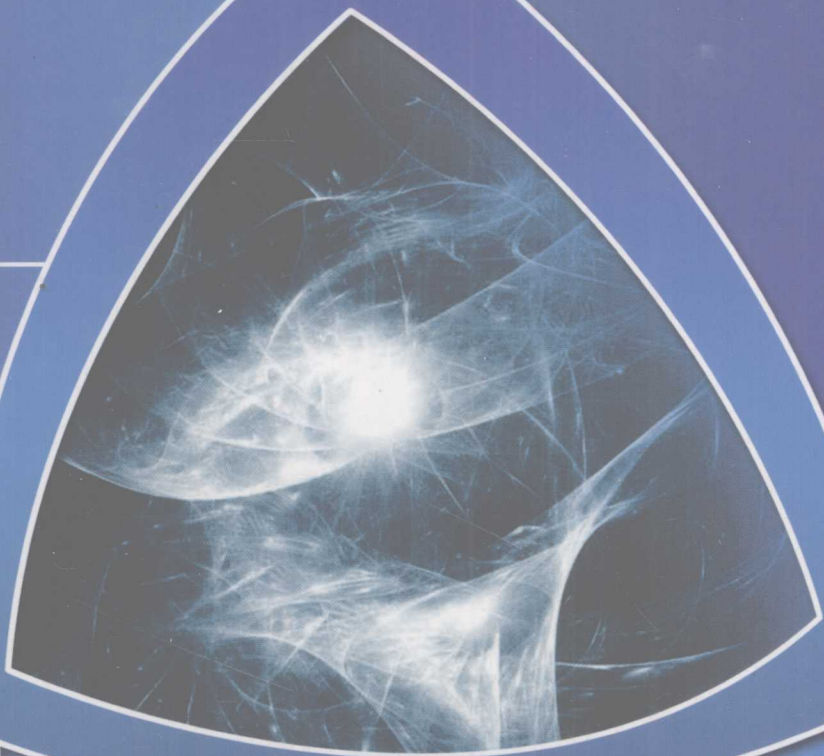




主 编 张正行

有机光谱 分析

有机光谱分析

主 编 张正行

副主编 杭太俊 袁耀佐

编 委 (以姓氏笔画为序)

丁 娅 王 玉 宋 敏 宋沁馨

张正行 杭太俊 袁耀佐

人民卫生出版社

图书在版编目(CIP)数据

有机光谱分析/张正行主编. —北京:人民卫生出版社,2009.8

ISBN 978-7-117-11741-8

I. 有… II. 张… III. 有机分析:光谱分析
IV. 0657.3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 049366 号

门户网: www.pmph.com

出版物查询、网上书店

卫人网: www.hrhexam.com

执业护士、执业医师、
卫生资格考试培训

有机光谱分析

主 编: 张正行

出版发行: 人民卫生出版社(中继线 010-67616688)

地 址: 北京市丰台区方庄芳群园 3 区 3 号楼

邮 编: 100078

E - mail: pmph@pmph.com

购书热线: 010-67605754 010-65264830

印 刷: 尚艺印装有限公司

经 销: 新华书店

开 本: 787×1092 1/16 印张: 35.75

字 数: 880 千字

版 次: 2009 年 8 月第 1 版 2009 年 8 月第 1 版第 1 次印刷

标准书号: ISBN 978-7-117-11741-8/R·11742

定 价: 72.00 元

版权所有,侵权必究,打击盗版举报电话: 010-87613394

(凡属印装质量问题请与本社销售部联系退换)

前言

我们曾经出版过《有机光谱分析》(1995年8月人民卫生出版社),该书出版被许多高校和科研单位作为教材或参考书采用,为教学和科研起了积极的推动作用。1996年先后获国家医药局优秀图书奖和科技进步三等奖。

