

实验六 傅立叶变换红外光谱

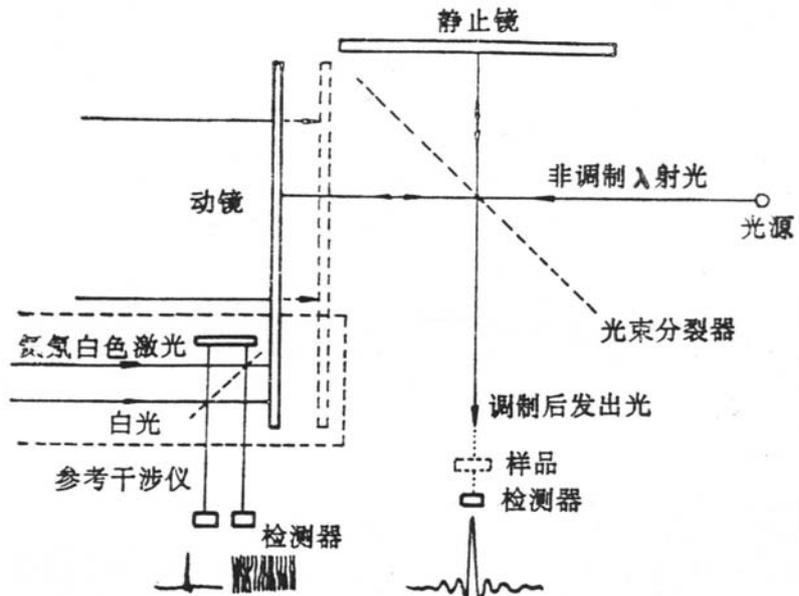
一 实验目地

- (1) 初步了解傅立叶变换红外光谱仪的结构及工作原理
- (2) 熟悉 FT-IR 的实验过程
- (3) 初步学会读谱图

二 实验原理

傅立叶变换红外光谱仪

- (1) 光学探测部分



迈克耳逊 (Mickelson)干涉仪，如图 1 所示。

图 1 红外光谱仪的光路示意图

当光线经过分束器时，被分成相等的两部分，分别射向移动反射镜和固定反射镜，造成光程差 X 。由于光的相干原理，在检测器处产生光的相干信号。对于单色光，其变化方程为：

$$I(x) = B(\nu) \cos(2\pi\nu x)$$

其中 $I(x)$ — 干涉光的强度 (光程差的函数) 由检测器测定

x — 光程差

$B(\nu)$ — 入射光的强度 (频率的函数)

ν — 频率

对于多色光, $I(x)$ 是所有频率产生信号的总和, 其干涉图包含着所有频率及其强度信息:

$$I(x) = \int_0^{\infty} B(\nu) \cos(2\pi\nu x) d\nu$$

当样品吸收某频率的能量 → 干涉图曲线发生相应的变化

(2) 干涉图的傅立叶变换

包含每个频率强度信息的干涉图, 可凭借数学的傅立叶变换技术, 对每个频率的光强进行计算, 从而得到红外光谱:

$$B(\nu) = \int_0^{\infty} I(x) \cos(2\pi\nu x) dx$$

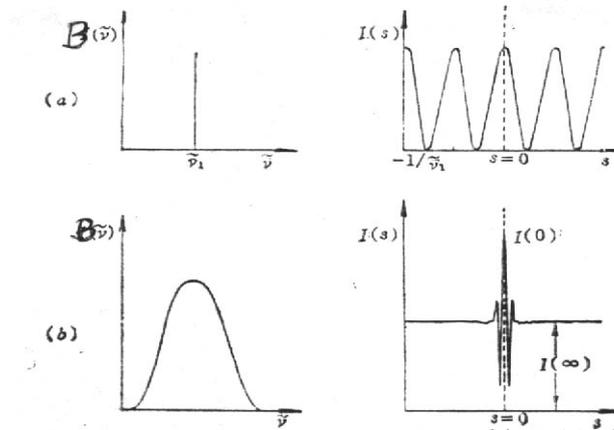


图2 干涉图及光谱图

(a) 单色光 (b) 多色光

三、实验仪器设备及流程

实验仪器设备: 美国热电集团尼高力分子光谱仪器公司生产的 Nexus 670 型 傅里叶变换红外光谱仪

试样: 聚苯乙烯薄膜及其他状态样品

流程： 用傅立叶变换红外光谱仪测量样品的红外光谱包括下述程序：

- (1) 分别采集背景(无样品时)的干涉图及样品的干涉图。
- (2) 分别通过傅立叶变换，将上述干涉图转化为单光束红外光谱。
- (3) 将样品的单光束光谱除以背景的单光束光谱，即得到样品的吸收光谱。

四、实验操作步骤

(1) 开机步骤

- 1 开启电源
- 2 开启计算机
- 3 开启光谱仪开关
- 4 启动 OMNIC 7.1a
- 5 待 Bench State 窗口显示正常后，既可开始样品测定

(2) 测定步骤

- 1 采集背景
- 2 根据样品状态进行制样，并放入样品舱
- 3 采集样品
- 4 对谱图进行数据处理并保存至文件夹

(3) 注意事项

- 1 制样时样品不可过厚或太薄。如样品制得过薄或浓度过低，常常使弱的甚至中等强度的吸收谱带显示不出来；如果样品太厚或过浓，会使许多主要吸收谱带彼此连成一片，看不出准确的波数位置和精细结构
- 2 样品中不应含有游离水。
- 3 对于多组分的试样，在进行红外光谱测绘前应尽可能将组分分离。
- 4 样品表面反射引起能量损失，造成谱带变形。并产生干涉条纹。消除的方法是使样品表面粗糙些。

五、数据处理

- 1 对谱图进行基线校正，标出各谱带的位置(波数)，并对照教材等参考书，了解所标出谱带对应的化学键。
- 2 对试样在谱库中进行检索，并根据检索结果查找和分析标准样品的谱图，考

察试样和标准样品的匹配程度。

六、分析讨论题

- 1 用傅立叶变换红外光谱仪测量样品的红外光谱时应有哪些注意事项？
- 2 红外光谱的特征频率的具体含义是什么？

(执笔人：韦亚兵)