



# 红外光谱基本原理课 件



# CATALOGUE

## 目录

- 红外光谱基本原理
- 红外光谱仪器
- 红外光谱实验技术
- 红外光谱的局限性
- 红外光谱的发展趋势与展望





PART 01

# 红外光谱基本原理



CATALOGUE



# 红外光谱的产生



## 分子振动

分子中的原子或分子的振动会产生能量变化，当这种变化与入射光的能量相匹配时，就会产生共振，从而吸收特定波长的光。



## 光的吸收与发射

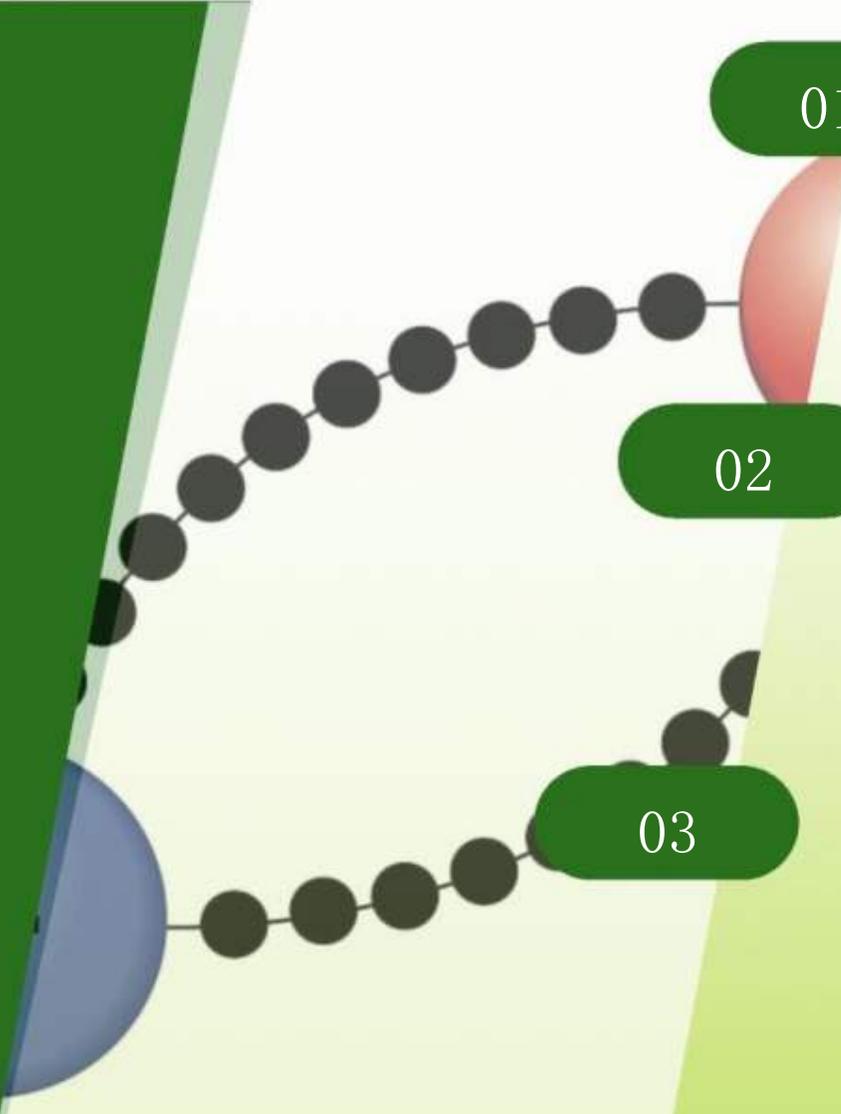
分子振动产生的能量变化会导致分子吸收特定波长的光，而其他波长的光则被反射或透射。