十余年过去了,各门谱学在理论、仪器、方法和应用等方面均有很重大的进展,鉴定有机化合物结构已在更高的水平上进行,进一步确定其构型、构象则是其自然的深化。波谱法已迅速渗透到化学、药学、植物化学、生物化学、医学、农业、商业等研究领域,在科学研究和国民经济的多个部门得到广泛应用。特别引人注目的是它在药学学科中的应用取得了巨大成功,推动了药学学科的发展,正如已故的著名药物分析专家安登魁教授在其主编的《药物分析选论》一书中预言的那样“哪里对现代药物分析的方法和技术运用得及时恰当,哪里就可能对新药的研究与开发以及药物的合理应用打开一个可喜而崭新的局面”。因此,波谱法已成为从事化学及相关学科的科技人员必须掌握的基本知识和基本技能。

为了进一步满足教学用书和在这一领域工作的专业人员需要,编者决定在1995年版《有机光谱分析》的基础上进行全面的补充、修改后再版。全书共分八章:第一章 紫外吸收光谱和手性光谱,新增了手性光谱的内容。第二章 红外光谱和拉曼光谱,新增了拉曼光谱的内容。第三章 核磁共振光谱基本理论,循序渐进地介绍NMR的原理。第四章 ^1H -核磁共振谱,新增更丰富的应用实例。第五章 ^{13}C -核磁共振谱,根据波谱分析现状,删除了部分用经验规则计算化学位移的内容。第六章 二维核磁共振技术,增加了NMR谱新技术最新应用发展。第七章 有机质谱法,增加了色谱-质谱联用和软电离质谱技术及其应用。第八章 波谱综合解析,增加了典型化合物光谱综合解析实例。

全书力求反映波谱学领域的新成就和新技术,并用较大篇幅融入了编者们十余年的教学、科研经验和成果。

全书编著的指导思想遵循:理论部分由浅入深,阐述清楚,便于学习;应用实例部分,给思路、给方法,便于应用。本书已被批准为“江苏省精品教材”建设项目。

本书编写人员感谢中国药科大学各级领导支持,感谢药分教研室同人和编写同志家人支持,感谢江苏省药检所领导支持本书编写(有两名骨干参加本书编写)。由于编写水平限制,本书一定会存在一些疏漏和不足之处,恳请读者批评指正,以便本书再版时修正,对诸位读者的关心和支持表示感谢。

编者

2009年5月于中国药科大学

目录

第一章 紫外吸收光谱和手性光谱	1
引言	1
第一节 分子吸收光谱的基本知识	2
一、光的性质与波长范围	2
(一) 光的波粒二象性	2
(二) 自然光、单色光和偏振光	3
(三) 电磁波谱的范围划分	4
二、分子的能级图	4
三、光的吸收	5
四、Lambert-Beer 定律	5
五、旋光现象	6
第二节 紫外吸收光谱	7
一、紫外吸收光谱的基本理论	7
(一) 分子轨道(molecular orbital)	7
(二) 电子跃迁(electron transition)	9
(三) 紫外吸收光谱	12
(四) 波长位移的影响因素	17
二、紫外吸收光谱与分子结构间关系	24
(一) 共轭烯类化合物的紫外吸收光谱	24
(二) 羰基化合物和 α 、 β -不饱和羰基化合物的紫外吸收光谱	26
(三) 芳香化合物的紫外吸收光谱	30
(四) 芳杂环化合物的紫外吸收光谱	33
三、紫外吸收光谱在分子结构测定中的应用	34
(一) 官能团及大致结构的探求	34
(二) 结构式的确定	35
(三) 紫外光谱在构型和构象测定中的应用	37
(四) 紫外吸收光谱在药物结构鉴定上的应用	39
第三节 手性光谱法	40
一、手性光谱法的基本理论	40
(一) 圆双折射和圆二色性(circular birefringence and circular dichroism)	40
(二) 旋光光谱和科顿效应(ORD spectra and Cotton Effect)	42
(三) 圆二色光谱(CD spectra)	43
(四) ORD 和 CD 的相互关系	44

