

用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的 ATR 采样附件

简单而通用的 FTIR 测量方法

前言

衰减全反射 (ATR) 是傅立叶变换红外 (FTIR) 光谱仪使用最广泛的一种采样方法。该方法能够快速轻松地测量包括液体、固体、粉末、半固体和糊剂在内的各种样品类型，因此得到了广泛应用。Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪采用多功能模块化概念，精确优化的采样附件连接在 Cary 630 FTIR 主机的前端。根据特定的应用或样品，应使用不同 ATR 传感器。永久校准的光学元件方便在数秒内完成各种模块的更换，无需用户校准。Cary 630 FTIR 有多种 ATR 传感器可供选择，并具有在不同 ATR 传感器之间快速切换的独特功能。

对于大多数应用而言，Cary 630 FTIR 可采用单反射硒化锌 (ZnSe)、钻石和锗 (Ge) 晶体 ATR 采样附件。这些附件可与采样压头配合使用，是分析固体、液体、糊剂和凝胶材料的理想选择。钻石传感器非常耐用，是分析坚硬材料的理想选择。ZnSe 传感器是分析较软固体的良好选择。Ge 传感器光程较短，是分析强吸光样品的理想选择。此外，多反射 ZnSe ATR 采样附件是分析液体、糊剂和凝胶的理想选择，因为这些测量需要更高的灵敏度。

这些采样技术专为 Cary 630 FTIR 定制设计，因此无论针对某一应用选择了哪种 ATR 传感器，分析人员都可对测量结果充满信心。这些量身定制的技术使这款光谱仪在同类产品中具有非常高的性能、灵敏度与简便易用性。

本技术概述介绍了可用于 Cary 630 FTIR 光谱仪的 ATR 传感器 (图 1)，描述了针对特定样品类型应该选择哪种传感器，并基于 Cary 630 FTIR 总结了 ATR FTIR 光谱仪的典型应用。



图 1. Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪可配备适当的采样附件，以满足所有分析需求。钻石晶体 ATR 采样附件是固体、液体、糊状物和凝胶 FTIR 分析的理想选择

操作

在 ATR 采样中，红外 (IR) 光穿过晶体，在晶体-样品界面至少发生一次全反射，反射光传输到 FTIR 检测器。在内反射过程中，一部分红外光进入样品并被吸收。进入样品的光则称为隐失波。隐失波穿透样品的深度取决于 ATR 晶体与样品之间的折光率差异。考虑到不同的样品类型和光程长度要求，采用几种不同折射率的材料作为 ATR 传感器。

单反射 ATR

单反射测量仅允许光束在晶体内发生一次内反射 (图 2)。

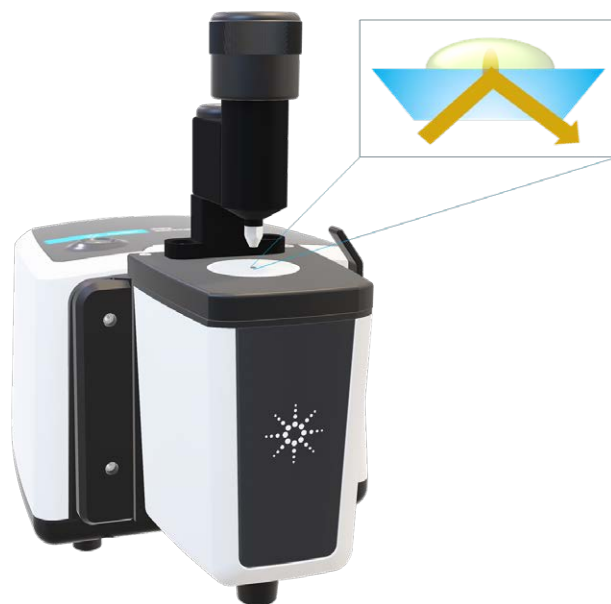


图 2. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的单反射 ATR 附件

多反射 ATR

相比之下，多反射 ATR 传感器采用较长的晶体，使光束在检测前可以在样品表面发生多次全反射（图 3）。因此，红外光与样品在每个反射点都会发生相互作用，从而得到更长的有效光程。这提高了测量的灵敏度，适用于需要较低检测限及更快数据采集的应用。



图 3. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的多反射 ATR 附件

样品测量

使用 ATR 附件分析液体样品或糊剂时，将一小滴样品置于 ATR 晶体上。测量完成后，可以用温和溶剂将晶体擦拭干净（如有必要）。

分析粉末、薄膜或者其他固体样品时，将样品置于 ATR 晶体上，并用旋转压头压紧，确保样品和晶体之间接触良好。测量完成后，可以重新收集样品，适用于少量或昂贵的样品。测量完成后，可以用温和溶剂将晶体擦拭干净（如有必要）。

单反射 ATR 附件上的旋转压头对给定 ATR 传感器材料施加合适的压力。旋转压头可以旋转 360 度，便于 ATR 晶体采样或清洗。在不需要压头时，也可将其拆卸（如只分析液体样品时）。多反射 ATR 附件仅用于液体样品，因此不需要压头。

