

ICS 13.310
A 92



中华人民共和国国家标准

GB/T 19267.1—2008
代替 GB/T 19267.1—2003

刑事技术微量物证的理化检验 第1部分：红外吸收光谱法

Physical and chemical examination of trace evidence in forensic sciences—
Part 1: Infrared absorption spectrometry

www.docin.com

2008-08-14 发布

2009-03-01 实施



中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局 发布
中国国家标准化管理委员会

前 言

GB/T 19267《刑事技术微量物证的理化检验》分为 12 个部分：

- 第 1 部分：红外吸收光谱法；
- 第 2 部分：紫外-可见吸收光谱法；
- 第 3 部分：分子荧光光谱法；
- 第 4 部分：原子发射光谱法；
- 第 5 部分：原子吸收光谱法；
- 第 6 部分：扫描电子显微镜/X 射线能谱法；
- 第 7 部分：气相色谱-质谱法；
- 第 8 部分：显微分光光度法；
- 第 9 部分：薄层色谱法；
- 第 10 部分：气相色谱法；
- 第 11 部分：高效液相色谱法；
- 第 12 部分：热分析法。

本部分为 GB/T 19267 的第 1 部分。

本部分代替 GB/T 19267.1—2003《刑事技术微量物证的理化检验 第 1 部分：红外吸收光谱法》。

本部分与 GB/T 19267.1—2003 相比主要变化有：

- 增加了术语和定义的内容(本部分的 3.7、3.8、3.11、3.13~3.19)；
- 补充修改了“衰减全反射红外光谱”的定义(本部分的 3.12, GB/T 19267.1—2003 的 3.9)；
- 删除了“光栅红外光谱”的定义(GB/T 19267.1—2003 的 3.10)；
- 补充修改“原理”部分(本部分的第 4 章、GB/T 19267.1—2003 的第 4 章)；
- 删除了关于“光栅红外分光光度计”的内容(GB/T 19267.1—2003 的 5.1.1)；
- 补充修改了仪器组成、实验条件设定的内容(本部分的 5.2, GB/T 19267.1—2003 的 5.2)；
- 增加了几种制样方法(本部分的 6.2.1.3、6.2.1.6~6.2.1.8)；
- 补充结果表述的内容(本部分的 8.4)。

本部分由中华人民共和国公安部提出。

本部分由全国刑事技术标准化技术委员会理化检验标准化分技术委员会(SAC/TC 179/SC 4)归口。

本部分起草单位：山东省公安厅物证鉴定中心。

本部分主要起草人：郝隰媛。

本部分所代替标准的历次版本发布情况为：

- GB/T 19267.1—2003。

刑事技术微量物证的理化检验

第1部分：红外吸收光谱法

1 范围

GB/T 19267 的本部分规定了红外吸收光谱的检验方法。

本部分适用于刑事技术领域微量物证的理化检验,其他领域亦可参照使用。

2 规范性引用文件

下列文件中的条款通过 GB/T 19267 的本部分的引用而成为本部分的条款。凡是注日期的引用文件,其随后所有的修改单(不包括勘误的内容)或修订版均不适用于本部分,然而,鼓励根据本部分达成协议的各方研究是否可使用这些文件的最新版本。凡是不注日期的引用文件,其最新版本适用于本部分。

GB/T 14666 分析化学术语

3 术语和定义

GB/T 14666 中确立的以及下列术语和定义适用于本部分。

3.1

反射和吸收光谱 reflection and absorption spectra

入射光透过样品层在金属表面上反射,再经过样品透射出来形成的光谱。

3.2

最大吸收峰 maximum absorption peak

光谱中透过率最低的吸收峰,用其对应的波长(λ_{\max})或波数表示。

3.3

最小吸收峰 minimum absorption peak

光谱中透过率最高的吸收峰,用其对应的波长(λ_{\min})或波数表示。

3.4

波数 wave number

每厘米中所含波的数目,即等于波长的倒数。单位用 cm^{-1} 表示。

3.5

特征频率区 characteristic frequency region

在 $4\,000\text{ cm}^{-1}\sim 1\,250\text{ cm}^{-1}$ 区域显示的光谱。

3.6

指纹区 fingerprint region

在 $1\,250\text{ cm}^{-1}\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 区域显示的光谱。

