

## 红外光谱法测定聚合物的结构

红外光谱与有机化合物、高分子化合物的结构之间存在密切的关系。它是研究结构与性能关系的基本手段之一。红外光谱分析具有速度快、样品用量少并能分析各种状态的样品等特点，广泛用于高聚物领域，如对高聚物材料的定性定量分析，研究高聚物的序列分布，研究支化程度，研究高聚物的聚集态结构，高聚物的聚合过程反应机理和老化，还可以对高聚物的力学性能进行研究。

### 一. 目的要求

1. 了解红外光谱的基本原理
2. 初步掌握红外光谱样品的制备和红外光谱仪的使用
3. 初步学会红外光谱图的解析

### 二. 基本原理

红外辐射光的波数可分为近红外区 ( $10000 \sim 4000 \text{cm}^{-1}$ )、中红外区 ( $4000 \sim 400 \text{cm}^{-1}$ ) 和远红外区 ( $400 \sim 10 \text{cm}^{-1}$ )。其中最常用的是中红外区，大多数化合物的化学键振动能的跃迁发生在这一区域，在此区域出现的光谱为分子振动光谱，即红外光谱。

通过讨论产生振动光谱的各种分子振动类型，可以了解红外光谱中各种吸收峰的归属，即各种吸收峰是由何种类型分子振动的能级跃迁产生的，以便推测分子中存在哪些基团和推断分子结构。分子基团的振动其实是化学键的振动，它分为伸缩振动和变形振动（又成为弯曲振动或变角振动）两类。每类又分为几种不同的振动方式。这里以亚甲基为例加以说明，如图 1 所示。各种振动方式分别用各种符号表示。

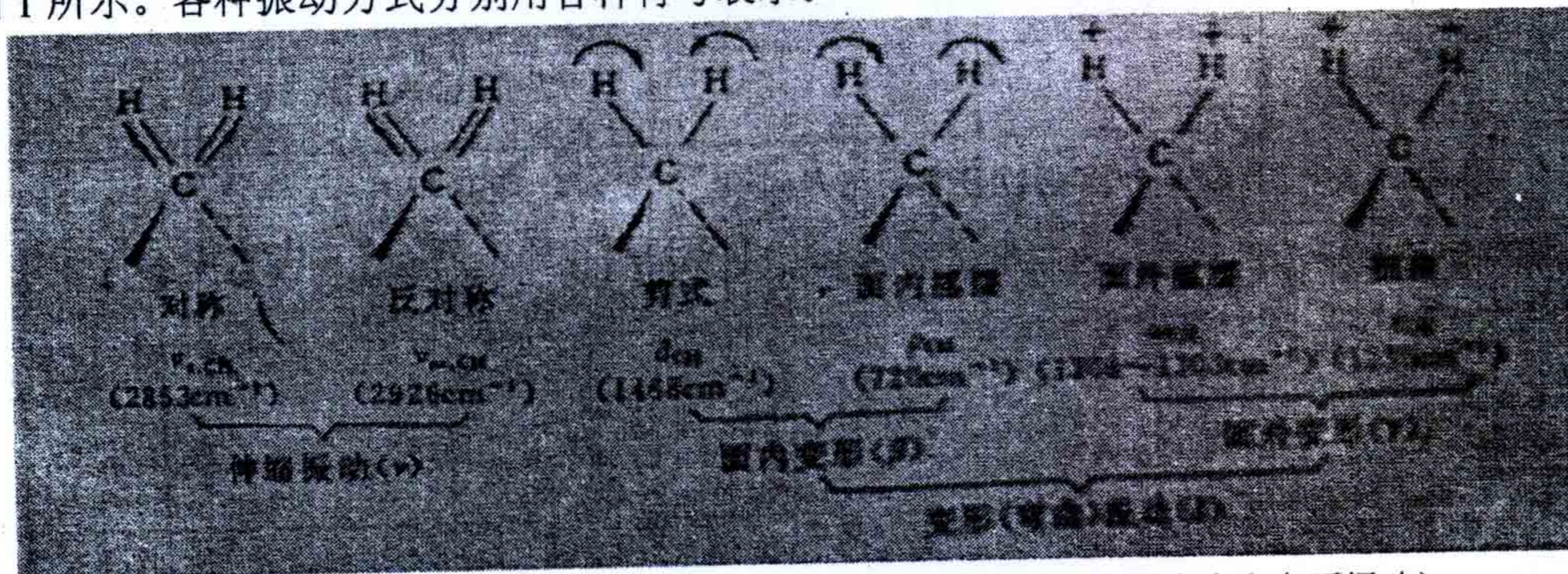


图 1 亚甲基的各种振动方式及其表示法（“+”“—”分别表示由纸面向上和向下振动）

伸缩振动  $\nu$ ：相邻两个原子直线方向的价键振动，即键长发生变化的振动。其中对称伸缩振动  $\nu_s$  在振动过程中各键同时伸长或缩短；反对称伸缩振动  $\nu_{as}$  在振动过程中某个键伸长的同时另一个键缩短。

