

# 仪器分析导论 第四册

IR NMR MS UV 数据集

〔日〕小川 雅彌 等主编

YIQIFENXI

YIQIFENXI  
DAOLUN



化学工业出版社

## 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，书中收集了解释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表示出了每个光谱必要的吸收范围，书中还收录了便于使用的计算式及换算表，以及213个化合物的数据。

本书内容精炼、语言通俗、很适于初学者自学。

小川 雅彌 監修代表

機器分析のてびき (データ集)

第一版 第2刷

化学同人 京都市山科区西野野色町5-4

1980年7月15日

仪器分析导论

第 四 册

IR NMR MS UV 数据集

吴贵芬 译

责任编辑: 任惠敏

封面设计: 任 辉

化学工业出版社出版发行

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

开本850×1168<sup>1</sup>/<sub>32</sub>印张6<sup>1</sup>/<sub>8</sub>字数161千字

1988年10月第1版 1988年10月北京第1次印刷

印 数 1—2,000

ISBN 7-5025-0092-8/TQ·54

定 价2.30元

## 加 序

《仪器分析入门》第1册刚一出版，就立即得到了大家的好评，但也指出了解析光谱所必需资料的不完善之处。为了补充这个不足之处，本书就将精选过的资料汇总成小册子<sup>①</sup>。

作为光谱解析的资料，就各自光谱而言，已经出版了许多具有丰富内容的数据集及详细的解说书。但是从这些资料来寻求基础的资料，谈出基本化合物是颇为费事的，特别对初学者来说是困难的。

为此，本数据集以基础图为中心，在基础图上表示出解析每个光谱所必要的吸收范围，收录了便于使用的计算式与换算表，以及作为解析范例的213个化合物的数据。希望这一适用的数据集，不论对初学光谱解析的人，还是对有经验者都将是十分有益的。

再有，如能承蒙对本书提出批评及建议，有助于今后的修订，则是非常荣幸的，不盛感激。

化学同人编辑部

---

① 即成为本套书的第四册——译注。

主 编

泉 美治  
【大阪大学蛋白研】

小川 雅彌  
【関西大学工学部】

加藤 俊二  
【大阪大学教養部】

塩川 二郎  
【大阪大学工学部】

芝 哲夫  
【大阪大学理学部】

执 笔

大城 芳樹  
【大阪大学工学部】

小幡 齐  
【関西大学工学部】

岡原 光男  
【大阪大学工学部】

野村 正勝  
【大阪大学工学部】

福尾 剛志  
【関西大学工学部】

松田 治和  
【大阪大学工学部】

# 目 录

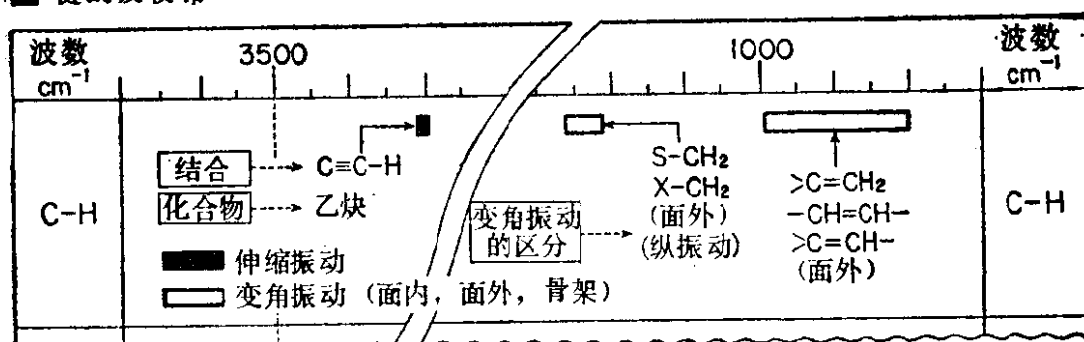
|                                                           |                    |
|-----------------------------------------------------------|--------------------|
| <b>第一章 红外吸收光谱</b>                                         | <b>岡原 光男… (1)</b>  |
| 主要键的吸收带 .....                                             | (2)                |
| 化合物、原子团的吸收带(8张图表) .....                                   | (4)                |
| 烯烃的吸收 .....                                               | (12)               |
| 波长一波数换算表 .....                                            | (14)               |
| <b>第二章 <math>^1\text{H}</math>核磁共振波谱</b>                  | <b>松田 治和… (16)</b> |
| 化学位移表 (12张图表) .....                                       | (16)               |
| 自旋偶合常数表 (2张图表) .....                                      | (28)               |
| $^1\text{H}$ -NMR化学位移的计算方法 .....                          | (30)               |
| 偶合常数的计算式 .....                                            | (32)               |
| <b>第三章 <math>^{13}\text{C}</math>核磁共振波谱</b>               | <b>大城 芳树… (33)</b> |
| $^{13}\text{C}$ 化学位移一览表 (3张图表) .....                      | (34)               |
| 化学位移表 (12张图表) .....                                       | (36)               |
| 自旋偶合常数表 .....                                             | (44)               |
| $^{13}\text{C}$ -NMR的化学位移计算方法 .....                       | (45)               |
| <b>第四章 质谱</b>                                             | <b>野村 正勝… (57)</b> |
| 碎片和开裂方式表 (至质量数106) .....                                  | (57)               |
| 主要中性碎片的开裂方式 .....                                         | (72)               |
| 同族系列的碎片离子 .....                                           | (74)               |
| 分子离子的相对强度 .....                                           | (76)               |
| <b>第五章 紫外吸收光谱</b>                                         | <b>小幡 齐… (77)</b>  |
| $\lambda_{\text{max}}$ 值表 (9张图表) .....                    | (78)               |
| 溶剂的使用波长范围 .....                                           | (87)               |
| $\lambda_{\text{max}}$ 的计算式 .....                         | (88)               |
| 透过率( $T\%$ )-吸光度( $\log I_0/I$ )换算表 .....                 | (91)               |
| 主要化合物的光谱 .....                                            | (93)               |
| <b>第六章 光谱数据表</b>                                          | <b>福尾 刚志… (94)</b> |
| IR, $^1\text{H}$ -NMR, $^{13}\text{C}$ -NMR, MS, UV ..... | (94)               |
| <b>附 录 本书的使用方法</b> .....                                  | (186)              |

