

仪器分析导论

第二版

第四册

IR NMR MS UV 数据集

泉 美治

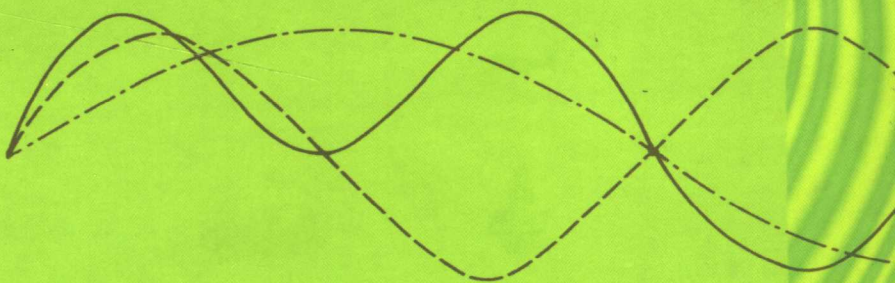
小川雅彌

[日] 加藤俊二 主编

塩川二郎

芝 哲夫

李春鸿 刘振海 译



化学工业出版社

化学与应用化学出版中心

(京)新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

仪器分析导论: 第二版. 第四册/[日] 泉 美治等主编; 李春鸿, 刘振海译. —北京: 化学工业出版社, 2005. 2
ISBN 7-5025-6311-3

I. 仪… II. ①泉…②李…③刘… III. 仪器分析 IV. O657

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 117078 号

機器分析のてびき (4), 第 2 版/泉 美治 小川雅彌 加藤俊二 塩川二朗 芝 哲夫主编
ISBN 4-7598-0295-9

Copyright©1996 by Kagakudojin. All rights reserved.

Chinese translation rights arranged with Kagaku-Dojin Publishing Company, Inc. Through Japan UNI Agency, Inc., Tokyo

本书中文简体字版由化学同人出版社授权化学工业出版社独家出版发行。
未经许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

北京市版权局著作权合同登记号: 01-2004-4951

仪器分析导论

第二版

第四册

IR NMR MS UV 数据集

[日] 泉 美治 小川雅彌 加藤俊二 塩川二朗 芝 哲夫 主编

李春鸿 刘振海 译

责任编辑: 任惠敏 杜进祥

责任校对: 陈 静 周梦华

封面设计: 于剑凝

*

化学工业出版社 出版发行

化学与应用化学出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

http://www.cip.com.cn

*

新华书店北京发行所经销

北京市昌平振南印刷厂印刷

三河市东柳装订厂装订

开本 850mm×1168mm 1/32 印张 7 字数 165 千字

2005 年 3 月第 2 版 2005 年 3 月北京第 2 次印刷

ISBN 7-5025-6311-3/O·78

定 价: 16.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

译 序

这是一套（共4册）有关仪器分析的入门书，1980年在日本问世以来，已印刷9次，备受日本广大读者的青睐。1988年译成中文由化学工业出版社出版，也很受中国读者欢迎。本次将该书的第二版翻译成中文，以供国内已经和正待从事仪器分析的广大读者参阅。

本书的一个突出特点是通俗易懂，不讲高深的理论，回避烦琐的数学推演；从实用的角度，在讲述各种方法基本概念（如原理、仪器的组成等）后，便逐一介绍实验步骤、数据表达和典型的应用实例，以及在实际测量过程中可能遇到的问题。本书的另一特点是内容全面，以不长的篇幅涵盖了仪器分析的所有领域，诸如：红外吸收光谱、核磁共振波谱、质谱、紫外光谱、元素分析、色谱、热分析、X射线衍射、电镜等。另外其内容精炼，语言简洁亦是同类书之中的佼佼者。

