

رسم FTIR , ATR

1. ساختار فایل Excel داده‌های FTIR

	A	B
1	Wavenumber (cm ⁻¹)	Transmittance (%)
2	4000	95.21
3	3990	95.35
4	3980	95.47
5	3970	95.60
6	3960	95.72
7	...	...
8	500	45.81
9	400	43.20



• ستون A: عدد موجی (Wavenumber) بر حسب cm^{-1}

• ستون B: شدت جذب (Absorbance) یا درصد عبور

(Transmittance %)

نکته: بیشتر دستگاه‌ها Transmittance % می‌دهند.

ساختار فایل اکسل داده‌های FTIR

رسم نمودار در اکسل

1- فایل اکسل را که داریم

2- انتخاب دو تا ستون

3- Insert – scatter

4- معکوس کردن نمودار

5- شکل اصلی را بهت میدهند

6 – طبق مراحل صفحه بعد



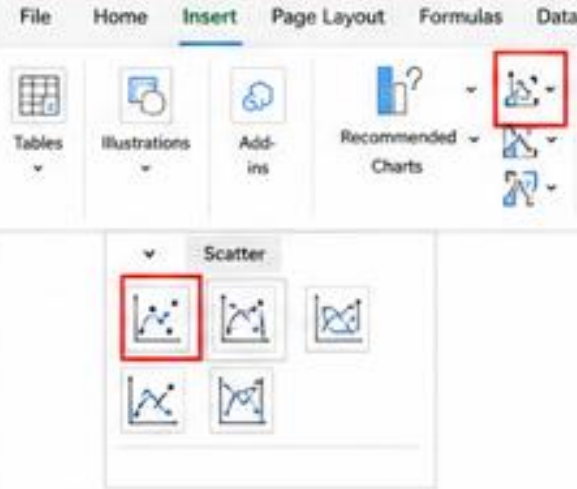
رسم نمودار در اکسل به صورت گام به گام

2. انتخاب دو ستون داده‌ها

	A	B
1	Wavenumber (cm ⁻¹)	Transmittance (%)
2	4000	95.21
3	3990	95.35
4	3980	95.47
5	3970	95.60
6	3960	95.72
7	...	...
8	500	45.81
9	400	43.20

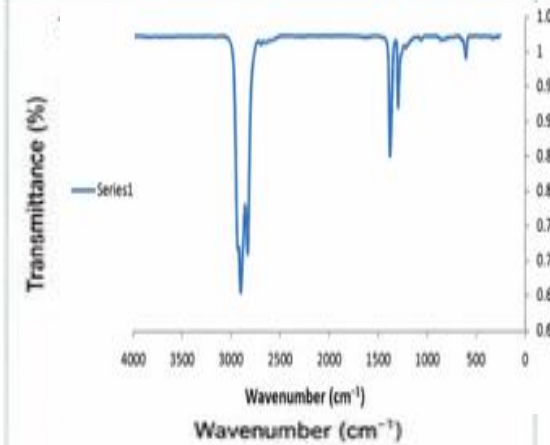
دو ستون A و B را انتخاب کنید.

3. Insert → Scatter (XY)



از مسیر Insert → Scatter (XY) نمودار را انتخاب کنید.

4. نمودار اولیه در Excel



نمودار اولیه رسم می‌شود.

معکوس کردن محور X

Format Axis

- Axis Options

Bounds

Minimum 4000.0

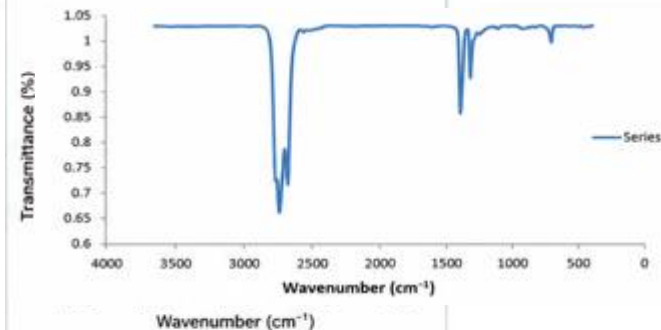
Maximum 400.0

☒ Values in reverse order

☐ Logarithmic scale

روی محور X راست کلیک کنید → Format Axis
تیک گزینه Values in reverse order را بزنید.

