

复杂分子的红外光谱

〔英〕L. J. 贝拉米 著

科学出版社

复杂分子的红外光谱

[英] L. J. 贝拉米 著

黄维垣 聂崇实 译

科学出版社

1975

内 容 简 介

本书介绍红外光谱与分子结构之间的联系。系统总结了大量有机化合物的红外光谱规律，内容较全面详细，并附有典型红外光谱图，参考文献收集亦较齐全，是现今用于分析解释红外光谱的基础性参考书。可供生产、科学研究和教学方面从事红外光谱工作的专业人员和利用红外光谱进行分析的化学工作者参考。

L. J. Bellamy

THE INFRA-RED SPECTRA OF COMPLEX MOLECULES

John Wiley, 1958

复杂分子的红外光谱

[英] L. J. 贝拉米 著

黄维垣 聂崇实 译

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

1975年10月第一版 开本：787×1092 1/32
1975年10月第一次印刷 印张：17 1/4 插页：3
印数：0001—6,380 字数：386,000

统一书号：13031·234

本社书号：385·13-4

定价：1.80元

译 者 的 话

L. J. 贝拉米著《复杂分子的红外光谱》是解析红外光谱方面的一本专著。本书的特点在于，它不是介绍红外光谱的实验方法和多原子分子光谱理论（因为这些都另有专门著作），而是致力于总结大量有机化合物分子结构和它们红外光谱之间的大量经验规律，可以说是迄今数据完备、分析亦较详细的参考书。目前化学工作者正是利用这些数据来解析红外光谱和鉴定分子结构的。

本书根据原著 1958 年第二版译出，中译本在原著发表之后十几年才与读者见面，从时间上说是晚了。好在红外光谱解析工作发展较早，十几年来实质性的东西没有变化，重要的基团频率新发展的内容并不十分多。虽然 1968 年又出版了作者的另一著作《Advances in Infrared Group Frequencies》，但这本书并非前书的再版，而是对前书的一些补充，并着重于分析基团谱峰的由来和影响位移的因素。因此我们觉得出版这本书的中译本，还是有参考价值的。

限于译者水平，译文中定有错误和不当之处，望读者不吝指正。

JY1/33/21

第 二 版 序

第一版刊行不久,本书的修订版又将发行,我希望它的内容将说明这种需要。虽然有相当多的内容已经为后来的工作所代替而删去,但结果本书的篇幅还是比前版大得多。此版书中包括了经筛选之后所留下的七百余篇新的参考文献,反映了最新工作的各方面。我仍旧企图收集这个领域中所有有关参考文献,因为,要去掉那些不需要的部分并不困难。

我仍旧保留原先的意图,即避免讨论小分子的振动-转动光谱的理论,因这方面已经有一些很好的著作。但我觉得很有必要增加最后一章,讨论大分子中基团频率位移的原因及其意义。过去几年中这方面已有较大进展,至少已经开始对存在于大分子中的基团频率的大量经验数据进行某种合理编排。这方面还有很多问题留待解决,读者将会感到所论及的某些概念仍然处于很初步的形成阶段。虽然由这类工作所形成的一些光谱与结构的联系已经达到能实际应用于结构判断的阶段,但要正确地进行光谱和结构对应联系的工作,了解引起各种特定基团频率有时出现表观的不规则性质的基本因素是必要的。在准备这一章时,我试图尽可能做到客观,但读者对其中有些小部分讨论仍可持某种程度的保留,我们对那些公正地论述他们自己工作的一些作者也往往如此。

强度数据怎样表达是修订过程中所遇到的一个重要问题。无疑地,将来要鉴别一个特定分子基团时,绝对强度和绝对频率的数据将是同等重要的,在有些例子中前者将更能够说明问题。然而,在现阶段,由于现有各种数据的性质不同,

而且没有表达这些结果的统一方法，故目前要正确估价这些数据是不现实的。因此我没有单独讨论这方面的问题，仍按照前版采用的方法，并在讨论有关的基团频率时，同时报道已有的关于强度的资料。（下略）

