



“十二五”江苏省高等学校重点教材

现代仪器分析 实验技术

(下册)

孙东平 王田禾 纪明中 王 丽◎主编

 科学出版社

“十二五”江苏省高等学校重点教材

现代仪器分析实验技术(下册)

孙东平 王田禾 纪明中 王丽 主编

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书入选“十二五”江苏省高等学校重点教材。主要介绍在化学及材料科学、生命科学、环境科学等研究和应用领域中常用的现代仪器分析方法,包括有机及金属元素分析、色谱分析、质谱分析、光谱分析、磁共振波谱分析、X射线分析、电子显微分析、热分析等。教材内容有较大的覆盖面,重点介绍各种方法的原理、仪器结构与各部件功能、所能获得的信息及能解决的问题,有较强的可读性和参考价值。

本书可作为各大专院校应用化学、材料科学专业硕士生、本科生的教材,也可作为相关专业的实验指导教师、科技工作者的专业参考书。

图书在版编目(CIP)数据

现代仪器分析实验技术·下册/孙东平等主编.—北京:科学出版社, 2015.3

“十二五”江苏省高等学校重点教材

ISBN 978-7-03-043892-8

I. ①现… II. ①孙… III. ①仪器分析-实验-高等学校-教材
IV. ①O657-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 055159 号

责任编辑:周巧龙 孙静慧 / 责任校对:赵桂芬

责任印制:赵博 / 封面设计:铭轩堂

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

三河市骏志印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015年3月第一版 开本:B5(720×1000)

2015年3月第一次印刷 印张:21 1/4

字数:428 000

定价:48.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

序

分析化学在其形成一门独立学科的历史发展长河中,有过多次重大的变革。对于所建立的诸多分析化学学科的教程,因其发展阶段和所依据的理论和方法不同,或因其对象与目的而异,甚至依据所用的仪器不同,而有不同的命名,如:定性分析和定量分析;重量分析与容量分析;化学分析与仪器分析;还有质谱分析、色谱分析与波谱分析等。

一门学科的定位和内涵是与时俱进的。我在主编的《10000 个科学难题 化学卷》(“十一五”国家重点图书出版规划项目,科学出版社,2009 年)一书的“分析化学中的若干科学问题”一文中,对当代分析化学下了这样的定义:“分析化学是研究物质的组成和结构,确定在不同状态和演变过程中的化学成分、含量和分布的测量科学,是化学科学的分支学科。”它涵盖了对物质在演变过程中的时空动态变化中的量测,表述了分析化学这一学科所涉及的核心内容和根本任务,且具有普遍性。但是,对于所编写教科书的书名,则可不拘一格地命名,体现特色,各显神韵。书名取得好,犹如画龙点睛。

目前,基于物理的光、电、磁、显微光学和电子计算机的发展和应用,现代仪器分析的书不断更新换代,仪器分析新方法、新技术层出不穷。建立在现代分析仪器测试基础上,使分析化学内容和发展方向发生了根本性的改变。各类分析仪器与微型计算机的结合,又使得仪器自动化程度不断提高,分析检测更加准确、高速、便捷,数据处理与结果分析也更为方便,仪器分析的应用范围更为广泛。

编写一本仪器分析实验技术这样的教材,内容纷繁、体系各异,既要向学生阐明基础理论、方法原理,又要讲述实验方法、技术和仪器原理,还要涉及仪器操作和数据处理,以充分发挥现代科学仪器的优越性,甚至还要提出思考题拓宽学生思路;同时,教材要实现适应多个部门,为培养高级专门人才需要的目的。这确是一件繁重的任务。

由孙东平教授等统稿、纪明中等 22 位老师联合编写的《现代仪器分析实验技术》(上、下册),不落俗套,别具一格,以集体的智慧总结了长期教学实践的经验,撰写成一部适用于化学、材料、食品、生物、制药、商检等部门研究生需要的现代仪器分析实验课教程,旨在提高学生使用现代分析仪器解决各种科研问题的能力。该书按照现代分析仪器检测原理的不同,系统地介绍了各类现代分析仪器(光谱、色谱、质谱、能谱、微区及形貌分析以及热分析等)的基本理论,重点介绍了实验方面的相关技术与技能。针对目前分析仪器的发展现状,选取典型的分析仪器进行了

