

<<近红外光谱解析实用指南>>

图书基本信息

书名：<<近红外光谱解析实用指南>>

13位ISBN编号：9787122063830

10位ISBN编号：7122063836

出版时间：2009-10

出版时间：化学工业出版社

作者：沃克曼，文依 编著，褚小立，许育鹏，田高友 译

页数：274

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>

## <<近红外光谱解析实用指南>>

### 前言

近红外光谱定量和定性分析需要采用多元校正算法（即常说的化学计量学方法）建立校正集样本光谱与其物理或化学性质之间的关系（常称为模型）。

因此，对光谱响应与化学组成浓度呈比例变化的特征波长区域进行辨识，无论对于科学认知其因果关系，还是建立常规分析方法都是必需的。

建立近红外光谱方法的第一步是采用近红外光谱仪测量样品的的光谱。

光谱是由仪器函数与样品的光学和化学特性卷积得到的。

样品充当了光谱仪的一个光学元件。

光谱包含了样品特有的分子振动信息、样品的物理性质信息以及样品与测量仪器之间特有的交互作用信息。

光谱与其化学结构的关联称为光谱结构相关。

光谱相关或解析是将抽象的吸收数据（光谱）转换成用来表述样品详细分子结构的信息。

光谱解析将为建立样品光谱与其分子性质之间的因果关系奠定基础。

单独使用化学计量学方法提供给分析科学的基础是不牢固的。

建立有效的多元校正模型，要求 $x$ （仪器的响应数据或光谱数据）与 $y$ （参考数据）之间存在定量关系。

如果 $x$ 与 $y$ 之间不存在因果关系，所建立的分析方法将不会得到正确的预测结果。

近红外光谱解析为了解分子结构与其特征吸收谱带之间的因果关系提供基础知识。

要想掌握近红外光谱这一分析技术，光谱解析是一个极其重要的智力过程。

本书尽可能地为分析工作者提供近红外光谱解析所需的工具和手段。

尽管目前尚未有近红外光谱解析的专著出版，但已发表了很多相关的经典评述性论文，其中一些论文给出了特征吸收谱带的光谱或图表。

## <<近红外光谱解析实用指南>>

### 内容概要

本书通过大量的谱图和数据详细介绍了近红外光谱吸收谱带与分子结构之间的关系，给出了主要官能团、有机化合物和聚合物的特征吸收谱带及其归属。

此外，书中还扼要介绍了近红外光谱产生的机理以及近红外光谱的应用发展史。

本书对读者深入了解和掌握近红外光谱分析技术将有很大帮助，具有广泛的参考价值。

特别适合作为光谱分析工作者的手册类工具书，也可用作科研院所和高等院校师生的教学参考书。

## &lt;&lt;近红外光谱解析实用指南&gt;&gt;

## 书籍目录

- 1 近红外光谱简介 1.1 分子光谱 1.2 振动能级 1.3 光谱响应与分子浓度 1.4 分子振动术语  
 1.5 伸缩振动 1.6 弯曲 1.7 近红外光谱群论基础 1.8 旋转轴 1.9 反映平面 1.10 反演中心  
 1.11 异常旋转轴 1.12 点群 1.13 用矩阵运算定义群 1.14 光谱测量中的实用问题 1.15  
 近红外光谱吸收谱带的类型 1.16 红外?近红外能量特性 1.17 简正模式理论(理想的或简谐振子)  
 1.18 非谐振子 1.19 简谐振子或简正模式图解 1.20 选律 1.21 非谐振子图解 1.22 近  
 红外光谱解析 1.23 基团频率 1.24 振动的耦合 1.25 费米共振(或二级共振) 1.26 确定谱  
 带归属的工具和技术 参考文献2 链烷烃和环烷烃 2.1 C—H官能团 2.2 甲基CH<sub>3</sub> 2.2.1 一  
 级倍频 2.2.2 高阶倍频 2.2.3 组合频 2.3 亚甲基CH<sub>2</sub> 2.3.1 线型分子的一级倍频  
 2.3.2 线型分子的高阶倍频 2.3.3 线型分子的组合频 2.3.4 环状分子的一级倍频 2.3.5  
 环状分子的高阶倍频 2.3.6 环状分子的组合频 2.4 次甲基 2.5 典型化合物比较 参考文  
 献3 烯炔和炔炔 3.1 线型烯炔的倍频 3.2 线型烯炔的组合频/弯曲振动模式 3.3 环状双键  
 3.4 二烯 3.5 炔和丙二烯 参考文献4 芳香化合物 4.1 苯 4.2 烷基取代芳香化合物 4.3  
 非烷基取代芳香化合物 4.4 其它芳香化合物 参考文献5 含羟基的化合物 5.1 O—H基团 5.2  
 醇 5.2.1 一级倍频 5.2.2 高阶倍频 5.2.3 组合频 5.3 酚 5.3.1 倍频 5.3.2 组  
 合频 5.4 多羟基化合物 5.5 氢过氧化物 5.6 羧酸中的OH 5.6.1 倍频 5.6.2 组合频  
 5.7 硅烷醇 5.8 烯醇和烯醇化合物 参考文献6 水 .....7 羰基化合物8 胺和酰胺9 P—H  
 和S—H10 碳水化合物11 氨基酸、肽和蛋白质12 合成聚合物和橡胶13 近红外光谱应用史附录1  
 NIR吸收带概要图附录2a 光谱?分子结构对照图(10500~6300cm<sup>-1</sup>, 952~1587nm) 附录2b 光谱?  
 分子结构对照图(7200~3800cm<sup>-1</sup>, 1389~2632nm) 附录3 详细的光谱?分子结构对照图(10500  
 ~3800cm<sup>-1</sup>, 952~2632nm) 附录4a 光谱特征吸收峰?分子结构对照表(以波长升序及波数降序排列  
 ) 附录4b 光谱特征吸收峰?分子结构对照表(以官能团字母升序排列) 附录5 光谱索引(以官能团  
 或对比官能团为序) 附录6 光谱索引(以化合物名称的汉语拼音字母顺序排列) 附录7 光谱索引(以  
 分子式的碳数排列) 索引

## <<近红外光谱解析实用指南>>

### 章节摘录

1 近红外光谱简介 1.1 分子光谱 分子光谱产生于分子中原子核的周期运动（振动）。这些原子核同时或分别沿直线矢量进行运动，包括旋转、振动、摇摆以及相对于重心的弯曲运动。分子的振动和弯曲运动表现为振动光谱活性，可以通过多种光谱技术进行测量，包括近红外、中红外、远红外（太赫兹）和拉曼光谱。

这些分子振动光谱与分子的结构高度相关，而且相当复杂。

本书的主要目的就是解析近红外光谱与分子结构之间的这种复杂的相关关系。

分子能级是原子和分子运动的平动能级、转动能级、振动能级和电子能级之和。

除平动能外，其它运动都会对分子光谱的特性产生影响。

转动能与每一个分子的旋转角速度成正比。

分子的电子能及其量子数可通过泡利原理进行描述，该问题不在本书的讨论范围之内。

本书主要讨论振动能级，并以振动能级模型为基础来解析近红外光谱（NIR）与分子结构之间的相关关系。

<<近红外光谱解析实用指南>>

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>