



石家莊鐵道大學
SHIJIAZHUANG TIEDAO UNIVERSITY

在线开放课程

光谱技术

红外光谱分析

主讲：杨治刚

目录



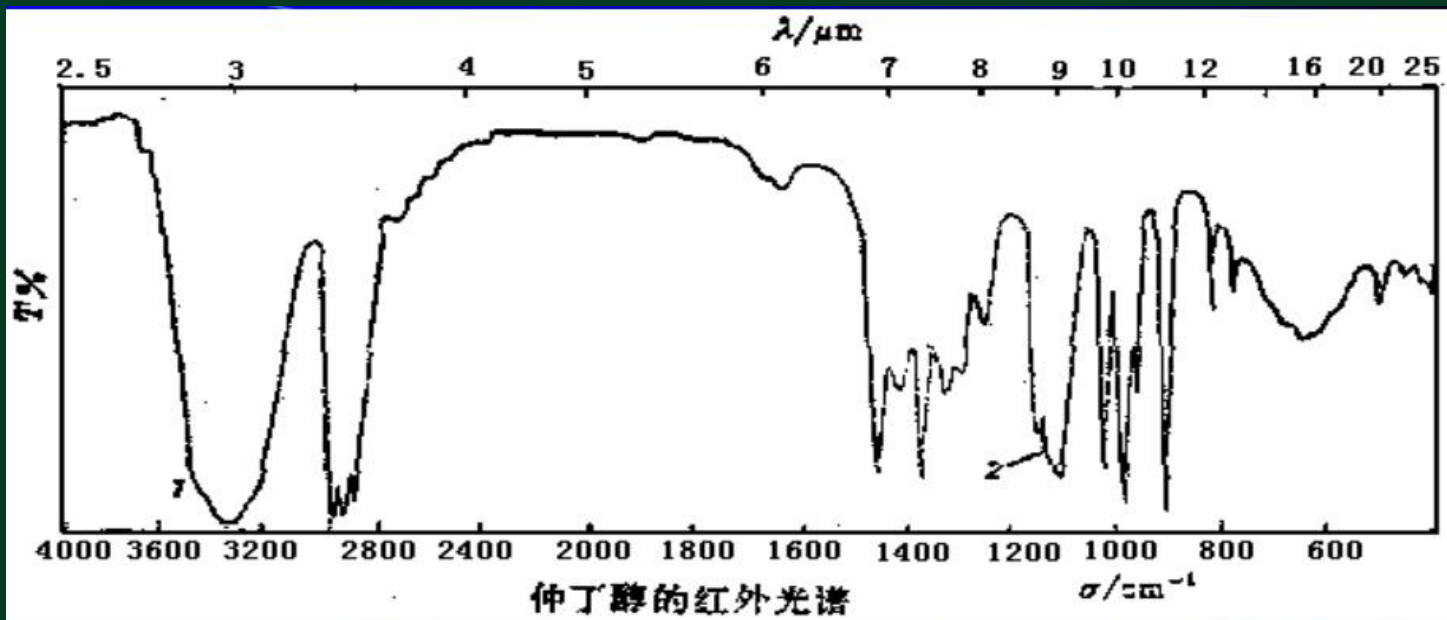
在线开放课程

- 红外光谱介绍
- 红外光谱分析演示
- 红外光谱仪结构

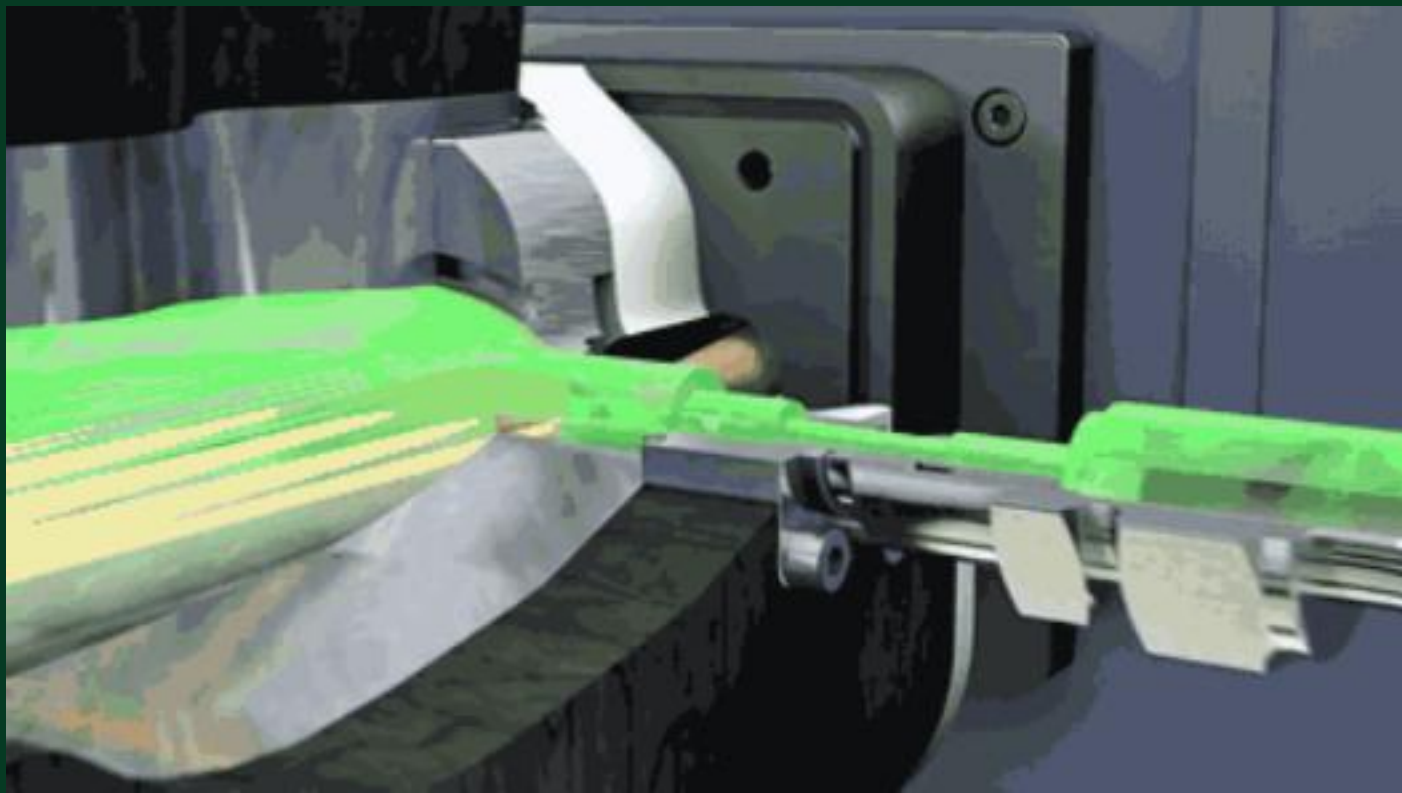
红外光谱分析

分子振动光谱

记录红外光的百分透射比与波长关系的曲线，即为红外光谱，所以又称之为红外吸收光谱。

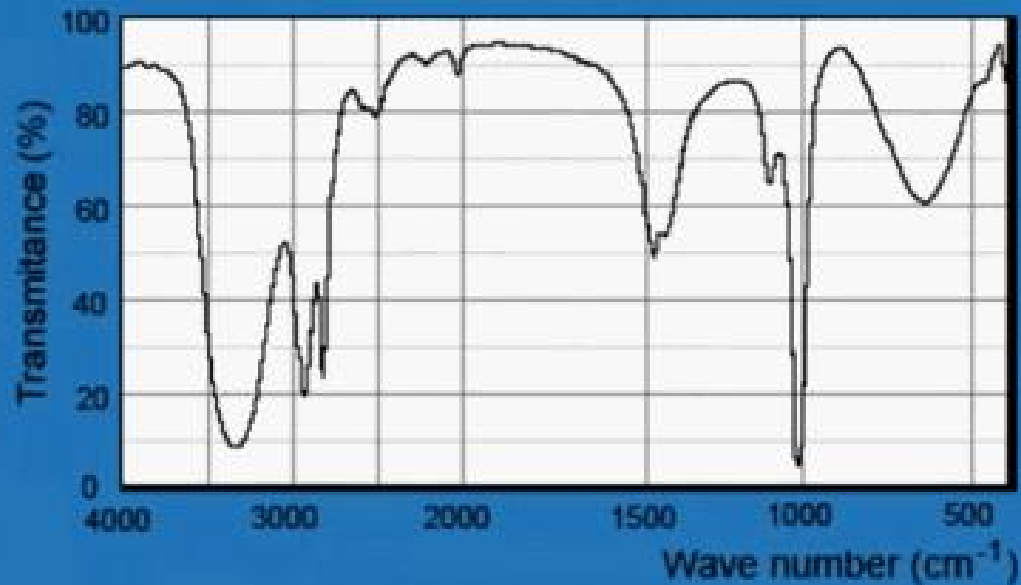




