

近代傅里叶变换

红外光谱技术及应用

上卷 吴瑾光 主编

科学技术文献出版社

TW 215
W 35
1

近代傅里叶变换红外光谱技术及应用

上 卷

主 编	吴瑾光			
副主编	许振华	李琼瑶	王宗明	席时权
	沈学础	林 林	阮 竹	
编 委	(按姓氏笔画为序)			
	王正熙	王永泰	王国文	王俊德
	邓振华	朱启鹤	江罗兰	严衍禄
	杨 健	吴平平	宋果男	范世福
	张元福	张琳娜	施 鼎	胡鑫尧
	翁诗甫	韩哲文	聂崇实	谢晶曦

科学技术文献出版社

(京)新登字 130 号

内 容 简 介

本书由北京大学吴瑾光教授主编,中国科学院院士、亚洲化学会主席、北京大学徐光宪教授作序,组织全国 40 多位红外光谱专家撰写。全书约 200 万字,分上、下卷。

傅里叶变换红外光谱技术是 80 年代才兴起的新谱学方法,在我国已得到广泛应用,在科研、教学和生产监测等方面发挥了重要作用。本书包括所有近代傅里叶变换红外光谱的各种技术及其在各个领域中的应用,它既反映当代傅里叶变换红外光谱技术的最高水平和最新进展,又包括了我国红外光谱工作者长期从事红外光谱实际工作的经验。对从事红外光谱研究或实际测试的各类人员都有指导意义。上卷包括:傅里叶变换光谱基础,仪器及附件,中、远、近红外光谱的测定,制样和光谱处理技术,各种联用技术,反射光谱、显微、偏振、高压及变温光谱技术,遥感及发射红外,动态及时间分辨光谱。下卷为傅里叶变换红外光谱技术在国民经济各个部门和各个科学研究领域中的应用,它们是:有机高分子,煤炭,石油及催化剂,矿物地质,化工,半导体及材料科学,农业及生物,医药,生物化学,无机及金属有机化学,法庭科学,环境及气象,染织,原子能,生产过程及质量控制等部门以及傅里叶变换红外光谱的最新进展。

本书是一本综合性的图书,既有基本原理章节,又有应用技术的详细介绍,文字深入浅出,适于全国各产业部门、科研院所、分析检测部门的红外光谱工作者以及大专院校有关专业的教师、研究生和大学生阅读参考。

图书在版编目(CIP)数据

近代傅里叶变换红外光谱技术及应用/吴瑾光主编. -北京:
科学技术文献出版社, 1994. 12
ISBN 7-5023-2214-0

I. 近… II. 吴… III. ①红外光谱学-傅里叶变换光谱学
②傅里叶变换光谱学-红外光谱学 IV. TN219

中国版本图书馆 CIP 数据核字(94)第 00342 号

科学技术文献出版社出版

(北京复兴路 15 号 邮政编码 100038)

北京市顺义板桥印刷厂印刷 新华书店北京发行所发行

1994 年 12 月第 1 版 1994 年 12 月第 1 次印刷

787×1092 毫米 16 开本 99 印张 2000 千字

科技新书目: 319-098 印数: 1—2500 册

上、下卷定价: 170.00 元

序 言

自从七十年代在红外光谱中引进傅里叶变换(FT)技术以来,由于它大幅度提高了红外光谱(IR)的灵敏度、波数精度、分辨能力和应用范围,使傅里叶变换红外光谱(FTIR)成为近年来发展最快的谱学方法之一。

我国在七十年代末期引进 FTIR 技术,由于它的简便易行,应用范围广,提供信息丰富等优点,使 FTIR 在我国得到迅速发展和推广。目前我国已有 FTIR 实验室几百个,有关科技人员上万人。10 余年来,他们在推动基础和应用研究,以及在国民经济、国防和环境科学等广泛领域中提供的样品剖析、鉴定、测试和结构分析的研究中取得了大量成果,积累了丰富的经验。例如北京大学化学系的 FTIR 实验室从 1979 年建立以来,确实对科研和教学工作起了重要的推动作用,应用这一谱学技术解决了国家重大科研项目如攀登计划和国家自然科学基金委员会重大项目中的的一些关键问题。在稀土配位化学,萃取机理,有机相微乳结构研究以及生物无机和胆结石等领域取得了高水平的科研成果,同时也促进了 FTIR 的基础研究和应用研究的深入发展。