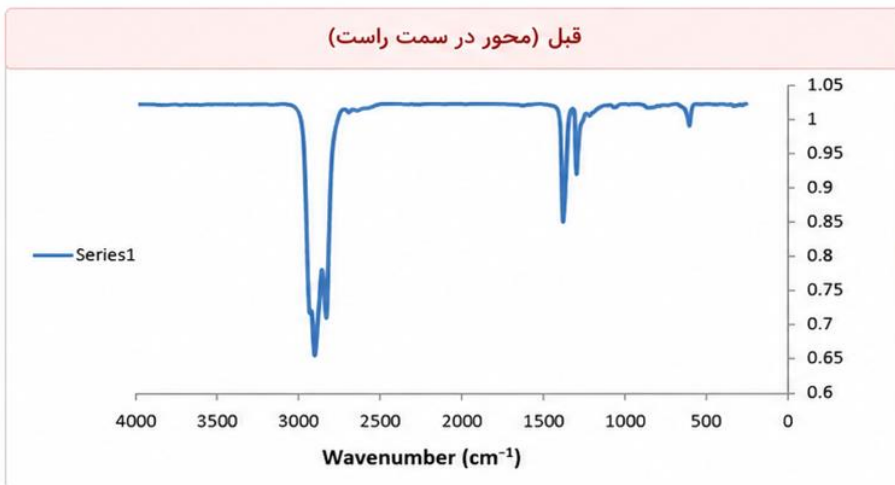
6. نمودار نهایی در Excel



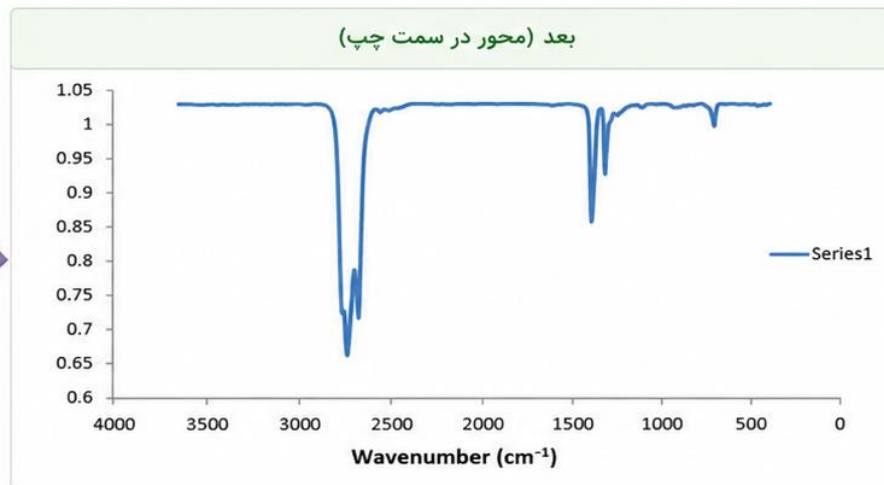
محور X از 4000 به 400 معکوس شد.

نمونه داده هایی
است که شما در
اکسل رسم میکنید
و شکل شان
اینطوری است
بخوایی محور آن
را درست کنی
این مراحل را
باید انجام داد

قبل (محور در سمت راست)



بعد (محور در سمت چپ)



مراحل جابجایی محور از راست به چپ در Excel

1 محور عمودی (Y) را انتخاب کنید

2 روی محور راست کلیک کنید

3 در پنجره Format Axis گزینه Labels را انتخاب کنید

4 گزینه مرتب شد. Maximum axis value (محور به سمت چپ منتقل می‌شود)

5 برای مرتب شدن محور افقی (در صورت نیاز) روی محور افقی کلیک کنید و گزینه Values in reverse را فعال کنید

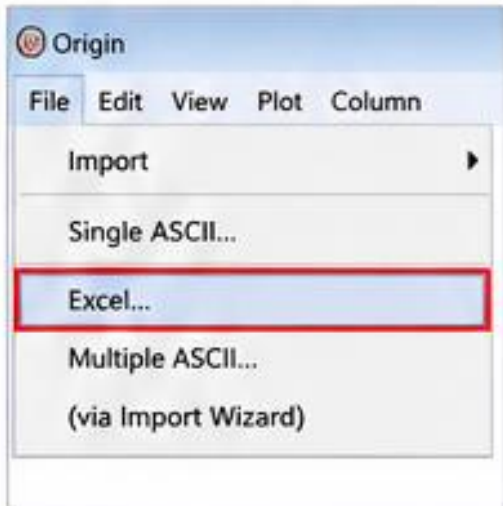
در FTIR معمولاً محور افقی باید از 4000 به 400 cm^{-1} نمایش داده شود (از چپ به راست کاهشی).

