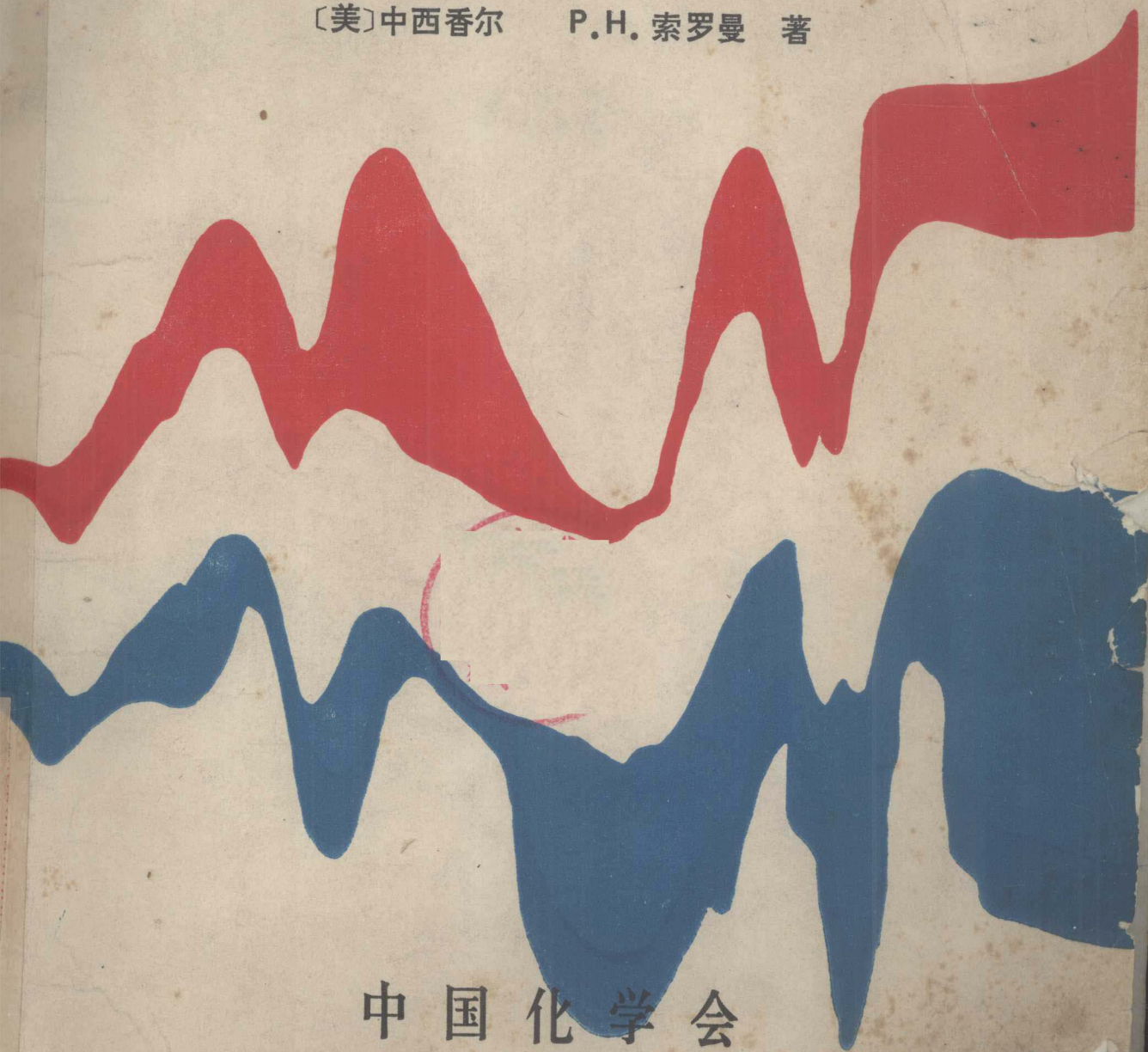


红外吸收光谱

〔美〕中西香尔 P.H. 索罗曼 著



中国化学会

红外吸收光谱

第二版

中 西 香 尔
P.H. 索 罗 曼

著

吴 平 平
洪 哲 林
韩 哲 文

译

黄 维 垣

校

工业学院图书馆
藏书章

致中国读者

很荣幸这本书能被吴平平、洪林和韩哲文三位同行热心地翻译成中文。

1950年到1952年间,我和黄维垣博士一起曾在哈佛大学已故的 L.F. Fieser 教授研究组工作(黄博士现在科学院上海有机化学研究所),稍早几年,黄鸣龙博士在 Fieser 的实验室完成了他的著名的 Wolff-Kishner 还原反应改良法,那时红外光谱技术尚处于萌芽时期,该校化学系刚得到一台第二型 Baird 自动记录红外光谱仪。至今,我仍很清楚地记得,当记录笔开始描绘出一个合成酮基萘醌的尖锐吸收峰时,我是多么兴奋呀!这就是我第一次与红外接触。这本红外书是根据我在一个月刊上所发表的十二篇有关特征频率的连载文章而撰写的。

