

研究生系列教材

SPECTRUM ANALYSIS

波谱 分析

刘玉鑫 主编



四川大学出版社



波谱

分析

SPECTRUM ANALYSIS

ISBN 7-5614-2964-9



ISBN 7-5614-2964-9 / O · 90

定价：36.00 元

研究生系列教材
四川大学研究生院资助

波谱 分析

SPECTRUM
ANALYSIS

刘玉鑫 主编

四川大学出版社



责任编辑:王 锋
责任校对:李桂兰
封面设计:罗 光
责任印制:杨丽贤

图书在版编目(CIP)数据

波谱分析 / 刘玉鑫主编. —成都: 四川大学出版社,
2004.12

ISBN 7-5614-2964-9

I. 波... II. 刘... III. 波谱分析 IV. O657.61

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 119178 号

内容简介

本书包括紫外光谱、红外光谱与拉曼光谱、核磁共振氢谱及核磁共振碳谱、质谱和各谱的综合解析。

书中收录了各类有机化合物的典型谱图、数据及标准谱图的检索,并以典型实例阐明谱图解析及结构的推导。各章后均附有习题。

本书可作为高等院校化学、化工、材料、生化、制药等专业本科生、研究生的教材或教学参考书,对从事有机化学、波谱分析及相关学科工作的研究人员、工程技术人员亦有相当的参考价值。

书名 波谱分析

主 编 刘玉鑫
出 版 四川大学出版社
地 址 成都市一环路南一段 24 号 (610065)
发 行 四川大学出版社
印 刷 郫县犀浦印刷厂
开 本 787mm×1 092mm 1/16
印 张 23.75
字 数 537 千字
版 次 2004 年 12 月第 1 版
印 次 2004 年 12 月第 1 次印刷
印 数 001~500 册
定 价 36.00 元

◆ 读者邮购本书,请与本社发行科
联系。电话:85408408/85401670/
85408023 邮政编码:610065

◆ 本社图书如有印装质量问题,请
寄回出版社调换。

◆ 网址:www.scupress.com.cn

版权所有◆侵权必究
此书无本社防伪标识一律不准销售

序

“年年岁岁花相似，岁岁年年人不同。”在世纪之交，经过高教体制改革，又一次强强合并后的新四川大学已成为我国西部地区规模最大、学科门类最齐全的新型综合性研究型大学。校训“海纳百川，有容乃大；严谨勤奋，求是创新”已成为川大人求知治学的座右铭。

作为新世纪的献礼，我校研究生教材建设基金资助的又一批研究生优秀教材相继正式出版了，在此我表示热烈的祝贺。

众所周知，21世纪是知识经济的世纪，国际竞争空前激烈。竞争的焦点是科学技术，竞争的核心是创新型人才，竞争的关键是国民教育。对于四川大学这样的国家重点大学而言，必须注意大力发展研究生教育，扩大规模，注重质量，强调创新。

校长、教师、教材是办学的三大要素，而教材是教学改革与师生智慧的重要结晶。正是基于这种思考，我校建设以学科建设为龙头，作为一项重要的措施就是加强研究生的教材建设。我们通过各种渠道，筹集了专项基金，用以资助研究生优秀教材的编写和出版。我们在1999年首次资助的是有博士学位授权点的学科专业中涉及面大、使用面宽的研究生学位平台课程的优秀教材。而今，我们扩大了教材基金资助的范围，无论文、理、工、管、医，只要是经过专家评审后认定的优秀教材，都可被列为资助对象。特别是社会需求量大的应用学科、新兴学科、交叉学科及保护学科的优秀教材，更是优先资助出版。

我们推出的研究生教材的基本特点是：符合该学科教学大纲的基本要求，有较强的理论性和系统性。这些教材既反映了该学科发展的新知识、新动向、新成就，也反映了我校教师在该门学科教学与科研中的新成果与新经验。

前人说得对，古今之成大事业、大学问者，都必须经过三种境界：“昨夜西风凋碧树。独上高楼，望尽天涯路。”此第一境界也。“衣带渐宽终不悔，为伊消得人憔悴。”此第二境界也。“众里寻他千百度。蓦然回首，那人却在，灯火阑珊处。”此第三境界也。研究生优秀教材的建设应该算作一种“大事业”。优秀教材的作者们对于研究生教育改革的执著追求，令人钦佩；他们的无私奉献精神，值得赞扬；他们所取得的教学科研成果应该积极推广，使其产生应有的社会效益，为百年名校增添光彩。我殷切希望在陆续出版的研究生教材中能出现“传诸后世”的佳作，更希望我校有更多教授、名家动手撰写研究生教材，分门别类，出版系列的研究生教材丛书，为建设国内一流、国际知名的新四川大学做出更大的贡献。

