



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 6040—2019  
代替 GB/T 6040—2002

---

## 红外光谱分析方法通则

General rules for infrared analysis

2019-06-04 发布

2020-05-01 实施

---

国家市场监督管理总局  
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 术语和定义 .....	1
4 仪器装置 .....	3
5 样品制备方法 .....	7
6 操作方法 .....	9
7 定性分析.....	10
8 定量分析.....	10
9 安全和维护.....	11
10 测定结果的整理 .....	12

## 前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准代替 GB/T 6040—2002《红外光谱分析方法通则》。本标准与 GB/T 6040—2002 相比主要技术变化如下：

- 修改了标准的波数适用范围(见第 1 章,2002 年版的第 1 章)；
- 术语定义部分增加了吸光度、基线、基频峰、倍频峰、合频峰、傅立叶退卷积、镜面发射法(见第 3 章,2002 年版的第 3 章)；
- 修改了仪器概要内容及示意图(见 4.1,2002 年版的第 1 章)；
- 仪器结构部分增加了光阑,删除了数据处理及显示记录(见 4.2,2002 年版的 4.2)；
- 附属装置增加了变压池、样品穿梭器、掠角反射附件、光纤探头,将 ATR 附件进行分类(见 4.3,2002 年版的 4.3)；
- 附加功能部分增加了归一化处理、峰高计算、加谱计算、乘谱计算、K-M 变换(见 4.4,2002 年版的 4.4)；
- 固体样品制备方法中增加了浆糊法和漫反射法(见 5.2,2002 年版的 5.2)；
- 删除粉末样品制备方法(见 2002 年版的 5.3)；
- 重新描述气体样品制备方法(见 5.4,2002 年版的 5.5)；
- 修改仪器安装条件(见 6.1,2002 年版的 6.1)；
- 修改透射率为 0% 的物质的波数适用范围(见 6.3.3,2002 年版的 6.3.2)；
- 修改定性分析的注意事项(见 7.2,2002 年版的 7.2)；
- 修改定量分析的方法(见 8.2,2002 年版的 8.2)。

本标准由中国石油和化学工业联合会提出。

本标准由全国化学标准化技术委员会有机化工分技术委员会(SAC/TC 63/SC 2)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、上海市计量测试技术研究院、广州中科检测技术服务有限公司、衢州氟硅技术研究院。

本标准主要起草人:姚青、李杰、黄文氢、黄煜、宗同强、钟军、朱丽娜、刘倩、薛民杰。

本标准所代替标准的历次版本发布情况为：

- GB/T 6040—1985、GB/T 6040—2002。

# 红外光谱分析方法通则

## 1 范围

本标准规定了用红外光谱仪定性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  $7\,800\text{ cm}^{-1}\sim 350\text{ cm}^{-1}$  (波长  $1.28\text{ }\mu\text{m}\sim 28.57\text{ }\mu\text{m}$ ) 的红外光谱分析。

## 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。

GB/T 7764 橡胶鉴定 红外光谱法

GB/T 14666 分析化学术语

## 3 术语和定义

GB/T 14666 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 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

**吸光度 absorbance**

入射光强度与透射光强度比值的以 10 为底的对数。

### 3.3

**样品厚度 sample thickness**

辐射光束在样品中通过的距离。

注:通常以厘米为单位。

### 3.4

**标准物质 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

**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。

### 3.6

**基频峰 fundamental bands**

分子吸收光子后从一个能级跃迁到相邻的高一能级产生的吸收。

### 3.7

**倍频峰 overtone bands**

分子吸收比原来能量大一倍的光子之后,跃迁两个以上能级产生的吸收峰。