(五) ORD 和 CD 的仪器与测量	45
二、旋光光谱和圆二色光谱在分子结构测定中的应用	46
(一) 八区规则(octant rule)	46
(二) 激子手性规则(exciton chirality rule)	49
(三) HPLC 与 CD 和 ORD 联用在手性药物研究方面的应用	52
第二章 红外光谱和拉曼光谱	55
第一节 振转光谱的基本理论	55
一、双原子分子的振动	55
(一) 双原子分子的振动频率	55
(二) 双原子分子振动的能量方程	57
(三) 偶极矩与极化率的变化	58
二、分子振动类型	59
三、分子运动自由度	60
四、振动跃迁选律与峰强度	61
五、振动偶合	62
六、分子的振-转光谱	64
第二节 红外光谱	67
一、傅里叶变换红外光谱仪	68
二、样品测定	69
(一) 样品要求	70
(二) 测定方法	70
第三节 拉曼光谱	74
一、拉曼光谱基本原理	74
二、拉曼光谱与红外光谱的比较	75
(一) 光谱选律的区别	75
(二) 分子振动信息的互补性	76
(三) 拉曼光谱的优点	77
三、拉曼光谱仪与拉曼光谱测定技术	77
(一) 拉曼光谱仪	77
(二) 拉曼光谱测定技术	78
第四节 各类有机化合物官能团的特征振动波数	79
一、烷烃	79
二、烯烃	81
三、炔烃	85
四、芳香烃	86
五、醇和酚	88
六、醚	92
七、胺	92
八、胺盐	93

九、羰基化合物	94
(一) 醛	96
(二) 酮	96
(三) 羧酸	97
(四) 酯	98
(五) 酰卤	100
(六) 羧酸酐	100
(七) 酰胺	101
十、羧酸根、氨基酸和氨基酸盐	102
(一) 羧酸根	102
(二) 氨基酸	102
(三) 氨基酸盐	103
十一、腈、异氰酸酯及亚胺化合物	104
十二、含 —N=O 基化合物	104
十三、有机硫化物	107
十四、有机卤化物	109
十五、磷化合物	109
第五节 红外、拉曼光谱在化合物分子结构鉴定中的应用	110
一、不饱和度的计算	111
二、官能团的搜索	111
三、结构解析示例	113
附表 2-1 各类化合物红外吸收波数范围和强度(按化合物英文名称字母顺序排列)	116
附表 2-2 各类化合物官能团红外吸收波数范围和强度(按波数顺序排列)	121
附表 2-3 复杂分子的官能团在拉曼光谱中特征振动波数	126
第三章 核磁共振光谱基本理论	131
第一节 原子核的自旋运动	133
一、自旋量子数(I)	133
二、自旋角动量(P)和磁矩(μ)	133
第二节 自旋核在外磁场中的性质	134
一、自旋核的取向、进动与能级	134
二、自旋核体系的能级分布与磁化矢量	136
(一) 能级分布(玻耳兹曼分布)	136
(二) 自旋核体系的磁化矢量(M)	136
三、核磁共振条件与共振信号	137
第三节 核的弛豫与谱峰宽度	138
一、自旋核体系的弛豫过程	139
(一) 纵向弛豫	139
(二) 横向弛豫	140

二、核磁共振谱峰宽度	140
第四节 磁化矢量的运动	141
一、Bloch 方程	141
二、旋转坐标系统中磁化矢量 M 的运动	143
三、自由感应衰减信号(FID)	144
第五节 脉冲 Fourier 变换核磁共振测定	146
一、连续波(continuous wave)核磁共振谱仪	146
二、脉冲-Fourier 变换核磁共振谱仪(PFT-NMR)	147
(一) Fourier 变换	147
(二) 脉冲射频磁场	149
(三) 脉冲-Fourier 变换核磁共振谱仪的优点	150
第六节 化学位移	150
一、化学位移的产生——电子云的屏蔽效应	151
二、化学位移标准物质和化学位移的表示	152
第七节 偶合裂分	154
一、自旋-自旋偶合产生机制	154
二、自旋-自旋偶合作用的 Dirac 矢量模型	156
三、自旋核的等价性与自旋偶合系统	158
(一) 化学等价核	158
(二) 磁等价核	159
(三) 自旋偶合系统的标记	160
(四) 偶合裂分多重性规律	160
第八节 核磁共振谱测定样品、溶剂和结构信息	162
第四章 ^1H -核磁共振谱	165
第一节 影响化学位移的因素	165
一、电性效应	165
(一) 诱导效应	165
(二) 共轭效应	166
二、各向异性效应	167
(一) 苯环的各向异性效应	167
(二) 炔键的各向异性效应	168
(三) 双键的各向异性效应	169
(四) 单键的各向异性效应	170
三、氢键效应	171
四、质子快速交换反应	171
五、溶剂的影响	173
第二节 质子化学位移与分子结构的相关性	174
一、烷基质子	174
二、烯质子	177