中国科学院院士

四川大学副校长

刘应明 教授

四川大学研究生院院长

前 言

波谱分析在有机化学及其相关学科的研究和化合物结构表征中起着极为重要的作用。随着各种波谱仪器的发展、普及与功能的完善,紫外光谱、红外光谱、核磁共振波谱、质谱已成为化学工作者最常用的分析工具。因此,波谱分析是近代化学工作者必须掌握的重要内容之一。

本书积累了编者二十多年来讲授《有机化学》与《波谱分析》课程的经验,是在多次修改使用了十多年的研究生讲义《波谱分析》的基础上,经认真改编而完成的。全书共分8章。第2章至第7章系统描述紫外光谱、红外光谱与拉曼光谱、核磁共振波谱、质谱的基本原理、方法特点、仪器结构、谱图解析及其应用,并适当编入了有关国内外波谱分析的资料和发展情况。第8章为各谱的综合解析,用多种谱图提供的结构信息互为补充及验证,最后推导出有机化合物的构造式。

本书考虑到化学工作者对波谱方法的实际应用,理论描述简明扼要、深入浅出。对各种波谱学的原理,以定性阐述清楚为准。尽可能避免复杂的数学推导,使以有机化合物为研究对象的化学工作者既容易理解,又能满足他们的需要。

本书着重于提高读者分析谱图及推导化合物结构的能力。各章除了通过典型实例详细阐明谱图的解析及结构的推导以外,还配有适量习题以引导初学者理论联系实际,由谱图推导化合物的结构。本书内容除涉及有机化学外,还涉及其他诸如高分子化学、天然有机化学、生物化学、配位化学等学科。对一些近代实验方法如同核、异核²DJ谱,FT-IR,GC-MS-DS等也作了扼要介绍。此外,还收录了许多典型化合物的谱图和数据,介绍了各种标准谱图的检索方法。本书除第2章紫外光谱2.1~2.4节由李万舜执笔,2.5~2.8节由王林元执笔外,其他章节均由刘玉鑫完成。全书由刘玉鑫整理定稿。

本书可作为高等院校化学、化工、生化、材料、药学等专业本科生、研究生的教材或教学参考书,也可供从事有机化学、波谱分析及相关学科研究工作的人员参考。

本书承蒙四川大学研究生教材基金资助出版,在出版过程中得到了四川大学出版社的大力支持,在此谨致以诚挚的感谢。

由于编者知识浅薄,书中如有错误和不妥之处,恳请读者批评指正。

刘玉鑫

2004年8月于四川大学新北村

目 录

第 1 章 绪 论	1
第 2 章 紫外光谱	5
2.1 分子吸收光谱	5
2.2 紫外光谱的基本原理	7
2.2.1 电子跃迁的类型	7
2.2.2 紫外光谱的表示方法	7
2.2.3 发色团、助色团、向红移、向蓝移及增色、减色效应	8
2.2.4 吸收带及其种类	10
2.3 影响紫外光谱的主要因素	11
2.3.1 分子内部结构的影响	11
2.3.2 环境因素的影响	15
2.4 有机化合物的紫外光谱	17
2.4.1 简单分子的紫外光谱	17
2.4.2 含有共轭双键的化合物	18
2.4.3 多共轭体系	21
2.4.4 芳香化合物	21
2.5 过渡金属配合物的紫外可见吸收光谱	25
2.5.1 d-d 跃迁光谱	25
2.5.2 电荷迁移光谱	26
2.5.3 配体内的电子跃迁光谱	27
2.6 紫外分光光度计与测定紫外光谱时的注意事项	27
2.6.1 紫外—可见分光光度计的原理	27
2.6.2 测定紫外光谱时的注意事项	28
2.7 紫外光谱的应用	29
2.7.1 有机化合物定性的一般方法	29
2.7.2 紫外光谱解析举例与加合规则	29
2.7.3 紫外光谱的应用	31
2.8 紫外光谱谱图集和数据表	37
第 3 章 红外光谱与拉曼光谱	42
3.1 红外光谱概述	42
3.2 红外吸收光谱的基本概念	43
3.2.1 红外吸收与分子瞬时偶极矩以及振动频率的关系	43
3.2.2 多原子分子的振动光谱	45

