

# 付里叶变换红外光谱 的应用研究

RESEARCH ON APPLICATION  
OF FTIR SPECTRA

高等学校化学学报编辑部编辑  
吉林大学出版社出版

# 付里叶变换红外光谱 的应用研究

主编 荆煦瑛

高等学校化学学报编辑部编辑  
吉林大学出版社出版  
1989年

付里叶变换红外光谱的应用研究

荆煦瑛 主编

吉林大学出版社出版

吉林省新华书店发行

(长春市解放大路 85 号)

长春市第五印刷厂印刷

开本: 787×1092 毫米 1/16

1989 年 12 月第 1 版

印张: 10.25

1989 年 12 月第 1 次印刷

字数: 259 千字

印数: 1—1 000 册

ISBN 7-5601-0349-9/047

定价: 4.60 元

## 天津市光学仪器厂为您服务

天津市光学仪器厂有二十余年光学冷加工历史,本厂技术力量雄厚,测试手段健全,为了更好地为用户服务,我厂承揽外协加工,其项目如下:

1. 本厂承担各种光学仪器,整机光学零件试制任务.
2. 各种光学玻璃材料的棱镜、平板、球面反射镜、球面透镜及球面玻璃样板等光学零件加工.
3. 各种非球面光学零件和标准球面的加工.
4. 复制光学元件,如复制光栅、复制非球面、复制各种基体的反射镜等.
5. 晶体光学零件的加工(包括窗口、棱镜、球面透镜、平板等).可加工如下几种晶体材料:
  - a. 氯化钠晶体材料;
  - b. 氯化钾晶体材料;
  - c. 溴化钾晶体材料;
  - d. 氟化钙晶体材料;
  - e. 氟化镁晶体材料;
  - f. 碘化铯晶体材料;
  - g. 锗单晶;
  - h. 硅单晶;
  - i. 天然水晶、人造水晶、熔融石英等;
  - j. KRS<sub>5</sub>、CSI 晶体材料等.

### 6. 光学零件真空镀膜

- a. 镀铝;
- b. 镀氟化镁;
- c. 镀一氧化硅;
- d. 镀铬;
- e. 镀金;
- f. 2~15 $\mu$  红外干涉滤光片.

### 7. 光学精密刻度

我厂有进口设备多台,机床精良、工艺先进,主要刻划金属、玻璃、有机玻璃等材料制造的度盘、标尺、鼓轮等另件,均能达到较高的精度要求,确保您满意.

### 8. 我厂还生产红外光谱仪附件

- a. 红外吸收池附件
  - Ø100 气体吸收池;
  - Ø500 气体吸收池;
  - 固定液体池;
  - 可折液体池;
  - 微量吸收池.

本厂承揽的外协件加工,信守合同,严格按图纸技术要求制作,质量可靠,交件迅速,并实行三包和技术咨询服务,服务周到,价格合理,手续简便,代办托运,欢迎广大用户来人、来函、来电洽谈业务.

### 天津市光学仪器厂

通讯地址:天津市光学仪器厂光学车间外协组

联系人:臧庆荣 付志才

电话:281887,281882 转光学车间 电报:2556

## 前 言

付里叶变换红外光谱(FTIR)实验技术是在电子计算机蓬勃发展的基础上,于本世纪七十年代才得以进入现代化学家的实验室,成为结构分析的有力手段.它以高灵敏度、高分辨率、快速扫描、联机操作和高度计算机化的全新面貌使经典的红外光谱技术再获新生.

基于这一背景,在国家教委大力支持下,部分高等院校于1983年集中引进了一批FTIR光谱仪,用以装备化学实验室.为了推动这批新型仪器及时地、高效能地发挥作用,于1984年在国家教委装备局直接领导下成立了国家教委FTIR光谱协会,并在杭州召开了成立大会.同年,在中国化学会第三届分子光谱学术报告会上,有关高校利用这批仪器所提供的学术报告就占相当的比重,引起了有关方面和科研人员的重视.随后,于1985年在厦门召开的“第二届FTIR学术报告会”和1987年在桂林召开的“第三届FTIR应用技术学术报告会”上亦均有几十篇报告宣读和交流.为了及时总结已有的成果、促进研究工作的深入开展,本协会遂发起组织出版《付里叶变换红外光谱的应用研究》.

本书由《高等学校化学学报》编辑部负责编辑,编辑部主任赵静宜任总编辑,南开大学荆煦瑛教授任主编.本书稿件筛选和审定工作是由北京石油化工科学研究院高级工程师王宗明、中国科学院长春应用化学研究所副所长(研究员)席时权、北京大学教授吴瑾光、中国科学院北京化学研究所副研究员沈德言、中国科学院大连化学物理研究所副研究员车迅和南开大学教授荆煦瑛等十几位同行共同分担.从70多篇来稿中经二审后选定39篇,分别在“研究论文”、“研究简报”及“实验方法和技术”这3个栏目刊出.此外又特约了7篇专论,开辟了进展与评述专栏,以满足广大会员和读者的需要.

在本书的筹备过程中,得到我国光谱学界前述的多位知名学者的支持和指导;吉林大学沈家骢副校长为本书的出版给予了指导和帮助;本协会理事长清华大学副教授胡鑫尧,本协会理事吉林大学高级工程师张元福,不但承担了出版经费的筹集,而且在组稿和审编中也做了很多工作;吉林大学出版社对本书的出版给予了很大的支持,副编审王瑞金认真地进行终审,提出了一些有益的改进意见;高等学校化学学报编辑部副主任陈忠才、刘永新同志对本书英文摘要进行了仔细的校订和修改;特此一并致谢.

最后,我们愿将这本专集献给我国的光谱学先辈——已故著名光谱化学家吴学周先生,他在生前为促进我国现代分子光谱学的发展作出了卓越的贡献.

国家教委 FTIR 光谱协会

1989年4月

# 付里叶变换红外光谱的应用研究

## 目 录

### 进 展 与 评 述

|                                                                                       |     |     |      |     |     |     |      |
|---------------------------------------------------------------------------------------|-----|-----|------|-----|-----|-----|------|
| 付里叶变换红外光谱在分子研究中的进展 .....                                                              | 沈德言 | 闻再庆 | (1)  |     |     |     |      |
| IR 基团频率位移及其在有机磷研究中的新进展 .....                                                          | 陈文驹 | 荆煦瑛 | (11) |     |     |     |      |
| 近年来付里叶变换红外光谱仪发展概况 .....                                                               | 董庆年 |     | (17) |     |     |     |      |
| 分子振动光谱理论的进展 .....                                                                     | 王宗明 |     | (23) |     |     |     |      |
| 时间分辨付里叶变换红外光谱及其应用 .....                                                               | 胡鑫尧 |     | (28) |     |     |     |      |
| 红外光谱计算机解释的新进展 .....                                                                   | 郑崇直 |     | (32) |     |     |     |      |
| YBa <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>7</sub> 和 Ln-Ba-Cu-O 超导体体系的付里叶变换远红外光谱研究 ..... | 刘会洲 | 许振华 | 翁诗甫  | 周维金 | 郭海  | 林应章 | (35) |
|                                                                                       | 王加赋 | 刘佛岸 | 徐端夫  | 吴瑾光 | 徐光宪 |     |      |

