

执业药师《药物分析》辅导：红外分光光度法（IR）PDF转换可能丢失图片或格式，建议阅读原文

https://www.100test.com/kao_ti2020/18/2021_2022__E6_89_A7_E4_B8_9A_E8_8D_AF_E5_c23_18003.htm 一、概述 红外线

：0.76mm ~ 500mm 近红外区（泛频区）13158 ~ 4000cm⁻¹ 中红外区（基本振动区）4000 ~ 200 cm⁻¹ 远红外区（转动区）

200 ~ 20 cm⁻¹ IR分子振动、转动能级的跃迁引起几乎所有的化合物都有自己特征的红外光谱鉴定依据 二、基本原理（一）

分子振动与红外吸收：分子基本振动形式：伸缩振动；弯曲振动（变形振动）。振动频率 = 入射的红外线振动频率相同时，分子对红外线产生吸收。（二）基频峰、泛频峰：基频峰：分子吸收一定频率的红外线，振动能级：基态（V = 0）

第一激发态（V = 1）产生吸收峰。强度较大，最主要一类吸收峰。泛频峰：V = 0V = 2；V = 3 倍频峰 合频峰，差频峰。

光谱变复杂，增加光谱特征性。（三）特征峰与相关峰：特征峰：鉴别官能团存在的吸收峰特征吸收峰。相关峰：由一个官能团所产生的一组相互依存的特征峰相关吸收峰。用一组相关峰确定一个官能团的存在光谱解析的一条重要原则。

（四）吸收峰的位置与强度：吸收峰的位置：振动能级跃迁所吸收的红外线的波长或波数。红外光谱的解释经验式某些化学键或官能团的吸收位置相对稳定。（P308页表25 - 2 光谱的九个重要区段）吸收峰的强度：振动时瞬时偶极矩的变化直接相关。

3. 特征峰与指纹区：（1）特征区：4000 ~ 1250cm⁻¹，特征频率区吸收峰较疏，易辨。含氢原子的单键，各种叁键，双键的伸缩振动的基频峰。含氢单键的面内弯曲振动的基频峰。 a 1900 ~ 1650 cm⁻¹，羰基峰很少与其

1900 ~ 1650 cm⁻¹，羰基峰很少与其

1900 ~ 1650 cm⁻¹，羰基峰很少与其

它峰重叠，谱带强度很大最易识别的吸收峰，最受重视（2）
指纹区：1250 ~ 400 cm^{-1} ，低频。化学结构上细小差别指纹区明显差别。三、光谱解析 光谱解析程序：先特征区，后指纹区；先最强峰，后次强峰；先粗查，后细找；先否定，后肯定。先根据第一强峰的峰位查找光谱的九个重要区域表
归属 100Test 下载频道开通，各类考试题目直接下载。详细请访问 www.100test.com