



普通高等教育“十一五”国家级规划教材

仪器分析

● 刘志广 主编

ANALYSIS



高等教育出版社

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

仪器分析

刘志广 主编

高等教育出版社

内容提要

本书是教育部普通高等教育“十一五”国家级规划教材。本书是作者在总结长期教学和教学改革实践的基础上,为适应高等工科院校仪器分析课程教学改革和学科内容快速发展的需要而编写的。全书力求以发展观和全局观来诠释分析仪器的创建、发展过程与作用。重点突出各种仪器分析方法的基本原理和应用,较多引入学科前沿知识,强调在课程学习中对学生能力和创新意识的培养。

全书共分为 13 章,内容包括电化学分析法、色谱分析法、光学分析法、质谱分析法、流动注射分析法与微流控分析芯片等方面内容。内容新颖,结构合理。

本书可作为高等工科院校仪器分析课程的教材使用,也可供其他类型院校及相关专业的教师、学生和分析工作者参考。

图书在版编目(CIP)数据

仪器分析/刘志广主编. —北京:高等教育出版社,
2007.7

ISBN 978-7-04-021740-7

I. 仪... II. 刘... III. 仪器分析-高等学校-
教材 IV. O657

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 070793 号

策划编辑 翟 怡 责任编辑 耿承延 封面设计 张申申 责任绘图 尹 莉
版式设计 史新薇 责任校对 张 颖 责任印制 毛斯璐

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街 4 号
邮政编码 100011
总 机 010-58581000

经 销 蓝色畅想图书发行有限公司
印 刷 唐山市润丰印务有限公司

开 本 787×960 1/16
印 张 29
字 数 550 000

购书热线 010-58581118
免费咨询 800-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.landaco.com>
<http://www.landaco.com.cn>
畅想教育 <http://www.widedu.com>

版 次 2007 年 7 月第 1 版
印 次 2007 年 7 月第 1 次印刷
定 价 33.00 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 21740-00

前 言

仪器分析已成为高等工科院校化学、化工类各专业的一门重要基础课,传统的课程体系和教学内容以及教学理念都远远不能满足课程发展和教学改革的需要。分析化学学科的迅速发展,也使得仪器分析课程的内容十分丰富,在有限的课时内,很难做到全面详细讲授。仪器分析作为高等工科院校的一门基础课,在保持课程教学基本要求的基础上,如何对大量的内容进行取舍,使之既能够体现工科院校教学特点,满足工科大学对仪器分析课程教学的基本需要,又能使学生对课程整体及学科发展前沿有所了解,这就是本教材所努力追求的目标。

创新型人才培养和能力与素质的提高是目前高校教学改革的中心,教材的编写也需要体现这种发展变化。本教材不但注重各种仪器分析方法基本原理的阐述,而且试图从点、线、面三个层次,以发展观和全局观来诠释分析仪器的创建、发展过程与作用。同时关注仪器分析方法研究中的热点问题;挖掘各类分析仪器发展过程中的创新主线,如电化学分析法中,由电解分析到经典极谱,再到各种现代极谱分析的发展演变过程;色谱分析中,由经典柱层析到各种现代高效色谱分析方法等;引入具有广阔发展前景的新的仪器分析类别,如微流控分析芯片等。努力探索在基础课程教学中如何对学生创新意识进行引导和培养。

本教材内容的覆盖面较广,增加了较多新内容,这是为了使本教材在内容体系上趋于完整,增强教材的通用性,以方便各院校根据各自的教学需要进行适当取舍。微流控分析芯片是近十几年来分析科学领域中出现的非常引人注目的成果,发展迅速。目前,该方面的内容在教材中的出现尚不多见。本书增加该方面内容的目的是一是考虑其重要性和可持续发展前景,保持教材内容的先进性和与时俱进的特色;二是让学生深入了解学科发展动态,更有利于学生创新思维能力的培养。

本书在编写过程中,参考了国内外出版的一些优秀教材和专著,引用了其中的某些数据和图表,在此向有关作者表示衷心感谢。

本书可作为高等工科院校仪器分析课程的教材使用,也可作为综合性大学化学系及相关专业的仪器分析课程的参考教材。

本书第1章—第8章及第13章由刘志广编写,第9章—第12章由张华编写,全书由刘志广统稿。由于作者本人水平和能力有限,书中难免会有错误和不当之处,敬请广大读者批评指正。

