

ICS 71.040.40
G 04



中华人民共和国国家标准

GB/T 6040—2002

红外光谱分析方法通则

General rules for infrared analysis

2002-09-24 发布

2003-04-01 实施

中华人民共和国
国家质量监督检验检疫总局 发布

目 次

| | |
|------------------|---|
| 前言 | Ⅲ |
| 1 范围 | 1 |
| 2 引用标准 | 1 |
| 3 定义 | 1 |
| 4 仪器装置 | 2 |
| 5 样品制备方法 | 5 |
| 6 操作方法 | 7 |
| 7 定性分析 | 8 |
| 8 定量分析 | 8 |
| 9 安全和维修 | 9 |
| 10 测定结果的整理 | 9 |

前 言

本标准是等效采用日本工业标准 JIS K 0117:2000《红外光谱分析方法通则》对 GB/T 6040—1985《化工产品用红外光谱定量分析方法通则》的修订。

本标准与 JIS K 0117:2000 在编写规则及格式上有些差异。

本标准与 GB/T 6040—1985 的主要差异:采用 JIS K 0117:2000 将标准名称由《化工产品用红外光谱定量分析方法通则》修改为《红外光谱分析方法通则》;增加了引用标准和定性分析等内容。

本标准从实施之日起,同时替代 GB/T 6040—1985。

本标准由原国家石油和化学工业局提出。

本标准由全国化学标准化技术委员会有机分会归口。

本标准起草单位:中国石油化工股份有限公司北京化工研究院。

本标准主要起草人:赵梅君、张颖。

本标准于 1985 年 5 月首次发布。

本标准委托全国化学标准化技术委员会有机分会负责解释。

1 范围

本标准规定了用红外光谱仪吸收光谱法定性或定量分析有机物及无机物的通用规则。
本标准适用于波数范围为 $4\,000\text{ cm}^{-1}\sim 400\text{ cm}^{-1}$ (波长 $2.5\ \mu\text{m}\sim 25\ \mu\text{m}$) 的红外光谱分析。

2 引用标准

下列标准所包含的条文,通过在本标准中引用而构成为本标准的条文。本标准出版时,所示版本均为有效。所有标准都会被修订,使用本标准的各方应探讨使用下列标准最新版本的可能性。

GB/T 7764—2001 橡胶鉴定 红外光谱法

GB/T 14666—1993 分析化学术语

3 定义

本标准涉及的主要用语的定义除了 GB/T 14666 中所规定的之外,还包括下列定义:

3.1 透过率 transmittance

透过样品的辐射能与入射的辐射能之比。

3.2 基线 baseline

在吸收光谱上,按一定方式绘制的直线或曲线,用它来表示吸收带不存在时的背景吸收曲线。

3.3 样品厚度 sample thickness

辐射光束在样品中通过的距离,通常以厘米为单位。

3.4 标准样品 standard sample

作为标准用的已知组成的物质,其化学结构和分析波长与被测物质一致或非常接近。

3.5 干涉图形 interferogram

利用迈克尔逊干涉仪得到的信号,以横轴为光的光程差,纵轴为光的强度所显示的图形。

3.6 变迹函数 apodization

为了减少因干涉仪的扫描距离有限而产生的复原光谱的畸变,在干涉图形上进行适当参数重叠的数学操作。

3.7 K-M 变换 kubelka-munk transformation

把漫反射法测定的光谱变换成吸收光谱的方法。

3.8 K-K 变换 kramers-kroning transformation

把测定的正反射光谱变换成吸收光谱的方法。

3.9 正反射法 specular reflection method

用样品表面光的正反射(镜面反射)测定反射光的方法。由于与反射率相关,修正光谱时必须进行变换。