



高等职业教育“十二五”规划教材

[高职教材]

现代仪器分析技术

[适用于食品、药品及饲料分析检验专业]

主编 李自刚 弓建红

MODERN INSTRUMENT ANALYTICAL TECHNIQUE



中国轻工业出版社

高等职业教育“十二五”规划教材

现代仪器分析技术

主 编 李自刚 弓建红

副主编 赵玉丛 樊国燕 张荷丽 胡 平



图书在版编目 (CIP) 数据

现代仪器分析技术/李自刚, 弓建红主编. —北京: 中国
轻工业出版社, 2011. 9

高等职业教育“十二五”规划教材

ISBN 978-7-5019-8388-9

I. ①现… II. ①李… III. ①仪器分析 - 高等职业
教育 - 教材 IV. ①0657

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 158727 号

责任编辑: 白洁

策划编辑: 白洁 责任终审: 孟寿萱 封面设计: 锋尚设计

版式设计: 宋振全 责任校对: 晋洁 责任监印: 张可

出版发行: 中国轻工业出版社 (北京东长安街 6 号, 邮编: 100740)

印 刷: 河北高碑店市德裕顺印刷有限责任公司

经 销: 各地新华书店

版 次: 2011 年 9 月第 1 版第 1 次印刷

开 本: 787 × 1092 1/16 印张: 18.25

字 数: 430 千字

书 号: ISBN 978-7-5019-8388-9 定价: 32.00 元

邮购电话: 010-65241695 传真: 65128352

发行电话: 010-85119835 85119793 传真: 85113293

网 址: <http://www.chlip.com.cn>

Email: club@chlip.com.cn

如发现图书残缺请直接与我社邮购联系调换

110300J2X101ZBW

编委名单

主 编	李自刚	弓建红			
副主编	赵玉丛	樊国燕	张荷丽	胡 平	
编 委	舒友琴	杨新玲	王建玲	王新民	魏志华
	彭爱娟	侯学会	丁德刚	徐 军	辛 婷

前　　言

本书由多名在高等职业教育领域从事多年食品、药品及饲料分析检验与生产的职业教育专家编写，是现代分析仪器技术知识学习与学生技能培养相结合的新教材，是近 20 年现代分析仪器技术高等职业教育实践教学和部分科研成果的总结，具有学习与实用相结合的特色。

本书充分体现了高等职业教育以全面素质为基础、以能力为本位培养高素质技能型专门人才的思想，即该书在注重现代仪器分析技术知识学习的同时，更注重培养学生在食品、药品及饲料分析检验方面的综合应用能力、实践能力、创新能力和职业能力。

本书主要介绍了近几年分析领域常用的仪器及发展前景好的分析方法的基本原理、仪器的基本结构、操作方法及注意事项、仪器的安装要求和保养维护等知识。在编写过程中，注意引入新方法和新技术，为学生在今后严格进行食品、药品及饲料质量检验、制定新产品质量标准等提供科学依据以及为工业新产品的生产、经营、管理等实际工作奠定基础，具有较强的科学性、实用性和先进性。本书所选取的技能操作训练内容都是教学领域的职业教育专家知识和经验的结晶，其不但实用，且更加适用。

本书不仅适用于各类高等职业教育食品、药品及饲料分析检验专业教学使用，也可作为食品、药品及饲料分析检验相关岗位的岗前培训和继续教育的教材或供相关科研工作者、技术人员参考。

本书是该领域许多长期工作在仪器分析理论与实验教学第一线的教师和教辅人员共同辛勤劳动的成果。本书的前言、绪论、项目一、项目七、项目九由樊国燕、赵玉丛和李自刚编写；项目二由杨新玲和李自刚编写；项目三由舒友琴和李自刚编写；项目四由侯学会、赵玉丛和李自刚编写；项目五和项目六由张荷丽和李自刚编写；项目八由彭爱娟和樊国燕编写；项目十由赵玉丛和李自刚编写。李自刚、弓建红、赵玉丛、樊国燕、张荷丽、胡平做了全书的统稿工作。本书的其他编委在本书的理论知识的编写以及实训题材的选题上都作出了贡献，本校仪器分析课程组的其他同仁已退休或因其他工作任务繁忙，未能参与本书编写工作，但是他们都曾为本书的形成和完善付出过劳动，本书也浸透了他们的心血和汗水。