本书很适用于以仪器分析作为表征手段和以仪器分析工作为主的广大技术人员，并可作为相关专业的大学生和研究生的教学参考书。读者还可通过阅读化学工业出版社出版的另两套系列丛书：已出版的《分析化学手册》和即将出版的《分析仪器使用与维护丛书》做进一步的深入了解。这两套书从仪器分析和分析仪器两个不同的角度介绍了分析化学这一重要分支。如果《仪器分析导论》能成为这两套丛书的基础篇，译者将感到十分欣慰。

本书翻译过程，承蒙中国科学院长春应用化学研究所的大力支持；出版过程，化学工业出版社编辑付出了大量辛勤劳动。译者在此一并表示衷心感谢。

如上所述,《仪器分析导论》涉及的知识面宽,译文定有一些顾此失彼的不当之处,望仪器分析专家和广大读者指正。

译 者

2004 年 7 月于长春

第二版说明

本书自1980年初版发行以来，逐年补充、修改，1986年出版增订版。此书虽多次重印并屡经修改，但因近年仪器分析取得长足进步，因此这次又全面修订，出版第二版。

随着仪器分析的发展，不仅仪器性能提高，而且操作更简便、效率更高，特别是引入微型计算机后使仪器控制与测量操作程序化，已往只能依靠专门技术人员进行的特殊测量，现也可由研究人员自行操作。与第一版一样，第二版也是适应这种需求供初学者阅读的入门书，在仪器操作所需的基础知识和测量方法、结果处理等方面，做了大量的修改。特别是补充了作者们的一些实际经验和体会，以便读者通过实际测量体验，进而掌握最新的仪器分析方法。

本书将许多仪器分析方法汇总在一起，旨在成为实际工作的向导。读者若欲了解更详尽的内容可参阅各种有关仪器分析的专著。诚恳希望本书能成为一本手册性工具书。

最后向为第二版的出版辛勤劳动的化学同人植下定一先生及增田亚美先生为首的编辑部各位先生们表示衷心感谢。

主编 レゐす

1995年12月

第四册（数据集）序

《仪器分析导论》第一册的出版，颇受好评，但感欠缺有关光谱解析的必要资料，为此将精选的资料汇编成本数据集，作为补篇。

对光谱解析所需要的资料，已出版各种光谱内容翔实的数据集和通俗读物。但从中找到基本的资料和基本化合物的数据实属困难，尤其对初学者更是如此。

为此，本数据集主要收录各种光谱解析常见吸收范围的基本图表，并收录常用计算公式和换算表以及 213 种化合物的数据，以此作为解析示例。所以无论对初次学做光谱解析的人员或已有很多工作经验的人员，都望成为一本很有用的案头工具书。

最后，望赐教，以便再版修正。

化学同人编辑部

1980 年 4 月

内 容 提 要

《仪器分析导论》是介绍仪器分析方法的入门书。全书共四册，前三册共编入了二十余种仪器分析方法，第四册为数据集。

本册是这套书的第四册，书中收集了解析 IR、NMR、MS、UV 所必需的数据图表资料。这些解释光谱的基础图表中给出了每种光谱分析的波长范围，书中还收录了便于使用的计算式及换算表，以及 258 个化合物的数据。

本书内容精炼，简明易懂，实用性强，非常适合初学者自学。

目 录

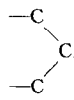
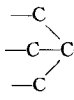
第 1 章 红外吸收光谱	岡原 光男 1
图表使用方法	1
主要键的吸收带	2
1. 链烷、链烯、环烃	4
2. 炔烃、芳香族烃	5
3. 醚、过氧化物、醇、脂肪酸	6
4. 脂肪酸衍生物	7
5. 羰基化合物、酰胺类、氨基酸	8
6. 胺、亚胺、腈、异氰酸酯	9
7. N—O, S—O 和 P—O 化合物	10
8. 卤素、硅、硫、磷化合物	11
链烯的吸收	12
波长-波数换算表	13
第 2 章 ^1H NMR 波谱	松田 治和 馬場 章夫 19
图表使用方法	19
化学位移表	20
1. CH_3 —	20
2. CH_2 —	21
3. $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{CH} \\ \diagdown \end{array}$ —	22
4. $\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ \text{C}=\text{C} \end{array}$	23
5. $\text{R}-\text{CHCH}_2$	23
6. $\begin{array}{c} \text{CH}_2 \\ \text{O} \\ \text{X} \end{array}$	23