三、炔质子	179
四、芳香质子	180
五、芳杂环质子	182
六、活泼氢	182
第三节 质子自旋-自旋偶合与分子结构的相关性	182
一、质子自旋偶合的分类	182
二、偕偶(germinal coupling)	183
(一) 碳氢键(H—C—H)夹角 θ 对 2J 的影响	183
(二) 相连基团电性对 2J 的影响	184
三、邻偶(vicinal coupling)	185
(一) 3J 是二面角(Φ)的函数	185
(二) 刚性构象环己烷衍生物的邻偶	186
(三) 刚性构象环丙烷衍生物的邻偶	187
(四) 链烷中的邻偶	187
(五) 烯质子的偶合分裂(vinyl)	188
(六) 键角(H—C—C)对 3J 的影响	189
(七) 电负性取代对 3J 的影响	190
(八) C—C 键长对 3J 的影响	190
四、远程偶合(long range coupling)	190
(一) 取代芳香结构(aromatic)	191
(二) 烯丙式结构(allylic)	193
(三) 小环或桥环结构(bridged ring)	194
(四) 空间传递的偶合作用	194
五、一级(first-order)与高级偶合(second-order coupling)	194
六、质子偶合常数表	195
七、质子与其他核的偶合(coupling to other nuclei)	197
第四节 一级偶合 ^1H -NMR 谱分析	198
一、一级偶合的一般规律	198
(一) 裂分峰数目	198
(二) 裂分峰强度	198
(三) 裂分具有“屋顶效应”	198
(四) 磁全同质子不出现裂分现象	199
(五) 对称化学等价而不相互作用的质子出现重叠峰	199
二、典型一级偶合 ^1H -NMR 谱	199
三、偶合系统遵守 $(n+1)$ 规律的条件	199
第五节 高级偶合 ^1H -NMR 谱分析	204
一、AB 系统	204
二、 AB_2 系统	205
三、ABX 系统	206
四、 A_2B_2 系统及 $\text{AA}'\text{BB}'$ 系统	209

五、取代芳香化合物的 ^1H -NMR 谱	212
(一) 单取代苯	212
(二) 二取代苯	212
(三) 三取代及多取代苯	214
六、长链及环烃的虚假偶合	214
第六节 与杂原子相连质子的 NMR	215
一、质子交换对偶合的影响	215
二、氢键对偶合的影响	216
三、核的电四极矩对偶合的影响	217
四、与氧相连质子的 NMR 谱	217
五、与氮相连质子的 NMR 谱	217
(一) 脂肪胺	219
(二) 芳胺	219
(三) 酰胺及芳氮杂环	219
(四) 胺盐	221
六、与硫相连质子的 NMR 谱	223
第七节 ^1H -NMR 谱中的特殊技术	223
一、强外磁场仪器	224
二、双共振(双照射)技术	224
(一) 自旋去偶(spin decoupling)	224
(二) 核间双共振(INDOR)	225
(三) 核的 Overhauser 效应(nuclear Overhauser effect, NOE)	225
三、化学位移试剂	227
第八节 ^1H -NMR 谱的解析	228
第五章 ^{13}C -核磁共振谱	230
第一节 ^{13}C -NMR 谱的特点	230
第二节 实验技术	234
一、脉冲 Fourier 变换	234
二、异核双共振技术	234
(一) 质子宽带去偶(broad band proton decoupling)	234
(二) 偏共振去偶(proton off-resonance decoupling)	235
(三) 门控去偶(gated decoupling)和反门控去偶(inverse gated decoupling)	235
第三节 影响 ^{13}C 化学位移的因素	238
一、碳的杂化类型	238
二、诱导效应	239
三、共轭效应	239
四、取代基对其 γ 碳的空间效应	240
五、电场效应	241
六、重原子效应	241