# 第一章 红外吸收光谱

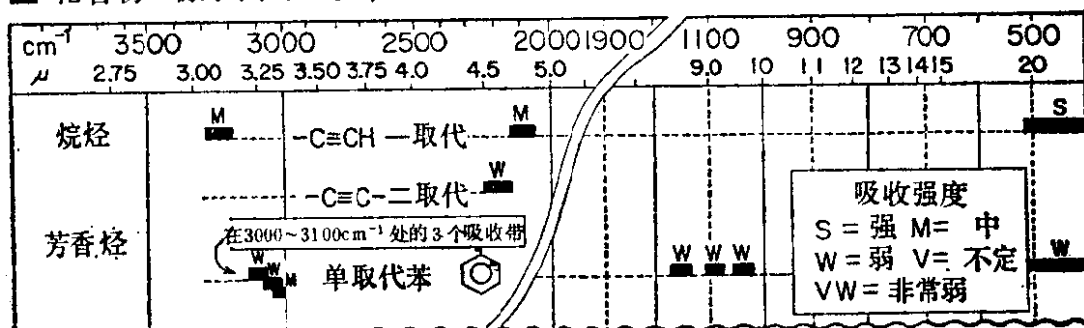
岡原 光男<sup>①</sup>

## 看表的方法

### ■ 键的吸收带



### ■ 化合物・原子团的吸收带



## 伸缩振动的近似归属方法

Hooke定律

$$\bar{\nu} \text{ (cm}^{-1}\text{)} = 4.12 \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

$K$  = 键的力常数 dyne/cm

(单键  $5 \times 10^5$ , 双键  $10 \times 10^5$ , 叁键  $15 \times 10^5$ )

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad (M_1, M_2 = \text{原子量})$$

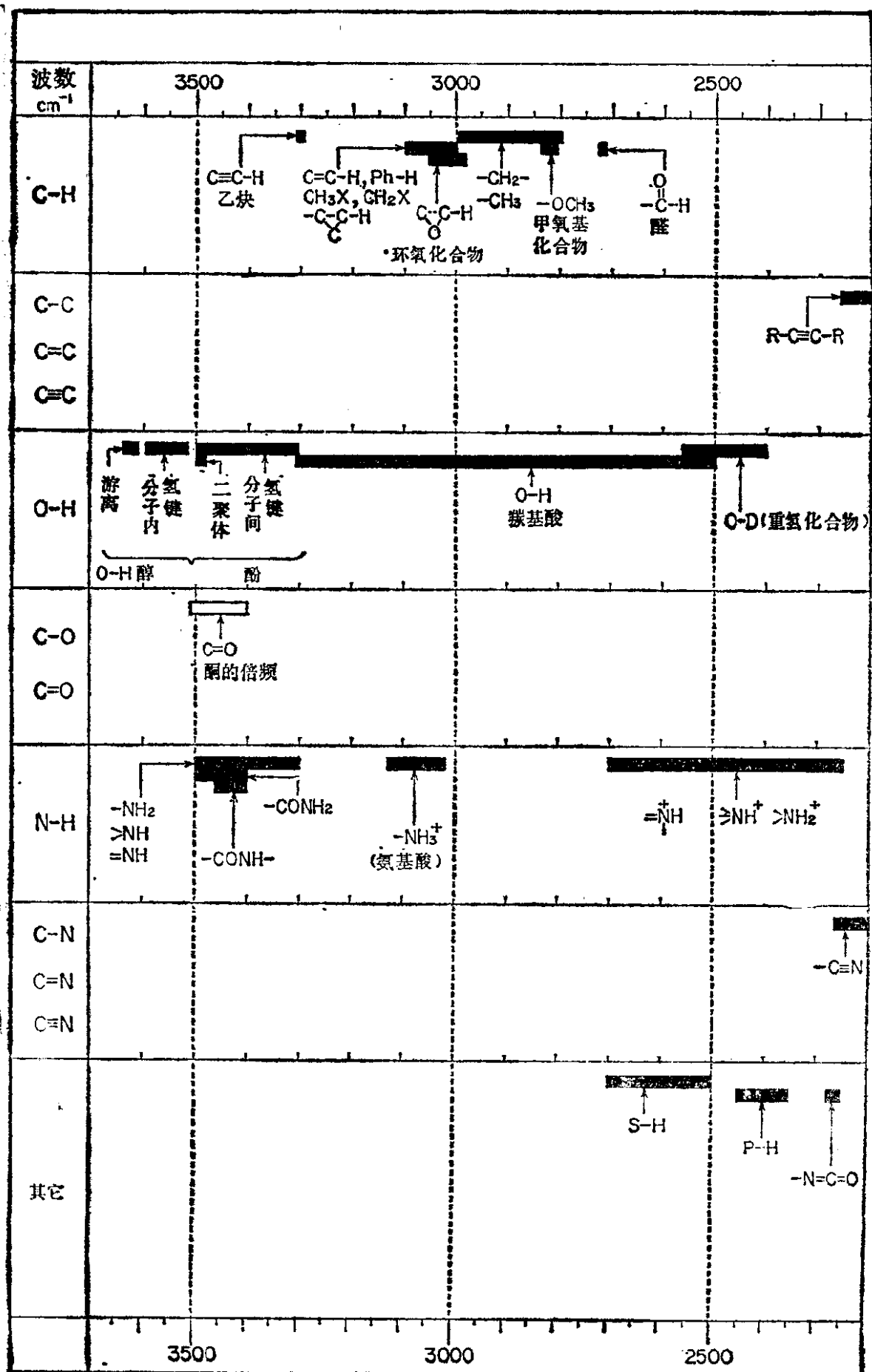
(例)  $C=C$  键:  $\mu = \frac{12^2}{12 + 12} = 6$

