

波谱分析课程教学大纲

课程代码：74120450

课程中文名称：波谱分析

课程英文名称：Spectroscopic Analysis

学分：1.5 周学时：1.5-0.0

面向对象：

预修要求：有机化学

一、课程介绍

（一）中文简介

有机化合物结构分析是介于有机化学和分析化学之间的边缘学科，波谱解析是其重要的组成部分。本课程系统介绍：1) 紫外光谱(UV)的测定原理，明确基本概念以及影响紫外吸收的因素，了解基本经验计算公式，估算吸收波长；2) 红外光谱(IR)的测定原理和各种官能团的基本吸收波数，明确基本概念以及影响红外吸收的因素；3) 质谱(MS)的测定原理以及各种常见有机物的断裂方式，学习分子离子峰及分子式的确定；4) 一维和二维核磁共振(1D和2D NMR)的基本概念、原理以及它们的运用。其中NMR和MS是本课程的重点讲解内容。

（二）英文简介

In this course you will learn the basic principles of the spectroscopic identification of compounds. The lecture is designed to introduce new concepts and techniques, while the laboratory experiments will allow you to apply those techniques to the identification of unknown molecules. With the successful completion of this course, you will be able to analyze, understand, and predict the spectra (IR, 1D NMR, 2D NMR, and mass spectra) of organic molecules and identify an unknown compound using a combination of these techniques.

二、教学目标

（一）学习目标

本课程的任务主要是介绍有机化合物波谱的基本原理, 以及进行各类有机物基本的波谱解析训练。通过本课程的学习, 学生应掌握基本的波谱解析技巧, 能完成一般有机物的结构鉴定, 为今后的深造或实际工作打下基础。

(二) 可测量结果

- 1、掌握紫外光谱的测定原理, 明确基本概念以及影响紫外吸收的因素, 了解基本经验计算公式, 估算吸收波长。
- 2、掌握红外光谱的测定原理和各种官能团的基本吸收波数, 明确基本概念以及影响红外吸收的因素。
- 3、掌握质谱的测定原理以及各种常见有机物的断裂方式, 学习分子离子峰及分子式的确定。
- 4、掌握一维和二维核磁共振(1D 和 2D NMR)的基本概念、原理以及其在有机化合物结构解析中的运用。
- 5、应用单个谱图或多谱图分析未知有机物的结构, 学习综合各种信息验证所得结构的正确性。

三、课程要求

(一) 授课方式与要求

授课方式: a. 教师讲授; b. 课后作业; c. 讨论课(学生主题发言); d. 平时测验; e. 期末考试。

课程要求: 掌握波谱分析的基本知识和研究内容, 能用所学的波谱知识解决简单有机化合物的结构鉴定问题。

说明: 由于课程的性质, 授课教师将特别重视交流互动, 每位选课同学在每堂课至少发言 1 次, 作为听众的同学对他人发言或回答问题提出异议或新的观点或补充, 这部分将作为平时成绩的主要依据; 开课期间将不定期进行至少 4 次测验以检验课程内容掌握程度。

(二) 考试评分与建议

期末闭卷考试占 60%, 平时测验占 20%, 课程作业占 10%, 平时交流互动、出勤等占 10%。

四、教学安排

周次	主题	具体内容	阅读材料	思考题
----	----	------	------	-----

1	核磁共振基础知识	产生核磁共振的基本条件和要求；核磁共振有关的弛豫、偶合常数、化学位移等基本概念；	梁晓天 核磁共振高分辨氢谱的解析和应用，科学出版社，1976	产生核磁共振的基本条件
2	¹ H NMR	影响 ¹ H NMR 偶合常数和化学位移的因素；常见氢核的化学位移。	梁晓天 核磁共振高分辨氢谱的解析和应用，科学出版社，1976	
3	¹³ C NMR	影响 ¹³ C 化学位移的因素；常见碳核的化学位移；DEPT 谱的应用		
4	2D NMR	常见 2D NMR (¹ H- ¹ H COSY、HMBC、HMQC 等) 在结构解析中的应用		
5	质谱基本知识	质谱的历史与展望；质谱有关的基本概念如分子离子峰等；常见的离子源和质量分析器；质谱的电离过程。		
6	基本有机物的质谱	常见有机物酮、醛、酸、酯等质谱过程。		
7	质谱解析	利用同位素峰确定有机物中的卤素原子；简单有机物的质谱解析。		
8	红外和紫外光谱	紫外和红外光谱的基本概念；基本知识和简单应用；结构总和解析。		

五、参考教材及相关资料

1. 有机化合物波谱分析，姚新生，等，2004年，中国医药科技出版社。
2. Spectrometric Identification of Organic Compounds 7th Ed, Robert M. Silverstein 等，2005年，JOHN WILEY & SONS. INC.

六、课程教学网站：

在条件具备的情况下，将通过校内网络提供必要的课件和文字材料链接