大多数特征频率早在 50 年代后期就知道了。在当时,不得不极大量地使用红外光谱仪,因为有机化学家为了解结构所能采用的只有红外和紫外两种方法。在以后的年代里,由于引进了各种各样的其他方法,红外不再像以前那样得到重用了。然而随着激光拉曼光谱,付里埃变换红外,近和远红外,气相色谱与付里埃变换红外联用技术及液体色谱与付里埃变换红外联用技术等等的最新发展,振动光谱的复兴即将来临。

这些新技术一般只需几微克样品,而且还可得到其他方法所不能得到的数据结果,由于这个原因,振动光谱又一次变或极为有用的物理工具。

恰好在这个时刻,通过吴平平、洪林和韩哲文三位同仁的努力,中文译本问世了,我非常感谢他们三位。

中西香爾

1979 年 10 月

本书作者介绍

“红外吸收光谱”日文版和英文第一版(1962)的作者是美国哥伦比亚大学化学系中西香尔教授,英文第二版是由拉特格斯大学道格拉斯学院讲师P.H.索罗曼补充、修改而成的。现将中西香尔教授和他的“红外吸收光谱”一书介绍给读者:

作者中西香尔教授1925年5月11日出生于香港,日本国籍,现为美国哥伦比亚大学化学系教授。他于1947年毕业于日本名古屋大学化学系,1954年为名古屋大学博士,1950-1952年为美国哈佛大学著名有机化学家L.F.菲塞尔教授的研究生,此期间与我国中国科学院上海有机化学研究所付所长,黄维垣教授同事。曾任名古屋大学化学系教授,东京教育大学化学系教授,1969-1977年任肯尼亚首都那罗比国际昆虫生理和生态研究中心主任,1979年到现在任Suntory生物有机研究协会会长,1969年到现在为美国纽约哥伦比亚大学化学系教授。

中西教授发表的文章有320篇。出版的书有“红外光谱法一习题”、“红外吸收光谱”和“天然产物化学”第一、二卷。应邀参加各种国际性学术会议80次。曾多次荣获各种荣誉:1954年荣获日本化学学会纯粹化学奖,1968年荣获Asahi文化奖,1973年为美国艺术和科学协会会员,1978年荣获美国化学学会Ernest Guenther奖,1979年荣获日本化学学会奖,1979年荣获E.E.Smissman奖状。

中西教授主要是从天然产物的研究,特别着重研究具有生理活性的天然产物。研究它们的分离、结构、反应和生物合成。他善于应用各种现代物理工具从事化学研究工作。是国际上公认的红外,核磁和旋光手征法的权威。

由于中西教授对红外光谱法有丰富的实践经验,因此他著的“红外光谱法一习题”“红外吸收光谱”一书出版后,在日本、美国及中国都广受欢迎,并已在日本,美国分别再版。现在我们将中西香尔教授的“红外吸收光谱”一书翻译成中文,介绍给我国的读者,予料它将对我国广大化学工作者、红外实验工作者和高校师生学习与掌握红外光谱法起极好的指导作用。

前

言

在第一次拜读一本书之后，经过了十五年又有机会为该书写前言，这种情况是不多见的。我现在正是在愉快、自豪和饶有兴味地做这件工作。

五十年代后期，当我第一次看到中西教授的专著——“红外吸收光谱”的日文原版时，红外还是有机化学家最广泛使用的物理方法，而核磁共振光谱仅在几年前才成为有机化学家的得力工具。我鼓励作者译出英文版本，因为我感到他完成的是一件罕见的功绩，他写了一本简短、通俗的专著，可供学生和实验化学家自学和独自欣赏红外光谱学的应用范围和细则。书中附有大量的习题和题解，极大程度地提高了此书的自学效果。因此，此书英译本在1962年间世后，立即轰动一时，就不足为奇了。

十五年过去了，有机化学的研究方法，特别是物理方法的应用方面有了很大发展，质子核磁共振谱和质谱已成为有效的常规工具，碳核磁共振谱即将同样地被广泛应用。今天的有机化学家，特别是近十年的那些有机化学的研究生，有着这样一种倾向，几乎是不分青红皂白地盲目使用核磁共振和质谱，而不知道从较老的，并已成熟的方法中，例如从红外光谱中能得到很多有用的、有时是独特的情报资料。这个较适当的仪器设备价格较便宜、适用性广，而且容易操作，稍加练习，即能容易地独立完成数据解释。

现在是时候了，应对较老的、经过时间考验的方法给予严谨的推荐，用以克服那种总想只依靠最新的、通常又是代价最昂贵的技术的倾向。红外光谱就是一个极好的例子。由一位国际上公认的红外、核磁和手征旋光法的权威——中西教授来阐明这一点是特别有说服力的，本书的新版对原版进行了相当全面的修订，并增加了激光拉曼光谱一章和很多新习题，我预期它能象第一版一样得到读者们的热烈欢迎，我谨希望十五年后我又能有机会为本书的第三版写前言。

斯坦福大学

1977年3月

卡尔·狄拉西

中国科学院

北京

原 序

为了有效地使用红外光谱来解决定性分析问题,首先要熟悉各种特征吸收谱带的形状和吸收区域,为此,最简单的方法自然是熟悉实际的谱图。本书的目的就在于此。本书在很短的导言章后,第二章就列了定性数据表,第三章和第四章叙述了影响谱带的位置和强度的各种因素。为了补充和详细叙述在第二章的表中的数据材料,在习题部分,列举了各种曲线,以供分析,在题解部分提供了各个谱带的归属及谱图的解释。

