

# 海洛因的傅里叶红外吸收谱

胡绪洲 杨爱明 林南英

(云南大学物理系, 云南大学实验中心, 昆明 650091)

**摘 要** 给出海洛因和鸦片的傅里叶红外吸收实测谱。根据吸收峰的位置, 计算出海洛因的基本声子能量:  $E_{L0} = 0.0486 \text{ eV}$ ,  $E_{T0_1} = 0.0555 \text{ eV}$ ,  $E_{T0_2} = 0.0616 \text{ eV}$ ,  $E_{LA} = 0.0257 \text{ eV}$ ,  $E_{TA_1} = 0.0097 \text{ eV}$ ,  $E_{TA_2} = 0.0134 \text{ eV}$ 。这些声子按照不同的组合方式, 形成海洛因的全部傅里叶红外吸收峰。

**关键词** 海洛因, 鸦片, 声子, 红外光谱。

## 1 引 言

云南省毗邻世界毒品的主要产地“金三角”, 处于国际禁毒斗争的前沿。在这里, 毒品走私的主要品种是海洛因和鸦片, 吸毒者容易误入歧途的诱饵多数是海洛因。为了有效地抵御毒品的侵害, 人民群众必须具备一些识别能力。利用近代科技手段去检测毒品, 简便而快捷。

鸦片是由罂粟蒴果的乳状渗出物风干得到<sup>[1]</sup>, 其中 25% 为多种生物碱的混合物。最重要的生物碱吗啡约占 10~ 16%。鸦片有毒性, 是一种容易形成习惯的麻醉物。从鸦片萃取和结晶的吗啡  $C_{17}H_{19}NO_3 \cdot H_2O$ , 常用作止痛剂, 但又是麻醉性成瘾药。吗啡乙酰化得到海洛因, 一般是白色苦味的结晶粉末, 熔点  $173^\circ\text{C}$ , 沸点  $272\sim 274^\circ\text{C}$ 。1 g 海洛因能溶于 1.5 ml 氯仿, 31 ml 乙醇, 100 ml 乙醚, 或 1700 ml 水。海洛因具有高毒性, 是非常容易成瘾的麻醉药。

本文采用日本理学电机公司的 D/max-3B 型 X 射线衍射仪, 美国伯乐公司的 FTS-40 型和珀金-埃尔默公司的 FT-1000PC 型傅里叶红外光谱仪测量, 具体分析和结果可供人们参考。

## 2 海洛因的傅里叶红外吸收谱

吗啡和醋酸酐制成的海洛因, 化学名称是二乙酰吗啡  $C_{17}H_{17}NO(C_2H_3O)_2$ 。实验采用日本理学电机公司生产的 D/max-3B 型 X 射线衍射仪, 分析得到海洛因的晶体结构属于正交晶系, 原胞基矢是  $a = 8.003 \times 10^{-10} \text{ m}$ ,  $b = 14.373 \times 10^{-10} \text{ m}$ ,  $c = 16.092 \times 10^{-10} \text{ m}$ <sup>[2]</sup>。可以看成由两种离子  $(C_2H_3O)^+$  和  $(C_{17}H_{17}NO)^{-}$  组成海洛因晶体。因为光波电场能使二元离子晶格产生垂直于光波传播方向的横向极化, 而正负离子反向位移形成的电偶极矩又从光波电磁场中吸收能量, 当光波频率等于晶格振动频率时, 晶格吸收达到极大值, 因此, 在红外波段有一个晶格吸收区域<sup>[3]</sup>。

采用美国伯乐公司 FTS-40 型傅里叶红外光谱仪, 仪器扫描范围是  $4000 \text{ cm}^{-1} \sim 400$

$\text{cm}^{-1}$ , 扫描次数为 16 次, 分辨率是  $8 \text{ cm}^{-1}$ 。为了便于测量红外透射吸收光谱, 从鸦片和海洛因上刮下一薄层粉末, 分别再加入一百倍重量的 KBr 混合研磨; 使用 11 吨液压机压成直径为 13 mm 的圆片, 厚度尽可能薄到能够透过更多红外光。

