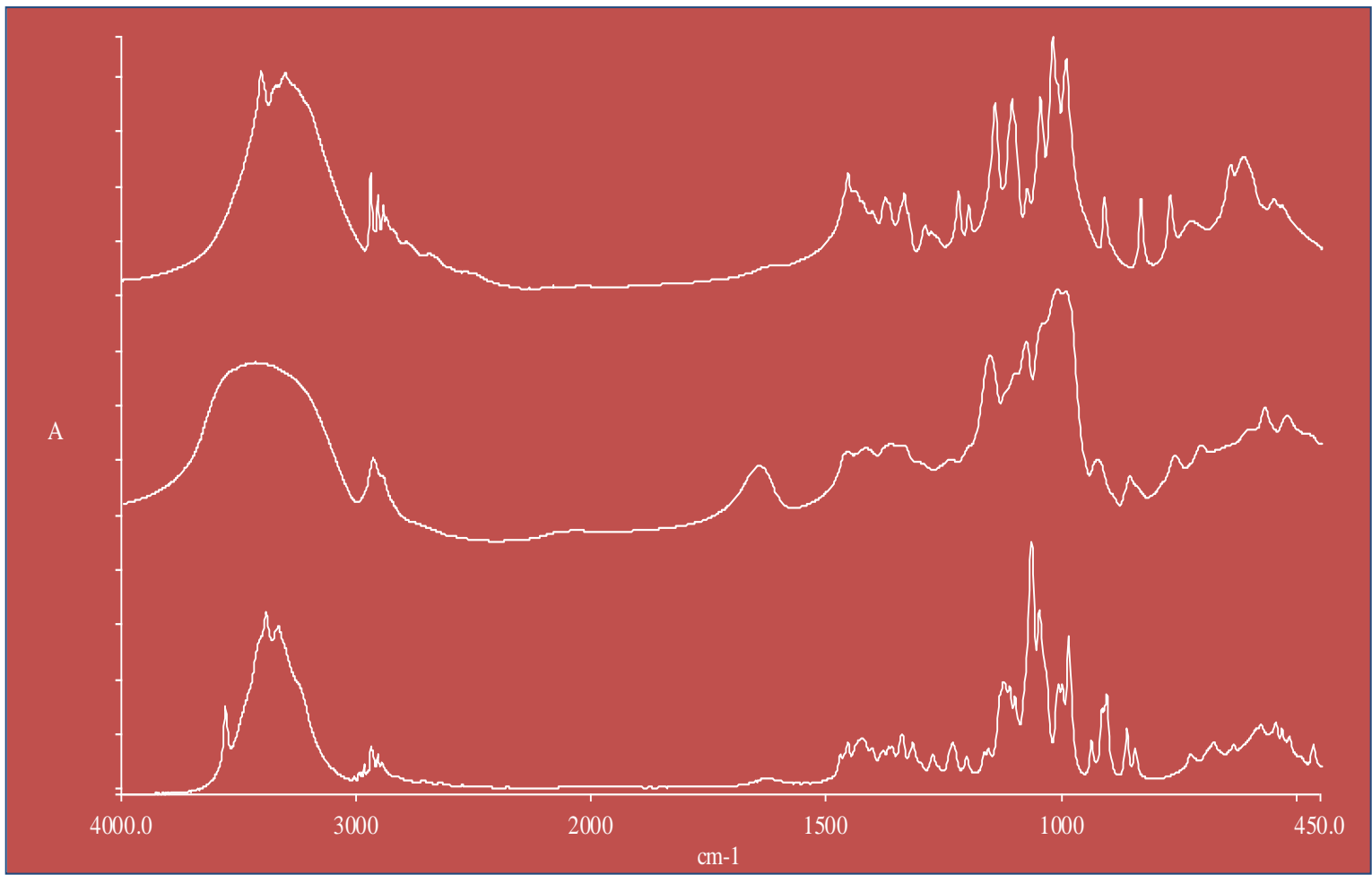
$$I(\delta) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(\nu) \times \cos 2\pi\nu\delta d\nu$$

- **傅里叶变换**

$$B(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\delta) \times \cos 2\pi\nu\delta d\delta$$

- 得到了光强随频率的变化关系

◆ **色散光谱仪是直接在频域内测量I，而FTIR是在时域内测量I，进一步经过傅里叶变换，实现I的频率分辨。**



- **傅立叶变换的优点：**

- 1、FTIR**不需要分光**，因此检测器接收到的光通量较色散型仪器大得多，因此提高了信噪比和灵敏度，有利于弱光谱的检测；
- 2、FTIR的**扫描速度极快**，能在很短的时间里（<1s）获得全谱域的光谱响应；
- 3、FTIR仪器与计算机技术的结合，使IR的整机性能大大提高，价格下降，使FTIR的商品仪器获得了普及。

