

图书基本信息

书名：<<华大精制高校教材·普通高等教育"十二五"规划教材·化学系列>>

13位ISBN编号：9787562256533

10位ISBN编号：7562256535

出版时间：2012-8

出版时间：张友杰 华中师范大学出版社 (2012-08出版)

作者：张友杰 编

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>

书籍目录

绪论 第1章紫外光谱 1.1 紫外光谱的基础知识 1.1.1 电磁波的基本性质与分类 1.1.2 分子的能级图 1.1.3 能级跃迁和吸收光谱 1.1.4 Lambert—Beer定律 1.2 紫外光谱的基本原理 1.2.1 分子轨道 1.2.2 电子跃迁 1.2.3 紫外吸收光谱表示法及常用术语 1.2.4 吸收带 1.2.5 影响 λ_{max} 的主要因素 1.2.6 影响 λ_{max} 的主要因素 1.2.7 测定紫外光谱溶剂的选择 1.3 紫外吸收光谱与分子结构间的关系 1.3.1 非共轭有机化合物的紫外光谱 1.3.2 共轭有机化合物的紫外光谱 1.3.3 芳香族化合物的紫外光谱 1.4 紫外光谱的应用 1.4.1 紫外光谱的几个经验规律 1.4.2 紫外光谱在有机化合物和药物结构测定中的应用 1.4.3 测定互变异构现象 1.4.4 药物中杂质的检查 1.4.5 吸光系数的应用 习题 第2章红外光谱 2.1 红外光谱概述 2.1.1 红外光谱的特点 2.1.2 红外光谱的不同区段 2.1.3 红外光谱图 2.2 红外光谱的基本原理 2.2.1 红外吸收光谱产生的必要条件 2.2.2 双原子分子振动模型 2.2.3 多原子分子的振动形式 2.3 影响峰位和峰强的主要因素 2.3.1 影响峰位的主要因素 2.3.2 影响峰强的主要因素 2.4 现代红外光谱仪简介 2.4.1 光栅式红外光谱仪 2.4.2 傅立叶变换红外 (FT—IR) 分光光度计 2.4.3 GC—FT—IR 联用技术 2.5 基团特征频率的分区和分组 2.5.1 基频区 (4000 cm^{-1} ~ 1300 cm^{-1}) 2.5.2 指纹区 (1300 cm^{-1} ~ 400 cm^{-1}) 2.5.3 相关峰 2.6 各类基团的特征频率 2.6.1 基频区第I组 (单键伸缩振动区, 4000 cm^{-1} ~ 2500 cm^{-1}) 2.6.2 基频区第2组 (叁键伸缩振动区, 2500 cm^{-1} ~ 1900 cm^{-1}) 2.6.3 基频区第3'组 (双键伸缩振动区, 1900 cm^{-1} ~ 1300 cm^{-1}) 2.6.4 指纹区 (1300 cm^{-1} ~ 400 cm^{-1}) 2.7 有机化合物和药物红外光谱的解析 2.7.1 有机化合物和药物红外光谱解析的一般程序 2.7.2 红外光谱解析举例 2.8 红外光谱的应用 2.8.1 红外光谱在表面化学方面的应用 2.8.2 红外定量分析 2.8.3 红外光谱在聚合物中的应用 2.8.4 药物晶型的鉴别 2.8.5 近红外光谱分析技术简介 习题 第3章核磁共振氢谱 3.1 核磁共振基本原理 3.1.1 核磁共振概述 3.1.2 原子核的磁性 3.1.3 核自旋能级——在磁场中的取向 3.1.4 核磁共振 3.1.5 核自旋弛豫 3.2 核磁共振谱仪 3.2.1 核磁共振谱仪的分类 3.2.2 脉冲傅立叶变换核磁共振谱仪 3.3 化学位移 3.3.1 屏蔽常数 和化学位移 3.3.2 影响化学位移的因素 3.3.3 各类质子的化学位移 3.4 自旋偶合 3.4.1 自旋—自旋偶合和自旋—自旋裂分 3.4.2 偶合分类 3.5 自旋系统 3.5.1 核的等价性 3.5.2 几种常见的自旋系统 3.6 核磁共振氢谱的解析 3.6.1 几种谱图现象 3.6.2 解析氢谱时常用的辅助实验方法 3.6.3 核磁共振氢谱解析 习题 第4章核磁共振碳—13谱和二维谱 4.1 核磁共振碳—13谱 4.1.1 碳—13谱概述 4.1.2 碳—13核磁共振的实验方法 4.1.3 碳—13的化学位移 4.1.4 碳—13的偶合常数 4.2 核磁共振二维谱 4.2.1 核磁共振二维谱的基本原理 4.2.2 同核化学位移相关谱 4.2.3 异核化学位移相关谱 4.2.4 NOE二维谱 (NOESY) 的基本原理 4.3 核磁共振新技术及其应用 4.3.1 多维谱简介 4.3.2 LC—NMR 联用技术 4.3.3 核磁共振定量分析及应用 4.3.4 脉冲梯度场技术 4.3.5 核磁共振成像技术 4.3.6 模拟计算谱 习题 第5章有机质谱基本原理 5.1 质谱概述 5.1.1 质谱发展简史 5.1.2 质谱的表示法、术语及质谱中的离子 5.2 质谱仪简介 5.2.1 传统磁偏转质谱仪 5.2.2 四极杆质谱仪 5.2.3 离子阱质谱仪 5.2.4 飞行时间质谱仪 5.2.5 傅立叶变换质谱仪 5.3 质谱仪的性能指标 5.3.1 分辨率 5.3.2 灵敏度 5.3.3 质量范围 5.4 离子源和电离技术 5.4.1 电子轰击电离 5.4.2 化学电离 5.4.3 快原子轰击 5.4.4 基质辅助激光解吸电离 5.4.5 大气压电离 5.5 联用技术 5.5.1 气相色谱—质谱联用 (GC / MS) 5.5.2 液相色谱—质谱联用 (LC / MS) 5.5.3 串联质谱 (MS / MS) 5.6 质谱中的反应 5.6.1 概述 5.6.2 简单断裂和复杂断裂 5.6.3 重排反应 5.6.4 影响离子强度的因素 第6章 质谱在结构解析中的应用 6.1 相对分子质量的确定 6.1.1 分子离子峰的判别 6.1.2 氮规律 6.1.3 其他判别方法 6.2 化学式的确定 6.2.1 高分辨质谱法 6.2.2 低分辨质谱法 6.3 各类有机化合物的质谱及举例 6.3.1 烃类的质谱 6.3.2 醇类和酚类的质谱 6.3.3 醚类的质谱 6.3.4 醛类和酮类的质谱 6.3.5 羧酸类及其酯类的质谱 6.3.6 胺类的质谱 6.3.7 酰胺类的质谱 6.3.8 其他含杂原子化合物的质谱 6.4 质谱的应用 6.4.1 药物及其代谢物的分析 6.4.2 添加剂的分析 6.4.3 兴奋剂、毒品的检测 6.4.4 农药、兽药残留量的分析 6.4.5 其他复杂成分的定位分析 6.5 质谱解析举例 6.5.1 质谱解析有机化合物分子结构的步骤 6.5.2 质谱解析举例 习题 第7章多谱综合解析 7.1 多谱综合解析概述 7.1.1 样品的准备和前期工作 7.1.2 各种波谱的优势 7.2 综合解析的一般步骤 7.2.1 初步观察 7.2.2 分子式的确定 7.2.3 计算不饱和度 7.2.4 结构单元的确定 7.2.5 结构式的确定 7.2.6 结构式的验证 7.3 应用NMR二维谱解析结构 7.3.1 ^1H — ^1H COSY和TOCSY (HOHAHA) 7.3.2 HMQC和HMBC 7.3.3 NOESY 7.4 多谱综合解析举例 习题 习题参考答案 参考书目及有关专业网站