全书由南开大学何锡文教授审阅。何锡文教授在详细审阅后,提出了十分

详细的宝贵意见和修改建议,在此表示由衷地感谢。高等教育出版社的岳延陆、陈琪琳一直关心本书的出版,给予很多指导,翟怡为本书的出版做了许多工作,在此谨致衷心的感谢。

多媒体已成为教学的有力工具。由于仪器分析课程自身的特性,多媒体在课程教学中更是发挥着重要作用。作者多年来从事分析化学多媒体教学软件的研究和开发工作,研制出版的多个仪器分析多媒体教学软件受到了各兄弟院校同行的厚爱,在本教材出版之际,对原出版的仪器分析电子教案也进行了全面改版。新版版面新颖,时代气息浓郁,特色突出,且内容更加丰富。教学中教材与电子教案配套使用将会相得益彰,我们愿意与使用本教材的兄弟院校同行共享教学改革的成果。需要者可与作者或高等教育出版社联系。

编 者

2007 年 1 月

目 录

第一章 绪论	1
1.1 概述	1
1.1.1 概述	1
1.1.2 仪器分析的分类及特点	1
1.1.3 仪器分析的发展过程	3
1.2 计算机与分析仪器	4
1.2.1 计算机对仪器分析发展的促进作用	4
1.2.2 分析仪器中的计算机应用技术	6
1.3 分析仪器的信息评价与处理	9
1.3.1 信息和熵	9
1.3.2 分析化学实验中信息量和熵	10
1.3.3 分析仪器的最大信息量	11
1.3.4 仪器的效率和剩余度	11
思考题与习题	12
第二章 电化学分析法	13
2.1 电化学分析法概述	13
2.2 电位法	15
2.2.1 电位法的基本原理	15
2.2.2 离子选择性电极	16
2.2.3 离子选择性电极的特性	25
2.2.4 电位分析方法及应用	27
2.3 电重量法与库仑法	33
2.3.1 电重量法	33
2.3.2 库仑法	35
2.3.3 库仑滴定	37
2.3.4 微库仑分析技术	39
2.4 伏安法	40
2.4.1 极谱法的基本原理	41
2.4.2 现代极谱分析方法介绍	50
2.4.3 溶出伏安法	56

2.4.4 循环伏安法	59
2.5 电化学分析专题	61
2.5.1 化学修饰电极	61
2.5.2 生物电化学分析	62
2.5.3 光谱电化学分析	63
思考题与习题	64
第三章 色谱理论基础与气相色谱法	66
3.1 色谱法概述	66
3.1.1 色谱法的特点和分类	67
3.1.2 色谱基本参数与色谱曲线的表征	68
3.2 色谱理论基础	69
3.2.1 气相色谱分离过程中的基本关系式	70
3.2.2 塔板理论	73
3.2.3 速率理论	74
3.2.4 分离度	76
3.3 气相色谱仪	78
3.3.1 气相色谱仪结构流程	78
3.3.2 气相色谱固定相	80
3.3.3 气相色谱检测器	84
3.4 气相色谱分离操作条件的选择	91
3.4.1 色谱柱及使用条件的选择	91
3.4.2 载气种类和流速的选择	93
3.4.3 其他操作条件的选择	94
3.5 色谱定性、定量分析方法	94
3.5.1 色谱定性鉴定方法	94
3.5.2 色谱定量分析方法	95
3.6 气相色谱应用技术	98
3.6.1 毛细管气相色谱分析	98
3.6.2 裂解气相色谱分析	99
3.6.3 顶空气相色谱分析	101
3.6.4 二维气相色谱分析	103
思考题与习题	104
第四章 高效液相色谱法和超临界流体色谱法	106
4.1 高效液相色谱的特性	106
4.2 高效液相色谱仪	108

