



普通高等教育“十二五”规划教材

基础仪器分析

主 编 黄承志

副主编 陈纘光 陈子林 卢建忠

徐 溢 范 琦 王 健



科学出版社

普通高等教育“十二五”规划教材

基础仪器分析

主 编 黄承志

副主编 陈纘光 陈子林 卢建忠

徐 溢 范 琦 王 健



科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书共 25 章, 涉及光谱及波谱分析、电化学分析、色谱及分离分析和成像分析。在相关章节中列举了仪器分析知识在药物分析中的应用实例, 可进一步理解仪器分析的基础知识与药学专业的关系, 并为药物分析课程的学习打下基础。每章后均有不同形式的习题, 可用于理解和巩固基础知识。

本书是药学类专业的基础教材, 可供全国高等学校药学及制药工程专业使用, 也可供中药、化学等其他相关专业使用; 不仅可用作研究生考试参考书, 还可供有关科研单位或药品等质量检验部门的科研、技术人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

基础仪器分析/黄承志主编. —北京: 科学出版社, 2017.12

普通高等教育“十二五”规划教材

ISBN 978-7-03-055942-5

I. ①基… II. ①黄… III. ①仪器分析—高等学校—教材 IV. ①O657

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 309433 号

责任编辑: 赵晓霞 / 责任校对: 何艳萍

责任印制: 师艳茹 / 封面设计: 迷底书装

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>

天津市新科印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017 年 12 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2017 年 12 月第一次印刷 印张: 37 1/4

字数: 950 000

定价: 98.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

《基础仪器分析》编写委员会

主 编 黄承志

副主编 陈纘光 陈子林 卢建忠

徐 溢 范 琦 王 健

编 委 (以姓名汉语拼音为序)

曹志娟(复旦大学)	陈 敏(西南大学)	陈 莹(武汉大学)
陈子林(武汉大学)	陈纘光(中山大学)	范 琦(重庆医科大学)
高鹏飞(西南大学)	郝石磊(重庆大学)	胡继伟(重庆医科大学)
黄承志(西南大学)	计晓娟(重庆医科大学)	季金苟(重庆大学)
梁建英(复旦大学)	梁淑彩(武汉大学)	卢建忠(复旦大学)
王 芳(武汉大学)	王 健(西南大学)	王国伟(西南大学)
谢智勇(中山大学)	徐 溢(重庆大学)	徐新军(中山大学)
杨晓明(西南大学)	姚美村(中山大学)	张晓凤(重庆大学)
甄淑君(西南大学)	周 骏(西南大学)	周 颢(中山大学)

各章编写人员

第1章	黄承志	王健		
第2章	徐溢	周骏	高鹏飞	黄承志
第3章	季金苟	徐溢		
第4章	徐溢	郝石磊		
第5章	卢建忠	曹志娟		
第6章	甄淑君	黄承志		
第7章	陈莹	范琦		
第8章	梁淑彩	陈子林		
第9章	杨晓明	计晓娟		
第10章	陈敏	王国伟		
第11章	陈敏			
第12章	周颀	陈缙光	王芳	
第13章	姚美村	陈缙光		
第14章	王芳	计晓娟		
第15章	计晓娟			
第16章	胡继伟			
第17章	徐新军			
第18章	梁建英	胡继伟		
第19章	梁建英	胡继伟		
第20章	谢智勇	陈敏		
第21章	陈子林			
第22章	张晓凤	徐溢	黄承志	
第23章	郝石磊	徐溢		
第24章	杨晓明			
第25章	计晓娟	范琦	黄承志	

前 言

基础仪器分析是药学类及相关专业的一门基础课程。学习本课程的目的是使读者在学习基础分析化学课程之后能进一步巩固“分析”的思维,充分认识“科学研究始于测量”,认识到通过制造分析工具、搭建分析仪器测试平台、设备和设施,可以延伸人的知觉和功能,通过测量获得新发现、找到新规律,进而将所学习的“分析”基础知识应用于药物研发、药品质量控制、个体化合理用药,实现精准医疗。为此,本书主要突出以下4个特点:

