



面向21世纪课程教材
Textbook Series for 21st Century

谱学导论

(第二版)

范康年 主编



NLIC 2970716351



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

面向 21 世纪 课 程 教 材
Textbook Series for 21st Century

谱学导论

P U X U E D A O L U N

(第 2 版)

范康年 主编

陆 靖 屠 波 吴 劼 王文宁 等编



NLIC 2970716351



高等教育出版社·北京

HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

内容提要

本书是教育部“高等教育面向 21 世纪教学内容和课程体系改革计划”的一项研究成果,是面向 21 世纪课程教材和普通高等教育“十一五”国家级规划教材。在第一版教材使用近十年的基础上,本次修订对教材结构、内容和具体实例等方面进行了重要的补充和更新,特别是将“波谱综合解析”单列一章讲述,此外又增加了光谱傅里叶变换和 X 射线精细结构谱等内容。

全书分为八章:一、分子光谱基础;二、红外和拉曼光谱;三、紫外及可见吸收光谱;四、磁共振谱;五、质谱法;六、波谱综合解析;七、X 射线衍射与光谱;八、电子能谱。为了便于读者巩固所学知识和提高解题能力,各章都给出相应例题和习题,并在书后附有参考答案。全书采用了国际单位制(SI)单位为法定计量单位。

本书可作为化学及相关专业本科学生的基础课教材,也可供相关专业人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

谱学导论/范康年主编. —2 版. —北京:高等教育出版社, 2011. 2

ISBN 978 - 7 - 04 - 031202 - 7

I. ①谱… II. ①范… III. ①光谱学 - 高等学校 - 教材 IV. ①O433

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 242615 号

策划编辑 鲍浩波 责任编辑 沈晚晴 封面设计 张楠
版式设计 张岚 责任校对 陈旭颖 责任印制 尤静

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 100120

购书热线 010 - 58581118

咨询电话 400 - 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>

经销 蓝色畅想图书发行有限公司

印刷 北京铭成印刷有限公司

畅想教育 <http://www.widedu.com>

开本 787 × 960 1/16

印张 25.5

字数 480 000

版次 2001 年 7 月第 1 版

2011 年 2 月第 2 版

印次 2011 年 2 月第 1 次印刷

定价 37.00 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 31202 - 00



面向21世纪课程教材



普通高等教育“十一五”
国家级规划教材

第二版前言

十多年前，在化学类本科课程结构和教学体系改革的过程中，为了适应现代学科和科学技术发展的需要，我们打破了过去以四大化学界定的基础课框架，整合了分散在各化学基础课中的相关内容，开设了一门集讲授微观结构测定原理、方法和应用为一体的基础课“谱学导论”，并编写出版了相应的教材《谱学导论》(高等教育出版社,2001年7月)，该教材为面向21世纪课程教材。近年来许多高校也开设了相应课程，《谱学导论》教材受到了普遍关注，至今已重印了七次。

这十年来，随着谱学技术的不断发展和教学改革的深入，我们在教学实践过程中对课程结构和教学内容做了许多改进和更新，加上当年原教材编写时，在很多方面都带有探索性，现在看来，尚有少部分内容需要调整，《谱学导论》教材的修订由此提上了议事日程。2007年，本书修订被列入普通高等教育“十一五”国家级规划教材出版计划，更促成了本书的修订工作。

本次修订主要包括以下几个方面：

一、从多年教学实践来看，将波谱综合解析专门进行较系统的讲授是很有必要的。因此，新版教材将原书作为附录的“波谱解析综合练习”改为一章“波谱综合解析”，并放在结构分析四大谱之后。

二、傅里叶变换技术在现代谱学中使用日趋广泛，为了让学生能了解它的基本原理和重要应用，分别在第一、第二和第四章增加了它的基本原理以及在红外和核磁技术中应用的内容。

三、由于同步辐射作为新型光源的大量应用，以及非晶态结构测量技术的日趋成熟，本次修订在X射线衍射一章中增加了X射线精细结构谱的内容，并将该章节名称改为“X射线衍射与光谱”。同时将“同步辐射的工作原理简介”作为附录列在章后，供读者参考。

四、在结构分析四大谱的相关章节中，对应用的实例都进行了不同程度的丰富和提炼，并相应删去了原书中过于具体的仪器结构和样品制备的细节。鉴于本书是以微观结构分析为主体的教材，本次修订还将与分析化学教材中可能重复的有关定量分析内容做了精简或删除。