实测鸦片和海洛因的傅里叶红外吸收谱, 如图 1 所示。本文应用声子组合法研究海洛因的红外吸收光谱\*。

如果把晶格原胞质心振动形成的声学支格波的纵横声子表示成  $\text{LA}$ 、 $\text{TA}_1$  和  $\text{TA}_2$ , 而原胞内正负离子相对振动形成的光学支格波的纵横声子表示成  $\text{LO}$ 、 $\text{TO}_1$  和  $\text{TO}_2$ , 那么, 每一个晶格吸收峰的能量都可以用这几个基本声子能量的简单组合得到, 列于表 1。利用表 1 中前边几个吸收峰的双声子组合方程, 可联立计算基本声子的能量。

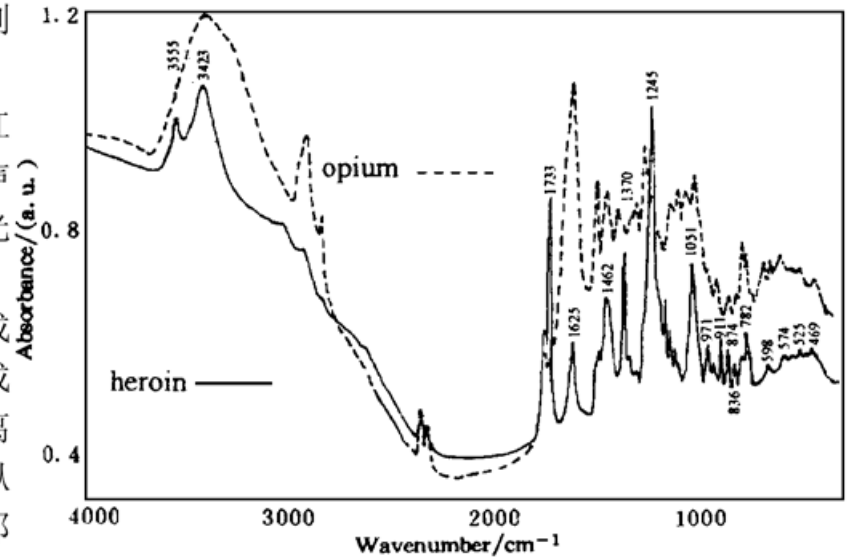


Fig. 1 Practically measured Fourier infrared absorption spectra of heroin and opium

Table 1. Phonon combinations of Fourier infrared absorption peaks of heroin

wavenumber/ $\text{cm}^{-1}$	peak energy/eV	phonon combination
469	0.0583	$\text{LO} + \text{TA}_1$
525	0.0652	$\text{TO}_1 + \text{TA}_1$
574	0.0713	$\text{TO}_2 + \text{TA}_1$
598	0.0743	$\text{LO} + \text{LA}$
782	0.0971	$2\text{LO}$
836	0.1038	$\text{TO}_1 + \text{LO}$
874	0.1086	$\text{TO}_2 + \text{LO}$
911	0.1132	$\text{TO}_1 + \text{LO} + \text{TA}_1$
971	0.1206	$\text{TO}_2 + \text{LO} + \text{TA}_1$
1051	0.1305	$\text{TO}_1 + \text{TO}_2 + \text{TA}_2$
1245	0.1546	$2\text{TO}_1 + \text{LO}$
1370	0.1702	$2\text{TO}_2 + \text{LO}$
1462	0.1816	$\text{TO}_1 + \text{TO}_2 + \text{LO} + \text{TA}_2$
1625	0.2018	$\text{TO}_1 + \text{TO}_2 + \text{LO} + \text{LA} + \text{TA}_1$
1733	0.2152	$\text{TO}_1 + \text{TO}_2 + \text{LO} + \text{LA} + \text{TA}_1 + \text{TA}_2$
3423	0.4251	$2(\text{TO}_1 + \text{TO}_2 + \text{LO} + \text{LA} + \text{TA}_1 + \text{TA}_2)$
3555	0.4415	$2(\text{TO}_1 + \text{TO}_2 + \text{LO} + \text{LA} + \text{TA}_1 + \text{TA}_2) + \text{TA}_2$
fundamental phonon wavenumbers/ $\text{cm}^{-1}$		$\omega_{\text{LO}} = 391, \omega_{\text{TO}_1} = 447, \omega_{\text{TO}_2} = 496,$ $\omega_{\text{LA}} = 207, \omega_{\text{TA}_1} = 78, \omega_{\text{TA}_2} = 108.$
fundamental phonon energies/eV		$E_{\text{LO}} = 0.0486, E_{\text{TO}_1} = 0.0555, E_{\text{TO}_2} = 0.0616,$ $E_{\text{LA}} = 0.0257, E_{\text{TA}_1} = 0.0097, E_{\text{TA}_2} = 0.0134.$

