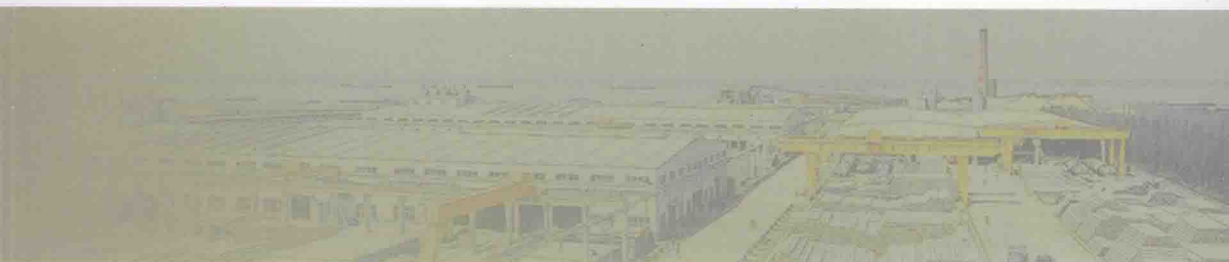


煤矿瓦斯的 激光光谱检测技术研究

MeiKuang WaSi De JiGuang
GuangPu JianCe JiShu YanJiu



周孟然 / 著

国家自然科学基金和神华集团有限公司联合资助(批

安徽省自然科学基金资助(批准号:11040606M103)

安徽省高校自然科学研究重点项目资助(批准号:KJ2011A0973)

煤矿瓦斯的激光光谱 检测技术研究

周孟然 著

合肥工业大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

煤矿瓦斯的激光光谱检测技术研究/周孟然著. —合肥:合肥工业大学出版社,
2012. 5

ISBN 978 - 7 - 5650 - 0696 - 8

I. ①煤… II. ①周… III. ①煤矿—瓦斯监测 IV. ①TD712

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 059173 号

煤矿瓦斯的激光光谱检测技术研究

周孟然 著

责任编辑 陆向军

出 版	合肥工业大学出版社	版 次	2012 年 5 月第 1 版
地 址	合肥市屯溪路 193 号	印 次	2012 年 5 月第 1 次印刷
邮 编	230009	开 本	710 毫米×1010 毫米 1/16
电 话	总编室:0551—2903038	印 张	15
	发行部:0551—2903198	字 数	244 千字
网 址	www. hfutpress. com. cn	印 刷	中国科学技术大学印刷厂
E-mail	hfutpress@163. com	发 行	全国新华书店

ISBN 978 - 7 - 5650 - 0696 - 8

定价: 36. 00 元

如果有影响阅读的印装质量问题,请与出版社发行部联系调换。

前 言

随着开采规模的不断扩大,我国煤矿高瓦斯矿井越来越多,瓦斯事故在煤矿事故中所占的比例也越来越高。瓦斯爆炸事故不仅造成人身伤亡,同时还会造成重大经济损失。针对煤矿瓦斯事故的发生,建立一个完整的瓦斯监测系统是保证煤矿安全生产的一个重要措施。目前,我国煤矿生产的监督管理已经得到了高度重视,如果想要很好地实时监测瓦斯浓度,就必须有一个健全、完整的监测系统,这是保障煤矿生命与财产安全的强有力支柱。

我国煤炭行业的瓦斯监测系统是 20 世纪 80 年代初从国外引进的,通过消化、吸收也生产出一些瓦斯监测器。目前国内普遍采用热催化元件和电化学方法进行检测,主要是气相色谱法(GC-FID),由于这种方法至少需要几分钟才能提供一个数据,所以不能进行连续监测。缺点是,在工作中探测器会中毒失效,需定期更换;同时探测器需要大的工作电流,在井下工作的安全性差;存在其他气体干扰,灵敏度较差。