五、在各章节的谱学应用部分都增加了相应实例，并作为例题参插在相关章节中，便于自学。同时还对章后习题进行了梳理和补充。

六、新版教材附录中增加了主题索引和外国人名索引，便于读者查阅。

在本书编写和修订过程中，参考了国内外出版的一些相关教材、著作和论文，并从中得到了许多启迪。现将这些资料目录列于书末，推荐给读者参考。通过这些资料的阅读可以扩大知识面，并加强对教材内容的理解。本书所用物理量单位均采用国际单位制(SI)。

参加本书修订的有陆靖(第一章)、屠波(第二、三和六章)、吴劼(第四、五章)和王文宁(第一、四、七章的部分)，其余章节的修订及全书的统稿和审定由本人完成。

复旦大学化学系庄继华为全书重新绘图，贺鹤勇、王全瑞、乔明华、曹勇、戴维林、翁林红和朱源龙等为本书修订提供素材或审阅部分章节，浙江大学陆维敏教授审阅了全书，作者对他们的帮助和支持表示衷心的感谢。

本书修订虽然是在我们对该课程十五年教学实践基础上进行的，但是限于作者水平，书中错误和不当之处恐难避免，敬请读者指正。

范康年

2010. 8. 24 于复旦园

第一版前言

在量子理论的基础上,人们通过理论和实验相结合的方式,逐步建立了许多探测物质微观结构的实验方法,特别是谱学方法。随着计算机科学和电子技术的迅速发展,实现这些谱学方法的仪器更是日新月异,达到了相当高的水平,许多仪器已成为科学研究中的常规测试工具。

随着谱学方法及仪器的发展和普及,近20年来许多谱学内容,特别是分子光谱(如紫外-可见光谱、红外光谱和拉曼光谱)、核磁共振、质谱等实验方法在大学基础课教材中都得到了反映。例如,物理化学教材中引入了介绍这些实验方法的原理及理论基础;无机化学和有机化学教材讲授了这些方法在测定无机物和有机物分子结构中的具体应用,特别是有机化学中专门有关于波谱解析的章节;而在分析化学中更是把介绍这些方法和测试技术作为仪器分析的发展新方向。以上情况说明大学基础课程能及时反映当代科学技术发展的新成就,这是非常可喜的现象。但是从另一方面看,各门基础课都介绍谱学相关内容,虽然各有侧重点,可为了使学能学懂,须从基本原理、实验技术讲起,直至具体应用,重复讲授现象就比较严重,使教学课时大量增加。同时由于受到课时限制,每门课又无法将它讲透,因此就出现了新的矛盾。

随着教育改革的深入,教学内容和课程结构的改革也得到了充分的重视。教育部化学教学指导委员会十分重视以上问题,在多次全体会议中进行了讨论,特别是在教育部立项的“03-8 化学类课程结构和教学体系改革”项目中把这个问题列为专门课题进行研究。经过多次研讨逐步形成了一种共识,即从多门单独课程中把关于微观结构测定的内容抽出来,形成一门比较系统的适合化学类本科学生学习的基础课,用以介绍微观结构测定的实验原理、方法和应用。复旦大学化学系领导十分重视这一项教学内容和课程结构的改革,从1996年起就组织有关教师进行探索,经过5年来的教学实践逐步形成了目前的课程结构和内容。由于本书所介绍的微观结构测定方法中谱学方法占有相当大的比重,而所介绍的内容深度也只能满足大学本科学生对这些方法的基本了解,所以定名为《谱学导论》。

本书的基本内容是遵照教育部下发的“化学专业本科基本培养规格和基

本教学要求”以及“化学专业及应用化学专业化学教学基本内容”两个文件的精神，将原来分散于物理化学、仪器分析、有机化学和无机化学体系中关于微观结构测定的原理、实验方法和具体应用的内容融合起来，建立起的一个新体系。这个体系内容上包括分子光谱(如紫外-可见光谱、红外光谱和拉曼光谱)、磁共振谱、质谱、X射线衍射和表面能谱等测定分子结构、晶体结构以及表面结构的方法，同时系统地讲授它们的基本原理、实验方法及应用，使学生在学后能对科学研究和生产实际中常用的微观结构测定方法有一个较全面了解。随着计算机科学和电子技术飞速发展，这些结构测试方法也越来越先进和系统，每种方法都可成为一门系统的课程，要在基础课中讲透所有方法是不可能的。本课程的宗旨是引导学生入门，使学生知道各种结构测试方法的基本原理和如何应用，特别要了解它们的应用范围。这样在今后的科学研究、生产实际中遇到有关微观结构测试的问题时，就能开拓思路，提高研究水平和工作效率。