变形振动  $\delta$ ：振动时键角发生变化或集团作为一个整体在其所处平面内、外振动。它又分为面内变形振动  $\beta$  和面外变形振动  $\gamma$ 。前者包括剪式振动  $\delta$  和面内摇摆振动  $\rho$ ，后者包括面外摇摆振动  $\omega$  和扭曲振动  $\tau$ 。其中剪式振动时，键角发生周期性变化；面内摇摆时，基团作为一个整体在它所处平面内左右摇摆；面外摇摆振动又称扇形振动，振动时基团作为一个整体，在垂直于它所处平面内前后摇摆；扭曲振动又称扭转振动或卷曲振动，在振动时基团围绕它与分子其他部分相连的价键前后扭动。

分子振动能与振动频率成反比。为计算分子振动频率，首先研究各个孤立的振动，即双原子分子的伸缩振动。

可用弹簧模型来描述最简单的双原子分子的简谐振动。把两个原子看成质量分别为  $m_1$  和  $m_2$  的刚性小球，化学键好似一根无质量的弹簧，如图 2 所示。

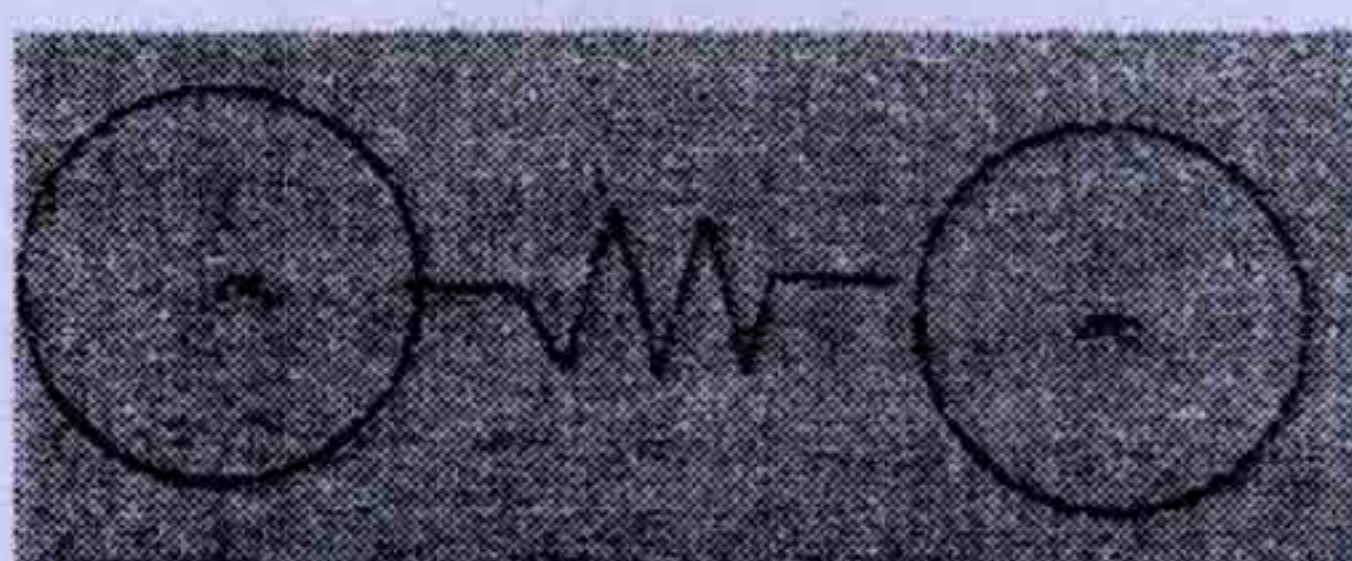


图 2 双原子分子弹簧球模型

按照这一类型，双原子分子的简谐振动应符合虎克定律，振动频率  $\nu$  可用下式表示：

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{u}}$$

(1)

式中， $\nu$  为频率 (Hz)； $K$  为化学键力常数 ( $10^5 \text{N/cm}$ )； $u$  为折合质量 (g； $m_1, m_2$  分别为每个原子的相对原子质量； $N$  为阿伏加德罗常数。

若用波数来表示双原子分子的振动频率，则公式改写为：

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{K}{u}}$$

(2)

在原子或分子中有多种振动形式，每一种简谐振动都对应一定的振动频率，但并不是每一种振动都会和红外辐射发生相互作用而产生红外吸收光谱，只有能引起分子偶极矩变化的振动（称为红外活动振动）才能产生红外吸收光谱。也就是说，当分子振动引起分子偶极矩变化时，就能形成稳定的交变电场，其频率与分子振动频率相同，可以和相同频率的红外辐射发生相互作用，使分子吸收红外辐射的能量跃迁到高能态，从而产生红外吸收光谱。

在正常情况下，这些具有红外活动的分子振动大多数处于基态，被红外辐射激发后，跃迁到第一激发态，这种跃迁所产生的红外吸收称为基频吸收。在红外吸收光谱中大部分吸收都属于这一类型。除基频吸收外还有倍频和合频吸收，但这两种吸收都较弱。