### 研 究 论 文

|                                                                                                                                                                     |     |     |      |      |      |      |      |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|-----|------|------|------|------|------|
| 大孔交联聚丙烯醛树脂的研究(Ⅱ)——大孔交联聚丙烯醛及其含氮衍生物树脂的红外光谱研究 .....                                                                                                                    | 何炳林 | 王林富 | 赵芬芝  | (37) |      |      |      |
| FTIR/PAS 和 ESCA 研究 PES 涂层交联机理 .....                                                                                                                                 | 蒋大振 | 吴忠文 | 张元福  | 周从君  | 汤心颐  | (41) |      |
| 含羰基硫代磷酸酯类化合物在溶剂中的红外光谱研究 .....                                                                                                                                       | 荆煦瑛 | 张明杰 | (46) |      |      |      |      |
| 纤维状样品表面结构的 FTIR 外反射光谱研究 .....                                                                                                                                       | 薛奇  | 刘石英 | 江善根  | 朱卫   | 沈亚谦  | (50) |      |
| 付里叶变换红外光谱漫反射技术用于纤维分子取向的研究 .....                                                                                                                                     | 江善根 | 刘石英 | 朱卫   | 沈亚谦  | 薛奇   | (53) |      |
| 用 FTIR 反射光谱法测定谷物中蛋白质与氨基酸的含量 .....                                                                                                                                   | 严衍禄 | 石师林 | 张禄达  | 孔繁玲  | (56) |      |      |
| 付里叶变换红外反射吸收光谱对 PI/SiO <sub>2</sub> 界面结构的研究 .....                                                                                                                    | 姚洪熹 | 薛兴国 | 竺品芳  | (59) |      |      |      |
| 红外光谱法研究 12-钨磷酸盐的酸性质 .....                                                                                                                                           | 周卓华 | 宋志玉 | 蔡天锡  | (62) |      |      |      |
| 用差减红外光谱-分峰法测定乙丙齐聚物中端羟基的微结构 .....                                                                                                                                    | 石明孝 | 黄艾华 | 郑平   | 贺继东  | 朱勤勤  | 杨士林  | (66) |
| 聚-十六烯-1 的红外光谱序态研究 .....                                                                                                                                             | 刘敏  | 石明孝 | 戚国荣  | (71) |      |      |      |
| 硝酸稀土冠醚络合物的红外辐射光谱研究 .....                                                                                                                                            | 汤大新 | 李丽萍 | 董玺娟  | 高原   | 于凤兰  | (74) |      |
| 四核稀土过氧根配合物 [Ln <sub>4</sub> O <sub>4</sub> Cl <sub>8</sub> (THF) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>8</sub> ] · 2H <sub>2</sub> O (Ln=Pr, Nd, Sm) 的 FTIR 研究 ..... | 林应章 | 吴瑾光 | 钱久信  | 陈燕平  | 徐光宪  | (77) |      |
| CO 在负载型 Rh <sub>4</sub> (CO) <sub>12</sub> 和 Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> 催化剂上吸附态的研究 .....                                                     | 陈耀强 | 江信蓉 | 谢蕙   | 陈豫   | (80) |      |      |

|                                        |                                   |      |
|----------------------------------------|-----------------------------------|------|
| 氧化铝担载铂原子簇化合物的红外光谱研究 .....              | 李贤均 周竞兰 谢 蕙 杜宗英                   | (84) |
| 薄层色谱-付里叶变换红外光谱法 .....                  | 王淑琴 K. H. Shafer, P. R. Griffiths | (88) |
| HY 和超稳 HY 型沸石表面酸性与催化活性关系的红外光谱研究 .....  | 韩崇家 胡祖韶                           | (91) |
| 红外光声光谱法研究拉伸对 $\beta$ -聚丙烯微观结构的影响 ..... | 吴平平 储 凤 韩哲文 胡克良 史观一               | (94) |

## 研究简报

|                                          |                     |       |
|------------------------------------------|---------------------|-------|
| P 型 $\text{CuInSe}_2$ 单晶的远红外反射光谱研究 ..... | 姜嘉定 宫垂琳             | (98)  |
| GC/FTIR 联机鉴定炸药废水中硝基苯类物 .....             | 冯惠华 周文敏 王永华         | (100) |
| 金属卟啉上原位吸附 NO 的漫反射红外光谱 .....              | 曹守镜 周牧易 林鸣红 程大典     | (102) |
| 长白山刺人参叶的 GC-FTIR 研究 .....                | 胡鑫尧 卢为琴 管元美 巫森鑫     | (105) |
| 稀土元素(III)的二苯基乙酰吡唑啉酮络合物的合成与红外光谱 .....     | 王加赋 吴瑾光 陈 滇 徐光宪     | (108) |
| 取代苯并 15-冠-5 硝酸镧配合物的激光拉曼和红外光谱 .....       | 杨新潮 鄢汉新             | (112) |
| 聚氯乙烯/聚氧化乙烯混体系结构的 FTIR 研究 .....           | 吕亚非                 | (115) |
| 利用原位 FTIR 反射光谱法对电极/电解质溶液界面的研究 .....      | 沈培康 杨 勇 林祖贻 田昭武 王金茂 | (118) |
| 福建乌龙茶香气中羟基和羰基化合物含量的 FTIR 光谱法测定 .....     | 王金茂 吴明光             | (122) |
| 稀土硅钨酸及盐的热谱及红外光谱研究 .....                  | 吴志芸 吴通好 蒋大振 赵仲清     | (123) |

## 实验技术、经验交流及仪器信息

|                                              |                         |       |
|----------------------------------------------|-------------------------|-------|
| 二高 $\gamma$ -亚麻酸及中间产物的红外光谱分析 .....           | 孙允秀 张惠祥                 | (126) |
| 铈的萃取行为的研究 .....                              | 金人美 陈梅芳                 | (129) |
| 碱溶液中镍表面氧化物的红外光谱研究 .....                      | 江志裕 严曼明 章惠芳             | (131) |
| 与 FTIR 联接的长光路气体反应器的研制 .....                  | 翁建华 蔡乙乞 韦占凯 黄明波 王百花 卫 国 | (134) |
| 红外光谱微量分析中的金刚石池采样技术 .....                     | 刘淮滨 李小平 史乃玲             | (136) |
| 深井水中微量有机物的分析研究 .....                         | 卢为琴 胡鑫尧                 | (138) |
| 多组分定量分析的程序编制 .....                           | 潘伟雄 阮 竹 刘崇徽             | (140) |
| $\text{Cu}^{2+}$ 预柱/GC/FTIR 鉴定废水中硝基苯系物 ..... | 王永华 冯惠华 周文敏             | (142) |
| 红外光谱的相关分析 .....                              | 董隽逸                     | (144) |
| 付里叶变换红外光谱在金属羰基化合物反应动力学研究中的应用 .....           | 师彦龙 史启祯 余光明 刘 煜         | (146) |
| CO 高分辨付里叶变换红外光声光谱测量 .....                    | 曾繁清 林金华 冯子刚             | (151) |
| 乙烯-丙烯- $\alpha$ -辛烯三元共聚物组成的 FTIR 测定 .....    | 石明孝 金 刚 朱勤勤 曾 文         | (153) |
| 付里叶变换红外光谱仪选购指南 .....                         | 边 择                     | (155) |
| 高性能的付里叶变换红外光声光谱探测器简介 .....                   | 张元福                     | (128) |
| 《Nicolet 170SX 操作技术与应用》经验汇编 .....            | 卢为琴                     | (114) |