	IR	FT-IR
仪器类型	色散型红外吸收光谱仪	傅里叶变换型红外吸收光谱仪
测定图谱时间	一般需 10min 扫描快	只需1s 甚至更短
波数精度	波数精度低, 0.5 cm^{-1}	波数精度高, 可 达 0.01 cm^{-1}
灵敏度	灵敏度低	灵敏度高
测定光谱范围	4000-400 cm^{-1}	10000-10 cm^{-1}

6.7、红外光谱的应用

• 1、定性分析

- ◆ **已知物的鉴定：** 将试样谱图与标准谱图对照或与相关文献上的谱图对照。
 - ✓ (1) Sadtler标准红外光谱集. 到1974年为止，共收集了47000种化合物的红外吸收光谱；
 - ✓ (2) 分子光谱文献 “DMS (Documentation of Molecular Spectroscopy) 穿孔卡片，由美国和西德联合编制；
 - ✓ (3) “API” 红外光谱资料，由美国石油研究所 “API” 编制。到1971年为止，共收集了3064种化合物的红外吸收光谱；
- **红外计算机谱图库：** 数万张各种类别物质的谱图，可以自动检索。

- 可以从红外光谱的波形、波峰的强度、位置及数目，研究物质的内部结构。
- **同一类化学键的基团在不同的化合物的红外光谱中吸收峰的位置是大致相同的**，这一特性提供了 鉴定各种基团是否存在的判断依据，也是红外光谱定性分析的基础。

◆未知物结构分析

- 如果化合物不是新物质，可将其红外谱图与标准谱图对照；
- 如果化合物为新物质，则须进行光谱解析：
 - 1) 该化合物的信息收集：试样来源、熔点、沸点、折光率、旋光率等；
 - 2) 计算不饱和度；
 - 3) 先特征，后指纹；先最强峰，后次强峰；
 - 4) 先粗查，后细找。
 - 5) 通过其它定性方法进一步确证：UV-Vis、MS、NMR、Raman等。

思考：如何利用人工智能机器学习算法实现基于红外吸收谱的物质自动识别？

• 2、定量分析

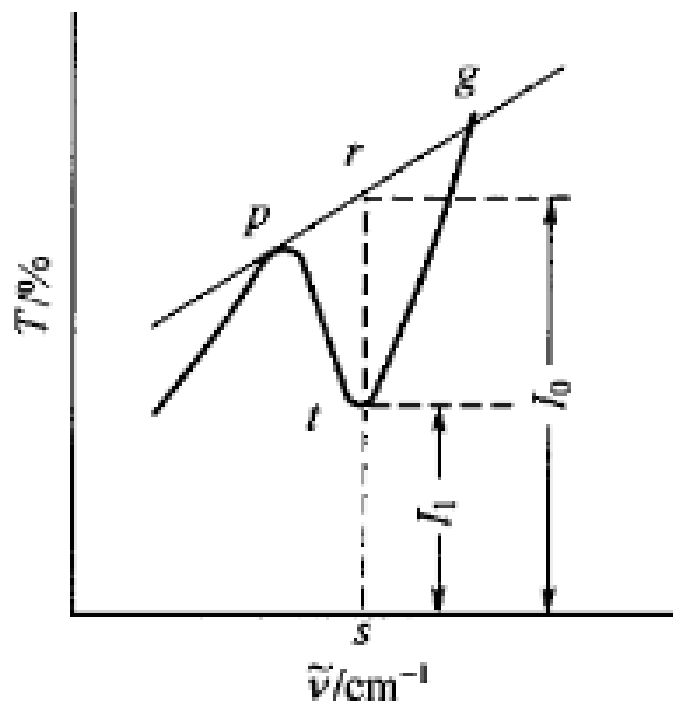
✓ 是通过通过对特征**吸收带强度**的测量来求出组分含量

✓ 物质对红外光的吸收符合**朗伯 - 比尔定律**
定量依据：Lamber – Beer定律

$$A = KCL$$

- ✓ 定量分析方法有**标准曲线法和内标法**。
但用红外光谱进行定量测定的灵敏度较低，实验误差较大，**不适用于微量组分**的测定；
- ✓ 选择特征吸收带；吸收带的强度和浓度有线性关系；干扰吸收带小；