3.3	红外光谱仪与样品制备方法	50
3.3.1	红外光谱仪简介	50
3.3.2	仪器的性能指标	51
3.3.3	样品的制备	52
3.4	基团与振动频率的关系	53
3.4.1	振动频率与成键原子的质量和键能的关系	53
3.4.2	基团频率	54
3.4.3	红外光谱区域划分	54
3.4.4	影响基团频率位移的因素	55
3.5	红外光谱定性分析	62
3.5.1	各类有机化合物的特征吸收	63
3.5.2	高分子化合物的红外光谱	89
3.5.3	无机化合物的红外光谱	91
3.5.4	红外吸收光谱的解析	93
3.5.5	红外光谱例解	96
3.5.6	标准谱图的应用	98
3.6	红外光谱定量分析	99
3.6.1	吸光度的测量方法	99
3.6.2	定量分析方法	100
3.7	红外光谱的新进展	100
3.8	拉曼光谱	102
3.8.1	拉曼光谱的原理	102
3.8.2	激光拉曼光谱仪与样品制备	104
3.8.3	拉曼光谱的特征频率	104
3.8.4	拉曼光谱的应用	106
第4章	核磁共振波谱概述	115
4.1	核磁共振原理	116
4.1.1	核的自旋与磁性	116
4.1.2	核磁共振条件	119
4.1.3	核自旋弛豫 (Nuclear Spin Relaxation)	120
4.2	核磁共振波谱仪与实验技术	122
4.2.1	核磁共振波谱仪的类型和性能指标	122
4.2.2	实验技术	125
4.3	核磁共振波谱中的结构信息	125
4.3.1	化学位移的产生与表示	125
4.3.2	自旋耦合、自旋裂分与耦合常数	127
4.3.3	信号强度	131
第5章	核磁共振氢谱	133

5.1	氢谱的化学位移与影响因素	133
5.1.1	影响化学位移的因素	134
5.1.2	各类氢的化学位移及其经验值的计算	139
5.2	氢谱的耦合常数与分子结构的关系	146
5.2.1	邻碳耦合	147
5.2.2	同碳耦合	151
5.2.3	远程耦合	153
5.2.4	芳烃与杂环芳氢间的耦合	154
5.2.5	氢核与其他磁核的耦合	155
5.3	自旋体系	157
5.3.1	自旋体系	157
5.3.2	核的等价性	157
5.3.3	自旋体系的命名	160
5.3.4	自旋体系的分类及特点	162
5.3.5	常见的自旋体系	163
5.4	核磁共振氢谱中的动力学现象——分子的动态变换与它的氢谱特征	172
5.4.1	单键旋转受阻	173
5.4.2	杂原子上活泼氢的交换	174
5.4.3	环的翻转	178
5.4.4	酮—烯醇式互变	178
5.5	氢谱解析的辅助手段	179
5.5.1	改变仪器的磁场强度进行氢谱的测定	179
5.5.2	双照射去耦技术	179
5.5.3	核 Overhauser 效应 (NOE)	181
5.5.4	重氢交换法	182
5.5.5	位移试剂 (shift reagents)	182
5.5.6	溶剂效应	183
5.6	氢谱的解析	184
5.6.1	核磁共振谱图的制作及其准备工作	184
5.6.2	解析氢谱的一般程序	185
5.6.3	氢谱解析实例	187
5.7	常用标准氢谱图	195
5.8	氢谱的应用	196
5.8.1	高聚物的研究	196
5.8.2	动力学方面的研究	198
5.8.3	配合物结构的研究	198
第6章	核磁共振碳谱	206
6.1	概述	206