\* 有关海洛因方面的学术论文并不多见, 还未发现其他人应用声子组合的方法研究海洛因的红外吸收光谱。

如果一个光子被两个声子吸收时, 能量和动量守恒定律要求光波波矢  $k$ , 格波波矢  $q$  和振动角频率  $\omega$  之间满足关系式

$$\omega(q_1) + \omega(q_2) = \omega(k), \quad q_1 + q_2 = k \approx 0 \quad (1)$$

这表明, 一个光子产生的两个声子的波矢大小近似相等但方向相反。在简约波矢区边界, 光波和格波的波矢值, 既满足守恒定律的要求又满足晶体衍射条件和布里渊区边界方程

$$k' = k + K_{hkl}, \quad K_{hkl} \cdot (k + K_{hkl}/2) = 0 \quad (2)$$

式中  $k'$  和  $k$  代表衍射光和入射光的波矢,  $K_{hkl}$  为倒格矢,  $hkl$  是衍射面指数。每当光束通过布里渊区边界时, 都要发生布拉格反射和能量跳跃, 也就是说有些光子被晶格吸收, 所以, 由双声子吸收过程计算得到的基本声子能量是布里渊区边界的数值。

如果一个光子被三个声子吸收, 那么, 能量和动量守恒关系式要求

$$\omega(q_1) + \omega(q_2) + \omega(q_3) = \omega(k), \quad q_1 + q_2 + q_3 = 0, \quad K_{hkl} \quad (3)$$

由于海洛因的简约布里渊区是一个不等边的正交平行六面体, 在  $[100]$ ,  $[010]$  和  $[001]$  三个方向上的面心有不相等的声子能量, 但是, 海洛因多晶微粒的排列完全无序, 所以, 由红外吸收谱计算的声子能量是统计平均值。某些吸收峰的测量值同声子组合值之间, 会有微小的偏差。

### 3 海洛因的原胞质心振动的红外吸收谱

采用美国珀金-埃尔默公司的 FT-1000PC 型傅里叶红外光谱仪, 扫描范围是  $7000 \text{ cm}^{-1} \sim 100 \text{ cm}^{-1}$ , 扫描次数为 5 次, 分辨率是  $4 \text{ cm}^{-1}$ 。在波数小于  $400 \text{ cm}^{-1}$  的红外吸收区, 测量海洛因的原胞质心振动的红外吸收谱, 如图 2 所示。虽然图 2 中的吸收率比较小, 但是, 光吸收过程仅有原胞质心振动的声学支声子参与, 所以, 低波数段吸收谱更能反映鸦片类毒品的共同特征。

