

# 第三章 红外吸收光谱分 析

- 3.1 红外吸收光谱法概述
- 3.2 红外吸收光谱的产生条件
- 3.3 分子振动方程及振动形式

3.4 红外光谱的特征性、基团频率

3.5 影响基团频率位移的因素

3.6 红外吸收光谱的定性和定量分析

3.7 红外吸收光谱仪

3.8 红外吸收光谱分析实验技术

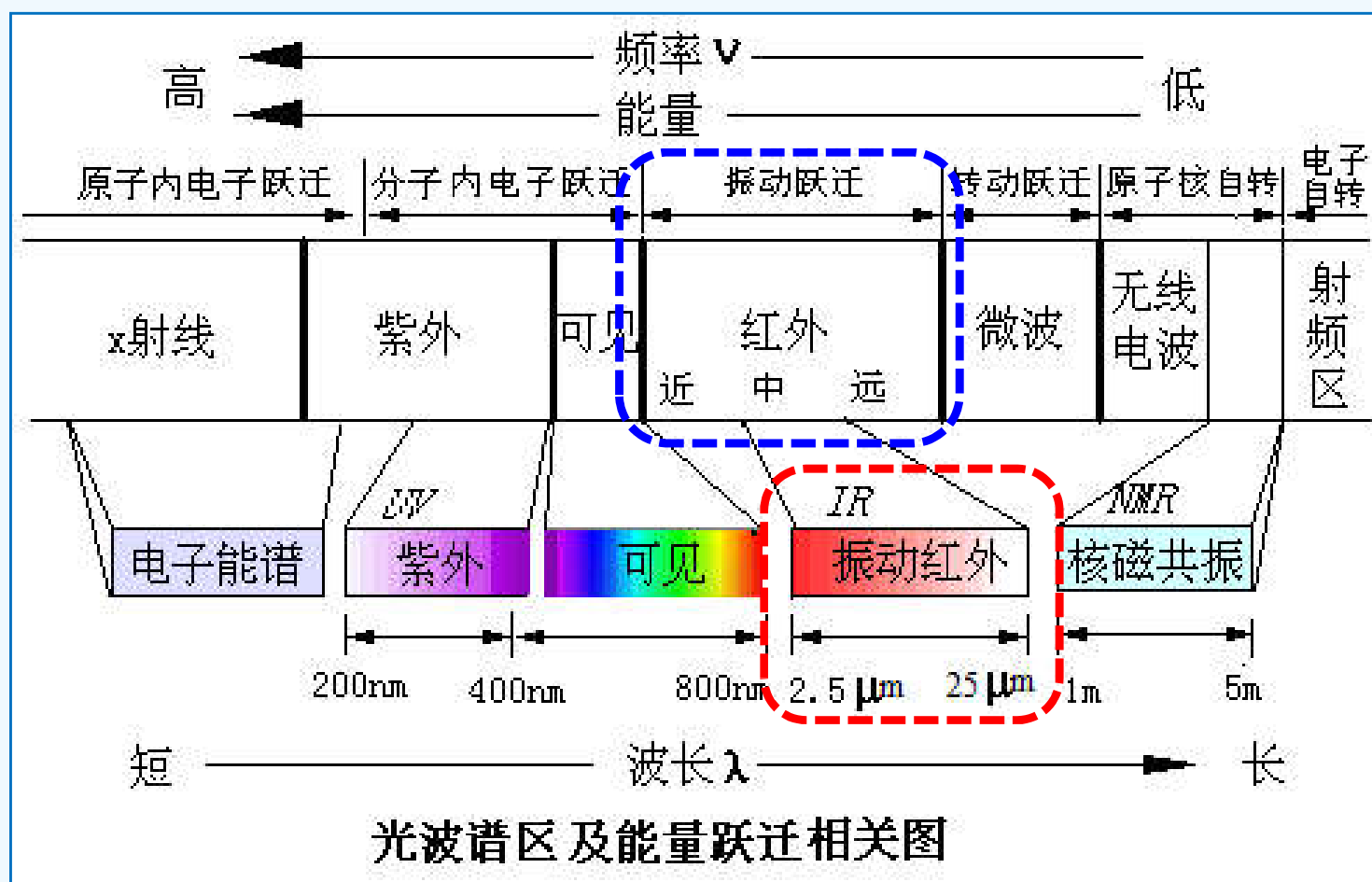
下页



帮助

返回

### 3.1 红外吸收光谱法概述及其基本原理



中红外区 ( $2.5\text{--}25\mu\text{m}$ ,  $4000\text{--}400\text{cm}^{-1}$ ) 是目前应用最广泛的红外光谱区

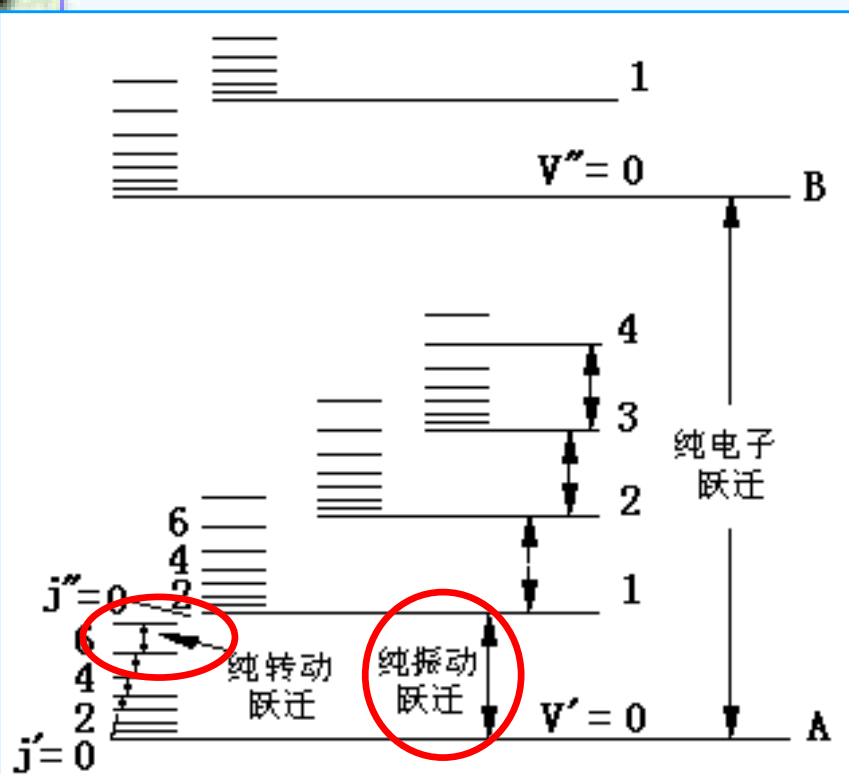
# 红外吸收光谱的产生

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** (Infrared Absorption Spectrometry, IR)，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。

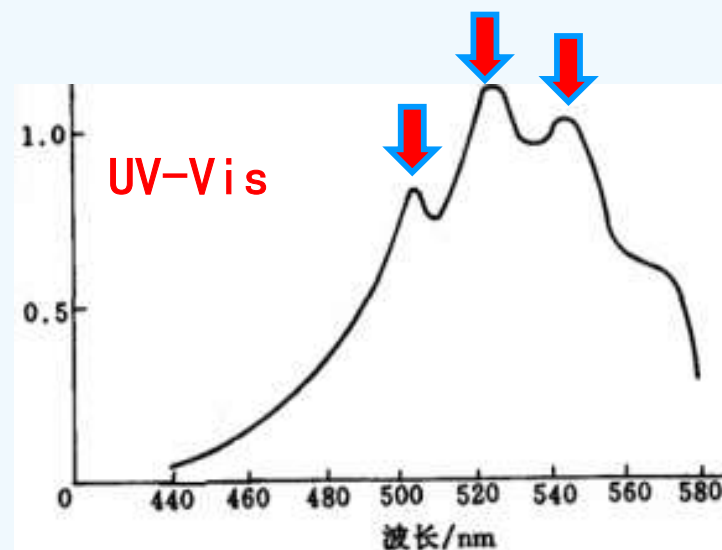
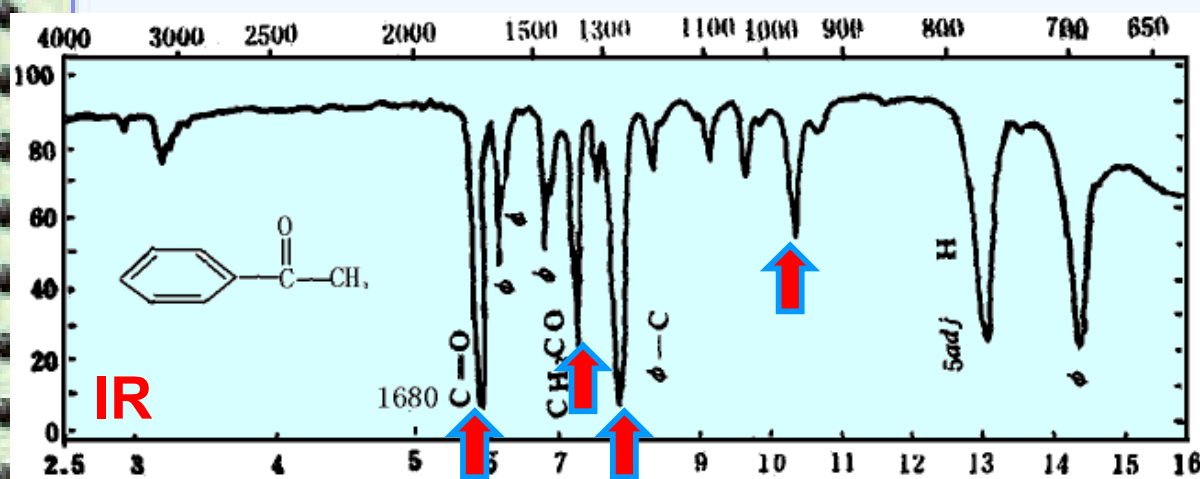
□ 选择性——定性

□ 依据的信息：分子内部原子间的相对振动及分子转动的特征信息。

辐射→分子振动能级跃迁→红外吸收光谱→官能团→分子结构



# UV-Vis与IR的比较



	IR	UV-Vis
光谱产生	分子振动能级的跃迁	分子电子能级的跃迁
光谱图	多为尖峰，谱图复杂，有高度特征性，横坐标多为波数	多为宽峰，谱图简单，特征性不明显，横坐标多为波长。
研究对象	有机物特征官能团的结构信息	不饱和化合物，尤其是有共轭体系的有机物
分析功能	既定定性又定量，结构分析，非破坏性分析。定性能力较强，定量灵敏度较低	既定定性又定量，有时是试样的破坏性分析。

## 3.2 红外吸收光谱产生的条件

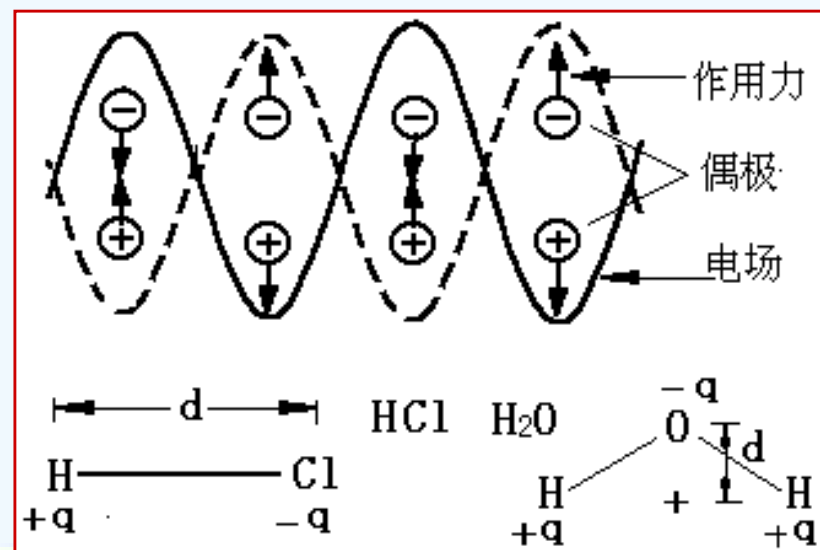
满足两个条件：

(1) 红外辐射能量**刚好**等于振动跃迁所需的能量；

$$\begin{aligned}\Delta E_{\text{分子}} &= \Delta E_{\text{振动}} + \Delta E_{\text{转动}} \\ &= h(\nu_{\text{振动}} + \nu_{\text{转动}}) \\ &= hc / (\lambda_{\text{振动}} + \lambda_{\text{转动}})\end{aligned}$$