## 红外光谱

通过测量不同波长光的吸收或发射，可以获得分子的振动和转动信息，从而形成红外光谱。





01

## 振动模式

分子中的原子或分子的振动模式可以分为伸缩振动和弯曲振动。伸缩振动是指原子沿键轴方向的振动，而弯曲振动则是指原子绕键轴的振动。

02

## 转动模式

分子中的原子或分子的转动模式可以分为刚性转动和弹性转动。刚性转动是指整个分子作为一个整体进行转动，而弹性转动则是指分子内部各原子之间的相对运动。

03

## 振动与转动的耦合

在某些情况下，分子的振动和转动模式会相互耦合，从而产生更复杂的振动和转动模式。



# 红外光谱与分子结构的关系



## 特征频率

不同化学键或基团具有不同的振动和转动频率，这些频率在红外光谱中表现为特征峰。通过分析特征峰的位置和强度，可以推断出分子中的化学键或基团。

## 峰的强度与跃迁概率

峰的强度反映了跃迁概率的大小，即分子从基态跃迁到激发态的难易程度。跃迁概率越大，峰的强度越高。

## 峰的形状与分子对称性

峰的形状可以反映分子的对称性和空间结构。例如，某些峰的出现可能与分子中的对称面或对称中心有关。



PART 02

# 红外光谱仪器



CATALOGUE



# 红外光谱仪的基本构造



光源

发射一定波长的红外光，常用光源有卤素灯、氙灯等。



分束器

将入射光分为两束，一束用于样品，另一束用于参考。



样品室

放置样品，使待测物质与入射光相互作用。



检测器

检测经过样品后的光信号，并将其转换为电信号。



# 傅立叶变换红外光谱仪



01



干涉仪



将入射光分成多束光，再通过干涉产生不同频率的红外光。

02



检测器



检测干涉后的光信号，并进行光电转换。

03



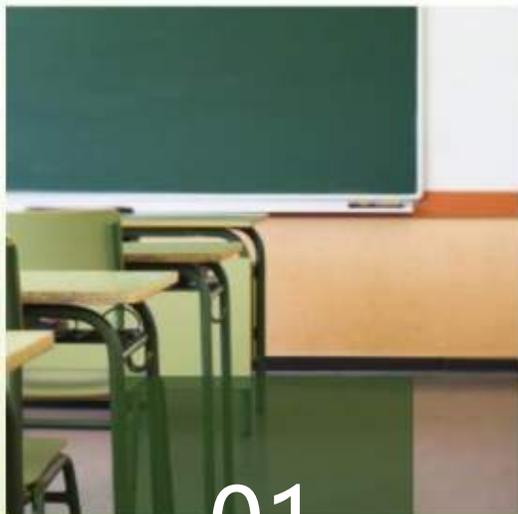
计算机



处理检测器输出的电信号，得到红外光谱图。



# 红外光谱仪的性能指标



01

波长范围

指仪器能够测量的红外光谱范围，通常以波数表示。



02

分辨率

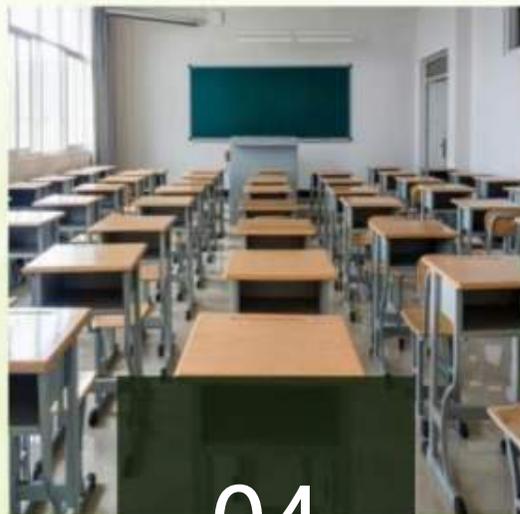
仪器能够区分相邻两个光谱峰的能力，通常以波数表示。



03

灵敏度

仪器对微弱光信号的响应能力，通常以信噪比表示。



04

扫描速度

仪器完成一次光谱扫描所需的时间，通常以扫描次数/秒表示。



PART 03

# 红外光谱的应用



CATALOGUE



# 在有机化学中的应用



## 确定分子结构

通过红外光谱可以确定有机化合物的官能团和化学键类型，从而推断出分子结构。



## 反应机理研究

红外光谱可用于研究有机化学反应机理，通过观察反应过程中红外光谱的变化，可以了解反应过程中化学键的变化情况。



## 化合物鉴别

不同的有机化合物具有独特的红外吸收峰，因此红外光谱可用于化合物的鉴别和纯度检测。





# 在无机化学中的应用



## 矿物鉴定

红外光谱可以用于鉴定矿物和岩石的成分，通过分析矿物中特定官能团的红外吸收特征，可以确定矿物的类型和组成。



## 化学键研究

在无机化合物中，某些化学键在红外光谱中具有特征性的吸收峰，因此红外光谱可用于研究无机化合物的化学键性质。



## 高分子材料分析

红外光谱可用于分析高分子材料的结构和性质，如聚合物、橡胶、纤维等。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：  
<https://d.book118.com/816124054031010235>