由于本课程涉及的知识面广，我们认为，在课堂教学中不能面面俱到、过细过宽，重要的是使学生能理解方法的基本原理和学会实际应用。学生可通过对每章后所附的大量习题的练习，提高自学能力、分析问题能力和解决实际问题的能力。本课程实验性较强，最好在后续实验课(如各校开始开设的综合实验)中能接触到具体实验和仪器，这样更有利于巩固所学知识。

本书所介绍的各种结构测定方法有许多是相互联系和相互配合的，特别是分子结构测定要涉及红外光谱、紫外光谱、核磁共振谱和质谱等方法，原讲义中在讲完质谱后配有以同学讨论和自行练习为主的波谱综合分析内容。由于这部分内容主要是课堂练习和习题，和其他章节并不协调，所以在成书时尝试将它放在附录中，可便于讲课教师灵活使用。

近五年的教学实践证明我们这一改革的直接效果是精简了学时，减少了重复。本课程的讲授时数为54学时(3个学分)。由于本课程的开设，我系普通化学、分析化学(包括仪器分析)、有机化学和物理化学各自都减少了20学时左右(即1个学分)，而学生对本课程内容的学习也更系统，更有兴趣。由于本课程涉及大量的图谱和实验原理，近两年来我们在讲授中配以多媒体教学，这样可取得更佳的教学效果。

本书在编写过程中，尽量注意其易读性，以便学生课后自学。同时本书在各章后，推荐了一些课外参考阅读材料，大部分取自易于获得的著作和期刊，藉以开拓学生的知识面，并加深对教学内容的理解。本书所用物理量和单位均采用国际单位制(SI)。

本书由范康年主编并审定全稿，主要执笔者有：陆靖(第一章)，屠波(第二章和附录一)，朱万森(第二章部分和第三章)，孙尧俊(第四章核磁共振部

分), 吴性良(第五章), 范康年(第六章和第七章部分)和王怀明(第七章)。陈士明和陆亚蒙分别为本书和原讲义的电子顺磁共振一节提供初稿, 编者在此深表感谢。

本书包含大量插图和谱图, 其中许多化合物的红外光谱和核磁共振图谱主要取自 SDBS 网站的数据库(<http://www.aist.go.jp/SDBS>), 网上没有的部分全由复旦大学化学系核磁共振实验室、X 射线衍射实验室及综合实验室提供测试和相应图谱, 编者在此表示感谢。

在本书编写过程中, 高等教育出版社朱仁编审, 南京大学化学学院忻新泉、姚天扬, 苏州大学曹阳及山东大学印永嘉等各位教授对本书大纲提出了宝贵的建议, 编者对于他们的关心和帮助表示衷心的感谢。还要感谢复旦大学马礼敦、杨芃源、王全瑞、朱元龙、翁林红和徐建华等教授、专家对本书原稿部分章节的审阅以及对编写所提供的宝贵资料和建议。

复旦大学化学系李振华、王云、唐海榕、罗成和李艳茶为本书初稿打字, 金幼铭绘图, 作者对他们的辛勤劳动深致谢意。

在本书编写过程中, 参考了国内外出版的一些相关教材和著作, 并从中得到了许多启发和收益。

本书的编写是教学改革的一种尝试, 整个讲述体系、材料取舍、内容深浅等方面都带有探索性, 尽管我们做了一些努力, 限于作者水平和时间紧迫, 书中错漏和不当之处恐难避免, 祈盼读者指正, 以便再版时更正。

编 者

2001. 3. 18 于复旦园

目 录

第一章 分子光谱基础	1
§ 1.1 分子的对称性	2
1.1.1 对称元素和对称操作	2
1.1.2 群和分子点群	3
1.1.3 群表示及其性质	4
§ 1.2 分子的内运动和光谱特征	7
1.2.1 核运动和电子运动的分离	8
1.2.2 分子光谱的分布和特征	9
1.2.3 跃迁概率和选律	11
1.2.4 线形和线宽	14
§ 1.3 转动光谱	15
1.3.1 质心平动的分离	15
1.3.2 双原子分子的刚性转子模型	18
1.3.3 非刚性转子模型	19
1.3.4 多原子分子的转动光谱	22
1.3.5 转动光谱的应用	24
§ 1.4 振动光谱	25
1.4.1 双原子分子的振动方程	25
1.4.2 简谐振子模型	26
1.4.3 非简谐振子模型	27
1.4.4 振动光谱的精细结构——振转光谱	31
1.4.5 多原子分子的振动模式	33
§ 1.5 电子光谱	38
1.5.1 双原子分子的电子能级及其表示方法	38
1.5.2 电子光谱选律	39
1.5.3 电子光谱的精细结构——电子振转光谱	42
1.5.4 富兰克-康顿原理	43
1.5.5 多原子分子电子光谱	45
§ 1.6 拉曼光谱	45