7. $-\text{CH}=\text{CH}-$	24
8. $\text{HC}\equiv\text{C}-$	26
9. 	26
10. 芳香环 H	27
11. 与取代方式有关的信号类型 (3~5 取代型)	30
12. 含有活性氢的化合物	31
自旋耦合常数表	32
^1H NMR 化学位移计算方法	35
1. $\text{X}-\text{CH}_2-\text{X}'$ 型化合物 (Shoolery 定律)	35
2. $\text{X}-\text{CH}=\text{CH}-\text{X}'$ 型化合物 (Tobey-Simon 定律)	36

3.  型化合物	37
---	----

耦合常数的计算公式	38
1. 利用键角的公式 (Karplus 定律)	38
2. 利用电负性计算的公式	39
远程自旋耦合	39
原子核的各种性质	40
常用的重氢溶剂中的残留质子	40

第 3 章 ^{13}C NMR 波谱..... 大城 芳树 43

图表使用方法	43
^{13}C NMR 化合物位移一览表	44
化学位移表	46
1. CH_3-X 型化合物	46
2. 环链烷	46
3. $\text{X}^1-\text{CH}_2-\text{X}^2$ 型化合物	47
4.  型及  型化合物	48
5. $\text{Hal}-\text{C}-$ 型化合物	48

6.	$\begin{array}{c} \text{X}^1 \\ \diagdown \\ \text{C}^{\alpha} \\ \diagup \\ \text{X}^2 \end{array} - \text{CH}_2^{\beta}$ 型化合物	49
7.	$\begin{array}{c} \text{X}^1 \\ \diagdown \\ \text{C}^{\alpha} \\ \diagup \\ \text{X}^2 \end{array} - \text{CH}^{\beta} - \text{X}^3$ 型化合物	50
8.	$\text{X}^1 - \text{C}^{\alpha} \equiv \text{C}^{\beta} - \text{X}^2$ 型化合物	51
9.	羰基碳	51
10.	 -X 型化合物的 C-1 碳	52
11.	芳杂环化合物的环碳	52
12.	$\begin{array}{c} \text{X}^2 \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{X}^1 \end{array}$ 型化合物的 C-1 碳	53
自旋耦合常数表		54
^{13}C NMR 的化学位移计算方法		56
1.	脂肪族化合物	56
2.	脂环化合物	62
3.	芳香族化合物	65
4.	羰基碳 (田中等的公式)	69
5.	杂环化合物	70
其他核 NMR 化学位移		71
第 4 章 质谱 野村 正勝 三浦 雅博		73
图表使用方法		73
碎片和碎裂方式表 (质量数到 107)		73
同族系列的碎片离子		94
分子离子的相对强度		96
第 5 章 紫外吸收光谱 小幡 齊		97
图表使用方法		97
λ_{max} 值表		98
天然类胡萝卜素色素对溶剂的极大吸收光谱及其来源		105
生物样品 λ_{max} 值表		106

溶剂的使用波长范围	108
$\lambda_{\max}$ 计算公式	109
1. 二烯化合物	109
2. α , β 不饱和羰基化合物	109
3. α , β 不饱和羧酸及酯	110
4. 苯酰型化合物	111
透射率-吸光度换算表	112
主要化合物的光谱	116
有关生物化合物的光谱	117
波长和吸光度的校正和吸光分析的相对误差	118
第 6 章 谱图数据表	福尾 刚志 121
图表使用方法	121
化合物 IR, ^1H NMR, ^{13}C NMR, MS, UV 数据	121
1. 链烷 (CH)	121
2. 链烯、链炔 (CH)	122
3. 环烷烃 (CH)	124
4. 环烯烃 (CH)	126
5. (苯环型) 芳香族 (CH)	129
6. 醇类 (CHO)	134
7. 醚、环氧化合物、缩醛 (CHO)	138
8. 酚类 (CHO)	140
9. 醛酮类 (CHO)	142
10. 醌类 (CHO)	147
11. 羧酸、酐 (CHO)	148
12. 酯 (CHO)	151
13. 带有异种官能团的化合物 (O_2)	153
14. 带有异种官能团的化合物 (O_3)	155
15. 带有异种官能团的化合物 (O_4 以上)	157
16. 胺 (伯、仲、叔), 铵盐 (CHN)	159
17. 氰基化合物, 偶氮化合物 (CHN)	161