用于 Cary 630 FTIR 的 ATR 传感器

无论您的应用需要单反射 ZnSe、钻石、Ge 还是多反射 ZnSe，Cary 630 FTIR 均可为您提供出色的性能。与其他使用第三方附件的 FTIR 光谱仪不同，Cary 630 FTIR 的采样技术经过安捷伦工程师定制设计，可与光谱仪的光学特性无缝匹配。无需校准的耐用设计允许在这些 ATR 采样技术之间进行瞬时切换，因此系统可轻松应对遇到的所有样品类型。用于 Cary 630 FTIR 光谱仪的不同 ATR 附件列于表 1。

表 1. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的 ATR 附件

ATR 附件	波长范围	有效光程	样品类型	旋转压头
单反射 ZnSe ATR 附件	5100–600 cm ⁻¹	4000 cm ⁻¹ 下为 1.1 μm 1700 cm ⁻¹ 下为 2.6 μm 600 cm ⁻¹ 下为 7.3 μm	纯净或浓缩物质；软质固体、糊剂、凝胶、液体；非强酸或强碱	有
多反射 ZnSe ATR 附件	5100–600 cm ⁻¹	4000 cm ⁻¹ 下为 5.5 μm 1700 cm ⁻¹ 下为 13.0 μm 600 cm ⁻¹ 下为 36.5 μm	低浓度组分、更稀的溶液；糊剂、凝胶、液体；非强酸或强碱	无
单反射 Di ATR 附件	6300–350 cm ⁻¹ ^a 5100–600 cm ⁻¹ ^b	4000 cm ⁻¹ 下为 1.1 μm 1700 cm ⁻¹ 下为 2.6 μm 600 cm ⁻¹ 下为 7.3 μm	硬质固体、颗粒、聚合物、糊剂、液体；所有 pH 范围	有
单反射 Ge ATR 附件	5100–600 cm ⁻¹	4000 cm ⁻¹ 下为 0.15 μm 1700 cm ⁻¹ 下为 0.36 μm 600 cm ⁻¹ 下为 1.02 μm	填充炭黑的聚合物	有

^a 配备 KBr 光学元件的 Cary 630 FTIR 主机
^b 配备 ZnSe 光学元件的 Cary 630 FTIR 主机

硒化锌 (ZnSe) ATR 附件

ZnSe 是一种半导体材料，多年来一直用作 ATR 传感元件。它比较坚硬、波长范围较宽，且不溶于水。因此它在测量柔软固体、糊剂、凝胶和液体时是不错的选择。它可用于分析 pH 5-9 的水溶液。Cary 630 FTIR 具有两种不同的 ZnSe 采样技术，即多反射和单反射传感器。

单反射 ZnSe ATR 附件

由于进入样品的红外光光程较短，该传感器适用于纯净的样品，即样品浓度相对较高或纯样品。单反射 ZnSe 附件是鉴定较柔软材料和粘性液体的良好选择。在测量聚合物薄膜等固体时，它可与 Cary 630 FTIR 配合使用。ZnSe ATR 附件如图 4 所示。



图 4. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的硒化锌 ATR 附件

多反射 ZnSe ATR 附件

Cary 630 FTIR 的高性能结合多反射 ATR 传感器更长的光程，提供了出色的灵敏度。使这台光谱系统可测量糊剂、凝胶和液体中浓度较低的组分，也可分析 pH 5-9 的稀释或浓缩水溶液中的溶质。多反射传感器嵌入不锈钢支架内，因此是分析非粘性液体样品的理想选择。当需要定性或定量测量时，这种传感器是理想选择。不建议用于测量固体材料，因为它无法与压钳配合使用。多反射 ZnSe ATR 附件如图 5 所示。



图 5. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的多反射硒化锌 ATR 附件

单反射钻石晶体 (Di) ATR 附件

使用钻石作为 ATR 材料已使 FTIR 采样发生了革命性变化。使用这种传感器可轻松对矿物和硬聚合物等较硬的样品进行分析，因为这种材料不易划伤。钻石晶体 ATR 也可耐强酸和强碱腐蚀，是测量高或低 pH 水溶液的理想选择。用于 Cary 630 FTIR 的钻石晶体 ATR 是一种单反射传感器，可与样品压头配合使用，使待分析材料与钻石晶体表面保持良好接触。作为单反射传感器，它适用于检测颗粒、粉末或其他硬质材料形式的纯净物质。Cary 630 FTIR 钻石晶体 ATR 的独特设计使其可提供较高能量输出，光谱仪与钻石采样技术的结合通常比其他常规 FTIR 系统更为出色。单反射钻石晶体 ATR 附件如图 6 所示。



