

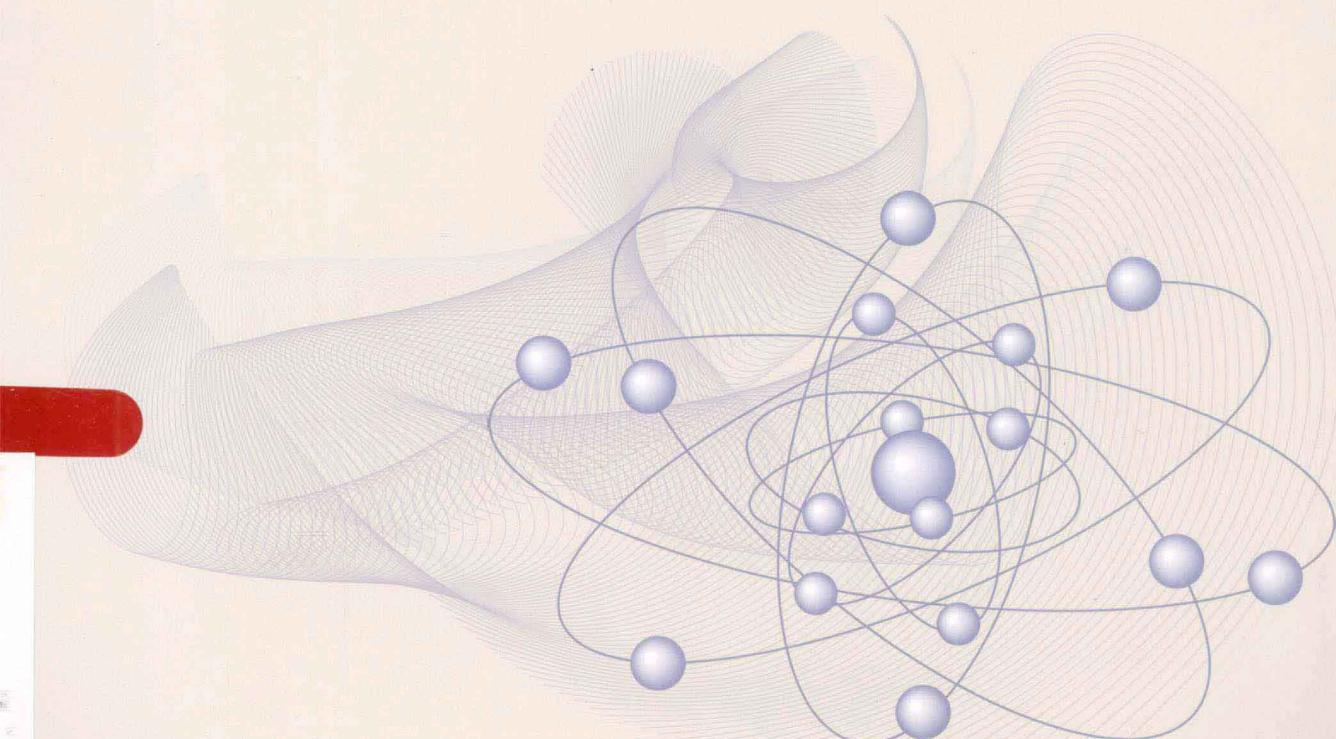
国家科技基础条件平台建设项目
“全国分析检测人员能力培训与考核体系”成果

全国分析检测人员能力培训委员会(NTC)系列培训教材

ATC 007

紫外—可见吸收光谱分析技术

柯以侃 主编



中国质检出版社
中国标准出版社



全国分析检测人员能力培训委员会(NTC)系列培训教材

ATC 007

紫外-可见吸收光谱分析技术

柯以侃 主编

中国质检出版社
中国标准出版社

北京

图书在版编目(CIP)数据

ATC 007 紫外-可见吸收光谱分析技术/全国分析检测人员能力培训委员会编著. —北京:
中国标准出版社, 2013. 6

ISBN 978 - 7 - 5066 - 7162 - 0

I. ①A… II. ①全… III. ①紫外光谱-吸收光谱法 IV. ①0657. 32

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 108855 号

内 容 提 要

本书依据全国分析检测人员能力培训委员会《ATC 007 紫外-可见吸收光谱分析技术考核与培训大纲》编写, 内容包括四部分:

(1) 技术基础; (2) 仪器设备与操作; (3) 标准方法与应用; (4) 分析结果的数据处理。

本书可供厂矿企业、科研院所、高等院校、检验检疫、环境监测等领域实验室的检测人员参考使用, 也可作为有关部门培训分析检测人员的教材。

中国质检出版社 出版发行
中国标准出版社

北京市朝阳区和平里西街甲 2 号(100013)
北京市西城区三里河北街 16 号(100045)

网址: www.spc.net.cn

总编室:(010)64275323 发行中心:(010)51780235

读者服务部:(010)68523946

中国标准出版社秦皇岛印刷厂印刷
各地新华书店经销

*

开本 787×1092 1/16 印张 13.75 字数 323 千字
2013 年 6 月第一版 2013 年 6 月第一次印刷

*

定价 48.00 元

如有印装差错 由本社发行中心调换
版权专有 侵权必究
举报电话:(010)68510107

全国分析检测人员能力培训委员会(NTC)

主任 吴波尔

副主任 刘卓慧 吴学梯 张 泽

委员 (按姓氏笔画排序)

马晋并 方 向 王海舟 乔 东 庄乾坤
许增德 宋桂兰 张渝英 李文龙 葛红梅

全国分析检测人员能力培训委员会(NTC) 系列培训教材编审委员会

总编审 张渝英

副总编审 王海舟 乔 东

常务编审 符 斌 佟艳春

编 审 (按姓氏笔画排序)

马燕文	马振珠	于世林	邓 勃	邓星临	邓志威
王春华	王福生	王 滨	王 蓬	王光辉	王明海
尹 明	田 玲	白伟东	刘虎威	刘国诠	刘丽东
刘咸德	刘 正	刘 英	刘卫平	刘 挺	傅若农
江超华	再帕尔	吕 杨	吴牟天	吴惠勤	吴淑琪
吴国平	冯先进	孙素琴	孙泽明	齐美玲	朱衍勇
朱跃进	朱林茂	朱生慧	朱锦艳	朱 斌	汪正范
汪聪慧	李 冰	李小佳	李丛笑	李红梅	李华昌
李重九	李继康	李寅彦	李国会	李万春	李美玲
沈学静	沈建忠	牟世芬	杨啸涛	杨春晟	邹汉法
罗立强	罗倩华	张 中	张 庄	张之果	张学敏
张锦茂	张伟光	张克顺	张东生	张夕虎	张慧贤
林崇熙	谢孟峡	者冬梅	周志恒	周巍松	周艳明
郑国经	卓尚军	屈文俊	贾云海	柯以侃	柯瑞华
柯晓涛	陈江韩	陈吉文	胡国栋	胡净宇	胡洛斐
胡晓燕	赵 雷	徐经纬	胡友宣	胡本平	高介平
高宏斌	高怡斐	唐凌天	徐晓东	郭永权	侯红霞
崔秋红	蒋士强	蒋仁贵	蒋子江	梁新帮	陶 琪
黄业茹	詹秀春	蔡文河	臧慕文	魏若奇	

《全国分析检测人员能力培训委员会(NTC)系列培训教材》

序

分析测试技术作为科技创新的技术基础、国民经济发展和国际贸易的技术支撑,环境保护和人类健康的技术保障,正受到越来越多的关注,而分析测试体系的建设在科技进步和经济发展中正发挥着举足轻重的作用。国家科技部从1999年以来先后组织建设并形成了分析测试方法体系、全国检测资源共享平台,大型仪器共享平台,标准物质体系以及应急分析测试体系等分析测试相关的基础条件平台。2005年在科技基础条件平台建设中,又启动了《机制与人才队伍建设——全国分析测试人员分析测试技术能力考核确认与培训系统的建立与实施》的项目,从而形成了由“人员、方法、仪器、标准物质、资源”等组成的完整系统的分析测试平台体系。

为加强分析检测人员队伍的建设,确保分析检测人员技术能力的培训与考核工作的科学性、规范性、系统性和持续性,完成国家科技基础条件平台建设的相关任务,中华人民共和国科学技术部、国家认证认可监督管理委员会等部门共同推动成立了“全国分析检测人员能力培训委员会”(简称“NTC”),负责对分析检测人员技术能力的培训与考核工作。

