

طیف‌بینی فروسرخ – میانی مبانی و راهنمایی‌های کاربردی

دکتر سودم‌السادات سجادی

عضو هیئت علمی پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای



مؤسسه انتشارات علمی دانشگاه صنعتی شریف



مؤسسه انتشارات علمی
دانشگاه صنعتی شریف

طیف‌بینی فروسرخ - میانی

مبانی و راهنمایی‌های کاربردی

تألیف: دکتر سوده‌السادات سجادی (عضو هیئت علمی پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای)

ویراستار: امیرمسعود کی‌منش

طراحی جلد: الهه احمدی میرقاند

مؤسسه انتشارات علمی دانشگاه صنعتی شریف، تهران

چاپ اول: ۱۴۰۰

شمارگان: ۳۰۰

بها: ۱۵۰۰۰۰ تومان

حق چاپ برای مؤسسه انتشارات علمی دانشگاه صنعتی شریف محفوظ است.

ISBN 978-964-208-259-9

شابک: ۹۷۸-۹۶۴-۲۰۸-۲۵۹-۹

تلفن: ۶۶۰۱۳۱۲۹-۶۶۱۶۴۰۷۲-۶۶۱۶۴۰۷۰

دفتر مرکزی: خیابان آزادی - دانشگاه صنعتی شریف

دفتر فروش: میدان انقلاب - خیابان شهید منیري جاوید (اردیبهشت) - ساختمان بهمن - پلاک ۸۷ - طبقه چهارم - واحد ۴۰۲

تلفن: ۶۶۴۰۵۱۳۲-۶۶۹۶۷۸۹۶

فروش اینترنتی: book.sharif.ir

پست الکترونیکی: publishing@sharif.ir

موضوع: infrared spectroscopy

شناسه افزوده: دانشگاه صنعتی شریف- مؤسسه انتشارات علمی

شناسه افزوده:

Sharif University of Technology, Institute of Scientific Publications

رده‌بندی کنگره: QD۹۶

رده‌بندی دیویی: ۵۴۳/۵۷

شماره کتابشناسی ملی: ۸۴۹۱۷۹۶

اطلاعات رکورد کتابشناسی: فیبا

سرشناسه: سجادی، سوده‌السادات، ۱۳۶۰

عنوان و نام پدیدآور: طیف‌بینی فروسرخ - میانی و راهنمایی‌های کاربردی /

سوده‌السادات سجادی؛ ویرایش امیرمسعود کی‌منش

مشخصات نشر: تهران: دانشگاه صنعتی شریف- مؤسسه انتشارات علمی، ۱۴۰۰

مشخصات ظاهری: ۴۹۶ ص: جدول، نمودار

شابک: 978-964-208-259-9

وضعیت فهرست‌نویسی: فیبا

یادداشت: کتابنامه

موضوع: طیف‌بینی فروسرخ

به نام خدا

فهرست

پیشگفتار

سیزده

فصل ۱ مقدمه

مقدمه

تابش الکترومغناطیس و طیف الکترومغناطیس

برهم‌کنش تابش الکترومغناطیس با ماده

نظریه طیف‌بینی فروسرخ

نمایش داده‌ها

تداخل قله‌های گازهای جوی در طیف‌بینی فروسرخ

مزیت‌های FT-IR ها در مقایسه با انواع دیگر طیف‌سنج‌های فروسرخ

منابع

فصل ۲ شیوه عملکرد دستگاه FT-IR

تداخل سنج و تداخل نگاشت

ایجاد تداخل نگاشت

شیوه تبدیل تداخل نگاشت به طیف

قدرت تفکیک دستگاه

منابع

فصل ۳ سخت‌افزار FT-IR

تداخل‌سنج‌های نوع مایکلسون

اندازه‌گیری اختلاف مسیر نوری تداخل‌سنج

شکافنده باریکو

منابع تابش فروسرخ برای طیف‌سنجی عبوری و بازتابی

آشکارسازها

۷۵	اپتیک
۷۹	طراحی طیف‌سنج
۸۱	آزمون کیفیت دستگاه و عیب‌یابی آن
۸۴	منابع

۸۷	فصل ۴ استفاده مناسب از پردازش طیفی
۸۸	قوانین پردازش طیفی
۸۸	تفریق طیفی
۹۴	اصلاح خط مبنا
۹۸	هموارسازی
۱۰۱	مشتقات طیفی
۱۰۴	از بین بردن پیچیدگی
۱۰۹	جستجوی کتابخانه‌ای طیفی
۱۲۰	منابع