结构剖析与组成方面的扼要介绍,为每种仪器精心设计了若干可用于教学的实验项目,并对样品制备、仪器的具体使用方法进行了详细的介绍。此外,还介绍了使用较为广泛的仪器工作软件。全书内容翔实,图表齐全,阐述深入浅出,是一本便于阅读、通俗易懂、理论与实验相结合的优秀实验教材。该书内容紧跟现代分析仪器新方法、新技术进展步伐,如对红外光谱仪的各种配件、紫外-可见光谱积分球、液质联用仪、固体核磁共振仪等内容亦作了介绍,是一本值得推荐的优秀教材或相应的教学参考书。该书同时入选“十二五”江苏省高等学校重点教材,可供化学、材料、生物类专业高年级本科生、研究生使用及广大仪器分析工作者参考。谨此推荐。

是为序。

陈洪渊

中国科学院院士

2014年7月于南京

前 言

在培养化学化工、材料、环境、生物工程等专业性人才的过程中,现代分析仪器与实验技术是必不可少的专业基础课程。因为现代分析仪器课程的重要性以及现代分析仪器技术的迅速发展,南京理工大学组织专门从事化工、材料类科研的专家和从事仪器分析与实验技术教学的教师,为化工学院、环境与生物学院和材料学院的硕士研究生开设了现代分析仪器课程,到目前为止,该课程已连续开设四年,受益学生近 2000 人,使研究生在论文工作期间独立解决问题的能力得到很大提高,受到广大师生的一致好评。在开设该课程的同时,学校多方筹集资金成立现代仪器分析与测试中心,购买了色谱、光谱、质谱、能谱、电镜、核磁等现代大型分析仪器用于实验教学,使得每一名学生能亲手操作现代大型仪器,部分学生经过专门培训后,能独立操作仪器。同时分析测试中心也是研究生创新中心,中心的仪器在为教学服务的同时,也为科研提供检测服务。

在教学过程中,学校组织任课教师和专家编写用于实验教学的讲义,并根据实际情况进行了多次修改。实验讲义尽量避免烦琐的数学推导,重点介绍仪器的原理、基本结构与功能,并根据具体仪器编写仪器的操作规程,设计用于教学的相关实验,为研究生以后从事科学研究打下坚实的实验基础。讲义内容包括色谱分析(气相色谱、液相色谱、离子色谱、凝胶色谱)、色谱-质谱联用(气质联用、液质联用)技术、光谱分析(快速傅里叶红外、遥感红外、紫外-可见、荧光、拉曼、原子吸收、电感耦合等离子)、磁共振分析(液体核磁、固体核磁、电子顺磁)、微区显微技术(扫描电镜、透射电镜、原子力显微镜)、X 射线技术(X 射线粉末衍射、X 射线单晶衍射、X 射线光电子能谱)、热分析(热重、差示扫描)等内容。实验讲义经过认真整理、修改,准备正式出版。本书可作为化学化工类、材料类、环境工程类、生物工程类等专业人才培养的教材,也可供相关科研工作者参考。

本书的编者分别是纪明中(第 1、26 章)、吕梅芳(第 2 章)、肖乐勤(第 3 章)、宋东明(第 4 章)、赫五卷(第 5、8 章)、林娟(第 6 章)、杲明菊(第 7 章)、朱春林(第 9、24 章)、胡炳成(第 10、12 章)、王正萍(第 11 章)、唐婉莹(第 13、14 章)、江晓红(第 15 章)、李燕(第 16 章)、郝青丽(第 17 章)、杨绪杰(第 18 章)、武晓东(第 19 章)、陆路德(第 20 章)、白华萍(第 21 章)、卑凤利(第 22 章)、韩巧凤(第 23 章)、刘孝恒(第 25 章)、王淑琴(第 27、28 章)。

编 者

2014 年 10 月于南京

目 录

序

前言

第 13 章 紫外-可见光谱分析	379
13.1 概述	379
13.2 紫外-可见光谱基本原理	379
13.2.1 理论基础	380
13.2.2 紫外光谱中常用的名词术语	382
13.2.3 紫外吸收光谱与分子结构的关系	384
13.2.4 紫外光谱中的几种吸收带	384
13.3 仪器基本构成及其工作原理	385
13.3.1 仪器基本构成	385
13.3.2 仪器的工作原理	387
13.4 实验技术	389
13.4.1 结构分析	389
13.4.2 定量分析	389
13.4.3 比色皿的使用方法	391
13.4.4 溶剂效应	392
13.4.5 紫外-可见分光光度计的使用	392
13.5 实验结果解析	404
13.5.1 定性分析	404
13.5.2 结构分析	404
13.5.3 定量测定	405
13.5.4 氢键强度测定	406
13.5.5 纯度检查	406
13.5.6 反应动力学研究	406
13.5.7 异构体的确定	407
13.5.8 位阻作用的测定	407
13.5.9 络合物组成及稳定常数的测定	407
13.6 应用	407
13.6.1 在食品生产中的应用	407