(2) 辐射与分子间有相互偶合作用，即要求分子振动时偶极矩 ( $\mu=qd$ ) 必须发生变化 ( $\Delta\mu\neq 0$ )。

$\Delta\mu\neq 0$  红外活性振动  
 $\Delta\mu=0$  红外非活性振动



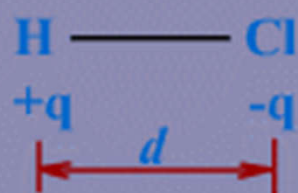


# 分子产生红外吸收光谱的条件



1. 辐射应具有能满足物质产生振动跃迁所需的能量；
2. 辐射与物质间有相互偶合作用。

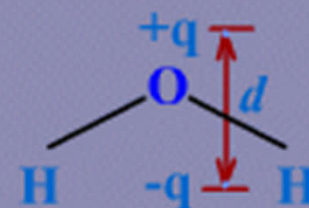
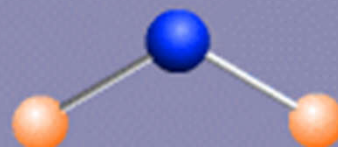
对称分子：无偶极矩，辐射不能引起共振，无红外活性。



HCl分子



H<sub>2</sub>O分子



辐射1



辐射2



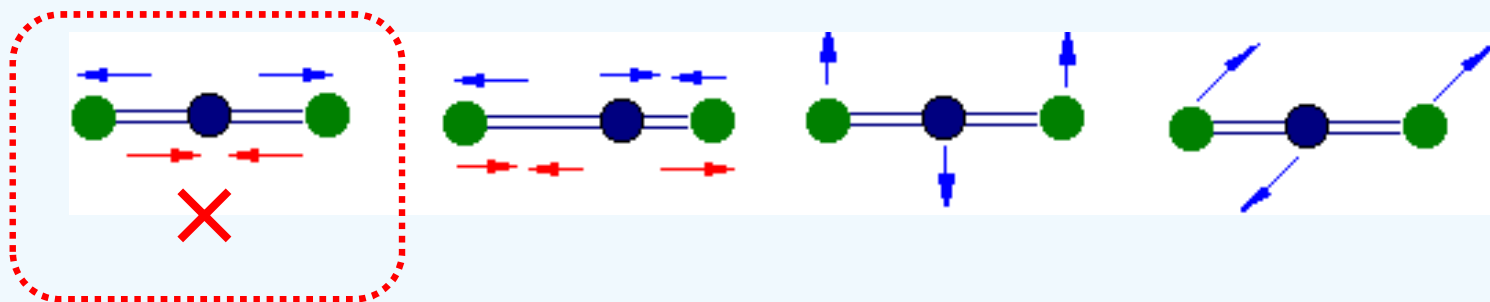
无辐射

- **对称双原子分子：** 没有偶极矩变化的振动跃迁，辐射不能引起共振，无红外活性。

如：单原子分子，同核分子， $\text{N}_2$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{Cl}_2$  等，无红外活性。

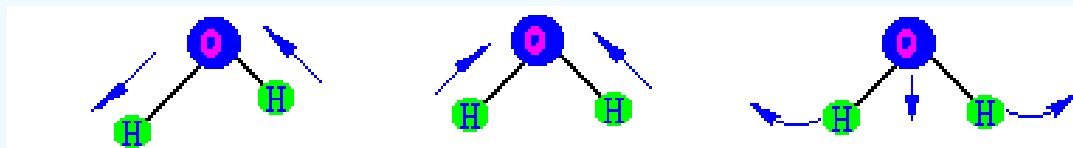
- **对称多原子分子：** 没有偶极矩，但分子的非对称性振动可以产生偶极矩变化，有红外活性。

如：  $\text{CO}_2$

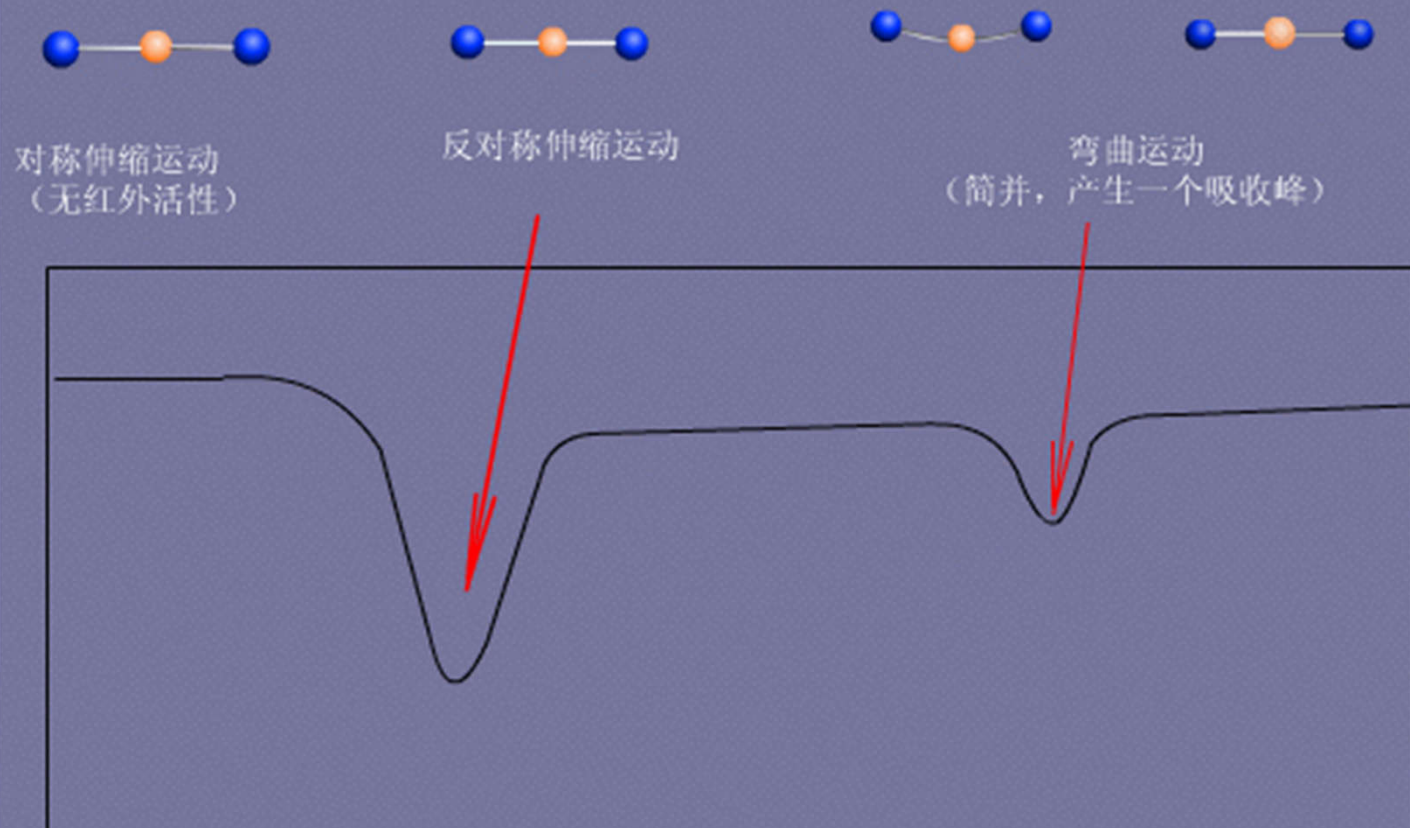


- **非对称分子：** 有偶极矩，有红外活性。

如：  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{HCl}$

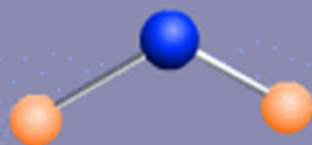


## CO<sub>2</sub>四种振动方式

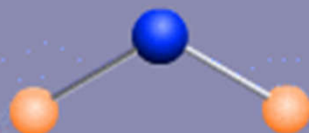




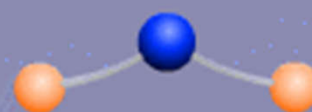
## 水分子的红外吸收与振动类型



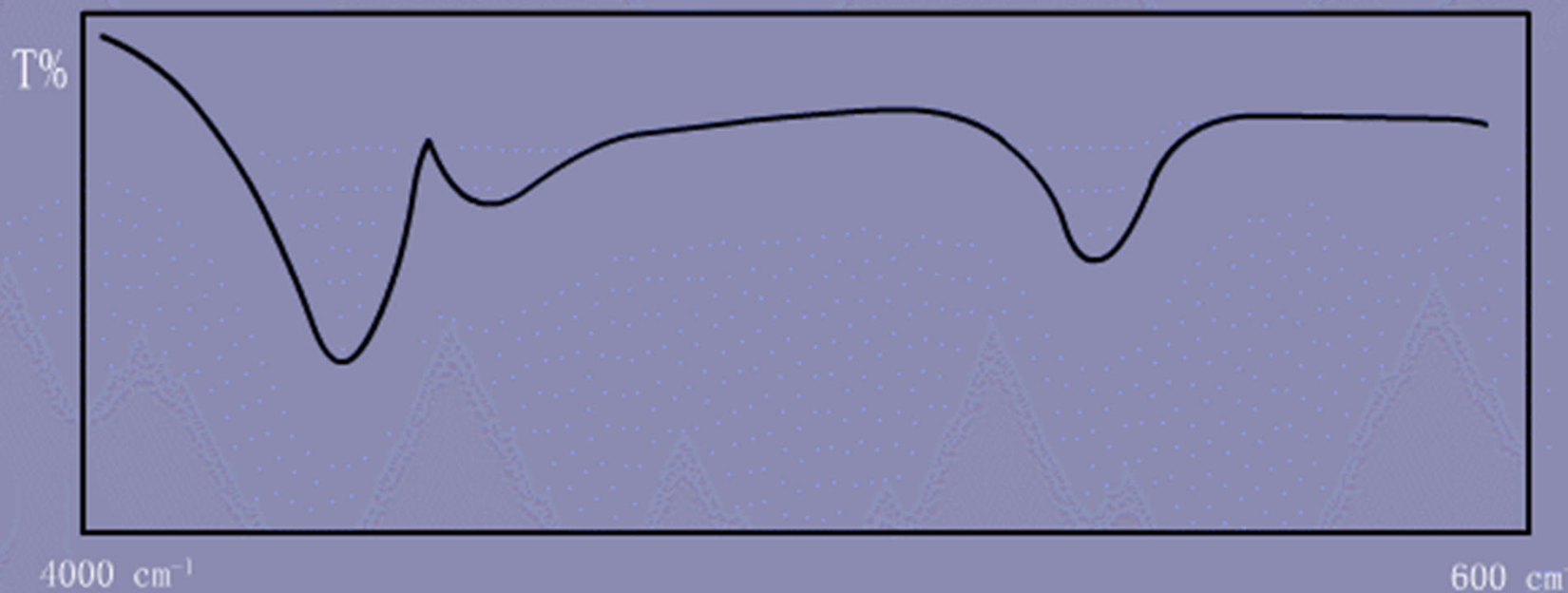
伸缩振动  
(反对称)



伸缩振动  
(对称)



变形振动



### 3.3 分子振动方程及形式

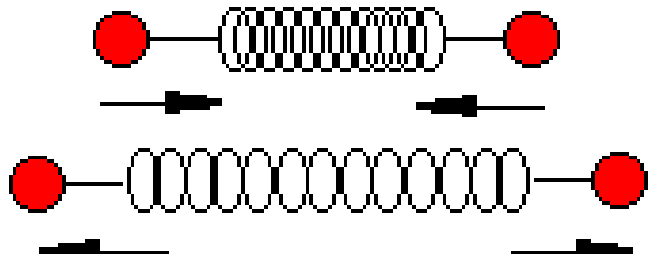
# 分子中基团的基本振动形式

## 1、双原子分子的振动

双原子分子中两个原子以平衡点为中心，以较小的振幅作周期性**伸缩振动**。可以近似看成**沿键轴方向**的简谐振动。

**分子振动方程式：**双原子分子的简谐振动及其频率

化学键的振动类似于连接两个小球的弹簧



虎克定律

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

**Hooke**定律推导出任意两个相邻的能级间的能量差为：

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

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} \Rightarrow \sigma \text{ (波数, cm}^{-1}\text{)} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = 1302 \sqrt{\frac{k}{A_r}}$$

**$k$** ：化学键的力常数，指将两个原子由平衡位置伸长至单位长度时的恢复力，与键能和键长有关；

**$\mu$** ：为双原子的折合质量  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$

振动能级跃迁能量：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。

键类型  
力常数  
(毫达因/埃)  
峰位 ( $\text{cm}^{-1}$ )

$-\text{C}\equiv\text{C}-$	$>$	$-\text{C}=\text{C}-$	$>$	$-\text{C}-\text{C}-$	$>$	$-\text{C}-\text{H}-$
15		10		5		5.1
2062		1683		1190		2920

