

# 中华人民共和国国家计量技术规范

JJF 1319—2011

## 傅立叶变换红外光谱仪 校准规范

Calibration Specification for Fourier Transform  
Infrared Spectrometers

受控文件	
受控号	GF-003
分发号	

2011-11-14 发布

2012-02-14 实施

国家质量监督检验检疫总局 发布



中 华 人 民 共 和 国  
国 家 计 量 技 术 规 范  
傅 立 叶 变 换 红 外 光 谱 仪  
校 准 规 范

JJF 1319—2011

国家质量监督检验检疫总局发布

\*

中国质检出版社出版发行  
北京市朝阳区和平里西街甲2号(100013)  
北京市西城区三里河北街16号(100045)

网址 [www.spc.net.cn](http://www.spc.net.cn)

总编室:(010)64275323 发行中心:(010)51780235

读者服务部:(010)68523946

中国标准出版社秦皇岛印刷厂印刷  
各地新华书店经销

\*

开本 880×1230 1/16 印张 1.25 字数 33 千字  
2012年1月第一版 2012年1月第一次印刷

\*

书号: 155026·J-2658 定价 21.00 元

如有印装差错 由本社发行中心调换  
版权专有 侵权必究  
举报电话:(010)68510107

**傅立叶变换红外光谱仪  
校准规范**

**Calibration Specification for Fourier  
Transform Infrared Spectrometers**



**JJF 1319—2011**

---

本规范经国家质量监督检验检疫总局于 2011 年 11 月 14 日批准，并自 2012 年 2 月 14 日起施行。

**归口单位：全国物理化学计量技术委员会**

**起草单位：江苏省计量科学研究院**

**中国计量科学研究院**

**本规范起草人：**

蔡冶强（江苏省计量科学研究院）

宋 健（江苏省计量科学研究院）

纪 洁（中国计量科学研究院）

陶 红（中国计量科学研究院）

# 目 录

1 范围	(1)
2 引用文件	(1)
3 术语和计量单位	(1)
4 概述	(1)
5 计量特性	(2)
6 校准条件	(2)
6.1 环境条件	(2)
6.2 标准物质	(3)
7 校准项目和校准方法	(3)
7.1 波数示值误差与波数重复性	(3)
7.2 透射比重复性	(3)
7.3 分辨力	(3)
7.4 本底光谱能量分布	(5)
7.5 100%线的平直度	(5)
7.6 噪声	(6)
8 校准结果表达	(6)
9 复校时间间隔	(7)
附录 A 聚苯乙烯标准物质红外谱图	(8)
附录 B 聚苯乙烯标准物质红外吸收峰主要参考值	(9)
附录 C 波数示值误差的不确定度评定示例	(10)
附录 D 傅立叶变换红外光谱仪记录格式 (供参考)	(12)
附录 E 校准证书 (内页) 格式 (供参考)	(14)



# 傅立叶变换红外光谱仪 校准规范

## 1 范围

本规范适用于傅立叶变换红外光谱仪波数为  $4\ 000\ \text{cm}^{-1} \sim 400\ \text{cm}^{-1}$  中红外区的校准。

## 2 引用文件

GB/T 21186—2007 傅立叶变换红外光谱仪

中华人民共和国药典 附录Ⅳ C 红外分光光度法

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

## 3 术语和计量单位

### 3.1 红外光区 infrared region

红外光是一种波长介于可见光区和微波区之间的电磁波谱。红外光的波长范围为  $0.78\ \mu\text{m} \sim 300\ \mu\text{m}$ ，通常把这个波段分成三个区域，即：近红外区、中红外区和远红外区。

#### 3.1.1 近红外光区 near infrared region

近红外区又称泛频区。近红外区波长范围为  $0.78\ \mu\text{m} \sim 2.5\ \mu\text{m}$ ，即波数为  $12\ 820\ \text{cm}^{-1} \sim 4\ 000\ \text{cm}^{-1}$ 。

#### 3.1.2 中红外光区 middle infrared region

中红外区又称基频区。中红外区波长范围为  $2.5\ \mu\text{m} \sim 25\ \mu\text{m}$ ，即波数为  $4\ 000\ \text{cm}^{-1} \sim 400\ \text{cm}^{-1}$ 。