1.6.1	拉曼散射效应	46
1.6.2	拉曼光谱选律及其与红外光谱的互补性	46
1.6.3	转动拉曼光谱	48
1.6.4	振动拉曼光谱	49
1.6.5	共振拉曼光谱	50
§ 1.7	光谱的动力学性质——瞬态光谱	52
1.7.1	含时薛定谔方程	53
1.7.2	时间分辨光谱测量	54
§ 1.8	光谱的傅里叶变换	56
1.8.1	光谱信息的傅里叶变换	56
1.8.2	傅里叶变换的定义和基本性质	57
	习题	59
第二章 红外和拉曼光谱		62
§ 2.1	红外光谱仪	62
2.1.1	色散型红外光谱仪	63
2.1.2	傅里叶变换红外光谱仪	63
§ 2.2	红外光谱的测量	65
§ 2.3	红外光谱的特征吸收峰	67
2.3.1	影响特征吸收峰的结构因素	67
2.3.2	各类官能团的特征吸收峰	69
§ 2.4	红外光谱解析	80
§ 2.5	拉曼光谱仪及应用简介	83
2.5.1	仪器简介	83
2.5.2	特点及应用	84
	习题	87
第三章 紫外及可见吸收光谱		96
§ 3.1	紫外及可见光谱仪	96
§ 3.2	紫外光谱吸收带及其影响因素	97
3.2.1	紫外光谱吸收带的分类	97
3.2.2	测试条件对紫外及可见吸收谱带的影响	98
§ 3.3	有机化合物的紫外光谱	99
3.3.1	共轭烯烃的紫外吸收	99
3.3.2	共轭烯酮的紫外吸收	101
3.3.3	芳香化合物的紫外吸收	103
3.3.4	杂环化合物的紫外吸收	105

§ 3.4 无机化合物紫外光谱	105
3.4.1 电荷转移吸收带	105
3.4.2 配体场吸收带	106
§ 3.5 紫外及可见光谱的应用	108
习题	110
第四章 磁共振谱	112
§ 4.1 物质的磁性	112
4.1.1 物质的磁性	112
4.1.2 分子磁矩及与外磁场的相互作用	113
4.1.3 核磁矩及与外磁场的相互作用	114
§ 4.2 核磁共振的基本原理	115
4.2.1 核磁共振现象	116
4.2.2 化学位移	117
4.2.3 自旋-自旋耦合作用	119
4.2.4 弛豫	121
§ 4.3 核磁共振谱仪简介	122
4.3.1 连续波核磁共振谱仪	122
4.3.2 脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪	123
§ 4.4 ^1H 核磁共振谱	125
4.4.1 屏蔽效应	125
4.4.2 各类质子的化学位移	126
4.4.3 化学等价与磁等价	135
4.4.4 一级裂分	137
4.4.5 自旋体系分类和复杂裂分	139
4.4.6 几类常见的耦合及其耦合常数	141
4.4.7 ^1H 核磁共振谱图解析时用到的一些辅助手段	142
4.4.8 ^1H 核磁共振谱的应用	145
§ 4.5 ^{13}C 核磁共振谱	151
4.5.1 引言	151
4.5.2 ^{13}C 谱中的化学位移	152
4.5.3 ^{13}C 谱中的耦合问题	154
4.5.4 ^{13}C 核磁共振谱的应用	156
§ 4.6 其他核磁共振技术	158
4.6.1 固体高分辨核磁共振	158
4.6.2 二维核磁共振谱	159
4.6.3 三维核磁共振谱	166