6.1.1	碳谱的发展	206
6.1.2	碳谱的特点	206
6.1.3	碳谱谱图	207
6.2	碳谱的波谱参数	207
6.2.1	化学位移及影响化学位移的因素	207
6.2.2	计算各类化合物 δ_c 的经验公式	214
6.2.3	碳谱中的耦合与耦合常数	225
6.2.4	信号强度	228
6.2.5	自旋晶格弛豫时间 (T_1)	229
6.3	碳谱的测定技术	231
6.3.1	脉冲-傅立叶变换技术 (PFT) 简介	231
6.3.2	碳谱中几种重要的去耦照射技术	232
6.4	碳谱的解析	236
6.4.1	试样的制备与碳谱的制作	236
6.4.2	核磁共振碳谱的解析步骤	236
6.5	常用标准碳谱	237
6.6	碳谱解析实例	238
6.7	核磁共振新进展	242
6.7.1	测定碳原子级数的几种新方法	242
6.7.2	固体高分辨核磁共振谱	243
6.7.3	二维核磁共振谱 (2DNMR)	244
6.7.4	磁共振成像	248
第7章	质谱	257
7.1	质谱的基本原理与仪器简介	257
7.1.1	基本原理	257
7.1.2	仪器简介	259
7.1.3	分辨率	262
7.2	离子的主要类型与相关信息	264
7.2.1	分子离子与相对分子质量的测定	264
7.2.2	同位素离子与分子式的确定	266
7.2.3	碎片离子	270
7.2.4	亚稳离子 (Metastable Ion)	270
7.2.5	多电荷离子 (Multiply Charged Ion)	271
7.2.6	离子-分子相互作用产生的复合离子	271
7.2.7	负离子	271
7.3	裂解类型与影响裂解的因素	271
7.3.1	裂解类型	271
7.3.2	影响离子裂解的因素	278

7.4	各类有机化合物的典型质谱	280
7.4.1	烃类	280
7.4.2	含氧化合物	284
7.4.3	含氮化合物	293
7.4.4	有机卤化物	297
7.4.5	有机硫化物	298
7.5	质谱的解析程序	299
7.5.1	解析质谱的一般程序	299
7.5.2	标准质谱图和质谱的计算机检索	303
7.6	无机化合物的质谱分析	303
7.7	生物分子的质谱	304
7.8	质谱的新进展	304
7.8.1	软电离技术	304
7.8.2	离子动能谱 (Ion Kinetic Energy Spectrum, IKES)	304
7.8.3	质能谱 (Mass-Analyzed Ion Kinetic Energy Spectrum, MIKES)	305
7.8.4	串联质谱 (Tandem Mass Spectrometry, MS-MS)	305
7.8.5	色谱—质谱—计算机联用仪 (GC-MS-DS 和 LC-MS-DS)	305
7.9	质谱在结构分析中的应用实例	306
第8章	波谱综合解析	320
8.1	各谱解析时的要点	320
8.1.1	质谱	320
8.1.2	核磁共振氢谱	321
8.1.3	核磁共振碳谱	321
8.1.4	红外光谱	321
8.1.5	紫外光谱	321
8.2	有机化合物主要结构与各谱间的关系	322
8.3	测定具有复杂结构的未知物的其他方法	325
8.4	波谱综合解析方法介绍	325
8.5	综合解谱实例	327
附录一	各类有机化合物的特征吸收	360
附录二	碳、氢、氮、氧各种组合的精密质量以及同位素丰度比 (选摘)	363
参考文献		365

第1章 绪论

化学法测定有机化合物的结构主要是通过元素分析（如对碳、氢、氮、氧、卤素、硫、磷等元素的分析）、物理常数的测定（如测定相对分子质量、熔点、沸点、折光率、旋光度等）、有机官能团的化学反应及衍生物的制备等方法来进行。但由于经典的化学分析操作繁琐、耗时，且有时不能准确地确定有机化合物的结构，所以在20世纪60年代以后，这些方法逐渐被波谱分析法（即紫外光谱、红外光谱、核磁共振波谱及质谱，简称四谱）所取代。

自20世纪40年代以来，应用仪器确定有机化合物结构的方法获得了长足的进展，特别是石油工业、高分子工业的发展更促进了现代物理仪器在有机化合物结构分析中的应用（见表1-1）。

表1-1 1946年~1985年化学分析方法的进展

百分比(%) 年份 方法	1946	1955	1965	1985
波谱分析	14.7	25.5	28.7	20.4
色谱分析	1.4	2.3	12.0	33.0
容量分析	25.2	22.2	10.6	3.7
重量分析	8.5	6.5	5.6	0.1
电化学分析	4.4	6.8	10.2	7.2
比色分析	23.0	20.2	15.2	10.9
放射化学分析	1.0	2.0	6.5	7.6
其他化学分析	21.8	14.5	11.2	17.1
无机分析	58.0	50.0	46.0	43.4
有机分析	42.0	50.0	54.0	56.6

