

<<波谱学基础>>

图书基本信息

书名：<<波谱学基础>>

13位ISBN编号：9787122133816

10位ISBN编号：7122133818

出版时间：2012-5

出版时间：化学工业出版社

作者：罗素琴，刘乐乐，王建华 主编

页数：120

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## &lt;&lt;波谱学基础&gt;&gt;

## 前言

波谱学知识的应用在有机化合物的结构测定中具有不可替代的作用，波谱学的应用范围很广，为了让大家更好地了解波谱学在有机化合物结构测定中的方法，及在生物医学中的一些应用，我们编写了此教材。

本书在知识结构中仍以四大谱为基础，即紫外（UV）、红外(IR)、质谱(MS)、核磁共振( $^1\text{H}$  NMR)，在内容上做到简明扼要、易懂易学，使同学们在对理论知识有初步了解的基础上，加大应用方面的知识内容，对其应用范围及在生物医学中的应用，尽量密切联系。

把这些技术的突出优点介绍给学生，对每一种波谱方法都做了比较清楚的介绍，着重于结合实例运用光谱数据解析图谱，帮助学生了解和熟练地掌握运用这些光谱方法。

最后一章为知识拓展，介绍了扫描隧道显微（STM）技术在分子结构、分子生物医学中的应用，以开拓视野，使学生对这一领域的知识有更多了解。

由于编者学识水平有限，且波谱学技术涉及学科广泛，书中难免有不妥之处，欢迎同行批评指正。

编者 2011年11月

## <<波谱学基础>>

### 内容概要

本书简明阐述了紫外、红外、质谱、核磁共振光谱和扫描隧道显微技术的基本原理及其在有机化合物结构分析和一些药物结构分析中的应用，并精选了一些具有代表性的谱图和实例。这些光谱技术用于在结构鉴定中处理各种谱图与分子结构的关系，本书内容简明、易懂。

本书可作为临床医学及相关专业本科生使用的教材和参考书，也可供其他人员参考。

## &lt;&lt;波谱学基础&gt;&gt;

## 书籍目录

## 第一章紫外光谱

## 第一节基础知识

- 一、紫外光谱
- 二、电子跃迁
- 三、朗伯-比尔定律及紫外光谱图
- 四、几种效应
- 五、吸收带

## 第二节不饱和有机化合物的紫外吸收峰及计算方法

- 一、共轭烯烃的  $\lambda_{max}$
- 二、 $\alpha,\beta$ -不饱和醛、酮、酸、酯吸收峰的计算方法
- 三、芳香族化合物的紫外光谱

## 第三节紫外光谱在结构分析中的应用

- 一、确定未知物的结构骨架
- 二、确定构型
- 三、测定互变异构现象

## 习题

## 参考答案

## 第二章红外光谱

## 第一节基础知识

- 一、红外光谱区划分
- 二、红外光谱的表示方法
- 三、红外光谱产生的条件

## 第二节基本原理

- 一、分子中化学键的振动频率
- 二、分子振动形式
- 三、基频峰与泛频峰
- 四、吸收峰的强度
- 五、特征峰与相关峰
- 六、特征区、指纹区及红外光谱九大重要区段
- 七、影响峰位位移的因素