4.6.4	核磁共振成像	167
§ 4.7	电子顺磁共振谱	168
4.7.1	基本原理	168
4.7.2	仪器和方法	176
4.7.3	研究对象和应用	180
	习题	187
第五章 质谱法		193
§ 5.1	基本原理和质谱仪简介	193
5.1.1	基本原理	193
5.1.2	质谱仪简介	195
§ 5.2	质谱图及其离子峰	198
5.2.1	质谱图与质谱表	198
5.2.2	主要离子峰的类型	199
5.2.3	有机化合物的碎裂	202
§ 5.3	质谱分析应用	211
5.3.1	有机质谱定性分析及谱图解析	211
5.3.2	质谱的定量分析	222
§ 5.4	质谱的联用技术	224
5.4.1	色谱-质谱联用	224
5.4.2	质谱-质谱联用	227
	习题	227
第六章 波谱综合解析		231
§ 6.1	波谱综合解析基本步骤	231
§ 6.2	波谱综合解析实例示范	232
6.2.1	实例详细解析	232
6.2.2	例题简要分析	236
	习题	249
第七章 X射线衍射与光谱		265
§ 7.1	X射线的产生、性质及特点	265
7.1.1	X射线的产生及性质	265
7.1.2	X射线与物质的相互作用	267
§ 7.2	晶体结构的周期性与对称性	269
7.2.1	结构周期性和点阵单位	269
7.2.2	结构对称性和晶系的划分	272

7.2.3	晶面的表示方法	278
§ 7.3	X 射线单晶衍射法	281
7.3.1	衍射方向和晶胞参数	281
7.3.2	衍射强度和晶胞内原子分布	284
7.3.3	单晶衍射实验方法简介	288
§ 7.4	X 射线多晶衍射法	293
7.4.1	特点和原理	293
7.4.2	粉末衍射图的获得	294
7.4.3	粉末衍射的应用	295
§ 7.5	X 射线吸收精细结构谱	299
7.5.1	XAFS 分类和产生机理	300
7.5.2	XAFS 实验方法简介	302
7.5.3	EXAFS 方法和应用实例	304
§ 7.6	电子衍射法简介	308
7.6.1	电子衍射法与 X 射线衍射法比较	308
7.6.2	电子衍射法测定气体分子的几何结构	309
7.6.3	低能电子衍射法在表面分析中的应用	310
§ 7.7	X 射线荧光光谱	315
7.7.1	X 射线荧光光谱方法及应用	315
7.7.2	X 射线荧光光谱仪	316
附录:	同步辐射的工作原理简介	319
习题		321
第八章 电子能谱 324		
§ 8.1	电子能谱的基本原理	324
§ 8.2	紫外光电子能谱	326
8.2.1	谱图特征	327
8.2.2	振动精细结构	328
8.2.3	自旋-轨道耦合	329
8.2.4	自旋-自旋耦合	330
§ 8.3	X 射线光电子能谱	331
8.3.1	谱图特征	332
8.3.2	化学位移	333
8.3.3	俄歇参数	334
8.3.4	定量分析	335
§ 8.4	俄歇电子能谱	336
8.4.1	俄歇过程和俄歇电子能量	336

8.4.2	俄歇谱图	337
8.4.3	化学效应	338
§ 8.5	电子能谱仪简介	339
8.5.1	激发源	340
8.5.2	电子能量分析器	343
8.5.3	检测器	344
8.5.4	真空系统	345
8.5.5	样品处理	345
§ 8.6	电子能谱应用	346
8.6.1	表面组成的分析	347
8.6.2	化学状态的鉴定	348
8.6.3	在催化研究中的应用	351
8.6.4	在痕量气体检测中的应用	353
8.6.5	在清洁汽油生产中的应用	354
8.6.6	在分子器件研究中的应用	356
	习题	357
附录一	国际单位制 (SI)	359
附录二	一些物理和化学的基本常数 (1986 年国际推荐值)	360
附录三	常用的换算因数	362
附录四	化学上重要点群的特征标表	363
	参考阅读材料	374
	习题参考答案	377
	主题索引	384
	外国人名索引	388

第一章 分子光谱基础

伟大的化学家波义耳(Boyle)说过：“化学的目的在于认识物质，而认识的方法是分析”。对物质的分析有两大任务，一是探究物质的组成(即物质的组分及其含量)，二是研究物质的结构(即物质中各种原子分子的空间排列和连接方式)。