نکته:

نتیجه: محور عمودی از سمت راست به سمت چپ منتقل شد.



3-1. Import فایل Excel



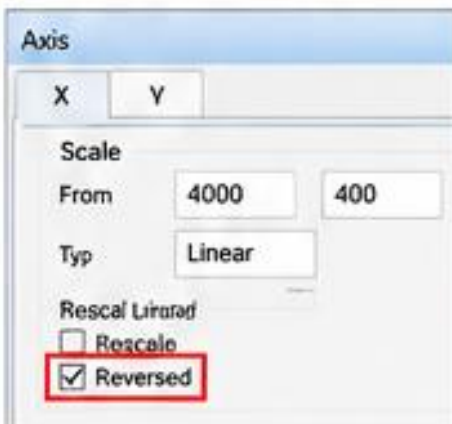
2- انتخاب ستون‌ها: 7-

	A(X)	B(Y)
1	Wavenumber (cm ⁻¹)	Transmittance (%)
2	4000	95.21
3	3990	95.35
4	3980	95.47
5	3970	95.60
6	3960	95.72
7	...	...
8	500	45.81
9	400	43.20

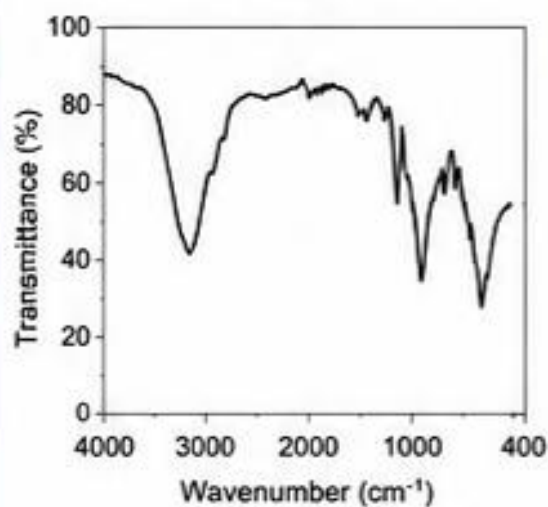
3.1 Line نهایی



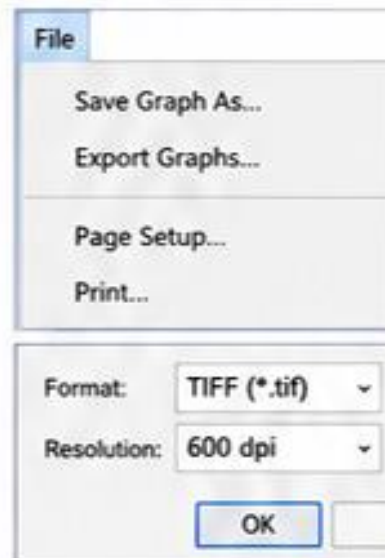
3.1 معکوس کردن محور



تنظیم ظاهری نمودار: 7-



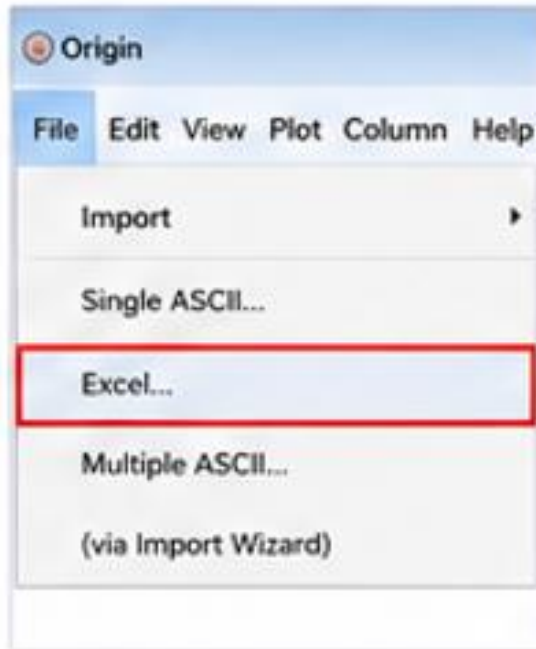
6.1 ذخیره با کیفیت



رسم نمودار در اوريجين به صورت گام به گام

رسم نمودار در Origin (کیفیت حرفه‌ای برای مقاله)