# RESEARCH ON APPLICATION OF FTIR SPECTRA

## Contents

### Progress and Review

|                                                                                                               |                                                                                                                                           |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Advance in Fourier Transform Infrared Spectroscopy of Polymer                                                 |                                                                                                                                           |
| .....                                                                                                         | Shen Deyan, Wen Zaiqing (10)                                                                                                              |
| Recent Advances in Infrared Group Frequency Shifts and Its Applications in Study of                           |                                                                                                                                           |
| Organophosphorus                                                                                              | ..... Chen Wenju, Jing Xuying (16)                                                                                                        |
| Recent Development in Fourier Transform Infrared Spectrophotometer                                            | ..... Dong Qingnian (22)                                                                                                                  |
| Advances in the Theory of Molecular Vibrational Spectroscopy                                                  | ..... Wang Zongming (27)                                                                                                                  |
| Time-Resolved Fourier Transform Infrared Spectroscopy and Its Applications                                    |                                                                                                                                           |
| .....                                                                                                         | Hu Xinyao (31)                                                                                                                            |
| Advances in Computer-Assisted Interpretation of Infrared Spectrum                                             | ..... Zheng Chongzhi (34)                                                                                                                 |
| Studies on FT Far IR Spectra of the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ and Ln-Ba-Cu-O Superconductor Systems |                                                                                                                                           |
| .....                                                                                                         | Liu Huizhou, Xu Zhenhua, Weng Shifu, Zhou Weijin, Guo Hai, Lin Yingzhang, Wang Jiafu, Liu Fuan, Xu Duanfu, Wu Jinguang, Xu Guangxian (36) |

### Research Papers

|                                                                                                |                                                                        |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| Studies on Macroporous Cross-linked Polyacrolein Resins( II )——IR Study of Macroporous         |                                                                        |
| Cross-linked Polyacrolein and Its Nitrogen-Containing Derivatives                              |                                                                        |
| .....                                                                                          | He Binglin, Wang Linfu, Zhao Fenzhi (40)                               |
| Studies on Cross-Linking Mechanism of Polyethersulphone(PES) by FTIR/PAS and XPS               |                                                                        |
| .....                                                                                          | Jiang Dazhen, Wu Zhongwen, Zhang Yuanfu, Zhou Congjun, Tang Xinyi (45) |
| Infrared Studies of Thiophosphate-Containing Carbonyl in Solvents                              |                                                                        |
| .....                                                                                          | Jing Xuying, Zhang Mingjie (49)                                        |
| External Reflection Infrared Spectroscopic Study on the Surface Structure of the Sample with a |                                                                        |
| Symmetrical Axis                                                                               | ..... Xue Qi, Liu Shiyong, Jiang Shangen, Zhu Wei, Seng Yaqian (52)    |
| Studies on Molecular Orientation of Fibers Using FTIR Diffuse Reflection Technique             |                                                                        |
| .....                                                                                          | Jiang Shangen, Zhu Wei, Shen Yaqian, Xue Qi, Liu Shiyong (55)          |
| Determination of Protein and Amino Acids in Cereals by Fourier Transform Near Infrared         |                                                                        |
| Reflectance Spectra(FTNIRS)                                                                    |                                                                        |
| .....                                                                                          | Yan Yanlu, Shi Shilin, Zhang Luda, Kong Fanling (58)                   |
| Studies on Interface Structure of $\text{PI/SiO}_2$ by FTIR Reflection Absorption Spectrometry |                                                                        |
| .....                                                                                          | Yao Hongxi, Xue Xingguo, Zhu Pinfang (61)                              |
| Studies on the Acidity of 12-Tungstophosphates by FTIR Method                                  |                                                                        |
| .....                                                                                          | Zhou Zhuohua, Song Zhiyu, Cai Tianxi (65)                              |



- Determination of Terminal Hydroxyl Microstructure in Ethylene and Propylene Oligomers by  
Subtracting-Resolving Bands of FTIR ..... Shi Mingxiao, Huang Aihua, Zheng Ping, (70)  
He Jidong, Zhu Qinqin, Yang Shilin
- Fourier Transform Infrared Spectroscopic Studies on the Order States of Isotactic  
Poly(1-hexadecene) ..... Liu Min, Shi Mingxiao, Qi Gourong (73)
- The FTIR Emission Spectra of Complexes of Rare-Earth Nitrates with 15-Crown-5  
..... Tang Daxin, Li Liping, Dong Xijuan, Gao Yuan, Yu Fenglan (76)
- Studies on FTIR Spectra of Tetranuclear Rare Earth Complexes  
[Ln<sub>4</sub>O<sub>4</sub>Cl<sub>8</sub>(THF)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>]·2H<sub>2</sub>O ..... Lin Yingzhang, Wu Jinguang, Qian Jiuxin, (79)  
Chen Yanping, Xu Guangxian
- A Study of Adsorption States of CO on Supported Rh<sub>4</sub>(CO)<sub>12</sub> and Rh<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> Catalysts  
..... Chen Yaoqiang, Jiang Xinrong, Xie Hui, Chen Yu (83)
- Studies on IR Spectrum of Platinum Cluster Catalysts Supported on Alumina  
..... Li Xianjun, Zhou Jinglan, Xie Hui, Du Zhongying (87)
- TLC-FTIR Analytical Method ..... Wang Shuqin, Shafer K. H., Griffiths P. R. (90)
- Studies on the Relationship Between Surface Acidity of HY and Ultrastable HY Zeolites and Catalytic  
Activity by IR Spectrometry ..... Han Chongjia, Hu Zushao (93)
- Studies on the Microstructure Changes of the  $\beta$ -Form of Isotactic Polypropylene in Drawing by  
FTIR-PAS ..... Wu Pingping, Chu Feng, Han Zhewen, Hu Kelong, Shi Guanyi (97)