人们对于物质结构的分析和测量可以上溯到非常久远的时代。早期人们主要通过“降解”等化学反应方法来探讨物质的组成和结构——设法将分子分解成更小的分子碎片，然后依据碎片去推断反应前的分子结构。这种方法一般需要大量的原料，分析过程十分复杂，对一个稍微复杂分子的分析往往需要几年甚至几十年。20世纪以来，物理的分析方法日趋成熟并在结构分析中占据了主导地位。所谓物理分析方法，是指利用各种外部能源，如光(从红外到紫外、甚至X光等各种光源)、电(电场和各种能量的电子束)、磁(磁场及各种能量形式的电磁辐射)，使物质内部的微观结构或状态发生变化，这种变化又以各种能量形式表现出来。这些能量的变化信息构成了谱，谱再经过适当的理论处理，可以得到物质的各种微观结构信息。研究谱和物质内部结构之间关系的学科就是谱学。

分子光谱是谱学中极其重要的组成部分。光谱学的历史起源于牛顿(Newton)对于太阳光的研究。1666年牛顿用三棱镜分解太阳光，得到了绚丽夺目的彩色光带，从而发现了白光是由各种颜色的光组成的。牛顿将光的这种排列命名为光谱。1802年渥拉斯顿(Wollaston)观测到太阳连续光谱背景上的几道暗线，这是关于光谱线的最早记载。1814年德国天文学家夫琅和费(Fraunhofer)对太阳光谱线进行了系统研究，绘制完成人类第一幅太阳光谱图。

德国化学家本生(Bunsen)和基尔霍夫(Kirchhoff)制备了世界上第一台光谱仪。1859年10月，他们用这一台仪器分析了太阳光的光谱，确认了太阳中同样有钠、氢、铁、镍、钙等元素。在地球上居然能够测定出遥远的太阳上的化学组成，这一发现轰动了科学界。

与此同时，人们对于光的本质的认识也在不断深化，这种认识上的深化也推动着光谱技术不断向前发展。1801年，托马斯·杨(Thomas Young)观测到了光束在通过两个小孔后形成的干涉现象，从而确认了光的波动性。1855—1865年，麦克斯韦(Maxwell)给出了关于电磁波定律的一套四个微分方程——后人称

之为麦克斯韦方程。这些方程给出了电场向量、磁场向量、电荷和电流之间的关系。如同牛顿定律是经典力学的基本方程一样,麦克斯韦方程是电和磁的基本方程。由此,麦克斯韦认为光是一种电磁波,他提出的光是电磁波的理论在1887年被赫兹(Hertz)从实验上证实。

1905年爱因斯坦(Einstein)在解释光电效应时,提出光的某些性质(比如光和物质的相互作用)用粒子说来理解要比波动说更容易。光是第一种被人类认识到具有波粒二象性的客体。

量子力学从理论上阐明了光谱信号和物质结构之间的关系,20世纪以来光谱技术不仅在定性定量分析上得到了很大发展,同时也演变成人们了解物质结构信息的主要工具之一。有机化学家用光谱研究分子结构,分析化学家用光谱确定样品的成分,在动力学研究中,光谱被用于检测样品浓度随时间的变化和探测反应的中间体。生物学家们甚至将光谱的应用范围拓展到了生物分子的结构和动力学的研究中。分子光谱已经成为人们研究物质结构的重要实验手段。

本章主要介绍分子光谱的理论基础。物质对光产生的吸收、发射或散射,其本质是光和物质分子的相互作用。将物质吸收、发射或散射光的强度对频率作图所形成的演变关系,就是分子光谱。根据光辐射的波长范围和作用形式的不同,分子光谱又包括紫外可见光谱、红外光谱、吸收光谱、荧光光谱和拉曼光谱等。不同的光谱可提供物质分子内部不同运动的信息,由分子光谱了解物质的结构,这就是学习分子光谱的目的。

§ 1.1 分子的对称性

量子力学的基本原理告诉我们,只要知道了分子体系的波函数,就可以得到关于分子体系的各种物理信息,包括分子结构和分子光谱的信息。但是,精确地求解分子的薛定谔(Schrödinger)方程是极其困难的,因而不得不依赖于各种近似方法。所以,利用分子的某些特殊性质对繁复的量子化学计算过程进行简化,就非常必要了。其中分子的对称性是可供利用的一个重要性质。这里简要介绍一些分子对称性及其数学表示的最基本知识,它们能够帮助我们简化分子光谱的理论处理。有关详细内容可参阅相关的参考书。

1.1.1 对称元素和对称操作

显然,诸如苯、甲烷、氨这样的分子都具有某种对称性质。但是要利用分子的对称性来简化量子力学的处理过程,首先必须给出一个描述分子对称性高低的方法,判断的依据是分子所包含的对称元素和对称操作的数目。