在当前形势下出版一本有关傅里叶变换红外光谱的综合性大型参考书,系统而全面地介绍 FTIR 基础知识、最新技术和应用是迫切需要的。

由北京大学吴瑾光教授主编,邀请全国高等院校、中国科学院和产业部门等研究院所的多位专家联合执笔撰写的《近代傅里叶变换红外光谱技术及应用》一书满足了这一需要。全书 200 万字,分上下两卷。上卷介绍傅里叶变换红外光谱的基本知识和各种最新技术以及傅里叶变换拉曼光谱,下卷介绍红外光谱在分子科学、煤炭、石油、地质矿产、气象及环境科学、农业及生命

医药科学、无机及材料科学、染织、日用化工、原子能以及法庭科学等广大领域中的应用。由于作者们不仅有很高的学术造诣,而且有丰富的实践经验,相信这本书的出版,将为我国 FTIR 的发展,促进 FTIR 在各学科领域中的应用作出贡献。

本书对我国各产业部门、科研院所、分析测试部门和大专院校有关专业的教师、科技人员、研究生和大学生都有很好的参考价值。

徐光宪

前 言

傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 的出现,使红外光谱技术复兴并走向繁荣昌盛。在六七十年代初期,由于分光型红外光谱术的局限性,造成红外光谱在谱学研究方法中的位置逐渐被其他谱学方法取代,处于停滞阶段。可是,八十年代以来,红外光谱技术的作用和地位起了戏剧性的变化,这主要归功于先进的 FTIR 带来的革命性的改变。调查分析表明当前 FTIR 在迅速发展的谱学技术中占数一或数二的地位。例如,近几年来有关红外光谱的化学应用文章每年约在万篇以上。从最新发展动态看来,两年一度的国际傅里叶变换光谱会议(1993 年为第九届会议)和前不久隆重召开的第 45 届应用光谱和分析化学国际会议(Pittsburgh 会议),红外光谱都处于主导或举足轻重的地位。红外光谱领域中新的发展、新的技术和新的应用,不断涌现、层出不穷,正说明 FTIR 方法受到国际科技界的重视和培植而欣欣向荣。

建立 FTIR 技术,虽然是一百年前的设想,但它的诞生是建立在近代高新科技如计算机和激光技术等高度发展的基础上,只有在高新科技迅猛发展的今天,FTIR 才有可能从设想变为今天的现实。我国从七十年代后期引进 FTIR 技术以来,全国各地已建立起了数百个 FTIR 实验室,拥有上万人的科技队伍,有更多的人在从事有关红外光谱研究和测试工作,推动了我国红外光谱的基础研究、应用研究、分析测试和生产监测等方面工作,取得了大量成果和辉煌成绩。国内两年一度的分子光谱会议也体现了我国红外光谱研究进展的一个方面。

红外光谱法能以崭新面貌出现,主要决定于其独特的优点:红外法的普适性强,气、固、液的样品都可测试而不破坏原样;FTIR 谱往往能提供丰富的信息。它不仅是结构研究的强有力工具,也是分析鉴定的有效方法,在工业监测应用中也有着广阔远景。它可以配合多种功能附件如显微红外、PAS、ATR 变温光谱、时间分辨光谱等的使用和发展多种联机技术,使红外光谱法几乎成为一种全能的技术。它不仅在化学各学科中应用很广,而且,对于许多相关学科,如石油、煤炭、农业、医药、地质、环境、

气象、空间科学等也有着重要的应用。有趣的是显微红外技术在法庭科学应用的生动实例，令人神往。这一切都显示红外方法的巨大生命力。

鉴于以上情况，出版一本有关 FTIR 技术的综合性专著是非常重要的而且及时的。本书就在这一状况下应运而生，由 Nicolet（尼高力）傅里叶变换红外光谱中国用户协会发起，邀请了全国四十多位著名红外光谱专家进行这本书的编写。感谢各位专家作者的热心支持与协作，同时感谢 Nicolet 仪器公司和科学技术文献出版社在出版过程中的大力协助，使得这部约 200 万字（上、下两卷）的著作得以顺利完成。全书内容丰富，不仅包括 FTIR 光谱的主要方面，如理论基础、技术知识、各种新技术及其在化学和其他相关学科中的应用和最新发展，更重要的是介绍了有关作者的实践体会和宝贵经验。本书也总结了我国近二十年来在红外光谱领域中的成果，推进了学术交流。我认为这本书既是一本启蒙的书籍，也是一本很好的参考书，它将推进我国红外光谱科学研究和应用的发展。