#### Research Notes

- Studies on Far-Infrared Reflection Spectra for P-Type GaInSe<sub>2</sub> Single Crystal  
..... Jiang Jiading, Gong Chuilin (99)
- Identification of the Nitro-Benzenoid Compound in the Explosive Wastewater by GC/FTIR  
Technique ..... Feng Huihua, Zhou Wenmin, Wang Yonghua (101)
- FTIR Diffuse Reflectance Spectra of In-Situ Adsorption of NO on Metalloporphyrin Complexes  
..... Cao Shoujing, Zhou Mui, Lin Minghong, Cheng Dadian (104)
- Analysis of Oplopanax Elatus Nakai Leaf by GC-FTIR  
..... Hu Xinyao, Lu Weiqin, Guan Yuanmei, Wu Miaoxin (107)
- Syntheses and Infrared Spectra of Rare Earth(III) Chelates of 1,3-Diphenyl-4-Acetyl-  
Pyrazolone-5 ..... Wang Jiafu, Wu Jinguang, Chen Dian, Xu Guangxian (111)
- Studies on Raman and Infrared Spectra of Lanthanum Nitrate Substituted Benzo-15-Crown-5  
Complexes ..... Yang Xinchao, Yan Hanxin (114)
- A FTIR Study on Poly(Vinyl Chloride)/Poly(Ethylene Oxide) Blends ..... Lü Yafei (117)
- In Situ Investigation of Electrode/Electrolyte Solution Interface by Using FTIR Reflectance  
Spectrometry ..... Shen Peikang, Yang Yong, Lin Zugeng, (121)  
Tian Zhaowu, Wang Jinmao
- Determination of Hydroxyl and Carbonyl Compounds in Aroma Constituents Oolong Tea by  
FTIR Spectrometry ..... Wang Jinmao, Wu Mingguang (122)
- Studies on Thermal and Infrared Spectra for Rare Earth Substituted Silicotungstic Acids  
..... Wu Zhiyun, Wu Tonghao, Jiang Dazhen, Zhao Zhongqing (125)

## Experimental Techniques, Experience Exchange and Information Equipments

- Analysis of Infrared Spectroscopy of Dihomo- $\gamma$ -Linolenic Acid and Its Intermediate  
..... Sun Yunxiu, Zhang Huixiang (128)
- A Study on the Extraction Behaviour of the Iridium ..... Jin Renmei, Chen Meifang (131)
- The Investigation of Surface Films on Ni in Alkaline Solution by Using FTIR Spectrometry  
..... Jiang Zhiyu, Yan Manming, Zhang Huifang (133)
- A Study and Preparation of the Long-Path Gas Reactor Linked with FTIR  
..... Weng Jianhua, Cai Yiqi, Wei Zhankai,  
Huang Mingbo, Wang Baihua, Wei Guo (135)
- Diamond Cell Sampling Technique in IR Micro-analysis  
..... Liu Huaibin, Li Xiaoping, Shi Nailong (137)
- : Analysis of Trace Organic Compounds in Groundwater ..... Lu Weiqin, Hu Xinyao (140)
- The Program Compilation for Quantitative Multicomponent Analysis  
..... Pan Weixiong, Liu Chongwei, Ruan Zhu (141)
- Identification of Nitrobenzenoid Compounds in the Waste Water by GC/FTIR with  
Copper( II ) Pre-Column ..... Wang Yonghua, Feng Huihua, Zhou Wenmin (143)
- Interrelating Analysis of IR Spectra ..... Dong Junyi (145)
- The Application of Fourier Transform Infrared Spectrometry in the Kinetics of Organometallic  
Carbonyl Compound Reaction ..... Shi Yanlon, Shi Qizhen, Yu Guangming, Liu Yu (150)
- The Measurement for High Resolution FTIR-PAS Spectrum of CO  
..... Zeng Fangqing, Lin Jinhua, Feng Zigang (152)
- Determination of the Composition of Ethylene-Propylene-Octene-1 Terpolymer  
..... Shi Mingxiao, Jin Gang, Zhu Qinqin, Zeng Wen (154)

# 付里叶变换红外光谱在分子研究中的进展

沈德言 闻再庆

(中国科学院化学研究所)

红外光谱法是高聚物的结构表征和性能研究的重要手段之一。以前使用的色散型仪器,灵敏度和精确度都较低,很难察觉高聚物中微小的结构变化。随着付里叶变换红外光谱仪的发展,由于它具有高信噪比、大能量输出、高波数精度、宽频率测量范围和快速扫描能力等优点,而且能把数据储存在计算机里,可根据需要进行各种数据处理,如差示光谱、谱带分离、微分、解卷积、因子分析以及最小二乘法纯谱带拟合技术等,使高分子的红外光谱研究得以深入广泛地发展。由于 FTIR 具有快速扫描能力,促进了在位红外光谱测量技术的发展,借以了解高聚物在变化过程中某一瞬间的结构信息,如研究高聚物的聚合过程和反应动力学,薄膜在变形和应力松弛过程中的结构变化和取向行为,以及高聚物结构随温度或外加电场、压力的变化等。

由于 FTIR 的发展减少了实验技术的困难,使得很多种附件技术,如光声光谱、漫反射光谱、反射吸收光谱和发射光谱等都得到显著地发展。红外光谱和气相色谱联用技术已被广泛应用。在分子研究领域,裂解色谱与 FTIR 联用,差示扫描量热(DSC)与 FTIR 联用技术均有报导。所有这些与 FTIR 有关的实验技术的发展,为 FTIR 在分子领域的研究开拓了广阔的前景<sup>[1~6]</sup>。

## 1 分子共混物的研究

FTIR 是研究共混物相容性以及形态结构的一种非常有效的手段, Coleman 曾对此发表了较全面的综述<sup>[7]</sup>。可以近似地假设<sup>[8]</sup>,如果共混物的两个组分完全不相容,则这两个组分发生相分离,所测量的共混物光谱应是两个纯组分光谱的简单加合。但如果共混物的两个组分是相容的,则共混物为单一相。由于不同分子链间的相互作用和纯组分光谱相比,共混物光谱中许多对结构和周围环境变化敏感的谱带会发生频率位移或强度的变化。Coleman 等研究了不同组分比的聚偏氟乙烯(PVF<sub>2</sub>)和无规聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)共混物<sup>[8]</sup>。在 PVF<sub>2</sub> 对 PMMA 的重量比为 75 : 25 时,该共混物体系是不相容的。因此这共混物的光谱基本上和两纯组分的加合光谱相同。但是当 PVF<sub>2</sub> 对 PMMA 的重量比为 39 : 61 时,该共混物体系是相容的,其光谱和纯组分加合光谱有明显不同。

我们用 FTIR 研究了 PVC 和不同类型聚胺酯(PU)的相容行为<sup>[9]</sup>。用谱带分离技术可以把 N—H 伸缩振动谱带分解为 3420、3330、3260 和 3190 cm<sup>-1</sup> 4 条谱带。其中 3420 cm<sup>-1</sup> 谱带归属为自由的 N—H 基团振动,而低频的 3 条谱带归属为 N—H 和羰基或醚键生成的不同形式的氢键谱带<sup>[10,11]</sup>。可近似地假设这些氢键谱带的吸收率是相同的,并且对自由的 N—H 谱带吸收率的比值为 3.46 : 1,由此可计算出各种类型的 N—H 含量。结果表明,随着共混物中 PVC 含量增加,自由的 N—H 基团明显增加。由于 PVC 可以和聚酯型聚胺酯的软链段混容,但不能和聚醚型聚胺酯的软链段混容,因此这两种不同类型聚胺酯和 PVC 共混物的形态结构以及相应的光谱变化行为有很大的差别。

两种高聚物共混体系的相容性也取决于温度。很多共混物体系在室温下是相容的,但当温

收稿日期:1988-03-01。

度升高超过临界混容温度后,则发生相分离,共混物的光谱也随之发生变化. Coleman 等研究了 PVC 和 乙烯-醋酸乙烯酯共聚物(EVA)共混体系的相容性和温度的关系<sup>[12]</sup>. 重量比为 80 : 20 的 PVC 和 EVA 的共混体系在室温下是相容的,由于不同分子间的相互作用,使其羰基谱带和纯 EVA 光谱相比向低频位移达  $6\text{ cm}^{-1}$ . 温度上升到  $60^\circ\text{C}$  以上后,由于分子间相互作用减弱,共混物的羰基谱带向高波数位移. 到达  $130^\circ\text{C}$  以上后,波数位置已和纯 EVA 的羰基谱带相近. 说明此共混物体系已发生相分离. 由此可判断此共混物体系的临界相容温度约在  $110\sim 130^\circ\text{C}$  之间.