第二章表中的“图号”行有带圆圈的数字,它表示习题的序号,在该序号的图谱中能找到这一特定的谱带。

在题解部分,附在解释各个谱带条文后面的括弧中的数据是那个基团标准的吸收范围。

在鉴定某类基团时,红外和核磁共振数据是互相补充的。例如,在各种各样的甲基中,诸如偕二甲基,甲氧基,N-取代甲基等,用核磁共振更容易鉴别,因此在附录中附加一个化学位移表。

本书在1960年首先用日文出版,(东京,Nankodo公司),在英译本中,定性部分修改不多,而习题和题解部分很多是重新写的,从日本红外数据协会(IRDC)的卡片中大量选用谱图作题材(参阅第9页)。

我愿向 Bellamy, Jones 和 Sandorfy 表示感谢,他们所著的内容丰富的教科书给我提供了很大的帮助。其他大量的资料是从很多其他“红外光谱”的书刊中收集来的。(参阅第8页)。

我非常感激 D.H.R. Barton 和 C. Djerassi 两位教授,根据他们的建议我才出版了这个英文译本,特别是 Djerassi 教授还为本书撰写前言,我对此表示最衷心的感谢。

我要深深地感谢我所有的同事,他们慷慨地花费时间和精力帮助我,特别要提出的是 A. Terahara 在炎热的暑假中为我校稿, J. Inoue 夫人和 K. Takahashi 小姐帮忙为原稿打字,及斯坦福大学的 phillip A. Hart 阅读了校样和润色我写的英文。虽然对日本人的夫人通常是不致谢的,但是我想应该是改变这种习惯的时候了,因此要感谢我的夫人 Yazuko 巧妙地处理了日本城市闹区的噪音对我的干扰。

还要感谢日本红外数据协会(the Infrared Data Committee of Japan)允许复制大量的谱图,感谢 Annalen der Chemie, Annals of the New York Academy of Science, Bulletin of the Chemical Society of Japan, DMS Cards, Helvetica Chimica Acta, Journal of the American Chemical Society, 日本化学杂志和 Spectrochimica Acta 等期刊的编辑们允许复制图表。最后,我感谢 Nankodo 公司和 Holden-Day 的职员们协助处理各项问题,例如包括我的懒散。

1962年8月11日

东京

中西香爾

※

※

※

※

当本书第一版在 D.H.R. Barton 和 C.Djerassi 两位教授的建议下于 1962 年出版的时候, 我不知道化学界的同仁们将如何评价它。但是当我知道它相当受欢迎时, 我大大地宽心了, 为此我也非常感谢。我有过要修改本书的某些想法, 但常常有各种借口, 使得我没有这样做。

现在我非常感激 P.H. Solomon 博士, 她热心地承担了修改第一版的任务, 主要的特征频率在 60 年代初就大体上明确了, 因此虽经计算机检查以更新所有的数据, 结果大部分材料现在仍然保持原状。

本书新版的主要变化是全书各细小部分的更新, 修改、补充了一些图表, 又增加了一章拉曼光谱的概述。

我们感谢乔治城大学的 C.F. Hammer 教授, 他精心审阅了修改稿, 感谢纽约市立学院的 R.H. Callender 教授对拉曼光谱一章做了各种各样的讨论和建议, 感谢布鲁克林理工大学的 B.J. Bulkin 教授做了某些拉曼光谱的测定, 也感谢 C.Djerassi 教授热情地答应再写一篇前言, 最后我再一次感谢我的夫人, 在这么多年代里一直是一位能干贤慧的日本夫人。

1976 年 12 月 31 日

纽约城

中西香爾

我只要补充一句话, 我要表示对 K.N. 和我的丈夫 Dan 感激之情, 他们的宽容和鼓励使这个修改任务远没有象 K.H. 上面所讲的那么艰难可怕。

1976 年 12 月 31 日

纽约城

P.H. 索罗曼

译 者 的 话

目前, 红外光谱法已在化学、生物、石油化工、医药……等各领域得到广泛使用, 而红外光谱法入门的关键是要熟悉和掌握各种特征吸收谱带的形状与吸收范围。为了使化学工作者和红外光谱实验工作者迅速、熟练地掌握这一技术, 我们向读者们介绍这本通俗的专著。

本书的特点是简明扼要, 各种基团的特征频率都附有精练的说明, 使读者们能掌握每一特征频率的特点, 再配合后面 100 个习题的题解, 更是清楚明瞭。本书在日本、美国、中国均是一本广受欢迎的好书。上海有机化学研究所付所长、黄维垣教授对我们的译稿进行了认真的校阅, 并给于宝贵的指导, 在此特致谢意。