$$K = 10 \times 10^5$$

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

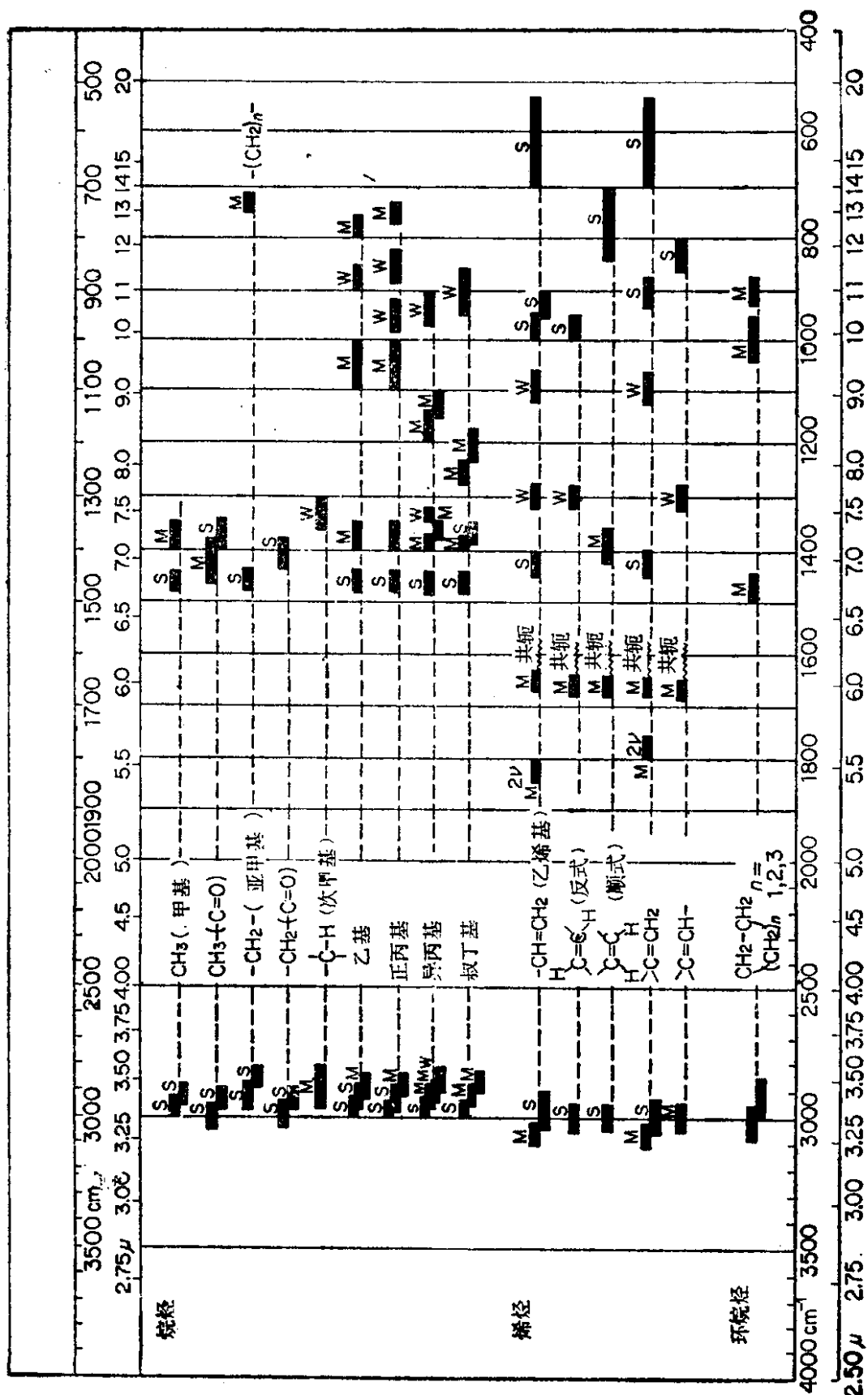
① 大阪大学工学部教授、工学博士。

## 主要键的吸收带

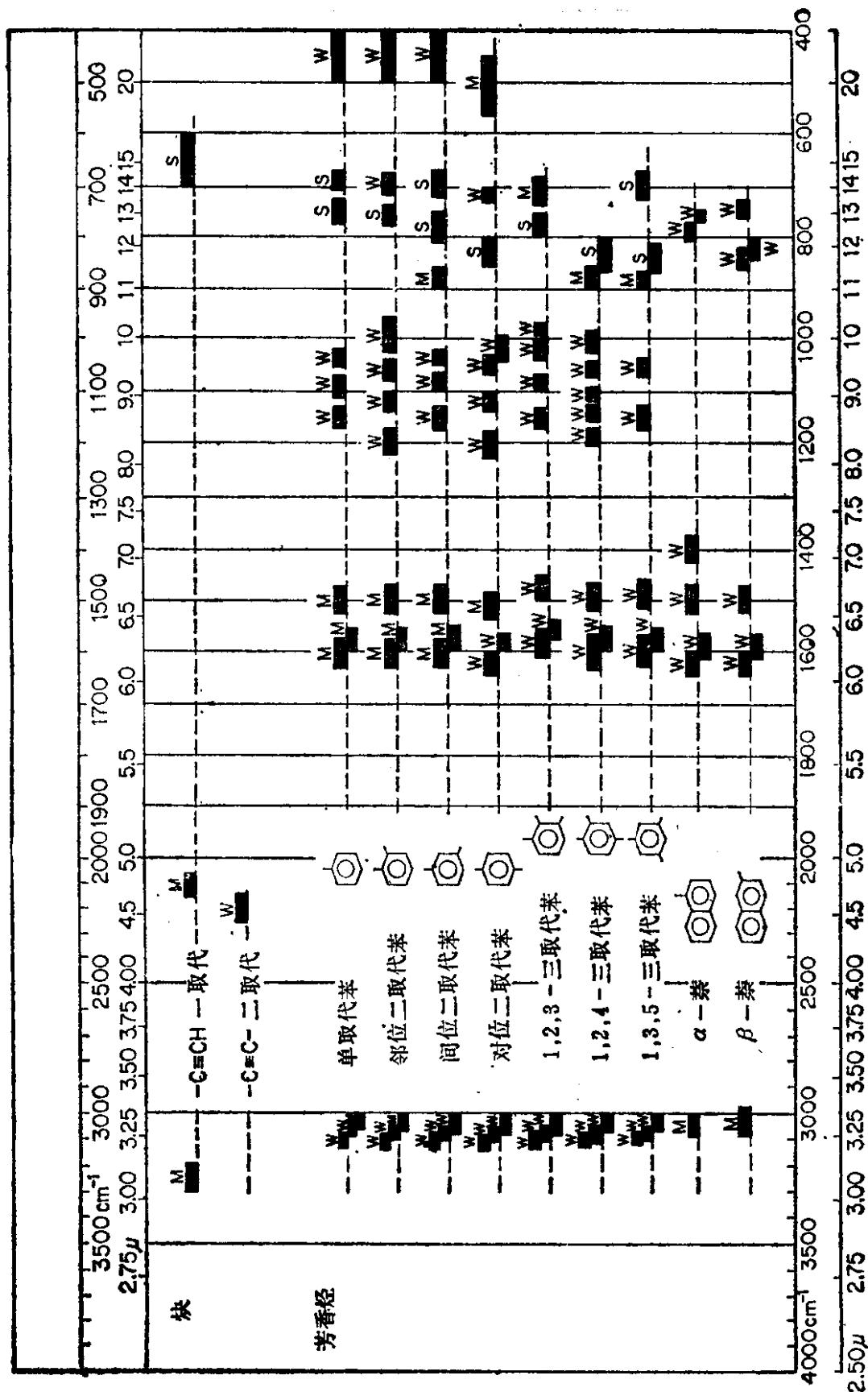


| 波数 $\text{cm}^{-1}$                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |      |      |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|------|
| 2000                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 1500 | 1000 |
| <p>芳香族倍频 (面外)</p> <p><math>\text{C}-(\text{CH}_3)_n</math></p> <p><math>\text{CH}_2-\text{CH}-</math></p> <p><math>\text{CH}_2</math> (剪式)</p> <p>酮</p> <p><math>&gt;\text{C}=\text{CH}_2</math></p> <p><math>-\text{CH}=\text{CH}-</math></p> <p><math>&gt;\text{C}=\text{CH}-</math> (面内)</p> <p><math>\text{S}-\text{CH}_2</math></p> <p><math>\text{X}-\text{CH}_2</math> (面外)</p> <p>(纵振动)</p> <p><math>&gt;\text{C}=\text{CH}_2</math></p> <p><math>-\text{CH}=\text{CH}-</math></p> <p><math>&gt;\text{C}=\text{CH}-</math> (面外)</p> |      |      |
| <p><math>\text{R}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{R}</math></p> <p><math>&gt;\text{C}=\text{C}=\text{C}</math></p> <p><math>\text{RR}'\text{C}=\text{CR}''\text{R}'''</math></p> <p><math>\text{R}-\text{C}(\text{CH}_2)_n-\text{R}</math></p> <p><math>\text{C}=\text{C}=\text{O}</math></p> <p><math>\text{C}(\text{CH}_2)_n</math> (骨架)</p> <p><math>\text{CH}_2-\text{CH}_2</math></p> <p><math>\text{CH}_2</math> (骨架)</p> <p><math>-(\text{CH}_2)_n</math> (骨架)</p>                                                                      |      |      |
| <p><math>\text{O}-\text{H}</math></p> <p>醇</p> <p>羧酸二聚体</p> <p><math>\text{O}-\text{H}</math></p> <p>羧酸二聚体</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |      |      |