3.7

傅里叶变换红外光谱仪 Fourier transform infrared spectrometer

利用干涉调频技术和傅里叶变换方法获得物质红外光谱的仪器。

3.8

分束器 beamsplite

为一半透膜,可使入射光 50%透射,50%反射。

3.9

透射红外显微镜 transmission mode infrared microscope

对微量样品能进行透射红外分析的显微镜,由物镜、目镜、载物台、反射镜、光栏及 MCT 检测器组成。

3.10

反射红外显微镜 reflection mode infrared microscope

对微量样品能进行反射红外分析的显微镜,由物镜、目镜、载物台、反射镜、光栏、MCT 检测器及反射板组成。

3.11

傅里叶变换高压红外(HP/FTIR) high pressure Fourier transform spectrum

使用特殊材料制成的高压样品池,把样品在高压下制样测量,获得样品傅里叶变换红外光谱。

3.12

衰减全反射红外光谱(ATR) attenuated total reflection infrared spectrum

红外光以大于临界角入射到紧贴在样品表面的高折光指数晶体时,由于样品折光指数低于晶体,发生全反射,红外光只进入极浅的表层,只有某些频率入射光被吸收,另一些则被反射,测量这一被衰减了的辐射就得到样品的衰减全反射红外光谱。

3.13

漫反射红外光谱(DIR) diffuse reflectance infrared spectrum

光束入射到粉末状晶体样品时,会产生表面反射、透射、晶体内反射等多重反射,不同方向反射光使样品产生了多向辐射光,即为漫反射,由漫反射技术得到的红外光谱称为漫反射红外光谱。

3.14

镜反射(MR) mirror reflectance

在平整的样品表面入射光不能透过样品时,光以一定角度入射到样品表面会产生反射,这种测谱方法称之为镜反射。

3.15

傅里叶变换红外光声光谱(PAS/FTIR) Fourier transform infrared photoacoustic spectroscopy

利用物质的光声效应原理,用光声池、前置放大器代替原有的 FTIR 探测器,测得的红外光谱。

3.16

傅里叶变换显微红外(MIC/FTIR) Fourier transform infrared microscopy

利用红外显微镜测量微量样品或样品微区的傅里叶变换红外光谱,称为傅里叶变换显微红外。

3.17

气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术(GC/FTIR) gas chromatography-Fourier transform infrared spectrometer

把气相色谱仪通过接口与傅里叶红外光谱仪相连,利用气相色谱的高效分离功能和傅里叶变换红外光谱的结构分析能力,对混合物进行分析鉴定的技术。

3.18

高效液相色谱-傅里叶变换红外光谱联用技术(HPLC/FTIR) high performance liquid chromatography-Fourier transform infrared spectrometer

把液相色谱仪通过接口与傅里叶变换红外光谱仪相连,利用液相色谱的高效分离功能和傅里叶变换红外光谱的结构分析能力,对混合物进行分析鉴定的技术。

3.19

热重分析-傅里叶红外光谱联用技术(TGA/FTIR) thermogravimetric analysis-Fourier transform infrared spectrometer

把热重分析仪通过接口与傅里叶变换红外光谱仪相连,用傅里叶变换红外光谱分析法对热失重各

区段放出的尾气进行在线联用分析的技术。

4 原理

红外光谱(infrared spectrum, IR)又称为振动转动光谱,是一种分子吸收光谱。当分子受到红外光的辐射,产生振动能级(同时伴随转动能级)的跃迁,在振动(转动)时伴有偶极矩改变者就吸收红外光,形成红外吸收光谱。由于物质的组成不同,对红外光吸收也不同,即不同物质有不同的红外光谱,这是定性依据。物质对红外光吸收的多少与物质浓度有关,与入射光强无关,这是定量的依据。红外光谱根据不同的波数范围分为近红外区($15\ 000\ \text{cm}^{-1}\sim 4\ 000\ \text{cm}^{-1}$)、中红外区($4\ 000\ \text{cm}^{-1}\sim 400\ \text{cm}^{-1}$)和远红外区($400\ \text{cm}^{-1}\sim 10\ \text{cm}^{-1}$)。