针对化学检测方法的缺陷,国内外都已经发展了光学检测,如光学干涉法瓦斯检测器和红外瓦斯检测仪等,在仪器的测量精度和范围等方面有了较大的提高。但这类仪器的主要问题是井下安全,以及单台仪器的大量布点而导致整个监测系统的造价太高,限制了应用范围。随着光纤传感技术的大量工业应用以及产业化,导致其价格迅速下降,从而加速了光纤传感器的商业化进程。尤其是近红外 DFB 激光器的商业化,以及把 DFB 激光器作为调谐半导体激光光谱仪(Tunable diode laser absorption spectroscopy,简称 TDLAS)的光源而使 TDLAS 技术的高灵敏和高选择性探测被越来越多地应用到许多环境监测领域,如远程区域的空气污染监测和对大气光化学过程的研究,污染源的排放监测以及对有毒、有害气体泄露检测等,使得激光光谱仪及光纤分布式传感、多路网络系统呈现出巨大的商业开发潜能。

本研究是基于激光吸收光谱技术的光纤分布式煤矿瓦斯检测的应用研究。整个系统用激光器,通过光纤多路开关,分时地把激光导入到设置于井下的光纤

光吸收池,经过气体吸收的激光通过光纤导出到探测器上,完成激光吸收测量。传统的甲烷检测系统通常受来自其他气体成分交叉干扰影响,很难精确地校正背景气体交叉干扰所带来的数据误差,此问题在探测甲烷含量很低时,显得越来越严重。在通常光谱吸收检测技术的基础上,本书构建了基于双波长技术的煤矿瓦斯传感系统,它是将光谱分析技术与现代光纤技术相结合,将以前主要用于实验室气体分析的光谱分析技术发展为对气体的在线监测装置。双波长是使用同一光源取得两束单色光,所以因光源的变化而产生的影响很小,可以得到低噪声的信号记录。实验结果表明,得到了精确的测量结果,它是一种能够应用于井下恶劣环境中测量瓦斯气体浓度的方法。该研究可实现全光纤测量,井下只有光纤信号,无电信号,抗干扰能力强,适宜于易燃、易爆等环境。

本书从实际出发,力求为煤矿生产一线及科研工作者人员提供一个借鉴,对瓦斯的检测提供了一个全新的手段和方法。本书共分为10章,主要内容包括绪论,光谱学理论,瓦斯的吸收特性,光谱学检测仪器,光谱吸收型气体传感技术,煤矿瓦斯气体光谱数据处理,可调谐二极管激光吸收光谱检测系统在瓦斯研究中的应用,神经网络在瓦斯浓度检测中的应用,双波长光纤传感网络在煤矿瓦斯监测系统构成,结论与展望等。

本书在编写过程中,得到了相关媒体企业和同行的大力支持,同时本人所培养的硕士研究生张海庆、吴迪、齐刘宇等在本书的编辑过程中也付出了辛勤的劳动,在此向他们表示衷心的感谢!

由于编写时间仓促,加之水平有限,书中疏漏之处在所难免,恳请读者提出宝贵的意见和建议。

周孟然

2012年5月

目 录

第 1 章 绪论	(001)
1.1 煤矿安全生产的重要性	(001)
1.2 煤矿瓦斯监测技术的现状	(002)
1.2.1 国外瓦斯监测的现状	(003)
1.2.2 国内瓦斯监测的现状	(003)
1.3 光谱监测煤矿瓦斯的重要意义	(005)
第 2 章 光谱学理论	(007)
2.1 光的发射和吸收	(008)
2.1.1 光传播的电磁理论	(009)
2.1.2 分子吸收与受激、自发发射	(012)
2.1.3 气体分子的吸收电磁理论	(015)
2.1.4 分子吸收线性与非线性的区别	(017)
2.2 原子光谱	(020)
2.2.1 原子吸收光谱分析方法的发展	(020)
2.2.2 原子的受迫振荡现象	(022)
2.2.3 原子对光谱的吸收与色散现象	(023)
2.3 光谱线的线形和宽度	(026)
2.3.1 自然线宽	(027)
2.3.2 多普勒展宽	(029)
2.3.3 压力展宽	(030)
2.3.4 谱线宽度扩展的均匀性	(031)
2.3.5 饱和展宽与渡越时间展宽	(031)