#### 3.1.3 远红外光区 far infrared region

远红外区又称转动区。远红外区波长范围在  $25\ \mu\text{m} \sim 300\ \mu\text{m}$ ，即波数在  $400\ \text{cm}^{-1} \sim 33\ \text{cm}^{-1}$ 。

### 3.2 波数 wave number

波长 ( $\lambda$ ) 的倒数为波数，单位符号为  $\text{cm}^{-1}$ 。

## 4 概述

傅立叶变换红外光谱仪是利用干涉仪干涉调频的工作原理，把光源发出的光经迈克尔逊干涉仪变成干涉光，再让干涉光照射样品，由计算机系统经傅立叶变换获得光谱图，如图 1 所示。仪器主要包括光源、干涉仪、样品室、检测器和计算机系统等几部分。

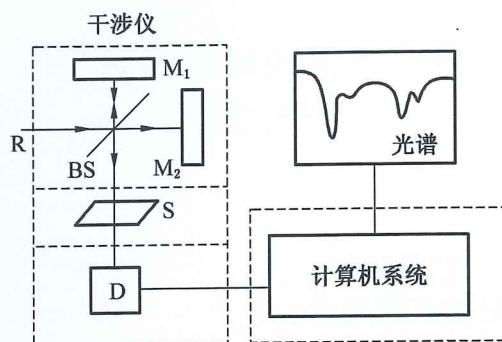


图1 傅立叶变换红外光谱仪工作原理

R—光源； $M_1$ —定镜； $M_2$ —动镜；BS—光束分裂器；S—样品；D—检测器

## 5 计量特性

傅立叶变换红外光谱仪的计量特性包括：波数示值误差、波数重复性、透射比重复性、分辨力、本底光谱能量分布、100%线的平直度和噪声，各项技术指标见表1。

表1 傅立叶变换红外光谱仪主要技术指标

序号	技术指标	要 求
1	波数示值误差	在 $3\,000\text{ cm}^{-1}$ 附近的波数示值误差一般为 $\pm 5\text{ cm}^{-1}$ ； 在 $1\,000\text{ cm}^{-1}$ 附近的波数示值误差一般为 $\pm 1\text{ cm}^{-1}$
2	波数重复性	在 $3\,000\text{ cm}^{-1}$ 附近的波数重复性一般不大于 $2.5\text{ cm}^{-1}$ ； 在 $1\,000\text{ cm}^{-1}$ 附近的波数重复性一般不大于 $0.5\text{ cm}^{-1}$
3	透射比重复性	一般不大于 0.5%
4	分辨力	在 $3\,200\text{ cm}^{-1} \sim 2\,800\text{ cm}^{-1}$ 能分辨七个峰
		$2\,851\text{ cm}^{-1}$ 与 $2\,870\text{ cm}^{-1}$ 之间分辨深度一般不小于 18%； $1\,583\text{ cm}^{-1}$ 与 $1\,589\text{ cm}^{-1}$ 之间分辨深度一般不小于 12%
		水汽 $1\,554.4\text{ cm}^{-1}$ 峰半高宽一般不大于 $2\text{ cm}^{-1}$
5	本底光谱能量分布	一般不小于 20%
6	100%线的平直度	$3\,200\text{ cm}^{-1} \sim 2\,800\text{ cm}^{-1}$ 内 100%线的平直度一般不大于 1%； $2\,200\text{ cm}^{-1} \sim 1\,900\text{ cm}^{-1}$ 内 100%线的平直度一般不大于 1%； $800\text{ cm}^{-1} \sim 500\text{ cm}^{-1}$ 内 100%线的平直度一般不大于 4%
7	噪声	一般不大于 1%

注：以上指标不是用于合格性判别，仅供参考。

## 6 校准条件

### 6.1 环境条件

6.1.1 环境温度： $15\text{ }^{\circ}\text{C} \sim 30\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，相对湿度： $\leq 70\%$ 。