吴瑾光 于北京大学

1994 年 3 月 20 日

目 录

第一章 傅里叶变换光谱学的基本原理	(1)
第一节 引言	(1)
第二节 干涉仪和干涉图	(3)
第三节 傅里叶变换光谱学的基本方程	(6)
第四节 分辨率, 仪器谱线函数	(7)
第五节 傅里叶变换的实施, 干涉图取样	(13)
第六节 傅里叶变换光谱学方法的基本优点	(16)
第七节 切趾	(20)
第八节 相位误差及其修正	(24)
第九节 傅里叶变换光谱仪的噪声和信噪比	(29)
第十节 傅里叶变换光谱学的计算技术	(33)
一、经典的傅里叶变换计算方法	(33)
二、快速傅里叶变换算法	(35)
三、傅里叶变换谱的实时显示和微处理计算机系统	(39)
第十一节 傅里叶变换光谱学的几种工作模式	(40)
一、干涉图快扫描和步进扫描模式	(40)
二、非对称傅里叶变换光谱学	(43)
三、双光束傅里叶变换光谱方法	(45)
四、使用同步辐射光源的傅里叶变换红外光谱	(48)
参考文献	(51)
第二章 傅里叶变换红外光谱仪	(54)
第一节 FTIR 光谱仪的基本组成	(55)
第二节 FTIR 光谱仪的光学系统	(56)
一、经典干涉仪及其性能	(56)
二、干涉仪的改进与发展	(61)
三、光路变革	(72)
四、光源的种类和特点	(78)
五、FTIR 光谱仪检测器的种类和特点	(81)
第三节 FTIR 光谱仪的电路系统和计算机	(85)
一、FTIR 光谱仪电路	(85)
二、FTIR 光谱仪用计算机	(87)
第四节 新型 FTIR 光谱仪的功能和选择	(90)
参考文献	(100)

第三章 红外透射光谱的样品制备与数据处理·····	(101)
第一节 透射光谱的样品制备·····	(101)
一、 中红外区的透光材料·····	(101)
二、 固体样品的制备技术·····	(104)
三、 液体样品的制备技术·····	(109)
四、 气体样品的制备技术·····	(114)
第二节 透射光谱的常用数据处理·····	(116)
一、 数据采集参数的作用与选择·····	(116)
二、 光谱坐标的变换·····	(119)
三、 加谱·····	(120)
四、 差谱·····	(122)
五、 乘谱·····	(126)
六、 平滑技术·····	(126)
七、 基线校正·····	(127)
八、 使谱图某一区域变为空白或生成直线·····	(128)
九、 峰值及峰谷位置的求取·····	(128)
十、 吸收峰积分强度的计算·····	(129)
十一、 导数光谱(微分光谱)·····	(130)
十二、 计算机分峰·····	(131)
参考文献·····	(135)
第四章 红外光谱反射技术及其在 LB 膜研究中的应用·····	(136)
第一节 概述·····	(136)
第二节 衰减全反射光谱及其在 LB 膜研究中的应用·····	(137)
一、 衰减全反射光谱的原理·····	(137)
二、 衰减全反射光谱光路设置和谱学特点·····	(139)
三、 改善 ATR 信噪比的方法和 ATR 技术局限性·····	(141)
四、 ATR 技术在 LB 膜研究中的应用·····	(142)
第三节 反射吸收光谱和 LB 膜的 IR 研究·····	(146)
一、 反射吸收光谱测量原理和光路设置·····	(146)
二、 反射吸收光谱技术谱学特点和应用限制·····	(148)
三、 改善反射吸收光谱信噪比和灵敏度的方法·····	(149)
四、 反射吸收光谱技术在薄膜研究中的应用·····	(150)
五、 CQ 型掠角反射吸收装置·····	(152)
第四节 偏振调制反射吸收光谱简介·····	(153)
一、 PMRAS 测量原理·····	(153)
二、 PMRAS 的特点·····	(154)
第五节 漫反射光谱技术简介·····	(155)
一、 漫反射原理和特点·····	(155)
二、 漫反射装置·····	(156)
三、 漫反射光谱的测量和 K-M 方程·····	(156)