红外吸收谱带的强度与分子数有关，但也与分子振动时偶极矩变化有关。变化率越大，吸收强度也越大，因此极性基团如羧基、氨基等均有很强红外吸收带。

按照光谱和分子结构的特征可将整个红外光谱大致分为两个区，即官能团区 ( $4000 \sim 1300 \text{cm}^{-1}$ ) 和指纹区 ( $1300 \sim 400 \text{cm}^{-1}$ )。

官能团区，即前面讲到的化学键和基团的特征振动频率区，它的吸收光谱主要反映分子中特征基团的振动，基团的鉴定工作主要在该区进行。指纹区的吸收光谱很复杂，特别能反映分子结构的细微变化，每一种化合物在该区的谱带位置、强度和形状都不一样，相当于人的指纹，用于认证化合物是很可靠的。此外，在指纹区也有一些特征吸收峰，对于鉴定官能团也是很有帮助的。

利用红外光谱鉴定化合物的结构，需要熟悉红外光谱区域基团和频率的关系。通常将红外区分为四个区：

(1) X-H 伸缩振动区 (X 代表 C、O、N、S 等原子) 频率范围为  $4000 \sim 2500 \text{cm}^{-1}$ ，该区主要包括 O-H、N-H、C-H 等的伸缩振动。O-H 伸缩振动在  $3700 \sim 3100 \text{cm}^{-1}$ ，氢键的存在使频率降低，谱 X 峰变宽，它是判断有无醇、酚和有机酸的重要证据；C-H 伸缩振动分饱和烃和不饱和烃两种，饱和烃 C-H 伸缩振动在  $3000 \text{cm}^{-1}$  以下，不饱和烃 C-H 伸缩振动（包括烯烃、炔烃、芳烃的 C-H 伸缩振动）在  $3000 \text{cm}^{-1}$  以上。因此， $3000 \text{cm}^{-1}$  是区分饱和烃和不饱和烃的分界线，但三元的  $-\text{CH}_2$  伸缩振动除外，它的吸收在  $3000 \text{cm}^{-1}$  以上；N-H 伸缩振

动在  $3500\sim 3300\text{cm}^{-1}$  区域, 它和 O-H 谱带重叠, 但峰形比 O-H 尖锐。伯、仲酰胺和伯、仲胺类在该区都有吸收谱带。

(2) 叁键和累积双键区 频率范围在  $2500\sim 2000\text{cm}^{-1}$ 。该区红外谱带较少, 主要包括叁键  $\text{C}\equiv\text{C}$ ,  $\text{C}\equiv\text{N}$  等的伸缩振动和  $\text{C}=\text{C}=\text{C}$ ,  $\text{C}=\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{N}=\text{C}=\text{O}$  等累积双键的反对称伸缩振动。

(3) 双键伸缩振动区 频率范围在  $2000\sim 1500\text{cm}^{-1}$  区域, 该区主要包括  $\text{C}=\text{O}$ ,  $\text{C}=\text{C}$ ,  $\text{C}=\text{N}$ ,  $\text{N}=\text{O}$  等的伸缩振动以及苯环的骨架振动, 芳香族化合物的倍频谱带。羰基的伸缩振动区在  $1600\sim 1900\text{cm}^{-1}$  区域, 所有的羰基化合物, 例如醛、酮、羧酸、酯、酰卤、酸酐等在该区都有非常强的吸收带, 而且是谱图中的第一强峰, 其特征非常明显, 因此  $\text{C}=\text{O}$  伸缩振动吸收带是判断有无羰基化合物的主要证据。 $\text{C}=\text{O}$  伸缩振动吸收带的位置还和邻接基团有密切关系, 因此对判断羰基化合物的类型有重要价值;  $\text{C}=\text{C}$  伸缩振动出现在  $1600\sim 1660\text{cm}^{-1}$ , 一般情况下较弱。芳烃的  $\text{C}=\text{C}$  伸缩振动出现在  $1500\sim 1480\text{cm}^{-1}$  和  $1600\sim 1590\text{cm}^{-1}$  两个区域。这两个峰是鉴别有无芳烃存在的标志之一, 一般前者谱带比较强, 后者比较弱。

(4) 部分单键振动及指纹区  $1500\sim 670\text{cm}^{-1}$  区域的光谱比较复杂, 出现的振动形式很多, 除了极少数较强的特征谱带外, 一般难以找到它的归属。对于鉴定有用的特征谱带有 C-H, O-H 的变形振动以及 C-O, C-N, C-X 等的伸缩振动。

饱和的 C-H 弯曲振动包括甲基和次甲基两种。甲基的弯曲振动有对称、反对称弯曲振动和平面摇摆振动。其中以对称弯曲振动较为特征, 吸收的谱带在  $1370\sim 1380\text{cm}^{-1}$  受取代基影响很小, 可以作为判断有无甲基存在的依据。次甲基的弯曲振动有 4 种方式, 其中的平面摇摆振动在结构分析中很有用, 当 4 个或 4 个以上的  $\text{CH}_2$  基呈直链相连时,  $\text{CH}_2$  平面摇摆振动出现在  $722\text{cm}^{-1}$ , 随着  $\text{CH}_2$  个数的减少, 吸收谱带向高波数方向位移, 由此可推断分子链的长短。