6.1.2 电源：(220±22) V，频率：(50±1) Hz。

6.1.3 傅立叶变换红外光谱仪应放在平稳的工作台上，电源接地良好。

6.1.4 傅立叶变换红外光谱仪室内不得有明显的机械振动，无电磁干扰，无强光直射；不得存放与实验无关的易燃、易爆和强腐蚀性的物质。

## 6.2 标准物质

聚苯乙烯红外波长标准物质。

注：取得国家计量行政部门批准的有证标准物质。

## 7 校准项目和校准方法

### 7.1 波数示值误差与波数重复性

傅立叶变换红外光谱仪扫描范围为 4 000  $\text{cm}^{-1}$ ~400  $\text{cm}^{-1}$ ，分辨率为 4.0  $\text{cm}^{-1}$ ，常用扫描速度，扫描次数为 15。待傅立叶变换红外光谱仪稳定后，采集空气本底背景，扫描聚苯乙烯红外波长标准物质，测量 3 027  $\text{cm}^{-1}$ ，2 851  $\text{cm}^{-1}$ ，1 601  $\text{cm}^{-1}$ ，1 028  $\text{cm}^{-1}$ ，907  $\text{cm}^{-1}$  5 个主要吸收峰。重复测量 3 次。按公式 (1) 计算，取  $\Delta_\nu$  绝对值最大值为波数示值误差。按公式 (2) 计算，取  $\delta_\nu$  绝对值最大值为波数重复性。

$$\Delta_\nu = \bar{\nu}_i - \nu \quad (1)$$

$$\delta_\nu = \nu_{\max} - \nu_{\min} \quad (2)$$

式中： $\Delta_\nu$ ——波数示值误差， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\delta_\nu$ ——波数重复性， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\bar{\nu}_i$ ——第  $i$  峰值波数测量平均值， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\nu$ ——第  $i$  峰值波数标准值， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\nu_{\max}$ ——第  $i$  峰波数测量最大值， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\nu_{\min}$ ——第  $i$  峰波数测量最小值， $\text{cm}^{-1}$ 。

### 7.2 透射比重复性

在 7.1 取得的测量谱图中，选取峰值透射比分别为 10%，20%，40% 的主要吸收峰，读取峰值的透射比，按公式 (3) 计算，取  $R_T$  绝对值最大值为透射比重复性。

$$R_T = T_{\max} - T_{\min} \quad (3)$$

式中： $R_T$ ——透射比重复性，%；

$T_{\max}$ ——聚苯乙烯峰值透射比最大值，%；

$T_{\min}$ ——聚苯乙烯峰值透射比最小值，%。

### 7.3 分辨力

#### 7.3.1 分辨苯环特征吸收峰的个数

在 7.1 取得的测量谱图中，检查并记录波数在 3 200  $\text{cm}^{-1}$ ~2 800  $\text{cm}^{-1}$  范围内，谱图可分辨的吸收峰的个数，见图 2。

#### 7.3.2 分辨深度

在 7.1 取得的测量谱图中，测量 2 851  $\text{cm}^{-1}$  (峰) 与 2 870  $\text{cm}^{-1}$  (谷) 之间的峰谷深度和 1 583  $\text{cm}^{-1}$  (峰) 与 1 589  $\text{cm}^{-1}$  (谷) 之间的峰谷深度，用  $T$  表示。见图 3 和图 4。