参考文献	(158)
第五章 傅里叶变换远红外光谱技术及应用	(159)
第一节 远红外光谱的特点	(159)
第二节 远红外光谱仪器的特点	(160)
一、远红外光源	(161)
二、干涉仪	(162)
三、检测器	(163)
第三节 影响远红外测量的因素	(164)
一、水汽对远红外测量的影响	(164)
二、噪声对远红外测量的影响	(166)
三、各种测试条件对远红外光谱的影响	(167)
第四节 远红外光谱样品的制备	(167)
一、固体样品的制样方法	(167)
二、液体样品的制样方法	(169)
三、气体样品的测定	(170)
第五节 远红外光谱的应用	(171)
一、重原子之间的伸缩振动和弯曲振动	(171)
二、气体或液体分子的扭转振动	(174)
三、环状分子的环变形(环折叠)振动	(177)
四、分子间氢键振动	(178)
五、晶格振动	(180)
六、气体分子的纯转动	(181)
参考文献	(185)
第六章 傅里叶变换红外光谱联用技术	(187)
第一节 气相色谱-傅里叶变换红外光谱联用 (GC/FTIR)	(187)
一、联用系统的气相色谱部分	(190)
二、光管	(191)
三、GC/FTIR 联机的光谱仪部分	(193)
四、数据采集和官能团色谱	(194)
五、重建色谱图	(196)
六、气相红外光谱的解析	(198)
七、冷冻捕集接口	(201)
第二节 高效液相色谱-傅里叶变换红外光谱联用 (HPLC/FTIR)	(203)
一、流动池法	(204)
二、流动相去除法	(208)
第三节 超临界流体色谱-傅里叶变换红外光谱联用 (SFC/FTIR)	(213)
一、流动池法	(213)
二、流动相去除法	(215)
第四节 薄层色谱-傅里叶变换红外光谱联用 (TLC/FTIR)	(217)
一、原位 TLC/FTIR	(217)

二、	光声光谱 (PAS) 检测法	(218)
三、	自动洗脱物转移方法	(218)
第五节	热重分析-傅里叶变换红外光谱联用 (TGA/FTIR)	(220)
一、	常规红外气体池	(221)
二、	光管接口	(221)
三、	TGA/FTIR 专用接口装置	(221)
	参考文献	(224)
第七章	傅里叶变换红外光谱显微技术及应用	(227)
第一节	导言	(227)
第二节	红外显微镜原理和仪器结构	(228)
一、	非同轴光路系统红外显微镜	(228)
二、	同轴光路红外显微镜	(229)
三、	红外显微镜品种	(230)
第三节	红外显微镜系统影响因素	(231)
一、	光阑孔径的影响	(231)
二、	红外显微镜吸光度的影响	(233)
三、	红外显微镜的信噪比	(233)
第四节	红外显微镜的性能特点	(234)
一、	红外显微镜的特点	(234)
二、	红外显微镜使用的局限性	(235)
第五节	红外显微镜测试技术	(236)
一、	红外显微镜测试方法	(236)
二、	红外显微镜的样品超薄切片测试技术	(236)
第六节	红外显微镜的应用	(237)
一、	红外显微镜在法庭科学中的应用	(237)
二、	红外显微镜在聚合物研究中的应用	(240)
三、	红外显微镜在微区分析中的应用	(241)
四、	红外显微镜在生化物质研究中的应用	(242)
五、	扫描红外探针的应用	(243)
第七节	高压金刚石池微量采样技术	(244)
一、	高压金刚石池的结构	(244)
二、	高压金刚石池微量采样操作技术	(244)
三、	高压金刚石池采样方法的改进	(245)
第八节	高压金刚石池 (DAC) 微量采样技术的应用	(246)
一、	DAC 在油漆检验中的应用	(246)
二、	DAC 在塑料、树脂和橡胶等高分子物质检验中的应用	(247)
三、	DAC 在纤维检验中的应用	(247)
四、	DAC 在爆炸物检验中的应用	(248)
	参考文献	(249)
第八章	傅里叶变换近红外光谱技术及应用	(251)