NTC的宗旨是为提高我国分析检测人员整体的检测能力和水平,促进分析检测结果的准确性和可靠性,为国家科技进步、公共安全、经济社会又好又快发展服务。

NTC依据国家相关法律法规,按照分析检测的相关国际和国家标准、规范等开展培训工作,遵循客观公正、科学规范的工作原则开展考核工作。

NTC的分析检测技术的分类系以通用分析测试技术为基点,兼顾专用技术,根据相关学科分类标准及分析检测技术设备原理划分,

形成每项技术分别覆盖材料、环境资源、食品以及能源等领域化学成分和性能表征的分析测试技术能力分类系统,首批共纳入了 58 项技术。

每项分析检测技术由四个技术部分组成,即分析检测技术基础、仪器与操作技术、标准方法与应用以及数据处理。

通过相关技术四个部分考核的技术人员将由全国分析检测人员能力培训委员会颁发分析检测人员技术能力证书。证书是对分析检测人员具备相关分析检测技术(方法)或相关部分的技术能力的承认,可以胜任相关分析检测岗位的检测工作;该证书可作为计量认证、实验室认可、相关认证认可以及大型仪器共用共享的能力证明。

为规范各项技术考核基本要求,委员会正式发布了各项技术的考核培训大纲。为便于培训教师、分析检测人员进一步理解大纲的要求,在 NTC 的统一领导下,由 NTC 秘书处负责组织成立了 NTC 培训教材编写审定委员会,系统规划教材的系统设置方案、设计了教材的总体架构、与考核相结合规定了每项技术各部分内容的设置,并分别组织了各项技术分编委会,具体负责各项技术的培训教材的编写。NTC 拥有《NTC 系列培训教材》的著作权,并指定该套教材为由 NTC 组织的分析检测人员技术能力培训的唯一指定教材,并将其专有出版版权授予中国质检出版社(国家标准出版社),由其出版发行,以服务于全国分析检测人员的技术培训与考核工作。

全国分析检测人员能力培训委员会

NTC 通用理化性能分析检测能力技术分类

1 ATC——化学分析测试技术

- ATC 001 电感耦合等离子体原子发射光谱分析技术
- ATC 002 火花源原子发射光谱分析技术
- ATC 003 X 射线荧光光谱分析技术
- ATC 004 辉光放电发射光谱分析技术
- ATC 005 原子荧光光谱分析技术
- ATC 006 原子吸收光谱分析技术
- ATC 007 紫外-可见吸收光谱分析技术
- ATC 008 分子荧光光谱分析技术
- ATC 009 红外光谱分析技术
- ATC 010 气相色谱分析技术
- ATC 011 液相色谱分析技术
- ATC 012 毛细管电泳分析技术
- ATC 013 固体无机材料中碳硫分析技术
- ATC 014 固体无机材料中气体成分(O、N、H)分析技术
- ATC 015 核磁共振分析技术
- ATC 016 质谱分析技术
- ATC 017 电感耦合等离子体质谱分析技术
- ATC 018 电化学分析技术
- ATC 019 物相分离分析技术
- ATC 020 重量分析法
- ATC 021 滴定分析法
- ATC 022 有机物中元素(C、S、O、N、H)分析技术
- ATC 023 酶标分析技术

2 ATP——物理检测技术

- ATP 001 金相低倍检验技术
- ATP 002 金相高倍检验技术
- ATP 003 扫描电镜和电子探针分析技术
- ATP 004 透射电镜分析技术
- ATP 005 多晶 X 射线衍射技术
- ATP 006 俄歇电子能谱分析技术
- ATP 007 X 射线光电子能谱分析技术

- ATP 008 扫描探针显微分析技术
- ATP 009 密度测量技术
- ATP 010 热分析技术
- ATP 011 导热系数测量技术
- ATP 012 热辐射特性参数测量技术
- ATP 013 热膨胀系数测量技术
- ATP 014 热电效应特征参数测量技术
- ATP 015 电阻性能参数测量技术
- ATP 016 磁性参数测量技术
- ATP 017 弹性系数测量技术
- ATP 018 声学性能特征参数测量技术
- ATP 019 内耗阻尼性能参数测量技术
- ATP 020 粒度分析技术
- ATP 021 比表面分析技术
- ATP 022 热模拟试验技术