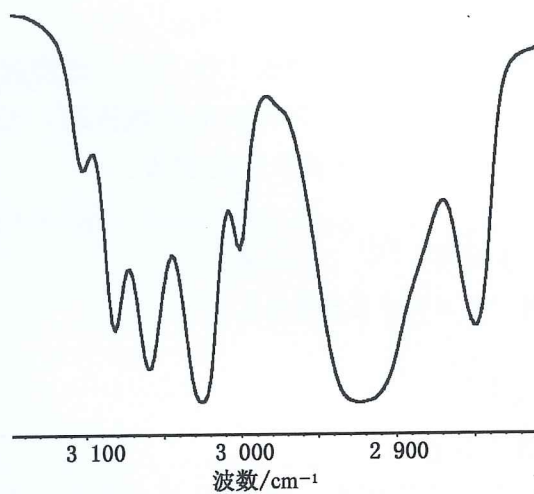


图2 聚苯乙烯标准物质苯环红外谱图

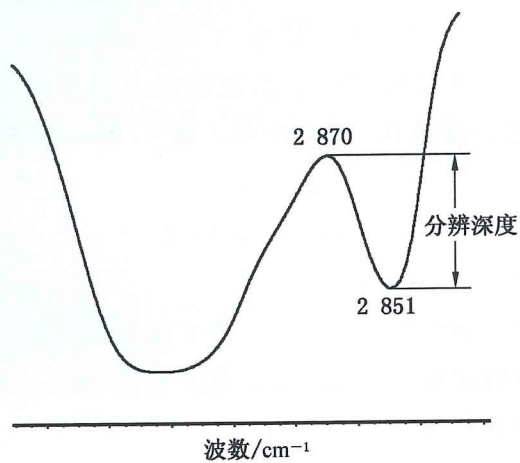


图3 2851 cm<sup>-1</sup> (峰) 与 2870 cm<sup>-1</sup> (谷) 分辨深度

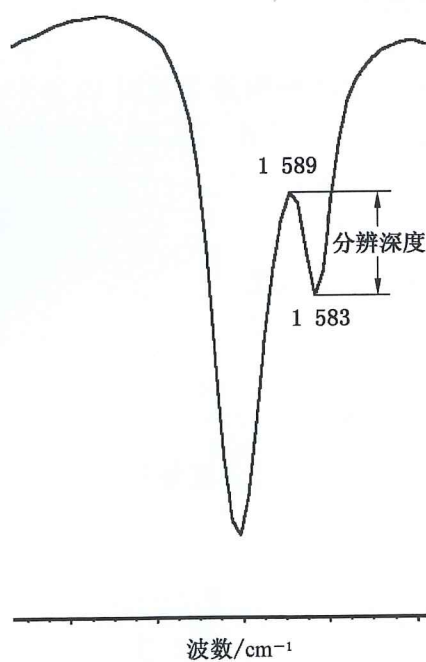


图4 1583 cm<sup>-1</sup> (峰) 与 1589 cm<sup>-1</sup> (谷) 分辨深度

### 7.3.3 半高宽

傅立叶变换红外光谱仪扫描范围为  $4\,000\text{ cm}^{-1}\sim 400\text{ cm}^{-1}$ ，分辨率为最佳分辨率（数值最小），常用扫描速度，扫描次数为 15。待仪器稳定后，采集空气本底背景，测量空气中水气在  $1\,554.4\text{ cm}^{-1}$  吸收峰的半高宽。见图 5。

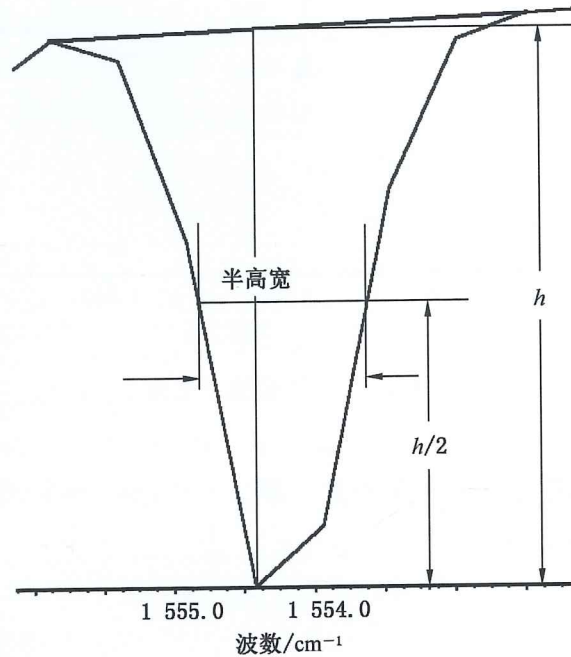


图 5 半高宽

### 7.4 本底光谱能量分布

按 7.1 条件设定仪器参数。待傅立叶变换红外光谱仪稳定后，采集空气本底背景，分别测量本底光谱中能量最高点波数处的能量  $E_{\max}$  和  $4\,000\text{ cm}^{-1}$  处的能量  $E_{4\,000}$ 。按公式 (4) 计算本底光谱能量分布。

$$\text{本底光谱能量分布} = E_{4\,000}/E_{\max} \quad (4)$$

式中： $E_{4\,000}$ —— $4\,000\text{ cm}^{-1}$  处的能量；

$E_{\max}$ ——能量最高点波数处的能量。

### 7.5 100%线的平直度

傅立叶变换红外光谱仪扫描范围为  $4\,000\text{ cm}^{-1}\sim 400\text{ cm}^{-1}$ ，分辨力为  $4.0\text{ cm}^{-1}$ ，常用扫描速度，扫描次数为 45。待傅立叶变换红外光谱仪稳定后，采集空气本底背景，扫描空气光谱。测量  $3\,200\text{ cm}^{-1}\sim 2\,800\text{ cm}^{-1}$ 、 $2\,200\text{ cm}^{-1}\sim 1\,900\text{ cm}^{-1}$  和  $800\text{ cm}^{-1}\sim 500\text{ cm}^{-1}$  波数范围内 100% 线的透射比变化量。按公式 (5) 计算 100% 线的平直度。见图 6。