7-1. Import فایل Excel



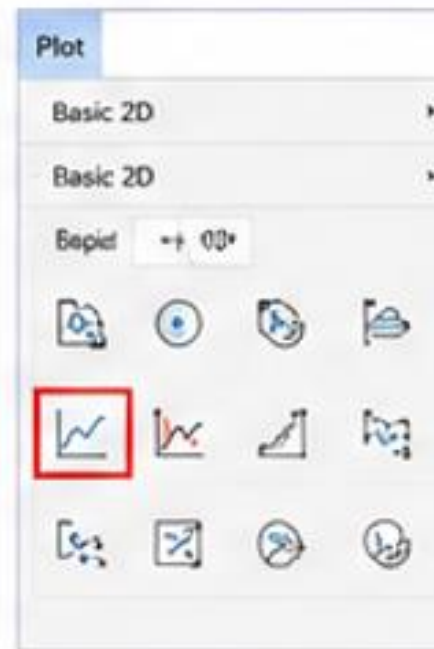
از مسیر $\text{File} \rightarrow \text{Import} \rightarrow \text{Excel}$ داده‌ها را وارد کنید.

7-2. انتخاب ستون‌ها

	A(X)	B(Y)
1	Wavenumber (cm^{-1})	Transmittance (%)
2	4000	95.21
3	3990	95.35
4	3980	95.47
5	3970	95.60
6	3960	95.72
7	...	...
8	500	45.81
9	400	43.20

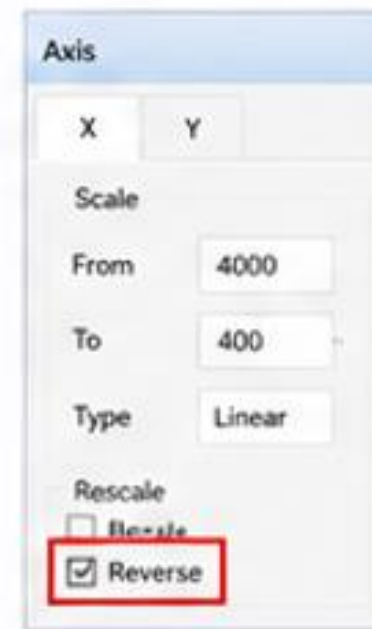
ستون A را به عنوان X و ستون B را به عنوان Y انتخاب کنید.

7-3. رسم Line



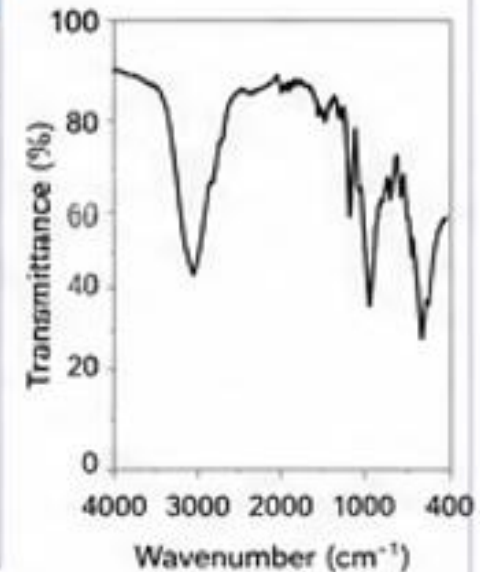
از $\text{Plot} \rightarrow \text{Basic 2D} \rightarrow \text{Line}$ نمودار خطی رسم کنید.

7-4. تنظیم محاور



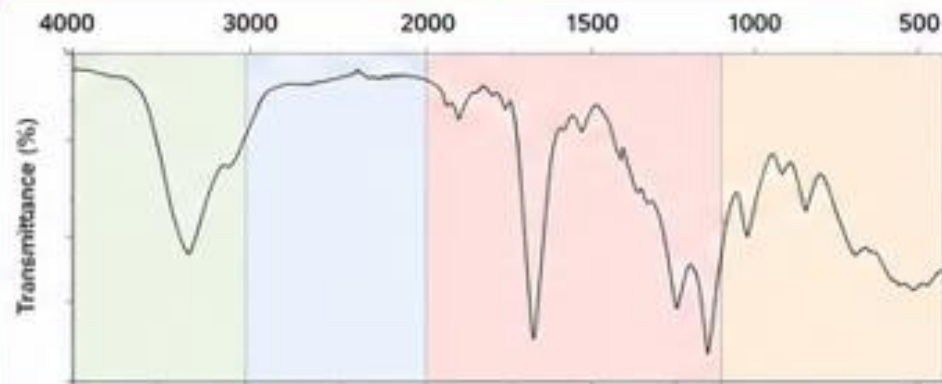
در Axis روی محور X، $\text{From} = 4000$ و گزینه Reverse را فعال کنید.

