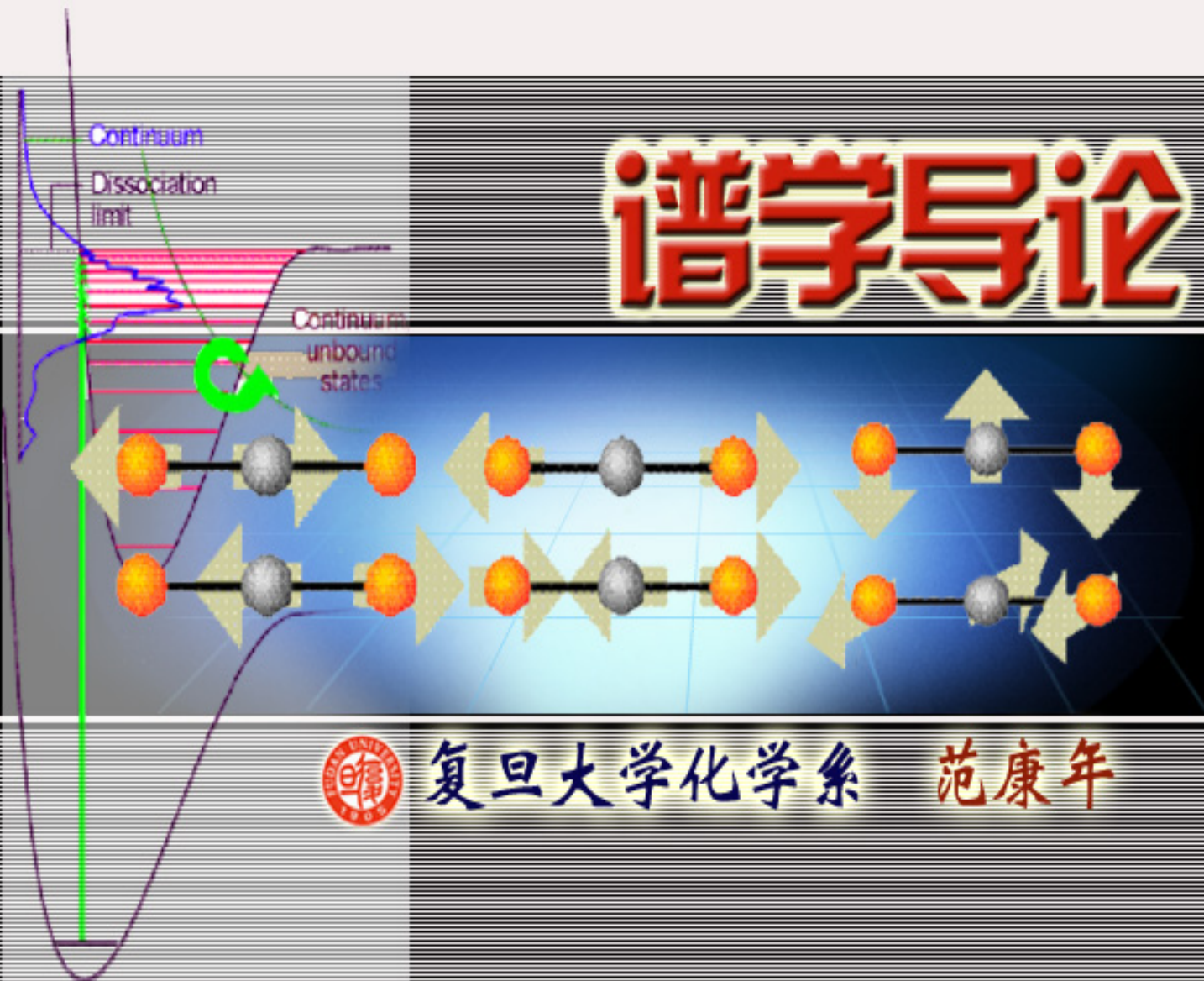


谱学导论



复旦大学化学系 范康年



王文宁

(物理化学/化学生物学)

化学东楼 206室

电话: 65643985

Email: wnwang@fudan.edu.cn

助教: **方亚辉** (物理化学) **email: 071022042@fudan.edu.cn**

韩露 (无机化学) **email: 051022013@fudan.edu.cn**



•课程主要内容和定位

结构分析有关的谱学知识，包括原理、实验方法、仪器和应用，定位于本科生对于谱学知识全面但又是一般的了解。

•学分和课时的来源

本课程是3学分，而普通化学、分析化学（包括仪器分析）、有机化学和物理化学各自都减少1个学分。

•课程名称 <谱学导论>



本课程主要讲述： (微观的结构分析)

光谱 (红外和拉曼光谱、紫外和可见吸收光谱)

磁共振谱 (核磁共振谱、电子顺磁共振)