4.2.1	高效液相色谱仪与流程	108
4.2.2	高效液相色谱仪的主要部件	109
4.3	液相色谱的固定相与流动相	114
4.3.1	液相色谱的固定相	114
4.3.2	液相色谱的流动相	116
4.4	液相色谱中的主要分离类型	118
4.4.1	液-固吸附色谱	118
4.4.2	液-液分配与化学键合相色谱	120
4.4.3	离子交换色谱	121
4.4.4	离子对色谱	122
4.4.5	空间排阻色谱	123
4.4.6	亲和色谱	125
4.5	液相色谱分析条件的选择	125
4.5.1	一般条件选择	125
4.5.2	分离类型选择	125
4.5.3	流动相的选择	126
4.6	高效液相色谱法的应用	129
4.6.1	高效液相色谱的分析应用	129
4.6.2	制备型液相色谱	129
4.7	离子色谱法	132
4.7.1	离子色谱法的基本原理与特点	132
4.7.2	离子色谱流程与装置类型	133
4.7.3	离子色谱法的应用	134
4.8	超临界流体色谱法	136
4.8.1	超临界流体色谱的特点与原理	136
4.8.2	超临界流体色谱仪的结构流程	139
4.8.3	超临界流体色谱法的应用	140
	思考题与习题	141
第五章	毛细管电泳	143
5.1	毛细管电泳的基本原理	143
5.1.1	概述	143
5.1.2	毛细管电泳基本原理	144
5.2	毛细管电泳仪	150
5.2.1	毛细管电泳仪的基本结构与流程	150
5.2.2	进样系统	151

5.2.3 检测器	152
5.3 毛细管电泳的分离模式	153
5.4 影响分辨率的因素及操作条件选择	156
5.4.1 工作电压的选择	156
5.4.2 毛细管选择与温度控制	157
5.4.3 毛细管电泳中的电解效应及分离介质的选择	158
5.5 毛细管电泳的应用	160
5.5.1 离子化合物的分析	160
5.5.2 在生物化学中的应用	160
5.5.3 在手性化合物分离中的应用	163
思考题与习题	165
第六章 原子光谱法	166
6.1 原子发射光谱法	166
6.1.1 基本原理	166
6.1.2 仪器类型与结构流程	169
6.1.3 分析方法与应用	177
6.2 原子吸收光谱法	179
6.2.1 基本原理	179
6.2.2 仪器类型与结构流程	183
6.2.3 干扰及其抑制	188
6.2.4 分析方法与应用	191
6.3 原子荧光光谱法	193
6.3.1 基本原理	193
6.3.2 原子荧光光谱仪	196
6.3.3 原子荧光光谱法的特点与应用	196
思考题与习题	197
第七章 X射线光谱法和表面分析法	198
7.1 X射线荧光光谱法	198
7.1.1 基本原理	198
7.1.2 X射线荧光光谱仪	202
7.1.3 分析方法与应用	207
7.2 X射线衍射法	208
7.2.1 基本原理	208
7.2.2 粉末衍射分析	209
7.2.3 单晶衍射分析	210

7.3 光电子能谱法与光探针技术	211
7.3.1 基本原理	212
7.3.2 X射线光电子能谱法	213
7.3.3 紫外光电子能谱法	216
7.4 电子能谱法与电子探针技术	216
7.4.1 俄歇电子能谱法	217
7.4.2 电子微探针分析与扫描电子显微镜	220
7.5 离子散射能谱法与离子探针技术	221
7.5.1 离子散射能谱法	222
7.5.2 次级离子质谱法	223
7.6 扫描探针显微镜技术	224
7.6.1 扫描隧道显微镜	224
7.6.2 原子力显微镜	226
思考题与习题	227
第八章 分子发光分析法	228
8.1 分子荧光法	228
8.1.1 荧光与磷光的产生过程	228
8.1.2 荧光光谱	229
8.1.3 荧光光谱的基本特征	233
8.1.4 荧光的产率与分子结构的关系	234
8.1.5 影响荧光强度的环境因素	235
8.1.6 仪器与结构流程	236
8.1.7 荧光分析方法与应用	236
8.2 分子磷光法	239
8.2.1 低温磷光测量	239
8.2.2 室温磷光测量	240
8.2.3 磷光测量装置	241
8.2.4 磷光法的应用	241
8.3 化学发光分析法	242
8.3.1 基本原理	242
8.3.2 化学发光反应的类型	244
8.3.3 化学发光分析测量装置与技术	247
8.3.4 化学与生物发光分析的应用	248
思考题与习题	249
第九章 紫外-可见吸收光谱法	250