13.6.2	在植物多糖含量测定中的应用	408
13.6.3	应用于水质测量	408
13.6.4	应用于药物分析	408
13.6.5	测定青蒿不同生长环境对青蒿素含量的影响	408
13.7	实验	409
实验一	紫外-可见分光光度计性能测试	409
实验二	氟试剂分光光度法测定水体中的氟化物	413
实验三	紫外-可见分光光度法测定苯酚	415
实验四	使用积分球测定阻燃布样品的镜反射和漫反射光谱	416
	参考书目	420
第 14 章	红外光谱分析	421
14.1	概述	421
14.2	红外光谱的基本原理	422
14.2.1	理论基础	422
14.2.2	红外吸收与分子结构	422
14.3	仪器的基本构成及工作原理	423
14.3.1	仪器的基本构成	423
14.3.2	工作原理	423
14.4	实验技术	426
14.4.1	实验方法选择	426
14.4.2	实验条件的选择及选择依据	426
14.4.3	红外光谱样品制备方法及一般要求	436
14.4.4	样品测试的一般步骤	441
14.5	实验结果解析	442
14.5.1	图谱的一般解析过程	442
14.5.2	红外吸收区域划分	442
14.6	仪器使用及谱图解析的一般要求	445
14.7	应用	445
14.7.1	在刑侦工作中用于物证鉴定	445
14.7.2	用于食品掺假的检测	446
14.7.3	用于胃镜样品无创、快速、准确的在体临床诊断的新方法	447
14.7.4	宝玉石检测中的应用	448
14.7.5	医学上应用于活体癌变细胞的鉴别	448
14.8	实验	449
实验一	液体、固体、气体、薄膜样品的透射谱测定	449

实验二 固体表面衰减全反射光谱的测定	453
实验三 高散射粉末样品漫反射光谱的测定	455
参考书目	456
第 15 章 激光共焦显微拉曼光谱分析	457
15.1 基本原理	457
15.2 基本构成及其工作原理	459
15.2.1 光源	460
15.2.2 外光路	460
15.2.3 色散系统	460
15.2.4 接收系统	461
15.2.5 信息处理与显示系统	461
15.3 实验技术	461
15.4 实验数据处理及谱图解析方法	464
15.5 应用	466
15.6 实验 柠檬酸钠粉末样品测试	468
参考书目	476
第 16 章 遥感傅里叶变换红外光谱分析	477
16.1 基本原理	478
16.1.1 红外辐射基本理论	478
16.1.2 红外辐射源的能量分布	482
16.1.3 双原子分子的振转光谱	484
16.2 遥感红外光谱仪的基本构成及其工作原理	487
16.2.1 遥感红外光谱仪的基本结构	487
16.2.2 两种遥感 FTIR 仪器简介	489
16.3 实验技术	492
16.3.1 空气中有机污染物的定性和定量分析	492
16.3.2 测量固体推进剂的燃烧火焰温度	494
16.3.3 遥感 FTIR 光谱仪的操作步骤	498
16.4 遥感 FTIR 的应用	499
16.4.1 对大气气体污染源的远距离无干扰测量	499
16.4.2 地球地物的红外发射率和温度	500
16.4.3 国防和军事方面的应用	500
16.4.4 森林火灾报警	501
16.4.5 火山喷发监测	502
16.4.6 工业排放气体的测定	502