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，可以通过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。
- ❑ 实际上，原子间的距离是随着振动改变的，化学键力常数也会改变，分子的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。



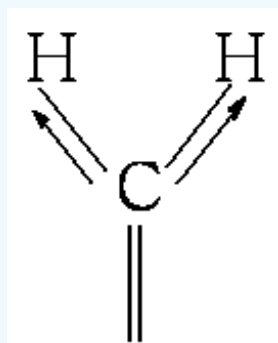
## 2、多原子分子的振动

两类基本振动形式：伸缩振动和弯曲振动

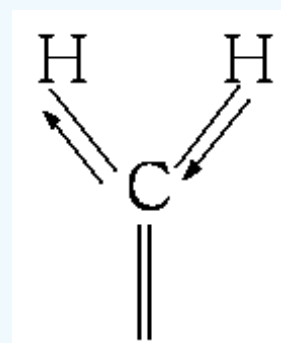
(1) 伸缩振动：原子沿键轴方向伸缩。

化学键键长改变，键角不变。

➤ 分为对称伸缩振动  $\nu_s$  和不对称伸缩振动  $\nu_{as}$ 。



对称



不对称

➤  $\nu_{as}$  产生的吸收峰波数高于  $\nu_s$  产生的吸收峰波数。

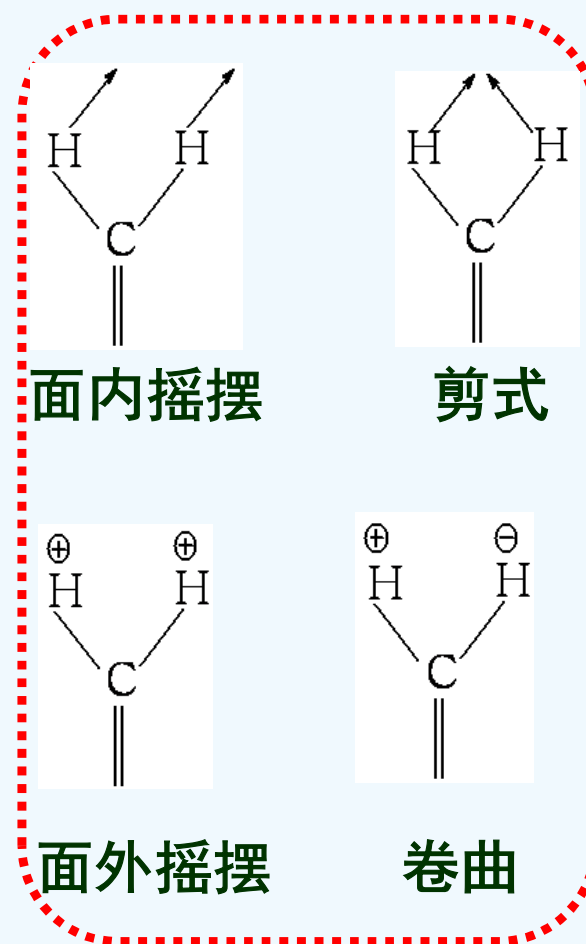
(2) 弯曲振动（变形振动）：分子发生原子间的相对振动运动时，如果基团的化学键键角/二面角改变而键长不变，这种运动称为弯曲振动。

弯曲振动分为面内弯曲  $\beta$  和面外弯曲  $\gamma$

①面内弯曲振动  $\beta$ ：面内摇摆振动  $\rho$ 、剪式振动  $\delta$

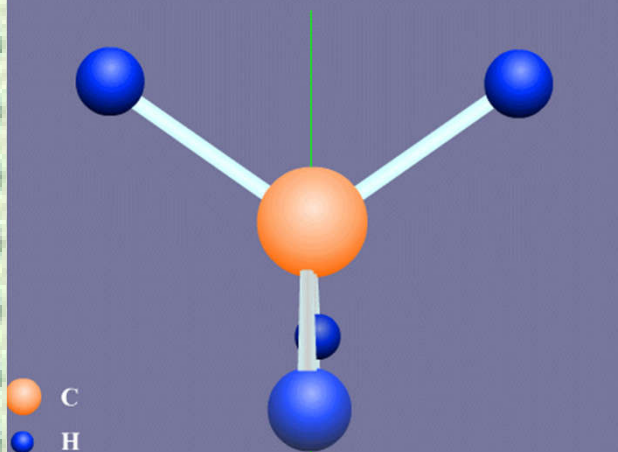
②面外弯曲振动  $\gamma$ ：面外摇摆振动  $\omega$ 、扭曲振动  $\tau$

➤ 弯曲振动的  $k$  比伸缩振动  $k$  小，对于同一基团而言，弯曲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



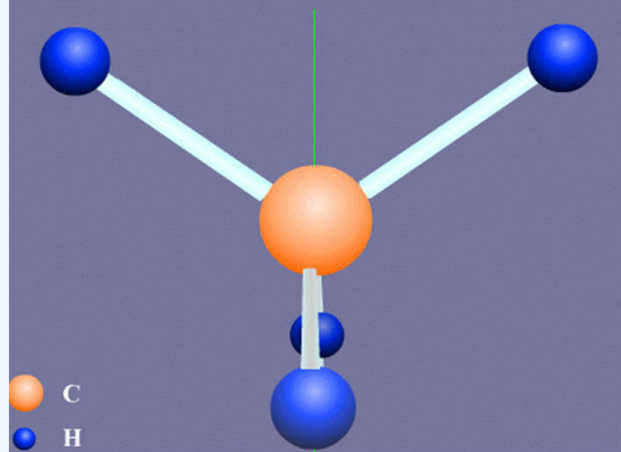
# 分子中基团的基本振动形式

分子的基本振动形式



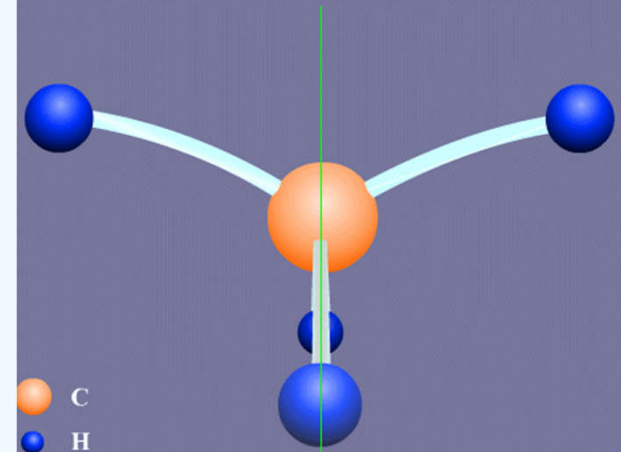
对称伸缩振动  $\nu_s$

分子的基本振动形式



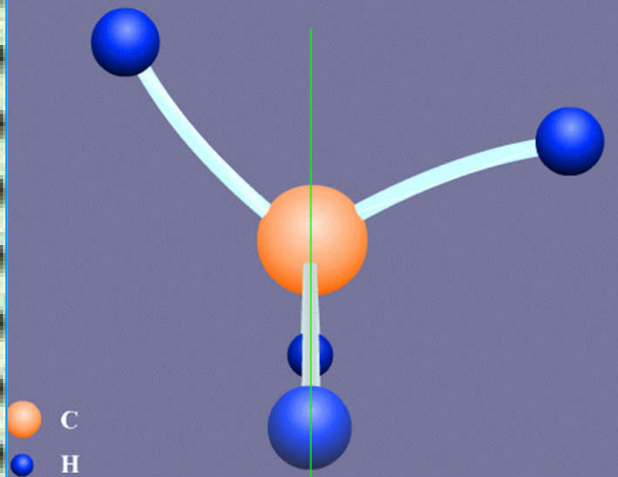
不对称伸缩振动  $\nu_{as}$

分子的基本振动形式



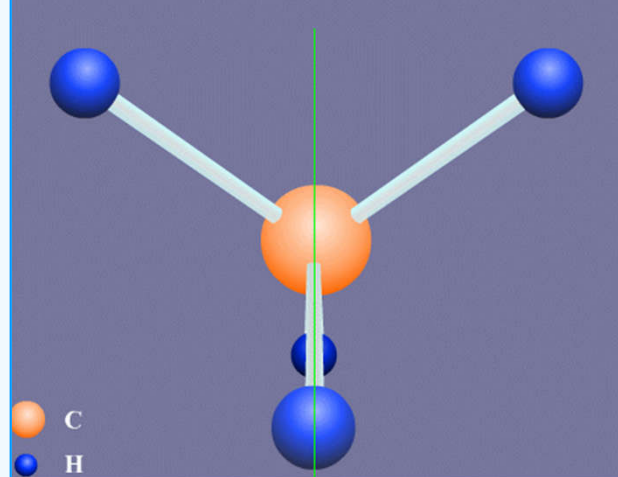
剪式振动  $\delta$  (面内)

分子的基本振动形式



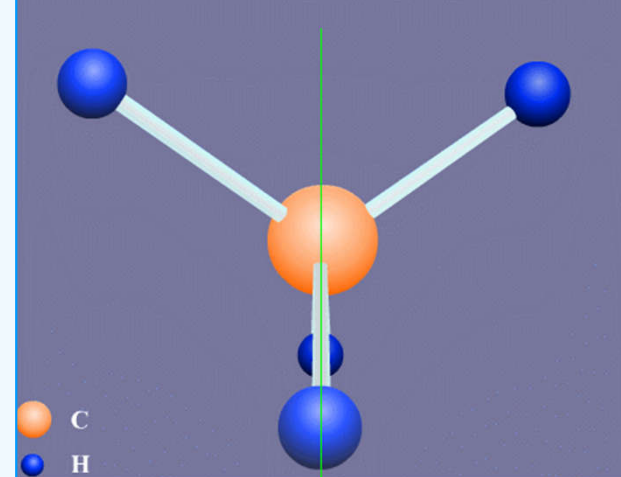
面内摇摆振动  $\rho$

分子的基本振动形式



面外摇摆振动  $\omega$

分子的基本振动形式

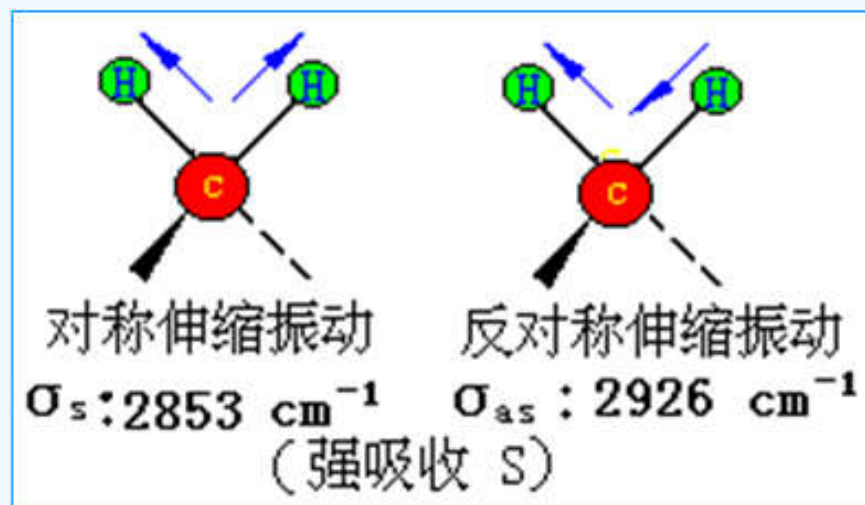


扭曲振动  $\tau$  (面外)

# 分子中基团的基本振动形式

伸缩振动

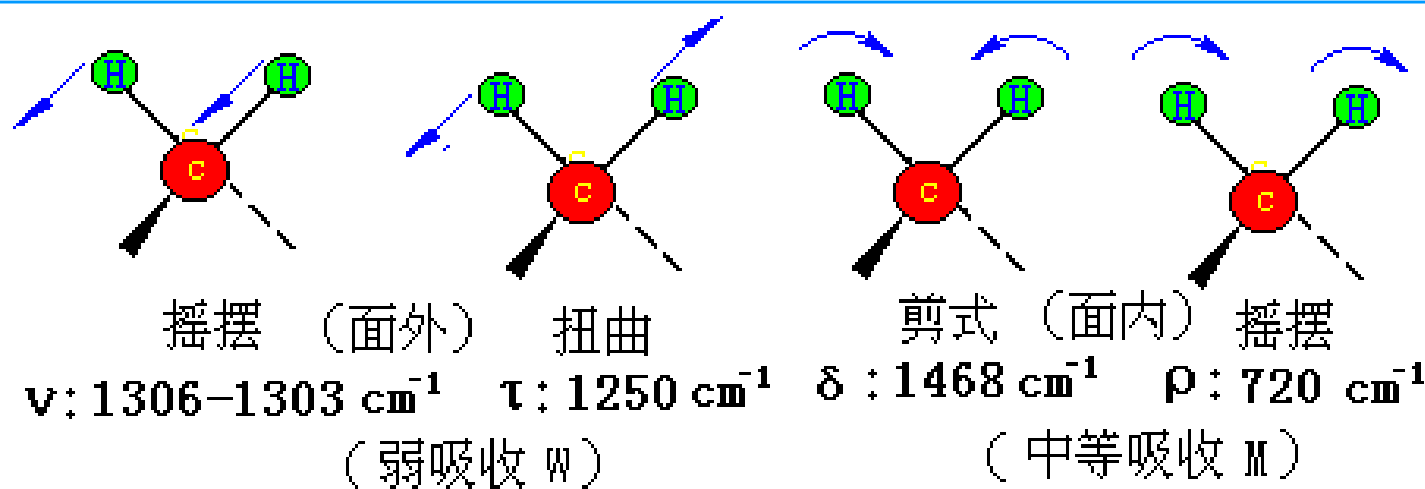
亚甲基:  $-\text{CH}_2-$



弯曲振动

亚甲基:

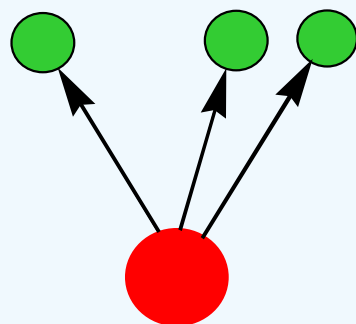
$-\text{CH}_2-$



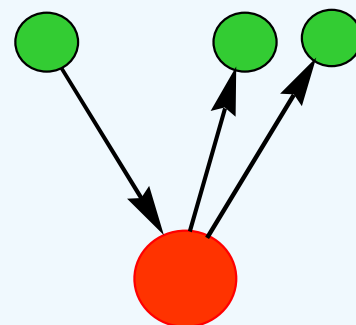
# 分子中基团的基本振动形式

伸缩振动

甲基:



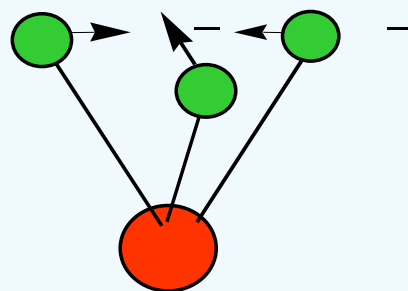
对称  
 $\nu_s(\text{CH}_3)$   
 $2870\text{cm}^{-1}$



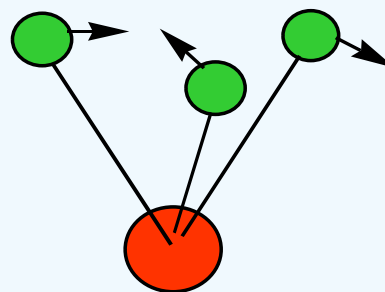
不对称  
 $\nu_{as}(\text{CH}_3)$   
 $2960\text{cm}^{-1}$

弯曲振动

甲基:



对称  $\delta_s(\text{CH}_3) 1380\text{cm}^{-1}$



不对称  $\delta_{as}(\text{CH}_3) 1460\text{cm}^{-1}$



# 振动自由度

分子基本振动的数目，即分子的独立振动数。

注意：分子平动能量改变不产生光谱，而转动能量级跃迁产生的远红外光谱超出中红外光谱的研究范围，因此应该扣除这两种运动形式。

对于由N个原子组成的分子：

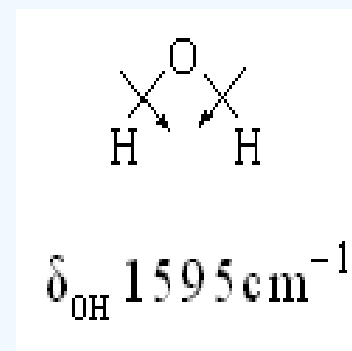
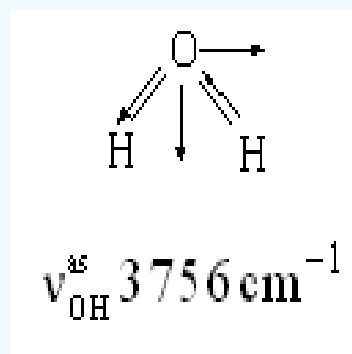
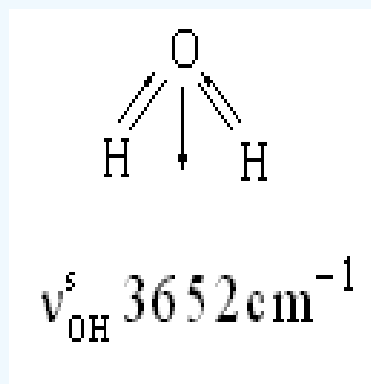
振动自由度

$f = 3N$ （运动自由度）—平动自由度—转动自由度

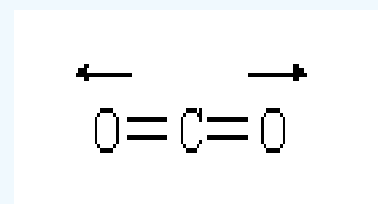
线性分子振动自由度  $f = 3N - 5$

非线性分子振动自由度  $f = 3N - 6$

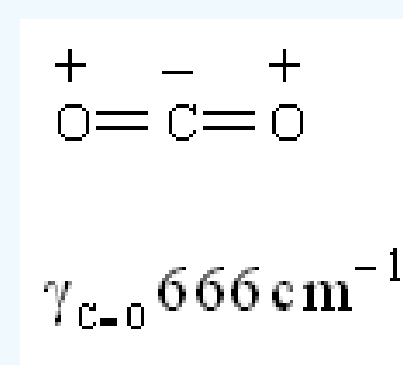
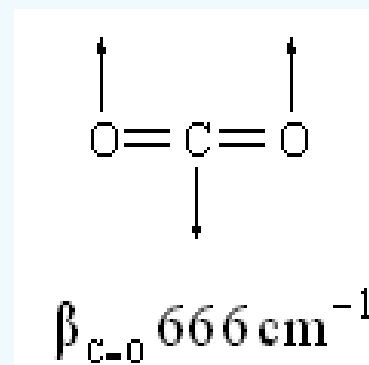
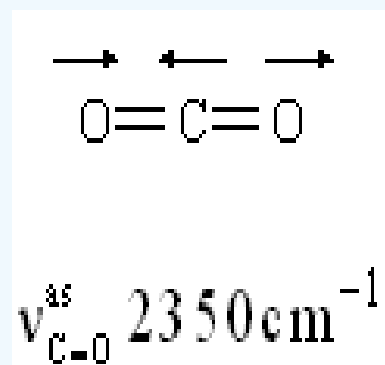
例如，水为非线型分子，振动自由度 $=3N-3-3=3$ ，说明水分子有3种基本振动形式

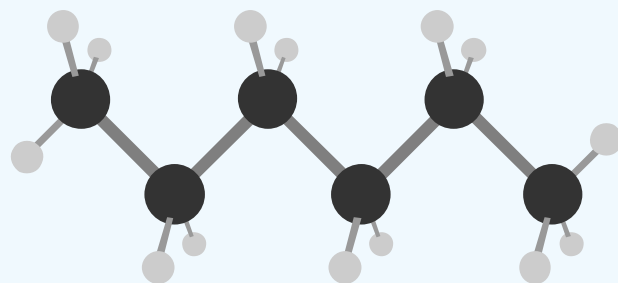


又如， $\text{CO}_2$ 为线型分子，振动自由度 $=3N-3-2=4$ ，说明 $\text{CO}_2$ 有4种基本振动形式



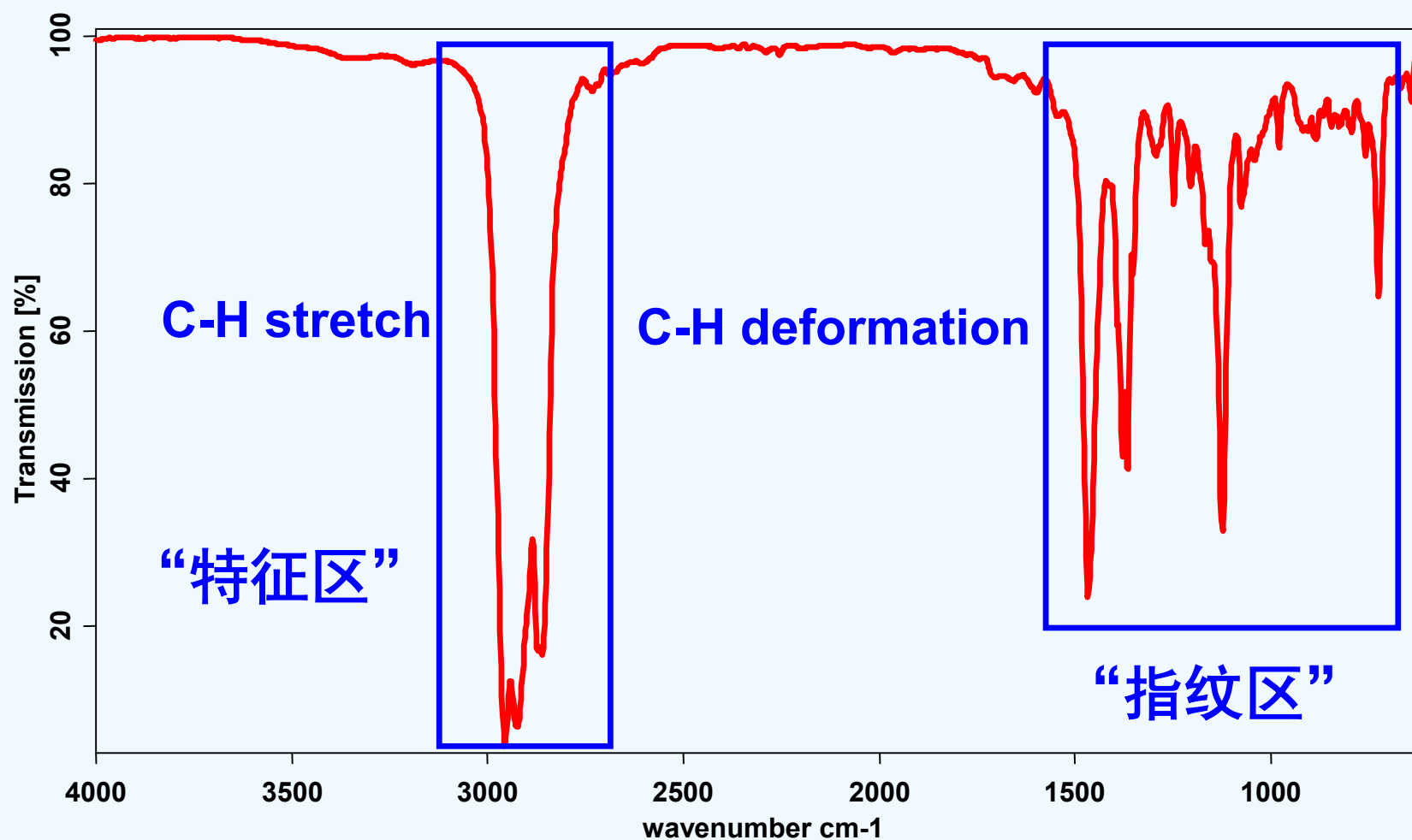
对称**伸缩**  
(无吸收峰)