7-5. تنظیم نهایی



نمودار با کیفیت بالا آماده شد.

تفسیر طیف FTIR



4000–3000 cm^{-1}

کشش پیوندی

O–H, N–H

و C–H (sp^3)

3000–2000 cm^{-1}

منطقه کم اثر

(اغلب نویز)

2000–1500 cm^{-1}

کشش پیوندهای

C=O, C=C

و N–O

1500–400 cm^{-1}

خمشی و کششی

پیوندهای فلزی-اکسیژن

و (M–O)

جدول چند بیک مهم

گروه عاملی	نوع ارتعاش	موجی (cm^{-1})
هیدروکسیل	کشش O–H	3400–3200
آلیفاتیک	کشش C–H	2920–2850
کربونیل	کشش C=O	1700–1600
آروماتیک	کشش / خمشی C=C	1500–1400
الکل / اتر	کشش C–O	1100–1000
فلز-اکسیژن	کشش M–O	800–400

تفسیر طیف FTIR

ساختار فایل خروجی اکسل ATR

1 ساختار فایل خروجی ATR-FTIR

فایل خروجی دستگاه ATR معمولاً شامل دو ستون اصلی است:

- ستون اول: عدد موجی (Wavenumber) بر حسب cm^{-1}
- ستون دوم: شدت جذب (Absorbance) یا درصد عبور (Transmittance %)

نکته: اکثر دستگاه‌های ATR داده‌ها را به صورت Absorbance ارائه می‌دهند.

	A	B
1	Wavenumber (cm^{-1})	Absorbance (a.u.)
2	4000	0.215
3	3990	0.216
3	3980	0.213
4	3970	0.217
5	...	...
N-2	420	1.258
N-1	410	1.275
N	400	1.293



فایل داده‌ها در Excel

باز کردن فایل در اکسل

2

Excel در فایل در

فایل Excel را باز کنید و اطمینان حاصل کنید که دو ستون Wavenumber و Absorbance صحیح هستند.

	A	B
1	Wavenumber (cm ⁻¹)	Absorbance (a.u.)
2	4000	0.215
3	3990	0.216
4	3980	0.213
5	3970	0.217
6	3960	0.218
7	...	...
8	500	1.220
8	490	1.236
9	480	1.250
10	470	1.260
11	460	1.270
12	450	1.280
13	440	1.286
14	430	1.290
15	420	1.258
16	410	1.275
18	400	1.293

3

انتخاب داده‌ها

هر دو ستون داده‌ها (عدد موجی و جذب) را از ردیف اول تا آخرین ردیف انتخاب کنید.

	A	B
1	Wavenumber (cm ⁻¹)	Absorbance (a.u.)
2	4000	0.215
3	3990	0.216
3	3980	0.213
5	3970	0.217
5	3960	0.218
7	---	---
8	500	1.220
8	490	1.236
9	480	1.250
10	470	1.260
11	460	1.270
13	450	1.280
14	430	1.280
16	420	1.258
19	410	1.293