由于本书编者的学识水平所限，书中的缺点和错误在所难免，敬请各位专家和读者批评指正。

编　者
于郑州牧业工程高等专科学校

目 录

绪 论.....	1
项目一 一般光学分析技术.....	5
任务一 理论学习	5
第一节 光学分析法的基础.....	5
第二节 旋光分析技术.....	8
第三节 折光分析技术	12
习题	16
任务二 技能操作训练	17
训练一 旋光分析技术测定葡萄糖注射液中葡萄糖的含量.....	17
训练二 味精中谷氨酸钠的测定	18
任务三 技能考核	19
1. WZZ 型数显自动旋光仪操作技能量化考核标准	19
2. 阿贝氏折光计操作技能量化考核标准	20
项目二 紫外 - 可见吸收光谱分析技术	22
任务一 理论学习	22
第一节 基本原理	22
第二节 紫外 - 可见分光光度计	27
第三节 紫外 - 可见吸收光谱分析技术的应用	31
第四节 紫外 - 可见吸收光谱分析实验技术	36
习题	41
任务二 技能操作训练	42
训练一 紫外 - 可见分光光度计的校正	42
训练二 邻二氮菲分光光度法测定铁	44
训练三 茶饮料中茶多酚含量测定	45
训练四 分光光度法测定饲料中的总磷	46
训练五 维生素 B ₁₂ 注射液的含量测定	48
训练六 可见分光光度法测定大山楂丸中总黄酮的含量	49
任务三 技能考核	50
紫外 - 可见分光光度计操作技能量化考核标准	50
项目三 分子荧光分析技术	52
任务一 理论学习	52

第一节 分子荧光光谱的基本原理	52
第二节 荧光分光光度计	58
第三节 荧光分析的应用	61
习题	63
任务二 技能操作训练	64
训练一 食品中硫胺素（维生素B ₁ ）的测定	64
训练二 蔬菜、水果及其制品中总维生素C的测定	67
训练三 鱼粉中乙氧基喹的测定	68
任务三 技能考核	70
分子荧光分光光度计操作技能量化考核标准	70
 项目四 红外光谱分析技术	71
任务一 理论学习	71
第一节 概述	71
第二节 基本原理	72
第三节 红外光谱图及其解析	78
第四节 红外光谱仪	84
第五节 红外光谱分析的实验技术	87
习题	91
任务二 技能操作训练	92
训练一 阿司匹林的红外光谱测定	92
训练二 奶粉中苯甲酸钠的含量测定	93
任务三 技能考核	95
红外光谱仪操作技能量化考核标准	95
 项目五 原子光谱分析技术	96
任务一 理论学习	96
第一节 重金属元素的一些基本知识	96
第二节 原子吸收光谱基本原理	98
第三节 原子吸收分光光度计	101
第四节 原子吸收分析实验技术	116
第五节 原子荧光技术分析简介	123
习题	126
任务二 技能操作训练	127
训练一 原子吸收光谱法测定自来水中钙、镁的含量	127
训练二 火焰原子吸收法测定饲料中铁、铜、锰、锌、镁	129
训练三 食品中总汞及有机汞的测定——原子荧光光谱分析法	132
任务三 技能考核	134

原子吸收光谱仪操作技能量化考核标准	134
项目六 电化学分析技术	136
任务一 理论学习	136
第一节 概述	136
第二节 电位分析技术	137
第三节 电位滴定技术	150
第四节 电导分析技术	153
第五节 永停滴定法	158
习题	162
任务二 技能操作训练	163
训练一 畜产品酸度的测定	163
训练二 用酸度计测定药物液体制剂的 pH	165
训练三 电位滴定法测定酱油中氨基酸态氮的含量	166
训练四 自动电位滴定法测定敌百虫原粉的有效成分	167
训练五 白砂糖电导灰分的测定	168
训练六 饲料中氟的测定	169
任务三 技能考核	171
1. 酸度计操作技能量化考核标准	171
2. 自动电位滴定仪操作技能量化考核标准	172
项目七 薄层色谱分析技术	174
任务一 理论学习	174
第一节 色谱法概述	174
第二节 薄层色谱分析的基本原理	175
第三节 薄层的制备	177
第四节 薄层色谱分析技术的应用	180
第五节 薄层扫描技术	182
习题	184
任务二 技能操作训练	184
训练一 薄层色谱技术分离鉴定 APC 片中的主要成分	184
训练二 盐酸普鲁卡因注射液中对氨基苯甲酸的检查	186
训练三 薄层色谱定性分析（五味子的定性鉴别）	187
训练四 食品中苯甲酸、山梨酸的测定	188
训练五 薄层色谱法测定饲料中黄曲霉毒素 B ₁ 的含量	189
任务三 技能考核	192
薄层色谱分析技术操作技能量化考核标准	192