## 第三节有机化合物的典型红外光谱

- 一、脂肪烃类
- 二、芳香烃类
- 三、醚、醇和酚类
- 四、羰基化合物
- 五、胺、腈和硝基化合物

## 第四节红外分光光度计简介

- 一、红外分光光度计的种类
- 二、红外分光光度计的性能

## 第五节红外光谱的解析与应用

- 一、有机化合物结构分析
- 二、定性分析
- 三、定量分析

## 习题

## 参考答案

## &lt;&lt;波谱学基础&gt;&gt;

## 第三章质谱

## 第一节质谱的基本原理

## 第二节质谱的表示方法

- 一、分子离子峰
- 二、碎片离子峰
- 三、同位素离子峰

## 第三节质谱的综合分析

## 第四节质谱在生物学中的应用

- 一、药物分子量的测定
- 二、新药分子结构的确定
- 三、分析人体皮肤表面的异构脂肪酸
- 四、监测毒品在体内的代谢变化

## 习题

## 参考答案

## 第四章核磁共振

## 第一节核磁共振基本原理

- 一、核磁共振仪简介
- 二、原子核的自旋与共振

## 第二节核磁共振的主要参数

- 一、化学位移与信号位置
- 二、峰面积(信号强度)与氢核数目
- 三、自旋偶合和偶合常数——信号的裂分

## 第三节影响化学位移的主要因素

- 一、诱导效应
- 二、电子的屏蔽作用——各向异性
- 三、氢键
- 四、溶剂的影响

## 第四节偶合常数与结构的关系

- 一、饱和碳原子上的邻偶
- 二、烯碳上的邻偶
- 三、同碳偶合
- 四、苯环化合物

## 第五节NMR谱图的解析与应用

## 第六节NMR在药物分析和分子生物学及医学中的应用

- 一、在药物分析中的应用
- 二、测定生物大分子的空间结构
- 三、核磁共振在医学中的应用

## 习题

## 参考答案

## 第五章扫描隧道显微技术

## 第一节扫描隧道显微(STM)技术简介

- 一、STM独特的优点
- 二、STM在结构分子生物学研究中的应用
- 三、STM应用于结构分子生物学研究时采用的技术

## 第二节核酸的STM研究

- 一、水溶液下的DNA
- 二、大气下的DNA和RNA

<<波谱学基础>>

三、真空中的DNA

四、DNA与蛋白质复合物

五、经变性处理的DNA的二级结构及三级结构

第三节蛋白质的STM研究

一、氨基酸和多肽

二、结构蛋白

三、功能蛋白

参考文献

## &lt;&lt;波谱学基础&gt;&gt;

## 章节摘录

版权页：第一章 紫外光谱第一节 基础知识一、紫外光谱紫外光谱(ultraviolet spectroscopy)常用UV作为代号，是从ultraviolet中UV二字而来的。

在紫外光谱中，波长用纳米(nm)表示。

紫外分远紫外区和近紫外区两部分，它们介于X射线的长波区段与可见光的短波区段之间，如表1-1所示。

远紫外区波长在10—200nm，此范围波长能被空气中的氧所吸收，因此必须将空气除掉，在真空中进行工作，这个区域的吸收光谱，称真空紫外，在技术上要求很高，一般不易操作，在有机化学中用途不大。

近紫外区波长在200 ~ 400nm，一般的紫外光谱是指这一区域的吸收光谱，对共轭体系有吸收，在有机化学中有应用价值。

波长在400 ~ 800nm称可见光谱。

常用的分光光度计常包括紫外及可见两部分，波长在200 ~ 800nm(或200 ~ 1000nm)。

二、电子跃迁紫外光谱是电子光谱的一部分，电子光谱是由电子跃迁而产生的吸收光谱的总称，它还包括可见吸收光谱。

当两个原子轨道相互作用，形成分子轨道时，放出大量的热形成  $\sigma$  成键轨道，同时生成相应的  $\sigma^*$  或  $\pi^*$  反键轨道。

成键轨道能量较低，成键电子均在成键轨道中，反键轨道能量较高，因此反键轨道是空的。

成键轨道中的电子，吸收一定能量之后，可激发到反键轨道。

由于  $\sigma$  键成键时放出的能量较  $\pi$  键成键时放出的能量多，故  $\sigma$  轨道的能量较  $\pi$  轨道的能量低， $\sigma^*$  跃迁的能量也较  $\pi^*$  跃迁的能量高。

氧、氮、卤素、硫等原子中，除成键电子外，还有孤电子对，这些孤电子对所占的原子轨道未参与作用，称非键轨道，亦称n轨道，这些n轨道的电子在成键过程中，能量没有什么变化，因此n轨道中电子的能量较  $\sigma$  轨道与  $\pi$  轨道中的电子能量高。

图1-1是各轨道能量高低排列以及各种电子跃迁的相对能量。

## &lt;&lt;波谱学基础&gt;&gt;

## 编辑推荐

《高等学校教材:波谱学基础》编辑推荐:波谱学知识的应用在有机化合物的结构测定中具有不可替代的作用,波谱学的应用范围很广,为了让大家更好地了解波谱学在有机化合物结构测定中的方法,及在生物医学中的一些应用,罗素琴、刘乐乐、王建华编写了《高等学校教材:波谱学基础》。

《高等学校教材:波谱学基础》在知识结构中以四大谱为基础,即紫外(UV)、红外(IR)、质谱(MS)、核磁共振( $^1\text{H NMR}$ ),在内容上做到简明扼要、易懂易学,使同学们在对理论知识有初步了解的基础上,加大应用方面的知识内容,对其应用范围及在生物医学中的应用,尽量密切联系。把这些技术的突出优点介绍给学生,对每一种波谱方法都做了比较清楚的介绍,着重于结合实例运用光谱数据解析图谱,帮助学生了解和熟练地掌握运用这些光谱方法。

最后一章为知识拓展,介绍了扫描隧道显微(STM)技术在分子结构、分子生物医学中的应用,以开拓视野,使学生对这一领域的知识有更多了解。



<<波谱学基础>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>