作 者

1957年7月

目 录

第一章 导言	1
--------------	---

第一部分 碳-碳和碳-氢键的振动

第二章 烷类	5
2.1 导言和表格	5
2.2 C—H 伸缩振动	5
(a) 位置	5
(b) 影响 C—H 伸缩特征频率的因素	9
(c) 影响强度的因素	12
2.3 CH ₃ —C 和 CH ₂ 变形振动	14
(a) 位置	14
(b) 影响 CH ₂ 和 CH ₃ 弯曲频率和强度的因素	16
2.4 和非碳的其他元素相接的甲基的变形振动	20
2.5 骨架振动	21
(a) 异丙基和叔丁基的结构	21
(b) 烷烃的链	23
(c) 环系统	26
(d) 低频率区域的吸收峰	28
参考文献	29

第三章 烯类	33
3.1 导言和表格	33
3.2 C=C 伸缩振动	35
(a) 位置和强度	35
(b) 对称性的影响	38
(c) 共轭的影响	40

(d) 氟取代的影响	44
3.3 $\equiv\text{CH}$ 伸缩振动	45
3.4 $\equiv\text{CH}$ 面外变形振动	47
(a) 双取代乙烯类(反式)	48
(b) 双取代乙烯类(顺式)	51
(c) 单取代乙烯类	53
(d) 不对称双取代乙烯类 $\text{R}_1\text{R}_2\text{C}=\text{CH}_2$	55
(e) 三取代乙烯类 $\text{R}_1\text{R}_2\text{C}=\text{CHR}_3$	56
3.5 $\equiv\text{CH}$ 面内变形振动	58
(a) 双取代乙烯类(反式)	58
(b) 双取代乙烯类(顺式)	58
(c) 单取代乙烯类	58
(d) 不对称双取代乙烯类	59
(e) 三取代乙烯类	59
参考文献	60
第四章 炔类和丙二烯类	64
4.1 引言和表格	64
4.2 $\equiv\text{CH}$ 伸缩振动	65
4.3 $\text{C}\equiv\text{C}$ 伸缩振动	66
(a) 位置	66
(b) 共轭的影响	67
(c) 强度	68
4.4 $\equiv\text{CH}$ 弯曲振动	69
4.5 丙二烯型结构	70
参考文献	71
第五章 芳香族化合物	73
5.1 引言和表格	73
5.2 $\equiv\text{CH}$ 伸缩振动	75
5.3 2000—1650 cm^{-1} (5.00—6.06微米)区域的吸收峰	77
5.4 $\text{C}=\text{C}$ 伸缩振动	80
(a) 1600 cm^{-1} (6.25微米)附近的谱带	81

(b) 1600—1560厘米 ⁻¹ (6.25—6.41微米)区域	82
(c) 1525—1475厘米 ⁻¹ (6.56—6.78微米)谱带	84
(d) 1450厘米 ⁻¹ (6.90微米)附近的谱带	84
(e) 多环化合物	84
(f) 1600—1450厘米 ⁻¹ (6.25—6.90微米)范围芳香族谱带 的吸收峰强度	85
(g) 在其他基团存在下鉴定芳香族结构	86
5.5 CH 面外变形振动	87
(a) 环上五个相邻氢原子 单取代芳香族化合物	88
(b) 环上四个相邻氢原子 邻位二取代芳香族化合物	90
(c) 环上三个相邻氢原子 1,3-和1,2,3-取代	90
(d) 环上两个相邻氢原子 1,4-,1,2,4-和1,2,3,4-取代	91
(e) 环上单独一个氢原子 处于两个取代基之间的氢 1,3-,1,2, 4-,1,3,5-,1,2,3,5-,1,2,4,5-和 五取代的芳香族化 合物	92
(f) 取代基的影响	93
5.6 1225和950 厘米 ⁻¹ (8.16和10.53 微米)间的特征吸收峰	94
(a) 1,2-, 1,4-和1,2,4-取代	95
(b) 单-, 1,3-, 1,2,3-和1,3,5-取代	95
(c) 1,2-, 1,2,3-和1,2,4-取代	96
5.7 其他芳香族系统	96
参考文献	97