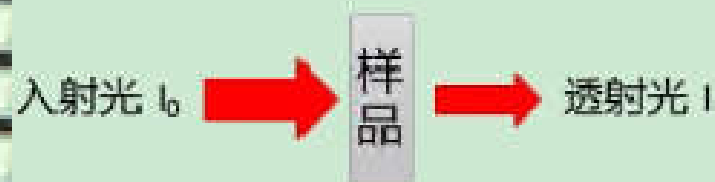


**$C_6H_{14}$  正己烷**

**50多种不同的振动**



# 红外光谱的一般形式

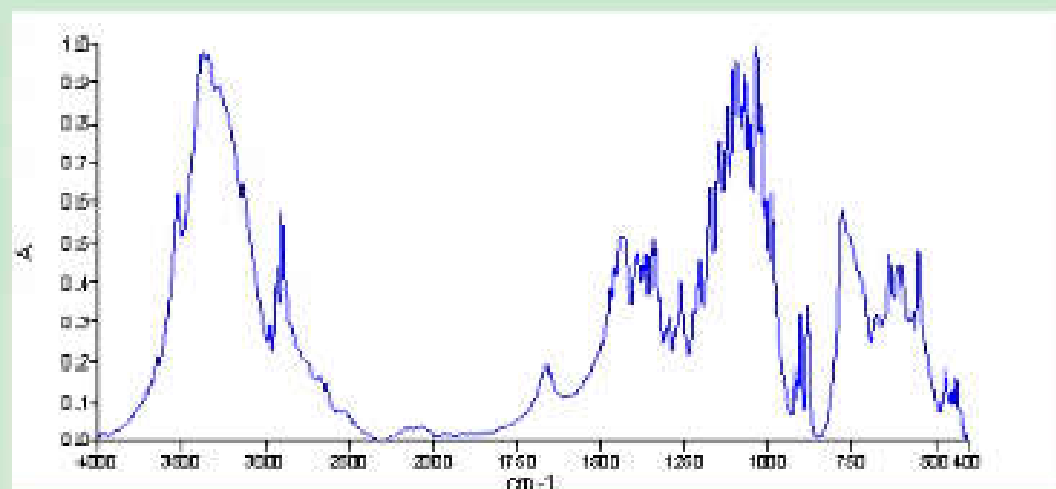
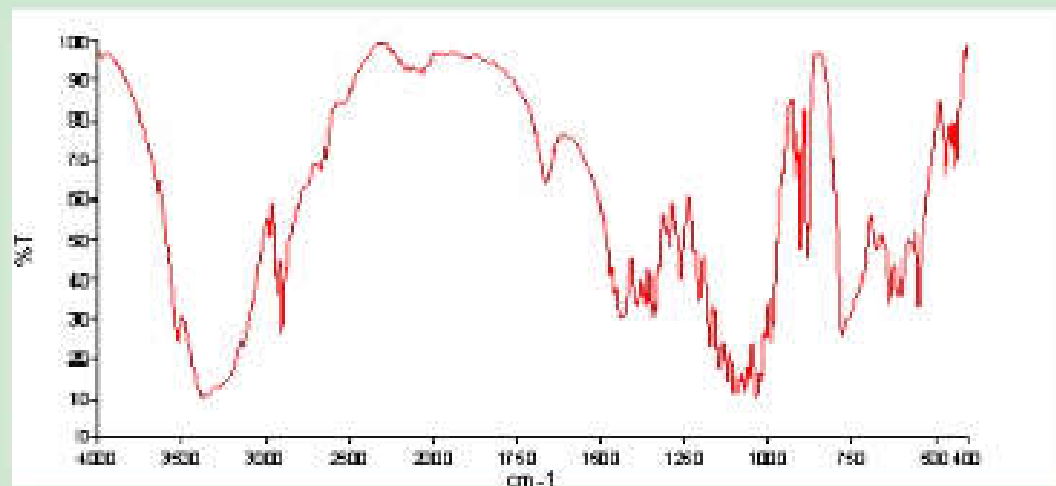


透过率

$$T = \frac{I}{I_0} \times 100\%$$

吸光度

$$A = \lg\left(\frac{1}{T}\right) = \lg\left(\frac{I_0}{I}\right)$$



## 3.4 红外光谱的特征性、 基团频率



# 吸收峰的位置

- (1) 基频峰和泛频峰
- (2) 特征区和指纹区

# 基频峰和泛频峰

● **基频峰**：分子吸收一定频率的红外线，由振动基态( $V=0$ )跃迁至**第一激发态( $V=1$ )**时，所产生的吸收峰。位置规律性比较强且强度比较大，在红外光谱上较容易识别。

● **倍频峰**：吸收一定频率的红外线后，分子振动能级由基态( $V=0$ )跃迁至**第二激发态( $V=2$ )**、**第三激发态( $V=3$ )**等所产生的吸收峰，分别称为二倍频峰、三倍频峰等。总称这些吸收峰为倍频峰。

● **差频峰**：有些弱峰还由**两个或多个基频峰频率的和或差**产生， $\nu_1 + \nu_2 \dots$ 峰称为**合频峰**， $\nu_1 - \nu_2 \dots$ 峰称为**差频峰**。

● **泛频峰**：**倍频峰、合频峰及差频峰统称为泛频峰**。泛频峰多数为弱峰，一般在图谱上不易辨认。但增加了光谱特征性。

# 特征区和指纹区

## 1.特征区： $4000\sim1300\text{cm}^{-1}$ ， $2.5\sim7.69\mu\text{m}$

化学键和基团的特征振动频率区，吸收峰较稀疏，易辨认，每一个吸收峰都和一定的基团相对应，一般可用于**鉴定官能团的存在**。

## 2.指纹区： $1300\sim400\text{cm}^{-1}$ ， $7.69\sim25\mu\text{m}$

吸收峰的特征性强，可用于**区别不同化合物结构上的微小差异**。吸收峰强度和位置相似，相互干扰较大，再加上各种弯曲振动的能级差小，吸收峰密集、复杂多变、不容易辨认。

# 两区域法的分区及其作用

区域	吸收峰类型	作用	特征
特征区 4000-1300cm <sup>-1</sup>	氢单键的伸缩振动峰	①确定化合物具有哪些基团； ②确定化合物的类别	吸收峰比较稀疏，容易辨认
	各种叁键、双键的伸缩振动峰		
	部分氢单键的面内弯曲振动峰		
指纹区 1300-400cm <sup>-1</sup>	各种单键的伸缩振动峰	①某些特征峰及大量相关峰作为确定基团的旁证； ②确定化合物的细微结构	吸收峰密集、多变且复杂，能够反映各化合物微小差异，可与标准图谱或已知物谱图进行对比分析
	多数基团的面外弯曲振动峰		

# 特征峰

- 特征峰：用于鉴别化学键或基团存在的吸收峰。

例： 2800 ~ 3000  $\text{cm}^{-1}$   $-\text{CH}_3$  特征峰；

1600 ~ 1850  $\text{cm}^{-1}$   $-\text{C}=\text{O}$  特征峰；

基团所处化学环境不同，特征峰出现位置变化：

$-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_2-$       1715  $\text{cm}^{-1}$       酮

$-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{O}-$       1735  $\text{cm}^{-1}$       酯

$-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}-$       1680  $\text{cm}^{-1}$       酰胺



# 基团吸收带数据

基团吸收带数据

特征吸收带 (伸缩振动)	含氢化学键	活泼氢	O — H	3 6 3 0
			N — H	3 3 5 0
			P — H	2 4 0 0
			S — H	2 5 7 0
		不饱和氢	$\equiv$ C — H	3 3 3 0
			A r — H	3 0 6 0
			= C — H	3 0 2 0
		饱和氢	— C H <sub>3</sub>	2 9 6 0 , 2 8 7 0
			$\diagup$ C H <sub>2</sub>	2 9 2 6 , 2 8 5 3
			$\diagdown$ C H	2 8 9 0
	三键	三键	C $\equiv$ C	2 0 5 0
			C $\equiv$ N	2 2 4 0
		双键	R <sub>2</sub> C = O	1 7 1 5
			R H C = O	1 7 2 5
			C = C	1 6 5 0
			C — O	1 1 0 0
		伸缩振动	C — N	1 0 0 0
			C — C	9 0 0
			C — C — C	< 5 0 0
			C — N — O	≈ 5 0 0
			H — C = C — H	9 6 0 (反)
			R — A r — H	6 5 0 — 9 0 0
			H — C — H	1 4 5 0
指纹吸收带	变形振动			

## 3.5 影响基团频率位移的因素

# 影响峰位变化的因素

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。相同基团的特征吸收并不总在一个固定频率上。

## 1. 内部因素

**诱导效应：** 吸电子基团使吸收峰向高波数（短波）方向移动（蓝移）

**共轭效应：**  $\pi-\pi$  共轭使吸收峰向低波数（长波）方向移动（红移）

**氢键效应：** （分子内；分子间）：红移，峰强度增加，峰形变宽

**空间效应：** 蓝移

**环张力效应：** 蓝移

## 2. 外部因素

## 1) 物质状态及制样方法

通常，物质由固态向气态变化，其波数将增加。

**如：丙酮                  液态时： $\nu_{C=O}=1718\text{cm}^{-1}$ ;**

**气态时:**  $\nu_{C=O}=1742\text{cm}^{-1}$ ,

**因此在查阅标准红外图谱时，应注意试样状态和制样方法。**

## 2) 溶剂效应

**极性基团的伸缩振动频率通常随溶剂极性增加而降低。**

如：羧酸中的C=O:

**气 态:  $\nu_{\text{C=O}}=1780\text{cm}^{-1}$**

**非极性溶剂:  $\nu_{C=O}=1760\text{cm}^{-1}$**

乙醚 溶剂:  $\nu_{C=O}=1735\text{cm}^{-1}$

乙醇溶剂:  $\nu_{C=O}=1720\text{cm}^{-1}$

**因此红外光谱通常需在非极性溶剂中测量。**

## 3.6 红外光谱定性和定量分析

## 一、定性分析

### 1. 已知物及其纯度的定性鉴定

在得到样品的红外谱图后，与纯物质的红外谱图对照比较，如果各吸收峰的位置与强度基本一致，就可以认为样品就是该种物质。

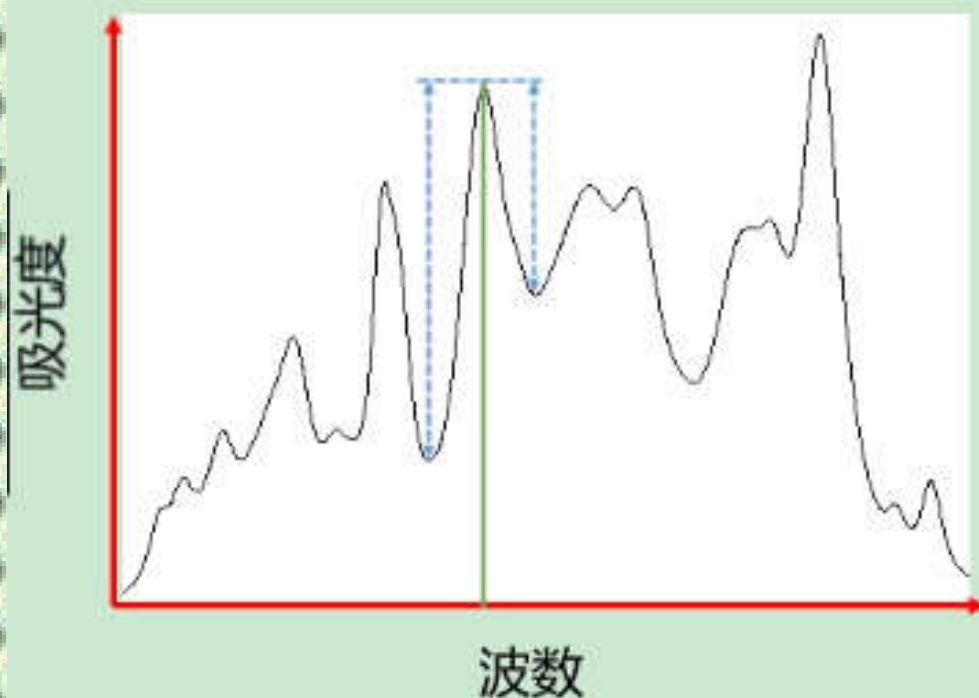
**红外吸收峰对于手性异构体、烷基链的长度区别不是很明显。**

### 2. 红外光谱标准谱图集

- ✚ **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
- ✚ **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。
- ✚ **“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。



## 红外光谱的吸收峰



## 红外光谱解析三要素

位置

$$\nu = (E_m - E_n) / h$$

强度

$$A = \varepsilon \cdot c \cdot l$$

形状

$$A(\bar{\nu}) = \alpha \cdot \exp \left[ \frac{-4 \ln 2 \cdot (\bar{\nu} - \bar{\nu}_0)^2}{\gamma_G^2} \right] + \beta \cdot \frac{\gamma_L^2}{\gamma_L^2 + 4(\bar{\nu} - \bar{\nu}_0)^2}$$



### 3. 未知物结构的测定

结构的测定基本步骤：

- ❖ 充分收集与运用与样品有关的资料与数据  
样品的来源、外观、纯度  
样品的元素分析结果  
样品的物理性质：分子量、沸点、熔点、折光率等
- ❖ 确定未知物的不饱和度：根据样品的元素分析结果得到未知物的分子量与化学式计算未知物的不饱和度

$$\text{C}_{n_4}\text{H}_{n_1}\text{O}_{n_2}\text{N}_{n_3}\text{P}_{n_5}\text{S}_{n_6} \quad U = 1 + n_4 + \frac{n_3 - n_1}{2} + \frac{3}{2}n_5 + 2n_6$$

$$\text{C}_{n_4}\text{H}_{n_1}\text{O}_{n_2}\text{N}_{n_3} U = 1 + n_4 + \frac{n_3 - n_1}{2}$$

注意：二价的O、S不参与计算

$U=0$  分子呈饱和状态；

$U=1$  分子含一个双键或一个饱和环；

$U=2$  分子含一个三键、或两个双键、或两个饱和环、或一些组合；

$U=3$  . . . .

