第一课：绪论

Monday, August 26, 2019 01:54

1. 参考书：
    a. 《材料分析方法》，杜希文，原续波，天津大学出版社；
    b. 《材料研究方法》，王培铭，许乾慰，科学出版社；
2. 主讲教师：索辉；
    a. 联系电话：13944911205；
    b. E-Mail：suohui@jlu.edu.cn；
    c. 办公地址：唐敖庆D440；
3. 材料特性表征：讲述材料分析技术及相关理论；
    a. 材料：
        i. 结构材料：以力学性能为基础，以制造受力构件所用的材料；
        ii. 功能材料：主要利用物质的独特物理、化学性质或生物功能等而形成的一类材料；
        iii. 一种材料往往既是结构材料又是功能材料；
4. 现代文明的三大支柱：材料、信息、能源；
5. 材料的性能：
    a. 特征性能，属于材料本身固有的性质，取决于材料本身的组成与结构；
    b. 功能物性；
    c. 结构决定性能；
6. 研究意义：
    a. 成分和结构的精确表征是材料研究的基本要求，也是实现性能控制的基本前提；
    b. 表征是指通过某种手段或者某种信息来反映其实质或者本质，材料表征=材料测试=材料分析；
7. 表征：显示出来的现象，表现出来的特征；
    a. 化学表征：用物理的或化学的方法对物质进行化学性质的分析、测试或鉴定，阐明物质的化学特性；
    b. characterization(表征)：描述，特征，性质；
8. 材料特性表征的主要内容：
    a. 表面和内部组织形貌：形貌分析；
        i. 借助显微技术：光学显微镜、电子显微镜、扫描探针显微镜；
    b. 晶体的相结构：物相分析，相：特定的物理和化学性质；
        i. 借助衍射方法：X射线衍射、电子衍射、中子衍射；
    c. 化学成分和价键(电子)结构：成分和价键分析；
        i. 核外电子能级分布：
            1) X光谱：X射线荧光光谱、电子探针X射线显微分析；
            2) 电子能谱；
    d. 有机物的分子结构：分子结构分析；
        i. 利用电磁波与分子键或原子核相互作用；
9. 材料分析的理论依据：依靠入射电磁波或物质波与物质相互作用，出射的电磁波或物质波携带物质材料的相关信息；

第二课：光学显微技术

Thursday, August 29, 2019 2:28 AM

1. 组织形貌分析的三个阶段：
    1. 光学显微镜(研制：列文虎克)：最高分辨率0.2um；
    2. 电子显微镜(理论：德布罗意，研制：鲁斯卡)：最高分辨率1nm；
        a. 不足：高速电子容易透入物质深处，低速电子容易被样品的电磁场偏折，所以电子显微镜很少对物质表面结构进行探测；
    3. 扫描探针显微镜（理论：隧道效应）：分辨率可达到原子级别；
2. 阿贝成像：衍射相干，平行光束收到有周期性特征物体的散射作用形成衍射谱，各衍射光斑发出的球面次波在像面上相干叠加形成像；
3. 光学显微镜物镜的重要参数：
    1. 放大倍数：像与对应标本大小的线性比值；
    2. 数值孔径(NA)：物镜前透镜与被检物体之间介质的折射率(n)与半孔径角的正弦之积，即：$NA = n * \sin\alpha$；
    3. 孔径角：物镜光轴上的物点与物镜前透镜的有效直径所形成的角度；
    4. 分辨率：所能分辨两个物点间的最小距离(受衍射影响)。通常把两艾里斑中心间距等于第一暗环半径R_0样品上相应的两个物体间距离Δr定义为透镜能分辨的最小距离。其中，$R_0 = \frac{0.16\lambda M}{n \sin\alpha}$，$\Delta r_0 = \frac{0.16\lambda}{n \sin\alpha}$.
        a. 普通光线的波长为400~700nm，因此光学显微镜的分辨力数值约0.2μm；
4. 瑞利判据：两艾里斑的中心间距等于第一暗环半径R。此时，两中央峰之间叠加强度比中央峰最大强度低19%，因此肉眼仍能分辨是两个物体的像；