(1) 保持了《基础分析化学》的编写风格,贯彻科学的历史、哲学和社会互融的教育理念,将知识性、趣味性和创新性融为一体,列出了大量的“延伸阅读”和“学习与思考”,以丰富读者的课外阅读,加强科学技术史教育,培养科学唯物史观和创新性思维,希望读者在学习过程中能形成自己的观点和看法,能应用于创新实践的各个方面。

(2) 在内容选择上,考虑到波谱分析的重要性,因而除了一般仪器分析教材中所涉及的光谱分析、电分析、色谱分析外,把波谱分析与光谱分析内容融为一体。

(3) 考虑到现代药物研发实践过程中对药学专业读者要求的多面性和广博性,特别是现代纳米技术发展和临床医学中各种成像技术的发展,融入了光散射光谱分析、X射线光谱分析、显微成像分析等内容,增加了在药物研发中特别重要的制备液相色谱、超临界流体色谱和毛细管电泳分析等内容。考虑到药学专业的特点,增加了临床医学成像分析。这些增加的内容可供教学参考,有兴趣的读者也可以作为课外阅读材料拓宽知识面。

(4) 为了让读者尽早适应后续基础药物分析课程的教学,使用的示例大多采用药典中的规范形式。

本书分为4篇共25章,建议安排72课时。除核磁共振波谱分析(第10章)、质谱分析(第11章)、气相色谱分析(第18章)和高效液相色谱分析(第19章)每章为6课时外,其余每章大致为3课时。绪论(第1章)可安排3课时,第1篇光谱及波谱分析共10章(第2~11章)可安排36课时;第2篇电化学分析共4章(第12~15章)可安排9课时;第3篇中色谱分析共4章(第16~19章)可安排15课时,现代分离技术共2章(第20章和第21章)可安排3课时;第4篇成像分析共4章(第22~25章)可安排6课时。教学过程中可根据实际情况有选择地学习有关内容,保持教学内容的灵活性,也可以根据兴趣和需要自学。

与编写《基础分析化学》的目的一样,我们衷心希望读者在学习过程中能形成自己的观点和看法,科学地看待分析仪器在现代科学发展中的重要作用,通过学习融合相关学科的最新知识,形成自己的创新理念、永葆创新活力,始终保持创新性和先进性,从而成为未来知识的创造者、缔造者和技术发明者。需要说明的是,我们可以充分利用各种资源搭建新的分析仪器,建立新的仪器分析方法,从而实现分析仪器的创新,在智慧制造时代实现新的跨越。

本书由西南大学、中山大学、武汉大学、复旦大学、重庆大学和重庆医科大学长期从事教学和科研一线的教师 in 总结其工作实践经验的基础上编写而成,引入了很多现代分析化学的研究成果,目的在于向读者展示科学研究和科学创新无止境。全书最后由西南大学黄承志教授和

王健教授通读、修改和统稿。

在本书的编写和出版过程中得到了西南大学、中山大学、武汉大学、复旦大学、重庆大学和重庆医科大学领导和同行的支持。科学出版社赵晓霞编辑为本书的出版付出了辛勤劳动。在此，我代表编委会对所有支持、关心和参与本书编写、出版的各位领导、同仁表示衷心感谢。本书初稿于 2016 年下学期在西南大学药学院和中山大学药学院试用，得到了部分老师和学生的反馈意见 and 建议。在此基础上，于 2016 年 11 月在重庆召开了定稿会。我们期待着使用本书的老师和学生能进一步为本书提出修改建议，并在修订版中得到改正，在此先行致谢。

当然，书中有很多不足之处，需要进一步完善和更新。衷心希望广大读者在使用过程中发现问题、找出问题，并及时反馈给我们，以便更好地为药学及相关专业的基础教学服务。

黄承志

2017 年 6 月于西南大学弘光垒

联系邮箱: chengzhi@swu.edu.cn

目 录

前言	
第 1 章 绪论	1
1.1 什么是仪器分析	2
1.1.1 分析仪器	2
1.1.2 仪器分析	3
1.2 为什么要学习仪器分析	3
1.2.1 仪器分析的任务	3
1.2.2 可用于分析目的物质性质	4
1.2.3 仪器分析的内容	5
1.2.4 分析仪器的类型与结构	5
1.3 如何学好仪器分析	6
1.4 现代仪器分析在新药研发中的应用	7
1.4.1 药物发现过程中的仪器分析	7
1.4.2 药物临床前研究过程中的仪器分析	7
1.4.3 药物临床研究过程中的仪器分析	8
1.4.4 药物生产、上市及上市后监测过程中的仪器分析	8
1.5 仪器分析发展简史	9
1.5.1 分析仪器发展的三个阶段及特征	9
1.5.2 仪器分析的发展趋势	11