项目八 气相色谱分析技术	194
任务一 理论学习	194
第一节 概述	194
第二节 气相色谱分析技术的基本原理	195
第三节 气相色谱仪	199
第四节 气相色谱固定相及其选择	207
第五节 气相色谱分析实验技术	209
习题	216
任务二 技能操作训练	217
训练一 填充色谱柱柱效能的测定	217
训练二 气相色谱技术测定冠心苏合丸中冰片的含量	218
训练三 甲苯的气相色谱分析——内标法定量	219
训练四 食品中 BHA 和 BHT 的测定	221
训练五 饲料中六六六、滴滴涕的测定	223
任务三 技能考核	225
气相色谱仪操作技能量化考核标准	225
项目九 高效液相色谱分析技术	227
任务一 理论学习	227
第一节 概述	227
第二节 基本原理	228
第三节 高效液相色谱仪	234
第四节 高效液相色谱技术的应用	244
第五节 氨基酸分析仪	246
习题	251
任务二 技能操作训练	252
训练一 高效液相色谱仪色谱柱的性能考察及分离度测试	252
训练二 HPLC 技术测定甲砜霉素原料的含量	253
训练三 高效液相色谱技术测定双黄连口服液中黄芩苷的含量	255
训练四 高效液相色谱定性及定量分析 ——中药赤芍中芍药苷的定性鉴别和含量测定（色谱分析设计实验）	255
训练五 维生素 A 和维生素 E 的测定	256
训练六 生鲜牛乳中三聚氰胺的测定	259
训练七 高效液相色谱法测定饲料中甲砜霉素含量	260
训练八 饲料中氨基酸的测定方法	261
任务三 技能考核	263
高效液相色谱仪操作技能量化考核标准	263

项目十 质谱分析技术	265
任务一 理论学习	265
第一节 概述	265
第二节 质谱仪器	265
第三节 质谱联用技术	274
习题	276
任务二 技能操作训练	278
生鲜牛乳中三聚氰胺的测定	278
参考文献	280

绪 论

一、仪器分析方法的分类

分析化学包括化学分析和仪器分析。化学分析利用化学反应及其计量关系进行（如酸碱滴定法），发展较早，是经典的分析方法。

仪器分析是利用精密仪器测量物质的某些物理或物理化学性质（如相对密度、光学性质、电化学性质等）以确定其化学组成、含量及化学结构，又称为物理和物理化学分析法。仪器分析在近几十年发展迅速，其方法门类众多，且能够适应各个领域提出的新任务，已成为现代分析化学的主干。

仪器分析通常根据所测量的物质性质来分类，其主要包括：光学（谱）分析、色谱分析、电化学分析、质谱分析等。下面简单介绍一下前三种方法。

1. 光学（谱）分析

光学（谱）分析是利用物质的分子或原子与光的相互作用特性（如吸收、发射、散射、干涉、衍射等）与物质结构和组成关系进行定性分析及定量检测，可分为一般光学分析（折光与旋光分析等）、光谱分析（紫外-可见分光光度法、红外分光光度法、原子吸收分光光度法、荧光分光光度法等）两大类。

2. 色谱分析

色谱分析是以混合物各组分在互不相溶的两相（固定相与流动相）中吸附、分配或其他亲和作用等性能的差异作为分离依据的分析方法，又可分为薄层色谱法（TLC）、气相色谱法（GC）和高效液相色谱法（HPLC）等。

3. 电化学分析

电化学分析是以电化学理论和被测物质溶液的各种电化学性质（电极电位、电流、电量、电导或电阻等）为基础建立起来的分析方法。它通常是将分析试样溶液构成一化学电池（电解池或原电池），然后根据所组成电池的某些物理量（如两电极间的电位差、电位、电量、电阻等）与其化学量之间的内在联系进行定性或定量分析。电化学分析又分为电位分析法、电导分析法、电解分析法、库仑分析法、极谱分析法和伏安法等。