- 吸光度测定:
- 基线法:



$$A = \lg \frac{I_0}{I_1} = \lg \frac{rs}{ts}$$

在最大吸收峰两侧选p、g两点，两点间连线称为基线，通过吸收峰顶点t作垂直于横坐标的垂线rs，由rs和ts 的长度可求出样品在此波长下的吸光度值A:

红外吸收光谱应用

- ✓ **酒类品质**：近红外光谱分析方法可以用来作为一种快速、无损检测葡萄酒中各种酚类物质浓度的检测；
- ✓ **奶制品品质检测**：非均脂牛奶中体细胞数(SCC)进行预测、检测牛奶处理过程中的脂肪含量；
- ✓ **果汁品质检测**：糖份检测、柠檬酸和苹果酸的含量检测、可溶性固形物；
- ✓ **食用油品质检测**：油中的醛、酮等主要成分。

本章重点

- 红外光谱划分;
- 红外光谱的产生机理和特点, 以及紫外-可见光谱的比较;
- 红外光谱图的特点;
- 产生红外吸收的条件;
- 双原子、多原子分子的振动形式及其红外吸收特点;
- 一些基本概念: 官能团区、指纹区、基频、倍频
- 影响红外吸收谱线的因素;
- 色散型和非色散型红外光谱仪的构成及特点;
- 红外光谱定性和定量分析依据和方法;

课后作业：

- 1.高光谱成像的原理和仪器结构**
- 2.非制冷型红外探测器**
- 3. 课后习题10-1,2,3**

10-1 试说明影响红外吸收峰强度的主要因素。

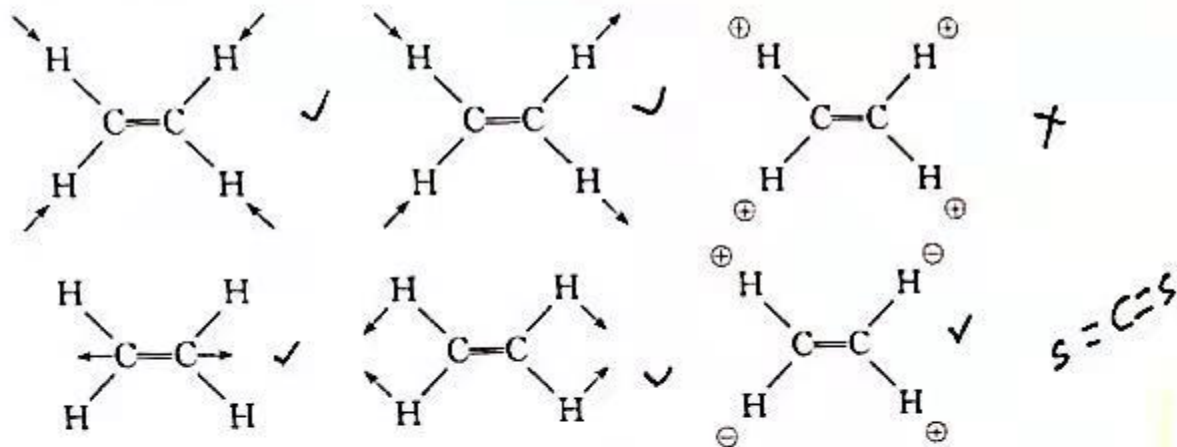
10-2 HF 中键的力常数约为 $9 \text{ N} \cdot \text{cm}^{-1}$, 试计算:

(1) HF 的振动吸收峰频率;

(2) DF 的振动吸收峰频率。

10-3 分别在 $950 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ 乙醇和正己烷中测定 2-戊酮的红外吸收光谱, 试预计 $\sigma_{\text{C=O}}$ 吸收带在哪一溶剂中出现的频率较高? 为什么?

10-4 分子在振动过程中, 有偶极矩的改变才有红外吸收。有红外吸收的称为红外活性; 相反, 称为非红外活性。指出下列振动是否有红外活性。



10-5 CS_2 是线性分子, 试画出它的基本振动类型, 并指出哪些振动是红外活性的?

10-6 某化合物分子式为 $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}$, 有下面的红外吸收带: 3020 cm^{-1} , 2900 cm^{-1} , 1690 cm^{-1} 和 1620 cm^{-1} ; 在紫外区, 它的吸收在 227 nm ($\kappa = 10^4 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$), 试提一结构, 并且说明它是否是唯一可能的结构。

10-7 什么是基频、倍频、合频、泛频峰?

在羧酸、酯、酰胺、腈、酮、醛和酰胺类化合物中, 出现 C=O