$U=4$  分子含三个双键和一个饱和环--苯、或以上组合。

#### ❖ 谱图解析

确定分子所含基团或键的类型

推定分子结构：分子式

分子结构的验证

## 二、定量分析

### 1. 定量分析的影响因素

**有利因素：**红外吸收峰多，选择的余地大；

**不利因素：**摩尔吸光系数小，灵敏度低；

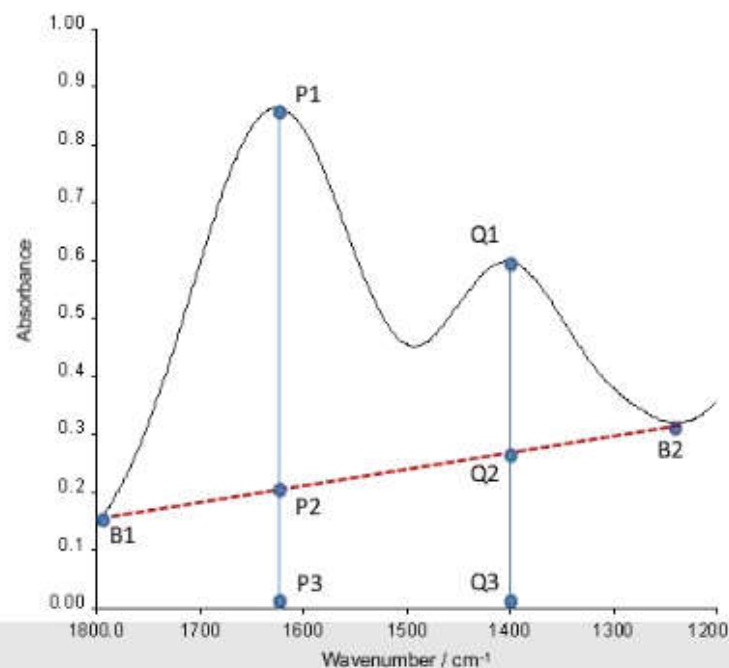
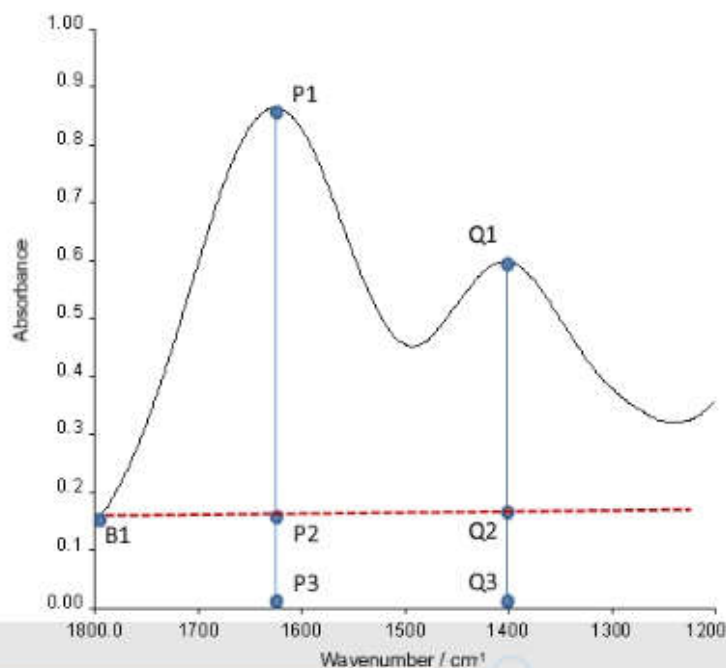
吸收光程较难控制，测量误差大；