## 2 高聚物结晶研究

在用红外光谱研究结晶高聚物的结构时,由于其晶区和非晶区的光谱重叠在一起,很难区分. 但使用 FTIR 差示光谱技术,选择两个结晶度不同的样品的光谱按一定比例相减,就可以扣除另一相光谱的干扰,而得到晶区或非晶区的光谱. 很多种结晶高聚物如聚乙烯<sup>[13]</sup>、聚丙烯<sup>[14]</sup>、聚氯乙烯<sup>[15,16]</sup>、聚对苯二甲酸乙二醇酯<sup>[17]</sup>、反式-1,4 聚氯丁二烯<sup>[18]</sup>和聚醚酮<sup>[19]</sup>等的晶区结构的 FTIR 研究均有文献报导.

已知聚对苯二甲酸乙二醇酯(PET)的晶体结构与其乙二醇链段的旋转构象有关. 在晶区中完全是反式构象,而在非晶区中既有左右式构象也有反式构象. Koenig 等<sup>[17]</sup>使用差示光谱技术把结晶度不同的 PET 样品光谱相减,分别得到了晶区和非晶区光谱. 但是他们在相减时,并未把晶区和非晶区的反式构象加以区分,因此得到的仅是“反式构象光谱”,并非“晶区光谱”. 我们使用差示光谱技术<sup>[20]</sup>,将一系列在不同温度下退火的 PET 光谱与非晶态的 PET 光谱相减,得到一系列不同结晶状态的 PET 的“反式构象光谱”,进一步将不同退火温度的“反式构象光谱”(分别在  $240$  和  $120^\circ\text{C}$  退火)彼此相减,可以得到“纯晶区光谱”和“非晶区反式构象光谱”,如图 1 所示. 两者相比,可看到若干反式构象谱带有一定波数位移,很多谱带的相对强度也发生了变化. 说明总体光谱的反式构象谱带是晶区和非晶区两种反式构象谱带的叠加.

用 FTIR 在位测量也可以研究 高聚物的结晶过程. 如我们研究了 PET 取向非晶态的结晶

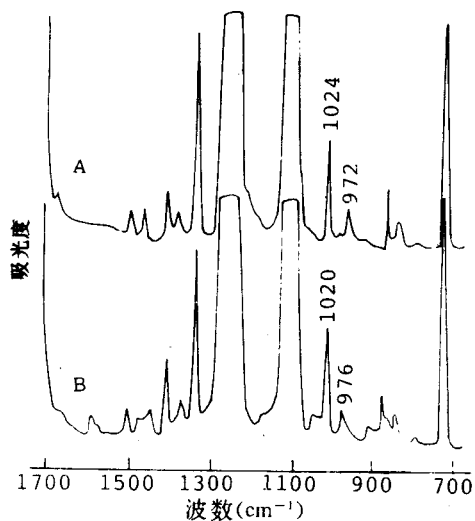


图 1 不同退火温度( $240$  和  $120^\circ\text{C}$ )PET 的“反式构象光谱”相减结果

A: 纯晶区光谱; B: 非晶区反式构象光谱.

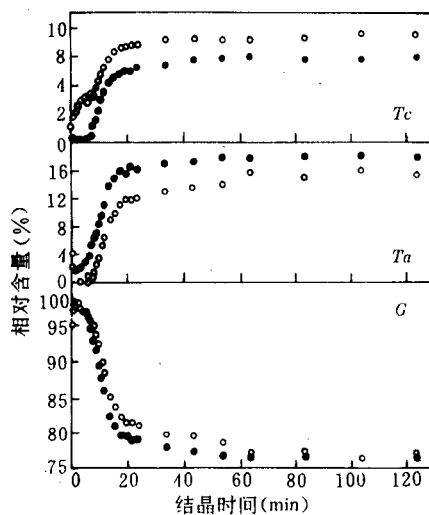


图 2 非晶 PET 薄膜在  $110^\circ\text{C}$  等温结晶过程中的构象变化

○: 未拉伸薄膜; ●: 取向薄膜.

行为<sup>[21]</sup>。以前的工作表明<sup>[22]</sup>, PET 非晶薄膜在较高的拉伸温度下以较低的拉伸速率拉伸, 可以得到在大区域链取向、无小区域链取向、非结晶的取向非晶膜。这种分子链的大区域取向对薄膜结晶的影响是一个很有趣的问题。我们把取向非晶膜和未拉伸的非晶膜两端固定, 放在 110℃ 的加热池内等温结晶, 并定时测量其红外光谱以观察其结晶过程。我们以前的工作发现, PET 光谱中的 1020 cm<sup>-1</sup> 附近的谱带对其乙二醇链段的构象变化很敏感。可用谱带分离技术分解为 1024、1021.5 和 1018 cm<sup>-1</sup> 3 条谱带, 分别对应 PET 晶区的反式构象 (*T<sub>c</sub>*)、非晶区反式构象 (*T<sub>a</sub>*) 和左右式构象 (*G*), 并用线性归纳法求出了这 3 条谱带吸收率的相对比值, 因此可以定量计算这 3 种构象结构<sup>[23]</sup>。图 2 为 PET 的取向非晶膜和未拉伸的非晶膜在 110℃ 等温结晶过程中, *T<sub>c</sub>*、*T<sub>a</sub>* 和 *G* 3 种构象结构含量随时间的变化情况。可以看到未拉伸非晶膜从加热一开始就发生结晶, 而取向非晶膜要滞后 5~6 min 才开始结晶, 而且结晶度也相对低些。

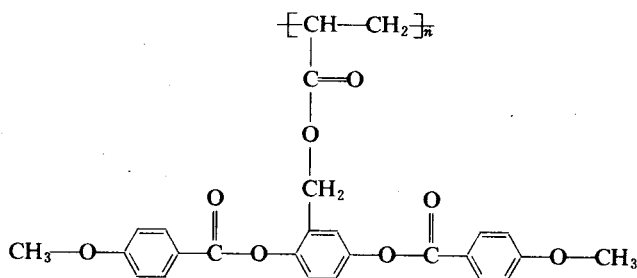
另一个有趣的例子是聚偏氟乙烯和聚甲基丙烯酸甲酯共混物结晶过程的研究<sup>[24]</sup>。把熔融淬火的共混物薄膜放在加热池中, 以 2℃/min 的升温速率加热, 并测量红外光谱。结果表明 PVF<sub>2</sub> 在共混物中的含量为 30~70% 时, 可生成 β 型结晶。而含量在这个范围之外时, 则生成 α 型结晶。