$$T_{100} = T_{100\max} - T_{100\min} \quad (5)$$

式中： $T_{100}$ ——100% 线的平直度，%；

$T_{100\max}$ ——每段波数范围内透射比最大值，%；

$T_{100\min}$ ——每段波数范围内透射比最小值，%。

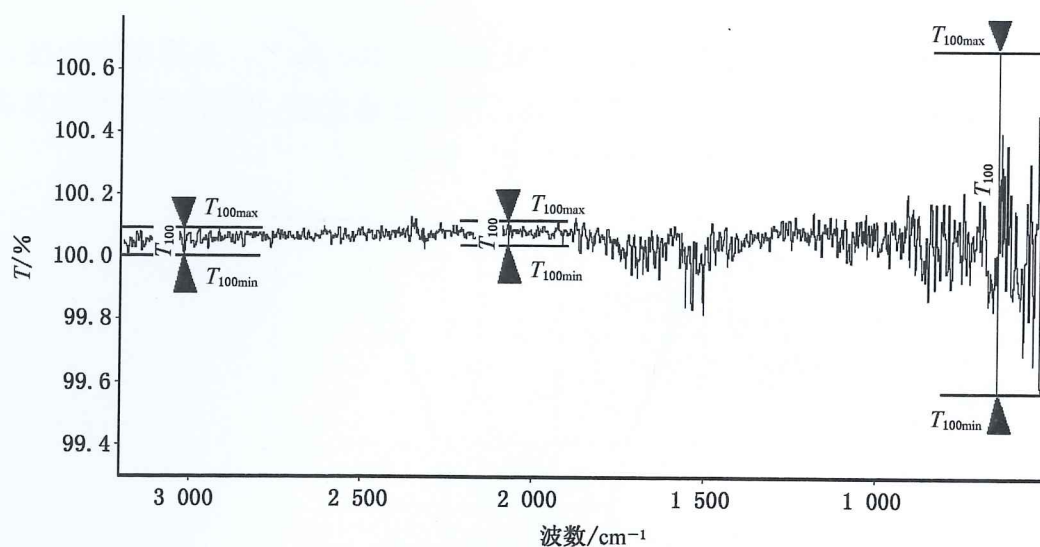


图6 100%线的平直度

### 7.6 噪声

在7.5取得的测量谱图中，手动测量计算 $2\ 100\ \text{cm}^{-1} \sim 2\ 000\ \text{cm}^{-1}$ 范围内噪声。按公式(6)计算噪声。见图7。

