

# 结构表征小能手之尼高力傅立叶变换红外光谱仪

刘炜

(富美实(上海)化学技术有限公司, 上海 200000)

在有机化合物的结构表征中, 我们常常会用到四大谱图, 这四大谱图分别为紫外光谱图、红外光谱图、质谱图以及核磁共振图谱。红外光谱作为四大图谱之一, 常常是不可或缺的。我们通过对有机物的红外光谱图进行解析, 可以大致判断化合物具有哪些官能团。



单位有一台美国 Thermo 尼高力傅立叶变换红外光谱仪, 这台仪器承担着日常样品测试工作, 比如未知样品官能团分析, 对照品及原料药红外光谱图对比以及标准品的结构表征等等。



这台仪器配备了两个模块，分别为 iD1 和 iD5，这两个模块分别对应着两个不同的分析方法，在我们对化合物进行分析前，需要确定好使用哪种模式进行测定，不过这里推荐使用 iD5 模块，因为采用该模块对待测物的要求比较低，固体样品和液体样品都可以直接拿来测定，这样就方便很多，不需要另外对待测物采用模具进行压片制样。

在样品分析前我们要注意安装的模块是否正确，同时在仪器软件操作界面设置正确的操作模块和参数。在样品分析前还需要采集空白背景图谱，这时候我们的样品台晶体上一定不要有异物，事先擦拭干净，待采集完空白后再把待测样品均匀覆盖在晶体上，这样可以确保采集图谱的代表性。

美国赛默飞尼高力傅立叶变换红外光谱仪的仪器结构比较简单，还具有体积小的优点，它不像气相，质谱，液相等仪器需要占据桌面很大一块地方，它只要这些仪器 1/2 甚至 1/3 的占地面积就能安置。

同时它还具有操作简单，上手快的优点，对于样品类型也没有特定限制，液体样品和固体样品均可，但事先要将样品里面的水分除去，不然会影响测定结果。液体样品由于比较均

匀，因此没有什么其它要求，对于固体样品要尽可能的进行研磨均匀。上样前需要检查一下样品台上面是否干净，有没有污染物，可使用异丙醇滴在样品台上，然后用棉签轻轻擦拭干净，保证光路无遮挡。测试样品结束后也进行同样操作，将残余样品清洗干净。

