

<<有机分子结构光谱鉴定>>

图书基本信息

书名：<<有机分子结构光谱鉴定>>

13位ISBN编号：9787030262127

10位ISBN编号：7030262123

出版时间：2010-1

出版时间：科学

作者：赵瑶兴,孙祥玉

页数：378

字数：584000

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>

<<有机分子结构光谱鉴定>>

前言

本书力图对基本原理和研究方法作简单扼要的介绍，便于理解分子结构与光谱参数的关系；从实际应用出发，以系统光谱数据、图谱和研究成果为基本资料，着重深入讨论谱线与分子结构的关系，将光谱原理与有机结构理论结合，贯穿于全书的理论阐述、识谱和谱图解析中；并注意光谱解析与化学方法相配合，以及天然产物分子结构鉴定过程中生源学说的引导作用。

此次再版对以下两方面作了修改和补充：（1）删减一般入门介绍资料，补充光谱方法的新进展，特别是有机质谱和核磁共振新进展与有机分子结构鉴定密切相关的部分内容。

（2）增加引用旨在提高识谱能力和解析能力的光谱资料和解析实例。

配套出版《有机分子结构光谱解析》（作者编著，科学出版社出版）一书，以期为本书作进一步的补充。

我们永远感激师辈梁晓天院士和已故蒋丽金院士在学术上对我们的诸多指导，感谢关心本书出版的佟振合院士、徐广智教授、樊美公教授、余翔林教授、黄明宝教授等，感谢科学出版社的大力支持。

由于我们的水平有限，书中疏漏和错误之处在所难免，欢迎读者批评指正。

<<有机分子结构光谱鉴定>>

内容概要

本书为中国科学院研究生教学丛书之一。

全书共六章。

前五章分别阐述有机质谱、红外光谱、紫外-可见光谱和核磁共振(^1H 和 ^{13}C)的特点及其在分子结构鉴定中的应用方式,着重讨论谱线与分子结构的关系,与有机结构理论相结合用于识谱和谱图解析,并简单介绍相关的Raman光谱、圆二色谱、顺磁共振等。

第六章讨论用于复杂分子结构鉴定的组合光谱,并扼要讨论化学方法与光谱解析的配合作用和生源学说对天然产物结构鉴定的启发和引导作用。

本书对一般光谱常识的介绍资料有所删减,补充了质谱与核磁共振新进展与有机分子结构鉴定密切相关的部分内容,并增加了有助于提高解析能力的光谱资料和典型的例解,力求接近学科前沿。