5 仪器和材料

5.1 傅里叶变换红外光谱仪

5.1.1 工作模式

从红外光源发出的红外光,经迈克尔逊干涉调频后入射至样品,透过(或反射)后到达检测器,透过光包含了样品对每一频率的吸收信息,将检测器检测到的光强信号输入计算机进行合傅里叶变换处理,结果以红外光谱图的形式输出,并由计算机通过接口仪器实施控制。

5.1.2 光源

常见的光源有以下几种:

- a) 碘钨灯——近红外区($15\ 000\ \text{cm}^{-1}\sim 4\ 000\ \text{cm}^{-1}$);
- b) 硅碳棒——中红外区($4\ 000\ \text{cm}^{-1}\sim 400\ \text{cm}^{-1}$);
- c) 金属丝($4\ 500\ \text{cm}^{-1}\sim 400\ \text{cm}^{-1}$);
- d) 高压汞灯——远红外区($<400\ \text{cm}^{-1}$)。

5.1.3 干涉仪

干涉仪是 FTIR 的最重要组成部分,由一组反射镜和分束器组成,仪器的波段范围也和分束器类型有关。常用光束分束器的技术参数见表 1。

表 1 常用光束分裂器的技术参数

| 使用范围/ cm^{-1} | 载片 | 涂层 |
|------------------------|----------------|-------------------------|
| 25 000~3 300 | SiO_2 | Fe_2O_3 |
| 6 000~1 700 | CaF_2 | Fe_2O_3 |
| 3 800~400 | KBr | Ge |
| 2 000~1 000 | CsI | Ge |
| 400~10 | Mylar | |

5.1.4 检测器

傅里叶变换红外光谱仪要求检测器响应速度快,灵敏度高,测量波段宽,且有较好的检测线性。常用检测器的技术参数见表 2。

5.1.5 数据处理系统

对仪器实施控制,采集数据和数据处理。该系统由计算机、输入输出接口、实施仪器控制、数据处理的系统软件组成。

5.1.6 红外显微镜

与傅里叶变换红外分光光度计联用的一种设备,主要用来检测超微量样品。

表 2 常用检测器的技术参数

| 名称 | 类型 | 工作温度/K | 适用波数/cm ⁻¹ | 探测率 D |
|------------------|-------|--------------|-----------------------|---------------------|
| DTGS(带 KBr 窗口) | 热电型 | 295 | 5 000~400 | 1.8×10 ⁹ |
| DTGS(带 CsI 窗口) | 热电型 | 295 | 5 000~200 | 1.8×10 ⁹ |
| DTGS(带 KRS-5 窗口) | 热电型 | 295 | 5 000~200 | 1.8×10 ⁹ |
| DTGS(带聚乙稀窗口) | 热电型 | 295 | 400~10 | 1.8×10 ⁹ |
| MCT-A | 光电导型 | 77(液氮) | 5 000~720 | 2×10 ¹⁰ |
| MCT-B | 光电导型 | 77(液氮) | 5 000~400 | 2×10 ¹⁰ |
| ZnSb,ZnSe 等 | 光电型 | 77(液氮) | 10 000~1 850 | 1×10 ¹¹ |
| PbSe | 光伏型 | 195 或 77(液氮) | 10 000~2 000 | |
| InAs | 光电导型 | 77(液氮) | 10 000~3 500 | |
| Si | P-N 结 | 259 | 25 000~8 000 | |

5.2 傅里叶变换红外分光光度计的校正及条件设定

5.2.1 仪器校正

通过对透过率、波数、分辨率等的测定与校正,获得最佳分析条件,具体操作如下:

- a) 透过率准确度校正:在 4 cm⁻¹分辨率条件下,测量 5 次 0.03 mm 厚聚苯乙烯的红外光谱,每扫描 5 次其 2 924 cm⁻¹峰的透过率变动应小于 0.1T%。
- b) 波数校正:可用对光和热稳定的样品,如标准聚苯乙烯,在全波段内记录红外光谱,观察吸收峰位置的准确性,聚苯乙烯膜红外光谱吸收峰位置见表 3;经校正后的波数就连续重复测定 3 次~5 次,观察吸收峰位置变化情况,精度要求在 3 000 cm⁻¹附近为±3 cm⁻¹,在 1 000 cm⁻¹附近为±1 cm⁻¹。

表 3 聚苯乙烯膜红外光谱吸收峰位置

| 吸收带号 | 波长(空气)/μm | 波数(真空)/cm ⁻¹ | 吸收带号 | 波长(空气)/μm | 波数(真空)/cm ⁻¹ |
|------|-----------|-------------------------|------|-----------|-------------------------|
| 1 | 3.302 6 | 3 027.1 | 8 | 6.315 0 | 1 583.1 |
| 2 | 3.419 0 | 2 924.0 | 9 | 8.462 2 | 1 181.4 |
| 3 | 3.507 0 | 2 850.1 | 10 | 8.660 9 | 1 154.3 |
| 4 | 5.142 6 | 1 944.0 | 11 | 9.351 1 | 1 069.1 |
| 5 | 5.343 3 | 1 871.0 | 12 | 9.725 0 | 1 028.0 |
| 6 | 5.549 1 | 1 801.6 | 13 | 11.026 | 906.7 |
| 7 | 6.242 8 | 1 601.4 | 14 | 14.304 | 698.9 |

- c) 分辨率校正:用氨气检查,在标准状态下测试,分辨率一般不低于 4 cm⁻¹,氨的红外光谱峰见表 4。

表 4 氨光谱在红外区的参考波数

| 序号 | 波数/cm ⁻¹ | 序号 | 波数/cm ⁻¹ | 序号 | 波数/cm ⁻¹ | 序号 | 波数/cm ⁻¹ |
|----|---------------------|----|---------------------|----|---------------------|----|---------------------|
| 1 | 1 212.7 | 8 | 1 103.4 | 15 | 951.8 | 22 | 867.8 |
| 2 | 1 195.0 | 9 | 1 084.6 | 16 | 948.2 | 23 | 847.7 |
| 3 | 1 177.1 | 10 | 1 075.9 | 17 | 915.6 | 24 | 827.7 |
| 4 | 1 158.9 | 11 | 1 065.6 | 18 | 912.4 | 25 | 770.9 |
| 5 | 1 140.6 | 12 | 1 046.4 | 19 | 908.2 | 26 | 745.3 |
| 6 | 1 122.1 | 13 | 1 027.0 | 20 | 892.0 | | |
| 7 | 1 117.5 | 14 | 1 007.5 | 21 | 888.0 | | |

5.2.2 实验条件设定

实验室条件设定如下:

- a) 工作环境相对湿度 $\leq 50\%$, 室温在 $20\text{ }^{\circ}\text{C}\sim 25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 之间;
- b) 分辨率不低于 $2\text{ cm}^{-1}\sim 4\text{ cm}^{-1}$;
- c) 建议扫描次数为 16 次 \sim 32 次;
- d) 光源能量调至最大允许值;
- e) 光谱记录区域根据检测器的性能而确定, 见表 2。

5.2.3 红外显微镜实验条件的设定

显微镜实验条件设定如下:

- a) 物镜不应低于 15 倍。
- b) 反射法检验时, 若用 1.5 mm 固定光栏, 反射率不应低于 10%; 若用可变光栏, 反射率不低于 20%。
- c) 透射法检测时, 建议使用溴化钾晶片或单晶硅片。

5.3 试剂和标准样品

5.3.1 试剂和标准样品

溴化钾、三氯甲烷、石油醚、乙醚、乙醇、丙酮、二硫化碳、醋酸乙酯、四氢呋喃、甲醇, 二甲基甲酰胺 (以上试剂均为分析纯)。

5.3.2 比对样品

直接从工厂或市场收集。应尽可能获得不加添加剂的高聚物。若从市场收集, 应考虑是否含有添加剂或混有其他材料。具体如下:

