

普通高等教育药学专业“十一五”规划教材

波谱解析

BOPU JIEXI

主编 张宇
周洪雷

郑州大学出版社

普通高等教育药学专业“十一五”规划教材

波谱解析

BOPU JIEXI

主编 张宇
周洪雷



郑州大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

波谱解析/张宇,周洪雷主编. —郑州:
郑州大学出版社,2006.10
普通高等教育药学专业“十一五”规划教材
ISBN 7-81106-348-4

I. 波… II. ①张…②周… III. 波谱分析-高等
学校-教材 IV. 0657.61

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第112680号

郑州大学出版社出版发行
郑州市大学路40号
出版人:邓世平
全国新华书店经销
郑州文华印务有限公司印制
开本:787 mm × 1 092 mm
印张:20.75
字数:507千字
版次:2006年10月第1版

邮政编码:450052
发行部电话:0371-66966070
1/16
印数:1~2 100
印次:2006年10月第1次印刷

书号:ISBN 7-81106-348-4/O·32 定价:30.00元

本书如有印装质量问题,请向本社调换



编写指导委员会

普通高等教育药学专业

“十一·五”规划教材

名誉主任 于德泉

主任委员 宋毛平 刘宏民

副主任委员 (以姓氏笔画为序)

马承严 马祥志 王 玮 王 锋

王学如 卢 奎 曲有乐 吕文戈

朱 华 闫福林 许启泰 李春来

吴基良 张振中 张晓丹 陈 旭

苗明三 金哲雄 黄胜堂 颜朝国

编 委 (以姓氏笔画为序)

马凤余 马承严 马祥志 王 玮

王 锋 王西芳 王学如 卢 奎

曲有乐 吕文戈 朱 华 朱 军

刘丽萍 刘宏民 闫福林 许启泰

李春来 李喜强 吴 洁 吴基良

闵 清 张 宇 张永清 张振中

张晓丹 陈 旭 陈松林 苗明三

林桂涛 金哲雄 姚素梅 黄胜堂

韩 莹 谢晓梅 颜朝国

办 公 室 吕双喜 李同奎



参编院校

普通高等教育药学专业

“十五”规划教材

(以姓氏笔画为序)

山东中医药大学

天津医科大学

长沙医学院

右江民族医学院

安徽中医学院

扬州大学

佳木斯大学

河南大学

河南中医学院

河南职工医学院

绍兴文理学院

郑州大学

郑州工业大学

陕西中医学院

咸宁学院

哈尔滨商业大学

济宁医学院

重庆工商大学

桂林医学院

浙江海洋学院

莆田学院

淮阴工学院

新乡医学院



总序

普通高等教育药学专业

“十一五”规划教材

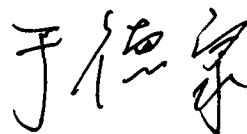
近年来,我国高等教育事业快速发展,取得了举世瞩目的成就。教育部实施了高等学校教学质量与教学改革工程,下发了《关于进一步加强高等学校本科教学工作的若干意见》和《教育部关于以就业为导向深化高等职业教育改革的若干意见》,提倡和鼓励学术水平高、教学经验丰富的教师,根据教学需要编写适应不同层次、不同类型院校,具有不同风格和特点的高质量教材。