### 3 液晶高分子的研究

液晶高分子可分为溶致型和热致型两大类。热致型高分子在升高温度至熔点后, 结晶熔化形成液晶态, 继续升温至各向同性转变温度才转变为各向同性态。在升温过程中, 通过观测液晶高分子光谱的变化, 有助于了解分子间相互作用力的变化, 探讨液晶的生成机理。

吴平等在升温过程中测量了偶氮氧型热致型液晶高分子 DDA-9 的红外光谱变化<sup>[25]</sup>。认为液晶高分子的分子间相互作用力主要是分子中的羰基和苯环上的氢原子形成非典型的氢键。当分子间相互作用力发生变化时(部分氢键破坏或形成), 其羰基伸缩振动谱带将发生位移。

我们测量了液晶基元横挂于分子主链的聚丙烯酸酯液晶的红外光谱在升温过程中的变化<sup>[26]</sup>。这种液晶高分子的结构为:



在升温过程中(25~200℃), 样品首先由固态转变为液晶态, 最后变为各向同性态。红外光谱测量表明, 光谱中与主链结构有关的谱带在升温过程中频率位移极小, 而与侧链中羰基和苯环骨架伸缩振动有关的谱带频率有较大的位移。图 3 表示几条波数位置对温度变化敏感的谱带在 100~200℃ 温度区间频率位移的情况。由图可知, 在 140℃ 和 180℃ 附近这两个区域频率位移较大, 形成突变。而在这两个温度之间的区域则保持恒定。这现象与用 DSC 和偏光显微镜观测的结果相对应。表明在 140℃ 以下的温度区间, 样品是固态非晶相, 分子以棒状无规则地分散。在 140℃ 附近, 分子开始熔化, 此时通过液晶单元分子间相互作用, 使分子排列趋于有序, 形成液晶态。进一步升高温度, 分子热运动加剧, 使这种液晶态的有序遭到破坏, 从而转变为各向同性态。

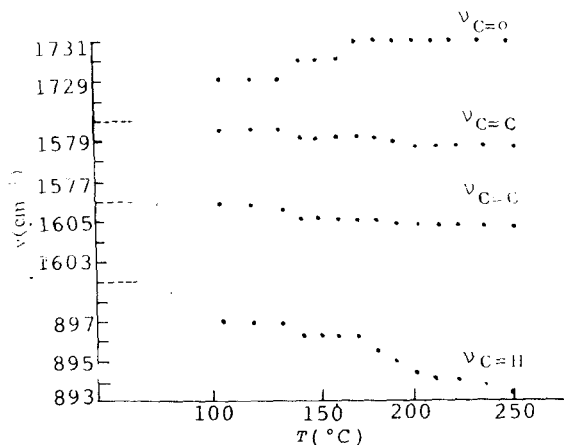


图3 丙烯酸酯型侧链液晶高分子的若干红外谱带的频率随温度的变化

#### 4 高聚物物理老化的研究

DSC 研究表明,许多种柔性链高分子从高弹态淬火到玻璃态后,再在低于  $T_g$  温度进行退火处理(物理老化),结果会在  $T_g$  温度附近出现一个热焓吸收峰.红外光谱也是研究高聚物物理老化的重要手段之一<sup>[27~30]</sup>.Wool 等把聚苯乙烯和聚氯乙烯样品分别经低温淬火和低于  $T_g$  温度退火处理后,在升温过程中观测它们的某些红外谱带的频率位移<sup>[31]</sup>.结果表明,淬火样品在温度到达  $T_g$  后,谱带频率位移幅度增加,而经过低于  $T_g$  温度退火的样品,其谱带位移幅度在  $T_g$  前后变化不大,总的频率位移幅度也较经淬火的样品小.

在 PET 的物理老化研究中,Moore 等用 FTIR 差示光谱证明,淬火的 PET 样品在低于  $T_g$  温度退火后,左右式构象增加<sup>[28]</sup>.我们把非晶的 PET 薄膜从高弹态淬火到玻璃态,并在低于其  $T_g$  温度时退火处理,然后在等速升温过程中测量样品的红外光谱,以观测其构象结构的变化<sup>[32]</sup>.为了检测在很窄的温度区域中结构的微小变化,使用差示光谱技术,把相邻温度间隔(2°C)测量的两个光谱相减.图4为经低于  $T_g$  温度退火处理的 PET 薄膜在不同温度下测量的光谱相减的结果.由图可知,随着温度升高,与其乙二醇链段反式构象结构有关的 973、1024、1340 和 1472  $\text{cm}^{-1}$  谱带强度增加,而与左右式构象结构有关的 898、1018、1044 和 1370  $\text{cm}^{-1}$  谱带强度减弱.说明反式构象结构增加,左右式构象结构减小.图中也清楚地表明,在 80~82°C 温度区间,这种构象结构变化最为明显.这个结构突变的温度正好和该样品用 DSC 测量的热焓吸收峰温度一致.说明热焓吸收峰与这种结构突变有直接联系.

#### 5 三维取向测量

通常使用的偏振红外光谱技术只能表征高分子链沿薄膜平面上的两个方向(平行和垂直于拉伸方向)的取向行为.为了测量分子链沿薄膜厚度方向的取向,通常使用薄膜倾斜法,即把取向薄膜相对于入射偏振光电矢量的方向倾斜一定角度.这样测得的光谱将包含薄膜厚度方向吸收的贡献.通过测量薄膜的折光指数,可求出光线对薄膜的实际入射角度,进而可以计算出沿厚度方向的吸光度<sup>[33,34]</sup>.由于计算机技术的发展,可使用光谱相减方法,根据公式直接得

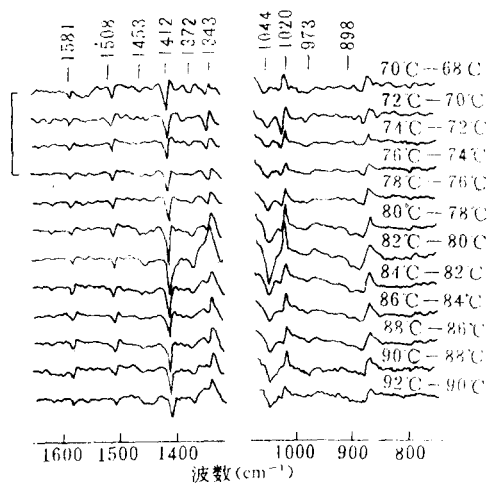


图4 在 67°C 退火 48h 的淬火 PET 薄膜等速升温过程中的 FTIR 差示光谱

到沿薄膜厚度方向的偏振光谱<sup>[35]</sup>. 我们曾使用上述方法测量了聚二苯甲酰对苯二胺(PPTA)薄膜的三维取向<sup>[36]</sup>. Haraguchi 等发现<sup>[37,38]</sup>, 用 PPTA 的硫酸溶液, 分别用甲醇和水作沉淀剂制膜, 可以得到两种不同的结晶变体. 经 X 射线衍射测量, 他们认为从甲醇沉淀制备的薄膜(变体 I)的氢键方向倾向于平行薄膜表面; 而用水沉淀制备的薄膜(变体 II)其氢键方向垂直于薄膜表面. 我们的实验结果表明, 这两种结晶变体的氢键方向均是垂直于薄膜表面的. 图 5 为平面取向的变体 I 薄膜( $A_x=A_y$ )在平行和垂直薄膜平面两个方向的偏振光谱. 显然  $A_z$  光谱中的 N—H 和 C=O 伸缩振动谱带(分别位于 3323 和 1650  $\text{cm}^{-1}$ )的强度要比  $A_x$  和  $A_y$  光谱中的强, 说明其氢键方向倾向于垂直薄膜表面.