第二部分 碳-氧和氧-氢键的主要振动

第六章 醇和酚	107
6.1 引言和表格	107
6.2 游离 OH 伸缩振动	109
6.3 氢键的 OH 振动 (通论)	112
6.4 分子间氢键	113
(a) 单氢桥络合物	114
(b) 多聚缔合	115

6.5 内分子氢键	116
(a) 单桥络合物	116
(b) 螯合物	118
6.6 OH 伸缩吸收峰的强度和形状	120
6.7 C—O 伸缩和 O—H 变形振动	123
参考文献	127
第七章 醚类、过氧化物和臭氧化物	132
7.1 导言和表格	132
7.2 脂肪族醚类	134
7.3 芳基和芳烃基醚	136
7.4 环醚类	137
(a) 环氧化合物	137
(b) 四、五和六元环化合物	139
7.5 过氧化物	140
7.6 臭氧化物	143
参考文献	144
第八章 酰卤、碳酸酯、酸酐和金属羰基化合物	147
8.1 导言和表格	147
8.2 酰卤	148
8.3 碳酸酯类和氯代甲酸酯类	149
8.4 酸酐类	150
8.5 过氧化物(酰基的)	152
8.6 金属羰基化合物	153
参考文献	155
第九章 醛和酮	157
9.1 导言和表格	157
9.2 链状酮类中的 C=O 伸缩振动	160
(a) 位置	160
(b) 烯键共轭的影响	162
(c) 芳基共轭的影响	164

(d) 环丙烷基共轭的影响	165
(e) α -卤代基的影响	165
9.3 二酮类中的 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动	168
(a) α -二酮类	168
(b) β -二酮类	169
(c) $\alpha\beta$ -不饱和- β -羟基酮类	170
(d) $\alpha\beta$ -不饱和- β -氨基酮类	173
(e) β -二酮的金属螯合物	174
(f) γ -和 δ -二酮类和有关的化合物	175
9.4 脂环系统中的 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动	176
(a) 七元环	176
(b) 六元环	176
(c) 五元环	177
(d) 四元环	178
(e) 大环系统	178
(f) 大环系统中的跨环效应	179
9.5 芳香环系统中的 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动	180
(a) 醌类	180
(b) 芳庚酚酮类	181
9.6 羰基吸收峰的强度	182
9.7 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动吸收谱带以外的酮类的其他特征频率	185
9.8 醛类的 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩吸收峰	185
9.9 醛类的 $\text{C}-\text{H}$ 伸缩吸收峰	188
9.10 醛类的其他特征振动	188
参考文献	189
第十章 羧酸	195
10.1 导言和表格	195
10.2 羧基的 OH 伸缩振动	197
10.3 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动	200
(a) 物理状态的影响	200
(b) 饱和脂肪酸	202

(c) α -卤代基的影响	202
(d) 共轭的影响	203
(e) 螯合的影响	204
(f) 二羧酸	205
(g) 吸收强度	206
10.4 羧酸的其他特征振动	207
(a) 1400 厘米 ⁻¹ 附近	207
(b) 1250 厘米 ⁻¹ (8.00微米)附近	208
(c) 羧基的 OH 变形振动	210
(d) 脂肪酸中的谱带递增	211
10.5 羧基离子, 盐类	212
参考文献	214
第十一章 酯类和内酯类	217
11.1 导言和表格	217
11.2 酯类的 C=O 伸缩振动	219
(a) 饱和酯类	219
(b) 共轭的影响	221
(c) 乙烯醇型的酯类	222
(d) α -卤代基的影响	223
11.3 双酯类及酮酸酯类的 C=O 伸缩振动	224
(a) α -双酯类及 α -酮酸酯类	224
(b) β -酮酸酯类及有关化合物	224
(c) γ -及 δ -双酯类及酮酸酯类	226
11.4 内酯、酸半缩酮等化合物的 C=O 伸缩振动	226
(a) 六元环(δ -内酯类)	226
(b) 五元环(γ -内酯类)	227
(c) 四元环	230
11.5 硫醇酯类	230
11.6 C—O 伸缩振动	230
(a) 总论	230
(b) 甲酸酯类	231

