

IR是振动-转动光谱

纵坐标是透过率T

IR的特点

应用范围广，几乎所有有机化合物在红外区有吸收

特征性，用于分子结构鉴定

定性、定量、结构分析

样品适应性广，气液固样品

不破坏样品

基本原理

产生条件

辐射应具有能满足物质产生振动跃迁所需的能量；

辐射与物质间有相互偶合作用，即振动伴随着偶极矩的变化

分子振动方程式：

$$\tilde{\nu} = 1303 \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

μ 是折合质量，单位是相对原子质量

多原子分子的振动

两类振动形式

伸缩振动:对称和反对称伸缩（强吸收）

变形震动：摇摆、扭曲（弱吸收），剪式、面内摇摆（中等吸收）

CO₂的振动模式需要记住

峰数

理论峰数>实际，原因：

1. 偶极矩不变化
2. 谱线兼并
3. 仪器灵敏度不够

有基频峰，也有倍频、合频

峰强

瞬间偶极矩变化大，峰强

键两端原子电负性差异大，峰强。

峰偏移的因素

1. 电子效应：诱导效应:吸电子->高频
2. 共轭效应：共轭变大、红移
3. 氢键：振动频率降低、强度增加
4. 空间：减弱共轭，蓝移；环张力增加，红外也会蓝移。4>5>6

仪器结构

色散型：光源、样品、单色器、检测器

傅里叶型：光源、干涉仪、样品室、检测器、计算机

光源

通常用惰性固体，加热使之发出连续的红外辐射

1. Nernst灯：Zr氧化物等，高波数区强度大，稳定性好、价格高、机械强度差。
2. SiC硅碳棒:低波数光强大。坚固、发光面积大。

吸收池

玻璃、石英不透红外。用NaCl KBr制成光片

单色器

色散元件、准直镜、狭缝

狭缝宽度应可调整

狭缝窄了分辨率高但是能量低，为减少长波能量损失，通常采用**程序增减狭缝宽度的方法**

检测器

| 红外检测器 | 原理 | 构成 | 特点 |
|-------------|----------|---|-----------------------------------|
| 热电偶 | 温差热电效应 | 涂黑金箔（接受面）连接金属（热接点）与导线（冷接端）形成温差。将温差转变为电位差。 | 光谱响应宽且一致性好、灵敏度高、受热噪音影响大 |
| 热释电检测器（TGS） | 半导体热电效应 | 硫酸三甘酐（TGS）单晶片受热，温度上升，其表面电荷减少，即 TGS 释放了部分电荷，该电荷经放大并记录。 | 响应极快，可进行高速扫描（中红外区只需 1s）。适于 FT-IR。 |
| 碲镉汞检测器（MCT） | 光电导；光伏效应 | 混合物 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 对光的响应 | 灵敏度高、响应快、可进行高速扫描。 |

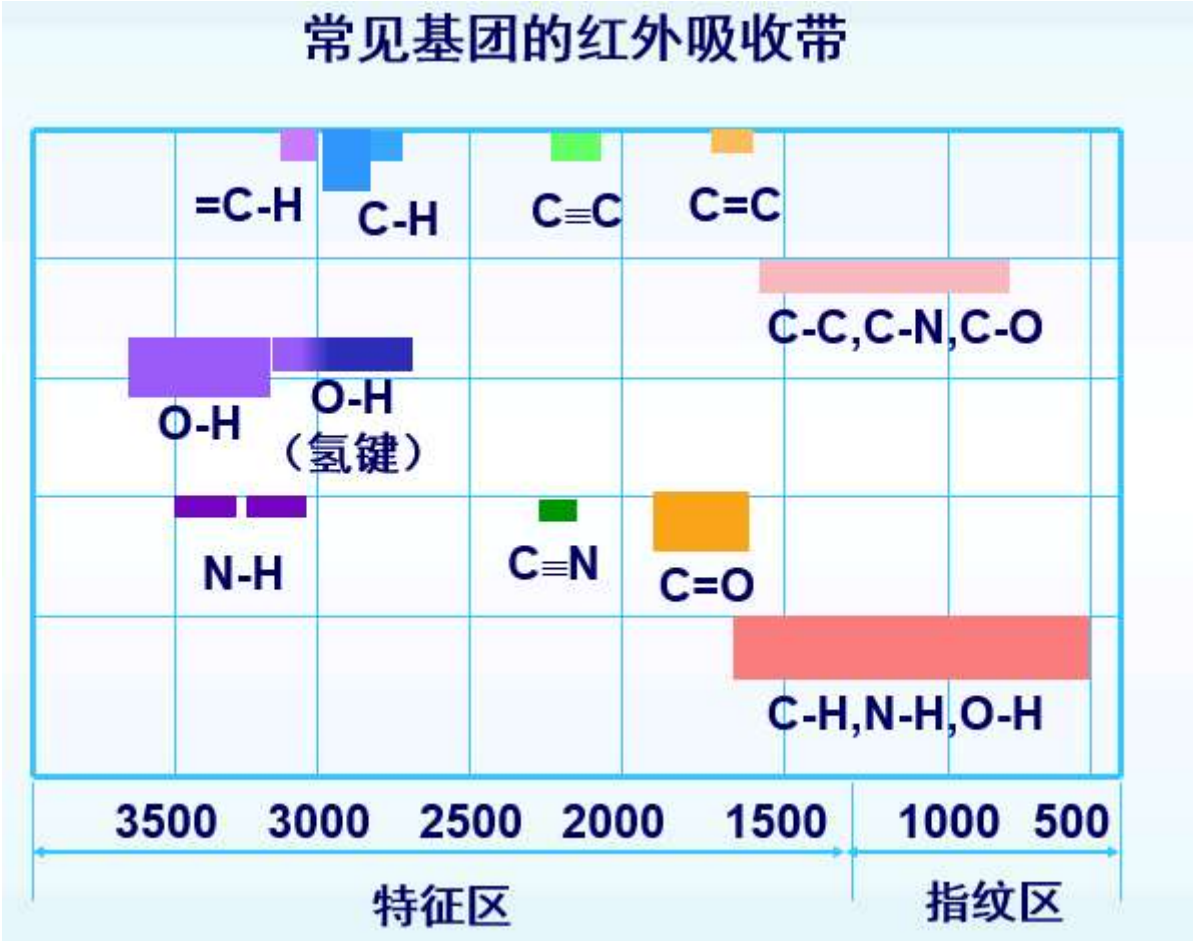
傅里叶变换特点

扫描速度快、分辨率高、灵敏度高、重复性好

试样处理和制备方法

纯物质、不含水、浓度适中

红外分析



其实要关注一下甲基的

定量分析的优点

有许多谱带可供选择，有利于排除干扰

适用于物理和化学性质相近，而用气相色谱法进行定量分析存在困难的试样。

气体、液体、固体均可进行测定

拉曼原理

拉曼与红外的比较

红外光谱源于偶极矩变化；拉曼光谱源于极化率(诱导偶极距)的变化

拉曼仪器结构

色散型：光源、样品池、单色器、检测器。光栅是干什么的？

光源：激光器

样品池：毛细管或玻璃（因为激光器波长一般在可见光区）

单色器：双单色器，一前一后

检测器：光电倍增管

拉曼应用

水可做溶剂