七、同位素效应	242
八、分子内氢键作用	242
九、介质的影响	242
十、分子构型交换对位移及峰形的影响	243
第四节 偶合常数	245
一、 ^{13}C - ^1H 直偶($J_{\text{C-H}}$)	245
二、远程 ^{13}C - ^1H 偶合	246
三、 ^{13}C 与其他 $I=1/2$ 核的偶合作用	249
四、 ^{13}C - ^{13}C 偶合	251
第五节 化学位移与分子结构相关性	253
一、开链烷烃碳的化学位移	254
(一) 链烷烃的 Grant-Paul 经验规律	255
(二) 官能团取代的影响	256
二、环烷烃碳的化学位移	258
三、烯烃碳的化学位移	260
四、炔烃碳的化学位移	262
五、芳香碳的化学位移	262
六、芳杂环碳的化学位移	264
七、醇和醚类化合物碳的化学位移	268
八、胺类化合物碳的化学位移	269
九、卤代烷碳的化学位移	271
十、羰基碳的化学位移	272
(一) 酮和醛	273
(二) 羧酸	274
(三) 羧酸衍生物	275
(四) 其他羰基化合物及其衍生物	278
十一、腈基化合物碳的化学位移	279
十二、有机硫和磷化合物碳的化学位移	279
第六节 ^{13}C -NMR 谱的解析	280
第六章 二维核磁共振技术	282
第一节 多脉冲实验(multiple-pulse experiments)	282
一、反转-恢复法(inversion recovery)	282
(一) 纵向弛豫时间测定	282
(二) 部分弛豫谱	283
(三) 溶剂峰的抑制	285
二、自旋回波(spin-echoes)	285
(一) 化学位移聚焦	285
(二) 不均匀磁场影响的消除	287
(三) T_2 的测定	289

(四) 对偶合系统的作用	289
三、 J -调制与 APT	291
四、极化转移(polarization transfer)与信号增强	294
(一) 极化转移	294
(二) INEPT	296
(三) DEPT	299
五、碳连接的 INADEQUATE 测定	300
六、BIRD 脉冲序列	302
七、脉冲场梯度(PFG)	304
第二节 二维 NMR 谱	305
一、2D J -分解谱	308
(一) 异核相关 2D J -分解谱	308
(二) 同核 2D J -分解谱	309
二、2D 相关谱	311
(一) ^1H - ^1H COSY	311
(二) ^{13}C - ^1H COSY	311
(三) ^{13}C - ^1H COLOC	315
(四) ^1H 检测的 ^{13}C - ^1H 相关谱	317
(五) 2D-INADEQUATE	321
(六) NOESY 与 ROESY	324
(七) 基于脉冲场梯度的相关谱测定	327
第七章 有机质谱法	332
第一节 质谱仪及其原理	333
一、单聚焦质谱仪(single focusing mass spectrometer)	333
二、双聚焦质谱仪(double focusing mass spectrometer)	334
三、四极质谱仪(quadropole mass spectrometer,quadropole mass filter)	335
四、离子阱质谱仪(ion trap mass spectrometer,IT-MS)	337
五、飞行时间质谱仪(time-of-flight mass spectrometer,TOF-MS)	339
六、傅里叶变换质谱仪(Fourier transform mass spectrometer,FT-MS)	340
七、质谱仪性能指标比较	341
第二节 离子化方法	341
一、电子轰击离子化(electron impact ionization,EI)	342
二、化学离子化(chemical ionization,CI)	343
三、解吸离子化(desorption ionization,DI)	346
(一) 解吸离子化机制	347
(二) 解吸离子化能量输入方式	348
(三) 解吸离子化常用的基质	349
四、喷雾离子化(spray ionization,SI)	351
(一) 电喷雾离子化(electrospray ionization,ESI)	351