吸收峰受化学环境、溶剂效应的影响较大。

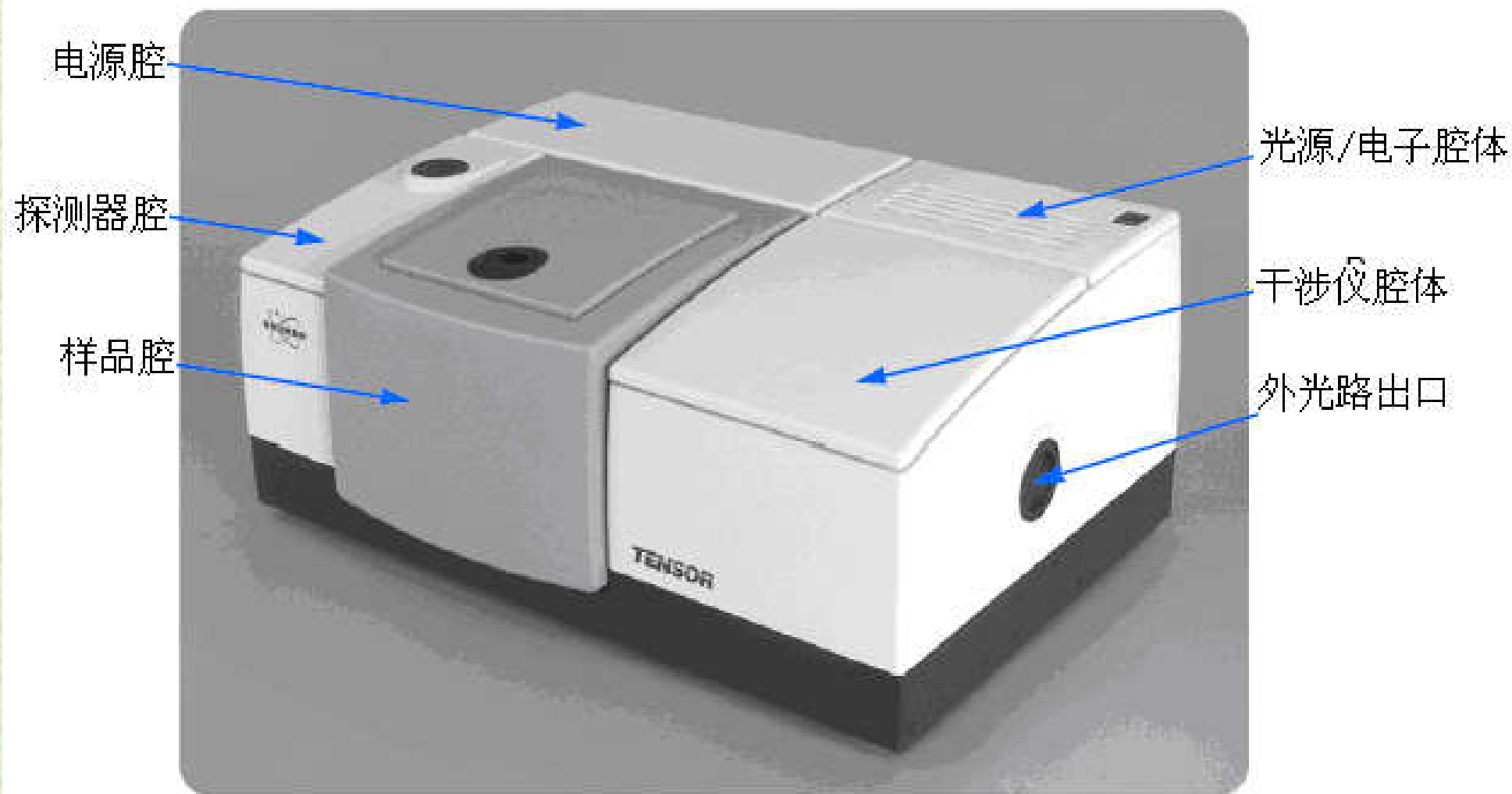
### 2. 定量分析的依据

同紫外-可见吸收光谱法

峰强度：基线选择



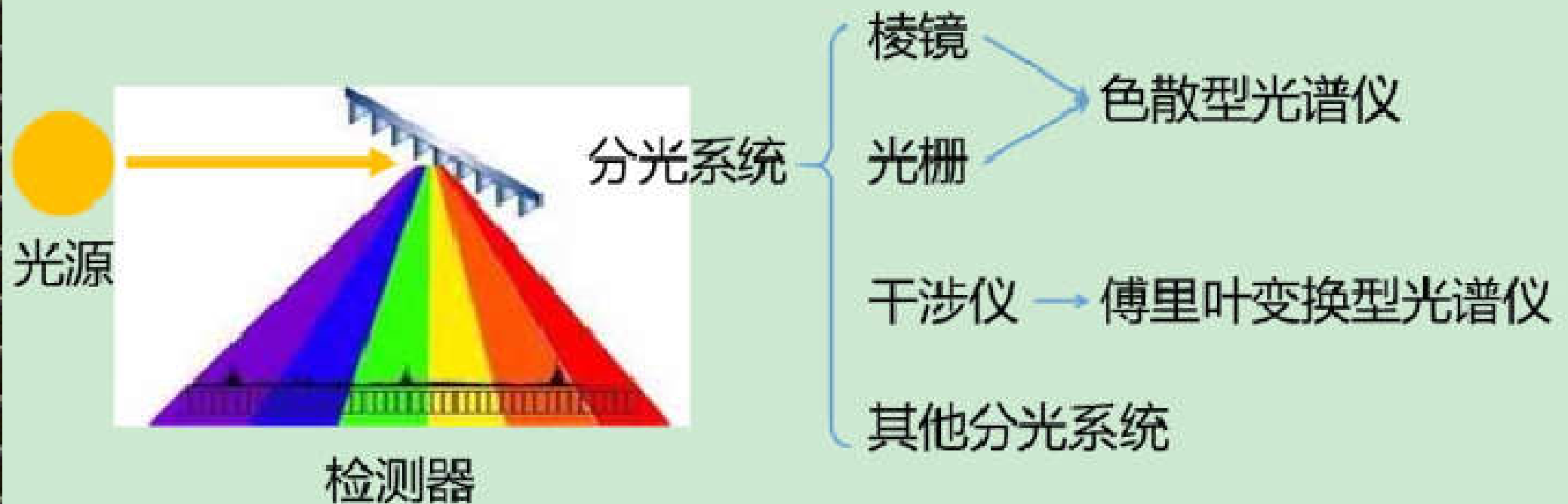
## 3.7 红外吸收光谱仪



# 仪器类型与结构

两种类型：色散型

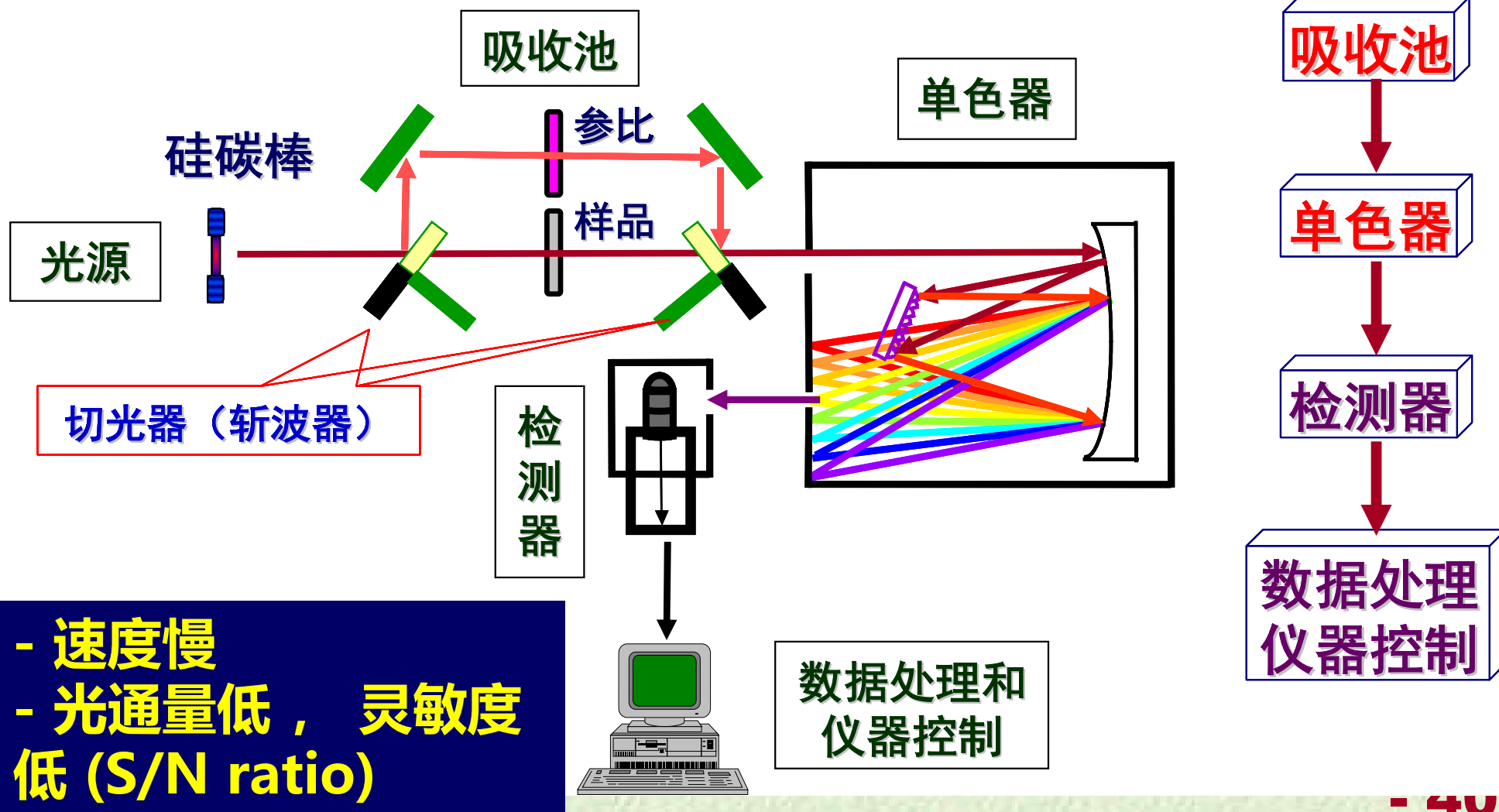
干涉型（傅立叶变换红外光谱仪）



# 红外吸收光谱仪

## 色散型红外吸收光谱仪的基本组成

### 组成结构框图

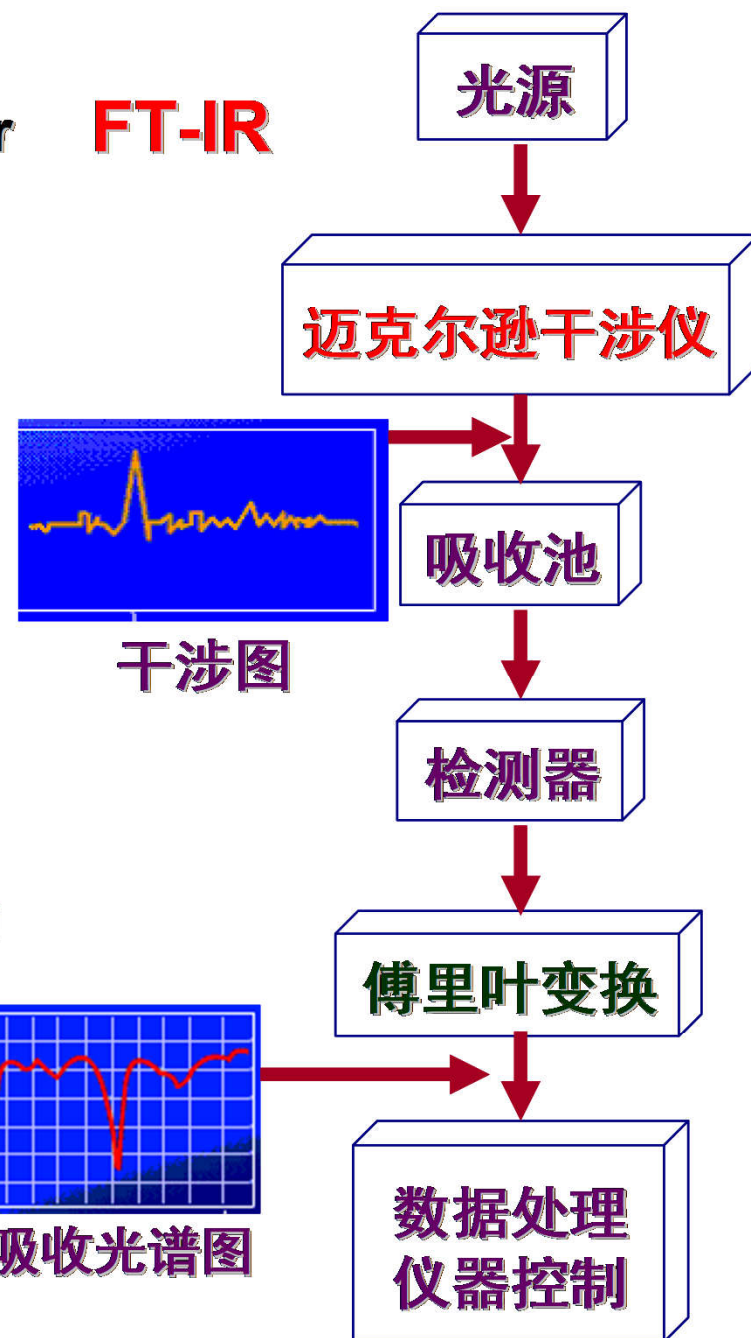
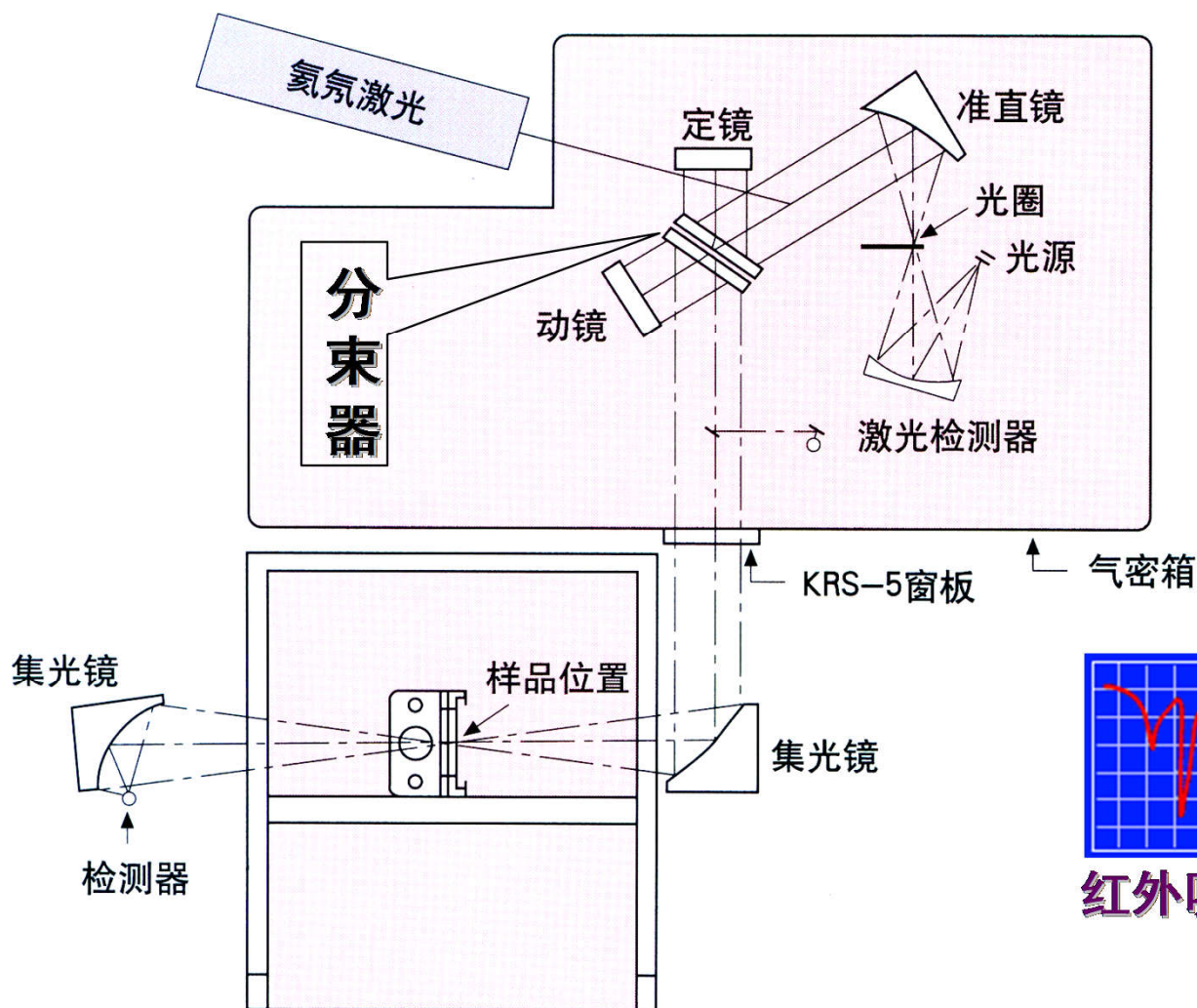




