



FTIR . fun

成分分析机构 · 配方剖析工作流示例

从原样红外到参考含量表

本 PDF 说明配方工作台如何指导一个示例案例逐步收敛：上传原样 FTIR，得到首轮方案，按方案补充实验结果，再结合外部检测文字反馈生成参考含量表。适用于所有成分分析机构向客户展示分析流程。

01

原样 FTIR 给出初始方向

02

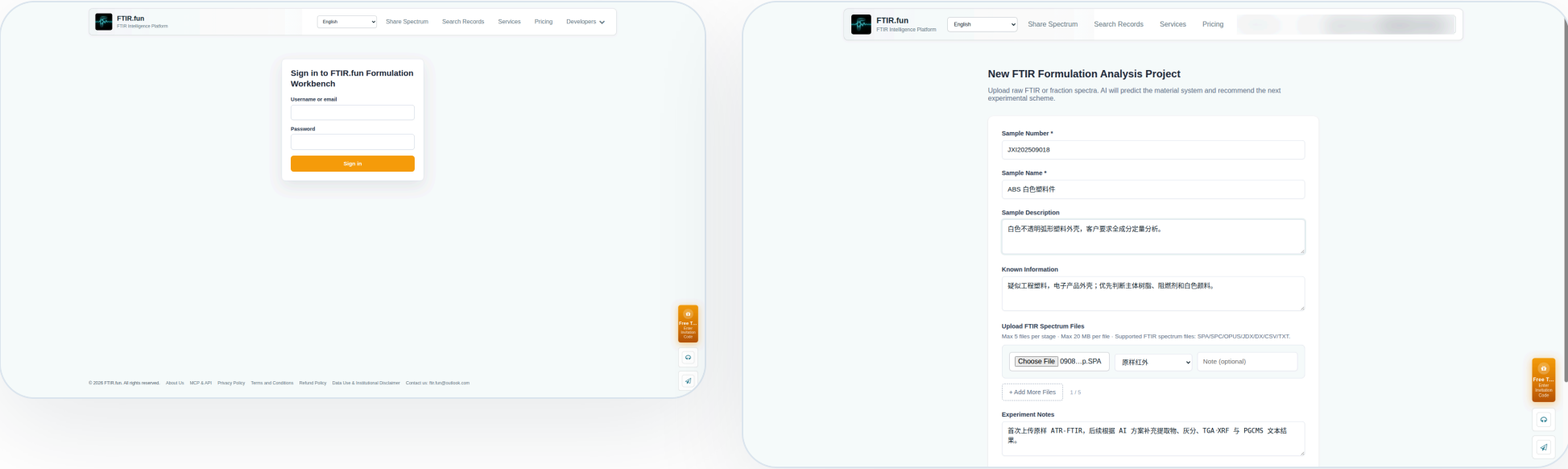
方案审核后进入下一轮

03

结合外部结果给参考表

选择原样并创建项目

案例为某白色塑料件。第一步只上传原样红外文件，同时录入样品名称、外观和已知背景。系统不会在这一步直接给完整配方，而是先从红外事实判断材料体系和下一轮应该补什么实验。



这一阶段的输入是“原样 FTIR + 用户已知信息”。后续 TGA、XRF、PGCMS 等结果以文字形式补充，不作为红外原始文件上传。

真实方案页面：原样红外先给方向

首轮分析页面显示原样 FTIR 的判断和下一步方案。对本案例，原样红外支持 PC/ABS 主体系，但阻燃剂、颜料和微量助剂需要通过提取物红外、灰分红外、TGA/XRF/PGCMS 等结果继续确认。

FTIR.fun

FTIR Intelligence Platform

English

Share Spectrum

Search Records

Services

Pricing

Sample Number: JXI202509018-DEMO-R1

Project ID: FP-DEMO-JXI202509018-R1

ABS 白色塑料件

白色不透明弧形塑料外壳，客户要求全成分定量分析。

Known info: 真实案例 JXI202509018；疑似工程塑料，电子产品外壳。

Scheme ready for review

Review the AI scheme below. Enter adjustment feedback if needed, or confirm it to continue to the next round.

