



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

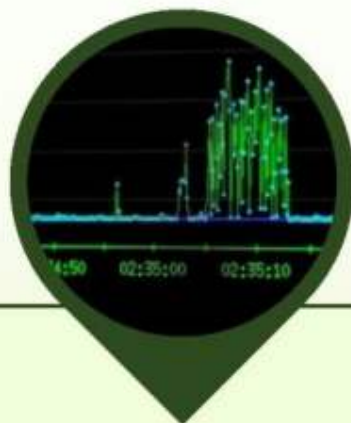


红外光谱的产生



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



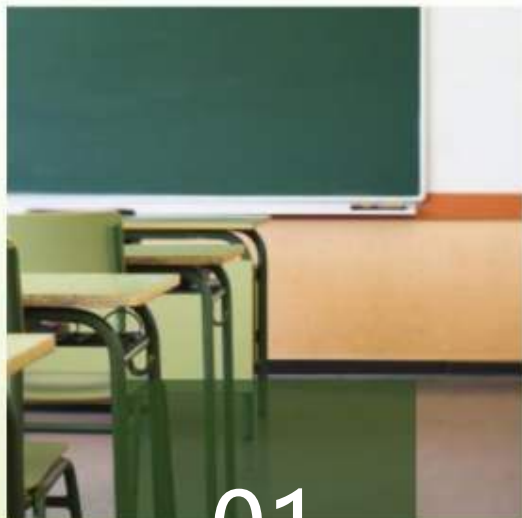
计算机



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

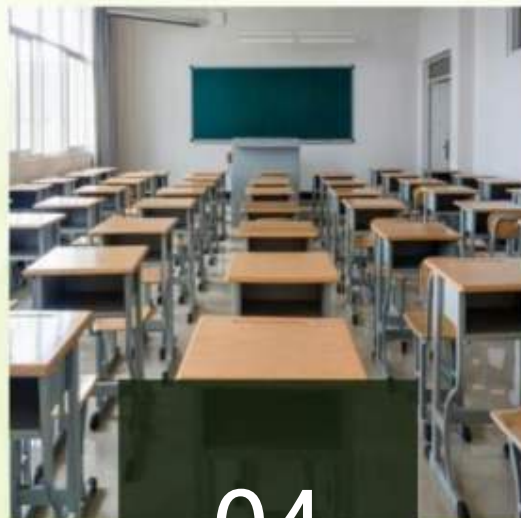
仪器能够区分相邻两个光谱峰的能力，通常以波数表示。



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>