第一节	傅里叶变换近红外光谱分析导论	(251)
一、	近红外光谱分析的发展简史	(251)
二、	近红外光谱的信号特征	(252)
三、	近红外光谱的信息特征	(253)
四、	近红外光谱的应用特征	(255)
第二节	有机物近红外光谱学基础	(256)
一、	C—H 键的近红外吸收带	(257)
二、	N—H 键的近红外吸收带	(259)
三、	O—H 键的近红外吸收带	(260)
四、	其它有机分子的近红外吸收带	(261)
第三节	近红外光谱仪器与常规近红外分析方法	(262)
一、	色散型近红外分光光度计	(262)
二、	傅里叶变换近红外光谱仪	(263)
三、	近红外光谱常规分析方法	(265)
第四节	傅里叶变换近红外漫反射光谱分析基础	(268)
一、	漫反射光谱参数	(268)
二、	多组分样品 NIRDRS 的理论	(272)
第五节	复杂样品近红外漫反射光谱分析的方法	(275)
一、	复杂样品近红外漫反射光谱分析的基本步骤	(275)
二、	复杂样品近红外漫反射光谱分析浓度定标方程的建立	(276)
三、	建立浓度定标方程的实际步骤	(276)
四、	多组分样品近红外漫反射光谱分析的浓度计算方程的优化	(277)
五、	多组分样品近红外漫反射光谱分析的误差与降低误差的方法	(279)
第六节	化学计量学在近红外光谱分析中的应用	(282)
一、	化学计量学在近红外光谱分析中的应用	(282)
二、	逐步回归分析	(283)
三、	主成分回归	(284)
四、	偏最小二乘法	(286)
五、	人工神经网络简介	(288)
附录：	逐步回归分析程序及应用实例	(289)
	参考文献	(300)
第九章	偏振红外光谱法	(302)
第一节	偏振红外光谱的原理	(302)
一、	偏振光	(302)
二、	偏振红外光谱的原理和特征	(303)
三、	红外二向色性比	(304)
四、	取向函数	(305)
第二节	偏振红外光谱的测定	(306)
一、	偏振器	(306)
二、	偏振红外光谱的测量方法	(308)

第三节	偏振红外光谱的应用	(312)
一、	研究化合物的结构与构象	(312)
二、	单分子膜分子取向与排列的研究	(313)
三、	归属化合物红外光谱的谱带	(313)
四、	高分子材料的取向、取向松弛及断裂过程的研究	(314)
五、	分离重叠的红外谱带	(315)
六、	在生物化学和生物物理研究中的应用	(316)
	参考文献	(321)
第十章	高压红外光谱法	(323)
第一节	红外透过压力容器	(323)
一、	耐高压的红外透过材料	(324)
二、	高压红外吸收池的种类与结构	(327)
第二节	压强的单位和压强的标定	(330)
一、	压强的单位	(330)
二、	压强的标定	(330)
第三节	高压红外光谱法的应用	(335)
一、	压力对光谱的影响	(335)
二、	高压下的相转变研究	(337)
三、	研究高压诱导产生的特殊晶型高聚物	(339)
四、	研究高分子与气体间的相互作用	(339)
五、	用于研究生化作用	(339)
六、	反应动力学研究	(340)
七、	研究压力对分子构象的影响	(341)
八、	红外光谱的谱带归属的研究	(342)
九、	金刚石砧型高压池在刑事侦破研究中的应用	(343)
十、	金刚石砧型高压池在地球化学和物理方面的应用	(344)
	参考文献	(346)
第十一章	傅里叶变换红外光热光声光谱技术	(348)
第一节	前言	(348)
一、	常规地解决样品不透明问题的方法	(348)
二、	新的解决不透明样品问题的方法	(348)
第二节	FTIR 光声光谱检测法基础	(351)
一、	气体样品的光声检测法	(351)
二、	固体样品的光声检测法	(354)
第三节	FTIR-PAS 光谱仪	(359)
一、	FTIR-PAS 光谱仪与 UV-VIS-PAS 光谱仪比较	(359)
二、	FTIR-PAS 的光学系统	(360)
三、	FTIR-PAS 光谱仪的性能	(361)
四、	光声探测器	(362)
第四节	FTIR-PAS 的归一化	(363)