Stage 1: 首次分析

Step 1: 乙醇萃取并测试提取物红外

信息价值/优先级: 高 | Cost: 低

Conditions: 乙醇回流或超声萃取，过滤后干燥测试 ATR Target: 优先确认可萃取阻燃剂/增塑剂

Expected: 若出现 P=O、P-O-C 和芳环峰，重点考虑磷酸酯类阻燃剂含量/比例用途: 与 XRF 的 P 元素结果联动，换算 TPP/RDP 等磷酸酯含量

方案依据: PC/ABS 体系常见磷酸酯阻燃剂，原样红外难以单独定量。

结果判读: 若提取物红外命中 TPP，下一轮用 XRF P 含量进行质量平衡。

Step 2: 灼烧灰化并测试灰分红外

信息价值/优先级: 高 | Cost: 低

Conditions: 550-600 C 灼烧至恒重，记录灰分率 Target: 确认无机填料/颜料 Expected: Ti-O 宽吸收或碳酸盐特征峰

含量/比例用途: 灰分率 + XRF Ti/Ca 用于估算 TiO2/CaCO3 含量

方案依据: 白色工程塑料常含 TiO2，灰分红外可快速确认无机相。

结果判读: 若灰分红外和 XRF 同时支持 Ti，则优先锁定二氧化钛。

Step 3: 输入 TGA 热失重与 XRF 元素结果

信息价值/优先级: 高 | Cost: 中

Conditions: TGA 记录主失重台阶与残渣；XRF 记录 P、Ti、Ca 等元素 Target: 建立含量参考表的质量平衡

Expected: 树脂/助剂分解台阶 + 无机残渣 + P/Ti 元素 含量/比例用途: 树脂总量、阻燃剂含量、颜料含量的参考范围

方案依据: 红外负责定性，TGA/XRF 负责补足定量约束。

结果判读: 若外部定量结果不足，最终表只能给参考范围并列出差失结果。

Review the suggested plan when you are ready. You can adjust it more than once before confirming.