当前,各类高校都相继开办了药学专业,高等院校的药学教育发展迅速,办学规模和办学层次逐年增加,市场对药学专业的学生需求逐年递增,学生就业率高,形成了高等院校一个新的亮点。然而,传统的高等院校药学专业,其课程体系、教学内容与新的教学模式之间的矛盾也日益突出。为了解决这个问题,配合高等院校药学专业建设的需要,更好地顺应社会发展对新一代药学人才的需求,进一步提高教学质量,加强药学专业的学科建设和课程建设,加快教材改革,适应教学改革的需要,更好地发展药学专业的本科教育,当是恭逢其时的事。2005年,在郑州大学出版社、郑州大学药学院的牵头组织下,对国内药学专业的培养目标、培养模式、课程体系、教学内容和教学大纲等进行了广泛而深入的调研,分析了国内药学专业相关教材的现状,此举得到了湖北、山东、安徽、陕西、江西、黑龙江、吉林、浙江、江苏、福建、河南、广西等省市三十多所院校的积极响应,也得到了国内一大批药学教育专家的支持。为了集思广益,保证高规格、高质量地出炉这套教材,紧扣当前药学专业本科教学的实际,组织召开了高等院校药学专业教学研讨会暨教材编写会,无论是大的环节,还是小的细节,无不经过与会专家和教授的科学规划、认真研讨和商榷,最终确定了这套普通高等教育药学专业“十一五”规划教材编写的

指导思想、体例和规范。每本教材的主编,都是学术水平高、教学经验丰富的一线教师,这就保证了这套新教材的编写质量。

可以说,这套教材的出版,为促进我国药学专业本、专科教育质量的不断提高,贡献了一份绵薄之力,很好地顺应了当前高等院校药学教育迅速发展的新趋势,也必将会对我国高等学校药学专业教育产生深远而积极的影响。同时也希望使用教材的师生多提意见和建议,以便及时修订、不断完善。

中国工程院院士
中国协和医科大学教授



2006年9月



作者名单

普通高等教育药学专业

“十一五”规划教材

主 编 张 宇 周洪雷

副主编 (以姓氏笔画为序)

贾 陆 容 蓉 黄胜堂

编 委 (以姓氏笔画为序)

孙 晶 张 宇 周洪雷

贾 陆 容 蓉 黄胜堂



内容提要

普通高等教育药学专业

“十五”规划教材

本书内容包括紫外光谱(UV)、红外光谱(IR)、核磁共振氢谱(^1H -NMR)、核磁共振碳谱(^{13}C -NMR)、质谱(MS)和综合解析六章内容。系统地介绍了四大光谱的基本原理、图谱信息及图谱解析技术,以及这些波谱技术的综合应用。书中收录了很多图谱和数据,每章配有学习要求和课后习题,书后附有英汉对照表。

本书可作为高等学校药学、制药工程、中药、化学、化工等专业的本科生和研究生教材,也可供从事以上专业的技术人员参考使用。



前言

普通高等教育药学专业

“ 十 一 五 ” 规 划 教 材

近几十年来,随着科学技术的进步以及波谱学与电子学、计算机科学的紧密结合,波谱法得到了极大的发展,而且已成为有机化合物结构研究的重要手段。与化学研究方法相比,波谱法的应用大大缩短了复杂化合物结构测定时间,并解决了化学法难以解决的蛋白质、核酸、多糖等大分子的结构测定问题。本书内容包括:紫外光谱(UV)、红外光谱(IR)、核磁共振氢谱($^1\text{H-NMR}$)、核磁共振碳谱($^{13}\text{C-NMR}$)、质谱(MS)和综合解析六章内容。系统介绍了四大光谱的工作原理及图谱解析技术,以及这些波谱技术的综合应用。

《波谱解析》作为本科生教材,在编写过程中,作者结合自己多年的教学科研工作实践,同时参考了国内外近年出版的有关教材,在叙述时力求图文并茂,由浅入深,通俗易懂,在基本知识、基本理论的阐述上力求系统、完整。同时在各个章节引入了波谱学领域的新成就和新技术。在质谱中不仅介绍了电子轰击法、化学电离法、场致电离法、场解吸电离法、快速原子轰击法等各种质谱电离技术及用途,还介绍了二次离子质谱法、电喷雾电离质谱法及激光解吸质谱法。在核磁共振波谱中还介绍了双共振技术及二维核磁共振谱。为了提高和训练学生解析图谱的能力,每章附有习题及重要数据和图表。

本书各章分别由以下人员分工编写完成:

- 第一章 容 蓉(山东中医药大学)
- 第二章 周洪雷(山东中医药大学)
- 第三章 张 宇(佳木斯大学)
- 第四章 贾 陆(郑州大学)
- 第五章 孙 晶(扬州大学)

第六章 黄胜堂(咸宁学院)

由于编者水平有限,书中难免有错误和不当之处,恳请读者批评指正。

编者

2006年4月



普通高等教育药学专业

目 录

“ 十 一 五 ” 规 划 教 材

第一章 紫外光谱	1
第一节 概述	1
一、电磁波的基本性质	1
二、紫外光与紫外光谱(ultraviolet spectra)	2
三、紫外光谱图	3
第二节 基本原理及基本概念	4
一、电子跃迁的主要类型	4
二、紫外光谱中一些常用术语	6
三、吸收带	7
四、光的吸收定律 — Lambert - Beer 定律	9
五、影响紫外吸收光谱的主要因素	10
第三节 有机化合物的紫外吸收峰及其计算方法	15
一、饱和烃类	15
二、脂肪醇、胺和卤代烃类	16
三、简单不饱和化合物	17
四、共轭烯烃	19
五、 α 、 β -不饱和羰基化合物	24
六、芳香烃类化合物	27
第四节 紫外光谱在有机化合物结构研究中的应用	31
一、紫外光谱一般规律	31
二、紫外光谱在有机化合物结构研究中的应用	32
参考文献	36
第二章 红外光谱	37
第一节 概述	37
一、红外光与红外光谱	37

波 谱 解 析

二、红外光谱图	38
三、红外光谱与紫外光谱的区别	38
第二节 基本原理及基本概念	39
一、振动形式	39
二、振动自由度与峰数	43
三、振动频率与峰位	45
四、影响特征吸收频率的因素	45
五、吸收峰的强度	52
第三节 红外光谱中的重要区段	53
一、特征区与指纹区	53
二、特征峰与相关峰	53
三、红外光谱的重要区段	54
四、芳香族化合物的特征吸收	62
第四节 各类化合物的典型光谱	66
一、烷烃类	66
二、烯烃类	67
三、炔烃	68
四、苯及同系物	69
五、醇、酚及羧酸类	70
六、醚类	71
七、酯和内酯	72
八、醛酮类	72
九、胺类	73
十、酰胺类	74
十一、杂芳环	75
第五节 红外光谱在有机化合物结构研究中的应用	75
一、鉴定样品是否为某已知成分	75
二、鉴定未知结构的官能团——推测结构	76
三、在其他方面的应用	77
四、红外光谱解析方法	78
参考文献	83
第三章 核磁共振氢谱	85
第一节 概述	85
一、核磁共振	86
二、核磁共振波谱及氢谱的 3 个参数	86
三、核磁共振波谱仪	87
四、核磁共振波谱法的用途	89
第二节 核磁共振基本原理	90

一、原子核的自旋与磁性	90
二、原子核的自旋取向与能级	93
三、核磁矩在磁场中的运动——拉莫尔进动	94
四、在射频场作用下所发生的现象——核磁共振吸收	95
五、弛豫过程	96
第三节 化学位移	97
一、化学位移的定义	97
二、化学位移产生的机理	98
三、化学位移的表示方法	99
四、影响化学位移的因素	100
五、化学位移的计算	108
第四节 核磁共振信号强度	111
第五节 自旋耦合与自旋裂分	113
一、自旋耦合的机理	113
二、共振峰裂分规则	113
三、耦合常数及影响因素	115
第六节 自旋系统	119
一、自旋系统的分类	119
二、一级图谱与二级图谱	122
三、几种常见的自旋系统	124
第七节 ^1H -NMR 谱的解析方法与示例	129
一、送样要求	130
二、解析程序	130
三、解析示例	131
参考文献	141
第四章 核磁共振碳谱	142
第一节 概述	142
一、 ^{13}C -NMR 谱的特点	142
二、实验技术	145
第二节 脉冲傅立叶变换核磁共振工作原理	151
一、连续波核磁共振谱仪的缺点	151
二、脉冲傅立叶变换(PFT)技术	152
三、傅立叶变换波谱仪的优点	154
第三节 化学位移	154
一、影响化学位移的因素	154
二、常见各类化合物的化学位移	157
三、烯碳的化学位移	159
四、芳香碳的化学位移	162