3 ATM——力学性能测试技术

- ATM 001 拉伸试验技术
- ATM 002 弯曲试验技术
- ATM 003 扭转试验技术
- ATM 004 延性试验技术
- ATM 005 硬度试验技术
- ATM 006 断裂韧度试验技术
- ATM 007 冲击试验技术
- ATM 008 疲劳试验技术
- ATM 009 磨损试验技术
- ATM 010 剪切试验技术
- ATM 011 压缩试验技术
- ATM 012 撕裂试验技术
- ATM 013 高温持久、蠕变、松弛试验技术

《ATC 007 紫外-可见吸收光谱分析技术》

编 委 会

主 编 柯以侃

编 委 (按姓氏笔画为序)

刘 芳 刘 锋 安 静 李华昌 李 梅
陈 辰 张伟光 张明祥 姜求韬 贾云海
崔秋红 符 斌 曾 磊

前　　言

紫外-可见吸收光谱法是最经典的光谱分析方法,有百年以上的历史。随着时代的发展,紫外-可见吸收光谱分析技术发生了一系列重大变化,新技术、新方法层出不穷,并以其测量范围宽、准确度高、应用范围广和操作简便等一系列优点,使紫外-可见吸收光谱法依然是各个领域不可或缺的重要的分析方法,并广泛被标准分析方法所采用。

本书依据全国分析检测人员能力培训委员会《ATC007 紫外-可见吸收光谱分析技术考核与培训大纲》编写,内容包括四部分:

(1)技术基础。阐明紫外可见光谱分析技术的基本原理、基本方法及应用,解释常用的术语及概念。

(2)仪器设备与操作。介绍紫外可见分光光度计的基本构成、操作技术、校准与检定及仪器维护。

(3)标准方法与应用。举例介绍紫外可见光谱分析技术在钢铁分析,有色金属分析,岩石、矿物分析,化工及能源分析,环境分析,以及食品、粮食分析等相关测试领域中的分析方法标准、适用范围、使用要求、具体分析步骤、结果计算、操作中应注意的问题等。

(4)分析结果的数据处理。介绍了紫外-可见吸收光谱法测定结果的数据处理及计算方法,误差及测定结果的不确定度评定。

本书以厂矿企业、科研院所、高等院校、检验检疫、环境监测等领域实验室的检测人员为基本对象,希望通过以本书作教材的培训或学习,提升他们在紫外-可见吸收光谱法方面的理论知识和实际技术



能力。本书可作为有关部门培训分析检测人员的教材,也可供有关部门分析检验人员在工作中参考和使用;对相关院校师生的教学,本书也极具参考价值。

本教材系在“全国分析检测人员能力培训委员会(NTC)培训教材编审委员会”的指导下,组织各领域的专家参加编写工作,并征求有关专家的意见,反复修改,几易其稿,最终成书。

本书由柯以侃和崔秋红共同完成,全书由柯以侃统稿。北京首钢冶金研究院的郑国经研究员、北京有色金属研究总院的臧慕文研究员、钢铁研究总院的柯瑞华研究员对书稿进行了审阅并提出许多宝贵的修改意见。参加本大纲和教材编写工作的还有符斌、安静、陈辰、贾云海、姜求韬、李梅、李华昌、刘芳、刘锋、曾磊、张伟光、张明祥等。本书在编写过程中曾得到各方面技术专家的指导和帮助,在此一并致以谢忱。