(二) 大气压化学电离(atmospheric pressure chemical ionization, APCI)	353
(三) 碰撞诱导解离(collision-induced dissociation, CID)	354
第三节 质谱法测定化合物分子量和分子式	355
一、质谱峰的类型	355
二、质谱相关知识介绍	356
(一) 奇电子离子与偶电子离子	356
(二) 氮规则	356
(三) 不饱和度	357
(四) 同位素峰	358
三、质谱法测定化合物分子量和分子式	362
(一) 低分辨质谱测定化合物的分子量	362
(二) 低分辨质谱测定化合物中有关元素	364
(三) 高分辨质谱测定化合物的分子量和分子式	366
(四) 多电荷离子(multiply-charged ions)测定生物大分子的分子量	369
第四节 有机质谱中的裂解反应	371
一、EI 质谱仪中有机分子裂解特点	371
二、分子离子形成与标注	372
三、裂解反应的机制	372
(一) 自由基、电荷定域理论	373
(二) 裂解产物稳定性规则与偶电子规则	374
四、影响碎片离子丰度的主要因素	376
五、研究有机质谱裂解反应机制的实验方法	379
(一) 亚稳离子法	379
(二) 同位素标记法	381
六、有机分子的裂解反应类型	381
(一) 简单裂解——断裂一个键的裂解反应	381
(二) 断两个以上键的裂解反应	383
(三) 重排裂解(rearrangement cleavage)反应	385
(四) 复杂裂解	392
七、软电离质谱裂解反应的特点及规律	394
第五节 常见官能团质谱裂解模式	400
一、烷烃	400
(一) 直链烷烃	400
(二) 支链烷烃	401
(三) 脂环烃	401
二、烯烃	404
(一) 直链单烯	404
(二) 含共轭双键的二烯	405
(三) 环烯烃	407
三、炔烃	408

四、芳烃	408
五、醇类	411
(一) 脂肪族饱和醇	411
(二) 脂环醇	413
(三) 脂肪族不饱和醇	414
(四) 芳香醇	415
六、酚类	415
七、醚类	416
(一) 脂肪醚	416
(二) 芳香醚	418
八、醛类	419
(一) 脂肪醛	419
(二) 芳香醛	420
九、酮类	420
(一) 脂肪酮	420
(二) 芳香酮	422
(三) 脂环酮	423
(四) 环状 α, β -不饱和酮	424
十、羧酸	426
(一) 脂肪族羧酸	426
(二) 芳香族羧酸	426
十一、羧酸酯	428
(一) 脂肪族羧酸酯	428
(二) 芳香族羧酸酯	429
(三) 内酯	430
十二、胺类	431
(一) 脂肪胺	431
(二) 芳香胺	433
(三) 脂环胺	433
(四) 酰胺类	434
十三、腈类	435
十四、含硫化合物	436
(一) 脂肪族硫醇	437
(二) 硫醚	437
十五、硝基化合物	437
第六节 质谱在化合物结构分析中应用	438
一、质谱法(EI 谱)研究小分子量化合物化学结构	439
(一) 质谱峰的相对重要性	439
(二) 分析步骤	440
(三) 分析实例	441