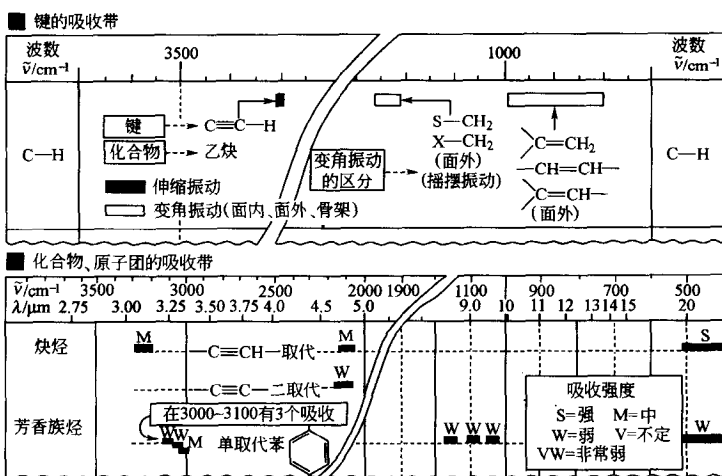
18. 亚硝基、硝基化合物, 肟, 酰胺 (CHON)	162
19. 带有异种官能团的化合物 (CHON, O-N)	164
20. 带有异种官能团的化合物 (CHON, O ₂ -N, O ₃ -N)	166
21. 带有异种官能团的化合物 (CHON, O _n -N ₂)	170
22. 杂环 (CHO)	171
23. 杂环[CH(O)N].....	175
24. 卤化物[CH(ON)Cl].....	182
25. 卤化物[其他的卤素 CH(ON)X]	186
26. 含硫化合物[CH(ON)S]	189
27. 含有其他元素的化合物	194
物理-化学数据库、辞典	199
附录 本书使用方法	201

第 1 章

红外吸收光谱

岡原 光男[●]