原书中错误之处译文均作了改正, 有些地方并作了注明。由于我们水平有限, 译文中难免有一些错误, 欢迎读者批评指正。

1980 年 3 月

目 录

致中国读者	1
本书作者介绍	1
前言	2
原序	1
译者的话	1
定性数据	1
第一章 红外光谱	(1)
第二章 特征频率表	(10)
2.1 吸收谱带的位置	(10)
2.2 强度	(10)
2.3 归属	(11)
表1 烷烃	(13)
表2 烯烃	(18)
表3 芳烃	(21)
表4 $x \equiv y$, $x = y = z$ 基团	(23)
表5 醇类和酚类	(26)
表6 醚类和有关基团	(33)
表7 胺和铵盐	(36)
表8 羰基	(41)
表9 硝基, 亚硝基等	(53)
表10 杂环化合物	(56)
表11 含硫基团	(60)
表12 含磷基团	(62)
表13 含硅基团	(64)
表14 卤素及其他各种基团	(65)
表15 无机盐	(67)
第三章 谱带的位置和强度	(69)
3.1 谱带的位置	(69)
3.2 氧化	(74)
3.3 谱带的强度	(75)
第四章 吸收谱带位移的实例	(77)

拉曼光谱

第五章 激光拉曼光谱 (83)

5.1 导言 (83)

5.2 拉曼谱图的实例 (90)

习题 (100)

题解 (149)

附录 (280)

附录 I NMR (80)

表 1 甲基, 亚基, 甲川基质子的近似化学位移 (280)

表 2 其他各种质子的化学位移 (281)

附录 II 波数、波长转换表 (282)

索引

内容索引 (288)

化合物索引 (290)

(01)	
(01)	
(01)	
(11)	
(81)	
(81)	
(13)	
(13)	
(81)	
(88)	
(88)	
(14)	
(02)	
(02)	
(00)	
(00)	
(18)	
(50)	
(70)	
(00)	
(00)	
(17)	
(77)	
(77)	

定性数据

第一章 红外光谱

通常认为红外光谱是化合物较特征的性质之一。

红外光是处于 0.75 微米 (1 微米是 10^{-4}cm , 用 μ 表示) 到 200 微米, 也就是从可见光以外到微波区的波长范围 (图 1.1)。但通常所谓的红外区仅指 2.5 至 40 或 50 μ 之间的范围, 较短或较长的波长范围分别称为近红外和远红外区。远红外区延伸至 10cm^{-1} , 它主要提供含有重原子的振动或键扭转的数据, 目前仍是个较为特殊的领域。

红外光的波长通常用波数来表示, 它是用厘米为单位的波长的倒数, 因此, 波数的单位是 cm^{-1} 。如 2.5~25 μ 相应于 $4000\sim400\text{cm}^{-1}$ 。以波长为线性和以波数为线性的两种分光光度计皆可采用, 目前以波数为单位的光度计使用较普遍。

所有的分子都是由以化学键联结的原子组成, 原子和化学键的运动可比喻为弹簧和球组成的体系的运动。它们的运动可看成是由伸缩振动和弯曲振动两个部份构成的, 振动频率不仅依赖于键本身的性质, 如 C-H 或 C-O 键, 而且也受整个分子和它的环境的影响。这种情况和在弹簧-球体系中遇到的情况相似, 单一弹簧的振动处于体系的其余部分的影响之中。

“如把能量转移给体系时, 则体系的内部运动变得较激烈。”同样地, 伴随有电子振动的键振动, 在受到电磁波 (红外光束) 的照射时, 振幅将增大。分子和弹簧-球体系间的区别在于前者的振动能级是量子化的, 因此, 只有一定频率的红外光才能被吸收, 该红外光频率与提高键的能级所需的频率完全一致。也就是说, 每个振动的振幅增加不是连续的, 而是以某一确定量跃增的。这样, 当样品受到频率连续变化的红外光照射时, 分子吸收了某些频率的光, 用作消耗于各键的伸缩或弯曲振动的能量。相应于这些吸收区域的透过光自然要减弱, 因此, 如按波数或波长记录透过红外光的强度, 就得到表示吸收谱带的曲线, 这就是红外光谱。

上面已提到分子中各个键的频率受整个分子环境的影响。但是, 有些键具有固有的特征: 多重键比单键强, X-H 类型键 (N-H, O-H, C-H 等) 有特别轻的末端氢原子。它们好似强度特别大的弹簧, 或似一端联结着特别轻的球的弹簧。与弹簧-球体系相似, 这些键的振动受分子其余部分的影响较少。因此, 这些键的伸缩频率总在一定的区域出现, 并是各种键所特有的。总的说来, 它们出现在 $3600\sim1500\text{cm}^{-1}$ 区域内 (图 1.1)。C=O 伸缩频率出现在 $2000\sim1500\text{cm}^{-1}$ 之间, 它对于结构和环境的差别非常敏感, 这使羰基吸收在有机化学上特别有用。

C-C, C-N, C-O, C-卤素等单键的伸缩谱带和各种键的弯曲谱带出现在 1600cm^{-1} 以下的区域。单键具有相同数量级的键强度, 而且, 它们常常连续联结, 如 C-C-C-O, 由此产生了较强的相互作用, 谱带出现的范围较宽, 对于结构的细微变化, 谱带位置具有较大的灵敏度。

低于 1300cm^{-1} 的红外光谱频率区域称为指纹区。在这一区域内, 每一化合物均具有它自己的特殊图形。但如利用指纹区来鉴定化合物, 仍应谨慎, 因为不同化合物可以有非常相似的谱图(例如, 同系列脂肪酸的溶液谱图), 而同一化合物又可能由于样品制作条件、多晶现象等的不同, 得到不同的谱图(看习题②5)。

下面我们讨论决定吸收谱带位置的因素。由质量为 m 和 m' 原子组成的双原子分子, 其伸缩频率 ν 可用方程 (1.1) 表示:

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{f(m+m')}{mm'}} \quad (1.1)$$

这里的 c 是光速, f 是力常数(键强度或键级, 相当于弹簧的虎克常数)。大分子中的 X-H 键和重键的伸缩频率也可用同一式子近似地表示。可以看出键

强度和成键原子的质量决定了谱带位置。键强度愈大, 质量愈小, 则这个键的吸收频率愈高, 也就是说该键的振动需要较大能量。例如, 由单键、双键到三键, 键的强度增加了, 因此, 伸缩频率也以 $700\text{--}1500\text{cm}^{-1}$ 、 $1600\text{--}1800\text{cm}^{-1}$ 、 $2000\text{--}2500\text{cm}^{-1}$ 的顺序增加。

(图 1.1) 即如果成键原子的质量相同, 则键级愈高的键, 吸收频率愈高。而且, 作为一级近似, 如联结的原子愈重, 则频率愈低。例如, O-H 键的伸缩振动在 3600cm^{-1} , 但是 O-D 键降至 2630cm^{-1} 。这里, 两个键的强度相同, 只是质量增加了。定性地讲, 弯曲频率也可以用同一方法处理。

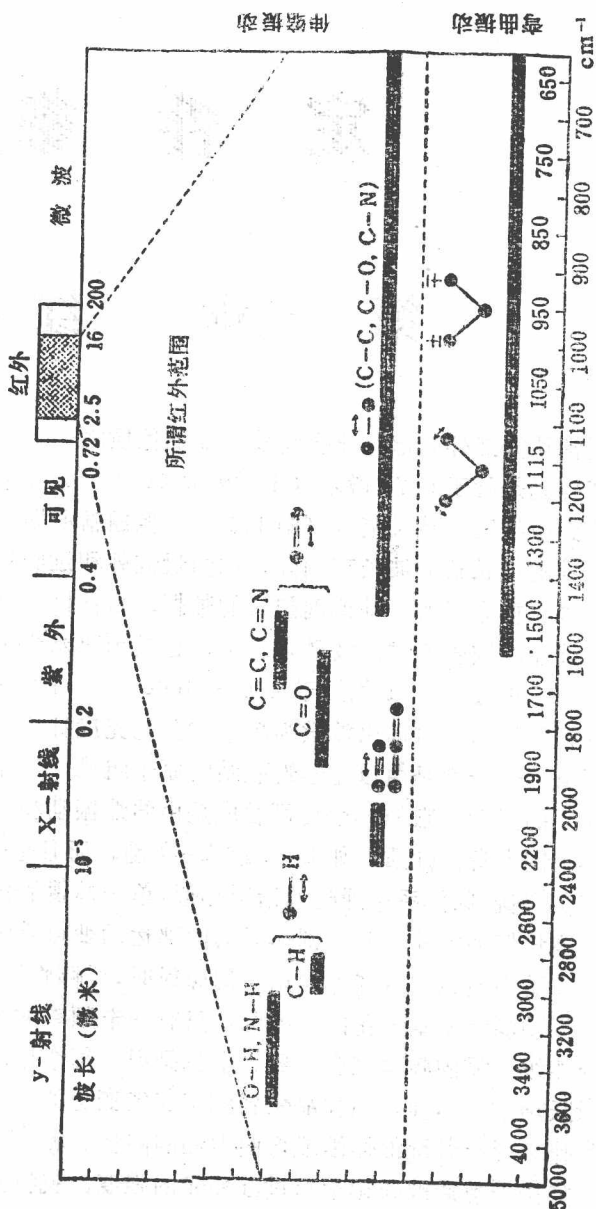


图 1.1 伸缩和弯曲振动

特征谱带最常用于判断分子的结构，由于它们是由含有特别轻的氢原子键或是由特别强的重键产生的，故在一定区域出现，并不受分子其余部分影响。但各个键的振动不可能完全不受分子的其余部分的影响，所以谱带位置会以各种复杂方式发生变化，该变化是定性分析的关键因素。

一种振动并不一定伴随有红外吸收谱带产生。只有当振动引起分子内电荷分布变化时，才产生吸收。变化愈大，吸收愈强。因此，仅由碳和氢原子构成的烃类的谱带是弱的，而由电负性差异较大的原子形成的键，如 C-N, C-O, C=O, C≡N 等所产生的谱带通常是很强的。虽然上面提到单键的弯曲频率和伸缩频率出现在同一区域，但由于 C-O 和 C-N 的伸缩频率较 C-C 伸缩频率强，所以 C-O 和 C-N 键的鉴定较容易。

凡属某一基团特有的，出现在某一区域，并有较高强度的吸收谱带，用作鉴定该基团，称为特征频率或特征吸收谱带。从 1940 年以来，收集了大量的谱带数据，目前，指纹区里许多谱带对于鉴定各种基团仍是有效的。