在烯烃的  $\text{C}=\text{H}$  弯曲振动中, 波数范围在  $1000\sim 800\text{cm}^{-1}$  的非平面摇摆振动最为有用, 可借助这些吸收峰鉴别各种取代烯烃的类型。

芳烃的 C-H 弯曲振动中, 主要是  $900\sim 650\text{cm}^{-1}$  处的弯曲振动, 对于确定苯环的取代类型是很有用的。甚至可以利用这些峰对苯环的邻、间、对位的异构体混合物进行定量分析。

C-O 伸缩振动常常是该区中最强的峰, 比较容易识别。一般醇的 C-O 伸缩振动在  $1200\sim 1000\text{cm}^{-1}$ , 酚的 C-O 伸缩振动在  $1300\sim 1200\text{cm}^{-1}$ 。在酯醚中有 C-O-C 的对称伸缩振动和反对称伸缩振动。反对称伸缩振动比较强。

C-Cl, C-F 伸缩振动都有强吸收, 前者出现在  $800\sim 600\text{cm}^{-1}$ , 后者出现在  $1400\sim 1000\text{cm}^{-1}$ 。

上述 4 个重要基团振动光谱区域的分布, 和利用振动频率公式 (2) 计算出的结果完全相符。即键力常数大的 (如  $\text{C}=\text{C}$ )、折合质量小的 (如 X-H) 基团都在高波数区; 反之键力常数小的 (如单键)、折合质量大的 (如 C-Cl) 基团都在低波数区。

常见各基团吸收带如附表所示。

### 三. 仪器和样品

1. 傅里叶变换红外光谱仪 (FT-IR)
2. 傅里叶变换红外光谱仪是一种干涉型红外光谱仪, 关键部分是干涉仪系统。干涉仪由光源、动镜、定镜、分束器、检测器组成。通常是采用迈克尔逊干涉仪 (Michelson Interferometer)。由干涉仪完成干涉调频, 在连续改变光程差的同时, 记录下中央干涉条纹的光强度变化即得到干涉图。利用电子计算机将这一干涉图进行傅里叶函数的余弦变换, 最后得到人们可辨认的红外光谱图。

傅里叶变换红外光谱仪 (FT-IR) 构成单元如图 3 所示。

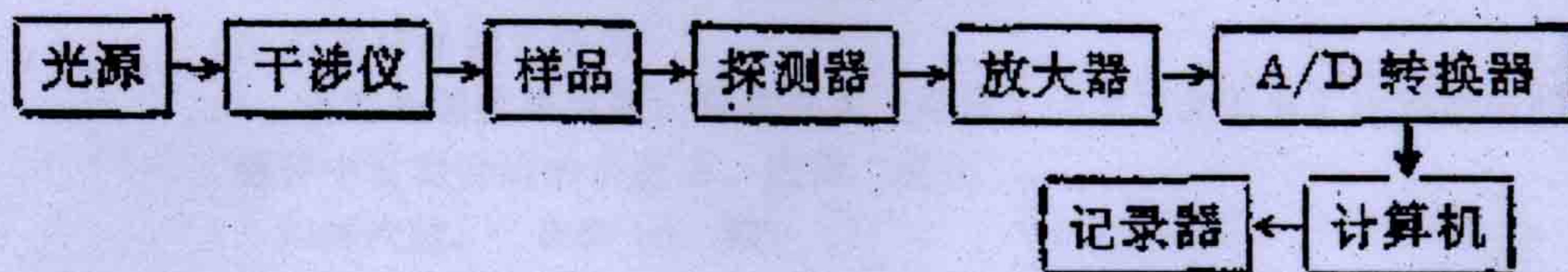


图 3 FT-IR 光谱仪结构组成方框图

### 3. 样品

聚合物一般以坚硬固体、弹性体、粘稠液体、薄膜等形态存在。针对不同形态的聚合物, 我们需要采取不同的制样方法。如对坚硬固体和粉末可采用溴化钾压片法; 对不宜研磨的弹性体和粘稠体可采用涂膜法, 也可采用在冷冻条件下显微切片法。采用衰减全反射 (ATR) 法时无需制样, 特别适用于一般制样方法不能制备的样品, 尤其适合于表面涂层和表面反应的研究, 可测定小至  $1-2\text{mm}^2$  的样品。最常用的两种制样方法如下:

#### (1) 薄膜法

选择合适有效的溶剂将聚合物溶解制成溶液, 使其成为均匀的薄膜后将其置于真空下干燥, 挥发掉其中的溶剂即可制成样品。

#### (2) 涂膜法

选择合适有效的溶剂将聚合物溶解制成溶液, 将其涂覆于溴化钾研片或单晶硅片上, 置于真空下干燥, 挥发掉其中的溶剂即可制成样品。

#### (3) 溴化钾压片法

此法对一般固体样品都是很适用的, 但是在聚合物制样中, 只适用于不溶性或脆性的树脂, 一些橡胶和粉末状的样品。具体步骤如下:

取  $2\text{mg}$  左右的待测样品和  $10\text{mg}$  左右的  $\text{KBr}$  晶体放在研钵中用力研磨, 使待测样品均匀分散在  $\text{KBr}$  中。将研好后的粉末, 小心地转入模具中, 用制样器用力压紧即可得到一个小的薄片状样品。