由表1-1可以看出，1946年至1985年的40年间有机分析的研究工作已经超过了无机分析的研究工作，并且色谱分析和波谱分析已成为当今有机化合物结构分析中强有力的两大工具。

色谱分析主要是对物质成分进行分析，即将复杂的有机混合物分离成纯样品。它包括气相色谱、高压液相色谱、裂解色谱、薄层色谱及纸色谱等。色谱分析具有特别有效

的分离能力，可以把十几种甚至数十种复杂的有机混合物分离成纯样品，而且常常可以定量。另外，色谱法可以为波谱分析提供纯样品，满足了波谱分析对样品纯度的要求。例如，多组分的石油化工产品、复杂高分子材料的裂解产物以及含有诸多成分的天然有机混合物都须通过色谱分离而以波谱定性。

波谱分析主要是利用纯样品进行有机化合物结构的鉴定。由于其具有微量、快速、灵敏、准确等特点，早已成为研究与确证化合物结构的强有力手段，因此波谱分析是化学工作者必须掌握的一门工具学科。

本课程主要介绍上述四谱与各种有机化合物结构的关系、各谱的解析技术以及综合利用四谱进行有机化合物结构鉴定的方法。

在利用波谱分析法解析有机化合物的分子结构时，应当了解各谱的特点，即哪一种谱擅长解析何种类型的结构。一般情况下，只用一种谱图进行鉴定是比较困难的，只有同时利用几种谱图互相取长补短，才能快速、准确地确定化合物的结构。另外，在做各谱解析前，应广泛了解化合物的来源（如人工合成还是天然生成）以及分离手段和相似化合物的物理化学性质，这些信息不失为结构分析的辅助手段，并且往往会对解析结果起到意想不到的作用。

比较四种波谱分析方法的分析结果，按灵敏度来说，质谱（MS）是最灵敏的，其次是紫外光谱（UV）、红外光谱（IR）及核磁共振谱（NMR）。而获取信息最多的是核磁共振谱（NMR），从核磁共振谱中能获取 60%~70% 有关分子结构的信息。其次是质谱与红外光谱，紫外光谱所得的信息则要少些。波谱分析因为是物理分析，所以还需要掌握许多物理知识，从所需背景知识的多寡来看，核磁共振谱需要得最多，特别是当使用不同物理方法做核磁共振谱分析时更是如此。质谱、红外光谱所需背景知识相对要少些，紫外光谱所需背景知识最少。测定各谱时若使用联用技术会使操作过程变得复杂，如¹³C 傅立叶核磁共振—计算机联用、气相色谱—质谱—计算机联用等。而红外分光光度计、紫外分光光度计的操作则比较简单和容易。

当今的许多生产和研究部门，如石油化工、高分子化工、精细化工、环境分析、生物化工、皮革化工、天然有机化学、生物有机化学、金属有机化学等都在广泛地使用波谱分析方法，不仅如此，在医学、生理、病理等方面，磁共振成像（MRI）还被用来鉴定正常组织与病变的肿瘤组织。利用磁共振成像可以测定人体组织中水分的¹H 核，血液中的²³Na 核以及骨骼成分的³¹P 核等。核磁共振技术还被广泛用于生物大分子如蛋白质的一、二级结构的测定。

在宇宙探索中，色谱—质谱联用已被成功地用于测定火星的大气成分。

在体育竞赛中，色谱—质谱联用被用来检测运动员尿样中是否含有兴奋剂。

通过对本课程的学习，读者可以了解各种谱分析方法的基本原理、谱图特点，掌握解析谱图的要领，并初步具备应用各种谱图综合解析未知化合物的能力。

要想具有较高的解谱能力，需要经过长时间的实践，不仅要牢记关键谱图的特征数据，还要对谱图的形状比较熟悉。只有不断地总结解谱经验，才能快速、准确地判定化合物的结构。

波谱分析主要包括紫外光谱、红外光谱、核磁共振谱及质谱。前三种波谱是由一定

频率的电磁辐射和分子、原子中某些跃迁能级间相互作用而生成的。如核磁共振谱是在磁场存在下，某些原子核因自旋取向吸收无线电波（射频区）而产生的波谱。红外光谱则是分子振动、转动时吸收中红外光而产生的光谱。紫外光谱（亦称电子光谱）则是由于原子外层价电子跃迁吸收近紫外光而产生的光谱（见表 1-2）。