Review or adjust scheme

Free T...
Enter
Invitation
Code

提取物红外

乙醇萃取后测提取物，优先确认 TPP 等可萃取磷酸酯类组分。

灰分红外

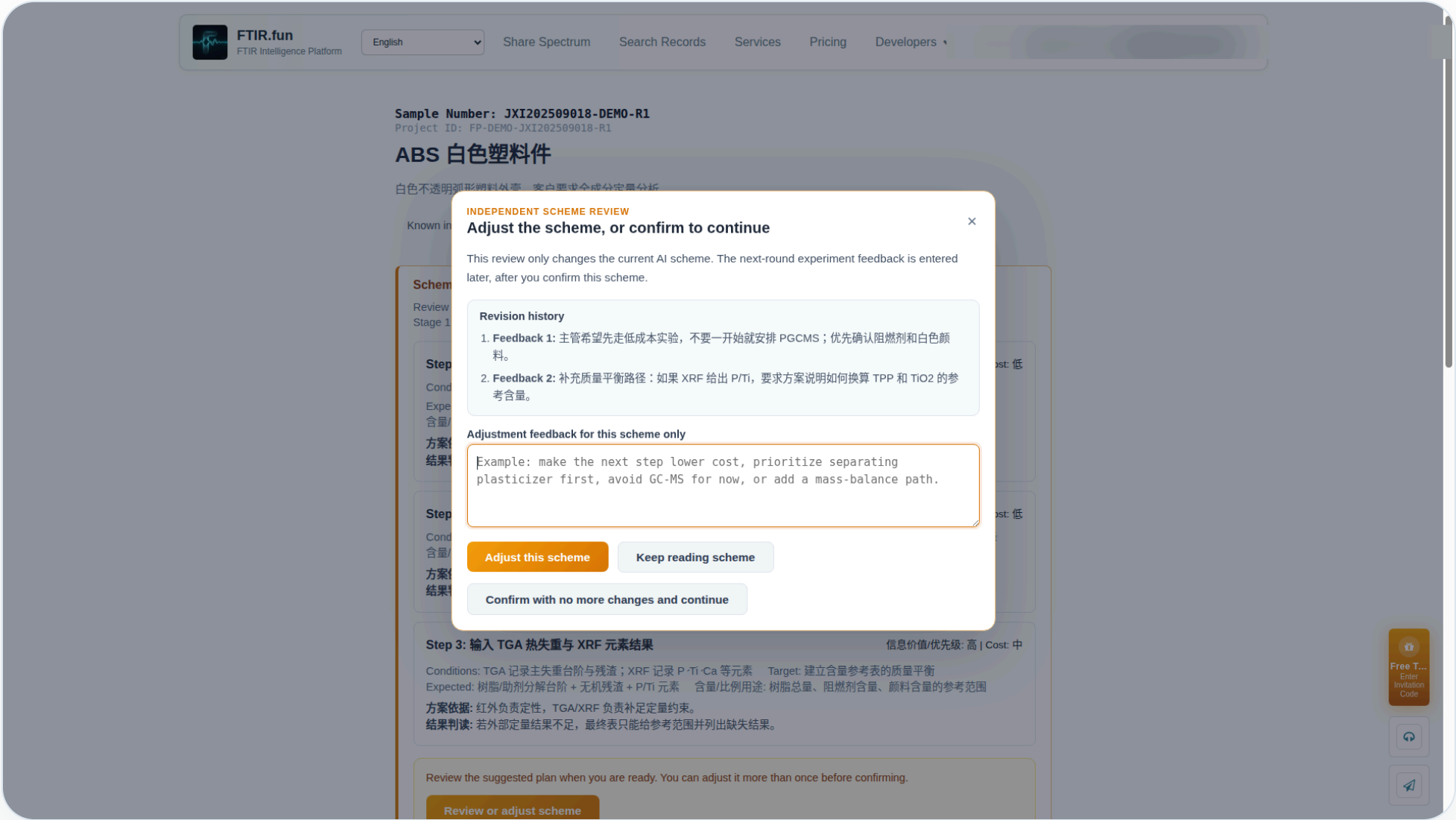
灼烧后测试灰分，确认 TiO2 等无机颜料或填料。

质量平衡

用 TGA 和 XRF 的文字结果约束树脂、无机物和含磷助剂比例。

看完方案后，再手动打开审核浮窗

方案反馈不是下一轮实验数据表的一部分。用户先阅读当前方案，再打开审核浮窗输入意见。LLM 会结合完整项目上下文和本轮意见重写当前方案；用户可以多次调整，直到确认后才进入下一轮。



这里保留“修改历史”，目的是让用户知道本轮方案曾因哪些意见改变；确认方案后，本轮过程数据不需要反复提交。

FTIR.fun

FTIR Intelligence Platform

English

Share Spectrum

Valued VIP user: 威凯检测技术有限公司

JXI202509018-DEMO-INPUT — Upload New Data

Upload new FTIR/fraction spectra, or submit textual experiment feedback only when there is no new spectrum.