| <p><math>\text{C}=\text{O}</math></p> <p>醛</p> <p>酮</p> <p>羧酸</p> <p>酯</p> <p><math>\text{C}=\text{O}</math></p> <p>酰胺</p> <p><math>\text{C}=\text{O}</math></p> <p>碳酸盐离子 (不对称)</p> <p><math>\text{C}=\text{O}</math></p> <p>酯</p> <p><math>\text{R}-\text{OR}'</math></p> <p>醚 (不对称)</p> <p><math>\text{C}-\text{OH}</math></p> <p>醇</p> <p>酚</p> <p><math>\text{C}-\text{O}</math></p> <p>环氧 (骨架)</p>                                                                                                                                     |      |      |
| <p><math>-\text{NH}_2</math></p> <p><math>-\text{NH}_3^+</math></p> <p><math>&gt;\text{NH}</math></p> <p><math>\text{NH}_2</math> (面外)</p> <p><math>\text{NH}</math> (面外)</p> <p>(纵振动)</p> <p>(纵振动)</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |      |      |
| <p><math>-\text{S}-\text{C}\equiv\text{N}</math></p> <p><math>-\text{N}\equiv\text{C}</math></p> <p><math>&gt;\text{C}=\text{N}-</math></p> <p><math>\text{C}-\text{N}</math></p> <p>胺</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |      |      |
| <p><math>\text{NO}_2, \text{NO}_2</math></p> <p>硝基, 亚硝基</p> <p>硝酸盐</p> <p>亚硝酸盐</p> <p><math>\text{CF}_2</math></p> <p><math>\text{CF}_3</math></p> <p><math>\text{N}-\text{O}</math></p> <p><math>\text{N}-\text{O}</math></p> <p><math>\text{C}-\text{S}</math></p> <p><math>\text{C}-\text{Cl}</math></p> <p><math>\text{P}=\text{O}</math></p> <p><math>\text{S}=\text{O}</math></p> <p><math>\text{P}-\text{O}-\text{R}</math></p> <p><math>\text{P}-\text{O}-\text{P}</math></p>                                                       |      |      |
| <p>其它</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |      |      |