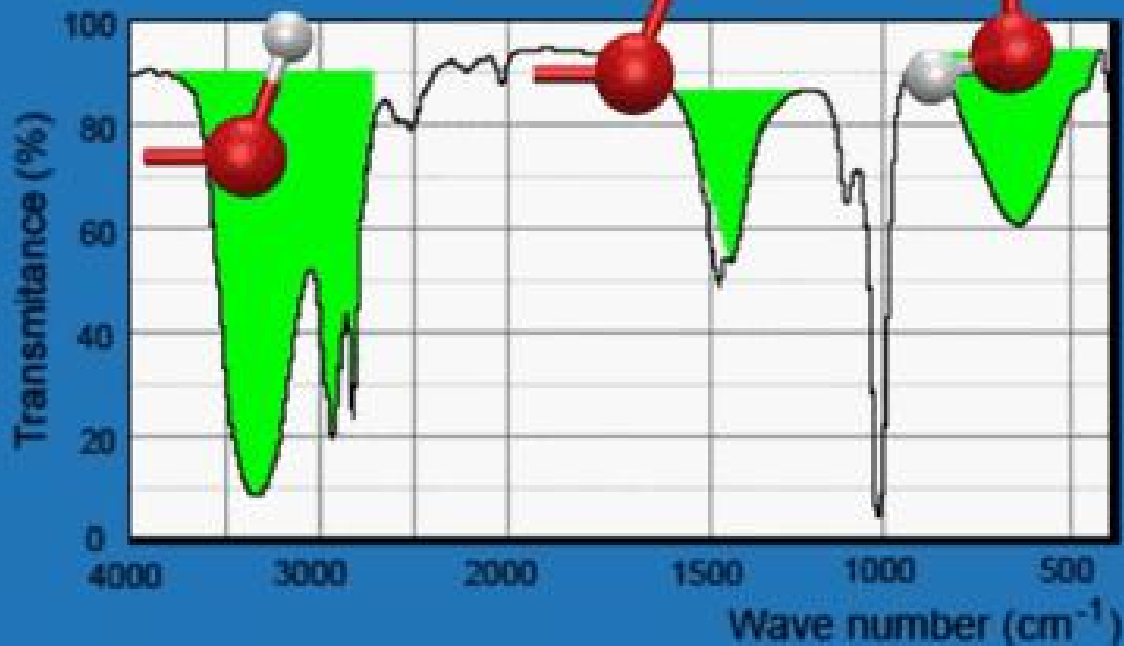


甲醇红外光谱分析过程

www.quimica3d.com

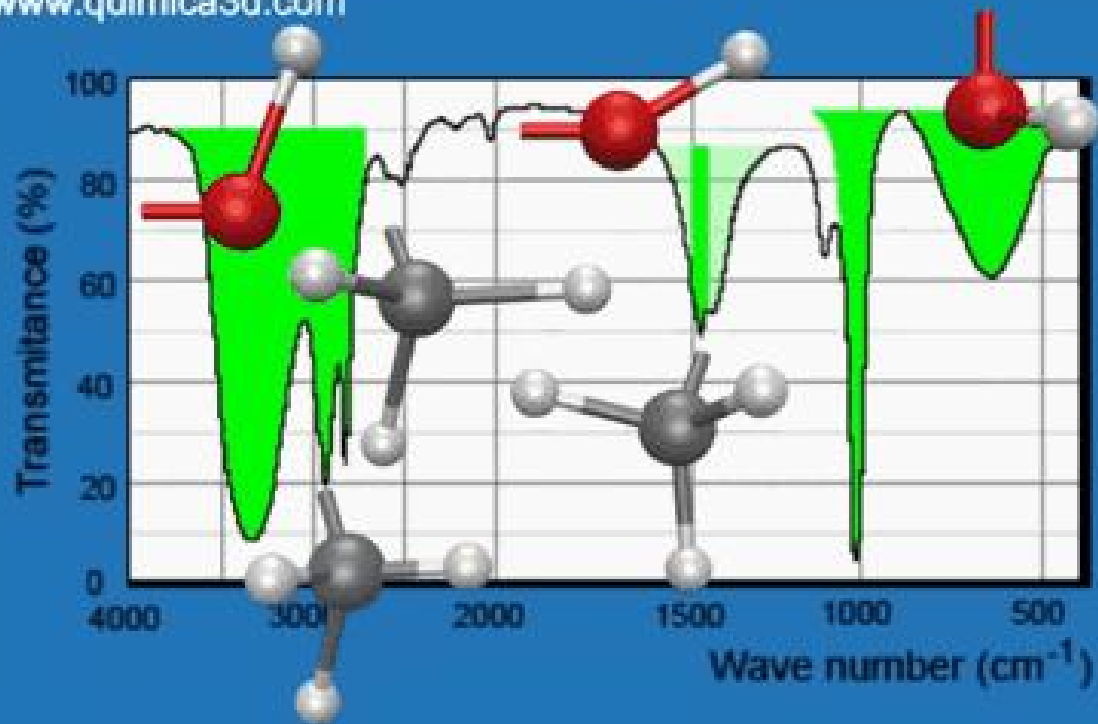


www.quimica3d.com



we note the presence of three narrow and sharp peaks: in 2945, in 2833, and in 1460

www.quimica3d.com