图表使用方法



伸縮振動的近似归属法

Hooke 法则

$$\bar{\nu} = 4.12 \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

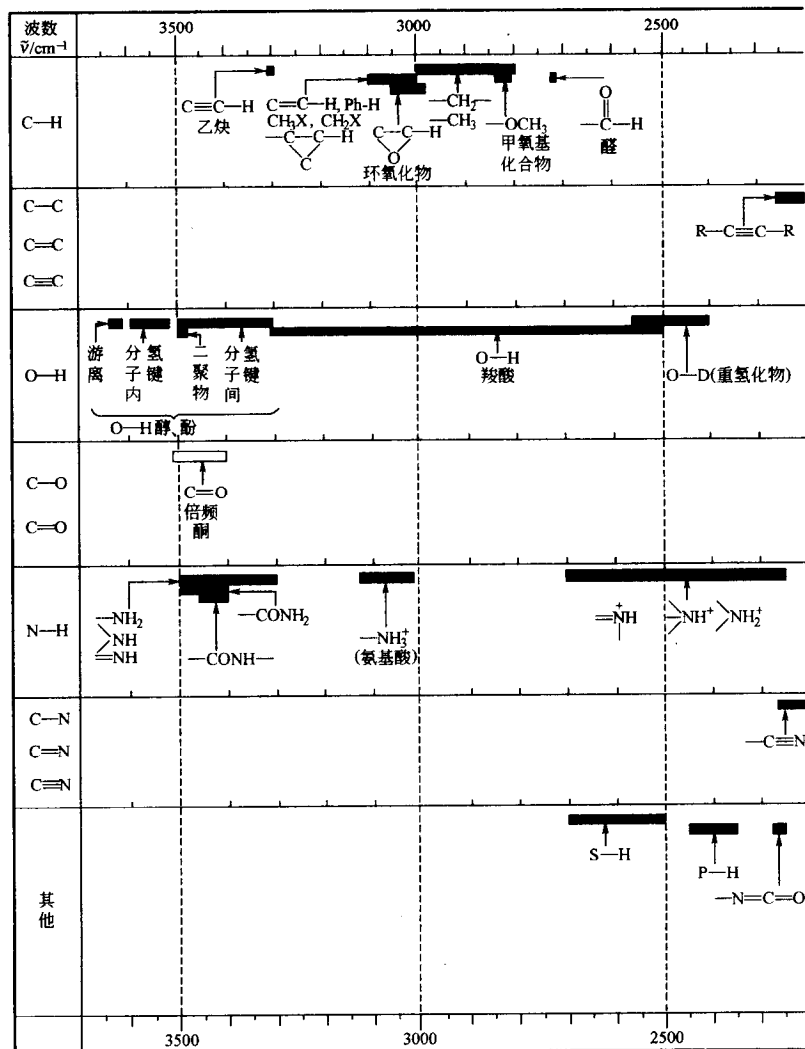
式中, $\bar{\nu}$ 为波数, cm^{-1} ; K 为键能常数, dyne/cm (单键 5×10^5 , 双键 10×10^5 , 三键 15×10^5)。

● 原大阪大学名誉教授, 工学博士。

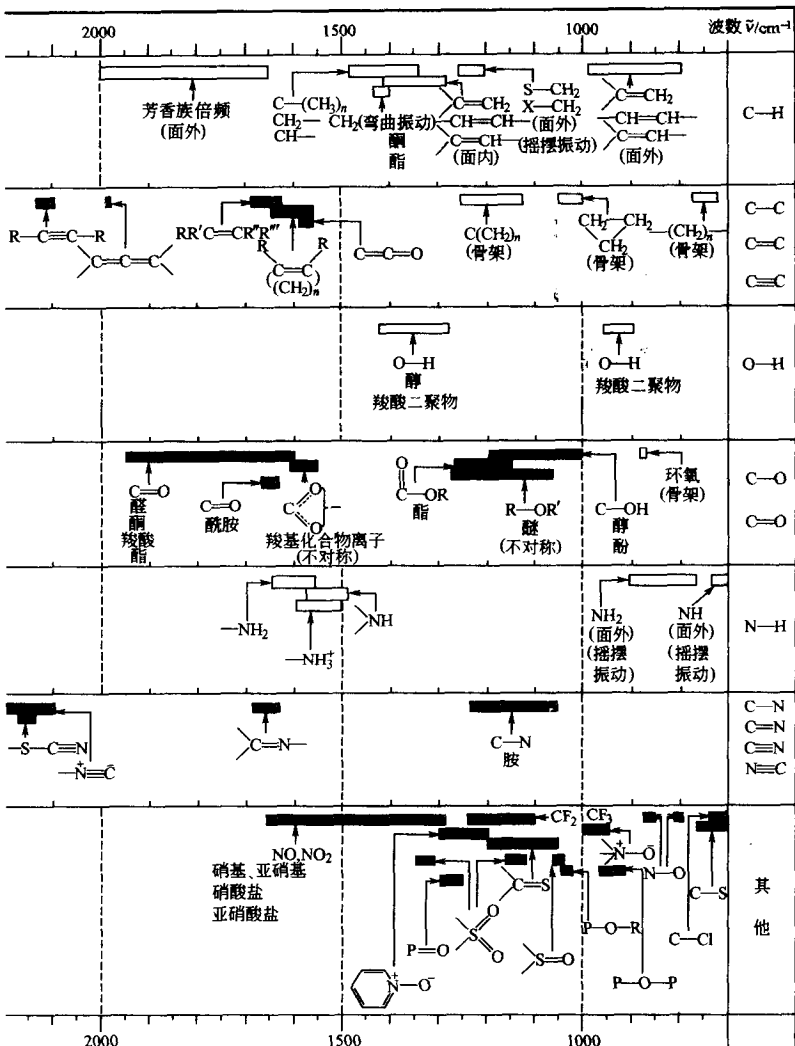
$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad (M_1, M_2 \text{ 为相对原子质量})$$