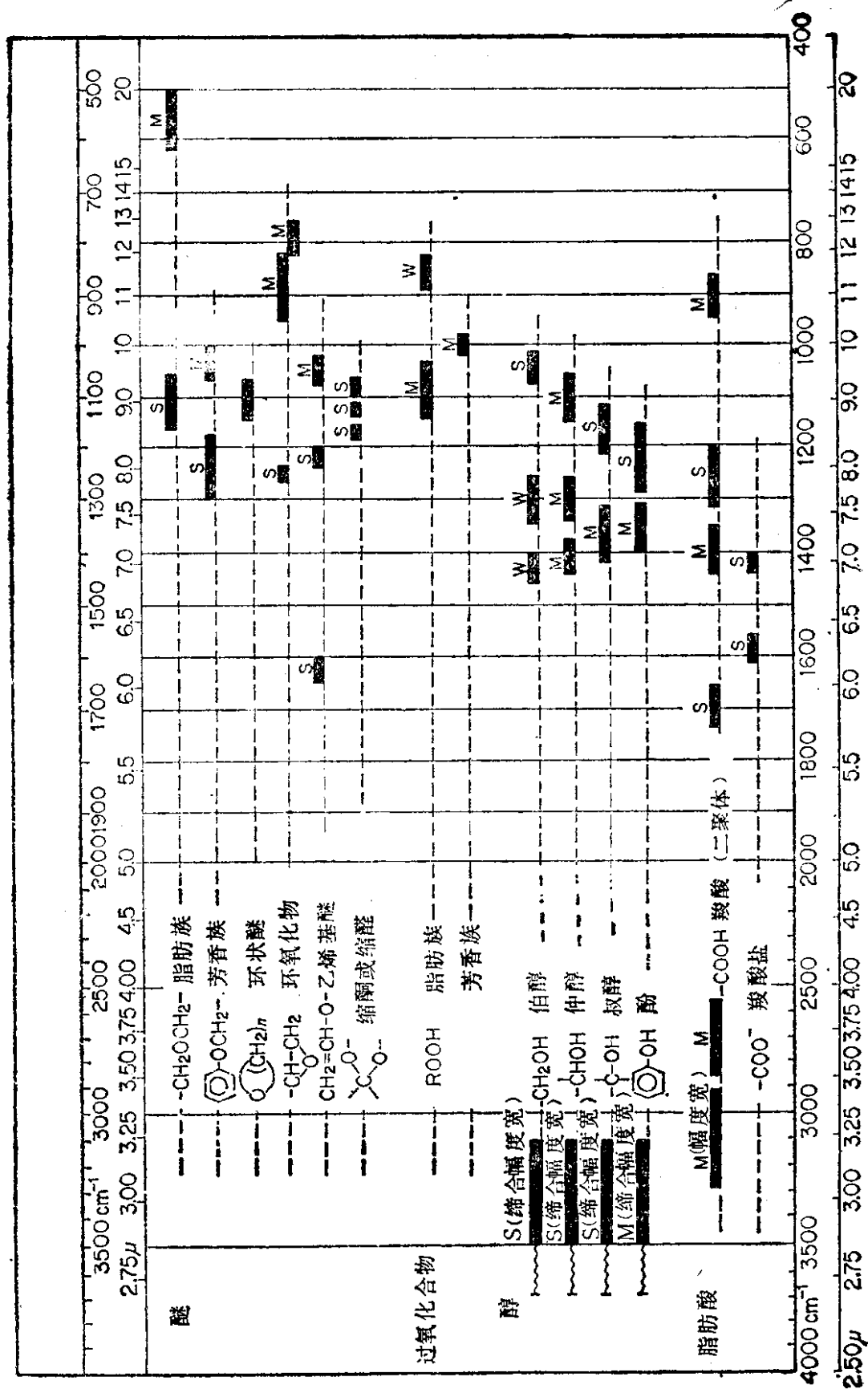
化合物、原子团的吸收带 I (烷烃, 烯烃)



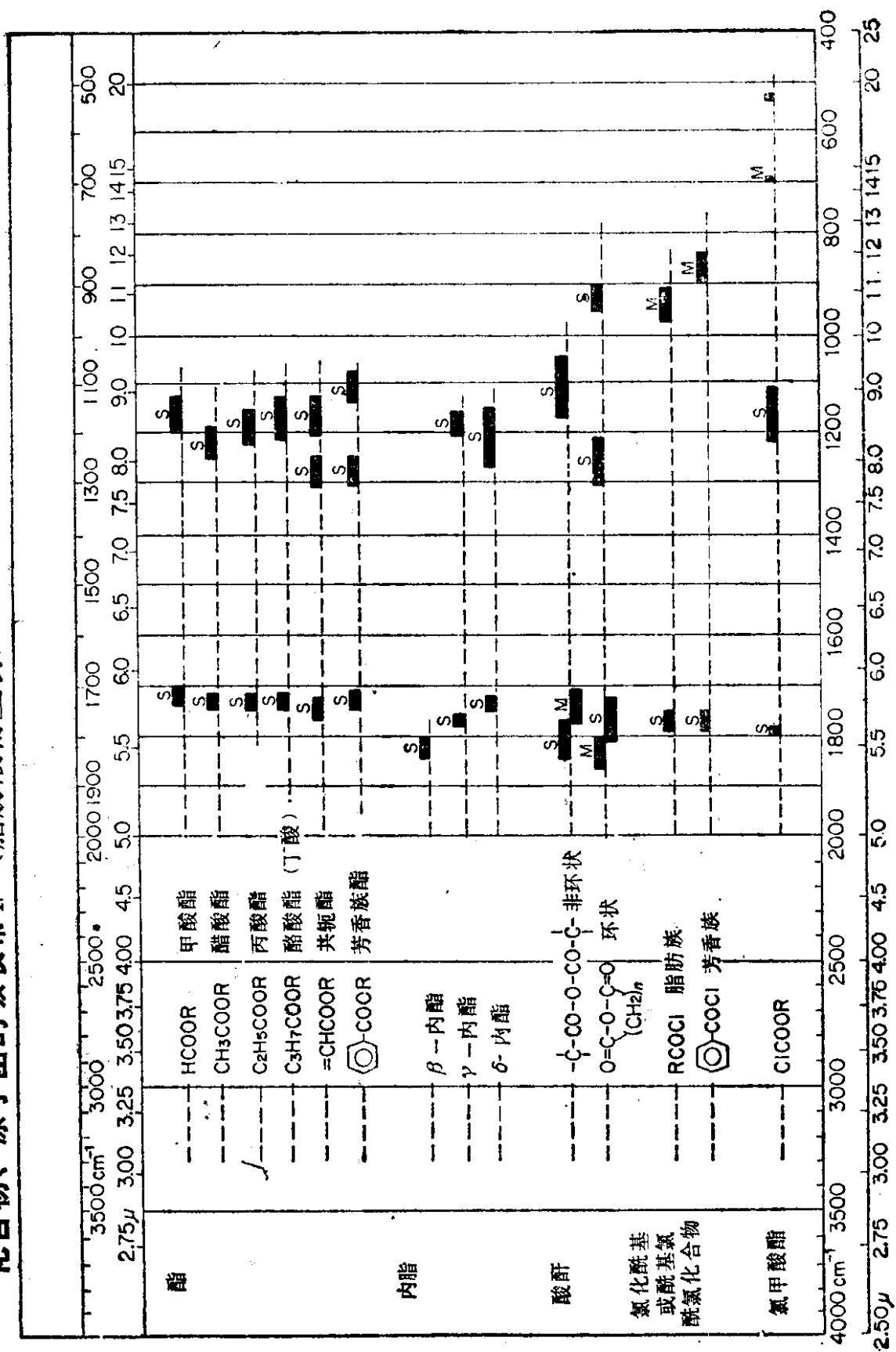
化合物、原子团的吸收带 II (炔烃, 芳香烃)