16.5 实验	502
实验一 遥感 FTIR 测量模拟污染气体的浓度	502
实验二 遥感 FTIR 测量固体推进剂燃烧火焰的浓度	511
参考文献	515
第 17 章 荧光光谱分析	520
17.1 基本原理	521
17.2 光谱仪的基本构成及其工作原理	523
17.2.1 激发光源	524
17.2.2 单色器	524
17.2.3 检测器	525
17.2.4 读出装置	526
17.3 实验技术	526
17.3.1 实验方法的选择	526
17.3.2 实验条件的选择及选择依据	527
17.3.3 实验影响因素及其排除办法	527
17.3.4 对被测样品的要求	529
17.3.5 样品的制备要求	529
17.4 实验结果解析	530
17.5 应用	530
17.6 实验 罗丹明和聚苯胺的荧光光谱测试	530
参考文献	534
参考书目	534
第 18 章 液体核磁共振	535
18.1 核磁共振基本原理	535
18.1.1 自旋核的磁共振现象	535
18.1.2 核的化学位移	536
18.1.3 核的自旋偶合与核间偶合常数	537
18.1.4 谱峰的积分与积分面积	538
18.2 超导核磁共振仪基本构成及其工作原理	538
18.2.1 仪器基本构成	538
18.2.2 工作原理	541
18.3 实验 氘代氯仿为溶剂测定乙醇的 ¹ H NMR 谱	541
参考书目	546
附录 几种磁活性原子核的性质	546
第 19 章 固体核磁共振	547

19.1 固体核磁共振基本原理	547
19.1.1 核磁共振的基本原理及固体核磁中主要的相互作用	547
19.1.2 魔角旋转技术	549
19.1.3 交叉极化技术	550
19.1.4 固体核磁共振的异核去偶技术	552
19.1.5 固体核磁共振实验的特点	552
19.1.6 固体核磁共振应用简介	553
19.2 实验	553
参考文献	559
参考书目	559
第 20 章 电子顺磁共振	560
20.1 电子顺磁共振的基本原理	560
20.1.1 物质的磁性	560
20.1.2 名词术语	560
20.1.3 电子自旋产生自旋磁矩	560
20.1.4 电子自旋与磁矩在外磁场中的取向	561
20.1.5 塞曼分裂	563
20.1.6 电子顺磁(自旋)共振	563
20.1.7 EPR(ESR)谱线的表示	563
20.1.8 EPR(ESR)和 NMR 的比较	564
20.1.9 g 因子	565
20.1.10 超精细相互作用——超精细分裂	566
20.1.11 零场分裂	567
20.2 电子顺磁共振的研究对象	568
20.2.1 顺磁性金属离子	568
20.2.2 自由基	569
20.2.3 双基或多基	570
20.2.4 三重态分子	570
20.2.5 固体中的晶格缺陷	570
20.2.6 其他研究对象	570
20.3 EPR 的应用	570
20.3.1 $\cdot\text{CH}_2\text{OH}$ 的 EPR	571
20.3.2 环辛四烯负离子自由基的 EPR	571
20.3.3 爆炸法制备纳米金刚石的 EPR 谱	572
20.3.4 Cu^{2+} 的 EPR 谱	572

20.3.5	$^{51}\text{V}^{4+}$ 的 EPR 谱	573
20.3.6	$\text{Mn}^{2+}(\text{d}^5)$ 的 EPR 谱	573
20.4	电子顺磁共振仪器	574
20.4.1	主要技术指标	574
20.4.2	实验装置	575
20.4.3	实验步骤	575
20.4.4	注意事项	576
20.5	实验	577
	实验一 CuSO_4 与 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 的 EPR 测定	577
	实验二 爆炸法制备的纳米金刚石的 EPR 测定	577
	参考文献	577
	参考书目	578
第 21 章	X 射线衍射分析	579
21.1	基本原理	579
21.1.1	晶体学基本概念	579
21.1.2	X 射线衍射分析基础	580
21.2	基本构成及工作原理	584
21.2.1	X 射线源	584
21.2.2	测角器	584
21.2.3	检测器	585
21.3	实验技术	585
21.4	实验结果分析	587
21.4.1	三强线法	587
21.4.2	特征峰法	587
21.4.3	参考文献资料	587
21.4.4	计算机检索法	587
21.5	应用	588
21.5.1	物相分析	588
21.5.2	点阵常数的精确测定	589
21.5.3	应力的测定	589
21.5.4	晶粒尺寸和点阵畸变的测定	590
21.5.5	单晶取向和多晶织构测定	590
21.5.6	小角 XRD 的测定	590
21.5.7	定量分析	590
21.6	实验 TiO_2 粉末 X 射线衍射分析	591