一、	归一化的含意和方法	(363)
二、	影响光声光谱的因素	(364)
第五节	FTIR-PAS 实验技术	(367)
一、	系统调整与检验	(367)
二、	光声池的吹扫与充气	(368)
三、	样品及其处理	(369)
四、	增强光声信号的方法	(370)
五、	光声饱和的判断与消除	(371)
六、	参数选择	(371)
七、	FTIR-PAS 定量分析法	(372)
八、	光声光谱解析	(373)
九、	光声光谱的计算机检索	(374)
十、	光声光谱适用条件	(375)
第六节	FTIR-PAS 应用举例	(375)
第七节	FTIR-PAS 技术与其他制样技术的比较	(380)
	参考文献	(382)
第十二章	傅里叶变换红外动态光谱和时间分辨光谱	(383)
第一节	概述	(383)
第二节	稳态平衡中的瞬间物种的研究	(384)
第三节	慢变化体系的研究	(384)
一、	反应动力学方面的研究	(385)
二、	变温下结构变化的研究	(389)
三、	应变下聚合物结构的研究	(392)
第四节	快变化体系的测定	(392)
第五节	时间分辨光谱	(394)
一、	什么是时间分辨傅里叶光谱	(394)
二、	时间分辨 FTIR/TRS 的四种采集方式	(395)
三、	时间分辨谱中“假线”(artifact) 出现及模拟	(398)
四、	FTIR/TRS 应用	(402)
	参考文献	(408)
第十三章	傅里叶变换红外发射光谱技术及其应用	(410)
第一节	导言	(410)
一、	红外辐射的基本定律	(410)
二、	FTIR 发射光谱分析的测量方法	(412)
第二节	喷气式飞机燃料沉积物的 FTIR 发射光谱分析	(414)
第三节	FTIR 发射光谱在表面润滑剂分析上的应用	(417)
一、	表面残余润滑剂的分析	(417)
二、	油酸和硅润滑油的 FTIR 发射光谱分析	(422)
三、	润滑剂在摩擦过程中的 FTIR 发射光谱分析	(423)
第四节	FTIR 发射光谱在金属氧化物催化剂研究上的应用	(424)

一、 红外发射池·····	(425)
二、 金属氧化物催化剂的 FTIR 发射光谱研究·····	(426)
三、 催化剂热分解的 FTIR 发射光谱研究·····	(430)
第五节 矿物的 FTIR 发射光谱·····	(431)
一、 高温矿物及其热相变的 FTIR 发射光谱·····	(431)
二、 低温矿石的 FTIR 发射光谱·····	(434)
第六节 农药样品的 FTIR 发射光谱·····	(437)
参考文献·····	(440)
第十四章 遥感技术在傅里叶变换红外光谱中的应用·····	(442)
第一节 基本原理·····	(443)
一、 红外源辐射光谱能量分布测量原理与方法·····	(443)
二、 傅里叶变换红外光谱遥测气体组分·····	(446)
第二节 仪器的基本结构·····	(449)
第三节 遥感傅里叶变换红外光谱对工业排放气体的监测·····	(450)
一、 燃煤发电厂排烟污染的测定·····	(450)
二、 水泥厂水泥窑排放气体的测定·····	(452)
三、 炼油厂排放气体的测定·····	(452)
四、 化肥厂污水处理池对大气污染的测定·····	(453)
五、 制砖窑上空污染的测定·····	(454)
第四节 燃油发动机尾气的 FTIR 遥感分析·····	(455)
一、 红外辐射光源的选择·····	(455)
二、 喷气式飞机尾气的测定·····	(456)
三、 靶机尾气的 FTIR 遥感分析·····	(457)
四、 摩托车尾气的 FTIR 遥感测定·····	(458)
五、 水上摩托快艇尾气的 FTIR 遥感分析·····	(459)
第五节 用遥感傅里叶变换红外光谱研究固体推进剂的燃烧·····	(460)
一、 固体推进剂燃烧辐射的红外光谱能量分布·····	(460)
二、 燃烧产物的浓度测定·····	(461)
第六节 森林火灾的报警·····	(462)
第七节 傅里叶变换红外光谱遥测热气体温度·····	(463)
一、 Herget 测温法·····	(463)
二、 Wang Junde 测温法·····	(465)
三、 分子发射基带最大强度光谱线测温法·····	(467)
第八节 傅里叶变换红外光谱遥测某些特殊红外辐射源的红外光谱能量分布·····	(469)
一、 红外诱饵炬光谱能量分布的遥测·····	(469)
二、 喷气式飞机尾气红外辐射能量分布·····	(471)
结论·····	(472)
参考文献·····	(473)
第十五章 分子振动光谱理论和计算·····	(474)
第一节 分子振动光谱理论的进展·····	(474)