【例】 C=C 键：

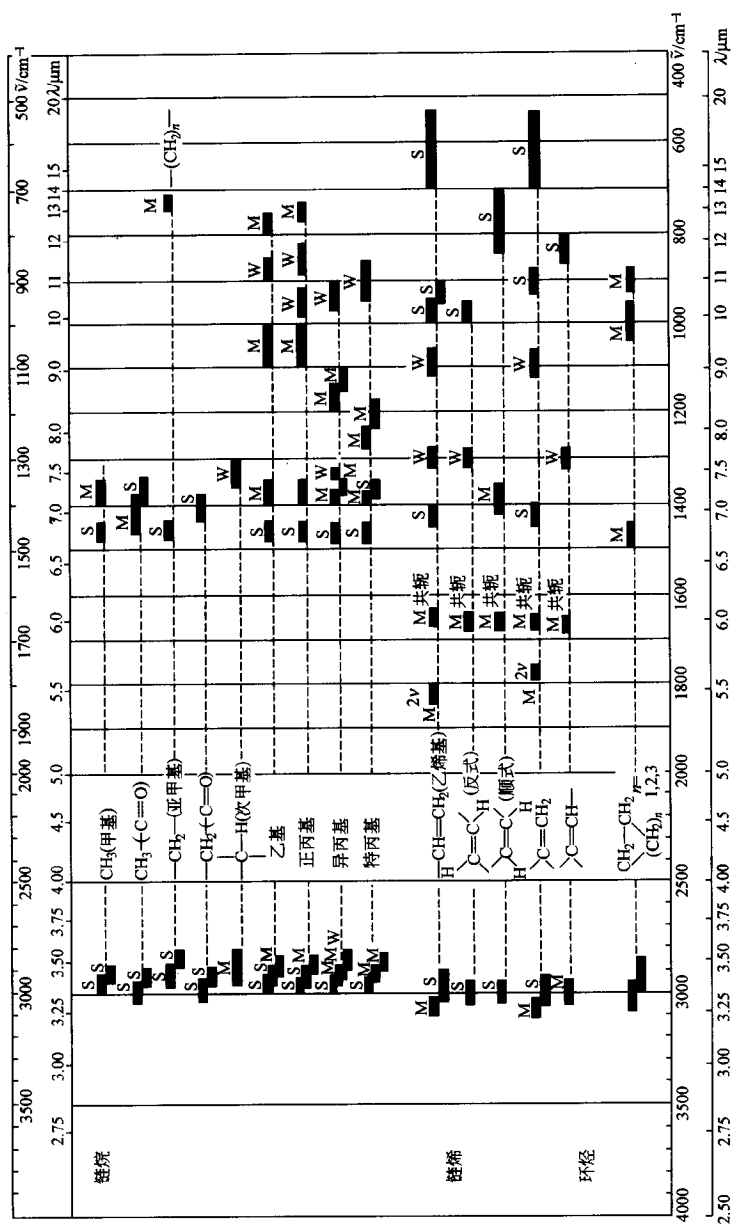
主要键的吸收带



$$\nu = 4.12 \sqrt{\frac{10^6}{6}} \text{ cm}^{-1} = 1682 \text{ cm}^{-1}$$



1. 链烷、链烯、环烃



2. 炔烃、芳香族烃