2.3.6 复合线形	(034)
第3章 瓦斯的吸收特性	(035)
3.1 分子的一般性质	(035)
3.1.1 分子结构的对称性	(036)
3.1.2 分子点群	(038)
3.2 多原子型分子振动和转动光谱	(041)
3.2.1 多原子分子的核运动	(041)
3.2.2 多原子分子振动	(042)
3.2.3 多原子分子转动的类别	(044)
3.2.4 多原子分子的振转谱	(045)
3.3 甲烷气体对吸收谱线的选择	(046)
3.3.1 气体分子运动及其光谱	(046)
3.3.2 基频、泛频及相应组合频率的光谱	(047)
3.3.3 气体分子吸收线型数学分析	(048)
3.3.4 气体分子运动时吸收谱线强度	(052)
3.3.5 甲烷的特征吸收谱线	(054)
第4章 光谱学检测仪器	(057)
4.1 近红外光谱	(057)
4.2 近红外光谱分析仪器的基本概述	(060)
4.3 近红外光谱仪器性能指标	(060)
4.4 近红外光谱仪器的基本结构及其含义	(063)
4.5 近红外光谱仪器的类型	(065)
4.6 近红外光谱的分析技术	(066)
4.7 常用的光谱类仪器	(070)
4.7.1 分光计	(070)
4.7.2 波长计	(073)

第 5 章 光谱吸收型气体传感技术	(075)
5.1 气体浓度检测的光谱技术	(075)
5.2 光谱遥感测量原理	(076)
5.3 差分吸收检测技术	(077)
5.4 差分吸收激光雷达(DIAL)技术	(081)
5.5 傅里叶变换红外光谱(FTIR)技术	(082)
5.6 激光诱导荧光(LIF)技术	(085)
第 6 章 煤矿瓦斯气体光谱数据处理	(088)
6.1 光谱数据预处理	(088)
6.1.1 光谱数据的平滑	(088)
6.1.2 基线校正	(093)
6.1.3 求导	(093)
6.1.4 归一化处理	(093)
6.1.5 傅立叶变换	(094)
6.2 光谱的数据处理	(096)
6.2.1 主成分分析法(PCR)	(096)
6.2.2 偏最小二乘法	(097)
6.2.3 人工神经网络法(ANN)	(099)
6.3 甲烷(CH_4)气体光谱的数据处理方法	(101)
第 7 章 可调谐二极管激光吸收光谱检测系统在瓦斯研究中的应用	(104)
7.1 可调谐二极管激光光谱吸收原理	(104)
7.1.1 直接吸收光谱	(104)
7.1.2 调制光谱技术	(105)
7.1.3 吸收线选择	(105)
7.1.4 灵敏度与检测限	(106)
7.1.5 噪声压缩与检测灵敏度的提高	(106)



7.2	可调谐二极管激光吸收光谱实验装置	(107)
7.2.1	实验装置	(107)
7.2.2	实验仪器的选择和确定	(109)
7.3	实验系统组成和软件控制流程	(117)
7.3.1	实验系统构建	(117)
7.3.2	控制软件使用及扫描过程	(118)
7.3.3	扫描采样	(120)
7.4	实验结果分析	(124)
第8章	神经网络在瓦斯浓度检测中的应用	(126)
8.1	神经网络的基本概念	(126)
8.1.1	神经元生物剖析	(126)
8.1.2	神经元及其信息传递的阈值特性	(128)
8.1.3	用数学模型表示神经元	(130)
8.2	神经网络的基本原理	(132)
8.2.1	神经网络的概念	(133)
8.2.2	人工神经网络中的几个特性	(135)
8.2.3	神经网络的学习方法	(136)
8.2.4	神经网络实际应用问题	(137)
8.3	基于神经网络的瓦斯浓度预测方法	(138)
8.3.1	BP 算法	(138)
8.3.2	时间序列基本理论	(143)
8.3.3	瓦斯浓度预警系统面临的主要问题	(144)
8.3.4	应用神经网络对瓦斯浓度进行预测的分析	(145)
8.3.5	BP 神经网络模型参数的设计	(148)
8.3.6	神经网络预测的仿真实验	(149)
8.4	BP 神经网络的 FPGA 实现	(158)
8.4.1	神经网络的硬件实现与模块的划分	(158)
8.4.2	瓦斯预警 BP 算法模块的实现	(160)