一、	引言.....	(474)
二、	振动频率理论——简正坐标分析.....	(475)
三、	振动谱带强度理论 (价键光学理论)	(476)
四、	展望.....	(478)
第二节	分子振动光谱的理论分析 (频率理论)	(479)
一、	笛卡儿位移坐标和振动久期方程.....	(480)
二、	内坐标.....	(482)
三、	G 矩阵.....	(484)
四、	力场和 F 矩阵	(486)
五、	简正坐标.....	(488)
六、	对称坐标.....	(491)
七、	势能分布.....	(493)
八、	简正振动的模式图.....	(494)
九、	均方振幅.....	(496)
十、	水分子的振动光谱.....	(497)
十一、	同位素分子的振动光谱.....	(503)
十二、	氟仿分子振动的简正坐标分析.....	(505)
十三、	NRCC 分子振动分析程序	(529)
第三节	红外光谱的强度理论.....	(536)
一、	引言.....	(536)
二、	偶极矩对简正坐标的导数.....	(537)
三、	采用对称坐标的强度.....	(543)
四、	$(\partial \mu / \partial Q)_0$ 的算例	(545)
五、	关于 GRIBOV 光学光谱软件包的说明	(553)
	参考文献.....	(571)
第十六章	红外特征基团频率与分子结构的关系.....	(573)
第一节	影响特征基团频率位移的因素.....	(573)
一、	特征基团频率与指纹频率.....	(573)
二、	影响特征基团频率位移的因素.....	(574)
第二节	烷烃.....	(582)
一、	C—H 伸缩振动	(582)
二、	C—H 变角振动	(583)
三、	C—C 伸缩振动和变角振动	(585)
第三节	烯烃.....	(585)
一、	双键上 C—H 伸缩振动.....	(586)
二、	C=C 伸缩振动	(586)
三、	双键上 C—H 变角振动.....	(588)
第四节	X≡Y 和 X=Y=Z 基团	(589)
第五节	芳香烃.....	(592)
一、	苯环上=C—H 伸缩振动	(592)

二、	苯环骨架振动·····	(593)
三、	苯环上=C—H 变角振动·····	(593)
四、	2000—1660cm ⁻¹ 区域的吸收·····	(595)
第六节	醇和酚·····	(595)
一、	X—H 基团振动频率·····	(595)
二、	O—H 伸缩振动·····	(596)
三、	C—OH 伸缩振动和 O—H 平面变角振动·····	(598)
四、	O—H 非平面变角振动·····	(599)
五、	观察 OH 基团吸收应注意的事项·····	(599)
第七节	醚及相关基团·····	(599)
第八节	胺类·····	(601)
一、	N—H 伸缩振动·····	(602)
二、	N—H 变角振动·····	(603)
三、	C—N 伸缩振动·····	(604)
四、	N—CH ₃ 吸收·····	(605)
五、	鉴别胺类化合物应注意的事项·····	(605)
第九节	铵盐·····	(606)
第十节	酮类化合物·····	(607)
一、	羰基化合物的振动吸收概况·····	(607)
二、	酮类化合物的振动吸收·····	(608)
第十一节	醛类化合物·····	(611)
第十二节	羧酸·····	(613)
一、	O—H 伸缩振动·····	(613)
二、	羧基伸缩振动·····	(613)
三、	O—H 平面变角振动·····	(613)
四、	C—O 伸缩振动·····	(614)
五、	O—H 非平面变角振动·····	(614)
第十三节	羧酸盐·····	(615)
第十四节	酸酐·····	(616)
第十五节	酯和内酯·····	(618)
第十六节	酰卤·····	(621)
第十七节	酰胺·····	(621)
一、	伯酰胺·····	(622)
二、	仲酰胺·····	(622)
三、	叔酰胺·····	(623)
四、	环状内酰胺·····	(623)
五、	其他含酰胺基化合物的羰基吸收·····	(623)
第十八节	氨基酸及其盐·····	(625)
第十九节	含硝基、亚硝基类化合物·····	(626)
一、	硝基化合物、硝酸酯和硝基胺·····	(626)