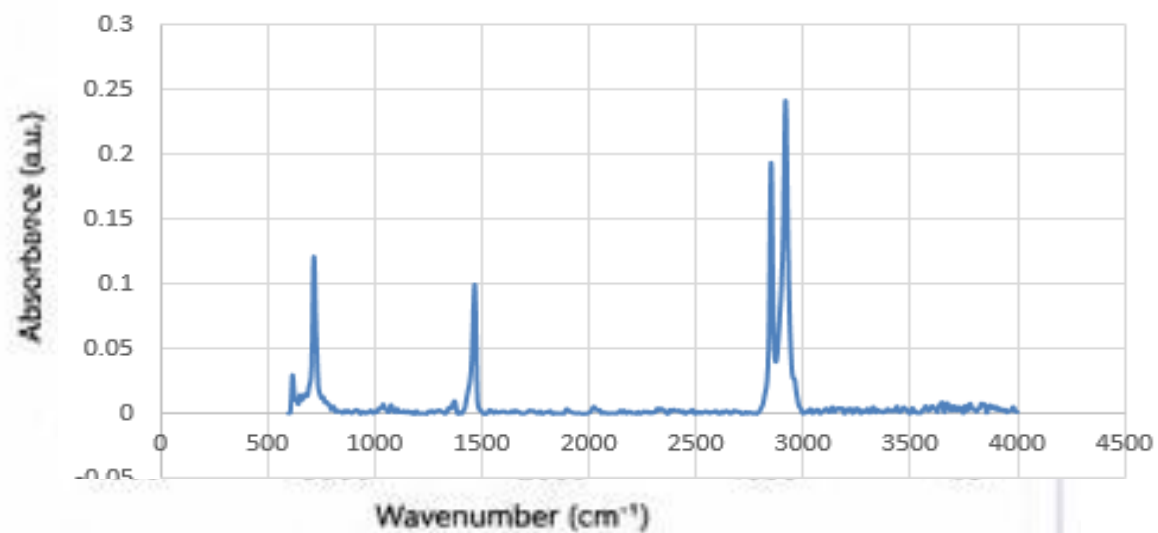
کل محدوده
داده‌ها را
انتخاب کنید.

انتخاب داده‌ها

4

رسم نمودار

از تب Insert گزینه Scatter (XY) را انتخاب کنید.



نمودار اولیه ایجاد می شود.

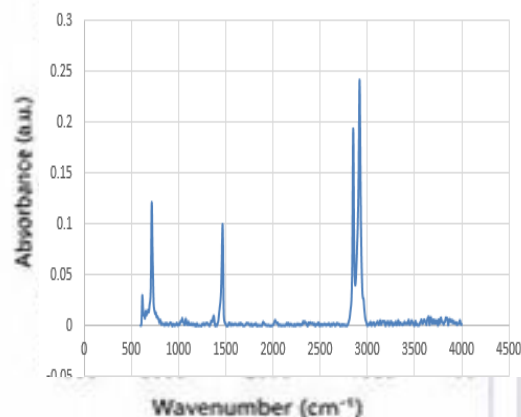
رسم نمودار

تنظیم محور نمودار

5

تنظیم محور X (عدد موجی)

1. روی محور افقی (عدد موجی) کلیک راست کنید.
2. گزینه Format Axis را انتخاب کنید.
3. در بخش Axis Options تیک گزینه Values in reverse را بزنید تا محور از 4000 به 400 رسم شود.

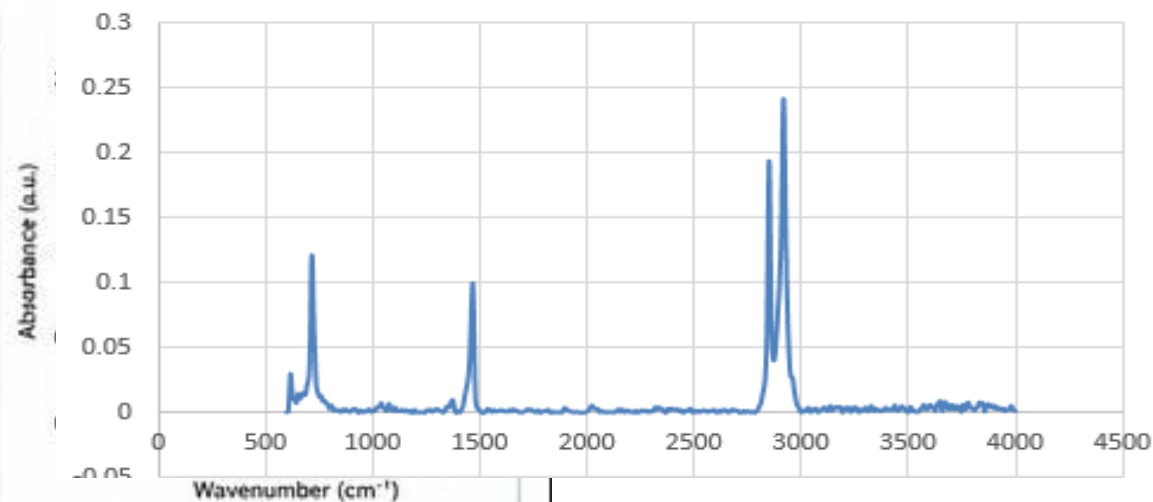
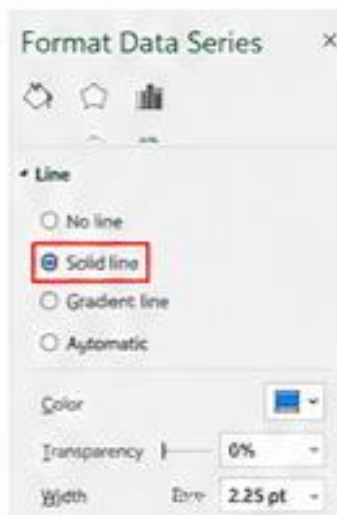