۱۲۱	فصل ۵ آماده‌سازی درست نمونه‌ها
۱۲۱	مرور کلی بر نمونه‌برداری عبوری
۱۲۴	آنالیز عبوری جامدات و پودرها
۱۲۴	قرص‌های KBr
۱۲۸	مول‌ها
۱۳۳	آنالیز عبوری پلیمرها
۱۳۳	روش کست فیلم
۱۳۵	روش حرارت و فشار
۱۳۷	آنالیز عبوری مایعات
۱۳۸	فیلم‌های نازک موئین
۱۳۹	سل‌های مایع درزگیری شده
۱۴۲	آنالیز عبوری گازها و بخارها
۱۴۷	آنالیز بازتابی
۱۴۷	انواع گوناگون بازتاب

۱۴۹	مزیت‌ها و عیب‌های نمونه‌برداری بازتابی
۱۵۰	بازتاب آینه‌ای
۱۵۱	بازتاب پخشیده (DRIFTS)
۱۵۵	بازتاب کلی تضعیف‌شده
۱۵۸	عمق نفوذ
۱۶۷	کاربردهای ATR
۱۷۱	ATR: مزیت‌ها و عیب‌ها
۱۷۳	آماده‌سازی نمونه FT-IR: مرور کلی و پیشنهادها
۱۷۳	منابع

۱۷۵	فصل ۶ طیف‌بینی فروسرخ کمی
۱۷۵	مقدمه
۱۷۵	قانون بیر
۱۷۹	آنالیز تک آنالیت
۱۷۹	کالیبراسیون و پیش‌بینی با قانون بیر
۱۸۲	رگرسیون خطی: برازش حداقل مربعات
۱۸۳	فرض‌های روش حداقل مربعات
۱۸۴	محاسبه خط حداقل مربعات
۱۸۶	آمار برای تعیین کیفیت و توانمندی (استواری) کالیبراسیون
۱۹۱	روش‌های ساخت استانداردها و اندازه‌گیری طیف‌ها
۱۹۳	پروتکل آزمایشی برای آنالیز تک جزئی
۱۹۳	اندازه‌گیری درست جذب‌ها
۱۹۵	رسیدگی به قله‌هایی که هم‌پوشانی دارند
۱۹۶	اصلاح برای تداخل‌کننده‌ها
۱۹۹	اجتناب از خطاهای آزمایشی
۲۰۴	منابع

۲۰۵	فصل ۷ آنالیز چند جزئی I
۲۰۵	روش‌های حداقل مربعات

۲۰۶	روش تعیین مستقل (MID)
۲۱۳	تعیین هم‌زمان چند جزء تشکیل‌دهنده
۲۱۷	روش حداقل مربعات کلاسیک (ماتریس K)
۲۲۰	روش حداقل مربعات معکوس (ماتریس P)
۲۲۷	اعتبارسنجی و پیش‌بینی
۲۲۸	مزیت‌ها و عیب‌های ILS
۲۲۹	منابع

فصل ۸ آنالیز چند جزئی II

۲۳۱	مقدمه
۲۳۲	مرور کلی بر تحلیل عاملی
۲۳۵	رگرسیون مؤلفه‌های اصلی (PCR)
۲۳۶	الگوریتم‌های حداقل مربعات جزئی (PLS)
۲۳۷	کاربرد تحلیل عاملی
۲۳۷	اعتبارسنجی متقابل: بررسی کیفیت مدل
۲۳۹	کالیبراسیون: گزینش تعداد درست عامل
۲۴۴	اعتبارسنجی
۲۴۵	مزیت‌ها و عیب‌های روش‌های تحلیل عاملی
۲۴۶	منابع

فصل ۹ منشأ ارتعاشی بسامدهای گروه

۲۴۷	مقدمه
۲۴۷	نوسانگرهای دواتمی
۲۴۸	نوسانگرهای جفت شده
۲۵۱	نوسانگرهای جفت شده نامتقارن
۲۵۲	بسامدهای کششی X-H
۲۵۳	ارتعاشات پیوند سه‌گانه
۲۵۴	پیوندهای دوگانه همجوار
۲۵۵	ترکیبات $C \equiv C$ و کربنیل