图 6. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的单反射钻石晶体 ATR 附件

单反射锗 (Ge) 晶体 ATR 附件

Ge 一种是易碎的硬质半金属元素，它具有较高的折射率，因此红外辐射对样品的穿透深度较浅。Cary 630 FTIR 可使用单反射 Ge ATR 元件，该元件是分析高吸光度或高散射度材料的理想选择。含炭黑的聚合物等样品通常可使用 Ge ATR 进行分析。O 形圈、垫片和黑色橡胶轮胎均为适合通过 Cary 630 FTIR Ge ATR 采样附件分析的材料示例。单反射锗晶体 ATR 附件如图 7 所示。



图 7. 用于 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪的单反射锗晶体 ATR 附件

应用示例

ATR 分析在工业及学术界的多种应用中广泛使用。安捷伦发表了介绍 ATR 附件应用的应用简报，并提供与其他现有采样技术的对比分析。目前发表的应用简报汇总如下。可在安捷伦网站上查看所有的应用。

药品包装材料质量控制和 USP <661.1> 法规认证

本研究的重点是使用 FTIR 光谱仪分析药品包装中所用的聚合物。使用钻石晶体 ATR 附件测定品牌药和仿制药包装之间的区别，以及展示对假冒药品的检测。章节 <661.1> 建筑用塑料材料中概述的 Cary 630 FTIR 在 USP 药品包装法规中的应用也已得到验证。

[下载完整应用简报。](#)

利用 FTIR 光谱快速、实时测定大麻素的效价

在本研究中，根据不同大麻产品的 THC 含量测定其效价。使用配备钻石晶体 ATR 附件的 Cary 630 FTIR 分析多种大麻样品类型（如提取物、浓缩物和馏分油），无需样品前处理。使用配备钻石晶体 ATR 附件的 Cary 630 FTIR 实现了生产工作流程中的快速、无损分析，提高了样品分析的效率和通量。



图 8. 使用配备钻石 ATR 附件的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪，无需任何样品前处理即可记录大麻浓缩物和馏分油的光谱

[下载完整应用简报。](#)

使用 Agilent Cary 630 ATR-FTIR 光谱仪测定婴儿米粉中的蔗糖浓度

本研究测定了不同品牌儿童早餐米粉的含糖量。将米粉样品研磨成粉末，直接置于钻石晶体 ATR 附件上，对蔗糖浓度进行定量。对于相同样品，Cary 630 FTIR 得到的结果与 HPLC 的数据表现出优异的相关性。

[下载完整应用简报。](#)

Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪对药物的快速鉴定与定性分析

本研究重点展示了 ATR-FTIR 分析在药品特定成分分类和纯度评估时，所展现出的出色灵敏度。使用配备钻石晶体 ATR 采样附件的 Cary 630 FTIR 对纯乙酰水杨酸样品和受污染的乙酰水杨酸样品进行了分析。Agilent MicroLab 软件独特的逻辑设置功能实现了制药应用中不同质量原料和成分的鉴定、定性和轻松区分。

[下载完整应用简报。](#)

使用配备五次反射 ZnSe 晶体 ATR 附件的 Cary 630 光谱仪进行混合燃料分析

本研究测定了各种燃料混合物的组成。使用配备多反射 ZnSe ATR 附件的 Cary 630 FTIR 对柴油/丁醇混合物进行重复分析，无需样品前处理，提供了分子水平上的数量和混合现象的信息。

[下载完整应用简报。](#)

分析洗手液中的醇类浓度

使用配备钻石晶体 ATR 附件的 Cary 630 FTIR 对洗手液中的醇类含量进行了定量分析。利用 MicroLab 软件开发了一种常规质量控制 (QC) 方法，可以自动鉴定醇类类型，并准确测定醇类浓度。



图 9. 将洗手液样品置于 Agilent Cary 630 FTIR 的 ATR 附件上。Angilen MicroLab 软件通过图片引导式工作流程，帮助用户进行清洁和采样在内的每个测量步骤。

[下载应用宣传单。](#)

检测假冒药物

在本研究中，使用配备钻石晶体 ATR 附件的 Cary 630 FTIR 采集药物片剂和安慰剂样品的红外光谱。使用 MicroLab 软件将光谱与完整的红外光谱库进行匹配。对于重要且经常被假冒的药物盐酸乙胺丁醇和头孢呋辛酯而言，Cary 630 FTIR 能够可靠区分真伪样品。



[下载完整应用简报。](#)

用于鉴定查获毒品样品中可卡因的自动化 FT-IR 筛查方法

使用配备钻石晶体 ATR 附件的 Cary 630 FTIR 采集查获可卡因样品的红外光谱。结合 MicroLab 软件中的自动化方法，Cary 630 能够鉴定可卡因的存在，与 HPLC 的测定数据表现出良好的相关性。事实证明，该仪器-软件配置适合作为一种非破坏性方法，对怀疑含有可卡因的查获毒品进行预筛选。

[下载完整应用简报。](#)

www.agilent.com/chem/cary630

DE74554071

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2022
2022 年 1 月 19 日，中国出版
5991-6858ZHCN

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