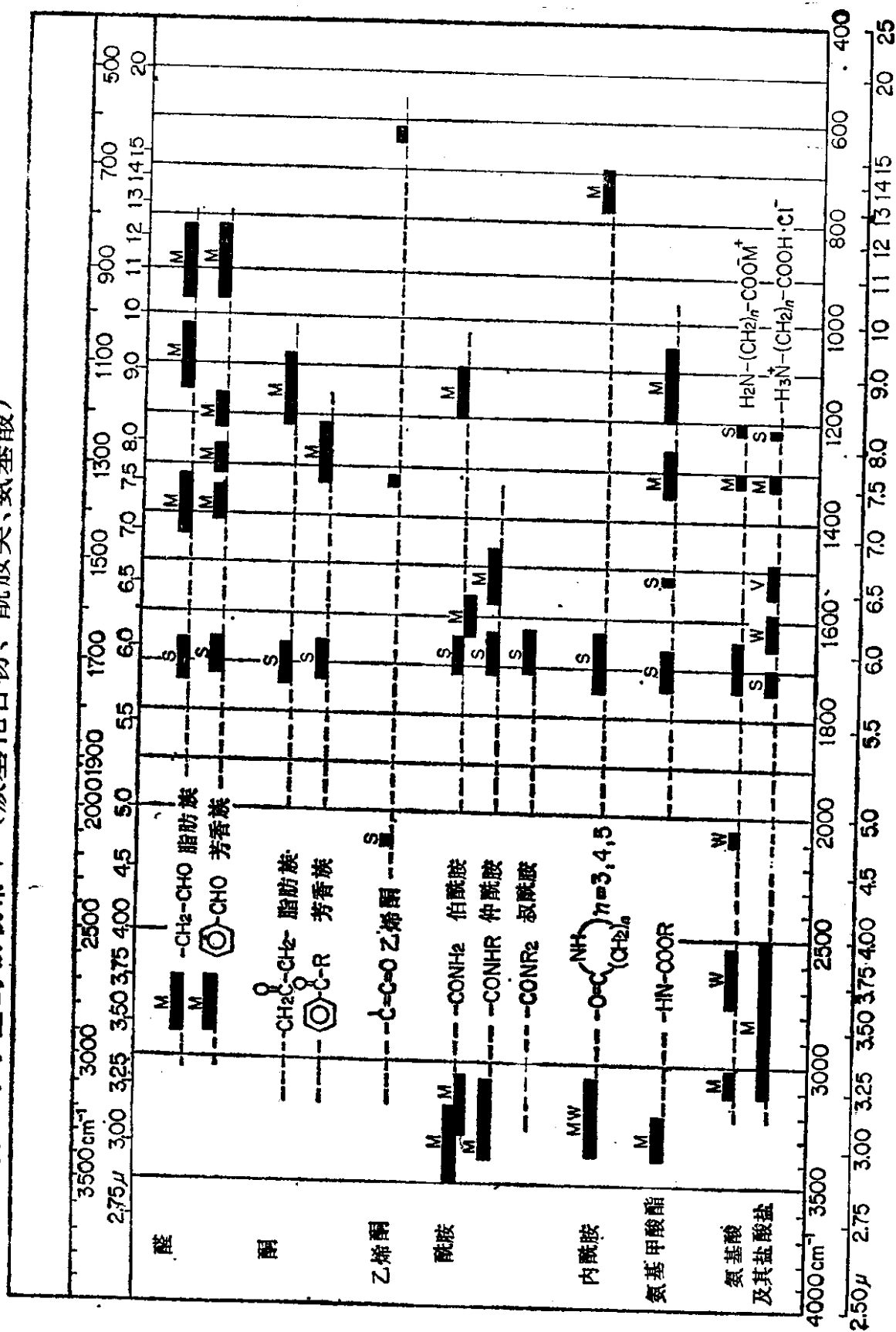
化合物、原子团的吸收带Ⅲ (醚、醇、脂肪酸)