使用倾斜法测量薄膜的三维取向, 需要知道该物质在红外区的折光指数. 由于折光指数不易准确测量, 会造成很大的实验误差. 近来 Fina 等<sup>[39]</sup>使用计算机在 Kramers-Kronig 积分基础上进行反复精化, 可以得到较准确的材料折光指数的色散曲线, 因此提高了测量的精确度. 他们用这种方法测量了 PET<sup>[40]</sup>和 PVF<sub>2</sub><sup>[41]</sup>薄膜的三维取向.

使用 ATR 方法也可测量薄膜的三维取向. 在用 ATR 装置测量时, 光线是倾斜于薄膜平面入射的, 故光谱中也包含有厚度方向的贡献. 可以靠改变入射光的偏振方向和取向薄膜的方向得到 4 个偏振光谱, 根据公式计算就可以得到薄膜 3 个方向的偏振光谱<sup>[42,43]</sup>. Hobbs 等<sup>[44]</sup>研制了一种可转动的 ATR 装置, 可以不需重新拆装样品而改变样品的方向.

由于纤维是典型单轴取向的, 因而分子链沿纤维轴对称分布. 但是在纤维的横截面上, 分子基团也会有倾向于垂直或平行纤维表面的差异. 这种取向用倾斜透射法测量是不可能的. 如图 6 所示, 在纤维横截面内, 无论基团的跃迁矩平行或垂直于纤维表面, 在 A 点和 B 点, 入射光电矢量和跃迁矩的夹角相差 90°, 因此无法区分这两种取向. 但使用 ATR 方法, 由于内反射板仅和纤维的一部分接触(如 A 点), 而未和内反射板接触的部分对吸收没有贡献, 因此可以测量在横截面上某一位置的取向. 我们用这种方法测量了聚酰胺-6 纤维的三维取向<sup>[45]</sup>. 结果表明, 在纤维横截面内,  $\alpha$ -晶型的聚酰胺氢键方向倾向于平行纤维表面, 而  $\beta$ -晶型的氢键方向

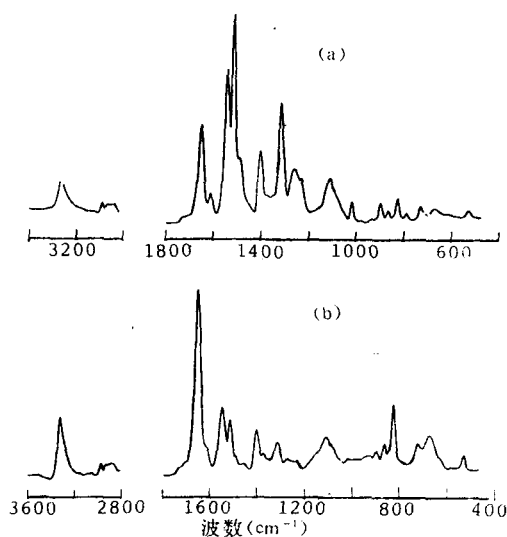


图 5 用甲醇沉淀制备的 PPTA 薄膜的偏振红外光谱  
(a)  $A_x$  和  $A_y$  光谱; (b)  $A_z$  (厚度方向) 光谱.

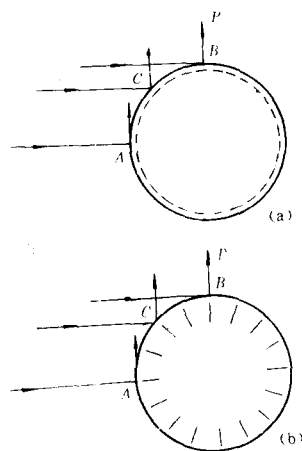


图 6 偏振光入射到理想取向纤维横截面上的各种情况

倾向于垂直纤维表面。

## 6 高聚物在拉伸过程中的结构变化

把特制的小型拉伸机放在红外光谱仪的样品室内,可在样品拉伸过程中连续测量红外光谱,以观察其结构的变化。特殊设计的拉伸机一般都配有测量应力、应变的装置,可在样品拉伸过程中,同时测量其红外光谱和应力-应变曲线。为了测量取向,还装配有可旋转的偏振器,在测量光谱时受仪器指令控制交替变换偏振光的电矢量方向<sup>[46~48]</sup>。

Siesler 等<sup>[49]</sup>研究了聚对苯二甲酸丁二酯在变形过程中的构象转变。把样品薄膜在小的应变范围内(5~15%)反复拉伸和松弛,并用快速扫描的 FTIR 监测其结构变化。结果表明,随应变增加,表征 *G-T-G* 构象结构( $\alpha$ -晶型)的 1460 和 1450  $\text{cm}^{-1}$  谱带强度减弱,而表征 *T-T-T* 构象结构( $\beta$ -晶型)的 1485 和 1470  $\text{cm}^{-1}$  谱带逐渐增强。

Theodorou 等<sup>[50]</sup>用 FTIR 研究无规聚苯乙烯薄膜在拉伸过程中的构象变化。发现在屈服点附近,反式构象结构减少。但在通过屈服点以后,反式构象结构的含量又恢复到原来状态。

Gupta 等<sup>[51]</sup>把 PET 薄膜预拉伸 2.5 倍,然后在 220℃ 热定形。在热定形时,其中一组样品是自由松弛的;另一组样品两端固定,保持恒定长度。其后再进行拉伸,并用快速扫描的 FTIR 观测其结构变化。结果表明,对于自由松弛的样品,其非晶区分子链的解卷曲是样品变形的主要机制。但对于定长的样品,在变形过程中主要是引起晶片间的纵向滑移。

聚酯-聚醚型多嵌段共聚物是一种热塑弹性体。我们以前的工作表明<sup>[52]</sup>,当样品被拉伸 3 倍以上时,其软链段的熔点会上升 10℃ 以上。当其熔点高于样品所处的环境时,就会发生结晶,影响其回弹性。我们又进一步用在位 FTIR 测量观察这种共聚物在拉伸过程中结构的变化<sup>[53]</sup>。图 7 为软段含量为 80% 的聚酯-聚醚多嵌段共聚物在 13℃ 拉伸过程中测量的 FTIR 光谱。其中 998 $\text{cm}^{-1}$  谱带是软链段的结晶谱带。由图可知,随着样品拉伸比增加,此谱带逐渐增强,说明软链段逐渐结晶。

