

# 第四章 分子结构测定方法的原理及应用

## § 4.1 分子光谱概论

现代实验方法:

质谱

波谱

电子显微技术

色谱

能谱

热谱

衍射

光谱

激光技术

分子光谱:

对分子所发出的光或被分子所吸收的光进行分光所得到的光谱。

与原子光谱比较:

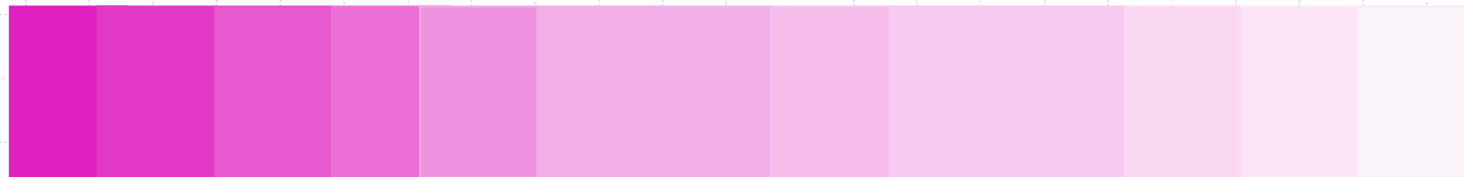
同: 每根谱线都是两个能级间跃迁的结果

异: 原子光谱为线状光谱

分子光谱为带状光谱



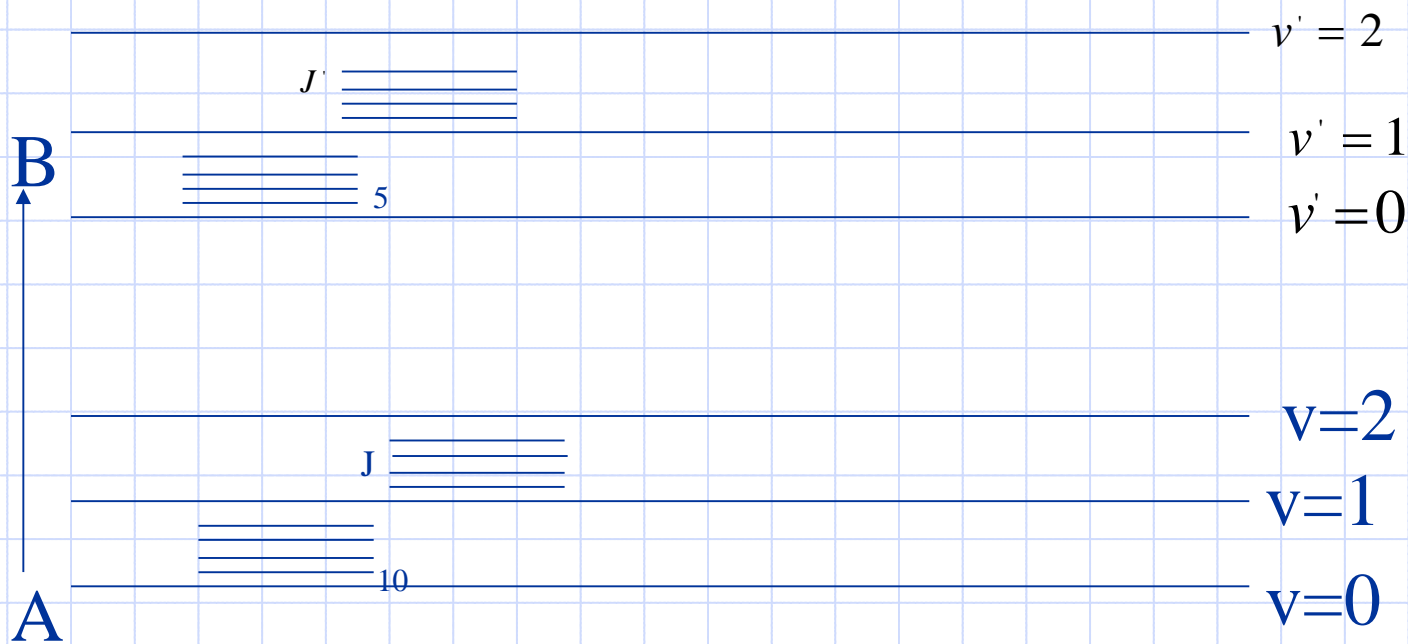
原子光谱 (线状)



分子光谱 (带状)