第 1 篇 光谱及波谱分析

第 2 章 光谱分析导论	14
2.1 光的本质	14
2.1.1 光的波粒二象性	14
2.1.2 电磁波	16
2.2 光与物质的相互作用	18
2.2.1 物质的光吸收与光发射	18
2.2.2 物质的光散射	20
2.2.3 光与物质作用的其他方式	21
2.3 物质的颜色及测量	21
2.3.1 物质的颜色与光的关系	21
2.3.2 人类的色觉	23
2.3.3 三原色原理	25
2.3.4 标准色度学系统	26

2.3.5 色度计算方法	27
2.4 光谱分析仪器	28
2.4.1 光谱分析仪器的基本结构	28
2.4.2 光源	28
2.4.3 单色系统	28
2.4.4 样品室	29
2.4.5 检测系统	30
2.4.6 数据处理和显示系统	31
2.5 光谱分析法	31
2.5.1 光谱分析法的分类	31
2.5.2 光谱分析法的属性	33
第3章 紫外-可见分子吸收光谱分析	36
3.1 分子轨道理论与有机分子的电子跃迁	36
3.1.1 分子轨道理论	36
3.1.2 电子跃迁的类型	37
3.1.3 生色团和助色团	39
3.1.4 波长红移与蓝移、增色与减色效应	40
3.2 有机化合物的紫外-可见吸收光谱	42
3.2.1 饱和烃及其衍生物	42
3.2.2 不饱和烃及其共轭烯烃	43
3.2.3 羰基化合物	43
3.2.4 芳香族化合物	43
3.3 无机化合物的紫外-可见吸收光谱	45
3.3.1 电荷转移跃迁	45
3.3.2 配位场跃迁	45
3.4 影响紫外-可见分子吸收光谱的因素	46
3.4.1 分子结构对光吸收的影响	46
3.4.2 环境效应	47
3.5 光吸收定律	49
3.5.1 朗伯-比尔定律	49
3.5.2 摩尔吸光系数和桑德尔灵敏度	50
3.5.3 朗伯-比尔定律成立的前提条件	51
3.5.4 朗伯-比尔定律的偏离	52
3.6 紫外-可见分光光度计	54
3.6.1 光源	55
3.6.2 双光束光路系统	55
3.6.3 样品池	55
3.7 分子吸收光谱的测定	57
3.7.1 试样的制备	57
3.7.2 测量条件的选择	57

3.7.3 参比溶液的选择	59
3.8 金属离子的测定	60
3.8.1 显色反应	60
3.8.2 显色剂	60
3.8.3 显色条件的选择	62
3.8.4 干扰及其消除方法	64
3.9 分子吸收光谱在药物分析中的应用	65
3.9.1 定性分析	65
3.9.2 定量分析	67
第4章 红外吸收光谱分析	72
4.1 概述	72
4.1.1 基本概念	72
4.1.2 红外光谱分析的特点及主要应用领域	73
4.2 红外吸收光谱分析法的基本原理	74
4.2.1 产生分子红外吸收的条件	74
4.2.2 红外光谱分析的理论模型	75
4.2.3 影响红外吸收峰强度的因素	77
4.2.4 影响基团吸收峰位置的因素	78
4.3 红外吸收光谱与分子结构	80
4.3.1 官能团区和指纹区	80
4.3.2 红外光谱的基本区域	81
4.3.3 典型化学键的红外吸收光谱	83
4.4 红外光谱分析法	85
4.4.1 红外光谱定性分析	85
4.4.2 红外光谱定量分析	85
4.5 红外吸收光谱仪及样品制备技术	86
4.5.1 红外吸收光谱仪的类型及构成	86
4.5.2 红外光谱分析的样品制备	88
4.6 近红外光谱分析	89
4.6.1 概述	89
4.6.2 近红外光谱分析原理	90
4.6.3 近红外谱带的归属	91
4.6.4 近红外光谱分析仪器简介	92
4.7 红外吸收光谱分析在药物研发中的应用	95
4.7.1 在合成类药物研发中的应用	95
4.7.2 在中药活性组分研发中的应用	95
4.7.3 药品鉴定和分析示例	96
4.7.4 制药过程分析中的应用示例	97
第5章 分子发光分析	100
5.1 分子发光的类型	100