- a) 塑料: 聚氯乙烯、聚丙烯、聚乙烯、聚甲基丙烯酸甲酯、聚苯乙烯、聚甲醛、ABS 塑料 (丙烯腈-丁二烯-苯乙烯共聚物) 等;
- b) 橡胶: 丁苯橡胶、丁腈橡胶、氯丁橡胶、丁丙橡胶、丁基橡胶、顺丁橡胶、天然橡胶等;
- c) 纤维: 锦纶、维纶、丙纶、氯纶、涤纶、柞蚕丝、棉、桑蚕丝、粘胶纤维等;
- d) 油漆: 醇酸清漆、硝基清漆、酚醛清漆、环氧清漆、氨基清漆及各种色漆等;
- e) 黏合剂: 聚乙烯醇、氰基丙烯酸乙酯、聚醋酸乙烯、羧甲基纤维素等。

6 样品制备

6.1 样品分离

6.1.1 机械分离

将载有附着物的检材, 放于立体显微镜下, 用针或手术刀片进行剥离或分离。被分离出的可疑物, 如粘着灰尘等物, 可将其移于载玻片上, 用蒸馏水清洗。

6.1.2 热解分离

适用于复杂的体系, 如橡胶制品、含大量填料的塑料、固化的树脂、多层油漆、腻子等高聚物检材的分离。它们难以用常规方法制样, 采用干馏法和控温热解法进行热解分离, 具体如下:

- a) 干馏法: 将试样放入小试管或毛细管中, 在酒精灯上间断加热, 使热解物凝聚在管壁上, 取出后立即进行光谱测试。
- b) 控温热解法: 可在气相色谱的裂解器上实现温度和裂解时间的控制。取一支长约 10 cm 的裂解管, 将一端在酒精灯上封死, 将样品放在被封死的一端, 插入裂解丝中, 调整好裂解温度和时间, 热解后获得热解物。也可使用较短裂解管, 用溴化钾晶片或红外金属反射板盖住裂解管口, 收集裂解气体冷凝液, 备检。常见高聚物最佳裂解温度见表 5。

表 5 常见高聚物最佳裂解温度

| 高聚物 | 热解温度/℃ |
|-----------|---------|
| 聚乙烯 | 440~450 |
| 尼龙 66 | 450~460 |
| 硅橡胶 | 475~500 |
| 木粉填充的酚醛树脂 | 500~550 |
| 聚四氯乙烯 | 550~580 |
| 石棉填充的酚醛树脂 | 600~650 |
| 硅树脂 | 725~750 |
| 氨丁橡胶 | 314,504 |
| 聚异戊二烯 | 412 |
| 氯化丁基橡胶 | 429 |
| 丁基橡胶 | 510 |
| 顺丁橡胶 | 415,510 |
| 聚丙烯 | 516 |
| 丁腈 | 518 |
| 乙丙橡胶 | 524 |
| 聚苯乙烯 | 433,524 |

6.1.3 薄层分离

常用的薄层板有硅胶 G、高效板等。一些常见物证的薄层分离展开剂见表 6。

表 6 常见物证薄层分离展开剂(硅胶 G)

| 物证 | 展开剂 |
|------|---|
| 矿油 | 乙醇-丙酮(7:3) 乙醇-正己烷(7:3) 乙醇-丙酮-氯仿(7:3:1) 乙醇-正丁醇-石油醚(6:2:2) 苯-正己烷-乙酸(18:1.5:0.5) 苯-石油醚-乙酸(18:1.5:0.5) |
| 食用油 | 四氯化碳-甲苯-乙醇(10:10:7) 庚烷-乙醚(8:2) 苯-正己烷-丙酮(25:5:0.6) 石油醚-甲苯-二乙胺(14:5:1) 庚烷-醋酸乙酯(8:2) 环己烷-醋酸乙酯(7:1) |
| 红色油漆 | 四氯化碳-氯仿-环己烷(3:2:1) 苯-乙醚-环己烷(5:2:10) 苯-乙醚-石油醚(5:4:10) 石油醚-醋酸乙酯(6:1) |