This peak is always found in molecules

红外光区的划分

- 红外光谱在可见光区和微波光区之间，波长范围约为 $0.75 \sim 1000\mu\text{m}$ ，分为三个区：**近红外光区**，**中红外光区**，**远红外光区**。

- **近红外光区的吸收带** ($0.75 \sim 2.5\mu\text{m}$)：由低能电子跃迁、含氢原子团（如O-H、N-H、C-H）伸缩振动的倍频吸收产生。

作用：该区的光谱可用来研究稀土和其它过渡金属离子的化合物，并适用于水、醇、某些高分子化合物以及含氢原子团化合物的定量分析。

红外光区的划分

- **中红外光区吸收带**（ $2.5 \sim 25\mu\text{m}$ ）：绝大多数有机化合物和无机离子的基频吸收带（由基态振动能级（ $\nu=0$ ）跃迁至第一振动激发态（ $\nu=1$ ）时，所产生的吸收峰称为基频峰）。

是红外光谱中吸收最强的振动，最适于进行红外光谱的定性和定量分析。又简称为**红外光谱法**。

红外光区的划分

• **远红外光区吸收带** ($25 \sim 1000\mu\text{m}$) : 气体分子中的纯转动跃迁、振动-转动跃迁、液体和固体中重原子的伸缩振动、某些变角振动、骨架振动以及晶体中的晶格振动所引起的。