图 1.2 表示醇羟基的特征吸收。无论羟基是处在什么样的分子中，都出现这些谱带。由于 O-H 伸缩谱带 (1) 典型的高频率和 C-O 伸缩谱带 (3) 的高强度，对鉴定特别有用。也提到弯曲频率 (2) 和 (4)，但很少用于鉴定。由于一特定键的振动敏锐地受其他邻近键的影响，所以随分子的结构和测量状态不同，特征频率的位置和强度亦不同。例如图 1.2 所示的羟基的四种吸收取决于：羟基是连接在伯、仲或叔碳原子上，羟基是游离的、形成分子间氢键，还是形成了分子内氢键；以及氢键强度等。因此，将它们与类似的或已知的化合物的谱带相比较，就能推测有哪一类羟基存在和处于什么状态。如果改变测定条件（溶剂等），或改变化学结构（氧化成酮，乙酰化等），吸收谱带亦相应变化，就可以证实这一推测。例如，如果还原一个含有异丙烯基的化合物，它的特征频率则消失，代之出现异丙基的

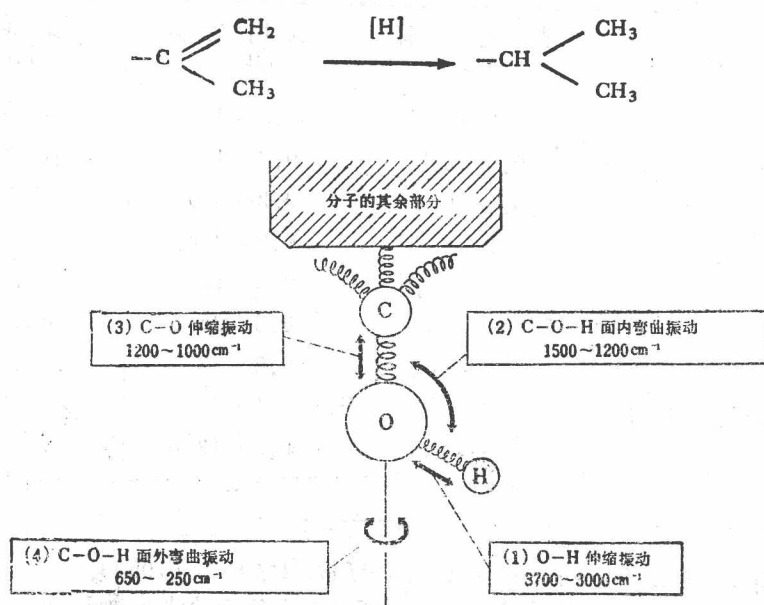


图 1.2 醇羟基的振动与吸收

特征频率。这个事实有力地支持了原来的假设。

由于本世纪四十年代后期出现了自动记录仪，目前已知的大多数基团的特征频率均已测得。这些资料已被汇编成书、表和卡片形式，在鉴定各种基团时，它们是不可缺少的。定性数据是红外光谱仪最重要的用途之一。吸收谱带直接反映了分子中键的状态，提供了很多具有理论意义的数据。谱带强度与样品用量成正比，这导致了红外光谱仪的另一重要用途一定量分析。

测定

通常可用聚苯乙烯薄膜校正波数（图 1.4），另一种校正方法是利用大气中水汽的谱图（图 1.3），如需更严格的测定，可参用国际纯粹和应用化学协会（I U P A C）制定的茛、环己酮和樟脑的特殊混合物的波数校正表*。池的厚度很容易由干涉曲线进行测定。（参考习题 1）。用于固体的溶剂不应侵蚀氯化钠窗片，也不应与样品发生反应；当透过率小于 35% 时，曲线会畸变。最合适的是非极性溶剂，如四氯化碳（和二硫化碳），（图 1.6 和 1.7），但由于极性稍大的氯仿溶解能力大，所以也被广泛使用（图 1.8）。二氧六环和四氢呋喃等极性溶剂亦用在一些特殊场合（图 1.9 和 1.10）。

固体也可以与石蜡油（矿物油）一起研磨成糊或作成 KBr 压片进行测定。这两类测定是互相补充的，因为被石蜡油吸收所掩盖的区域，在 KBr 谱图中是透明的。但后者常含有由于吸收水分所产生的谱图：3300cm⁻¹（中，O-H 伸缩）和 1460cm⁻¹（弱，H-OH 弯曲），（水的去除参看第三章固体的测定）。

下面给出一些表格和曲线。

表 1.1 棱镜材料*

材 料	最 宜 范 围 [μ]	适 用 范 围 [μ]	溶 解 性 (20℃) 克/100克水
玻 璃	0.3~2	0.3~2	不 溶
石 英	0.3~3.5	0.2~4	不 溶
氟化锂	0.6~6	0.2~6.5	0.27
氟化钙	0.2~9	0.2~9.5	0.016
氯化钠	2~15.5	0.2~17	36.0
溴化钾	10~25	0.2~25	54.0
氯化银	2~20	0.2~22	0.00015
KRS-5(TlBr-TlI)	2~40	1~40	0.05
氟化钡	0.2~13	0.2~13.5	0.17
溴化铯	10~37.5	1~38	124.0

* 录自 Perkin-Elmer, *Instruction Manual* 3B 9 (1954).