表 6 (续)

| 物证 | 展开剂 |
|--------|--|
| 原子印章墨水 | 吡啶-异戊醇-浓氨水(1:1:1) 苯-丙酮-二乙胺(4:1:1) 环己烷-氯仿-二乙胺(4:1:1) 苯-氯仿-二乙胺-乙醇(1:1:1:0.5) 氯仿-乙醇-二乙胺-浓氨水(5:3:1:1) 氯仿-环己烷-二乙胺-乙醇(3:3:2:1) 苯-环己烷-二乙胺-乙醇(3:3:2:1) |

样品的洗脱和富集:将薄层斑点刮下,放入微量离心管中,加几滴溶剂轻震,然后高速离心,用微量注射器移出液体,挥去溶剂,用于光谱测试。为降低干扰,可用多孔溴化钾三角法清除硅胶(装置见图1)。将薄层斑点刮下,放入一平底玻璃管中(内径10 mm~12 mm,高30 mm~35 mm),加入少量溶剂;将溴化钾三角块(高25 mm,底7 mm,厚2 mm)夹入夹子中放入溶液里,使三角块的角向上,不与玻璃管接触;将玻璃管盖上带孔(直径3 mm)板,使孔对准三角的尖端;由此使溶剂不断挥发,样品浓集于三角顶端,取下三角顶端的溴化钾待测。也可用三角层析纸代替溴化钾三角,样品也将浓集于三角顶端,然后用溶剂将三角顶端样品冲洗于溴化钾晶片或红外反射板上,待测。



图 1 多孔溴化钾三角分离薄层斑点硅胶装置

6.2 制样

6.2.1 固体试样

6.2.1.1 溴化钾压片法

将试样与干燥的溴化钾在玛瑙研钵中混合均匀,充分研磨后,放在直径13 mm的模具中,在压片机上压制成透明片,还可用微量样品压片模具中压制1 mm~3 mm直径的片,装入样品架待测。

6.2.1.2 热压成膜法

对热塑性高聚物则用两块载玻片夹住,在酒精灯上加热熔化,压成薄膜,冷却后取出膜直接测试。

6.2.1.3 糊状法

将干燥处理后的试样研细,与液体石蜡或全氟代烃混合,调成均匀糊状,夹在盐片中测试。

6.2.1.4 金刚石池法(Diamond-Anvil-Cell, DAC)

金刚石池是常用的微量固体样品的制样装置,由两块珍宝级的Ⅱ_a金刚石和加压支架组成。金刚石既作为红外光的窗口,又当作挤压被测样品的锥型顶砧,锥台表面为0.3 mm²并抛光。微克量级的试样放在两块金刚石顶砧之间,使彼此紧密接触,然后放在支架上加压,置于聚光器光路中。Ⅱ_a型金刚石在2 800 cm⁻¹~4 000 cm⁻¹范围内有弱吸收,在1 900 cm⁻¹~2 800 cm⁻¹内有强吸收,应进行背景扣除。

6.2.1.5 红外显微镜法

将微克量级的试样压薄并置于红外显微镜聚焦光路上的溴化钾晶片上或反射板上,然后进行红外光谱的测定。

6.2.1.6 漫反射法

将样品与溴化钾、氯化钾等分散剂均匀磨碎,其粒度和均匀度与压片法相似,固体粒度要求在10 μm以下,卤化钾与样品比例一般在1:20至1:10之间。测试时将卤化钾与样品混合研磨,装入样品池即可测得混合粉末的漫反射谱,将该谱与卤化钾粉末的漫反射谱(背景谱)相比就得到了样品的漫反射光谱。利用漫反射法进行定量分析时要进行K-M(Kubelka)变换,一般仪器软件可以自动进行。