第三课：光学显微技术与电子显微分析

Monday, September 2, 2019 2:14 AM

1. 光学透镜的像差：
    a. 球差(球面像差)：平行于主轴的光线，当通过透镜时发生折射，边缘与中心部分的折射光不能通过汇聚相交于一点。这种位置差称为球差；
        i. 解决方法：组合透镜、控制入射光粗细(牺牲分辨率)；
    b. 色像差：由于组成白光的各色光波长不同，折射率不同，因而成像位置也不同；
        i. 解决方法：
            1) 消色差物镜(achromat)：色差矫正可以使可见光中红光和蓝光聚焦于一点，而黄绿光则聚焦于零一点；
            2) 复消色差物镜；
    c. 像域弯曲：垂直于光轴的直立的物体经过透镜后形成一弯曲的像面，像域弯曲是几种相差综合作用的结果；
        i. 解决方法：特殊透镜；
    d. 像散：
    e. 慧差；
    f. 场曲；
    g. 畸变：正畸变和负畸变；
2. 焦深：焦点深度的简称，指保持于焦点区的最大深度；
    a. 在使用显微镜时，当焦点对准某一物体时，不仅位于该点平面上的各点都可以看清楚，而且在此平面的上下一定的厚度内，也能看得清楚，那么这个清楚部分的厚度就是焦深；
    b. 焦深与物镜的数值孔径及分辨率成反比；
3. 视场：观察显微镜时，所看到的明亮的圆形范围叫视场；
    a. 视场直径：也称视场宽度，是指在显微镜下看到的圆形视场内所能容纳被检物体的实际范围；
    b. 视场直径愈大，愈便于观察；
    c. 视场直径$F = \frac{FN}{\beta}$，其中FN-视场数，β – 物镜放大率；
4. 工作距离：也叫物距，即指物镜前透镜的便面到被检物体之间的距离；
    a. 镜检时被检物体应在物镜的一到二倍焦距之间；
    b. 工作距离与焦距是两个概念。平时说的调焦实际上是调整工作距离；
5. 样品制备：
    a. 取样：
        i. 取样应该选择代表性的部位；
    b. 镶样：
    c. 磨光；
        i. 机械抛光；
        ii. 电解抛光；
        iii. 化学抛光；
    d. 腐蚀：

a. 腐蚀；
    i. 化学腐蚀；
    ii. 电解腐蚀；

6. 比较重要的显微镜：
    a. 相差显微镜：用于观察无色透明的活细胞；
    b. 微分干涉相差显微镜DIC：能显示结构的三维立体投影成像；
    c. 偏光显微镜：双折射晶体；
    d. 荧光显微镜：以紫外线为光源，用以照射被检物体，使之发出荧光；
    e. 激光扫描共聚焦显微镜LCSM：可以对样品进行断层扫描和成像，进行无损伤观察和分析细胞的三维空间结构；

---

1. 电子显微分析：利用聚焦电子束与试样物质相互作用产生的各种物理信号分析试样物质的微区形貌、晶体结构和化学组成；
2. 电子显微分析包括：
    a. 透射电子显微镜TEM；
    b. 扫描电子显微镜SEM；
    c. 电子探针仪EPMA：X射线显微分析；
3. 电子显微镜的特点：
    a. 放大倍率极高，可以直接观察试样的形貌、机构，可以选择分析区域；
    b. 可以进行微区分析，具有高度分辨率；
4. 德布罗意波长：$\lambda = \frac{h}{mv}$；
5.