作用：对异构体的研究特别方便，金属有机化合物（包括络合物）、氢键、吸附现象的研究。

红外光所具有的能量正好相当于分子（化学键）的不同能量状态之间的能量差异。因此才会发生对红外光的吸收效应。

红外产生的条件：

1. 被吸收的辐射光子具有的能量与发生振动跃迁所需能量相等。
2. 辐射与物质之间有耦合作用（偶极矩发生变化）

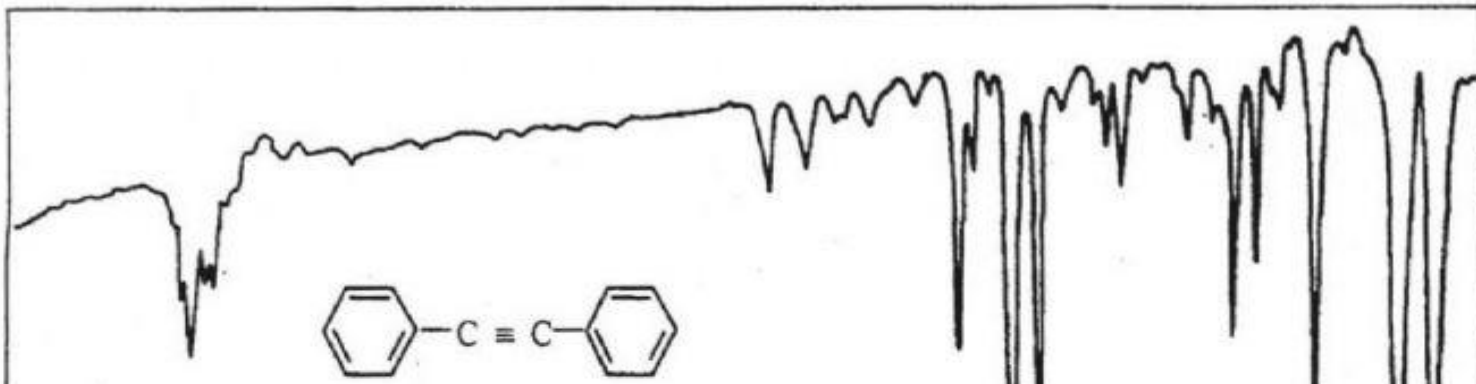
一些化学键的弯曲振动对应的红外波数

键	波数 cm^{-1}
XOH	1200 – 600
H ₂ O	1650 – 1600
NO ₃	900 – 800
CO ₃	900 – 700
BO ₃	800 – 600
SO ₄	680 – 580
SiO ₄	560 – 420

红外产生的条件:

1. 被吸收的辐射光子具有的能量与发生振动跃迁所需能量相等。
2. 辐射与物质之间有耦合作用
(偶极矩发生变化)

红外光谱分析



官能团区

4000 ~ 1330 cm^{-1}

指纹区

1330 ~ 600 cm^{-1}

3400 3200 3000 2800 2600 2400 2200 2000 1800 1600 1400 1200 1000 800 600

← $\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$

二苯乙炔的红外光谱

红外光区的划分

官能团区

4000 ~ 2500 cm^{-1}

X-H 伸缩振动频率区, X: O,H,C,N,S.