二、仪器分析的特点

1. 灵敏度高

仪器分析法的灵敏度远高于化学分析，故可以测定含量极低（ 10^{-6} ，百万分之一； 10^{-9} ，十亿分之一；甚至 10^{-12} ，万亿分之一）的组分。因此仪器分析应用广泛，特别适用于物质中杂质的测定和环境监测中痕量物质的测定。

2. 选择性好

仪器分析法适于复杂组分试样的分析。仪器分析法的选择性比化学分析法好得多，所以仪器分析方法可进行多组分的同时测定。很多仪器分析方法还可以通过选择或调整测定条件，在测定共存组分时，相互间不产生干扰。

3. 分析迅速

仪器分析法适于批量试样分析。用精密分析仪器测量时速度很快，加上计算机技术的应用，分析操作的自动化，结果的自动记录及数据的自动处理，使分析更为迅速。试样经预处理后直接上机测定，仅需数十秒至数分钟即可得出分析结果。有些仪器分析方法如色谱分析，可一次测定多种组分。采用自动化系统，还可在很短时间内分析批量同种试样。

4. 适于痕量组分的测定

仪器分析相对误差较大，但测定痕量组分时，绝对误差则较小，因此仪器分析虽不适用于测定常量组分（被测组分的百分含量大于1%），但适用于测定痕量组分（被测组分的百分含量小于0.01%）。

5. 适应性强，应用广泛

仪器分析方法有数十种之多，方法功能各不相同，所以仪器分析的适应性强，不但可以定性和定量，还可用于结构状态、空间分布、微观分布等有关特征分析，以及进行微区分析、遥测分析等。仪器分析灵敏度极高，所需试样量很少，有时只需数微克，甚至可以在不损坏试样的情况下进行无损分析，这对活组织分析、考古分析等具有重要意义。此外，仪器分析还可用于化学基础理论研究和物理化学常数的测定，如络合物的组成和不稳常数的测定等。

6. 易于自动化

仪器分析使用复杂的精密仪器测量，被测组分的理化性质经检测器可转化为电信号而记录下来，特别是将微机与仪器相连接，很多操作过程可实现自动化。不但可以处理数据、运算分析结果，而且可以由仪器准确无误地进行全部操作，包括分析条件控制、工作曲线校准、分析程序控制等。如设计出自动化体系，则可实现全部自动化，将大大提高例行分析速度。

从仪器分析上述特点来看，其与化学分析相比有很多优点。虽然如此，化学分析仍然保留有一定的地位。首先各种精密分析仪器都有一定的局限性，功能上不可能适用于所有试样。一般情况下，特别是生产部门，不可能具备多种分析仪器；加之精密仪器昂贵，需要较好的工作环境，在安装调试和维护保养等方面花费也很大，因此仪器分析的普遍推广受到了一定的限制。而且仪器分析在测量前一般要进行预处理（仪器分析的一般过程是：样品预处理、分离、样品信号的产生、信号的检测、信号的加工处理、测定的显示、结果的分析计算），其中主要是化学分析步骤，如试样的溶解，共存组分的掩蔽、分离等；另外仪器分析中需要纯化学品作为标准进行对照分析，这些化学品的准确含量都要用化学分析来确定。所以，仪器分析虽有其优越性，但在实际分析试样时仍离不开化学分析手段。何况仪器分析的相对误差大，一般适用于痕量组分的测定，常量组分通常还需用化学分析测定。

由此看来，仪器分析和化学分析是相辅相成不可偏废的。化学分析是分析化学的基础，仪器分析是分析化学的主干，只有在化学分析的基础上仪器分析才能发挥其独特性能。因此在解决实际问题时，应根据具体情况，参照各种方法的特点选择适宜的分析方法。

三、仪器分析的发展趋势

现代科学的进步和工业生产的发展，不仅要求分析化学应提高准确度、灵敏度和分析速度，而且还不断提出更多的新课题、新任务，通过分析提供更多、更复杂的信息。包括从常

量分析到超微量分析；从整体成分分析到微区分析、表面、区域分析；从成分分析到结构分析、状态分析；从静态分析到快速化学反应的跟踪等。对近代分析化学的这些新任务和新要求，仪器分析有很大的适应性和发展潜力。因此，仪器分析已成为近代分析化学的发展方向，其发展趋势概括起来有以下几个特点。