本书可作为高等院校有机化学及相关专业研究生的教学用书,也可供有关师生和研究工作者参考。

<<有机分子结构光谱鉴定>>

书籍目录

《中国科学院研究生教学丛书》序第二版前言第一版序第一版前言第0章 绪论 参考文献第1章 有机质谱 1.1 有机质谱的基本原理 1.1.1 质谱计和质谱检测 1.1.2 有机质谱及其在有机分子结构研究中的作用 1.2 质谱中的离子 1.2.1 分子离子 1.2.2 同位素离子和离子元素组成 1.2.3 碎片离子和假分子离子 1.2.4 亚稳离子 1.3 有机质谱的发展 1.3.1 软电离离子源 1.3.2 混合物的质谱分析 1.3.3 离子回旋共振和FOurier变换质谱 1.4 分子式的测定和不饱和数的计算 1.4.1 由低分辨质谱推定可能的分子式 1.4.2 由高分辨质谱测定分子式 1.4.3 不饱和数的计算 1.5 有机分子质谱断裂的一般规律 1.5.1 质谱断裂过程和有关的理论解释 1.5.2 影响质谱断裂的结构因素 1.5.3 质谱断裂反应类型 1.5.4 各类有机化合物主要的裂解反应类型 1.6 有机质谱解析 1.6.1 质谱解析的一般程序 1.6.2 有机质谱例解 参考文献第2章 红外光谱 2.1 电磁辐射与分子光谱 2.1.1 电磁辐射与电磁波谱 2.1.2 能级跃迁和分子光谱 2.2 红外光谱的基本原理 2.2.1 振动方程和振动能级跃迁选律 2.2.2 多原子分子的振动光谱 2.2.3 吸收谱带的强度和振动能级跃迁的对称性选择定则 2.2.4 红外光谱检测 2.3 有机基团与振动频率的关系 2.3.1 振动频率与成键原子的质量、键能的关系 2.3.2 有机分子的基团频率 2.3.3 影响谱带位移的因素 2.4 基团频率与分子结构 2.4.1 氢原子成键的伸缩振动频率区 (3700~2—400cm⁻¹) 2.4.2 叁键和聚集双键伸缩振动频率区 (2400~1900cm⁻¹) 2.4.3 双键伸缩振动频率区 (1900~1600cm⁻¹) 2.4.4 骨架振动和指纹区 (1600cm⁻¹以下) 2.4.5 重要有机化合物的红外光谱与结构的关系 2.5 远红外光谱和近红外光谱 2.5.1 远红外光谱 2.5.2 近红外光谱 2.6 Raman光谱 2.7 红外光谱解析 2.7.1 谱图解析的一般程序 2.7.2 红外光谱例解 参考文献第3章 紫外-可见光谱 3.1 紫外光谱的基本原理 3.1.1 分子轨道能级和电子跃迁类型 3.1.2 Franck-Condon原理, 电子光谱的振动精细结构 3.1.3 吸收强度和吸光度的加合性 3.1.4 自旋多重性和电子跃迁选择定则 3.1.5 溶剂效应 3.1.6 紫外光谱检测 3.1.7 双波长分光光度法 3.1.8 光声光谱 3.2 紫外光谱与有机化合物结构的关系 3.2.1 简单分子的吸收光谱 3.2.2 脂肪族共轭分子的吸收光谱 3.2.3 芳香体系的紫外光谱 3.2.4 立体结构因素对紫外光谱的影响 3.2.5 平衡体系的紫外光谱 3.3 旋光光谱和圆二色谱 3.3.1 旋光光谱 3.3.2 圆二色谱 3.3.3 ORD和CD在研究立体化学中的应用 3.4 紫外光谱解析 3.4.1 紫外光谱解析的一般方法 3.4.2 模型化合物的应用 3.4.3 试剂和化学反应的配合作用 3.4.4 紫外光谱例解 参考文献第4章 1H-核磁共振 4.1 核磁共振的基本原理 4.1.1 核的自旋与核磁共振 4.1.2 宏观磁化强度矢量和旋转坐标 4.1.3 弛豫和弛豫机理 4.1.4 化学位移及其表示方法 4.1.5 核磁共振检测 4.2 1H化学位移和结构的关系 4.2.1 屏蔽和屏蔽常数 4.2.2 影响化学位移的结构因素 4.2.3 氢键和溶剂效应 4.2.4 各类氢核的化学位移及其经验计算参数 4.3 自旋耦合与耦合常数 4.3.1 自旋耦合和自旋分裂 4.3.2 耦合常数与结构的关系 4.4 电子自旋共振和化学诱导动态核极化 4.4.1 电子自旋共振与自由基的结构 4.4.2 化学诱导动态核极化与自由基反应机理 4.5 1H-NMR谱图解析 4.5.1 核的等价性 4.5.2 几种常见的自旋系统 4.5.3 分子的对称性 4.5.4 虚假远程耦合 4.5.5 假象简单图谱 4.5.6 活泼氢与动态核磁共振 4.5.7 简化图谱的几种方法 4.5.8 谱图解析的一般程序 4.5.9 1H-NMR例解 参考文献第5章 13C-核磁共振 5.1 13C-NMR特点和实验方法 5.1.1 13C-NMR特点 5.1.2 PFT-13C-NMR谱检测 5.2 13C化学位移与结构的关系 5.2.1 影响化学位移的因素 5.2.2 各类碳核的化学位移及其经验计算参数 5.3 自旋耦合与耦合常数 5.3.1 碳-氢耦合 5.3.2 碳-碳、碳-氘耦合 5.3.3 碳-杂原子耦合 5.4 自旋-晶格弛豫 5.4.1 自旋-晶格弛豫的机理 5.4.2 自旋-晶格弛豫提供的结构信息及其应用 5.5 13C-NMR谱的测绘技术 5.5.1 不去偶的13C-NMR谱 5.5.2 质子宽带去偶——噪声去偶 5.5.3 偏共振去偶 5.5.4 门控去偶和反转门控去偶 5.5.5 质子选择去偶 5.6 核磁共振进展 5.6.1 自旋回波J-调制和极化转移技术 5.6.2 二维核磁共振 5.6.3 多维核磁共振 5.7 18C-NMR谱图解析 5.7.1 13C-NMR谱图解析一般程序 5.7.2 2D-NMR谱的应用和解析思路 5.7.3 13C-NMR谱例解 参考文献第6章 复杂分子的组合光谱 6.1 组合光谱解析 6.1.1 各类光谱在分子结构鉴定中的作用 6.1.2 组合光谱的解析程序 6.2 化学方法与其他经典分析方法的配合作用 6.3 生源学说与天然产物的结构鉴定 6.3.1 生源学说简介 6.3.2 生源学说对天然产物结构鉴定的引导作用 6.4 组合光谱例解 参考文献主要参考书目常用缩写词

<<有机分子结构光谱鉴定>>

章节摘录

20世纪50年代起，伍德沃德—霍夫曼（Woodward-Hofmann）的轨道对称守恒原理和福井谦（Fukui）-Hofmann的前线轨道理论将分子轨道理论用于化学反应，他们应用量子力学波动方程求解得到的轨道图，形象地解释了复杂的化学反应过程，简捷地阐述了在协同反应中的化学反应方向、产物的立体选择性与轨道对称性的关系，为一些具有复杂结构的分子合成设计提出有益的启示。

近代化学和物理学的发展不仅为有机分子结构鉴定奠定了理论基础，同时也为先进的机械工业和电子工业提示了必要的设计思想，使各种光谱仪器得以问世。

首先，紫外—可见光谱仪和红外光谱仪进入有机化学实验室，大大加快了有机分子结构鉴定的步伐。例如，由萝芙木或蛇根草提取出的利血平（reserpine）与吗啡分子结构比较更为复杂，自1952年离析出纯品后，得到当时可能使用的光谱技术的配合，特别是尼尔斯（Nielsen）通过紫外光谱解析，检测到利血平分子含有吲哚和没食子酸衍生物两个共轭体系（见3.4.2），确定了利血平的主要结构单元，分子结构鉴定工作进行很快。

1956年Woodward等用轨道对称性概念完成合成，总共花费不到5年时间。

<<有机分子结构光谱鉴定>>

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>