2500~1900 cm^{-1} 叁键和累积双键伸缩振动

1700 cm^{-1} 双键伸缩振动

指纹区

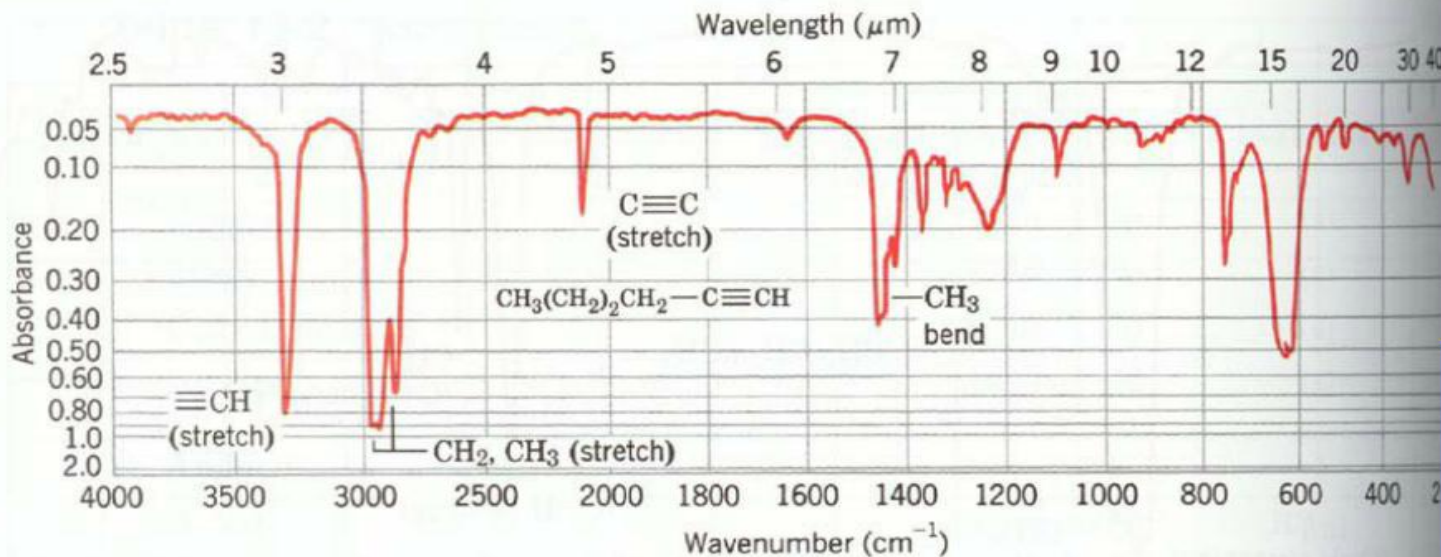
1330~600 cm^{-1}

吸收带多, 整个分子振动转动引起的, 反映整个分子的特征。可用于鉴定两个化合物是否同一化合物。

