



中华人民共和国国家标准

GB/T 32199—2015

红外光谱定性分析技术通则

Standard practice for general techniques for obtaining infrared spectra
for qualitative analysis

2015-12-10 发布

2016-07-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局
中国国家标准化管理委员会 发布

目 次

前言	Ⅲ
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语、定义和符号.....	1
4 总则	1
5 液体样品的分析	4
6 固体样品的分析	7
7 气相样品的分析.....	10
8 聚合物的分析.....	11
9 其他类型样品的分析.....	15
10 特殊分析技术	15
参考文献	18

前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准参照 ASTM E 1252—2002《红外光谱定性分析技术通则》。

本标准由中国机械工业联合会提出。

本标准由全国工业过程测量控制和自动化标准化技术委员会(SAC/TC 124)归口。

本标准起草单位:中国仪器仪表行业协会、北京大学、北京华云分析仪器研究所有限公司、北京华夏科创仪器技术有限公司、北京农学院、北京分析仪器研究所。

本标准主要起草人:马雅娟、翁诗甫、唐青云、高程达、张新民、娄兴军。

红外光谱定性分析技术通则

1 范围

1.1 本标准所覆盖的光谱范围为 $4\ 000\ \text{cm}^{-1}$ ~ $50\ \text{cm}^{-1}$,适用于采用红外光谱技术对液体、固体和气体样品进行定性分析,定性分析对样品的用量不作限制。也可用于光谱波数高于 $4\ 000\ \text{cm}^{-1}$ 的近红外区的定性分析。

1.2 本标准并不涉及实际使用过程中有关的安全问题。用户在使用前,确定本标准应用的局限性,并有责任制定适宜的安全及健康规范。具体的预防措施见 5.5.1。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件,仅注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

ASTM E 131 分子光谱学相关术语(Terminology Relating to Molecular Spectroscopy)

ASTM E 334 红外微量分析通用技术(Practices for General Techniques of Infrared Microanalysis)

ASTM E 573 内反射光谱技术(Practices for Internal Reflection Spectroscopy)

ASTM E 1421 傅里叶变换红外(FT-IR)光谱仪的性能表征和测量:0级和1级填充零[Practice for Describing and Measuring Performance of Fourier Transform Infrared (FT-IR) Spectrometers: Level Zero and Level One]

ASTM E 1642 气相色谱-红外联用(GC/IR)分析通用技术[Practice for General Techniques of Gas Chromatography Infrared (GC/IR) Analysis]

3 术语、定义和符号

ASTM E 131 界定的术语、定义和符号适用本文件。

4 总则

4.1 红外(IR)定性分析是通过基团的鉴定^{[1]~[3]}、或者比较未知样品与已知标准样品的红外吸收光谱,或者两者相结合的分析方法。这些光谱可以借助于红外光的透射、反射以及其他技术,如光声光谱(PAS)等获得^{[4]~[8]}。用于比较的光谱应在同样技术和相同条件下获得。使用者应注意到并非所有公开发表的标准光谱都是完全合适的^{[9]~[16]}。

4.1.1 红外定性分析所使用的仪器和附件可以通过商业途径获得。用户应按照制造商所提供的用户手册操作,以确保仪器在最佳状态下安全运行。

4.2 将一厚度均匀的样品薄膜放置在与红外光路垂直的位置得到透射光谱(消除样品薄膜产生干涉条纹的方法见 8.5.1)。样品厚度应合适,在所分析的吸收峰位置到达检测器的红外光能量要降到足够低。最强吸收谱带的吸光度最好在 1~2 之间,其他谱带的吸光度应在 0.6 左右。由于所测样品分子极性存在差异,会出现例外情况。例如,饱和烃是非极性的,CH₂ 反对称伸缩振动在 $2\ 920\ \text{cm}^{-1}$ 有强吸收,变