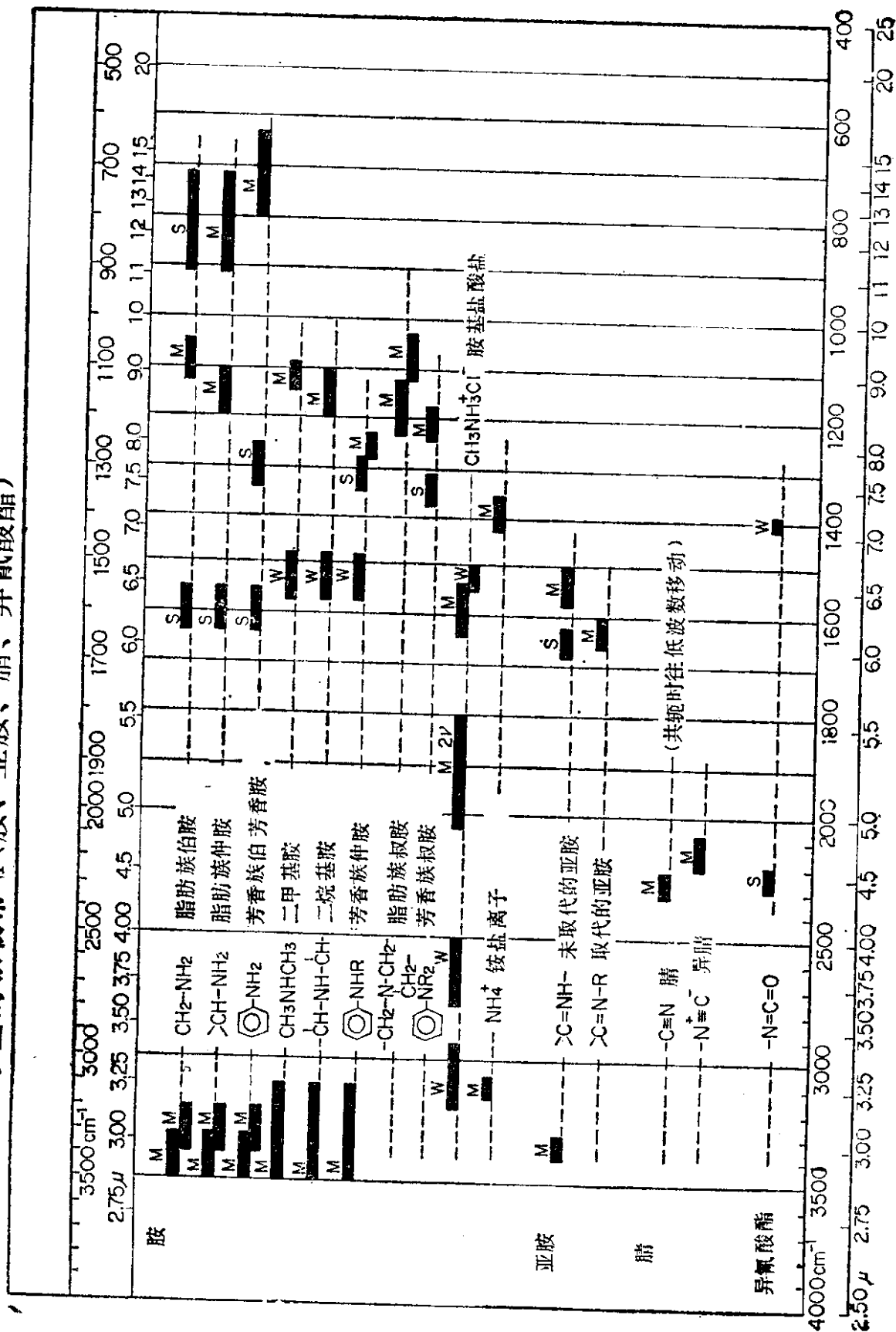
化合物、原子团的吸收带 IV (脂肪酸衍生物)



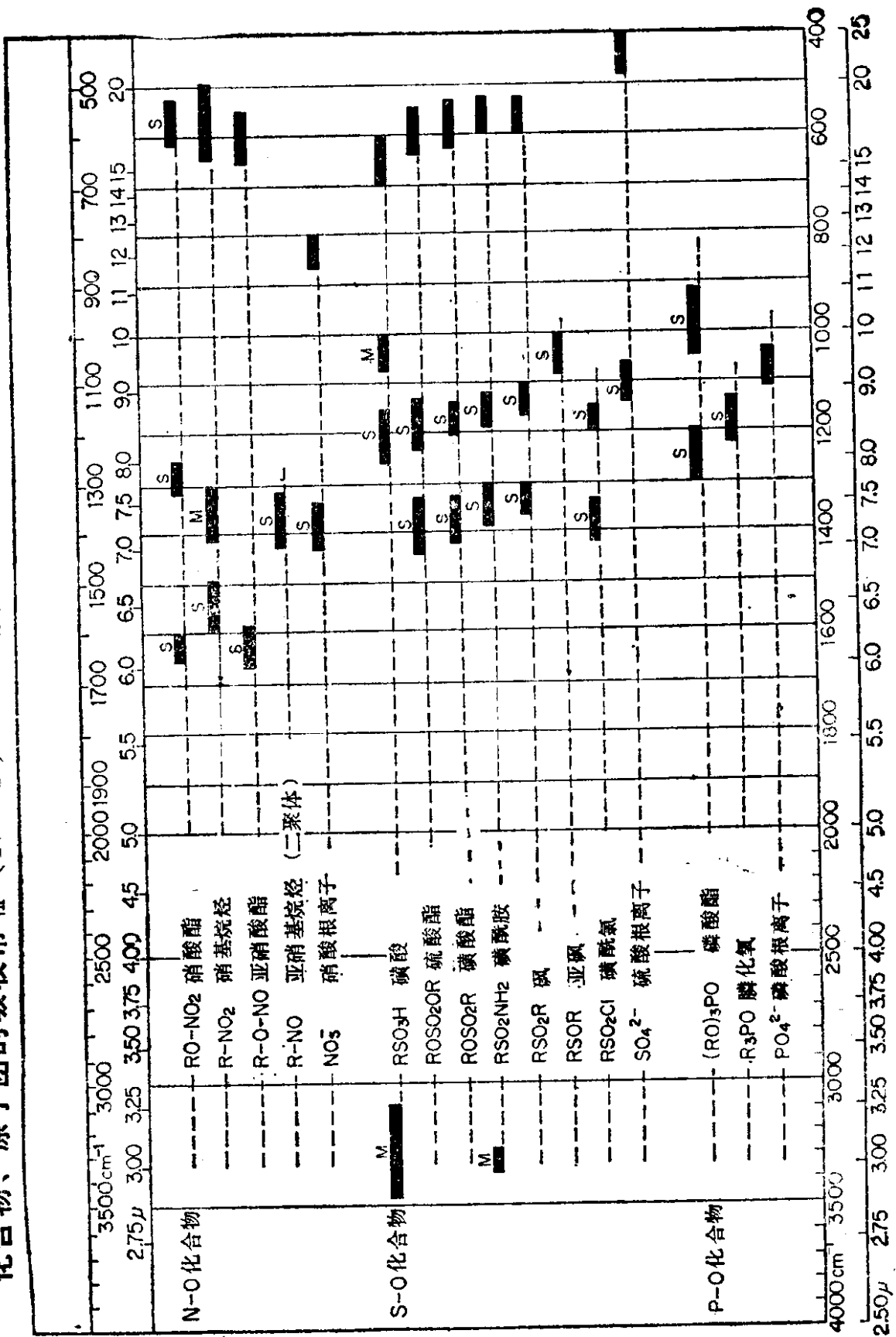
化合物、原子团的吸收带 V (羰基化合物、酰胺类、氨基酸)