1. 方法创新

现代科学技术相互交叉、渗透，各种新技术的引入、应用等，使仪器分析不断开拓新领域、创立新方法。如电感耦合等离子体发射光谱、傅里叶变换红外光谱、傅里叶变换核磁共振波谱、激光拉曼光谱、激光光声光谱等。

2. 分析仪器的智能化

将计算机技术与分析仪器结合，实现分析操作的自动化和智能化，是仪器分析的一个非常重要的发展趋势。在分析工作者的指令控制下，计算机不仅能处理分析结果，而且还可以优化操作条件、控制完成整个分析过程，包括进行数据采集、处理、计算等，直至动态CRT显示和最终曲线报表。目前计算机技术对仪器分析的发展影响极大，已成为现代分析仪器一个不可分割的部件。

3. 仪器联用技术

试样的复杂性、测量难度、要求信息量及响应速度在不断提高，这就需要将多种分析方法结合起来，可以取长补短，起到方法间的协同作用，从而提高方法的灵敏度、准确度及对复杂混合物的分辨能力，同时还可获得两种手段各自单独使用时所不具备的某些功能，因而仪器联用技术已成为当前仪器分析方法的主要方向之一。例如，分离方法（GC、HPLC）与鉴定方法（MS、IR）的联用技术。

4. 新型动态检测和非破坏性分析

运用先进的技术和分析原理，研究并建立有效而实用的实时、在线和高灵敏度、高选择性的新型动态分析检测和非破坏性分析，是仪器分析发展的一个主流。目前，多种生物传感器如酶传感器、免疫传感器、DNA传感器、细胞传感器等不断涌现，为活体分析带来了机遇。

5. 扩展时空多维信息

现代仪器分析的发展已不局限于将待测组分分离出来进行分析和测量。随着人们对客观物质认识的深入，某些过去不熟悉的领域，如多维、不稳态、边界条件等，也逐渐提到日程上来，现代核磁共振光谱、质谱、红外光谱等分析法可提供有机物分子的精细结构、空间构型及瞬态变化等信息，为人们对化学反应历程及生命过程的认识提供了重要的基础。

总之，仪器分析正向着快速、准确、自动、灵敏及适应特殊分析的方向快速发展。

习题

1. 名词解释

光谱分析，色谱分析，电化学分析，仪器联用技术。

2. 填空题

(1) 分析化学包括_____和_____。

(2) 仪器分析灵敏度极_____, 所需试样量很_____, 有时只需_____。

(3) GC 是_____, HPLC 是_____。

(4) 将_____与_____相连接，很多操作过程可实现自动化。

3. 简答题

- (1) 仪器分析与化学分析相比有哪些优点?
- (2) 现代仪器分析的发展趋势是什么? 并举例说明。
- (3) 仪器分析的一般过程是什么? 请简要说明。

项目一 一般光学分析技术

任务一 理论学习

第一节 光学分析法的基础

光学分析法主要是根据物质发射的电磁辐射或物质与电磁辐射相互作用后所产生的辐射信号或发生的信号变化来测定物质的性质、含量和结构的一类分析方法。本节理论基础不仅适用于本项目，对于项目二的紫外-可见吸收光谱分析技术、项目三的分子荧光分析技术、项目四的红外光谱分析技术、项目五的原子光谱分析技术同样适用。

光学分析方法包含三个主要过程，即能源提供能量，能量与物质相互作用，产生被检测信号。

一、电磁辐射与电磁波谱

1. 电磁辐射

从 γ 射线直至无线电波都是电磁辐射或称电磁波，所以光是电磁辐射的一部分。电磁辐射是一种以巨大速度通过空间，而不需要任何物质作为传播媒介的光（量）子流，它具有波粒二象性。电磁辐射在传播过程中以及反射、衍射、干涉、折射和偏振等现象中，表现为波动性。它的特点，主要是每个光子具有一定波长（ λ ）、频率（ ν ）和波数（ σ ）。在一定介质中，上述参数之间的关系为：

$$\nu = c/\lambda \quad \sigma = 1/\lambda \quad (1-1)$$

式中， c 是电磁辐射在真空中的传播速度，所有电磁辐射在真空中的速度相同， $c = 2.997925 \times 10^{10} \text{ cm/s}$ 。在其他介质中，由于电磁辐射与介质的作用，传播速度稍比在真空中小一些。