۲۵۸	ارتعاشات کششی ترکیبات حلقوی
۲۵۹	برهم‌کنش خمشی-خمشی
۲۶۶	برهم‌کنش کششی-خمشی
۲۶۹	انرژی‌های ثابت نیروی برهم‌کنش
۲۷۰	منابع

فصل ۱۰ استفاده از بسامدهای گروه مشخصه در تحلیل ساختار

۲۷۱	مقدمه
۲۷۱	آلکان‌ها
۲۷۵	گروه‌های متیل
۲۷۶	ارتعاشات کششی CH_3
۲۷۸	ارتعاشات تغییر شکل CH_3
۲۸۲	ارتعاشات گهواره‌ای CH_3
۲۸۴	گروه‌های متیلن
۲۸۴	ارتعاشات کششی CH_2
۲۸۷	ارتعاشات تغییر شکل CH_2
۲۸۷	ارتعاشات جنبانه‌ای CH_2
۲۸۷	ارتعاشات گهواره‌ای CH_2
۲۸۸	ارتعاشات پیچشی CH_2
۲۸۸	CH_2 در سامانه‌های حلقوی سیرشده
۲۸۹	

فصل ۱۱ آلکین‌ها و آلن‌ها

۲۹۱	مقدمه
۲۹۱	استیمین‌های تک استخلافی
۲۹۳	استیلین‌های دو استخلافی
۲۹۴	آلن‌ها
۲۹۵	

فصل ۱۲ گروه‌های اولفین

۲۹۵	مقدمه
۲۹۷	

پیشگفتار

بحث‌های طیف‌بینی فروسرخ دامنه گسترده‌ای از مطالب سطوح مقدماتی تا پیشرفته و از جنبه‌های کاربردی تا نظری را شامل می‌شود. باوجود اینکه کتاب‌های بسیار ارزشمندی در زمینه مبانی نظری و دستگاهی طیف‌بینی فروسرخ وجود دارد که مطالعه آنها به روشن شدن بسیاری از زمینه‌های طیف‌سنجی کمک می‌کند، تجربه نشان می‌دهد که بیشتر کاربران و دانشجویان، به‌ویژه دانشجویان رشته‌های غیر شیمی ارائه مطالب را به‌صورت ساده و کاربردی ترجیح می‌دهند.

باوجود تلاش‌های فراوان مراکز گوناگون در برگزاری کارگاه‌های آموزشی و نگارش متن‌های علمی متنوع، نیاز دانشجویان در این زمینه تأمین نشده است؛ شاید به این دلیل که کسب بیشترین اطلاعات از یک طیف، بدون آگاهی از جنبه‌های کاربردی طیف‌سنجی مانند چگونگی آماده‌سازی درست نمونه و یا استفاده مناسب از پردازش طیفی میسر نیست و این درحالی است که برای بسیاری از افراد امکان محدودی برای کار مستقیم با دستگاه وجود دارد. برای رفع این مشکل، در این کتاب سعی شده ضمن اشاره به بحث‌های نظری، کار با دستگاه نیز توضیح داده شود. البته با توجه به گستردگی بحث‌ها، نگارش کتابی که به‌گونه‌ای کامل نیاز مخاطبین را تأمین کند، بسیار دشوار است، اما سعی شده است که با رعایت حد میانه‌ای از نظریه و کاربرد، این نیاز تأمین شود. همچنین، با بیان مطالب کتاب به‌صورت تصویری و ارائه مثال‌های گوناگون تلاش شده است تا تصویر ذهنی روشنی از اصول و فرایندهای زیربنایی موضوع برای خواننده ایجاد شود.

در گردآوری این کتاب مطالب زیادی از اساتادان و همکاران آموخته‌ام که بر خود لازم می‌دانم که از همه آنها تشکر کنم. در اینجا، به ویژه از جناب آقای دکتر مجید حاجی‌حسینی قدردانی می‌کنم که با ویرایش علمی مطالب باحوصله و دقت فراوان مرا در نگارش این کتاب یاری کردند. همچنین، تلاش‌های خانم دکتر زهرا باقری که کار بازخوانی متن را به عهده داشتند شایان تقدیر است.