$$T_0 = T_{0\max} - T_{0\min} \quad (6)$$

式中： $T_0$ ——噪声，%；

$T_{0\max}$ ——每段波数范围内透射比最大值，%；

$T_{0\min}$ ——每段波数范围内透射比最小值，%。

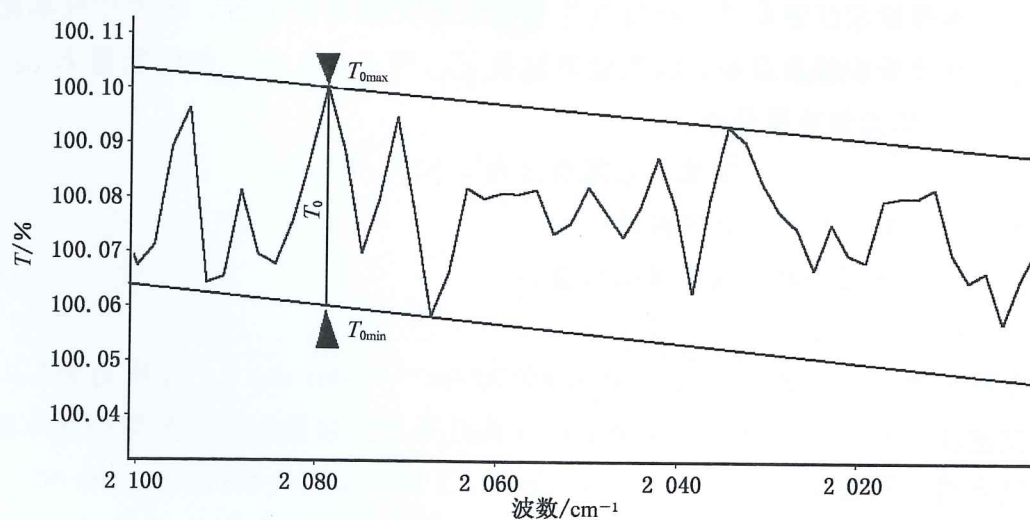


图7 噪声

## 8 校准结果表达

根据校准结果，发校准证书，所有校准项目及其结果均应在证书中反映。校准结果应包含标题、实验室名称和地址、送校单位的名称和地址、校准日期、校准所用测量标准的溯源性及有效性说明、校准结果及其测量不确定度的说明、校准环境等方面内容。