由于该项技术所涉及的应用领域极其广泛,以及编者知识面及水平所限,书中难免有疏漏和错误之处,恳请分析界专家及读者批评指正。

编 者

2013年6月

目 录

1 紫外-可见吸收光谱法基础知识	1
1.1 紫外-可见吸收光谱法概述及其特点	1
1.2 紫外-可见吸收光谱法的基础理论、基本概念和名词术语	2
1.2.1 光的基本特性	2
1.2.2 物质对光的吸收及吸收光谱曲线	3
1.2.3 跃迁类型	4
1.2.4 紫外-可见吸收光谱常用术语	7
1.2.5 紫外吸收光谱与分子结构	9
1.2.6 影响紫外吸收光谱的主要因素	13
1.3 紫外-可见吸收光法定量分析的基本原理	14
1.3.1 物质的颜色	14
1.3.2 光吸收的基本定律及吸光度的加和性	15
1.3.3 偏离比尔定律的原因	17
1.4 分光光度法中主要显色反应及显色反应条件的选择	19
1.4.1 光度分析对显色反应的要求	19
1.4.2 主要显色反应类型	19
1.4.3 显色剂	20
1.4.4 显色反应条件选择	27
1.5 吸光度测量条件的选择	36
1.5.1 波长的选择	36
1.5.2 光谱带宽的选择	36
1.5.3 吸光度范围的选择	36
1.5.4 参比溶液的选择	37
1.6 紫外-可见吸收光谱定性分析及其应用	38
1.6.1 定性分析的一般步骤	38
1.6.2 定性分析的常用方法	39
1.6.3 在定性分析中的应用	41
1.7 紫外-可见吸收光谱分析定量方法	42
1.7.1 常规法	42
1.7.2 差示分光光度法	45

1.7.3 双波长分光光度法	48
1.7.4 导数分光光度法	53
1.7.5 多元配合物光度法	60
1.7.6 动力学光度法	68
1.7.7 萃取光度法	75
1.7.8 固相光度法	80
1.7.9 浮选光度法	83
1.7.10 长光路毛细吸收管光度法	84
1.8 紫外-可见吸收光谱分析用的标准溶液和样品制备	86
1.8.1 标准溶液的制备	86
1.8.2 样品的制备	87
1.9 思考题	87
参考文献	88
2 紫外-可见分光光度计使用和维护	90
2.1 紫外-可见分光光度计结构概况	90
2.2 紫外-可见分光光度计的主要部件	92
2.3 紫外-可见分光光度计的操作方法	102
2.4 紫外-可见分光光度计安装和调试	105
2.5 紫外-可见分光光度计的日常保养维护、检定和常见故障	113
2.6 思考题	114
参考文献	115
3 紫外-可见吸收光谱分析法的标准和应用实例	116
3.1 紫外-可见吸收光谱分析法在我国标准中的应用概况	116
3.2 紫外-可见吸收光谱分析法标准实例解析	117
3.3 思考题	147
参考文献	147
4 紫外-可见吸收光谱分析法中的数据处理和不确定度评定	149
4.1 数理统计中的一些基本概念	149
4.2 分析数据的统计处理	154
4.3 回归分析在紫外-可见吸收光谱分析法中的应用	159
4.4 不确定度评定基础	163
4.5 紫外-可见吸收光谱法测量不确定度的评定	167
4.6 紫外-可见吸收光度法测量不确定度评定实例	172

4.7 思考题	174
参考文献	175
附录 1 常用数据和显色剂	176
附录 2 仪器质量指标检测常用的标准物质与标准光源及 紫外-可见分光光度计的主要技术指标	193
附录 3 分子吸收分光光度法通则(紫外和可见光部分)	197

紫外-可见吸收光谱法基础知识

1.1 紫外-可见吸收光谱法概述及其特点

紫外-可见吸收光谱法是基于在 200 nm~800 nm 光谱区域内测定物质的吸收光谱或在某指定波长处的吸光度值，对物质进行定性、定量或结构分析的一种方法，该法又称为紫外-可见分光光度法。紫外-可见吸收光谱法的发展经历了一个漫长过程，已有百年以上的历史。最初是利用某些离子和无机试剂形成有色物质，用目视比色法测定这些离子的含量，例如用硫氰化钾来测定试样中的微量铁；用奈斯勒试剂测定氨等，采用的仪器是比色管。目视比色法可看作紫外-可见吸收光谱法的雏形。

紫外-可见吸收光谱属于电子光谱，是由多原子分子的外层电子或价电子的跃迁而产生的。这种光谱可用于含有不饱和键的化合物，尤其是含有共轭体系的化合物的分析和研究。虽然紫外吸收光谱基本上只能反映分子中发色团和助色团的特性，而不是反映整体分子的特征，但在化合物结构测定中仍有重要作用。

自 1945 年美国 Beckman 公司推出世界上第一台成熟的紫外-可见分光光度计商品仪器以后，紫外-可见分光光度计得到飞速发展。从单光束发展到准双光束、双光束和双波长；仪器的光学元件由棱镜分光发展到光栅分光；电子学元件由集成电路取代了电子管和晶体管等分立元件组成的电路；仪器的自动化程度因采用了计算机技术得到了很大的提高；目前正向着高速、痕量、小型化、低杂散光和低噪声方向发展。