(c) 乙酸酯类	232
(d) 丙酸酯、丁酸酯及较高级的同系物	234
(e) $\alpha\beta$ -不饱和酯类	235
参考文献	235

第三部分 碳-氮、氮-氢键的主要振动

第十二章 酰胺、蛋白质和多肽	246
12.1 导言和表格	246
12.2 NH 伸缩振动	250
(a) 伯酰胺	250
(b) 仲酰胺	250
12.3 酰胺谱带 I (羰基吸收峰)	253
(a) 总论	253
(b) 伯酰胺(RCONH_2)	255
(c) 仲酰胺(N-单取代酰胺, 链状的)	256
(d) 叔酰胺	258
(e) 内酰胺	259
(f) 酰胺谱带 I 的强度	261
12.4 酰胺谱带 II	262
(a) 伯酰胺(RCONH_2)	262
(b) 仲酰胺(RCONHR)	263
(c) 仲酰胺中酰胺谱带 II 的来源	263
(d) 酰胺谱带 II 的频率范围	266
12.5 其他谱带与结构的对应联系	267
(a) 伯酰胺	267
(b) 酰胺谱带 III	268
(c) 骨架振动	268
(d) NH 的面外变形形式	268
12.6 具有特殊结构的酰胺	269
(a) 含有 CO—NH—CO 基团的化合物	269
(b) 含有 R—NH—CO—OR 基团的化合物	270

(c) 酰苯胺类 $\text{Ph}-\text{NH}-\text{COR}$	271
(d) 取代的脲类衍生物 $-\text{NH}-\text{CO}-\text{NH}-$ 等	271
(e) 含有 $\text{R}-\text{CO}-\text{NH}-\text{N}-$ 基团的化合物	272
12.7 多肽和蛋白质	272
(a) 总论	272
(b) 简单的肽类	273
(c) 3330 厘米^{-1} (3.0微米) 附近的 NH 伸缩谱带	276
(d) 3080 厘米^{-1} (3.25微米)附近的 NH 伸缩谱带	277
(e) 酰胺谱带 I 和 II	278
12.8 蛋白质研究中的红外二向色性效应	279
参考文献	281
第十三章 氨基酸、其盐酸盐、金属盐及酰胺基酸	286
13.1 导言和表格	286
13.2 NH_3^+ 伸缩振动	290
13.3 NH_3^+ 变形振动“氨基酸谱带” I 和 II	292
13.4 COOH 振动	294
(a) 羧基离子	294
(b) 不离子化的羧基吸收峰	297
13.5 $3000-2000\text{ 厘米}^{-1}$ ($3.33-5.00\text{微米}$)区域	298
13.6 其他谱带与结构的对应联系(氨基酸)	299
13.7 氨基酸的金属盐	300
13.8 酰胺基酸	301
(a) NH 振动	301
(b) $3000-2000\text{ 厘米}^{-1}$ 区域	301
(c) 羧基吸收峰	302
(d) 酰胺谱带 I 和 II	302
(e) 其他谱带与结构的对应联系	303
参考文献	303
第十四章 胺与亚胺类	305
14.1 导言和表格	305
14.2 NH 伸缩振动	306