## 9 复校时间间隔

傅立叶变换红外光谱仪的复校时间间隔根据使用情况由用户确定，建议不超过1年。更换重要部件、维修或对仪器性能有怀疑时，应随时校准。



聚苯乙烯标准物质红外谱图

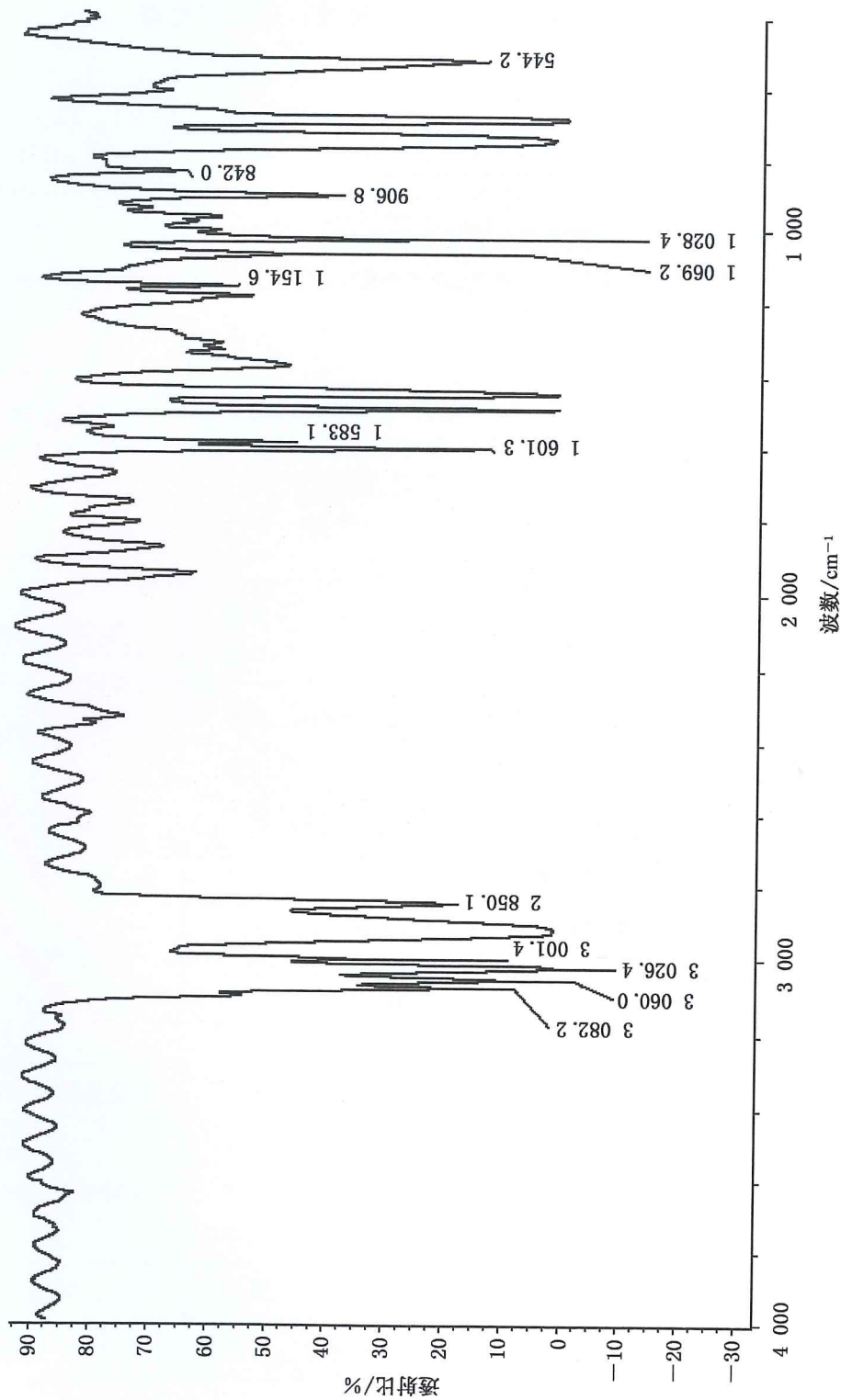


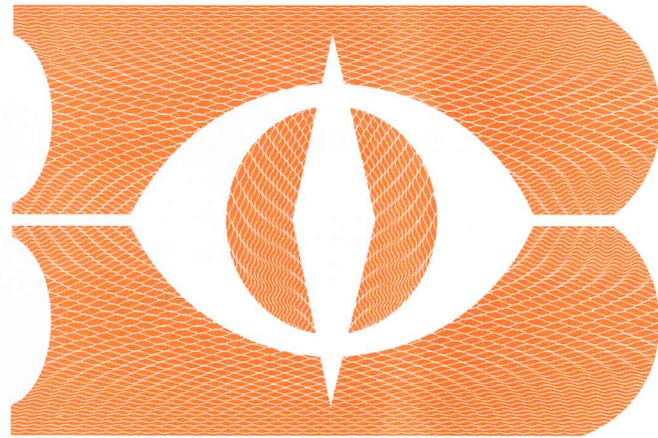
图 A.1 聚苯乙烯标准物质红外谱图

## 附录 B

## 聚苯乙烯标准物质红外吸收峰主要参考值

表 B.1 聚苯乙烯标准物质红外吸收峰主要参考值

序号	波数/cm <sup>-1</sup>	序号	波数/cm <sup>-1</sup>	序号	波数/cm <sup>-1</sup>
1	3 082.2	6	1 601.3	11	906.8
2	3 060.0	7	1 583.1	12	842.0
3	3 026.4	8	1 154.6	13	544.2
4	3 001.4	9	1 069.2		
5	2 850.1	10	1 028.4		



## 附录 C

## 波数示值误差的不确定度评定示例

## C.1 建立数学模型

$$\Delta_\nu = \bar{\nu}_i - \nu$$

式中： $\Delta_\nu$ ——波数示值误差， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\bar{\nu}_i$ ——第  $i$  峰值波数测量平均值， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\nu$ ——第  $i$  峰值波数标准值， $\text{cm}^{-1}$ 。

## C.2 方差和灵敏系数

数学模型中各项彼此独立，则

$$u(\Delta_\nu) = \sqrt{c_1^2 u^2(\bar{\nu}) + c_2^2 u^2(\nu)}$$

其中： $c_1=1$ ， $c_2=1$ 。

## C.3 标准不确定度分量评定

C.3.1 由标准物质引入的不确定度  $u(\nu)$ 

从标准物质证书中可查到，波数为  $1\,028.36\text{ cm}^{-1}$ ，其不确定度为  $0.085\text{ cm}^{-1}$ ，包含因子  $k=2$ ，则

$$u(\nu) = \frac{U}{k} = \frac{0.085\text{ cm}^{-1}}{2} = 0.043\text{ cm}^{-1}$$

C.3.2 波数测量的不确定度  $u(\bar{\nu})$ C.3.2.1 由测量重复性引入的不确定度分量  $u_1$ 

选择一台傅立叶变换红外光谱仪，对  $1\,028.36\text{ cm}^{-1}$  连续测量 3 次，得到数据如下：

次数	1	2	3
测量值/ $\text{cm}^{-1}$	1 028.5	1 028.2	1 028.1
$\bar{\nu}$	1 028.27 $\text{cm}^{-1}$		
极差 $\Delta$	0.4 $\text{cm}^{-1}$		

$$s = \frac{\Delta}{k} = \frac{0.4\text{ cm}^{-1}}{1.64} = 0.25\text{ cm}^{-1}$$

$$u_1 = \frac{s}{\sqrt{n}} = \frac{0.25\text{ cm}^{-1}}{\sqrt{3}} = 0.15\text{ cm}^{-1}$$

