# 紫外光谱在有机化学中的应用探析

来源：网络 作者：天地有情 更新时间：2024-01-04

*摘 要：紫外光谱是分子内价电子吸收一定波长的电磁辐射发生跃迁而产生的吸收光谱。基于此原理，这种光谱可用于含有不饱和键的化合物，尤其含有共轭体系的化合物的分析和研究。本文主要从定性、定量、结构方面进行具体分析，以此探讨紫外光谱在有机化学中的...*

摘 要：紫外光谱是分子内价电子吸收一定波长的电磁辐射发生跃迁而产生的吸收光谱。基于此原理，这种光谱可用于含有不饱和键的化合物，尤其含有共轭体系的化合物的分析和研究。本文主要从定性、定量、结构方面进行具体分析，以此探讨紫外光谱在有机化学中的具体应用。

关键词：紫外光谱 有机化学 应用

20世纪中叶以来，由于量子力学、电子和光学技术以及计算机科学的迅速发展，一批现代分析仪器逐渐问世，有机化学家在科学研究中广泛使用这些仪器来鉴定有机化合物的分子结构，大大加快了有机化学的发展和新有机化合物的发现。在这些仪器分析方法中，鉴定有机化合物结构最常用的方法除了有红外光谱(IR)、核磁共振谱(NMR)、质谱(MS)外，紫外光谱(UV)也被广泛应用于有机化合物的定性和定量测定。

一、紫外光谱在有机化学中应用的基本原理

物质的吸收光谱本质上就是物质中的分子和原子吸收了入射光中的某些特定波长的光能量，相应地发生了分子振动能级跃迁和电子能级跃迁的结果。由于各种物质具有各自不同的分子 、原子和不同的分子空间结构，其吸收光能量的情况也就不会相同，因此，每种物质就有其特有的、固定的吸收光谱曲线，可根据吸收光谱上的某些特征波长处的吸光度的高低判别或测定该物质的含量。紫外光谱分析就是根据物质的吸收光谱研究物质的成分、结构和物质间相互作用的有效手段。通过紫外光谱，可研究分子中电子能级的跃迁。在电子光谱中，价电子吸收一定波长的电磁辐射发生跃迁。有机化合物的价电子有三种类型：形成单键的电子、形成多重键的电子、杂原子(氧、氮、硫、卤素等)上未成键的n电子。各类电子吸收紫外光后，由稳定的基态(成键轨道或非键轨道)向激发态(反键轨道)跃迁，当这些电子吸收了外来辐射的能量就从一个能量较低的能级跃迁到一个能量较高的能级。因此，每一跃迁都对应着吸收一定的能量辐射。特殊的结构就会有特殊的电子跃迁，对应着不同的能量(波长)，反映在紫外可见吸收光谱图上就有一定位置一定强度的吸收峰，根据吸收峰的位置和强度就可以推知待测样品的结构信息。

二、紫外光谱在有机化学中的主要应用

1.有机化合物的定性鉴别

利用紫外光谱对有机化合物进行定性鉴别的主要依据是，多数有机化合物具有吸收光谱特征。例如，吸收光谱形状、吸收峰数目、各吸收峰的波长位置、强度和相应的吸光系数等。值得注意的是，结构相同的化合物应有完全相同的吸收光谱，但吸收光谱完全相同的化合物却不一定是同一个化合物。利用紫外光谱进行化合物的定性鉴别，一般采用对比法。所谓的对比法，就是将样品化合物的吸收光谱特征与标准化合物的吸收光谱特征进行比较。如果两者完全相同，则可能是同一种化合物;如果两者有明显差别，则肯定不是同一种化合物。最常用于鉴别的光谱特征数据是吸收峰所在的波长(max)。若一个化合物中有几个吸收峰，并存在谷或肩峰，应该同时作为鉴定依据。另外，具有不同或相同吸收基团的不同化合物，可能有相同的 max值。但它们的相对分子质量一般不相同，因此它们的或值常有明显差异，吸光系数值常用于化合物的定性鉴别。

2.有机化合物的结构研究

有机化合物的紫外吸收光谱特征主要取决于分子中生色团和助色团以及它们的共轭情况，不能反映整个分子的结构特征。所以，单独用紫外光谱不能完全确定物质的分子结构，必须与红外光谱、质谱和核磁共振谱等联合使用，方可得到化合物结构的详细信息。不过在分析紫外光谱时，有一些基本实验事实应该充分掌握和利用。例如，在200~800 nm无吸收( 1)，则表明分子中不含有苯环或共轭体系，也没有羰基存在;在200~250 nm有强的吸收带( =10 000左右)，表明分子中含有共轭二烯或，-不饱和酮(醛);250 nm以上有强的吸收带时，表示分子中含有环内二烯或较长的共轭体系;在250~300 nm有弱的吸收带，表示分子内有羰基存在;在250~300nm有中等强度的吸收带( =200~1000)，说明分子中很可能含有芳香环。根据紫外光谱的数据可以判断化合物分子中是否存在共轭体系，如有共轭体系(包括碳一碳双键与碳一碳双键的共轭、碳一碳双键与碳一碳叁键的共轭、碳一碳双键与碳一氧双键的共轭以及苯环等)，根据吸收带的波长可以推定连接在共轭体系碳上的取代基的数目及位置，进而推测出化合物的基本结构。例如，用其他方法已测得 -水芹烯的结构式可能是(A)或(B)。UV数据： max=231nm( =9 000)。紫外光谱中200~250 nm有强的吸收带(K带)，表示分子中含有共轭二烯，所以可以推定 -水芹烯的构造式应该为(A)。在实际工作中 max的具体值还可利用经验公式进一步计算核实。

3.有机化合物的定量分析

一定浓度范围内的溶液对紫外光的吸收遵循朗伯--比尔定律。利用紫外分光光度法可以对有机样品中某组分进行定量分析。其原理和比色分析相同，具体步骤如下：①绘制被测组分纯品的紫外吸收曲线，找出最大吸收波长 max;②在 max处测量一系列不同浓度的标准溶液的吸光度，以吸光度为纵坐标、浓度为横坐标，绘制标准曲线;③在 max处测量未知样品溶液的吸光度，对照标准曲线，求出被测组分的含量。

三、结语

紫外分光光度法的优点在于分析快速、灵敏度高、不需要显色剂和操作方便等。对于混合物中单组分含量测定时，只要各组分的 max不重叠，便可不用事先分离而直接测量。紫外分光光度法目前正广泛应用于微量和痕量分析中。

参考文献

[1]张俊生,李纯毅,王晓莉.浅谈紫外吸收光谱在有机化学中的应用[J].内蒙古石油化工. 202\_(09).

[2]赵晓坤.紫外吸收光谱在有机化合物结构解析中的应用[J].内蒙古石油化工.202\_,(11).

[3]吴文铭.紫外可见分光光度计及其应用[J].生命科学仪器.202\_,(04).

本DOCX文档由 www.zciku.com/中词库网 生成，海量范文文档任你选，，为你的工作锦上添花,祝你一臂之力！