5.2	分子荧光分析法	101
5.2.1	荧光及磷光	101
5.2.2	分子荧光和磷光的产生	102
5.2.3	荧光激发光谱和发射光谱	104
5.2.4	荧光光谱的特征	105
5.2.5	荧光特征参数	107
5.2.6	荧光发射与分子结构	108
5.2.7	荧光分子的各向异性	111
5.2.8	影响分子荧光发射的环境因素	112
5.2.9	分子荧光分析法	116
5.2.10	分子荧光分析法的应用	118
5.2.11	荧光分光光度计	119
5.3	化学发光分析法	121
5.3.1	化学发光的产生	122
5.3.2	典型化学发光体系	124
5.3.3	化学发光分析仪器	128
5.4	生物发光分析法	129
第6章	光散射光谱分析	132
6.1	光散射现象及种类	132
6.1.1	光散射现象	132
6.1.2	光散射种类	132
6.2	光散射的本质	133
6.2.1	丁铎尔散射	133
6.2.2	瑞利散射	134
6.2.3	米氏散射	135
6.2.4	密度涨落理论	136
6.2.5	拉曼散射	138
6.2.6	布里渊散射	139
6.2.7	康普顿散射	140
6.3	共振光散射光谱分析	140
6.3.1	共振光散射光谱分析法的理论基础	141
6.3.2	共振光散射增强	142
6.3.3	共振光散射光谱分析法	142
6.3.4	共振光散射光谱分析法的应用	143
6.3.5	共振光散射技术的发展	144
6.4	拉曼散射光谱分析	144
6.4.1	概论	144
6.4.2	基本原理	144
6.4.3	激光拉曼光谱仪	146
6.4.4	激光拉曼光谱法	147

6.4.5	共振拉曼散射光谱法	147
6.4.6	表面增强拉曼散射光谱法	148
第7章	原子吸收光谱分析	150
7.1	概述	150
7.1.1	原子吸收光谱分析法的优点	150
7.1.2	原子吸收光谱分析法的局限性	150
7.2	原子吸收光谱分析法的基本原理	151
7.2.1	原子吸收光谱的产生	151
7.2.2	原子吸收谱线的特征	152
7.2.3	原子吸收光谱的谱线变宽	153
7.3	原子吸收光谱的测量	157
7.3.1	积分吸收测量法	157
7.3.2	峰值吸收测量法	157
7.3.3	锐线光源	158
7.3.4	基态原子数与原子化温度	158
7.3.5	原子吸收定量分析法的定量分析基础	159
7.4	原子吸收分光光度计	159
7.4.1	光源	160
7.4.2	原子化系统	160
7.4.3	光学系统	161
7.4.4	检测系统	162
7.5	原子吸收光谱分析法的干扰及其抑制	162
7.5.1	光谱干扰及其抑制	162
7.5.2	化学干扰及其消除	164
7.5.3	物理干扰及其消除	164
7.6	定量分析方法	165
7.6.1	标准曲线法	165
7.6.2	标准加入法	165
7.6.3	原子吸收光谱的测定条件	167
7.6.4	原子吸收光谱分析法的特征参数	168
7.7	原子吸收光谱分析法在药物研发中的应用	168
第8章	原子发射光谱分析	173
8.1	概述	173
8.2	原子发射光谱分析法的基本原理	174
8.2.1	原子发射光谱的产生	174
8.2.2	谱线的类型	175
8.2.3	谱线的宽度和轮廓	176
8.2.4	谱线的自吸与自蚀	176
8.2.5	影响谱线强度的因素	176
8.3	原子发射光谱仪	177