(a) 总论	306
(b) 伯胺类	307
(c) 仲胺及亚胺类	309
14.3 胺类中的氢键	311
(a) 分子间氢键	311
(b) 内分子氢键	312
14.4 NH 变形振动	314
(a) 伯胺类	314
(b) 仲胺类	315
14.5 C—N 伸缩振动	317
(a) 芳香胺类	317
(b) 脂肪胺类	318
14.6 CH_3 —N 基团	318
14.7 NH_3^+ , NH_2^+ 及 NH^+ 基团	319
(a) NH_3^+ 吸收峰	319
(b) NH_2^+ 吸收峰	320
(c) NH^+ 吸收峰	320
参考文献	321
第十五章 不饱和含氮化合物	324
15.1 导言和表格	324
15.2 $\text{—C}\equiv\text{N}$ 伸缩振动	325
(a) 总论	325
(b) $\text{C}\equiv\text{N}$ 谱带的强度	327
15.3 异氰酸酯及甲二亚酰胺类 (carbodimides)	329
(a) 异氰酸酯	329
(b) 甲二亚酰胺类	330
15.4 $\text{—C}=\text{N—}$ 伸缩振动	330
(a) 总论	330
(b) 环共轭系统	333
(c) $\text{C}=\text{N—}$ 吸收峰的强度	335
15.5 $\text{—N}=\text{N—}$ 伸缩振动	335

15.6 重氮基团	337
15.7 叠氮化合物	338
参考文献	340
第十六章 杂环芳香族化合物	342
16.1 导言和表格	342
16.2 吡啶和喹啉类	343
(a) 总论	343
(b) CH 伸缩振动	344
(c) C=C 和 C=N 振动	344
(d) 环的振动和氢的变形 (吡啶和喹啉环取代基的 指定)	346
(e) 羟基和氨基取代的吡啶和喹啉	348
16.3 嘧啶和嘌呤类	348
(a) 总论	348
(b) CH 伸缩振动	349
(c) C=C 和 C=N 振动	349
(d) 环的振动	350
(e) 羟基和氨基嘧啶	351
16.4 其他杂环结构	352
参考文献	353

第四部分 含有其他元素的振动,无机基团

第十七章 硝基和亚硝基化合物,硝酸酯及

盐和亚硝酸酯及盐	362
17.1 导言和表格	362
17.2 硝基化合物	364
(a) C—NO ₂ 基团	364
(b) 共价的硝酸酯—O—NO ₂ —	368
(c) 共价的硝基胺类—N—NO ₂	369
(d) R—NO ₂ 伸缩吸收峰的强度	370

(e) RNO_2 基团的低频率吸收峰	370
17.3 $\text{R}-\text{N}=\text{O}$ 伸缩振动	371
(a) 亚硝酸酯 $-\text{O}-\text{N}=\text{O}$	372
(b) 亚硝基化合物 $>\text{C}-\text{N}=\text{O}$	372
(c) 亚硝基胺类 $-\text{N}-\text{N}=\text{O}$	374
(d) $\text{R}-\text{N}=\text{O}$ 基团的其他特征吸收峰	375
(e) 氧化胺类	376
17.4 硝酸离子	377
参考文献	378
第十八章 有机磷化合物	381
18.1 导言和表格	381
18.2 $\text{P}=\text{O}$ 伸缩振动	381
18.3 $\text{P}-\text{O}-\text{C}$ 伸缩振动	386
(a) $\text{P}-\text{O}-\text{C}$ (芳香族的) 振动	386
(b) $\text{P}-\text{O}-\text{C}$ (脂肪族的) 振动	387
(c) $\text{P}-\text{O}-$ 乙基振动等	388
(d) $\text{P}-\text{O}-$ 甲基振动	389
18.4 焦磷酸酯类	390
18.5 $\text{P}-\text{OH}$ 伸缩振动	391
18.6 $\text{P}-\text{H}$ 伸缩振动	392
18.7 磷-碳 键	393
(a) 芳香族	393
(b) 脂肪族	394
18.8 磷-硫键	394
(a) $\text{P}=\text{S}$ 伸缩振动	394
(b) $\text{P}-\text{S}-$ 伸缩振动	396
18.9 磷-氮键	396
(a) $\text{P}-\text{NH}_2$ 及 $\text{P}-\text{NH}$ 振动	396
(b) $\text{P}-\text{N}$ 伸缩振动	397
18.10 磷-卤键	398
(a) $\text{P}-\text{Cl}$ 振动	398