当前建议方案:

Stage 1: 首次分析

Step1: 乙醇萃取并测试提取物红外 → 优先确认可萃取阻燃剂/增塑剂

方案依据: PC/ABS 体系常见磷酸酯阻燃剂，原样红外难以单独定量。

结果判读: 若提取物红外命中 TPP，下一轮用 XRF P 含量进行质量平衡。

Step2: 灼烧灰化并测试灰分红外 → 确认无机填料/颜料

方案依据: 白色工程塑料常含 TiO₂，灰分红外可快速确认无机相。

结果判读: 若灰分红外和 XRF 同时支持 Ti，则优先锁定二氧化钛。

Step3: 输入 TGA 热失重与 XRF 元素结果 → 建立含量参考表的质量平衡

方案依据: 红外负责定性，TGA/XRF 负责补足定量约束。

结果判读: 若外部定量结果不足，最终表只能给参考范围并列出差失结果。

Upload FTIR Spectrum Files

Max 5 files per stage · Max 20 MB per file · Supported FTIR spectrum files: SPA/SPC/OPUS/JDX/DX/CSV/TXT.
For follow-up stages, spectrum files are optional. TGA, DSC, chromatography, MS, XRF, and EDS results should be entered as text below, not uploaded as files.

Choose FileNo file chosen

原样红外

Note (optional)

+ Add More Files1 / 5

Experiment Notes

按首轮方案完成乙醇萃取、灰化和热分析；提取物红外、灰分红外、TGA·XRF·PGCMS 结果如下。

TGA / Thermal Analysis Result

TGA 显示树脂和有机助剂为主要失重来源，残渣与 TiO₂/无机组分相关；该结果用于约束树脂总量、灰分比例和质量平衡。

DSC Result

Describe Tg, melting peaks, crystallization peaks, peak areas or enthalpy if available, and reference/standard basis.

Chromatography / MS Result

PGCMS 主要峰来自 PC/ABS 树脂裂解产物；12.45 min 左右峰为 TPP，同时辅助确认 MBS·UV-329、抗氧剂 1076 等微量助剂。

XRF / EDS / Elemental Result

XRF : P 2.491%, Ti 0.508%, Ca 0.044%·P 用于换算 TPP 参考含量, Ti 用于换算 TiO₂ 参考含量。

Other Experiment Feedback

提取物 FTIR 支持 TPP；灰分 FTIR 支持 TiO₂。最终结果以参考含量表形式输出，并列明仍缺少的原始曲线、峰表或标准品对照。

Submit Data & Analyze

Free Trial
Enter Invitation Code

© 2026 FTIR.fun. All rights reserved. About Us MCP & API Privacy Policy Terms and Conditions Refund Policy Data Use & Institutional Disclaimer Contact us: ftir.fun@outlook.com

截图中的结果来自示例报告链：TGA 用于质量平衡，XRF 的 P/Ti 用于估算 TPP 和 TiO₂，PGCMS 用于确认微量助剂。

各分项结果如何把预测体系缩小

工作台的作用是把“未知物”逐步变成“有证据边界的候选体系”。红外负责定性骨架，用户输入的热重、元素和质谱结果提供含量参考约束。

原样 FTIR
支持 PC/ABS 主体，这是首轮方向的基础。

提取物 FTIR
提取物红外支持 TPP，将阻燃/增塑方向从泛化候选缩小到磷酸三苯酯。

灰分 FTIR
灰分谱图支持 TiO2，使白色无机组分具备直接证据。

XRF
P 2.491%、Ti 0.508%，分别用于 TPP 和 TiO2 的参考含量换算。

TGA
树脂/助剂失重与残渣比例共同约束总量，不单独作为成分定性依据。

PGCMS
辅助确认 MBS、UV-329、抗氧剂 1076 等低含量有机助剂。

阶段	系统能做什么	不能替代什么
首轮原样	基于红外判断 PC/ABS 方向，并给出下一步实验方案。	不能只凭原样红外定量所有助剂。
实验反馈	把外部检测结论纳入上下文，调整方案或收敛候选。	不能读取未输入的 TGA/XRF/PGCMS 原始数据。
最终综合	给参考含量表和缺失结果清单。	不能替代正式报告所需的原始曲线、谱图、校准和复核流程。