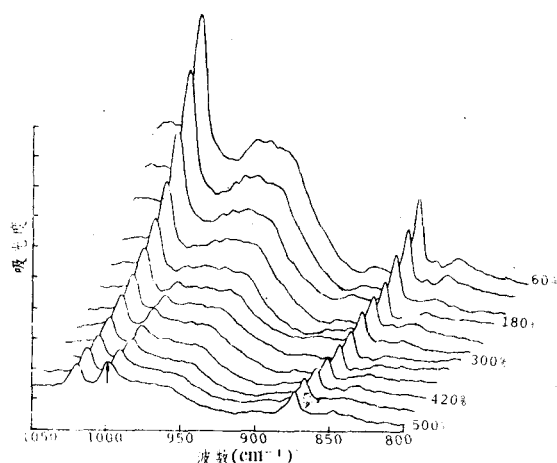


图 7 聚酯-聚醚多嵌段共聚物薄膜在拉伸过程中测量的 FTIR 光谱

## 7 应力诱导谱带变形

当高聚物在承受应力变形时,其分子链中某些结构的键长或键角可能发生变化,也会引起分子链的构象或分子间相互作用力的变化,因此也会使一些与这些结构变化因素有关的红外

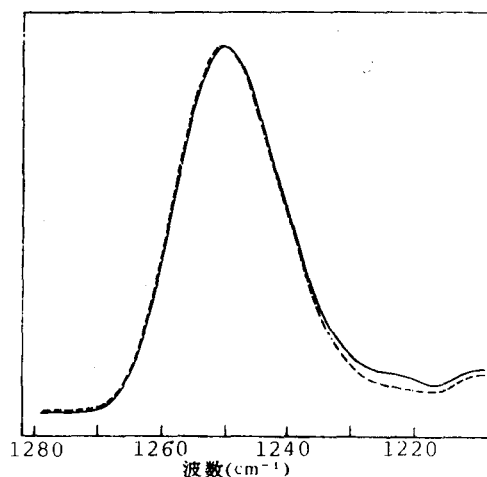


图 8 聚对苯撑二苯并噻唑薄膜在应力松弛过程中的 FTIR 光谱



谱带发生频率位移或强度变化. 最典型的情况是谱带向低频位移, 并在谱带低频一侧出现“尾部”<sup>[46]</sup>. 频率的位移和施加的应力成正比, “尾部”的出现可认为是由于分子链承受应力不均匀而产生一些过应力键造成的. Wool 对在应力下谱带位移的机理进行了总结<sup>[54]</sup>. Sikka 等<sup>[55]</sup>在应力诱导 PET 结构变化的研究中指出, 片晶间的微纤结构分子链首先承受应力, 其后把应力传递结晶区. 应力使分子链有伸直的倾向, 使乙二醇链段从左右式构象转变为反式构象, 同时引起分子间相互作用力的变化. Sikka 等<sup>[56]</sup>也研究了无规聚苯乙烯在外加应力下的光谱变化. 结果表明, 在应力下所有发生频率位移的谱带均与苯环的振动模式有关, 说明外加应力会使相邻苯环之间的相互作用力改变, 引起苯环中电子云分布的变化.

我们研究了聚对苯撑二苯并噻唑的红外谱带在应力下的变化<sup>[57]</sup>. 发现光谱中的  $1250\text{ cm}^{-1}$  谱带在外加应力下产生的频率位移最大, 可达  $3\text{ cm}^{-1}$ . 同时在谱带的低频一侧出现尾部. 图 8 为在样品承受应力后应力松弛过程中测得的光谱. 图中实线为对样品施加应力后立即测得的光谱 ( $t < 0.35\text{ s}$ ), 虚线为  $140\text{ s}$  以后测得的结果. 两者比较可知, 变化最明显的是后者低频尾部的减弱, 而谱带的位移和施加应力时的几乎相同, 基本上没有恢复. 以上结果说明在快速应力松弛阶段, 过应力键的断裂和应力转移对应力松弛起主要作用.

## 8 FTIR 和差示扫描量热联用

高聚物的结构状态变化总是伴随有吸热或放热过程. 因此在用红外光谱监测高聚物的结构变化的同时测量它的热感应是非常有意义的. 随着 FTIR 联用技术的发展, 最近也出现了 FTIR-DSC 联用装置<sup>[58]</sup>. 一种特殊设计的 DSC 池可以放置在 FTIR 仪器的样品室光路中, 并用红外显微镜把入射光线聚焦到 DSC 池的窗口上. 为了透过红外光, 样品池是用 NaCl 或兰宝石做的. 使用这种联用技术, 可以深入研究结晶或非晶高聚物、高分子共混物、液晶高分子的各种相转变、结构变化与热响应的关系以及结晶动力学、氧化降解机理等.

Koberstein 等<sup>[59]</sup>使用 FTIR-DSC 联用技术研究了聚胺酯 PU-70 的凝聚态结构变化对 N—H 氢键的影响. DSC 测量表明此样品在  $175^\circ\text{C}$ 、 $195^\circ\text{C}$  和  $215^\circ\text{C}$  有 3 个吸热峰. 根据以前用 DSC 和 X-射线衍射同时测量的结果<sup>[60]</sup>, 这  $175^\circ\text{C}$  的吸热峰是由于微相分离转变时, 分子间链段混溶的结果. 红外测量表明, 在  $175^\circ\text{C}$  以上 N—H 积分吸光度迅速地减弱, 说明由于分子间链段的混容, 造成氢键的破坏. 在  $215^\circ\text{C}$  的吸热峰是由于硬链段整体熔融产生的. 伴随这个吸热过程, C=O 和 C—H 谱带的吸光度均有所减弱, 并出现了  $\text{N}=\text{C}=\text{O}$  基团的谱带, 说明发生了胺酯化的逆反应.

## 9 漫反射光谱

漫反射光谱技术以前主要应用于紫外和可见光谱区, 但用于红外光谱测量较为困难, 主要是由于样品漫反射的红外光很弱, 使用色散型的红外光谱仪则由于灵敏度低而很难检测. 由于 FTIR 光谱仪器具有高的能量输出, 并可配备高灵敏度的检测器(如液氮冷却的铊镉汞检测器), 从而为漫反射光谱法扩展至红外光谱区创造了有利条件. 近年来漫反射 FTIR 光谱得到广泛的应用<sup>[61~64]</sup>.

漫反射光谱广泛用于高分子材料及其添加剂的剖析. 可以不需样品制备, 直接测量表面涂层和难于制样的粉末状样品. 在很多研究工作中, 要求保持样品的初始物理状态. 而经过红外制样的样品往往会改变了这种初始状态, 故可以使用漫反射法对未经制样的样品直接测量. 如为了连续观测粉末状样品在空气中的氧化降解, 把样品制成 KBr 压片显然是不适宜的. Fuller 等<sup>[65]</sup>用漫反射光谱法研究了聚二甲基富烯在空气中连续氧化过程中的结构变化. 为了表征金属丝表面涂层的结构, 如使用 ATR 法, 由于金属丝和内反射板很难充分接触, 故测量效果不理