

# 105-2 學年度儀器分析書面報告

姓名：江俊霖 學號：4A440052 班級：化才二乙

日期：106/5/27

書面報告題目：**紅外線光譜儀之儀器原理、構造、應用等**

## 一、儀器原理

紅外線吸收光譜法與紫外線可見光吸收光譜法都屬於分子吸收光譜的範疇。但光譜產生的原理不同，紅外線吸收光譜是振動紅外線吸收光譜是振動轉動光譜，而紫外線可見光吸收光譜是電子光譜。因此紅外線的光譜和分子的振動轉動分子的振動轉動有密切關係。紅外線光區的波長範圍從  $0.78\text{--}1000\ \mu\text{m}$  ( $780\text{--}1000,000\ \text{nm}$ )，其波數從  $12,800\text{--}10\ \text{cm}^{-1}$ 。從儀器的應用範圍，一般將紅外線光區分為三個區：近紅外光區、中紅外光區、及遠紅外光區。IR 儀器主要使用中紅外光區。

## 二、儀器構造

由 IR 光譜中可以得到各種有機物官能基的振動光譜和指紋區光譜作各種定性比對及定量的分析。固體、液體及氣體可藉紅外線光譜測定聚合物之組成並確認其成分之分子構造，分子集轉動及振動和移動等運動方式於一身而具有特定振盪頻率範圍（波數在  $4000\text{cm}^{-1}\text{--}200\text{cm}^{-1}$  之間）。分子振動分為兩種形式，一為伸縮振動（stretching vibration），一為彎曲振動（bending vibration）。所謂伸縮振動是原子沿其化學鍵的方向作有規律的運動；至於彎曲振動則是一種改變化學鍵角的運動。兩化學鍵若有一共同原子，則其兩端的原子或原子團因運動而導致化學鍵角改變便是彎曲振動，例如 Distortion（扭曲）、rocking（搖晃）及 torsional（扭轉）振動，均包含著化學鍵角改變的振動。這些頻率發生在紅外線光譜波長在  $25\text{--}50\text{nm}$  範圍內，紅外線分光光度計發射紅外線而被試料吸收，此與試料的轉動和振動相關，由紅外線光度計發射而殘餘的光，透過與監視後以紀錄紙紀錄下來，被記錄下來之透過光線稱為紅外線光譜，物質的官能基有其特徵性吸收光譜，因而藉光譜圖之位置能確認該物質之構造。

利用紅外光譜儀的量測，一般可分為穿透和反射兩類，我們常藉由紅外光束穿過待測物質而獲得其穿透或吸收光譜，但是當碰到不透光的樣品（如金屬板）或在某些光區不透光的樣品（如玻璃）中，因紅外光不穿透，無法由透光譜瞭解其振動結構，因此我們進行反射光譜的量測，以獲得其結構的振動光譜。其中反射的方式又細分為三種：

#### 漫反射 (Diffuse Reflection)

當一束光打到表面不平整的顆粒環境時，部份的光入射到樣品中，會因折射現象而偏折、或在樣品內產生多次反射，產生各種角度的散射光，收集偵測各角度的光來獲得樣品的光譜，主要是運用在固體和粉末樣品的分析。有時我們也可利用 SiC 的擦子擦拭樣品，使樣品粉末附著在 SiC 上，再測量其紅外光譜。

#### 全反射 (Attenuate Total Reflection; ATR)

在測量吸收性強的材料光譜時，ATR 光譜是一個選擇方式。這個現象首先在 1959 年的紅外光譜學研究中提到，當紅外光進入一高折射率材料的稜柱時，在內部產生多次反射，利用每次的反射時在稜柱的表面產生微小的滲透波 (evanescent wave) 進入樣品，如果滲透波 (evanescent wave) 輻射被樣品吸收，則在吸收譜帶的波長處調減。

#### 鏡面反射 (Specular Reflectance)

一束光打到表面平整光滑的樣品形成鏡面反射，遵守反射定律

### 三、儀器應用

#### 1. 定性分析

( 1) 已知物的鑒定在得到試樣的紅外譜圖後，與純物質的譜圖進行比較，如果譜圖中峰位、峰形和峰的相對強度都一致，即可認為是同一物質。

( 2) 未知物的鑒定是紅外光譜法定性分析的一個重要用途，涉及到圖譜的解析

#### 2. 定量分析

定量依據是 LambertBeer 定律，定量時吸光度的測定常用基線法。

### 四、參考資料來源

1. <file:///C:/Users/asus/Downloads/99-%E7%B4%85%E5%A4%96%E7%B7%9A.pdf>
2. [eshare.stust.edu.tw/EshareFile/2014\\_6/2014\\_6\\_96dd5550.doc](eshare.stust.edu.tw/EshareFile/2014_6/2014_6_96dd5550.doc)