8.4.3 控制模块设计	(170)
8.4.4 实验结果分析	(171)
第9章 双波长光纤传感网络在煤矿瓦斯监测系统构成	(172)
9.1 双波长测量及波长选取技术的原理	(172)
9.1.1 双波长测量技术	(172)
9.1.2 波长的选取技术	(174)
9.2 双波长光纤气体传感系统设计	(181)
9.2.1 光纤传感系统框图	(181)
9.2.2 激光器	(183)
9.2.3 单色器	(187)
9.2.4 斩光器	(187)
9.2.5 吸收池	(188)
9.2.6 接收装置	(190)
9.3 系统软件设计	(193)
9.3.1 软件使用方法	(193)
9.3.2 参数设置	(197)
9.4 实验结果分析	(203)
9.4.1 系统性能测试	(203)
9.4.2 对比测试	(218)
9.4.3 稳定性测试	(220)
第10章 结论与展望	(224)
10.1 结论	(224)
10.2 展望	(225)
参考文献	(226)

第1章 绪 论

1.1 煤矿安全生产的重要性

当今时代是能源紧缺的时代,对于煤炭来说,这种不可再生资源的重要性就不言而喻了。随着现代工业技术的不断发展,煤矿开采工艺的不断改进、规模的扩大及开采深度的不断延伸,煤层瓦斯涌出量越来越大,高瓦斯矿井越来越多。虽然煤矿开采的安全问题得到了相当高的重视,但由于井下各种不可知突发因素的产生而导致的煤矿灾难事故仍然层出不穷,其中危害最大的当属瓦斯事故^[1],瓦斯事故在煤矿事故中占的比例越来越高。2011年5月中旬短短数天竟发生了6起较大的煤矿瓦斯事故,造成36人死亡。5月13日,黑龙江省双鸭山市四方台区龙祥煤矿发生1起瓦斯爆炸事故,死亡4人,受伤1人;5月17日,湖南省湘煤集团金竹山矿业有限公司一平硐煤矿发生1起煤与瓦斯突出事故,死亡8人;5月17日,云南省昭通市威信县南风煤矿发生1起煤与瓦斯突出事故,死亡7人;5月20日,云南省昭通市彝良县昌能煤矿发生1起瓦斯窒息事故,死亡3人;5月22日,四川省自贡市新胜煤矿发生1起瓦斯爆炸事故,死亡6人;5月22日,湖南省娄底市民兴煤矿发生煤与瓦斯突出事故,死亡8人,受伤1人。2010年全国煤矿瓦斯事故死亡人数达到623人,百万吨死亡率达到0.749,这与美国、波兰、南非等国家相比仍然有较大差距,这些国家的百万吨死亡率都已经下降到0.1%以下。由此可见,瓦斯事故需要我们高度重视并努力研究解决这一难题。

随着现代开采技术的不断提高,开采深度越来越深,很容易产生瓦斯突出这种地质灾害。它的主要成因就是瓦斯浓度的不断增加,在地应力和瓦斯释放引力的作用下,突破其较软弱的抵抗层,瞬时喷发出大量的瓦斯,其中还夹杂着固体煤。瓦斯突出灾害中有害气体携带着煤与渣石骤然涌出,躲避不及的人们可

能被掩埋,高浓度的瓦斯迅速充盈巷道,空气中的氧气因氧化反应迅速降到不能保障人类生存的 12 % 以下,无法避开的人们因缺氧窒息而死。这时候如遇火花或细微的明火,将导致爆炸。目前我国的煤矿安全生产事故不断,特别是不断发生重大瓦斯爆炸事故,造成了严重的经济损失,已经引起各级领导部门的高度重视。瓦斯主要成分甲烷(CH_4)是无色、无味、无臭、可燃起的气体,当其爆炸后生成大量有害气体,使得井下人员很难侥幸存活。就目前国内的煤矿事故分析而言,瓦斯事故占的比例超过一半,对井下操作人员的生命安全造成了严重的危害。由于甲烷气体密度比较小,往往在矿井顶板或接近开挖面聚集,因此研究和开发以实现远程实时检测甲烷浓度的监测系统,是非常必要的。对甲烷气体浓度的实时在线监测,已经成为煤矿企业实现安全生产的第一选择。如果不能实现瓦斯浓度快速、准确的监测,将极大地制约煤矿安全生产的稳步发展。