参考文献	600
参考书目	601
第 22 章 单晶 X 射线分析	602
22.1 简介	602
22.1.1 晶体的特征	602
22.1.2 单晶结构分析简史	602
22.1.3 晶体结构分析的重要性	603
22.1.4 结构分析的过程	604
22.2 晶体培养与单晶衍射实验	605
22.2.1 单晶的培养	605
22.2.2 晶体的挑选与安置	606
22.2.3 面探测器衍射仪与数据收集	609
22.2.4 数据的还原与校正	613
参考书目	613
第 23 章 X 射线光电子能谱	614
23.1 基本原理	614
23.2 仪器结构及工作原理	616
23.3 应用简介	619
23.4 XPS 的特点及主要用途	622
23.4.1 特点	622
23.4.2 用途	622
23.5 实验 用 X 射线光电子能谱仪分析硫化铜的表面结构与组成	622
参考文献	627
参考书目	627
第 24 章 扫描电子显微镜	628
24.1 工作原理	628
24.2 主要结构	628
24.2.1 电子光学系统	628
24.2.2 图像显示和记录系统	631
24.2.3 真空系统	632
24.2.4 X 射线能谱分析系统	633
24.3 扫描电子显微镜主要特点	634
24.4 影响图像形成和质量的主要因素	634
24.4.1 影响图像形成的因素	634

24.4.2 影响图像细节清晰的因素	635
24.5 主要操作步骤	636
24.5.1 开机及样品准备	636
24.5.2 图像调节过程	636
24.5.3 拷贝图像	637
24.5.4 关机	637
24.6 试样的制备	637
24.6.1 样品要求	637
24.6.2 金属试块样品	637
24.6.3 薄膜样品	637
24.6.4 粉末样品	638
24.6.5 生物样品	638
24.6.6 镀膜	638
24.7 实验 多孔氧化铝模板制备的金纳米线的形貌分析	638
参考文献	641
参考书目	641
第 25 章 透射电子显微镜	642
25.1 基本原理	642
25.2 透射电子显微镜的基本结构及工作原理	643
25.2.1 电子枪	644
25.2.2 照明系统	645
25.2.3 放大、成像系统	646
25.2.4 观察室和照相室(记录系统)	647
25.3 透射电子显微镜在科学研究中的应用	647
25.3.1 材料的常规观测及高分辨成像	647
25.3.2 电子衍射花样及其形成原理	648
25.4 实验 透射电子显微镜用于无机纳米材料的检测	651
参考文献	657
参考书目	657
第 26 章 原子力显微镜	658
26.1 简介	658
26.2 原子力显微镜结构	659
26.3 原子力显微镜的工作模式	660
26.4 原子力显微镜样品的要求	661
26.5 实验	662

实验一 黄原胶分子形貌的原子力显微镜研究	662
实验二 原子力显微镜在纳米材料表面形貌及粒度上的研究	663
实验三 原子力显微镜扫描成像 DNA 分子	665
参考文献	666
参考书目	667
第 27 章 热重分析	668
27.1 基本原理	669
27.2 热重分析仪的基本构成及其工作原理	670
27.2.1 仪器的基本构成	670
27.2.2 工作原理	674
27.3 实验技术	674
27.3.1 实验方法的选择	674
27.3.2 实验条件的选择及选择依据	675
27.3.3 实验影响因素及其排除方法	676
27.3.4 样品制备方法及一般要求	678
27.4 实验结果解析	679
27.5 应用	680
27.6 实验 用热重法研究草酸镍在 N_2 气氛中的热分解反应	681
参考书目	684
第 28 章 差示扫描	685
28.1 基本原理	685
28.2 差示扫描量热仪的基本构成及其工作原理	687
28.2.1 仪器的基本构成	687
28.2.2 工作原理	691
28.3 实验技术	692
28.3.1 实验方法的选择	692
28.3.2 实验条件的选择及选择依据	692
28.3.3 实验影响因素及其排除方法	693
28.3.4 样品制备方法及一般要求	695
28.4 实验结果解析	696
28.5 应用	698
28.6 实验 用差示扫描量热法研究草酸钴残渣催化高氯酸铵的热分解 反应	700
参考书目	702

第 13 章 紫外-可见光谱分析

13.1 概 述

紫外-可见光谱法 (ultraviolet-visible spectrometry, UV-Vis) 是研究在 200~800nm 波长光区内分子吸收光谱的一种方法。它广泛地用于无机和有机质的定性和定量测定,其灵敏度和选择性较好。紫外-可见光谱法使用的仪器设备简单,易于操作。