表 1-2 电磁波与光谱区对照表

光谱区域	宇宙射线	γ 射线	X 射线	远紫外光	近紫外光	可见光	红外光			微波	无线电波	
							近红外	中红外	远红外			
跃迁能级	核与内层电子			价电子			振动与转动			转动	核磁共振	
波长 λ (nm) (μm)			0.1	4	200	400	800					
								3	30	300	500	

综上所述，前三种波谱都是吸收光谱。而质谱与其他谱不同，它是根据分子、离子及其碎片的质量来分析的，其原理将在第 7 章中详细讨论。

图 1-1 至图 1-4 是四种波谱纵轴与横轴及波形的比较。

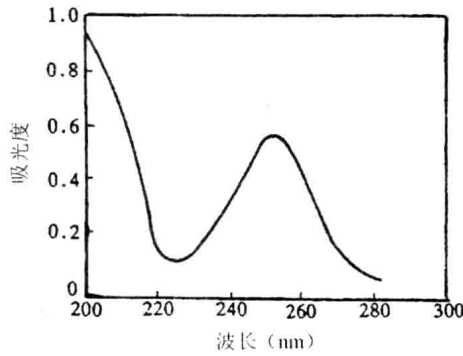


图 1-1 紫外光谱

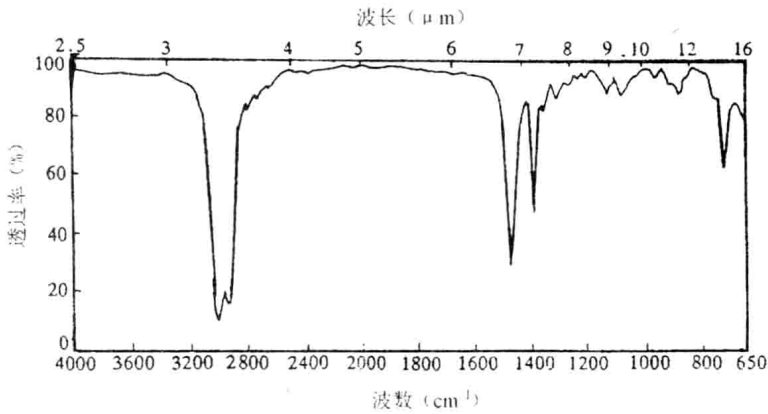


图 1-2 红外光谱