1.2 煤矿瓦斯监测技术的现状

我国目前煤矿生产的监督管理已经得到了很高程度的重视,瓦斯监测是其中一个最重要的环节。因此,如果想要很好地实时瓦斯浓度监测,就必须有一个健全完整的瓦斯浓度监测系统,这是保障煤矿生命与财产安全的强有力支柱。矿井瓦斯成分很复杂,其主要成分是甲烷(CH_4),其次是二氧化碳(CO_2)和氮气(N_2),另外还有少量重烃类气体(乙烷、丙烷、丁烷、戊烷等)、氢气(H_2)、一氧化碳(CO)、二氧化硫(SO_2)、硫化氢(H_2S)等。瓦斯爆炸需要同时满足三个条件:

- (1)一定的瓦斯浓度。瓦斯浓度在 5 % ~ 16 % 之间。
- (2)一定的引火温度。点燃瓦斯的最低温度在 650 °C ~ 750 °C 之间,且存在时间必须大于瓦斯爆炸的感应期。
- (3)充足的氧气含量。氧气浓度不得低于 12 %,一般氧气在整个井下气体中的浓度比例要达到 18 % 以上。

当达到以上三种瓦斯爆炸条件时就会发生爆炸,煤矿瓦斯爆炸是一种热—链式反应(也叫连锁反应),就其本质来说,是一定浓度的甲烷和空气中度作用下产生的激烈氧化反应。当爆炸混合物吸收一定能量(通常是引火源给予的热能)

后,反应分子的链即行断裂,离解成两个或两个以上的游离基(也叫自由基),这类游离基具有很大的化学活性,成为反应连续进行的活化中心,在适合条件下,每一个游离基又可以进一步分解成两个或两个以上以上的游离基。这样的恶性循环,导致游离基越来越多,化学反应速度剧增,最后发展为燃烧或爆炸式的氧化反应。爆炸促使爆源附近的气体因高温高压而以极大的速度向外冲击,破坏巷道和器材设施,扬起大量煤尘并使之参与爆炸,产生更大的破坏力并造成人员伤亡。

对于爆炸的发生,我们是可以采取有效的措施来进行防止,常用的有严禁明火、控制火源、保持矿下通风、时刻保持矿下瓦斯浓度、注意排放瓦斯等。此外还有通过瓦斯浓度传感器来监测,当瓦斯浓度接近 16 % 的时候报警系统会报警,做到防患于未然。

1.2.1 国外瓦斯监测的现状

国外煤矿瓦斯的监测,从 1915 年美国在井下用瓦斯检定灯检测瓦斯以后,许多国家都在不断地研究新的方法。主要有以下几种:(1)瓦斯检定灯,又称安全火焰灯。它用火焰的高度变化检测瓦斯,结构简单,价格便宜。(2)光干涉原理的瓦斯检定器,它具有体积小、携带方便、坚固耐用、测量范围大等优点;缺点是浓度指示不直观,受气压、温度、湿度影响,特别是当空气中氧气不足和氮氧比例异常时,测量会出现误差。(3)催化燃烧原理的检测仪,利用不同浓度的甲烷,在催化燃烧时产生的热量不同,用温度来测量甲烷的浓度。优点是输出信号大,线性好,电路结构简单,是国外测量低浓度甲烷最为普遍的一种;缺点是不能检测高浓度甲烷。(4)热导原理的检测仪器,是利用所测气体和空气热导率之差来实现检测的。优点是热导元件工作温度低,使用寿命长;缺点是检测低浓度甲烷时输出信号小,且易受湿度和二氧化碳等气体的影响,多用在检测高浓度甲烷中。(5)气体检测管通常被称为检定管,是利用检测剂与气体进行化学反应时,所发生的颜色变化来确定被测气体浓度。