9.1 紫外-可见吸收光谱基础	250
9.1.1 概述	250
9.1.2 紫外-可见吸收光谱的产生	250
9.1.3 光吸收定律	252
9.2 紫外-可见分光光度计	252
9.2.1 紫外-可见分光光度计的类型	252
9.2.2 紫外-可见分光光度计的构成	253
9.3 吸收带类型与溶剂效应	254
9.3.1 电子跃迁和吸收带类型	254
9.3.2 紫外-可见吸收光谱常用术语	257
9.3.3 溶剂对紫外-可见吸收光谱的影响	260
9.4 典型有机化合物的紫外-可见吸收光谱	262
9.4.1 饱和烃	262
9.4.2 饱和烃衍生物	262
9.4.3 不饱和脂肪烃	262
9.4.4 羰基化合物	264
9.4.5 芳烃	268
9.5 紫外-可见吸收光谱在有机化合物结构分析中的应用	270
9.5.1 紫外-可见光谱提供的有机化合物结构信息	270
9.5.2 有机化合物紫外-可见光谱图的解析方法	271
思考题与习题	274
第十章 红外光谱法和激光拉曼光谱法	276
10.1 红外光谱法基础	276
10.1.1 红外光谱的基本知识	276
10.1.2 分子振动和特征振动频率	278
10.2 红外光谱仪	289
10.2.1 色散型红外光谱仪	289
10.2.2 傅里叶变换红外光谱仪	291
10.2.3 试样的处理和制样方法	294
10.3 红外光谱与分子结构的关系	295
10.3.1 典型有机化合物的红外光谱	295
10.3.2 频率位移的影响因素	305
10.4 红外光谱的应用	309
10.4.1 红外光谱图解析步骤	309
10.4.2 红外光谱的定性分析	310

10.4.3 红外光谱的定量分析	313
10.5 激光拉曼光谱法	314
10.5.1 拉曼光谱概述	314
10.5.2 拉曼光谱原理	314
10.5.3 激光拉曼光谱仪	319
10.5.4 拉曼光谱的应用	320
思考题与习题	323
第十一章 核磁共振波谱法	326
11.1 核磁共振的基本原理	326
11.1.1 概述	326
11.1.2 原子核的自旋	327
11.1.3 核磁共振现象	328
11.1.4 饱和与弛豫	331
11.1.5 核磁共振的宏观理论	332
11.2 核磁共振波谱仪	333
11.2.1 核磁共振波谱仪的构成	333
11.2.2 核磁共振波谱常用溶剂	335
11.2.3 试样准备和测定	335
11.3 质子核磁共振波谱(^1H NMR)	335
11.3.1 化学位移及其影响因素	336
11.3.2 自旋-自旋偶合和耦合常数	344
11.3.3 质子核磁共振波谱的应用	349
11.4 碳核磁共振波谱(^{13}C NMR)	355
11.4.1 ^{13}C NMR 的特点	355
11.4.2 ^{13}C NMR 的谱标识技术	356
11.4.3 ^{13}C NMR 的化学位移	356
11.4.4 ^{13}C NMR 的应用	361
11.5 二维核磁共振波谱(2D NMR)	363
11.5.1 1D NMR 与 2D NMR	363
11.5.2 二维化学位移相关 NMR 谱	366
思考题与习题	368
第十二章 质谱法	373
12.1 质谱仪的类型	373
12.2 质谱仪的基本构成	374
12.2.1 进样系统	375

12.2.2 真空系统	375
12.2.3 离子源	376
12.2.4 质量分析器	380
12.2.5 检测器	386
12.3 质谱联用仪器	386
12.3.1 气相色谱-质谱联用仪	386
12.3.2 液相色谱-质谱联用仪	389
12.3.3 串联质谱法	391
12.4 质谱仪的性能指标	394
12.5 质谱中的各种离子	396
12.5.1 质谱术语及质谱中的离子类型	396
12.5.2 分子离子	398
12.5.3 碎片离子	399
12.6 典型有机化合物的电子轰击质谱(EIMS)	403
12.7 电子轰击质谱(EIMS)的解析	416
思考题与习题	423
第十三章 流动注射分析与微流控芯片	427
13.1 流动注射分析	427
13.1.1 FIA 分析的基本原理	428
13.1.2 仪器装置	431
13.1.3 流动注射分析应用技术简介	432
13.2 微流控分析芯片	433
13.2.1 微流控分析芯片中的基本方法与技术	435
13.2.2 微流控分析芯片的应用	445
思考题与习题	448
主要参考书	449

第一章 绪 论

1.1 概 述

1.1.1 概述

分析化学分为化学分析和仪器分析两大部分,仪器分析法是以测量物质的物理或物理化学性质为基础的分析方法,涉及许多分析仪器。仪器分析法与化学分析法相比具有重现性好,灵敏度高,分析速度快,自动化程度高及试样用量少等特点,近几十年来发展十分迅速,已在分析化学中占据了主导地位。