C.3.2.2 仪器分辨力引入的不确定度分量  $u_2$ 

按该台傅立叶变换红外光谱仪，波数分辨力为  $0.1\text{ cm}^{-1}$ ，考虑为均匀分布。

$$u_2 = \frac{0.1\text{ cm}^{-1}}{2\sqrt{3}} = 0.029\text{ cm}^{-1}$$

因  $u_2$  的值远小于  $u_1$  的值，可忽略。

$$u(\bar{\nu}) \approx u_1 = 0.15\text{ cm}^{-1}$$

## C.4 合成标准不确定度

$$\begin{aligned}u(\Delta_\nu) &= \sqrt{c_1^2 u_1^2 + c_2^2 u_2^2} \\ &= \sqrt{(0.043 \times 1)^2 + (0.15 \times 1)^2} \text{ cm}^{-1} \\ &= 0.16 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}$$

## C.5 扩展不确定度

取  $k=2$  时, 扩展不确定度  $U$  为:

$$\begin{aligned}U &= ku(\Delta_\nu) = 2 \times 0.16 \text{ cm}^{-1} \\ &= 0.32 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}$$

## 附录 D

## 傅立叶变换红外光谱仪记录格式 (供参考)

委托方名称				记录编号		
委托方地址				校准日期		
型号规格				出厂编号		
制造厂				设备编号		
室温	℃	湿度	%RH	技术依据		
主要测量设备				外观		
1. 波数示值误差及重复性 ( $\text{cm}^{-1}$ )						
标准值						
测量值	1					
	2					
	3					
平均值						
$\bar{\nu}_i - \nu$						
$\nu_{\max} - \nu_{\min}$						
波数示值误差		在 3 000 $\text{cm}^{-1}$ 附近		在 1 000 $\text{cm}^{-1}$ 附近		
波数重复性		在 3 000 $\text{cm}^{-1}$ 附近		在 1 000 $\text{cm}^{-1}$ 附近		
2. 透射比重复性 (%)						
峰的波数		10%处	$\text{cm}^{-1}$	20%处	$\text{cm}^{-1}$	40%处 $\text{cm}^{-1}$
测量值	1					
	2					
	3					
$T_{\max} - T_{\min}$						
透射比重复性						

3. 分辨力					
分辨率设定值/cm <sup>-1</sup>		测量项目		测量结果	
		在 3 200 cm <sup>-1</sup> ~2 800 cm <sup>-1</sup> 范围内分辨个数			
		分辨深度 /%	2 851 cm <sup>-1</sup> (峰) 与 2 870 cm <sup>-1</sup> (谷) 之间 分辨深度		
			1 583 cm <sup>-1</sup> (峰) 与 1 589 cm <sup>-1</sup> (谷) 之间 分辨深度		
		水的半峰宽/cm <sup>-1</sup>			
4. 本底光谱能量分布		$E_{4\ 000} =$	$E_{\max} =$	$E_{4\ 000}/E_{\max} =$	
5. 100%线的平直度 (%)					
3 200 cm <sup>-1</sup> ~2 800 cm <sup>-1</sup>		2 200 cm <sup>-1</sup> ~1 900 cm <sup>-1</sup>		800 cm <sup>-1</sup> ~500 cm <sup>-1</sup>	
$T_{100\max}$		$T_{100\max}$		$T_{100\max}$	
$T_{100\min}$		$T_{100\min}$		$T_{100\min}$	
$T_{100\max} - T_{100\min} =$		$T_{100\max} - T_{100\min} =$		$T_{100\max} - T_{100\min} =$	
6. 噪声 (%)					
$T_{0\max} =$		$T_{0\min} =$		$T_{0\max} - T_{0\min} =$	
备注					

校准员\_\_\_\_\_

核验员\_\_\_\_\_

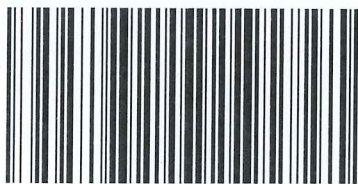
## 附录 E

## 校准证书（内页）格式（供参考）

1. 校准条件：

2. 校准结果：

序号	技术指标	校准结果
1	波数示值误差	
2	波数重复性	
3	透射比重复性	
4	分辨力	
5	本底光谱能量分布	
6	100%线的平直度	
7	噪声	



JJF 1319-2011

版权专有 侵权必究

\*

书号：155026·J-2658

定价：21.00 元