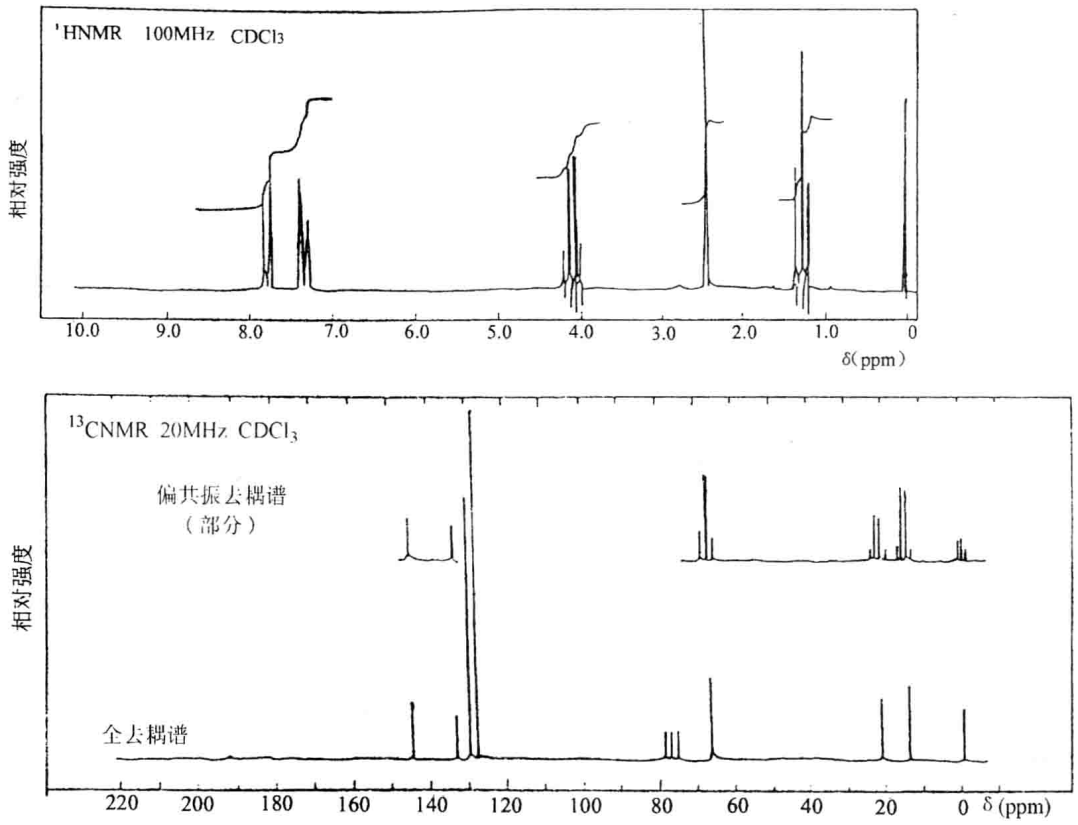


图 1-3 核磁共振氢谱 (上) 和碳谱 (下)

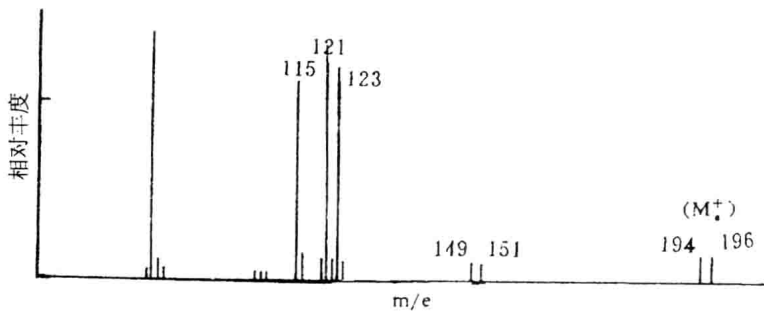


图 1-4 质谱

注: ppm = 1×10^{-6} 。

第 2 章 紫外光谱

2.1 分子吸收光谱

当使用具有一定波长范围的连续光照射化合物时，某些波长的光会被分子不同程度地选择吸收，在透射光中不再出现，从而形成吸收光谱。我们把这种光谱称为分子吸收光谱。用来测定分子吸收光谱的仪器叫做分光光度计，若使用的连续光波长为 200nm~400nm（近紫外区）及 400nm~800nm（可见光区），则称为紫外—可见分光光度计；若使用的连续光波长为 2.5 μ m~25 μ m（中红外区），则称为红外分光光度计。紫外光谱和红外光谱都是分子吸收光谱。