频率（ ν ）是每秒钟内光波振动次数，单位 Hz。

波数（ σ ）是每厘米长度中波的数目，单位 cm^{-1} 。

波长（ λ ）是指相同振动相位的两波间，从某一波长上任一点到相邻波上相应点之间的线性距离，单位 nm。

例如，波长为 200nm 的光的频率与波数分别是：

$$\text{频率} = 3 \times 10^{10} / 200 \times 10^{-7} = 1.5 \times 10^{15} \text{ (Hz)}$$

$$\text{波数} = 1 / 200 \times 10^{-7} = 50000 \text{ cm}^{-1}$$

2. 辐射能

电磁辐射与物质相互作用时，所表示出来的发射和吸收现象只能用微粒性解释，这时电磁辐射被看做一粒一粒不连续的光子流。其主要特征是每个光子具有能量（ E_L ），光子的能量与频率成正比，它与频率、波长和波数的关系为：

$$E_L = h\nu = hc/\lambda = hc\sigma \quad (1-2)$$

式中， h 是普朗克常数，其值等于 $6.6262 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 。可见波长越长，光子能量越小；

波长越短，光子能量越大。也即随着波长增加，辐射的波动性变得明显；而随着波长减小，辐射的微粒性表现得较明显。上式把电磁辐射的波粒二象性联系在一起。能量常用电子伏(eV)、尔格(erg)、焦耳(J)或卡(cal)作单位，它们的换算关系为：

$$1\text{eV} = 1.602189 \times 10^{-12} \text{erg} = 1.6021892 \times 10^{-19} \text{J} = 3.827 \times 10^{-20} \text{cal}$$

3. 电磁波谱

所有电磁辐射在性质上是完全相同的，它们之间的区别仅在于波长或频率不同，若把电磁辐射按照波长大小顺序排列起来，就称为电磁波谱。表1-1列出了各电磁波谱区的名称、波长范围等。虽然不同文献中提供的不同波谱的界限往往略有不同，但不同区的辐射均可用于物质的分析。

表 1-1 电磁波谱的分类

辐射区段	波长范围	波数范围/cm ⁻¹	跃迁能级类型	分析方法
γ射线	0.01 ~ 0.1nm	$1 \times 10^{11} \sim 1 \times 10^{10}$	原子核能级	放射化学分析法
X射线	0.1 ~ 10nm	$1 \times 10^{10} \sim 1 \times 10^6$	内层电子能级	X射线光谱法
光学光谱区	远紫外光	$10 \sim 200\text{nm}$	$1 \times 10^6 \sim 5 \times 10^4$	价电子或成键电子能级
	近紫外光	$200 \sim 400\text{nm}$	$5 \times 10^4 \sim 2.5 \times 10^4$	价电子或成键电子能级
	可见光	$400 \sim 760\text{nm}$	$2.5 \times 10^4 \sim 1.3 \times 10^4$	价电子或成键电子能级
	近红外光	$0.76 \sim 2.5\mu\text{m}$	$1.3 \times 10^4 \sim 4 \times 10^3$	分子振动能级
	中红外光	$2.5 \sim 50\mu\text{m}$	$4 \times 10^3 \sim 2 \times 10^2$	原子振动/分子转动能级
	远红外光	$50 \sim 1000\mu\text{m}$	$2 \times 10^2 \sim 1 \times 10$	分子转动、晶格振动能级
微波	$0.1 \sim 100\text{cm}$	$1 \times 10 \sim 1 \times 10^{-2}$	电子自旋、分子转动能级	微波光谱法
无线电波	$1 \sim 1000\text{m}$	$1 \times 10^{-2} \sim 2 \times 10^{-5}$	磁场中核自旋能级	核磁共振光谱法

二、电磁辐射与物质的相互作用

电磁辐射与物质的相互作用是普遍发生的物理现象，也是比较复杂的物理现象，有涉及物质内能变化的相互作用如吸收、发射（产生荧光、磷光）等，也有不涉及物质内能变化的相互作用如透射、折射、衍射、旋光等。