仪器分析发展至今,形成了以电化学分析、色谱分析、热分析、光分析及波谱分析为支柱的现代仪器分析,其内涵和外延非常丰富。仪器分析不单纯地用于物质的定性和定量,已成为研究各种化学理论和解决实际问题的重要手段,它对基础化学、环境化学、生物化学、生命科学及材料化学等学科的发展所起到的促进作用已毋庸置疑,并已从分析化学的专业课程转变为化学、药学、生物、环境及材料等各专业的基础课。熟悉和掌握各种现代仪器分析的原理和技术对于化学、化工及相关专业的学生已经是必须具有的基本素质,因而仪器分析教材和教学内容也需要不断调整来适应这种发展变化,从而跟上时代发展的节奏。

仪器分析的学习不单纯是对各种分析仪器和方法的了解和掌握,其中的每种方法都可能涉及化学、生物学、数学、物理学、电子学、自动化及计算机等各方面的知识,学习过程将是一个知识综合运用能力和分析解决问题能力的提高过程。同时,仪器分析中的各种方法的产生与发展过程无不体现出科学研究中的原创性与革新性,是创新思想的完美体现,这在引导学生认识如何是原始性创新和培养学习者的创新意识方面有着重要意义。

1.1.2 仪器分析的分类及特点

仪器分析的内容之丰富,发展之迅速,所体现出的“与时俱进”特征,是其他化学基础课程所少见的。特别是 20 世纪中后期以来,更是各种新理论、新方法、新仪器不断出现的快速发展时期。仪器分析的快速发展不仅表现在各种新分析方法的出现上,大规模集成电路、激光、计算机等新技术的出现更使得早期的仪器分析方法发生了巨大变革。

凡能表征物质的物理和化学性质的方法,原则上都可以被用作分析该物质的依据,由此也使得仪器分析不仅方法众多,而且各种方法具有相对独立的原理、特点及应用范围而自成体系,所以熟悉仪器分析分类方法与发展进程对于学习仪器分析是十分必要的。

根据方法的主要特征和作用,仪器分析通常可分为电化学分析法、色谱法、光学分析法、热分析法及质谱法等类别。电化学分析法是建立在溶液电化学性质上的一类分析方法,包括电位分析、库仑及伏安分析等。色谱法是利用混合物中各组分物理或化学性质的微小差异,通过物理化学方法来达到分离分析目的的一类分析方法,包括了气相色谱、液相色谱、离子色谱及超临界色谱等方法。混合物的高效快速分离分析是色谱法区别于其他分析方法的重要特点。高效毛细管电泳更是在各种混合物高效快速分离分析方法中独领风骚。光学分析法是建立在物质与电磁辐射相互作用基础上的一大类分析方法。光学分析法按分析对象可分为原子光谱分析和分子光谱分析,按作用类型又可分为吸收光谱分析和发射光谱分析,按测量方式可分为光谱分析法和非光谱分析法。分析仪器的种类繁多,每种仪器都因为有各自的特点和价值而存在,同时,每种分析仪器也存在着一定的局限性,面对复杂的分析任务,一种或一类仪器分析方法都很难完成,通常需要采用多种分析方法来达到分析目的。另外,将两种或多种分析仪器结合以发挥更大的作用,从而又形成了新的分析仪器和方法,如将色谱和质谱结合形成了色谱-质谱联用仪器,色谱和红外吸收光谱结合形成的色谱-红外吸收光谱联用仪等。近年来,微流控分析芯片技术的发展十分迅速,被称为“芯片上的实验室”,已成为分析化学中的前沿研究领域。

表 1-1 给出了仪器分析的类型、测量的重要参数或有关性质以及相应的仪器分析方法。

仪器分析的特点体现在以下几个方面。

(1) 分析速度快,自动化程度高 许多分析仪器都配置有计算机和自动进样装置,使仪器能够在较短时间内分析多个样品,并自动处理数据和计算结果,特别适合大批量试样的快速分析。

(2) 灵敏度高,试样用量少 仪器分析特别适合微量和痕量组分的分析,通常可测出质量分数为 10^{-8} 或 10^{-12} 数量级的组分,试样用量可降低至 μg 或 μL 数量级。

