

<<谱学导论>>

图书基本信息

书名：<<谱学导论>>

13位ISBN编号：9787040097399

10位ISBN编号：7040097397

出版时间：2001-1

出版时间：高等教育出版社

作者：范康年 编

页数：329

字数：390000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<谱学导论>>

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。

以上情况说明了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》。

<<谱学导论>>

内容概要

本书是教育部“高等教育面向21世纪内容和课程体系改革计划”的研究成果，是面向21世纪课程教材和教育部理科化学“九五”规划教材。

本书作者将原分散在物理化学、有机化学、无机化学和分析化学中关于谱学的有关内容，按功能横向设置的思路，融基本原理、实验方法、仪器概况和解谱方法于一体编写而成的。

全书共有正文7章和附录及插图光盘。

一、分子光谱基础；二、红外和拉曼光谱；三、紫外—可见吸收光谱；四、磁共振谱；五、质谱法；六、x射线衍射与荧光光谱；七、电子能谱。

本书可作为化学专业本科生的基础课教材，也可供相关专业的人员参考。

<<谱学导论>>

书籍目录

第一章 分子光谱基础 1.1 多原子分子的结构和对称性 1.1.1 对称元素和对称操作 1.1.2 群和分子点群 1.1.3 群表示及其性质 1.2 分子内粒子运动和光谱特征 1.2.1 核运动和电子运动的分离 1.2.2 分子光谱的分布和特征 1.2.3 跃迁概率和选律 1.2.4 线形和线宽 1.3 转动光谱 1.3.1 质心平动的分离 1.3.2 双原子分子的刚性转子模型 1.3.3 非刚性转子模型 1.3.4 多原子分子的转动光谱 1.3.5 转动光谱的应用 1.4 振动光谱 1.4.1 双原子分子的振动方程 1.4.2 简谐振子模型 1.4.3 非简谐振子模型 1.4.4 振动光谱的精细结构——振转光谱 1.4.5 多原子分子的振动模式 1.5 电子光谱 1.5.1 双原子分子的电子能级及其表示方法 1.5.2 电子光谱选律 1.5.3 电子光谱的精细结构——电子振转光谱 1.5.4 富兰克-康顿原理 1.5.5 多原子分子电子光谱 1.6 拉曼光谱 1.6.1 拉曼散射效应 1.6.2 拉曼光谱选律及其与红外光谱的互补性 1.6.3 转动拉曼光谱 1.6.4 振动拉曼光谱 1.6.5 共振拉曼光谱 1.7 光谱的动力学性质——瞬态光谱 1.7.1 含时薛定谔方程 1.7.2 时间分辨光谱测量 1.8 分子光谱的定量分析基础 1.8.1 光吸收定律——比尔定律 1.8.2 分子光谱定量分析中的定量方法 习题 参考阅读材料第二章 红外和拉曼光谱 2.1 红外光谱仪 2.1.1 色散型红外光谱仪 2.1.2 傅里叶变换红外光谱仪 2.2 红外光谱的测量 2.2.1 红外样品的制样 2.2.2 测试条件对红外谱带的影响 2.3 红外光谱的特征吸收峰 2.3.1 影响特征吸收峰的结构因素 2.3.2 各类官能团的特征吸收峰 2.4 红外光谱的应用 2.5 拉曼光谱仪及应用简介 2.5.1 仪器简介 2.5.2 特点及应用概况 习题 参考阅读材料第三章 紫外-可见吸收光谱 3.1 紫外-可见光谱仪 3.1.1 紫外-可见光谱仪的主要组成部分 3.1.2 紫外-可见光谱仪的类型 3.2 影响紫外光谱的因素 3.2.1 紫外光谱吸收带的分类 3.2.2 测试条件对紫外-可见吸收谱带的影响 3.3 有机化合物的紫外光谱 3.3.1 共轭烯烃的紫外吸收 3.3.2 共轭烯酮的紫外吸收 3.3.3 芳香化合物的紫外吸收 3.3.4 杂环化合物的紫外吸收 3.4 无机化合物紫外光谱 ... 第四章 磁共振谱第五章 质谱法第六章 X射线衍射与荧光光谱第七章 电子能谱附录一 波谱解析综合练习和习题附录二 国际单位制(SI)附录四 常用的换算因数附录五 化学上重要点群的特征标表部分习题参考答案

章节摘录

第一章 分子光谱基础 很早人们就知道，物质的特殊颜色可以用于测定物质的含量，这就是比色分析法的基础。

在量子力学诞生以后，人们对于光和物质之间相互作用的认识有了本质的飞跃，光谱技术不仅在定性定量分析上得到了很大发展，同时也演变成了人们了解物质结构信息的主要工具之一。

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、微波谱、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 多原子分子的结构和对称性 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任何信息。

尽管写出一个分子的薛定谔（Schrödinger）方程并不困难，但是能够精确求解的微观体系却为数很少，绝大部分分子体系薛定谔方程的求解都依赖于近似方法。

因此，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，就非常有必要了。

其中，分子的对称性是可供利用的最重要的性质之一。

下面简单介绍一些分子对称性及其数学表示的最基本知识，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、氨这样的分子都有对称性，但是怎样定量地描述分子的这种对称性高低呢？首先需要给出一个对分子对称性进行分类和描述的方法。

以氨分子为例，它是正三角锥形状，N原子在正三角锥的顶点上，三个H原子位于三角锥基底正三角形的三个顶点上。

设想，三个H原子构成的正三角形中心和N原子之间连成一条线，则当整个分子围绕这根线旋转120度后，我们不能分辨这个分子和它在旋转前有什么不同。

这种在不改变分子中任何两个原子之间距离的前提下使分子复原的操作称为对称操作。

对称操作赖以进行的几何元素称为对称元素。

<<谱学导论>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>