弹性高聚物 (如橡胶) 很难直接研细成粉末, 因此难于制作  $\text{KBr}$  晶片。这时可用低沸点溶剂 (如四氯化碳) 将高聚物溶胀, 然后加入  $\text{KBr}$  粉末, 边搅拌, 边研磨, 待溶剂挥发后进行压片。此外还可采用低温 ( $-40^\circ\text{C}$ ) 研磨技术, 使弹性高聚物在低温下变脆, 这时再与  $\text{KBr}$  混研压片。

一个较好的样片应该尽量的薄, 均匀, 并具有一定的透明性。

## 四. 实验步骤 (以美国热电公司生产傅里叶变换红外光谱仪 (FT-IR Nicolet 380) 为例)

### 1. 选取样品

供选择的样品有: 聚苯乙烯、聚甲基丙烯酸甲酯、涤纶、丁腈橡胶、天然橡胶、聚氯乙烯、聚乙烯、聚丙烯、聚苯乙烯、ABS 等。

### 2. 制样

根据样品性状选取合适的制样方法

### 3. 测试

#### (1) 开机

a. 打开仪器光学台的电源开关。

b. 打开计算机电源开关, 双击“EZ OMNIC”图标, 打开“OMNIC”窗口。

c. 查光谱仪的工作状态: 在“OMNIC”窗口的菜单栏下面“光学台状态”指示器显示绿色“V”, 即为正常。

#### (2) 放置样片

拉开窗口，将制好的样片固定在支架上。

### (3) 收集样品的光谱图

a. 设定光谱收集参数：单击菜单【采集】→【实验设置】出现相应的对话框，在以下栏目中设定合适的参数后，选择“确定”。

扫描次数： 8 或 16、32

光谱分辨率： 4

Y轴格式： %Transmittance

谱图校正： None

在“背景光谱管理”中选择“采集样品前采集背景”。

b. 收集样品光谱：单击菜单【采集】→【采集样品】，然后按屏幕提示进行操作。

① 在出现“输入谱图标题”对话框时，输入待测物谱图的标题，按“确定”。

② 在出现“背景 请准备背景采集”提示时，检查光路中没有样品后，选择“确定”。计算机收集背景的背景干涉图，并立即将其转换成单光束图，显示在窗口中。

③ 在出现“样品 请准备样品采集”提示时，将制好的样品插入样品架上，然后选择“确定”。计算机收集样品的干涉图，将其转换成单光束图，并作背景扣除处理。在窗口中显示的是扣除背景后的样品红外光谱图。

c. 保存光谱：点击左上角“文件”，在下拉框中选择“另存为”，然后输入文件名，点击“确定”，进行保存。

### (3) 光谱处理

a. 将收集的样品光谱图从%透光率的形式转变为吸光度的形式：单击“吸光度”工具按钮；

b. 作基线校正：单击“自动基线校正”工具按钮，窗口中出现两条谱线，其中红色为校正后的谱线（在谱图标题上有“\*”）；

c. 除原谱（即未经校正图谱）：点击原始谱线，即变为红色，且标题上没有“\*”标记。按“删除”工具按钮；

① 谱图从吸光度形式重新转变为%透光率形式：单击“%透过率”工具按钮；

② 在谱图上标注吸收峰的位置，并解释相应吸收峰的归属：

方法一：单击“标峰”，窗口出现一横线，可单击鼠标左键上下移动，以确定自动标峰的限度。

方法二：单击窗口下方的工具按钮“T”，移动鼠标箭头指向吸收峰峰尖，在按住键盘“Shift”同时按鼠标左键，然后按键盘上的“回车”键确定。

## 五. 结果与讨论

1. 解释样品谱图各主要吸收峰的归属。
2. 样品的用量对检测精度有无影响？
3. 做红外光谱检测时样品是否要经过精制？
4. 采集样品光谱为什么要扣除背景？

## 六. 参考文献

1. 《红外光谱法在分子研究中的应用》 沈德言著 科学出版社 1982年1月第1版
2. 《红外光谱吸收法及其应用》 陈允魁著 上海交通大学出版社 1993年11月第1版
3. 《近代傅里叶变换红外光谱法及应用》 吴瑾光主编 科学技术文献出版社

## 附表

表1 在C、H、O化合物中含氧基团的吸收带

基团	波 长 ( $\mu\text{m}$ )	波 数 ( $\text{Cm}^{-1}$ )	吸收带特征
-OH	2.7—2.8 (游离)	3704—3571	弱, 尖锐
	2.8—3.2 (缔合)	3571—3125	强, 宽
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{C} \end{array}$	5.5—6.5	1818—1538	强, 中等宽度
$\begin{array}{c}   \\ \text{C}-\text{O} \\   \end{array}$	7.5—11.0	1333—909	强, 宽度可变, 常常是多重峰