章节摘录

版权页：插图：我们把高能态的核自旋经过某种非辐射途径释放能量回到基态以恢复Boltzmann平衡的过程称为核的自旋弛豫（nuclear spin relaxation）。

自旋弛豫有两种，一种是自旋—晶格弛豫，另一种是自旋—自旋弛豫。

（1）自旋—晶格弛豫 简单地说，自旋—晶格弛豫就是处于高能态的核自旋体系与其周围环境——“晶格”之间的能量交换过程。

在液体中，由于分子的布朗运动，存在一个涨落场（fluctuating field）。

这个涨落场来源于体系中分子的扩散、旋转等快速的无规则运动（布朗运动）。

尽管在某一定时间内各点涨落场的频率与相位的统计平均值为零，但在某一瞬间是有某一确定值的。

当这个涨落场的频率与某核自旋的Larmor频率接近时，该核自旋就会与涨落场发生能量交换，即高能态核自旋将能量交给环境分子，使之增加运动动能，而核自旋本身回到基态。

相应的特征时间称为自旋—晶格弛豫时间（spin—lattice relaxation time），用 T_1 表示。

因为自旋—晶格弛豫是使宏观上纵向（z轴方向）磁化强度由零回复到 M_z^0 ，故又称其为纵向弛豫（图3—6）。

^1H 的 T_1 大约在 $10^{-2}\text{s} \sim 1\text{s}$ 之间， ^{13}C 的 T_1 约在 $10^{-2}\text{s} \sim 10^3\text{s}$ 之间。

T_1 值在同一分子中的不同核之间差别较大，这些差别来自不同弛豫机制、结构环境和体系的运动状况。

（2）自旋—自旋弛豫 简单地说，自旋—自旋弛豫是核自旋之间的交换，即高能态核自旋与低能态核自旋相互接近时，高能态核将能量传给低能态核。

这是因为它们是同种核，Larmor频率相同。

这样，低能态核成为高能态核，高能态核成为低能态核。

显然，这种弛豫不能达到保持和恢复核的基态过剩状态，自旋体系的总能量也不发生变化。

但是在核磁共振时，核自旋受射频场的相位相干作用，使宏观的净磁化强度偏离z轴，从而产生了一个x—y平面上的磁化强度分量 M_{xy} （图3—5下图），而自旋—自旋弛豫是通过自旋交换，使偏离x轴的净磁化强度 M_{xy} 回到原来的平衡零值状态（即自旋矢量均匀地分布在锥面上）。

这种弛豫称为横向弛豫，与此相应的特征时间称为自旋—自旋弛豫时间，用 T_2 表示。

编辑推荐

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>