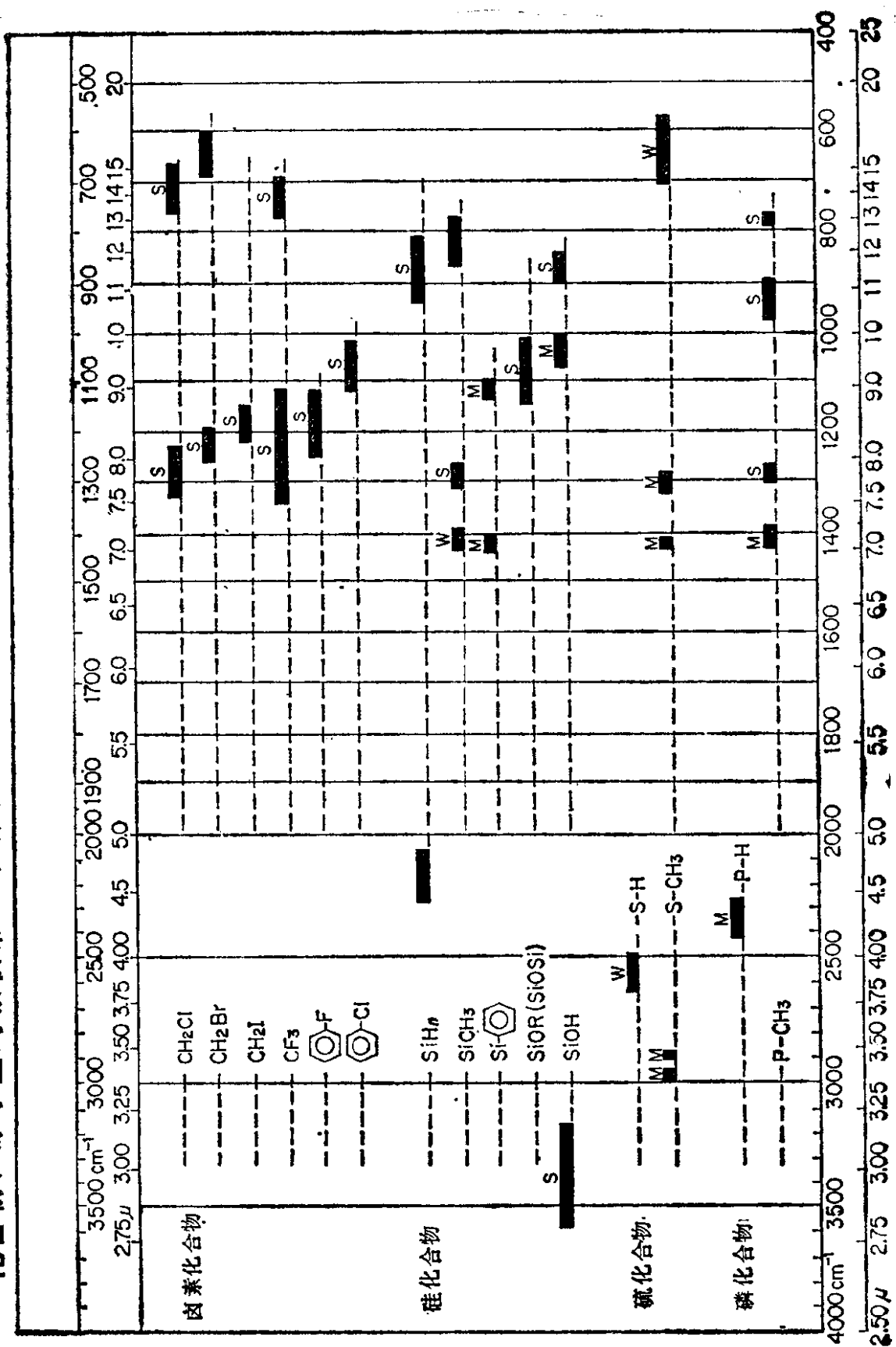
化合物、原子团的吸收带 VI (胺、亚胺、腈、异氰酸酯)



化合物、原子团的吸收带 (N—O, S—O及P—O化合物)



化合物、原子团的吸收带Ⅷ(卤素, 硅, 硫, 磷化合物)



烯烃的吸收

| 取代方式 | 结 构                                                                                                                                            | 吸收区域cm <sup>-1</sup> (nm)强度                                                    | 代 表 例<br>cm <sup>-1</sup>                                                                                                          |
|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 一取代  | $\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} \\ & / & \diagdown \\ \text{H} & & \text{R} \end{array}$ 乙烯基 | 1648~1638 (6.07~6.10) S<br>1000~985 (10.00~10.05) S<br>915~905 (10.93~11.05) S | 1-丁烯 1645, 994, 912<br>1-戊烯 1643, 993, 912<br>3,3-二甲基-1-丁烯 1640, 1000, 900<br>乙基基环己烷 1645, 993, 909<br>3,4-二甲基-1-己烯 1640, 997, 908 |
| 二取代  | $\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} \\ & / & \diagdown \\ \text{R} & & \text{R} \end{array}$ 顺式  | 1662~1626 (6.02~6.15) W<br>730~665 (13.70~15.04) S                             | 2-丁烯 1661, 675<br>2-戊烯 1656, 693<br>4-甲基-2-戊烯 1660, 719<br>4,4-二甲基-2-戊烯 1660, 690<br>3-辛烯 1654, 714                                |
|      | $\begin{array}{c} \text{H} & & \text{R} \\ & \diagdown & / \\ & \text{C}=\text{C} \\ & / & \diagdown \\ \text{R} & & \text{H} \end{array}$ 反式  | 1680~1668(5.95~6.00) W-VW<br>980~960 (10.20~10.42) S                           | 4-甲基-2-戊烯 1680, 971<br>4,4-二甲基-2-戊烯 1680, 980<br>4-乙基-2-己烯 1670, 966<br>2-辛烯 1670, 963<br>3-辛烯 1675, 961                           |