注意\*: 同时含有C=O和OH的化合物, 若其OH吸收不太明显, 可由C=O吸收带说明氧的存在。

表2 饱和碳氢化合物的基团吸收

结构	振动方式	吸收带位置		注 释
		波长 ( $\mu\text{m}$ )	波数 ( $\text{cm}^{-1}$ )	
-CH <sub>2</sub> -	C-H伸缩	3.42	2925	可靠, 强吸收
		3.51	2850	
-CH <sub>3</sub>	C-H伸缩	3.38	2960	甲基含量很高时, 才能观察到
		3.48	2874	
$\begin{array}{c} \text{R}_1 \\ \diagdown \\ \text{C}-\text{H} \\ \diagup \\ \text{R}_2 \end{array}$	C-H伸缩	3.46	2890	难于观察
-CH <sub>2</sub> -	C-H弯曲	6.82	1465	可靠, 当与氯氧相连时向长波方向位移
-CH <sub>3</sub>	C-H弯曲(反对称)	6.90	1450	与CH <sub>2</sub> 区别困难
$\begin{array}{c} \text{R}_1 \\ \diagdown \\ \text{C}-\text{CH}_3 \\ \diagup \\ \text{R}_2 \end{array}$	C-H弯曲(对称)	7.28	1375	非常有用的吸收带, 在复杂的结构中鉴定甲基是可靠的
$\begin{array}{c} \text{R}_1 \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{R}_2 \end{array} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C-H弯曲(对称)	7.24	1380	
		7.33	1365	
$\begin{array}{c} \text{R}-\text{C} \\ \diagdown \\ \text{CH}_3 \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C-H弯曲(对称)	7.19	1390	是可靠的
		7.33	1365	
$\begin{array}{c} \text{R}_1 \\ \diagdown \\ \text{C}-\text{H} \\ \diagup \\ \text{R}_2 \end{array}$	C-H弯曲	7.46	1340	有时有用
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \diagdown \\ \text{C}-\text{H} \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C-C伸缩	8.55	1170	对碳氢化合物有用, 如化合物中有其它元素, 用处较少
	C-H弯曲	8.66	1155	
-C-(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub>	C-C伸缩	8.0	1250	
	C-H弯曲			
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{R}_1-\text{C}-\text{R}_2 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C-C伸缩	8.3	1205	
	C-H弯曲			
$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{R}_2 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C-C伸缩	8.65	1155	
	C-H弯曲			
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{R}_2 \\   \quad   \\ \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \end{array}$	C-C伸缩	8.64	1157	
	C-H弯曲	8.90	1125	
		9.32	1073	
C-CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> 面内摇摆	10.3	971	主要用于聚乙烯的支化链的测定
C-CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> 面内摇摆	10.8	926	
C-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> 面内摇摆	11.0	909	
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> 面内摇摆	11.24	890	

$\text{>CHCH}_2\text{CH}_2$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.00	770	主要用于高级α-烯烃
$\text{>CH(CH}_2)_2\text{CH}_2$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.50	740	
$\text{>CH(CH}_2)_3\text{CH}_2$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.79	725	
$\text{>CH(CH}_2)_4\text{CH}_2$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.86	721	
$\text{>C-CH}_2\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	~13	770	在乙烯聚合物中是有用的, 但对邻近碳原子取代基的性质是灵敏的
$\text{>C-(CH}_2)_2\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.3	752	在研究烯烃聚合物和共聚物是非常有用的
$\text{>C-(CH}_2)_3\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.64	733	
$\text{>C-(CH}_2)_4\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.70	730	
$\text{>C-(CH}_2)_5\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.75	727	
$\text{>C-(CH}_2)_6\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.88	720*	
$\text{>C-(CH}_2)_n\text{-C-}$	CH <sub>2</sub> 面内摇摆	13.70 13.88	730 720	

\* 无定形 n > 5

\*\* 结晶 n > 5

表3 烯炔类和芳香族结构的吸收

结 构	近似吸收位置							
	C-H伸缩		C=C伸缩		C-H面内弯曲 (变形)		C-H面外弯曲 (变形)	
	μm	cm <sup>-1</sup>	μm	cm <sup>-1</sup>	μm	cm <sup>-1</sup>	μm	cm <sup>-1</sup>
$\begin{matrix} R_1 \\ H \end{matrix} > C = C < \begin{matrix} H \\ H \end{matrix}$	3.25 3.30	3077 3030	6.08	1645	7.10 7.68	1408 1302	10.10 11.00	990 910
$\begin{matrix} R_1 \\ R_2 \end{matrix} > C = C < \begin{matrix} H \\ H \end{matrix}$	3.24	3086	6.08	1645	7.10	1408	11.27	888
$\begin{matrix} R_1 \\ H \end{matrix} > C = C < \begin{matrix} H \\ R_2 \end{matrix}$	3.30	3030	6.02	1660	7.70	1300	10.36	966
$\begin{matrix} R_1 \\ H \end{matrix} > C = C < \begin{matrix} R_2 \\ H \end{matrix}$	3.30	3030	6.05	1653	7.10	1410	~14.5*	~690*
$\begin{matrix} R_2 \\ R_2 \end{matrix} > C = C < \begin{matrix} R_2 \\ H \end{matrix}$	3.30	3030	6.00	1667	7.40	1350	12.05	830
$\text{>C} = \overset{ }{\text{C}} - \overset{ }{\text{C}} = \text{C} <$	3.25 3.30	3077 3030	6.25	1600	7.30 7.64	1370 1310	9.90 11.00	1010 910
$R-C \equiv C-H$	3.02	3310	~4.45	~2247	—	—	~15.50 14.50	~645 690
单取代							13.35 14.50	750 690
邻位二取代	~3.30	~3030	6.2—	1613—	~6.75—	~1481	13.35	750
间位二取代			6.5**	1538**			12.90	775
对位取代							12.35	810
1,2,3-三取代							12.82	780