6.2.1.7 衰减全反射(ATR)法

将样品置于ATR附件下,充分接触,然后进行ATR红外光谱测定。此法用于测定不易溶解、熔化、难以粉碎的弹性或黏性样品。

6.2.1.8 光声光谱(AS)法

将样品置于光声池中测定。红外光声光谱法主要用于强吸收、高分散的样品及橡胶高聚物等难以制样的样品的测定。

6.2.2 液体试样

采用夹片法制样。将氯化钠或溴化钾盐片抛光,将试样滴于溴化钾或氯化钠片上,用另一片盖住,然后用固定样品支架夹住即可测试。对较稠而不易挥化的液体,可直接涂在盐片上。若试样量较少,可涂于1 mm~3 mm直径的盐片上,并用相应聚焦光束的红外光谱仪测试,也可供透射或反射红外显微镜测试。

较易挥发的液体可使用液体池或选用溶液法制样。

6.2.3 气体试样

采用气体池制样。首先根据样品挥发性的大小选用100 cm、10 cm、3 cm等不同光程的气体池,样品量较少时,可选用微量气体池。然后将气体池抽成真空,将气体试样导入。

7 试验方法

7.1 图谱检测

将制好的样品置于红外光谱仪样品间或红外显微镜的载物台上,进行测试。测试时,应按照如下要求:

- a) 光谱图的最大吸收峰应保持在10%~20%透过率,基线保持平直;
- b) 应扣除背景;
- c) 如有供比对的样品,应同时测试谱图。

7.2 图谱认定

7.2.1 未知物的鉴定

7.2.1.1 计算机检索

根据红外光谱提供的结构信息,判断未知物可能为哪类物质,然后到商品库中检索,如为纯物质可到标准库中检索。根据检索结果,用相应物质测试谱图,再与未知物红外光谱图比对,即可得出结论。采用计算机检索,应保证未知物有足够的纯净度,同时应多取几个试样点检测,反复进行检索。

7.2.1.2 查阅图谱

根据红外光谱提供的结构信息,判断未知物可能为哪类物质,然后查阅商品红外光谱谱图或纯物质标准红外光谱谱图,将查出的谱图同未知物谱图比对,即可得出结论。

7.2.1.3 与其他分析手段配合鉴定

将红外光谱分析与质谱分析、紫外光谱分析、核磁共振、扫描电镜及发射光谱分析等方法配合使用,鉴定未知物是什么物质。

7.2.2 目标物认定

7.2.2.1 用标准物作对照,在相同的条件下绘制两种物质红外光谱谱图,然后进行比对,如完全吻合,即为相同物质。

7.2.2.2 如没有标准物作为对照,可以通过查阅被指认的红外光谱谱图与未知物的谱图进行比对(Saterla红外光谱图库有多种商业谱图及标准物质谱图供查阅)。

7.2.2.3 如仪器配有红外光谱谱库,采用计算机检索,直接从库中调出被指认物的红外光谱谱图与未知物的谱图比对。

7.2.2.4 比对检验

在相同条件下测试检材和比对样品的红外光谱谱图,然后进行比对。

8 结果表述

8.1 对未知物的鉴定,应表述为:检材是某种物质或主要含有某种物质。如不能确切表述为某种物质,应根据红外光谱的官能团信息提出可能是某种物质等分析意见。

8.2 目标物认定应表述为:检材是或不是某种物质。

8.3 比对检验应表述为:检材与某种比对样品是相同物质或属同类物质。

8.4 红外光谱分析应附以光谱图,并注明仪器型号、试样名称、选用附件名称、仪器测量条件、试样预处理情况、制样方法、标准或对照物质来源、数据处理方法及分析结果。

www.docin.com

www.docin.com

中华人民共和国
国家标准
刑事技术微量物证的理化检验
第1部分：红外吸收光谱法
GB/T 19267.1—2008

*

中国标准出版社出版发行
北京复兴门外三里河北街16号
邮政编码：100045

网址 www.spc.net.cn

电话：68523946 68517548

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 字数 20 千字
2008年11月第一版 2008年11月第一次印刷

*

书号：155066·1-34848 定价 16.00 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)68533533



GB/T 19267.1—2008