分子的总能量由下列 5 个组构成：

$$E_{\text{总}} = E_0 + E_m + E_e + E_v + E_r$$

E_0 ——分子内能，不随分子运动改变。

E_m ——分子在空间的平动动能，是温度的函数。它是连续变化的，但不是量子化的，所以不产生吸收光谱。

E_e ——分子的电子所具有的能量。

E_v ——分子中原子间的振动能量。

E_r ——分子绕质量中心转动的能量。

E_e 、 E_v 及 E_r 三种能量都是量子化的，也就是说，它们在不同能级间跃迁所产生的能量。

图 2-1 为双原子分子的能级示意图。

由图中我们可以得知，电子基态 (A) 与电子激发态 (B) 之间的电子跃迁能级为 ΔE_e ，其间隔最大，电子能级跃迁产生的吸收光谱为紫外吸收光谱。

$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda$$

ΔE ——某一频率光子的能量；

h ——普朗克常数， $6.624 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{S}$ ；

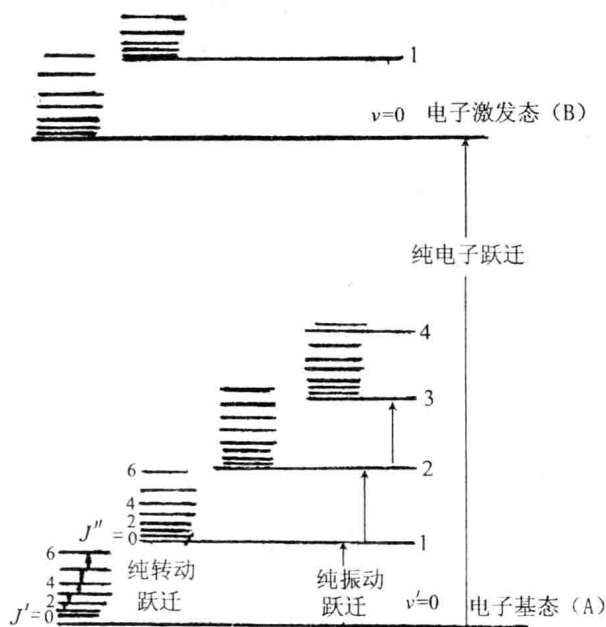


图 2-1 双原子分子能级示意图

ν ——光子的频率；

c ——光速；

λ ——光波波长。

由于电子能级跃迁产生的光谱在紫外可见光区，所以上述公式中的 $\Delta E = 1\text{eV} \sim 20\text{eV}$ 。该光谱是由价电子或外层电子跃迁产生的，因此，紫外可见光谱也叫做电子光谱，其中近紫外及可见光区的电磁波（ $200\text{nm} \sim 800\text{nm}$ ）在鉴定有机化合物的结构上较为有用。 $4\text{nm} \sim 200\text{nm}$ 区域一般称为远紫外区或真空紫外区，由于该区域内的电磁波易为空气中的水分、氧气及氮气所吸收，所以对仪器的要求很高，必须抽成高真空。该区内的吸收大多对结构分析价值不大， $200\text{nm} \sim 300\text{nm}$ 波长的紫外光又易于被玻璃吸收，因而在该区域内测定紫外光谱时只能用石英作试样的比色皿，通常也将该区域称为石英紫外区。

分子纯振动跃迁时的能级差 $\Delta E = 0.05\text{eV} \sim 1\text{eV}$ ，与此能量相应的光波波长约为 $1\mu\text{m} \sim 25\mu\text{m}$ 。由于这段区域的光谱属于中红外区，所以分子振动光谱也称为中红外光谱。

分子纯转动跃迁时的能级差 $\Delta E = 0.0035\text{eV} \sim 0.05\text{eV}$ ，其相应的波长为 $25\mu\text{m} \sim 350\mu\text{m}$ ，这段区域的光谱属于远红外区，其中部分进入微波区。由分子转动能级跃迁产生的吸收光谱也称为远红外光谱或微波谱。

由图 2-1 可见，电子能级 AB 间含有若干振动能级，振动能级内含有若干转动能级，所以电子能级的跃迁与振动能级的跃迁所产生的吸收光谱不是一条线或数条线，而是若干谱带，紫外可见光谱和红外光谱就是这样的谱带。

测定紫外光谱时，试样大多采用液体或溶液形式，这时分子间的强作用力或溶液中的溶剂作用会使得紫外光谱呈现的不是尖锐的吸收峰，而是一些平滑的吸收带，如图 2-2 所示。

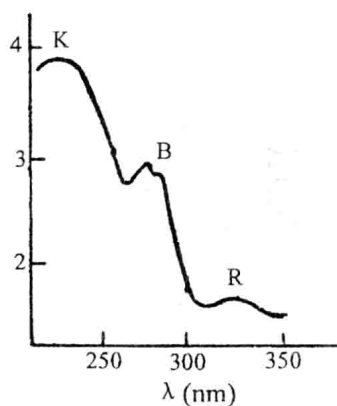


图 2-2 苯乙酮的紫外吸收光谱

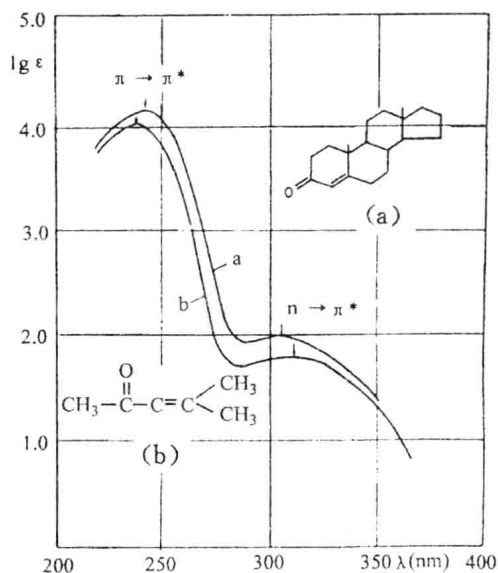


图 2-3 甾丸酮和异丙叉丙酮的紫外光谱