\*\* 位置可变

\*\*\* 一至几个强度可变的尖锐吸收

表4 羰基化合物的吸收

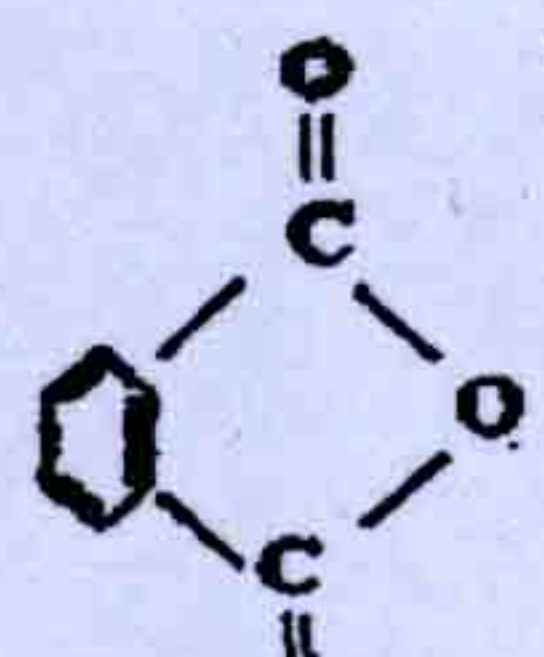
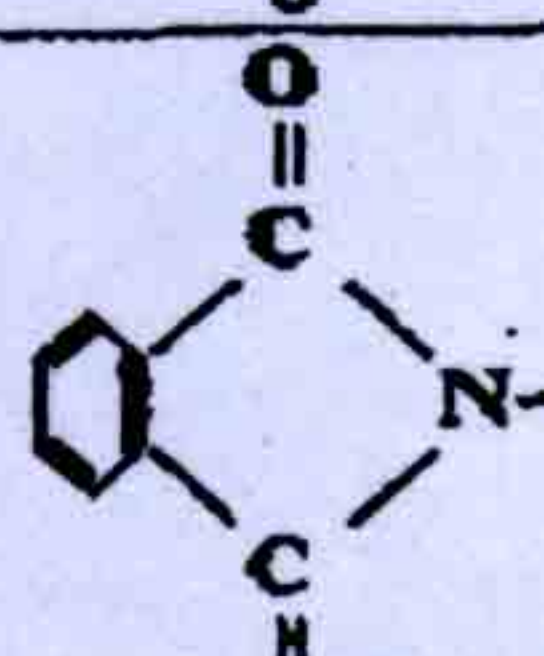
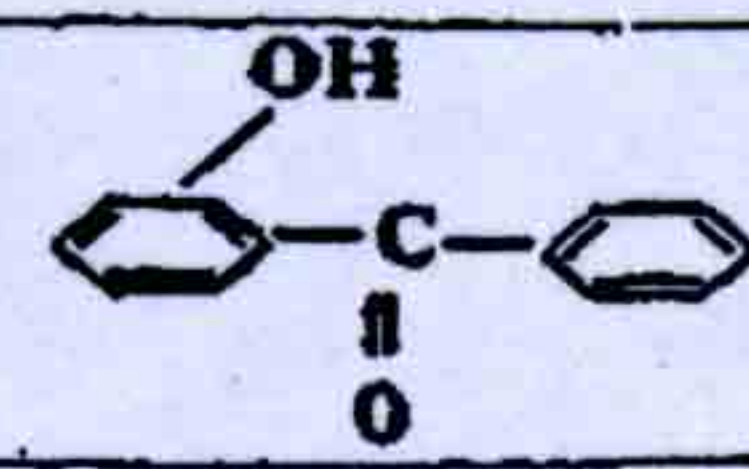
化合物	结构	C=O近似吸收位置		其它特征吸收
		$\mu\text{m}$	$\text{cm}^{-1}$	
脂肪族酸酐	$\begin{array}{l} \text{R}_1\text{CO} \\ \text{R}_2\text{CO} \end{array} \text{O}$	$\begin{array}{l} 5.48 \\ 5.72 \end{array}$	$\begin{array}{l} 1825 \\ 1750 \end{array}$	C—O吸收带在1150—1050 $\text{cm}^{-1}$ (8.70—9.52 $\mu\text{m}$ )
脂肪酰过氧化物	$\begin{array}{l} \text{R}_1\text{CO}-\text{O} \\   \\ \text{R}_2\text{CO}-\text{O} \end{array}$	$\begin{array}{l} 5.52 \\ 5.60 \end{array}$	$\begin{array}{l} 1812 \\ 1786 \end{array}$	没有有用的吸收带
芳香酸酐	$\begin{array}{l} \text{C}_6\text{H}_5-\text{CO} \\   \\ \text{C}_6\text{H}_5-\text{CO} \end{array} \text{O}$	$\begin{array}{l} 5.56 \\ 5.60 \end{array}$	$\begin{array}{l} 1800 \\ 1786 \end{array}$	芳香族结构
邻苯二甲酸酐		$\begin{array}{l} 5.4 \\ 5.62 \end{array}$	$\begin{array}{l} 1854 \\ 1780 \end{array}$	C—O吸收带在1150—1050 $\text{cm}^{-1}$ (8.70—9.52 $\mu\text{m}$ )
邻苯二甲酰亚胺		$\begin{array}{l} 5.62 \\ 5.82 \end{array}$	$\begin{array}{l} 1780 \\ 1718 \end{array}$	芳香族结构
脂肪酸芳香酯	$\text{RCOO}-\text{C}_6\text{H}_5$	5.65	1770	C—O吸收带在 $\begin{array}{l} 1220\text{cm}^{-1} \\ (8.2\mu\text{m}) \\ 1150\text{cm}^{-1} \\ (8.7\mu\text{m}) \end{array}$
芳香酸芳香酯	$\text{C}_6\text{H}_5-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_5$	5.73	1745	几个C—O吸收带在1300—1110 $\text{cm}^{-1}$ (7.7—9.0 $\mu\text{m}$ )
脂肪酸烷酯	$\text{R}_1\text{CO} \cdot \text{OR}_2$	5.76	1736	1170 $\text{cm}^{-1}$ (8.5 $\mu\text{m}$ ) 附近的C—O吸收带
羧酸	$\text{RCOH}$	5.78	1730	CH吸收带在2720 $\text{cm}^{-1}$ (3.68 $\mu\text{m}$ )
芳香酸烷酯	$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOR}$	5.81	1720	C—O吸收带在 $\begin{array}{l} 1120\text{cm}^{-1} \\ (8.93\mu\text{m}) \\ 1260\text{cm}^{-1} \\ (7.94\mu\text{m}) \end{array}$
二烷基酮	$\text{R}_1\text{COR}_2$	5.83	1715	C—O吸收带在1325—1215 $\text{cm}^{-1}$ (7.55—8.23 $\mu\text{m}$ )
脂肪酸(二聚体)	$\text{R}-\text{COOH}$	5.85	1710	$\begin{array}{l} \text{C—O在}\sim 1300\text{cm}^{-1} \\ (7.7\mu\text{m}) \\ \text{OH在}\sim 930 (10.75\mu\text{m}) \end{array}$
芳香酸(二聚体)	$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$	5.92	1690	芳香族吸收带
二芳基酮	$\text{C}_6\text{H}_5-\text{CO}-\text{C}_6\text{H}_5$	6.00	1667	芳香族结构
邻羟基二芳基酮		6.08	1645	芳香族结构
羧酸盐离子	$\text{RCOO}^-$	$\begin{array}{l} 6.40 \\ 7.15 \end{array}$	$\begin{array}{l} 1563 \\ 1400 \end{array}$	$\begin{array}{l} \text{脂肪酸盐—CH}_2\text{—在}1350\text{—} \\ 1100\text{cm}^{-1} (7.41\text{—}9.09\mu\text{m}) \\ \text{芳香酸盐—芳香结构} \end{array}$