8.3.1	激发光源	178
8.3.2	分光系统	179
8.3.3	检测系统	181
8.4	原子发射光谱分析	183
8.4.1	定性分析	183
8.4.2	半定量分析	184
8.4.3	定量分析	185
8.4.4	分析线、内标元素及内标线的选择	186
8.5	原子发射光谱在药物研发中的应用	186
8.5.1	在药品质量控制中的应用	187
8.5.2	在药理毒理研究中的应用	187
8.5.3	在中药研发中的应用	188
8.6	原子荧光光谱分析法	189
8.6.1	原子荧光简介	189
8.6.2	原子荧光光谱仪	189
8.6.3	原子荧光分析法的特点及其应用	189
第9章	X射线光谱分析	191
9.1	概述	191
9.2	X射线的产生及弛豫现象	191
9.2.1	X射线的产生	191
9.2.2	弛豫现象	194
9.3	X射线光谱仪	194
9.3.1	X射线源	194
9.3.2	入射波长限定装置	195
9.3.3	X射线检测器	196
9.3.4	信号处理器	198
9.4	X射线吸收光谱分析法	198
9.4.1	X射线的吸收	198
9.4.2	X射线吸收光谱分析法的原理	198
9.4.3	X射线吸收光谱分析法的应用	199
9.5	X射线荧光光谱分析法	199
9.5.1	定性分析	200
9.5.2	定量分析	200
9.5.3	仪器装置	200
9.6	X射线衍射光谱分析法	201
9.6.1	X射线衍射光谱分析法的原理	201
9.6.2	晶体结构分析	202
9.6.3	X射线衍射强度	205
9.6.4	X射线衍射光谱分析	205
9.7	X射线光电子能谱分析法	208

9.7.1	基本原理	208
9.7.2	化学位移及其影响因素	208
9.7.3	X 射线光电子能谱仪	211
9.7.4	X 光电子能谱的定性与定量分析	214
9.8	X 射线光谱分析在药物研发中的应用	215
第 10 章	核磁共振波谱分析	217
10.1	概述	217
10.2	核磁共振的原理	218
10.2.1	原子核的自旋和磁矩	218
10.2.2	核磁共振现象	220
10.2.3	自旋弛豫	221
10.3	核磁共振波谱仪	221
10.3.1	核磁共振的产生方式	221
10.3.2	连续波核磁共振波谱仪	222
10.3.3	脉冲傅里叶变换核磁共振波谱仪	224
10.4	化学位移	225
10.4.1	化学位移的产生	225
10.4.2	化学位移的表示方法	226
10.4.3	化学位移的影响因素	227
10.4.4	NMR 波谱的测定	229
10.4.5	常见结构的化学位移	231
10.5	自旋偶合和自旋分裂	231
10.5.1	自旋偶合	231
10.5.2	核的等价性	232
10.5.3	偶合常数	233
10.6	核磁共振氢谱的解析	235
10.6.1	核磁共振氢谱	235
10.6.2	核磁共振氢谱的解析步骤	235
10.7	核磁共振碳谱及解析	236
10.7.1	核磁共振碳谱的特点	236
10.7.2	^{13}C 核磁共振谱的化学位移	237
10.7.3	影响 ^{13}C 化学位移的因素	238
10.7.4	常见的 ^{13}C 核磁共振谱	239
10.7.5	^{13}C 核磁共振谱的解析步骤	241
10.8	二维核磁共振谱	242
10.8.1	基本原理及类别	242
10.8.2	同核化学位移相关谱	243
10.8.3	多量子跃迁谱	244
10.9	核磁共振波谱在药物研发中的应用	245
10.9.1	药物靶标生物大分子结构的解析	245