1.2.2 国内瓦斯监测的现状

我国煤炭行业的瓦斯监测系统是 20 世纪 80 年代初开始从国外引进,通过消化、吸收生产出一些中低档的瓦斯监测仪器。我国目前的煤炭瓦斯中甲烷成

分的检测仪器主要分为三种,分别是光学干涉仪、气敏元件传感器和气相色谱仪。我国大部分的检测仪器都是从国外进口,近一二十年来,一些国有企业也逐渐开始生产甲烷检测器及相应的各种瓦斯监测系统,这在一定程度上保证了煤矿的安全生产。

(1) 气相色谱仪

该仪器可以检测 N_2 、 O_2 、 CH_4 、 CO 等多种气体。测量精度很高,而且测量范围很大。这种仪器的缺点是:①需要的工作环境比较苛刻,只能在室内使用;②需要的工作功率很大,而且必须与计算机相连,无法单独使用;③无法实现实时监测功能,需要事先对气体取样分析;④成本较高;⑤不属于便携式仪器,体积大,占据空间较多。

(2) 气敏元件传感器

该仪器是我国目前在矿井中使用最多的检测仪器,其原理是通过一种电桥电阻在不同浓度甲烷中的阻值变化来实现瓦斯监测功能。一般有两种仪器:一种是安装在矿井内的,一种是便携式的。它的优点是:使用方便,价格便宜。该仪器的缺点是:①精度较低,测量结果相比于其他两种可靠性偏低;②系统需要的响应时间相对来说较长,需要半分钟左右;③该仪器适用的测量范围较小,在 4% 之内;④甲烷浓度一旦达到某一临界值,电桥电阻会氧化,甚至可能导致铂金丝被烧断,从而使仪器被损坏。

(3) 光学干涉仪

该仪器是利用光的干涉原理测量光程之差从而测定有关物理量的光学仪器。光束几何路程或介质折射率的变化 $\Rightarrow$ 两束相干光间光程差的变化 $\Rightarrow$ 干涉条纹的移动,根据这个原理只要我们测得干涉条纹的光程变化,就能反推出折射率或者与此有关的其他物理量。测量精度决定于测量光程差的精度,干涉条纹每移动一个条纹间距,光程差就改变一个波长。在温度等相关条件相同的前提下,甲烷和空气的折射率都是略大于 1,空气的折射率约为 1.000272,甲烷的折射率约为 1.000411,鉴于两者折射率的不同,我们可以根据干涉条纹的移动来定量地分析甲烷浓度。因为测量会受到水蒸气和二氧化碳的影响,为了消除这种影响,通常情况下会在把气体送入检测器之前先经过氯化钙和碱石灰,从而保证测量的准确性。光学干涉仪的优点是:要求条件低,精度高,为矿下检测瓦斯人员使用最多的仪器。缺点是:①读数不太方便,读数误差受人为因素影响

很大;②测量精度偏低,且范围不够广泛;③如果测量环境中水蒸气的浓度偏高,测量精度会大幅度下降。

近几年来随着光学技术的发展,以及人们对瓦斯化学检测方法缺陷的不断认识,国内外都开始逐渐研究使用光学检测来替代传统的化学检测方法,光学检测仪器的测量范围和测量精度都比传统的化学检测仪器有了较大的提高。这类仪器有两个共同缺点,一个是每台仪器所需要的布点太多而使整个系统造价过高;另一个是井下使用的安全性不够高,有待提升。光纤传感器商业化在从20世纪90年代开始它的加速进程,在那段时期里光纤传感器是个非常热门的话题,国内外学者都大量地参与研究,使得其在工业上的应用迅速增加,从而使其价格更加低廉。可调谐二极管激光技术(TDLAS)是指对气体测量时通过其激光器的电流调谐和波长扫描特性的技术。二极管激光器有个显著的优点,就是具有高单色性,使得可以使用气体分子的单一吸收谱线对瓦斯气体吸收光谱测量,消除了光谱干扰因素,更准确地鉴别了瓦斯气体。TDLAS技术在性能上和传统瓦斯传感器完全不同,它具有高选择性和高灵敏度探测,从而越来越广泛地应用于多种环境监测领域,如对有毒有害气体泄露检测、大气光化学过程的研究、远程区域的空气污染监测以及污染源的排放监测等,为光纤传感技术商业化的迅速发展奠定基础。