经典的吸收光谱法对混浊试样，存在背景吸收和干扰组成的试样的测定会产生较大误差，甚至无法测定。从 20 世纪 50 年代开始发展了许多新的分光光度分析方法，首先提出并得到广泛应用的是双波长分光光度法，以后又产生了导数分光光度法、三波长法和正交函数法等。随着计算机的广泛使用，化学计量学在光度分析中的应用研究变得十分活跃，已独自构成了计量学分光光度法这一新的分支学科，对解决复杂体系中各组分测定开辟了新的广阔的途径。

显色剂和显色体系的研究始终是紫外-可见吸收光谱法研究的重点，到 20 世纪 50 年代前后显色剂的发展达到一个高峰，但新的显色剂的研究始终没有停止脚步，有机结构理论，有机合成理论和配位化学理论的发展促进了显色剂的研究。目前，新的高灵敏度、高选择性的显色剂不断出现，对许多无机和有机物的分析提供了更多的选择。

本书讨论的内容包括四方面：紫外-可见吸收光谱的基本理论和基本方法；紫外-可见分光光度计的基本结构及其检定；紫外-可见吸收光谱法在各类标准中的应用及紫外-可见

吸收光谱法的数据处理和不确定度评定。

紫外-可见吸收光谱分析技术和其他各种近代仪器分析方法相比，是一种较为古老的方法，但至今仍占有重要地位，这与它自身具有许多特点是分不开的。其主要特点有：

(1) 测量范围宽

该法主要用于痕量组分的测定，测定浓度下限可达 10^{-5} mol/L~ 10^{-6} mol/L，如果用预先浓缩或其他措施，甚至对浓度为 10^{-7} mol/L~ 10^{-9} mol/L 的物质亦可测定。当采用差示分光光度法还可用于常量组分的测定。

(2) 测量准确度高

方法的准确度能满足痕量组分测定的要求，测定的相对误差为 2%~5%，使用精密度高的仪器，误差可减小为 1%~2%。

(3) 应用范围广

元素周期表中几乎所有的金属元素均能进行测定，也能分析氮、硅、硼、氧、硫、磷、卤素等非金属元素；凡具有发色团的有机化合物均可用该法进行定量和定性分析，可作为红外光谱、拉曼光谱、核磁共振波谱、质谱等定性技术的一种重要的辅助工具；还可用于测定配合物组成，在有机酸、碱及配合物化学平衡及动力学研究等方面亦有其重要用途。

(4) 操作简便

紫外-可见分光光度计比较简单，价钱便宜，对实验室要求不高，是一般分析实验室的必备仪器，仪器操作简便、快捷、易于掌握。

1.2 紫外-可见吸收光谱法的基础理论、基本概念和名词术语

1.2.1 光的基本特性

吸收光谱涉及物质对光的吸收，因此先简要介绍光的基本特性。光是一种电磁波，具有波动性和粒子性。光既是一种波，可用波长和频率等参数描述。波长是指在波传播路径上具有相同位相的两点之间的距离，通常用 λ 表示，其单位在紫外-可见光区用 nm 表示， $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ 。频率是指单位时间内电磁波振动的周数，用 ν 表示，单位是赫兹 (Hz) 或 1/秒 (1/s)。频率与波长可用式 (1-1) 换算：

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

式中： c ——光速，等于 $3.00 \times 10^{10} \text{ cm/s}$ 。

光也是一种粒子，它具有能量 (E)， E 和 ν 及 λ 之间的关系为：

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

式中： E ——能量，单位焦耳 (J)， h ——普朗克常数 ($6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$)。

由上式可知，不同波长的光能量不同，波长愈长，能量愈小；波长愈短，能量愈大。

例：求波长为 300 nm 的紫外光的能量为多少？

$$\begin{aligned} E &= h\nu = hc/\lambda = (6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}) \times (3 \times 10^{10} \text{ cm/s}) / (3 \times 10^{-5} \text{ cm}) \\ &= 6.63 \times 10^{-19} \text{ J} \end{aligned}$$

上面计算结果，能量单位用 J 表示时，其数值是很小的，故有时常用电子伏特表示， $1 \text{ J} = 6.24 \times 10^{18} \text{ eV}$ 。