用作吸收池的窗片材料的极限波长可比表中所示的波长长 1-2μ

** R.N.Jones and A. Nadean,

Canadian Journal of Spectroscopy 20, 33 (1975)。

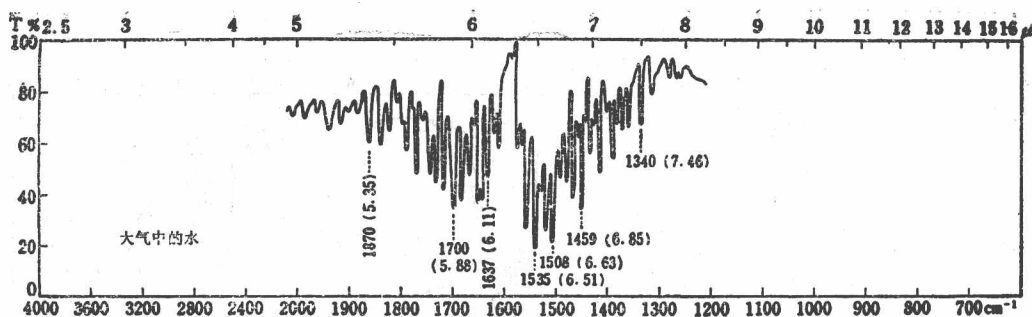


图 1.3 由单光束仪器测得，明显的峰用作波数校正

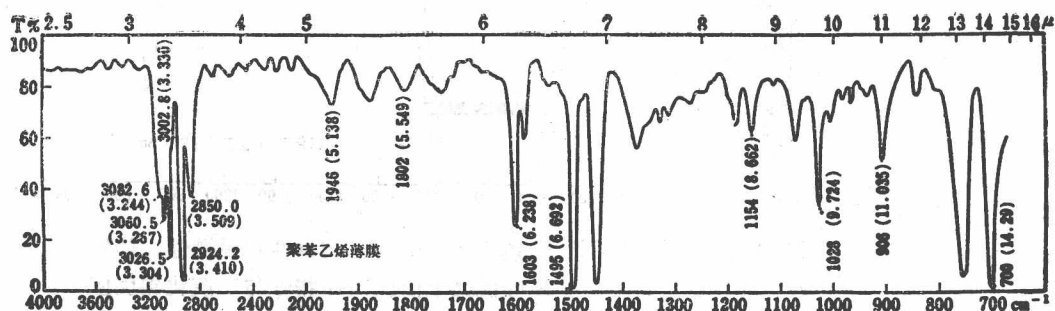


图 1.4 用 3026, 3003, 2924, 1603, 1495, 906cm⁻¹ 和其他谱带校正波数。
聚苯乙烯薄膜通常安装在一易于使用的框上，也用于调节分光光度计的操作条件

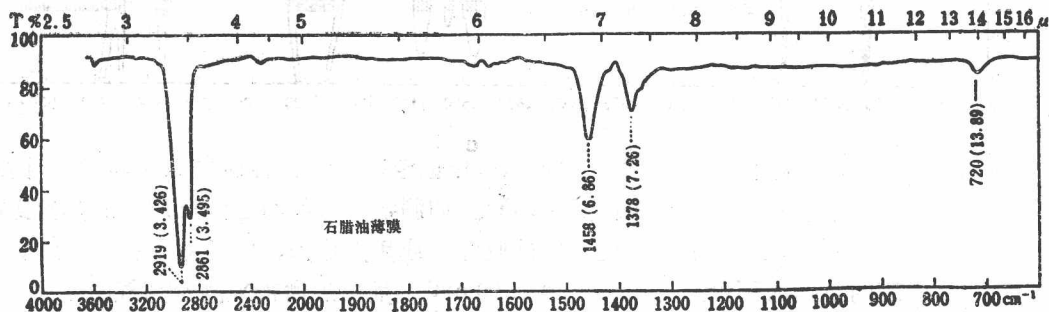


图 1.5 用于固体样品，谱带是由次甲基和甲基产生的

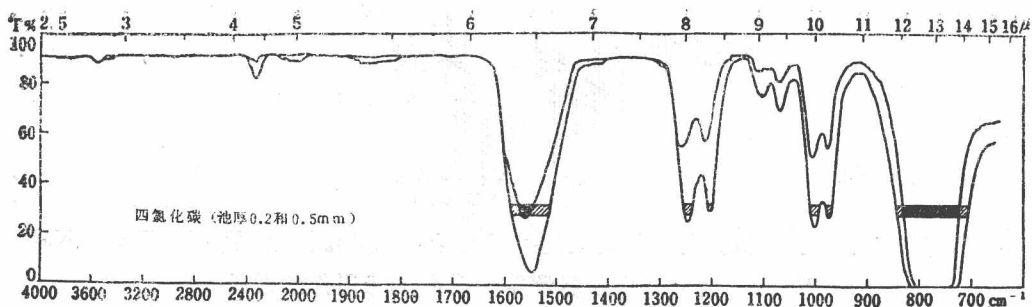


图 1.6* 通用溶剂，特别适用于高频区域

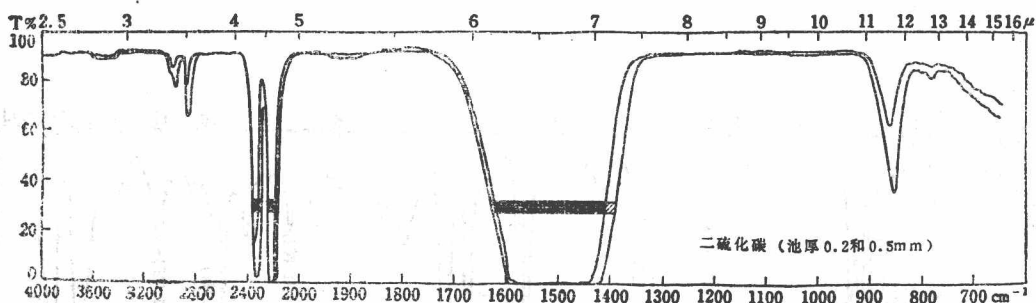


图 1.7* 通用溶剂，特别适用于低频区域。由于它的毒性和易燃性，使用时最好在通风柜中进行。在某些情况下伯胺与仲胺可与二硫化碳反应生成二硫代氨基甲酸酯 [R. N. Jones and C. Sandorfy, "Chemical Applications of Spectroscopy", p. 511 (1956).]