1.3 光谱监测煤矿瓦斯的重要意义

无论是从总量还是开采量上,我国都是世界煤炭资源大国,但我国在煤炭开采安全技术方面和世界上其他国家相比有较大的差距,煤矿事故不断发生,安全形势不容乐观。随着煤炭工业的不断扩大,井下瓦斯爆炸事故也日益增多,煤炭行业的安全问题不仅被各地市的煤矿企业放在首位,而且已引起党和政府的高度重视,明确了今后一个时期煤矿瓦斯防治政策、任务和主要措施,都是为了进一步提高煤炭工业的安全生产。

造成瓦斯事故因素有很多方面,主要有管理、技术和自然条件这三方面因素,要想尽可能地减少瓦斯事故,必须要加强管理,明确责任,提高技术,完善设施,同时只有具备了先进的瓦斯检测设备,掌握了瓦斯检测的关键性技术,才能从根本上提高井下工作的安全性。2011年发展改革委、安全监管总局发布的《关

于进一步加强煤矿瓦斯防治工作的若干意见》表明了党中央、国务院高度重视煤矿瓦斯防治工作，胡锦涛、温家宝等党和国家领导同志多次就煤矿瓦斯防治作出重要批示。坚持预防为主的原则，提高项目核准和企业准入门槛，实行防治关口前移；坚持先进性原则，吸收总结了部分先进企业瓦斯防治经验；坚持依法依规生产的原则，对国家相关规定不落实或防治效果达不到规定标准的矿井，坚决停产整顿或依法关闭，可用“落实责任、提高门槛、强化基础、完善政策、严格监管”二十字概括。由此可见，瓦斯防治的安全问题刻不容缓，新技术新设备在瓦斯监测中的应用显得越来越重要。

第2章 光谱学理论

红外光谱与分子的结构有着密切的联系,它是研究表征分子结构的一种有效手段,相比其他方法,任何样品都能使用红外光谱分析,所以说它是公认的一种重要分析工具。在微分子、化工、物理、能源、材料、天文、气象、遥感、环境、地质、生物、医学、药物、农业、食品、法庭鉴定和工业过程控制等各个领域的分析测定中都有十分广泛的应用。

红外光谱可以研究分子的结构和化学键以及测定分子的键长和键角,利用这个我们可以测定如力常数、分子对称性等,并由此推测分子的立体模型。力常数 $\Rightarrow$ 化学键的强弱,简正频率 $\Rightarrow$ 热力学函数等。分子中的某些化学键或技能团虽然在不同化合物中,但是他们所对应的谱带波数基本上是固定的或只在小波段范围内变化,例如甲基、亚甲基、羰基、氰基、羟基、氨基等在红外光谱中都有特征吸收。因此通过红外光谱测定,可以判定未知样品中含有哪些有机官能团,最终我们可以确定未知物的化学结构。

分子内和分子间的某种相互作用,所处化学环境的不同使有机官能团的特征频率发生微细变化,这使得我们可以研究表征分子内、分子间的相互作用。

分子在低波数区的许多简正振动往往涉及分子中全部原子,分子不同它们的振动方式也彼此不同,这使得红外光谱像指纹一样具有高度的特征性,被称为指纹区。根据这一特点,人们采集了成千上万种已知化合物的红外光谱,并把它们在电脑数据库中编成红外光谱标准谱图库,以后就可以像指纹识别一样来识别各个分子。

随着当代红外光谱技术的发展,红外光谱的应用远远不止对样品进行简单的常规测试,进而发展为推断化合物组成的阶段。红外光谱仪与其他多种测试手段联合使用衍生出许多新的分子光谱领域,例如,红外光谱仪与色谱技术联合可以认识复杂的混合物体系中各种组分的化学结构;红外光谱仪与显微镜方法相结合,形成红外成像技术,用于研究非均相体系的形态结构。由于红外光谱能利用其特征谱带有效地区分不同化合物,使得该方法具有其他方法难以匹敌的