分子吸收紫外-可见光获得的能量足以使价电子发生跃迁,因此由价电子跃迁产生的分子吸收光谱称为紫外-可见光谱或电子光谱。紫外吸收光谱是由于分子中价电子的跃迁而产生的,所以又称为电子光谱。由于电子跃迁的同时,伴随着振动能级和转动能级的跃迁,所以紫外光谱为带状光谱。紫外吸收光谱的波长范围是 10~400nm,其中 10~200nm 为远紫外区(这种波长的光能够被空气中的氮、氧、二氧化碳和水吸收,因此只能在真空中进行研究,所以这个区域的吸收光谱称真空紫外),200~400nm 为近紫外区,一般的紫外光谱是指近紫外区。波长在 400~800nm 范围的称为可见光谱。常用的分光光度计一般包括紫外及可见两部分,波长在 200~800nm(或 200~1000nm)。

紫外-可见分光光度法有如下特点:①仪器和操作简单、费用成本低、速度快;②灵敏度高,最低检出浓度可达 10^{-6} g/mL;③精密度和准确度较高,其相对误差可达到 1%~2%,这满足了对微量组分的测定要求;④选择性较好;⑤用途广泛,广泛用于化工、环境等方面。

紫外-可见光谱不仅可以进行定量、定性及结构分析,还能进行配合物的组分及稳定常数、官能团鉴定、相对分子质量测定等。

13.2 紫外-可见光谱基本原理

紫外-可见吸收光谱遵从朗伯-比尔定律:当一束平行单色光通过含有吸光物质的稀溶液时,溶液的吸光度与吸光物质浓度、液层厚度乘积成正比,即

$$A = kcl \quad (13-1)$$

式中, k 为吸光物质的本性,与入射光波长及温度等因素有关; c 为吸光物质浓度; l 为透光液层厚度。当 c 的单位取 mol/L, l 的单位为 cm 时, k 常用 ϵ 表示。 ϵ 称为摩尔吸光系数,单位为 $L \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ 。为简便起见,本书后续部分在提及 ϵ 时,均略去单位。

朗伯-比尔定律是紫外-可见分光光度法的理论基础。

13.2.1 理论基础

紫外可见吸收研究的是分子内原子在平衡位置附近的振动、分子绕其重心的转动和价电子运动。所以分子的能量 E 等于以上三项之和：

$$E = E_e + E_v + E_r \quad (13-2)$$

式中, E_e 、 E_v 、 E_r 分别代表电子能、振动能和转动能。

分子从外界吸收能量后, 就引起分子能级的跃迁, 即从基态能级跃迁到激发态能级。分子吸收能量具有量子化的特征：

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (13-3)$$

紫外吸收光谱是由分子中的电子跃迁产生的。按分子轨道理论, 在有机化合物分子中这种吸收光谱取决于分子中成键电子的种类、电子分布情况, 根据其性质不同可分为三种电子: ①形成单键的 σ 电子; ②形成不饱和键的 π 电子; ③氧、氮、硫、卤素等杂原子上的未成键的 n 电子。如图 13-1 所示。

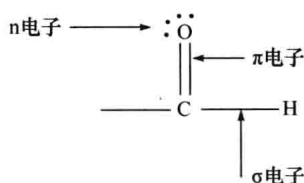


图 13-1 基团中的 σ 、 π 、 n 电子

当它们吸收一定能量 ΔE 后, 将跃迁到较高的能级, 占据反键轨道。分子内部结构与这种特定的跃迁是有密切关系的, 使得分子轨道分为成键 σ 轨道、反键 σ^* 轨道、成键 π 轨道、反键 π^* 轨道和 n 轨道, 其能量由低到高的顺序为: $\sigma < \pi < n < \pi^* < \sigma^*$, 如图 13-2 所示。

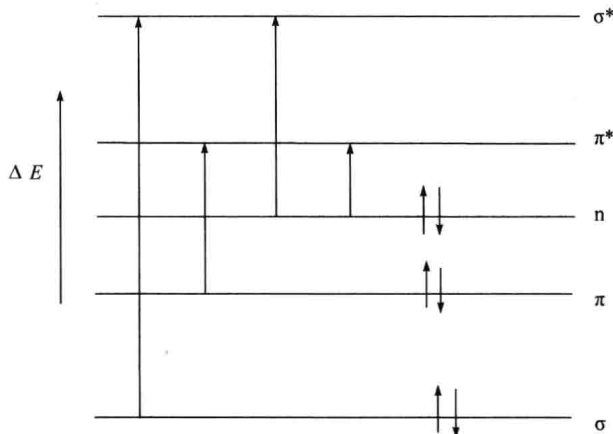


图 13-2 分子轨道中的能量跃迁示意图