质谱

X射线衍射和光谱分析

电子能谱 (XPS、UPS、AUS)



谱学导论目录

第一章 分子光谱基础

§ 1.1 多原子分子的的结构和对称性

§ 1.2 分子光谱概论

§ 1.3 转动光谱

§ 1.4 振动光谱

§ 1.5 电子光谱

§ 1.6 拉曼光谱

§ 1.7 光谱的动力学性质—瞬态光谱

§ 1.8 分子光谱的定量分析基础



第二章 红外和拉曼光谱

§ 2.1 红外光谱仪

§ 2.2 红外光谱的测量

§ 2.3 红外光谱的特征吸收峰

§ 2.4 红外谱图解析

§ 2.5 拉曼光谱简介



第三章 紫外和可见吸收光谱

§ 3.1 紫外和可见光谱仪简介

§ 3.2 影响紫外光谱的因素

§ 3.3 几类常见化合物的紫外光谱分析

§ 3.4 无机化合物紫外光谱分析

§ 3.5 荧光光谱简介



第四章 磁共振谱

§ 4.1 核磁共振的基本原理

§ 4.2 核磁共振仪简介

§ 4.3 ^1H 核磁共振

§ 4.4 核磁共振碳谱

§ 4.5 电子顺磁共振



第五章 质谱

§ 5.1 质谱仪

§ 5.2 质谱图及其离子峰

§ 5.3 质谱分析应用

§ 5.4 质谱的联用技术

第六章 波谱技术在分子结构分析中的应用

§ 6.1 波谱综合解析步骤

§ 6.2 应用实例 (教材中放在附录一)



第七章 x射线衍射和光谱分析

§ 7.1 x射线的产生、性质、特点

§ 7.2 x射线单晶衍射法

§ 7.3 x射线粉末衍射法

§ 7.4 电子衍射和中子衍射法简介

§ 7.5 x射线荧光光谱分析



第八章 能谱

§ 8.1 电子能谱基本原理

§ 8.2 紫外光电子能谱 (UPS)

§ 8.3 X射线光电子能谱(XPS)

§ 8.4 俄歇电子能谱

§ 8.5 电子能谱仪简介

§ 8.6 应用举例



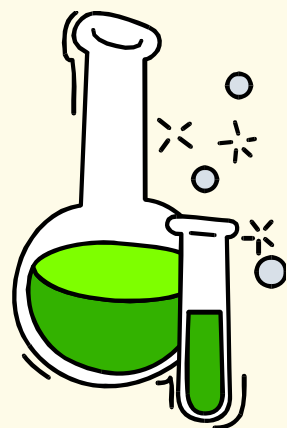
化学分析方法



结构分析方法

宏观 化学组成, 浓度

微观 分子中原子的空间
排列方式



例：茅台酒——催化剂 (组成 表面 原位)

1. 结构分析方法的发展

化学方法：取代和降解

取代——用已知基团取代分子中某些原子或原子团，
通过产物分析结构



降解——将分子分解成碎片，从碎片分析结构



缺点：需要大量原料，制备和分离困难，许多化合物难以凭借上述方法分离和识别



课程的发展和绪论

物理方法

利用光、电、磁等各种场和物质发生相互作用，引起物质内部微观结构或状态发生变化，并以能量形式表现出来。测量这种能量变化情况，可以推测物质内部结构。

早期物理方法



介电常数

折射率

磁化率

现代物理方法

用各种形式的电磁波（含光、电、磁、微波、射频，甚至电子束）照射被测对象，作用以后电磁波强度和频率的关系构成谱。

研究谱和物质内部结构之间关系的学科就是谱学



2. 谱学的发展历史和分类

十七世纪:

棱镜分光现象

十八世纪:

焰色反应

本世纪三十——四十年代:

红外、紫外、拉曼光谱

(玻尔的贡献)

本世纪五十年代:

衍射技术和磁技术

本世纪六十年代:

能谱和穆斯堡谱

本世纪八十年代:

瞬态光谱技术

激光诱导荧光

单分子检测



课程的发展和绪论

教材

谱学导论

范康年主编

高等教育出版社

2001年7月



课程的发展和绪论

主要参考书目

《物理化学》(第二版) 范康年主编 高等教育出版社

《高等结构分析》 马礼敦主编 复旦大学出版社

《Physical Chemistry》 P. Atkins, J. de Paula, 7th

《分子光谱 Molecular Spectroscopy》 J. L. McHale

科学出版社(影印版)





《有机化合物结构鉴定与有机波谱学》

宁永成 清华大学出版社

《有机化学》

王积涛 南开大学出版社

《结构分析导论》

游效曾 科学出版社





考试

期中考试：~30%

期末考试：~70%

作业：最终成绩评定时作为参考