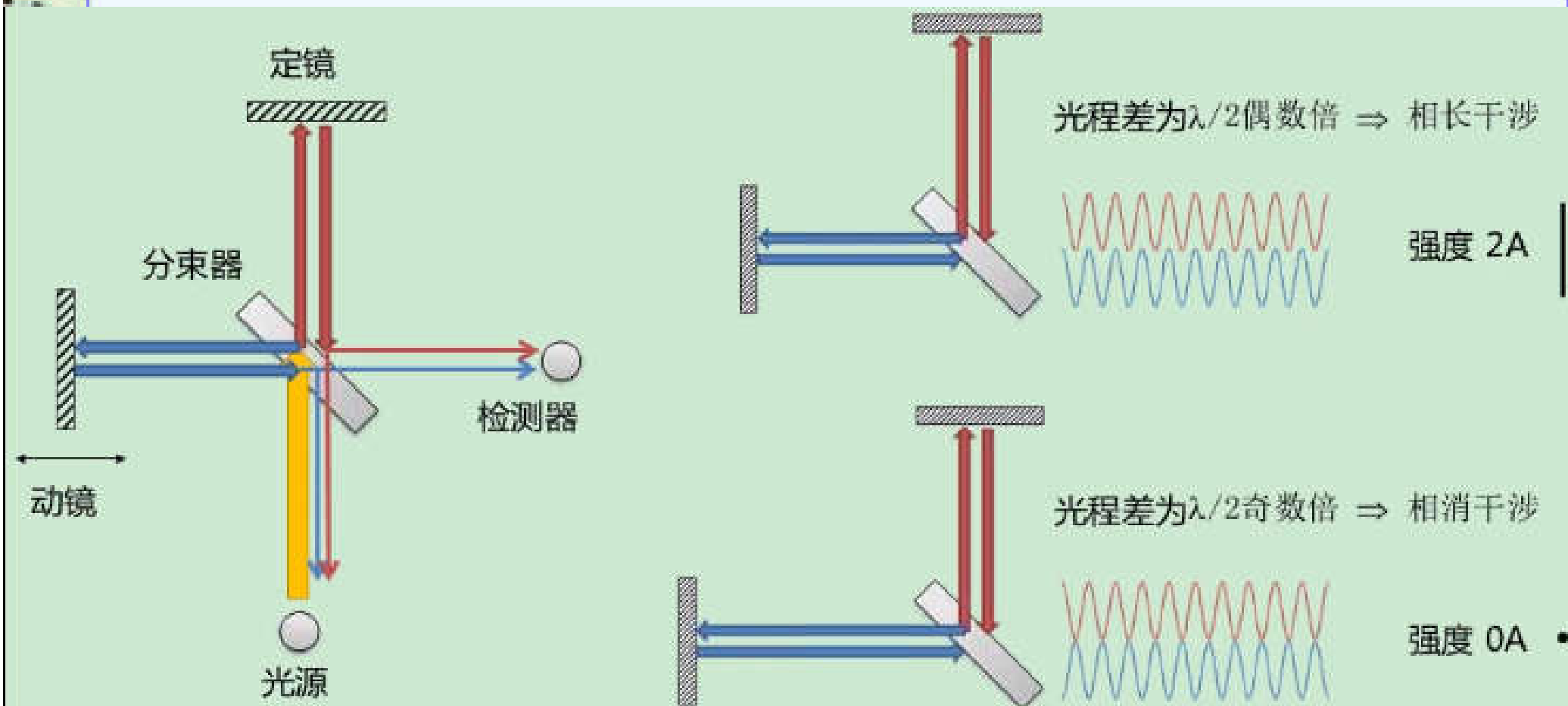
# 傅里叶变换红外吸收光谱仪简介

Fourier Transform Infrared Spectrometer **FT-IR**

## 组成结构框图及工作原理



# 迈克尔干涉仪工作原理图



干涉仪对辐射频率的调制



# 傅立叶变换红外光谱仪特点

**测量时间短：**在不到一秒钟的时间内可以得到一张谱图，比色散型光栅仪器快数百倍；可以用于GC-IR联用分析。

**分辨率高：**波数精度达到 $0.01\text{cm}^{-1}$ 。

**测量精度高：**重复性可达0.1%。

**杂散光小：**小于0.01%。

**灵敏度高：**在短时间内可以进行多次扫描，多次测量得到的信号进行累加，噪音可以降低，灵敏度可以增大， $10^{-9}\sim 10^{-12}\text{g}$ 。

**测定光谱范围宽：** $10000\sim 10\text{cm}^{-1}$ ， $1\sim 1000\text{ }\mu\text{m}$ 。

## 3.8 红外吸收光谱分析 实验技术

# 一、试样的制备

## 1、固体样品

- (1) 压片法
- (2) 糊剂法
- (3) 薄膜法

## 2、液体样品

- (1) 液体池法
- (2) 液膜法

## 固体样品

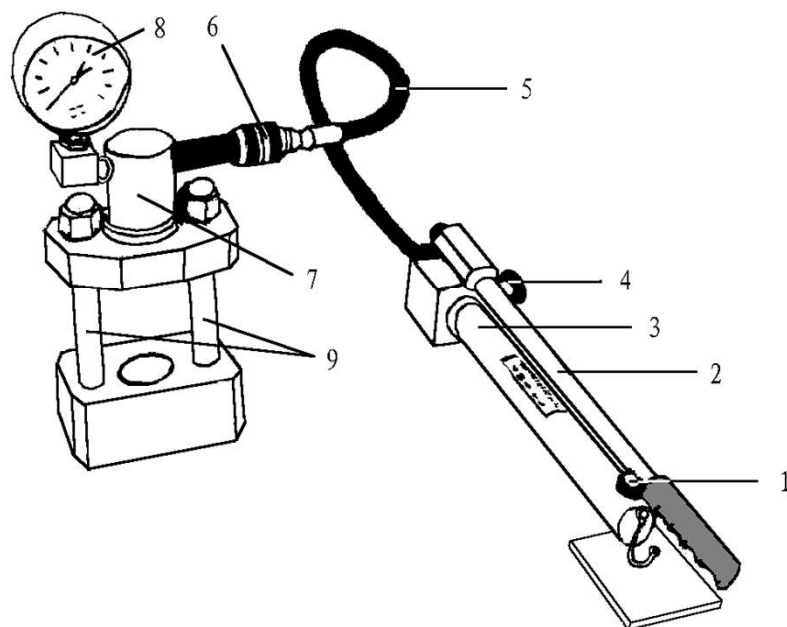
### 1. 压片法 **光散射现象较严重**

**KCl、KBr在加压下呈现所谓冷胀现象并变为可塑物，在中红外光区完全透明，因此常用作固体样品的稀释剂。**

**稀释剂的比例：样品/稀释剂 $\approx$  1/100**

**稀释剂的要求：纯度高、粒度小于 $2.5\mu\text{m}$ 、不含水分。**

**油压机压力： $5\sim 10\times 10^7\text{Pa}$  ( $5\sim 10\text{t/cm}^2$ )；加压同时要抽去空气。**



# 压片法

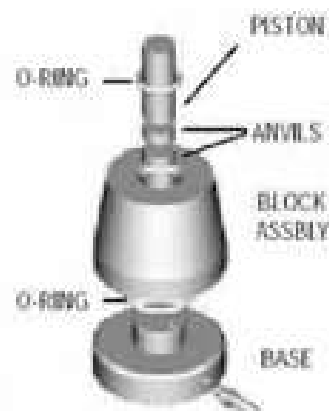
溴化钾



玛瑙研钵



压片模具



液压砧



手持式压片机



手动液压压片机



自动液压压片机



图片来源 [www.specac.com](http://www.specac.com) [www.piketech.com](http://www.piketech.com)

## 2. 糊状法      减少了光散射现象

选取与试样的折射率相近的液体分散介质与固体粉末混合研磨制成糊膏，涂在KBr盐片上，用分散剂作为本底测定。

固体有机化合物的折射率一般在1.5~1.6。

常用的液体分散介质：

液体石蜡油( $n_d=1.46$ )、六氯丁二烯( $n_d=1.55$ )、氟化煤油

这些液体分散介质自身也有各自的吸收峰。

## 3. 薄膜法 (10~50 $\mu\text{m}$ )

常用于高分子有机化合物的测定。

**熔 融 法：**对于熔点较低，而且热稳定性好的样品，可以采用此法。

**溶液成膜法：**将试样溶解于沸点较低的溶剂中，然后将溶液分布在成膜介质（水银、玻璃、塑料、金属板）上，让溶剂蒸发后形成试样膜。

## 液体样品

### 1. 样品池的类型

固定池、可拆池、可变厚度池、微量池

### 2. 液体样品的制备

(1) **液池法** 固定池：用于易挥发性液体的测定。

可拆池：用于高沸点、粘稠型液体的测定

### (2) 液膜法

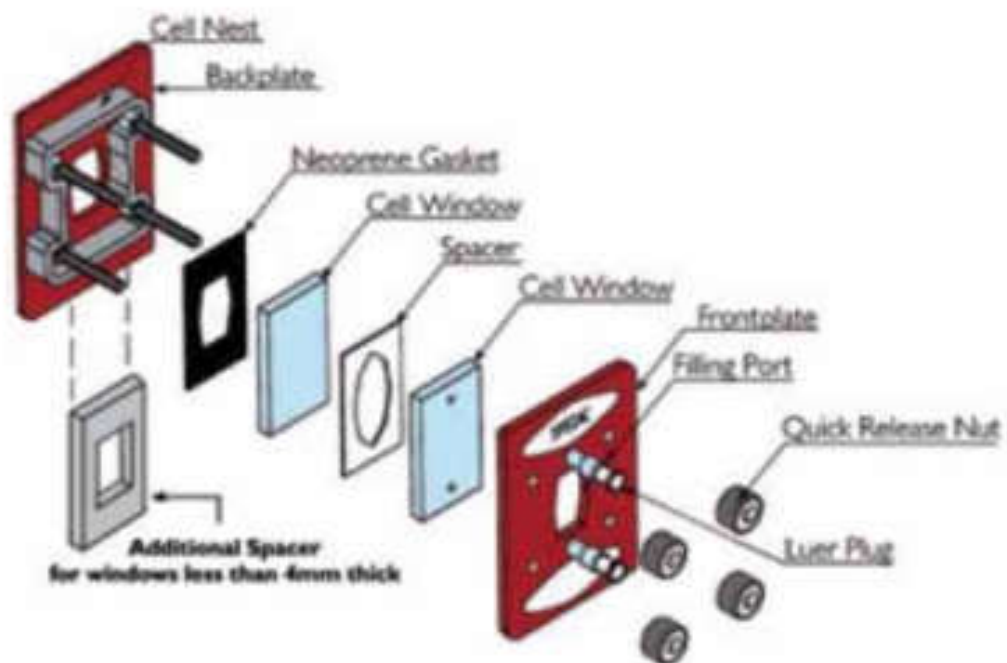
用溶剂 $\text{CS}_2$ 、 $\text{CCl}_4$ 、 $\text{CHCl}_3$ 等溶解吸收很强的液体后，在两片KBr盐片之间滴加1~2滴样品形成液膜，夹住后进行测试。

**注意：**溶剂化效应、溶剂自身的红外吸收峰。

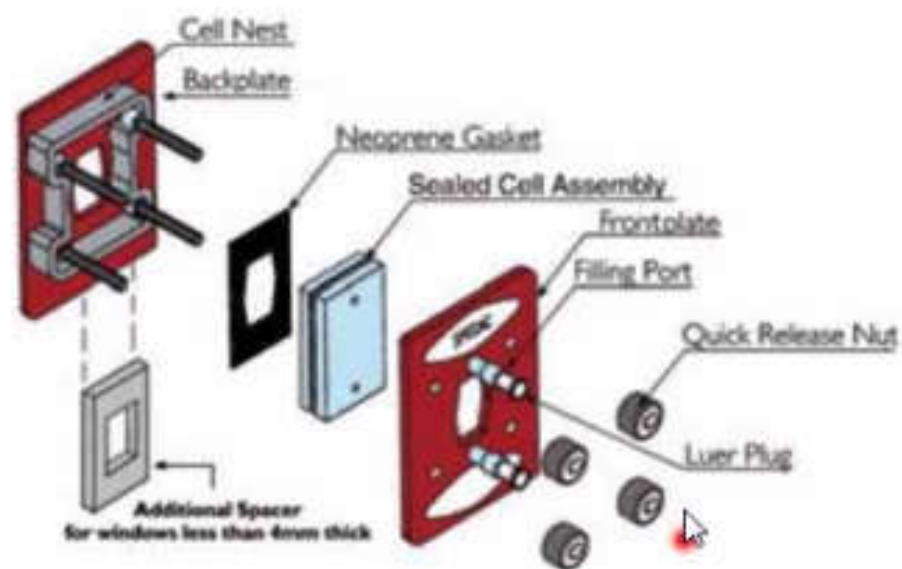


# 液体池

可拆卸液体池



密封液体池



# 液体池

□ 窗片材料

□ 光程长度

溶质浓度	光程长度
10%以上	0.05毫米
1%~10%	0.1毫米
0.1%~1%	0.2毫米
0.1%以下	0.5毫米

固定光程液体池



特殊液体池：流动，变温，高压.....



可变光程  
液体池



长光程液体池

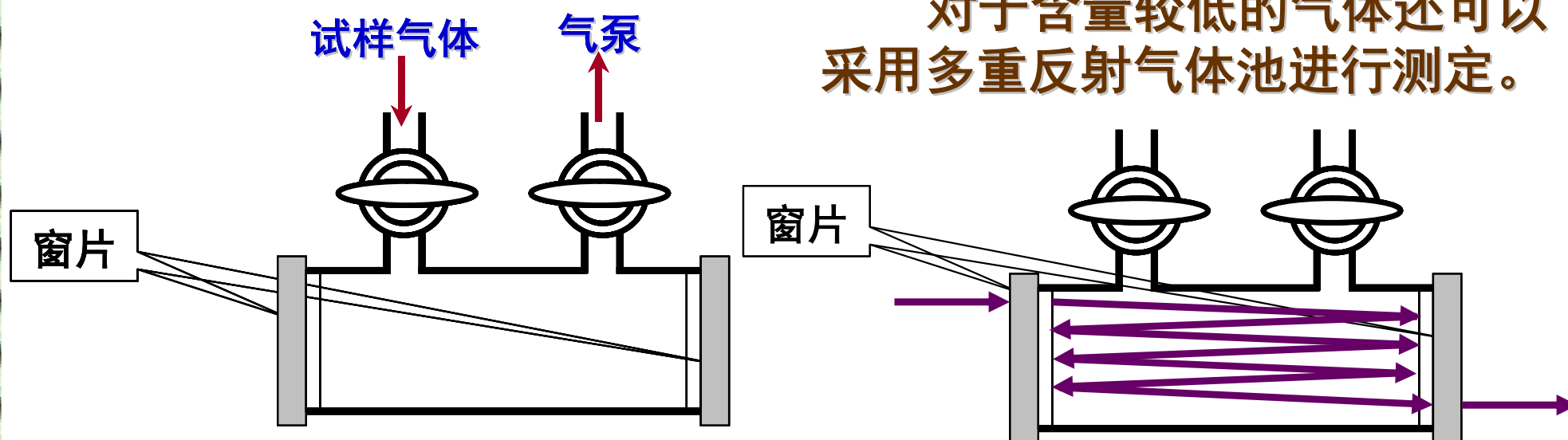


图片来源 [www.specac.com](http://www.specac.com) [www.piketech.com](http://www.piketech.com)

## 气体样品

气体、蒸气压高的液体、固体或液体分解所产生的气体，都可以用气体池测定。

对于含量较低的气体还可以采用多重反射气体池进行测定。



# 气体池

## 短光程气体池



## 长光程气体池



## 可加热气体池



图片来源 [www.specac.com](http://www.specac.com) [www.piketech.com](http://www.piketech.com)

## 窗片材料

- 碱金属卤化物：KBr, NaCl, KCl, CsI
  - 截止波数低，测量光谱范围宽；但是溶于水
  - 粉末在高压下可形成透明薄片，是常用的压片法稀释剂
- 重金属卤化物：AgCl, AgBr,  $\text{TlBr}_{0.42}\text{I}_{0.58}$  (KRS-5)
  - 截止波数低，测量光谱范围宽，而且不溶于水；但是硬度较低
  - AgCl和AgBr可制作中红外光纤；KRS-5可作内反射晶体，但是有毒
- 氟化物： $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ 
  - 不溶于水；但是截止波数高，难以测量指纹区光谱
- ZnSe, Ge, 金刚石
  - 截止波数低，测量光谱范围宽，而且不溶于水；常用作内反射晶体
  - 折射率高，因此表面反射率高，降低透射光通量，容易产生干涉条纹
- 蓝宝石, 石英
  - 截止波数高，只能用于测量高波数区域 (X-H) 的中红外光谱
  - 常用于近红外光谱测试

材料	透光范围 / $\text{cm}^{-1}$	折射率
KBr	48800-345	1.52
NaCl	52600-457	1.49
$\text{CaF}_2$	79500-900	1.40
$\text{BaF}_2$	76600-700	1.45
KRS-5	17900-200	2.37
ZnSe	15000-650	2.40
Ge	5500-500	4.00
金刚石	30000-10	2.40