(3) 用途广泛,能适应各种分析的要求 除定性、定量分析外,还能进行化合物结构分析,相对分子质量测定,价态与形态分析,表面与微区分析等。

(4) 选择性高 很多方法可以通过选择或调整测定条件,选择性测定某组分。

虽然仪器分析方法具有显著优点而发挥着重要作用,但仍存在着一定的局

表 1-1 仪器分析分类

方法类型	测量参数或有关性质	相应的分析方法
电化学分析法	电导 电位 电流 电流-电压 电荷量	电导分析法 电位分析法, 计时电位法 电流滴定法 伏安法, 极谱分析法 库仑分析法
色谱法	两相间分配	气相色谱法, 液相色谱法, 超临界色谱, 离子色谱法
光学分析法	辐射的发射 辐射的吸收 辐射的散射 辐射的折射 辐射的衍射 辐射的转动	原子发射光谱法, 火焰光度法, 荧光光谱法等 原子吸收光谱法, 分光光度法(紫外、可见、红外), 核磁共振波谱法 比浊法, 拉曼光谱法, 散射浊度法 折射法, 干涉法 X射线衍射法, 电子衍射法 偏振法, 旋光色散法, 圆二色性法
其他	热性质 质荷比 电泳-电渗流	热重法, 差热分析法 质谱法 毛细管电泳法

限性,如仪器价格昂贵,结构复杂。仪器分析是一种相对分析方法,往往需要与标准物质进行比对。另外,仪器分析的准确度较低,相对误差通常在5%或更大,这对于微量和痕量分析完全能满足要求,但对于常量分析则不如化学分析方法准确。

仪器分析方法多种多样,仪器种类繁多,随着科学技术的发展,已有的分析方法和仪器会不断发展更新,同时新的分析方法和仪器还将不断涌现。因此,我们需要将注意力放在有持续发展价值的内容学习上。学习时,不能只见仪器不见方法,要注重学习方法的原理、特点与应用,从整体上把握住仪器分析。

1.1.3 仪器分析的发展过程

20世纪是仪器分析快速发展的重要时期,这主要得益于两个方面:一是电子工业、精密机械加工工业的快速发展与科学中的一系列重大发现,为其快速发展奠定了良好的基础;二是社会的迫切需要为其快速发展提供了机遇和动力。无论是大规模化学工业的兴起,还是40~50年代兴起的材料科学,60~70年代发展起来的环境科学,80年代以来快速发展的生命科学和纳米材料,都对分析化学提出了新的课题和挑战,极大地促进了仪器分析的发展。

通常将分析化学的发展过程分为三个阶段或三次变革,其中的后两次涉及了仪器分析。

阶段一:20世纪初,溶液中四大反应平衡理论的确立,奠定了分析化学的理论基础,使分析化学由一门操作技术变成一门科学,形成了分析化学的第一次变革。但一直到20世纪40年代,化学分析法在分析化学中占据着主导地位,仪器分析方法种类少且准确度低。

阶段二:20世纪40年代以后,由于物理学、电子学的发展,半导体材料工业、原子能工业及化学工业的大规模连续化生产的需要,使仪器分析处于大发展时期。这个时期的一系列重大科学发现(体现在众多诺贝尔奖获得者的出现),为仪器分析的建立和发展奠定了基础。仪器分析的快速发展引发了分析化学的第二次变革,但是在这一时期,分析仪器的自动化程度仍较低。

阶段三:20世纪80年代初出现了以计算机应用为标志的分析化学第三次变革,实现了计算机控制下的分析数据采集与处理、信息挖掘及三维图像显示。分析过程转向了连续、快速、实时、自动和智能化,同时以计算机为基础的新仪器不断出现,如傅里叶变换红外光谱,色-质联用仪等,使计算机成为分析仪器不可分割的一部分。

目前,仪器分析呈现了向更高灵敏度和自动化、智能化、微型化及集成化等方向发展的趋势。表1-2展示了仪器分析的未来发展途径及未来对仪器分析的要求。

表 1-2 仪器分析的未来发展途径及未来需求

未来发展途径	未来需求
自动化和机器人	更高的灵敏度或选择性
仪器网络	更具创新性的分析方法联用
真正智能仪器	高级三维微量、纳米和亚表面分析
更复杂的数据压缩	对测量科学的更深入的理解
在线传感器和微型化系统	在更苛刻的原位条件下进行分析的能力
高级遥感	直接探测分子、过渡态和反应动力学的能量分布
	用专家系统解释原始分析数据

1.2 计算机与分析仪器

计算机使分析仪器发生了深刻变革,两者已密不可分,因此熟悉计算机控制下的分析仪器及信息处理的相关知识对学习现代仪器分析将是十分有益的。

1.2.1 计算机对仪器分析发展的促进作用

计算机对仪器分析发展的促进作用主要表现在以下几个方面。