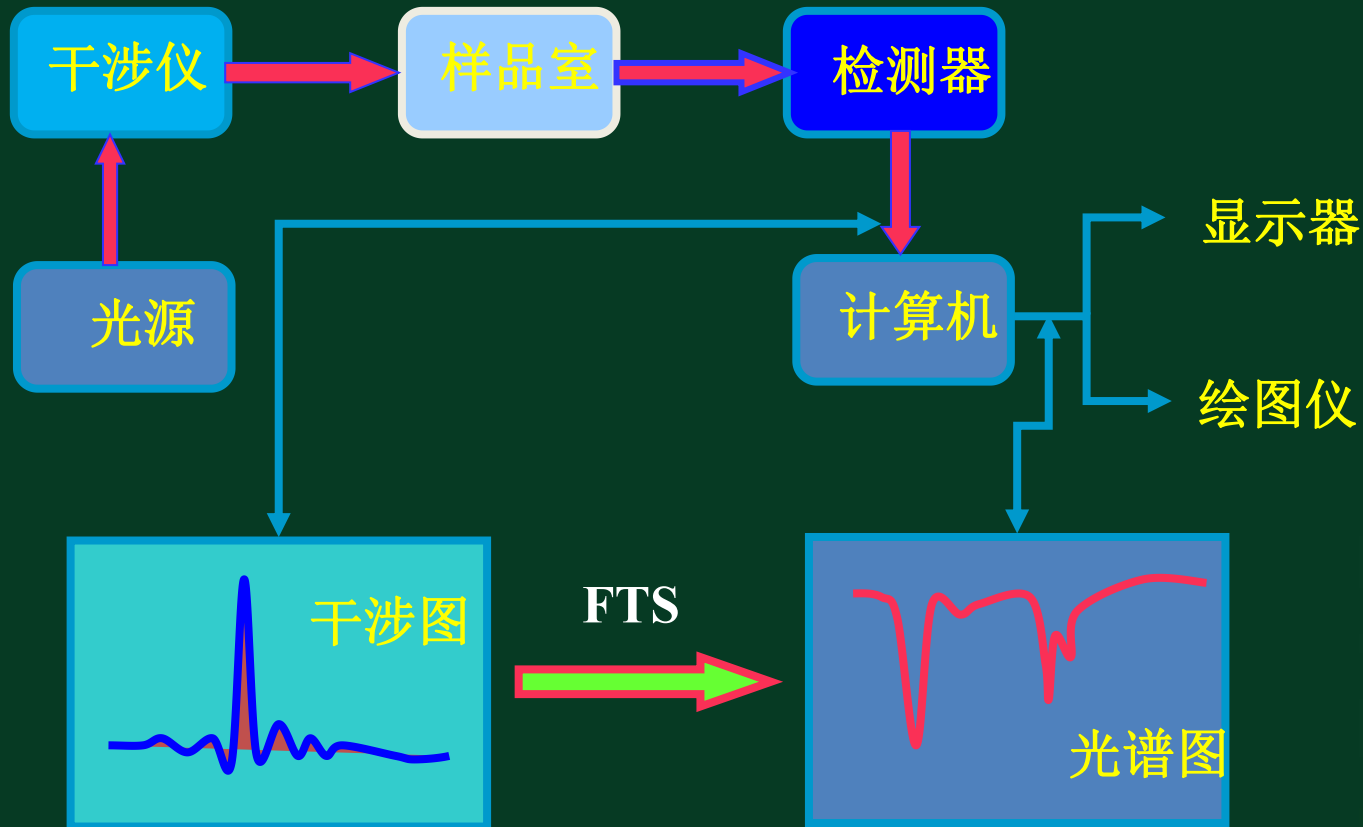
官能团与特征频率

官能团

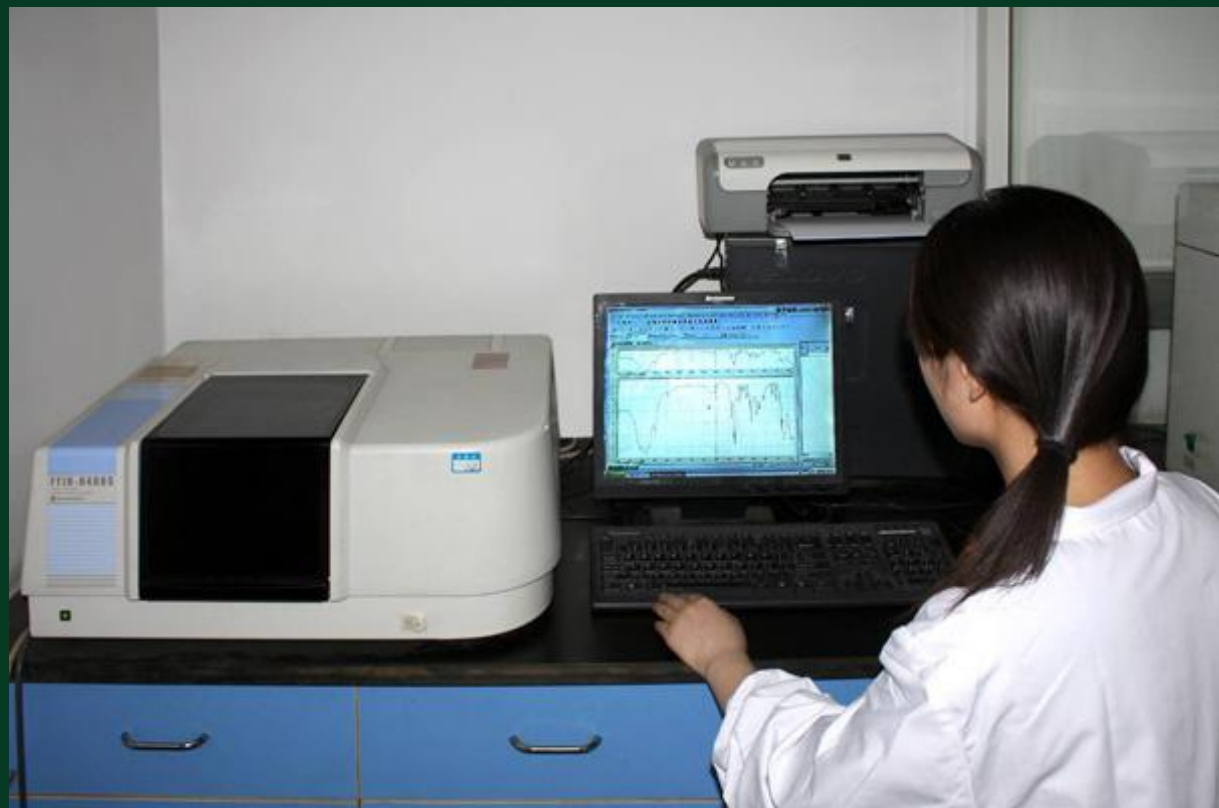
吸收频率 ν (cm^{-1})



傅里叶变换红外光谱仪



结构框图



小结



在线开放课程

红外分析：

研究和确认化学物质，分析分子的结构

特征。