以双原子分子为例：分子内部的总能量为：

$$E = E_R + E_V + E_E \quad (\text{取平动能量为零})$$



转动能级差: (相当于微波和远红外)

$$\lambda : 1.25 - 0.012 \text{ cm}$$

振动能级差: (红外)

$$\lambda : 2.5 \times 10^{-3} - 1.25 \times 10^{-4} \text{ cm}$$

电子跃迁: (近红外, 可见, 紫外, 远紫外)

$$\lambda : 1.25 \times 10^{-4} - 6 \times 10^{-6} \text{ cm}$$

一般地,

$$\Delta E_R < \Delta E_v < \Delta E_e$$

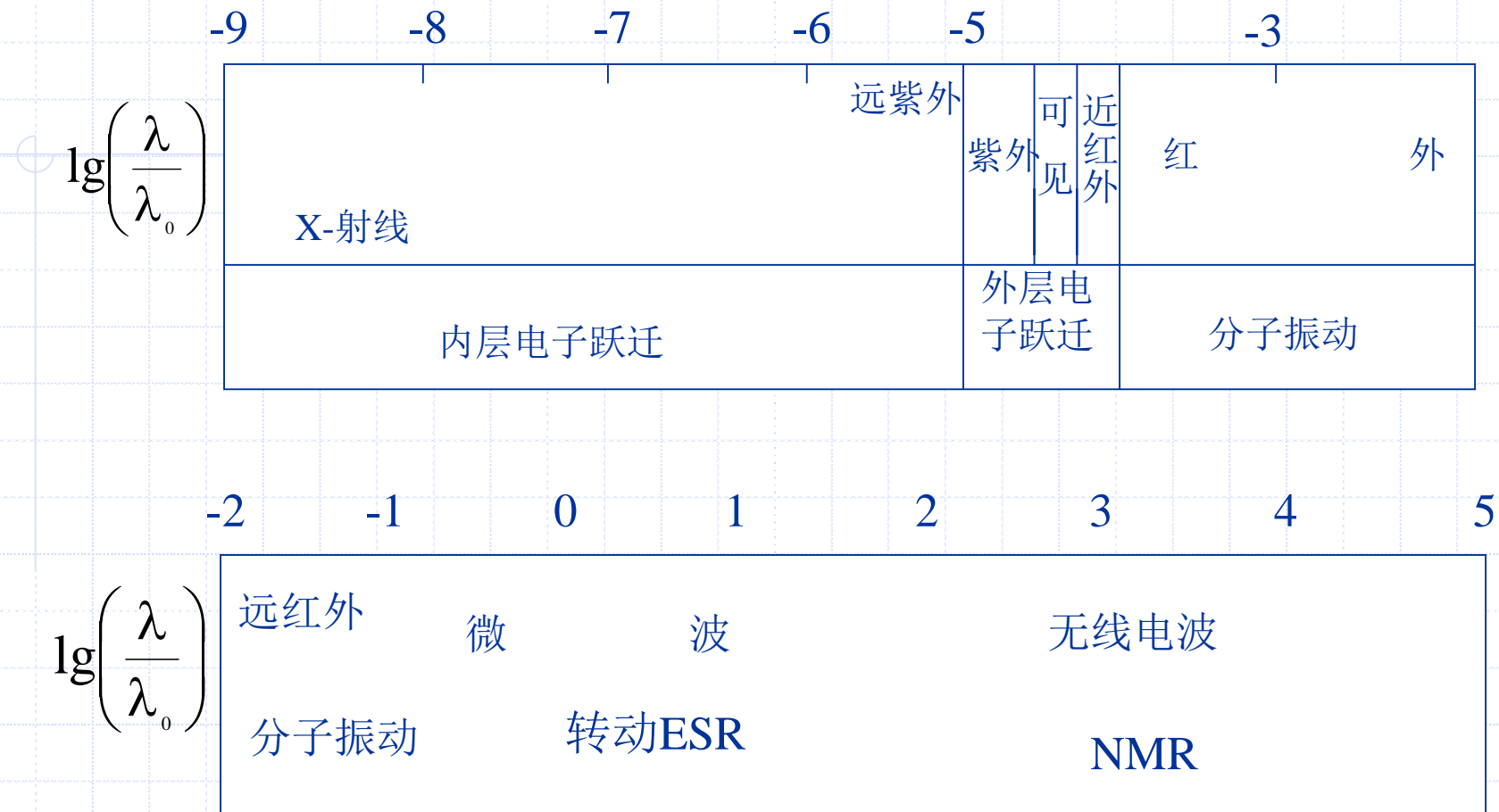


图 各种分子光谱所分布的波段示意图