最终生成参考含量表，并列明缺失结果

最终页结合红外证据和用户输入的外部检测文字结果，输出参考成分含量表。这个表用于指导报告整理和复核，不等同于系统独立出具正式配方报告。

Conditions: 550-600 C 灼烧至恒重, 记录灰分率 Target: 确认无机填料/颜料
Expected: Ti-O 宽吸收或碳酸盐特征峰 含量/比例用途: 灰分率 + XRF Ti/Ca 用于估算
方案依据: 白色工程塑料常含 TiO₂, 灰分红外可快速确认无机相。
结果判读: 若灰分红外和 XRF 同时支持 Ti, 则优先锁定二氧化钛。

Step 3: 输入 TGA 热失重与 XRF 元素结果 信息价值/优先级: 高 | Cost: 中
Conditions: TGA 记录主失重台阶与残渣; XRF 记录 P·Ti·Ca 等元素 Target: 建立含量参考表的质量平衡
Expected: 树脂/助剂分解台阶 + 无机残渣 + P/Ti 元素
含量/比例用途: 树脂总量、阻燃剂含量、颜料含量的参考范围
方案依据: 红外负责定性, TGA/XRF 负责补足定量约束。
结果判读: 若外部定量结果不足, 最终表只能给参考范围并列出缺失结果。

Back to Project List

FTIR-Scope Formulation Analysis Summary

Component	Content	Function	Evidence	Evidence Type	Confidence
聚碳酸酯 (PC)	约 76.6% (参考)	主体树脂	原样 FTIR 支持 PC 主体; TGA 与其余组分质量平衡支持该参考比例。	FTIR + TGA/质量平衡	高
丙烯腈-丁二烯-苯乙烯共聚物 (ABS)	约 17.4% (参考)	共混树脂	原样 FTIR 的腈基与丁二烯特征提示 ABS; 结合报告给出的质量平衡。	FTIR + 外部报告	中-高
MBS	约 2.3% (参考)	增强/抗冲改性材料	需 PGCMS 或更明确裂解碎片确认; 报告数据给出参考含量。	PGCMS 文本反馈/报告	中
磷酸三苯酯 (TPP)	约 2.1% (参考)	阻燃剂、增塑剂	提取物 FTIR 命中 TPP; XRF 中 P 元素用于含量换算。	提取物 FTIR + XRF	高
UV-329	约 0.2% (参考)	紫外线吸收剂	需 PGCMS/质谱碎片或标准品对照确认。	PGCMS 文本反馈/报告	中
抗氧化剂 1076	约 0.1% (参考)	抗氧化剂	接近方法检出限, 需 PGCMS/标准品确认。	PGCMS 文本反馈/报告	中

灰分 FTIR 表明二氧化钛。

成分	示例参考含量	主要证据
PC	约 76.6%	原样 FTIR + TGA/质量平衡
ABS	约 17.4%	原样 FTIR + 质量平衡
MBS	约 2.3%	PGCMS 文字反馈
TPP	约 2.1%	提取物 FTIR + XRF P 元素
UV-329	约 0.2%	PGCMS/质谱或标准品对照
抗氧化剂 1076	约 0.1%	PGCMS/标准品确认
二氧化钛	约 1.3%	灰分 FTIR + XRF Ti 元素 + TGA 残渣

仍需补充或复核：PGCMS 原始峰表/质谱图或标准品对照、TGA 原始曲线与测试气氛/升温程序、XRF/EDS 完整元素表与校准方式。



FTIR . fun

ANALYSIS CAPABILITY

成为配方分析的有力助手

从红外事实出发，结合用户输入的实验反馈和外部检测结果，帮助实验室把未知物体系一步步缩窄到可复核的参考结论。

13万+

红外谱库

2000万+

知识库与文献语料

多平台

API / MCP / GPT
Actions / Dify / Coze
/ n8n

AI

多轮上下文分析能力

已准备/上线接入形态包括：OpenAPI、MCP、OpenAI Actions、Dify、Coze、Gemini Function、LangChain、n8n、Smithery 等。