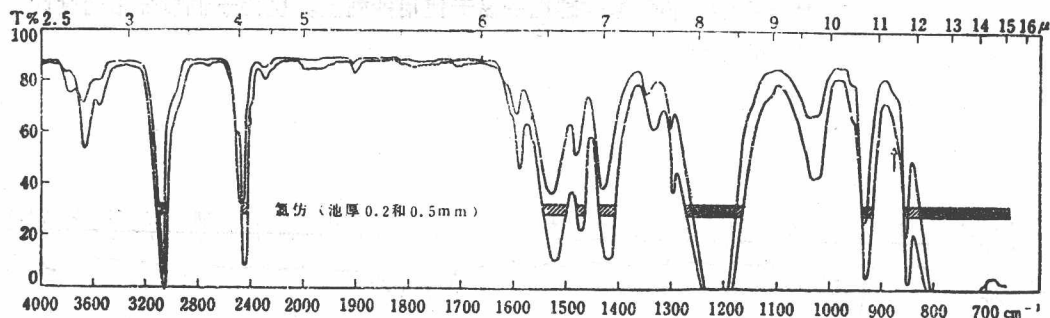


图 1.8* 通用溶剂，商品氯仿含1~2%乙醇作稳定剂，这很容易由 880 cm^{-1} ，附近的小峰形状检出（图中箭头所示）。如测定的样品与乙醇反应或生成氢键，则需预先使溶剂通过氧化铝或硅胶柱，或用其他方法将乙醇除去*。除去乙醇的氯仿约可贮存一周，可由 1810 cm^{-1} 处出现谱带来测定光气的生成

* * D. D., Perrin, W.L.F. Armarego and R. Perrin, "Purification of Laboratory Chemicals", P.110, Pergamon press, Oxford, 1966.

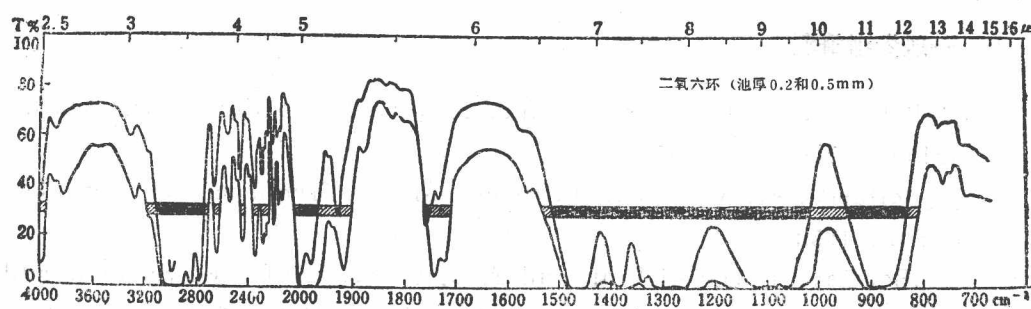


图 1.9* 用于研究氢键等的特殊溶剂

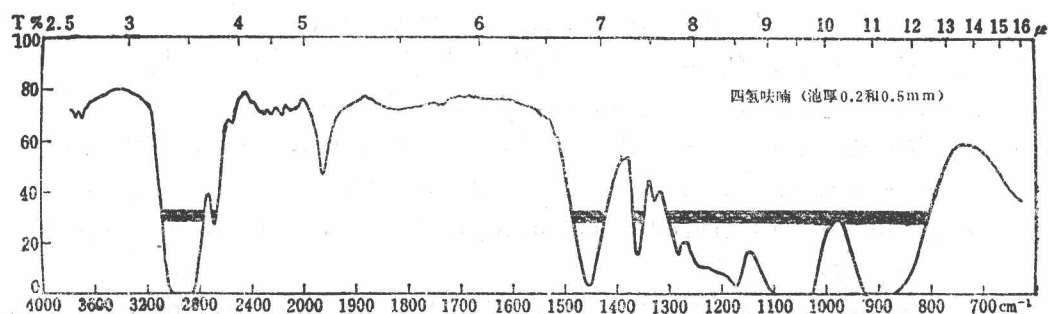


图 1.10* 用于研究氢键等的特殊溶剂

校正

为精确校准棱镜和光栅分光光度计，应参考下述专论。

I U P A C Commission on Molecular Structure and Spectroscopy, "Table of Wavenumbers for the Calibration of Infra-red Spectrometers," Butterworths, London, 1961.

* 图 1.6-1.10 的黑影部分代表百分透过率低于 35% 的区域，各个溶剂在这些区域是不适用的。