表 5 含羟基化合物的吸收峰

化合物	振动方式	近似吸收位置		注 释
		$\mu\text{m}$	$\text{cm}^{-1}$	
醇、酚、酸、过氧化物	OH伸缩	2.7—3.2	3704—3125	
脂肪酸	C=O伸缩	5.85	1710	二聚体，在稀溶液中向短波位移
芳香酸	C=O伸缩	5.92	1690	
酸	C-O伸缩	7.81	1282	常有几个吸收带，在芳香醚中也存在
酚	C-O伸缩	8.20	1220	
三级醇	C-O伸缩	8.70	1150	三级醇的位置不太可靠
二级醇		9.09	1100	
一级醇		9.50	1053	
酸	OH弯曲	10.8	926	只在二聚体中存在

表 6 含氯碳氢化合物的吸收

结 构	振动方式	近似吸收位置		注 释
		$\mu\text{m}$	$\text{cm}^{-1}$	
-CHCl-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -	CH <sub>2</sub> 弯曲	6.95	1440	在聚烯烃中，CH <sub>2</sub> 吸收带出现在1466 $\text{cm}^{-1}$ (6.82 $\mu\text{m}$ )
-CHCl-CH <sub>2</sub> -CHCl-		7.00	1430	
-CCl <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CHCl-		7.05	1418	
-CCl <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CCl <sub>2</sub> -		7.15	1400	
-CH <sub>2</sub> -CHCl-CH <sub>2</sub> -	C-H弯曲	7.50	1333	
-CHCl-CHCl-CHCl-		8.00	1250	
-CH <sub>2</sub> -CCl <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -	C-C伸缩	7.85	1273	在聚偏二氯乙烯及其共聚物中位置非常易变
-C-Cl	C-Cl伸缩	9.40	1064	
		12.05—16.13	830—620	