1.2.2 物质对光的吸收及吸收光谱曲线

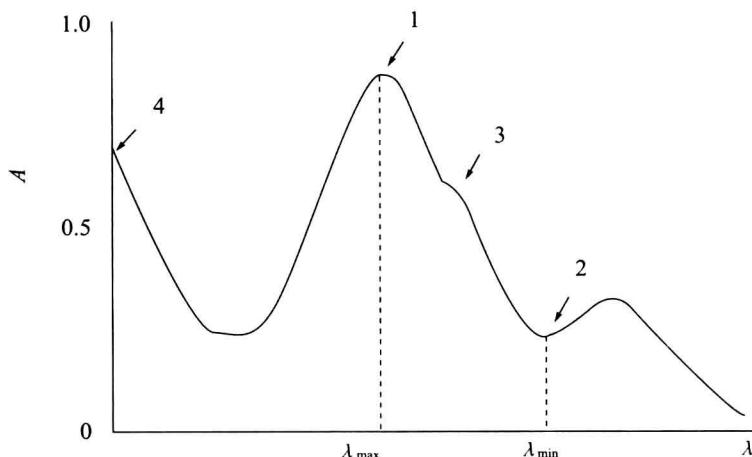
分子和原子一样有它的特征分子能级，分子内部运动可分为价电子运动，分子内原子在其平衡位置的振动和分子本身绕其重心的转动，因此分子具有电子能级、振动能级和转动能级。一个分子的内能 E 是转动能 $E_{\text{转}}$ 、振动能 $E_{\text{振}}$ 、电子能 $E_{\text{电子}}$ 之和，分子跃迁的总能量变化为：

$$\Delta E = \Delta E_{\text{转}} + \Delta E_{\text{振}} + \Delta E_{\text{电子}}$$

由于分子运动所处的能级和产生能级跃迁时所需能量都是量子化的，因此当产生能级跃迁时，只能吸收与其相应的特定波长的光能，而不同物质其结构不同，分子的能级及其能级之间间隔也互不相同，这就决定了不同物质吸收不同波长的光。物质对光的吸收用吸收光谱曲线来描述。紫外-可见吸收光谱属电子光谱，是由电子能级跃迁产生。电子能级之间的差值 $\Delta E_{\text{电子}} = 1 \text{ eV} \sim 20 \text{ eV}$ ，相当于波长 $60 \text{ nm} \sim 1250 \text{ nm}$ ，属紫外-可见光区，若设 $\Delta E_{\text{电子}}$ 为 5 eV ，则得到相应的吸收光谱中被吸收光波的波长应该是： $\lambda = hc/\Delta E_{\text{电子}} = (6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}) / (5 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}) = 2.48 \times 10^{-5} \text{ cm} = 248 \text{ nm}$ ，在近紫外区。

本书研究的紫外-可见吸收光谱主要指近紫外区到可见光区，即从 $200 \text{ nm} \sim 800 \text{ nm}$ 这个波长范围。电子跃迁所需的能量最大， $\Delta E_{\text{电子}}$ 约为 $1.6 \times 10^{-19} \text{ J} \sim 3.2 \times 10^{-18} \text{ J}$ ， $\Delta E_{\text{振}}$ 约为 $8.0 \times 10^{-21} \text{ J} \sim 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ ，而 $\Delta E_{\text{转}}$ 约为 $1.6 \times 10^{-23} \text{ J} \sim 8.0 \times 10^{-21} \text{ J}$ ，因此，当发生电子能级跃迁时，都同时有振动和转动能级的跃迁，这就是为什么多原子分子的紫外-可见吸收光谱不是线状光谱而是带状光谱的原因。通常物质的紫外-可见吸收光谱是在溶液中测定的，只需考虑电子能级跃迁，此时，光谱的精细结构完全消失。

紫外-可见吸收光谱常用吸收曲线描述，即应用单色光依次照射一定浓度的样品溶液，分别测量其吸光度，以吸光度 A 对波长 λ 作图，如图 1-1 所示。



1—吸收峰；2—谷；3—肩峰；4—末端吸收

图 1-1 吸收光谱示意图

吸收曲线呈现一些峰和谷，每个峰峦相当于谱带，曲线的峰称为吸收峰，它对应的波长用 λ_{max} 表示；曲线的谷对应的波长用 λ_{min} 表示；在峰旁的小曲折称肩峰；在吸收曲线的