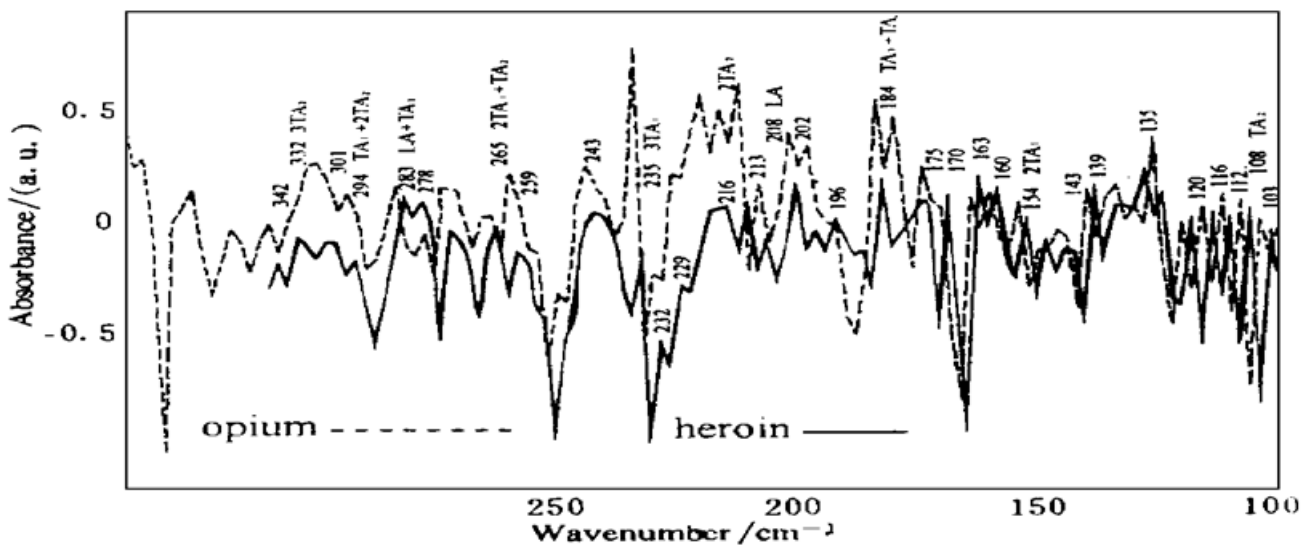


Fig. 2 Practically measured infrared absorption spectra of mass central vibration of primitive cells for heroin and opium

利用表 1 中的声学支声子  $LA$ 、 $TA_1$  和  $TA_2$  就能够组合出图 2 中的一些主要吸收峰, 列于表 2。常见的海洛因是多晶而不是单晶, 晶粒有不同取向。表 2 内的每一种声子组合方式可能对应图 2 中几个有微小能量偏差的吸收峰, 这就是不同方向上简约布里渊区边界面心的声

子能量不同的表现。

Table 2. Phonon combination of infrared absorption peaks of mass central vibration of primitive cells

wavenumber/cm <sup>-1</sup>	peak energy/eV	phonon combination
108	0.0134	TA <sub>2</sub>
154	0.0191	2TA <sub>1</sub>
184	0.0228	TA <sub>1</sub> + TA <sub>2</sub>
208	0.0258	LA
216	0.0268	2TA <sub>2</sub>
235	0.0291	3TA <sub>1</sub>
265	0.0329	2TA <sub>1</sub> + TA <sub>2</sub>
283	0.0351	LA+ TA <sub>1</sub>
294	0.0365	TA <sub>1</sub> + 2TA <sub>2</sub>
332	0.0412	3TA <sub>2</sub>

作者利用红外共振吸收的原理, 根据海洛因的基本声子能量, 选择对鸦片类毒品敏感的材料和器件, 制作电子鼻的嗅觉神经网络, 寻求探测毒品的简便方法。

### 参 考 文 献

- [1] Merck & Co., Inc. The Merck Index, Rahway, N.J. USA (1989), 468, 1083  
 [2] Joint Committee on Powder Diffraction Standards, Powder Diffraction File, Organic Volume, Sets 6~10, 6~ 0118 (1967), 24  
 [3] 方俊鑫, 陆 栋, 固体物理学(下册), 上海: 上海科学技术出版社, 1981. 109~ 112, 185, 192~ 202

## Fourier Infrared Absorption Spectrum of Heroin

Hu Xuzhou Yang Aiming Lin Nanying

(Department of Physics, Centre of Laboratory, Yunnan University, Kunming 650091)

(Received 23 February 1998; revised 4 May 1998)

**Abstract** The practically measured Fourier infrared absorption spectra of heroin and opium have been given. On the basis of the absorption peak sites, the fundamental phonon energies of heroin are calculated:  $E_{LO} = 0.0486$ ,  $E_{TO_1} = 0.0555$ ,  $E_{TO_2} = 0.0616$ ,  $E_{LA} = 0.0257$ ,  $E_{TA_1} = 0.0097$ ,  $E_{TA_2} = 0.0134$  eV. All of the Fourier infrared absorption peaks of heroin, consist of these elementary phonons by different combination.

**Key words** heroin, opium, phonon, infrared spectrum.