二、色谱-质谱联用技术鉴定复杂样品中微量组分分子结构	445
(一) 色谱-质谱联用技术概述	445
(二) 质谱解析中技巧	447
(三) 解析实例	447
三、色谱-质谱联用技术在多肽、蛋白质等生物大分子结构测定中的应用	477
(一) 蛋白质一级结构的基本概念	477
(二) 多肽、蛋白质的电喷雾(ESI)离子的质谱特征	478
(三) 应用实例	478
四、色谱-质谱联用技术在寡糖及糖苷类药物结构分析中的应用	485
(一) 糖的基本概念	485
(二) 寡糖的质谱裂解规律	488
(三) 应用实例	490
附表 7-1 通常丢失的中性碎片质量及组成	501
附表 7-2 通常碎片离子的质量及组成	502
附表 7-3 组成蛋白质的基本氨基酸的质量及组成	505
附表 7-4 常见单糖及其衍生物的质量及组成	507
附表 7-5 常见元素和化合物的电离能	509
 第八章 波谱综合解析	510
一、光谱解析有关注意事项	510
二、光谱综合解析的步骤与提供的重要结构信息	510
三、光谱综合解析实例	511
 参考文献	550
中英文名词索引	551
普通名词索引	551
各类化合物官能团的特征振动波数索引	555
各类化合物氢核的化学位移索引	555
各类化合物碳核的化学位移索引	555
各类化合物的质谱裂解反应索引	555

引言

紫外-可见吸收光谱、旋光光谱和圆二色光谱^①都是由电子跃迁产生的吸收光谱,检测的波长均在紫外-可见光波长区间即 200~800nm,广义上均称为电子吸收光谱(electronic absorption spectroscopy)。但三者测定的对象、测定方法、测得的光谱形状和结构信息是不同的。测量光的吸收度随波长改变的曲线,称为紫外-可见吸收光谱(ultraviolet-visible absorption spectra, UV)。在有机化合物分子结构测定中,UV 光谱可直接提供分子的芳香结构和共轭体系信息。

旋光光谱和圆二色光谱都是由紫外-可见光波长范围内的线偏振光作用于手性化合物产生的,前者基于线偏振光通过手性介质时偏振光平面旋转,产生旋光度,记录摩尔旋光度 $[\varphi]$ 随波长改变的曲线称旋光光谱(optical rotatory dispersion spectrum)。后者基于线偏振光分解成左旋(L)和右旋(R)圆偏振光,左旋和右旋圆偏振光通过手性介质时吸收度不同,

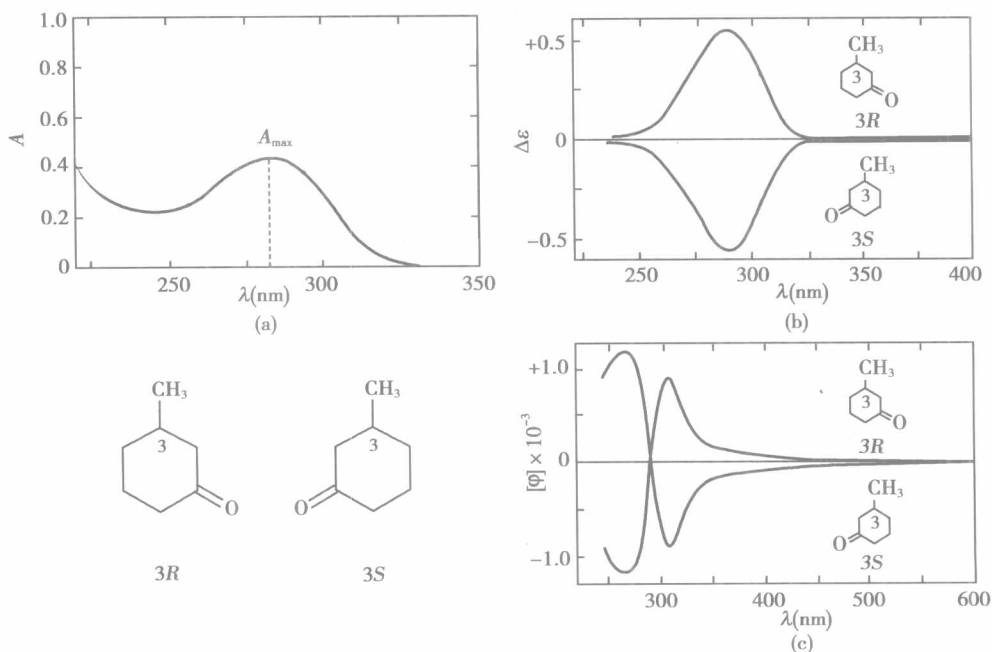


图 1-1 3-甲基环己酮的 UV(a)、CD(b)和 ORD 光谱(c)