10.9.2 药物代谢和药物筛选中的应用	246
10.10 现代磁共振分析技术	246
10.10.1 固体高分辨核磁共振谱	246
10.10.2 计算机辅助有机化合物结构解析	247
第 11 章 质谱分析	251
11.1 概述	251
11.1.1 质谱与质谱分析法	251
11.1.2 质谱分析法的特点	252
11.2 质谱分析仪	253
11.2.1 质谱分析仪的主要构件	253
11.2.2 真空系统	253
11.2.3 进样系统	253
11.2.4 离子源	255
11.2.5 质量分析器	260
11.2.6 检测器及数据处理系统	264
11.2.7 质谱仪的主要性能指标	265
11.3 质谱图及化学键的主要裂解方式	267
11.3.1 质谱的表示方式	267
11.3.2 质谱图中主要离子峰类型	268
11.3.3 化学键的主要裂解方式	271
11.4 质谱定性分析与定量分析	273
11.4.1 质谱定性分析	273
11.4.2 质谱定量分析	275
11.5 现代质谱分析技术	276
11.5.1 基质辅助激光解吸离子化-飞行时间质谱	276
11.5.2 傅里叶变换离子回旋共振质谱仪	277
11.5.3 串联质谱	277
11.5.4 电感耦合等离子体质谱	279

第 2 篇 电化学分析

第 12 章 电化学分析导论	282
12.1 概述	282
12.1.1 电化学分析法分类	283
12.1.2 电化学分析法的特点	284
12.2 化学电池	284
12.2.1 化学电池的种类	284
12.2.2 丹尼尔电池	284
12.3 电池电动势	286
12.3.1 电极-溶液相界面电位差	286
12.3.2 液体-液体相界面电位差	286

12.3.3 电极-导线相界面电位差	287
12.3.4 原电池的电动势	287
12.4 极化现象	287
12.4.1 浓差极化	287
12.4.2 电化学极化	288
12.5 指示电极	288
12.5.1 金属基电极	289
12.5.2 膜电极	291
12.6 参比电极	293
12.6.1 甘汞电极	294
12.6.2 银-氯化银电极	295
12.7 盐桥	295
第 13 章 电导分析	298
13.1 概述	298
13.2 电解质溶液的导电现象	298
13.2.1 导体	298
13.2.2 电解质溶液的导电机制	301
13.2.3 法拉第定律	301
13.3 电导分析法的基本原理	302
13.3.1 电导与电导率	302
13.3.2 影响电导分析法的因素	303
13.4 溶液电导的测量	305
13.4.1 电极和电导池	305
13.4.2 电导仪	306
13.4.3 无电极式电导测量法	306
13.4.4 非接触式电导法	306
13.5 电导分析法及其应用	307
13.5.1 直接电导法	307
13.5.2 电导法的应用	307
13.6 电导检测器	309
13.6.1 接触式电导检测器	309
13.6.2 非接触式电导检测器	310
第 14 章 电位分析	312
14.1 概述	312
14.2 电位分析法的理论基础	312
14.3 酸度计	314
14.3.1 酸度计的种类与结构	314
14.3.2 pH 计的工作原理	315
14.4 离子选择电极	317
14.4.1 离子选择电极的种类	317

14.4.2	原电极	318
14.4.3	敏化膜电极	323
14.4.4	离子敏场效应晶体管	326
14.4.5	离子选择电极的性能参数	326
14.5	直接电位分析	328
14.5.1	标准曲线法	329
14.5.2	直接比较法	329
14.5.3	标准加入法	329
14.6	电位滴定法	331
14.6.1	滴定曲线及滴定终点	331
14.6.2	指示电极的选择	333
14.7	压电现象	335
14.7.1	压电效应的原理	335
14.7.2	压电材料的主要参数	336
14.7.3	压电方程	338
14.7.4	压电振子	338
第 15 章	极谱法与伏安分析	342
15.1	概述	342
15.2	经典极谱分析	343
15.2.1	极谱分析法原理	343
15.2.2	极谱波	344
15.2.3	极谱波的类型	345
15.2.4	极谱波方程	346
15.2.5	扩散电流方程	346
15.2.6	干扰电流及其消除	347
15.2.7	极谱法的测定	348
15.2.8	极谱法的应用	349
15.3	现代极谱分析	349
15.3.1	单扫描极谱法	349
15.3.2	脉冲极谱法	350
15.3.3	极谱催化波	351
15.4	伏安分析法	352
15.4.1	循环伏安法	353
15.4.2	溶出伏安法	354
15.5	超声电分析化学	355
15.5.1	超声伏安分析法	356
15.5.2	电极过程动力学	356
15.5.3	超声电化学发光分析	356