波 谱 解 析

五、醇类化合物碳的化学位移	166
六、羰基碳的化学位移	166
第四节 偶合常数	169
第五节 弛豫时间	171
一、有关纵向弛豫的理论	171
二、弛豫时间的测定	173
三、 T_1 的应用	175
第六节 碳原子级数的确定	176
一、 J 调制法或 APT 法	176
二、INEPT 法	177
三、DEPT 法	179
第七节 ^{13}C -NMR 谱的解析	180
一、样品的准备	180
二、利用 ^{13}C -NMR 谱进行结构分析的一般步骤	180
第八节 二维核磁共振谱简介	184
一、二维核磁共振谱概述	184
二、2D J 谱	185
三、2D 相关谱	188
四、2D-INADEQUATE(双量子谱)	191
参考文献	199
第五章 质谱	200
第一节 概述	200
一、质谱分析的特点	200
二、质谱仪	201
第二节 基本原理	205
一、质谱的基本原理	205
二、质谱的表示方法	207
三、质谱仪的主要性能指标	208
第三节 质谱中的主要离子	209
一、电荷离子的表示方法	209
二、分子离子(molecular ion)	210
三、同位素离子(isotope ion)	211
四、碎片离子(fragment ion)	217
五、亚稳离子(metastable ion, m^*)	221
六、重排离子(rearrangement ion)	221
七、络合离子(molecule complexes ion)	222
八、多电荷离子(multiply-charged ion)	222
九、负离子	222

第四节 质谱中的电离技术及用途	222
一、电子轰击离子源 (electron impact source, EI)	223
二、化学电离源 (chemical ionization, CI)	224
三、场致电离源 (field ionization, FI)	225
四、场解吸电离源 (field desorption, FD)	225
五、快速原子轰击源 (fast atom bombardment, FAB) 和二次离子质谱 (secondary ion mass spectrometry, SIMS)	227
六、电喷雾电离源 (electrospray ionization, ESI)	228
七、激光解吸源 (laser desorption, LD)	228
第五节 离子断裂类型	228
一、简单断裂	228
二、重排断裂	231
三、复杂断裂	234
第六节 各类化合物的质谱	235
一、碳氢化合物 (烃)	235
二、羟基化合物	240
三、醚类化合物	243
四、醛酮	245
五、酸和酯类化合物	248
六、胺类和酰胺类化合物	251
七、腈类化合物	254
八、卤化物	255
九、硝基化合物	256
十、有机硫化合物	258
十一、杂环化合物	259
第七节 质谱解析方法与示例	259
一、质谱解析方法	259
二、质谱解析示例	260
参考文献	266
第六章 谱图综合解析	267
第一节 有机化合物结构综合解析程序	267
一、确定样品纯度	267
二、测定分子量	267
三、确定分子式	267
四、计算不饱和度	268
五、推断结构式	268
第二节 分子式确定法	268
一、元素分析法	268

波 谱 解 析

二、质谱法	268
三、核磁共振法	269
四、综合波谱数据确定分子式	269
第三节 分子不饱和度计算	270
第四节 分子结构式的确定	271
一、分子内结构单元及剩余单元的确定方法	271
二、结构碎片的连接	273
三、结构单位的综合与结构式的确定	274
第五节 综合解析示例	274
参考文献	304
附录 I 有机化合物质谱中容易丢失的中性分子和游离基	305
附录 II 有机化合物质谱中一些常见的碎片离子	308
英汉对照表索引	311