① 这里的圆二色光谱指的是电子圆二色光谱(electronic circular dichroism, ECD),另外还有振动圆二色光谱(vibrational circular dichroism, VCD)和磁圆二色光谱(magnetic circular dichroism, MCD)。

记录二者吸收度差值($\Delta A = A_L - A_R$)随波长改变的曲线,称为圆二色光谱(circular dichroism, CD)。因为 ORD 光谱和 CD 光谱限于测定手性化合物,不适于测定非手性化合物或消旋化合物,故统称为手性光谱法(chiroptical spectroscopy),主要用来测定手性化合物的构型和构象,是其他光谱无法代替的。如图 1-1 为 3-甲基环己酮的 UV、ORD 和 CD 光谱。

本章着重讨论紫外-可见吸收光谱法,对于手性光谱法原理和应用作扼要介绍。

第一节 分子吸收光谱的基本知识

一、光的性质与波长范围

(一) 光的波粒二象性

光是电磁波。与光的传播过程的有关现象,例如光的干涉和衍射,证明了光具有波动的特征;光的偏振现象则进一步证明光是一种横波,是一种在各个方向上振动的射线。它在空间的传播可分解为位相相同但又相互垂直的电场矢量(E)与磁场矢量(H)的正弦波(图 1-2),与光波的传播方向垂直。光谱中主要是研究电场矢量与物质分子的作用,磁场矢量被忽略。

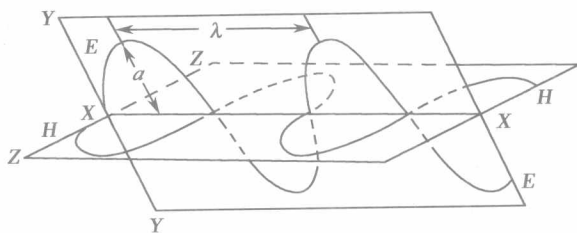


图 1-2 电磁波在空间传播示意图

光的波动性可由下列描述波动性的物理量来描述:

波长(λ)指相邻波峰间的距离。在紫外-可见光区常用纳米(nanometer, nm)为单位,红外光区则多用微米(μm)为单位。

$$1\text{nm} = 10^{-3}\mu\text{m} = 10^{-6}\text{mm} = 10^{-7}\text{cm} = 10^{-9}\text{m}$$

频率(ν)为 1 秒钟内经过某点的电磁波数目,单位为秒⁻¹(s^{-1}),亦有以赫兹(Hz)为单位的。光的频率数值很大,为了方便,常用波数($\bar{\nu}$)代替频率。波数的定义是光在真空中行进 1cm 长度时电磁波的数目,即波长的倒数,单位为 cm^{-1} 。

光速、波长、频率、波数之间存在着如式 1-1 所示的关系:

$$c = \lambda \cdot \nu = \frac{c}{\bar{\nu}} \quad (1-1)$$

式中, c 为光速,其值约为 $3 \times 10^{10} \text{cm/s}$ 。

某波长为 $2.5\mu\text{m}$ 的光,其频率及波数可由式(1-1)计算而得:

$$\nu = \frac{3 \times 10^{10}}{2.5 \times 10^{-4}} = 1.2 \times 10^{14} \text{s}^{-1}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2.5 \times 10^{-4}} = 4000 \text{cm}^{-1}$$

光又具有粒子性,它是由不连续的光子构成的粒子流,具有一定的能量 E 。光和物质发生相互作用时(例如光电效应),主要呈现粒子的性质,可以把光看成一束高速运动的粒子