محور به صورت صحیح از 4000 به 400 رسم می‌شود.

6

تنظیم ظاهر نمودار

- عنوان محورها را ویرایش کنید.
- ضخامت خط را افزایش دهید.
- رنگ خط را تغییر دهید.
- خطوط شبکه (Gridlines) را در صورت نیاز حذف کنید.



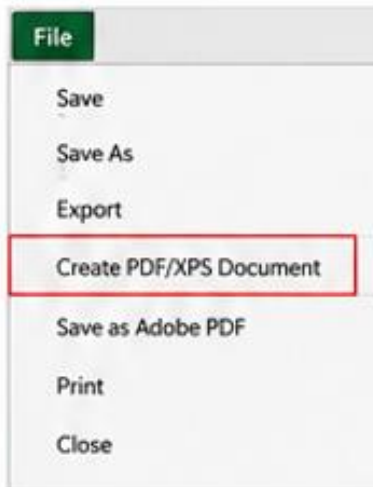
نمودار نهایی زیباتر و حرفه‌ای‌تر می‌شود.

نحوه ذخیره و تفسیر نمودار

7

ذخیره نمودار

برای استفاده در مقالات یا گزارش‌ها، نمودار را با کیفیت بالا ذخیره کنید.



یا به صورت تصویر:



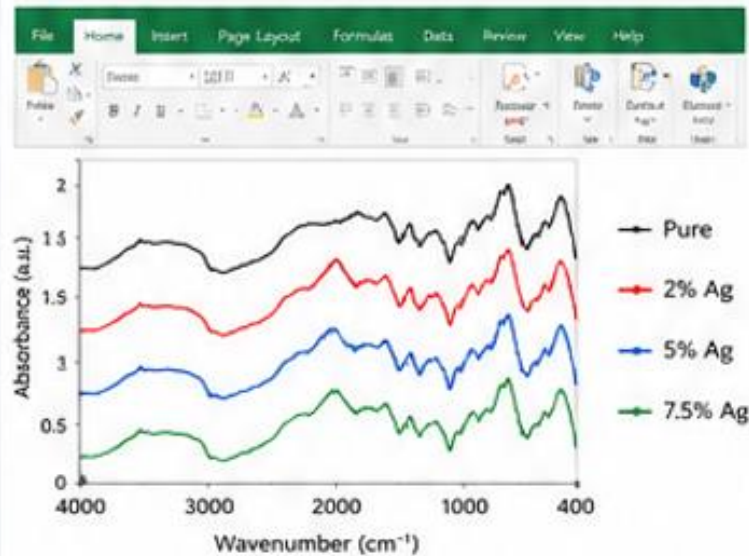
Right Click on Chart
→ Save as Picture

File → Export
→ Change File Type

8

مقایسه چند نمونه (اختیاری)

برای مقایسه چند نمونه، داده‌های هر نمونه را در یک نمودار رسم



رنگ‌های مختلف و Offset عمودی برای شفافیت بیشتر استفاده کنید.

9

تفسیر طیف ATR-FTIR

نواحی مهم طیف و ارتعاشات مربوط به گروه‌های عاملی:

گروه عاملی	نوع ارتعاش	(cm⁻¹ موجی)
هیدروکسی OH-مل	کشش O-H	3700 - 3200
آلیفانیک	کشش C-H	3000 - 2800
کربونیل	کشش C=O	1700 - 1600
آرومانیک	کشش C=C	1500 - 1400
الکل / اتر	کشش C-O	1100 - 1000
M-O	کشش فلز-اکسیژن	800 - 400

مقایسه موقعیت و شدت پیک‌ها بین نمونه‌ها می‌تواند تغییرات ساختاری و شیمیایی را نشان دهد.