(1) 吸收 辐射能作用于物质的原子、分子或离子（总称为粒子）后，物质选择性地吸收某些频率的辐射能，并从低能级状态（基态）跃迁至高能级状态（激发态），这个过程称为吸收。任一波长光子的能量必须与物质内的原子或分子的能级变化(ΔE)相等，才能被吸收，否则，不会被吸收。被吸收的光子的能量或频率可以通过普朗克公式求得。物质内的原子或分子的能级变化(ΔE)与被吸收光子的能量之间的关系为：

$$\Delta E = E_L = h\nu = hc/\lambda = hc\sigma \quad (1-3)$$

若已知物质内原子或分子在不同能级间跃迁的能量差(ΔE)，按上式可计算出相应辐射能的波长。

【示例 1-1】某电子在两能级之间跃迁的能量差为 $4.969 \times 10^{-19}\text{J}$ ，其吸收光的波长为多少纳米？其波数为多少？

解：因为 $\Delta E = h\nu = hc/\lambda$

$$\text{所以 } \lambda = hc/\Delta E$$

$$\begin{aligned}
 &= 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 3 \times 10^{10} \text{ cm/s} / 4.969 \times 10^{-19} \text{ J} \\
 &= 4 \times 10^{-5} \text{ cm} = 400 \text{ nm} \\
 \sigma &= 1/\lambda = 25000 \text{ cm}^{-1}
 \end{aligned}$$

(2) 发射 粒子吸收能量后, 从基态跃迁至激发态, 处于激发态的粒子是不稳定的, 在短暂的时间 (约 10^{-8} s) 内, 又从激发态跃回至基态。发射就是指粒子从激发态跃迁回基态, 并以光的形式释放出能量的过程。

(3) 散射 光通过介质时会发生散射, 也就是说有一小部分光的光子和粒子相碰撞, 使光子的运动方向发生改变而向不同角度散射, 这种光称为散射光。散射一般有两种情况: 一种是光子和粒子发生弹性碰撞时, 不发生能量的交换, 仅仅是光子运动方向发生改变, 光频率不变, 这种散射称为瑞利散射; 另一种是光子和粒子发生非弹性碰撞时, 在光子运动方向发生改变的同时, 光子与粒子之间会发生能量交换, 光频率发生改变, 这种散射称为拉曼散射。

(4) 反射和折射 当光从介质 I 照射到与介质 II 的分界面时, 一部分光在分界面上改变传播方向又返回到介质 I 的现象, 称为光的反射; 另一部分光则改变方向, 以一定的折射角度进入介质 II, 这种现象称为光的折射。

(5) 干涉和衍射 在一定条件下光波会相互作用, 当两列或两列以上光波在空间相遇相互叠加时, 将产生一个其强度视各波的相位而定的加强或减弱的合成波, 称为干涉。当两个波的相位差 180° 时, 发生最大相消干涉。当两个波同相位时, 则发生最大相长干涉。光波绕过障碍物或通过狭缝时, 以约 180° 的角度向外辐射, 波前进的方向发生弯曲, 这种现象称为衍射。

(6) 旋光 有机化合物的分子结构中含有不对称碳原子, 能使通过的平面偏振光的偏振面旋转一定的角度, 这种现象称为旋光。

三、光学分析法的分类

根据电磁辐射与物质相互作用的机制不同, 可建立各种不同的光学分析方法, 一般分为三种类型: ①基于辐射的发射原理的有发射光谱法 (如 X 射线光谱法)、荧光光谱法、火焰光度法、原子荧光谱法、放射化学法等。②基于辐射的吸收原理的有比色法、分光光度法、原子吸收法、核磁共振法等。③基于其他原理的主要有拉曼光谱法和一般光学分析法 (如折射法、旋光法、X 射线衍射法等)。

1. 一般光学分析方法

利用物质受辐射线照射时, 改变电磁辐射的传播方向、速度等物理性质, 所建立的分析方法称为一般光学分析法或称非光谱法。例如, 利用物质的折射、偏振、衍射与散射等现象, 建立起来的折射分析、旋光分析、X 衍射分析与光散射分析等一般光学分析法。

2. 光谱法

当物质与辐射能相互作用时, 物质内部发生能级跃迁, 记录由能级跃迁所产生的辐射能强度随波长 (或相应单位) 的变化, 所得的图谱称为光谱。利用物质的光谱进行定性定量和结构分析的方法称为光谱分析法, 简称光谱法。光谱法种类很多, 吸收光谱法、发射光谱法和散射光谱法等是光谱法的三种基本类型; 根据产生光谱的粒子不同, 光谱法也可分为原子光谱法和分子光谱法。

(1) 原子光谱法和分子光谱法 原子光谱法是以测量气态原子或离子外层或内层电子