第四课：扫描电子显微镜

Thursday, September 5, 2019 1:59 AM

1. 扫描电子显微镜的特点：
    a. 高的分辨率，大约1nm；
    b. 有较高的放大倍数，20-20万倍连续可调；
    c. 有很大的景深，视野大，成像富有立体感；
    d. 配有x射线能谱仪；
    e. 试样制备简单；
2. 电子散射：当一束聚焦电子束沿一定方向入射到试样内时，由于受到固体物质中晶格位场和原子库伦场的作用，其入射方向会发生改变，这种现象称为散射；
3. 扫描电子显微镜的信号：二次电子、背散射电子、x射线等；
    a. 二次电子：被入射电子轰击出来的核外电子；
        i. 由于原子核和外层价电子间的结合能很小，因此外层的电子比较容易和原子脱离。；
        ii. 当原子的核外电子从入射电子获得了大于体系结合能的能量后，可离开原子而变成自由电子；
        iii. 如果这种散射过程发生在比较接近样品表层，那些能量大于材料逸出功的自由电子可从样品表面逸出，变成真空中的自由电子，即二次电子；
        iv. 二次电子来自表面5-10nm的区域，能量为0-50eV；
        v. 二次电子对试样表面状态非常敏感，能有效地显示试样表面的微观形貌；
        vi. 由于它发自试样表面层，入射电子还没有较多次散射，因此产生二次电子的面积与入射电子的照射面积没多大区别。
        vii. 二次电子的分辨率较高，一般可达到5-10nm；
        viii. 扫描电子显微镜的分辨率通常就是二次电子的分辨率；
    b. 背散射电子：被固体样品中的原子核反弹回来的一部分入射电子；
        i. 背散射电子包括弹性背散射电子和非弹性背散射电子；
        ii. 弹性背散射电子是指样品中原子核反弹回来的散射角大于90°的那些入射电子，其能量基本上没有变化；
        iii. 其能量为数千到数万电子伏特；
        iv. 非弹性背散射电子是入射电子和核外电子撞击后产生非弹性散射而造成的，不仅能量变化，方向也发生变化；
        v. 如果有些电子经过多次反射后仍能反弹出样品表面，这就形成非弹性背散射电子；
    c. X射线：多余的能量以X射线形式放出；
4. 扫描电镜的构造：
    a. 电子光学系统：由电子枪、电磁透镜、光阑、扫描线圈和样品室等部件；

第五课：电子与固体物质的相互作用

Thursday, 12 September, 2019 02:02

1. 静电透镜：能使电子波折射聚焦的具有旋转对称等电位曲面簇的电极装置；
2. 磁透镜：能使电子波聚焦的具有旋转对称非均匀的磁极装置；
   a. 能使电子偏转会聚成像，不能加速电子；
   b. 总是会聚透镜；
   c. 焦距、放大倍数连续可调；
3. 电子波长：$\lambda = \frac{\hbar}{mv}, \lambda = \sqrt{\frac{150}{U}} = \frac{12.25}{\sqrt{U}}$；
4. 电子散射：当一束聚焦电子束沿一定方向入射到试样内时，由于受到固体物质中晶格位场和原子库伦场的作用，其入射方向会发生改变，这种现象称为散射；
   a. 弹性散射：只改变方向，动能不变；
   b. 非弹性散射：方向和动能都改变；
5. 布拉格定律：入射波从晶体中的平行原子平面作镜面反射，其反射角等于入射角；
6. 弹性散射：
   a. 电子符合布拉格定律；
   b. 携带有晶体结构、对称性、取向和样品厚度等信息；
   c. 在电子显微镜中用于分析材料的结构；
7. 非弹性散射：
   a. 非弹性散射的电子损失了部分能量，方向也有微小变化；
   b. 可用于电子能量损失谱，提供成分和化学信息。也能用于特殊成像或衍射成像；
8. 原子对电子散射的三种情况：
   a. 原子核对电子的弹性散射；
   b. 原子核对电子的非弹性散射；
   c. 原子核外单子对电子的非弹性散射；
9. 入射电子与原子核发生碰撞时：$\alpha = \frac{Ze^2}{E_0 r_n}$, α: 散射角, Z: 原子序数, e: 电子电荷, E_0: 入射电子能量, r_n: 电子距原子核距离;
10. 入射电子发生非弹性散射的能量损失(转变为X射线)：$\Delta E = \hbar\nu = \frac{\hbar c}{\lambda}$;
    a. 由于能量损失不固定，X射线波长无特征值；
    b. 波长是连续的，不能用来分析；
    c. 在X射线谱上产生连续背底，影响分析的灵敏度和准确度；
11. 非弹性散射发生时，电子能量损失，而原子则受到激发：
    a. 单电子激发：二次电子。入射电子与核外电子的碰撞，将核外电子激发到空能级或者脱离原子成为二次电子，而原子则成为离子，此过程称为电离；
       i. 是级联过程；
       ii. 能量低：$< 50\text{eV}$；
       iii. 主要为小角度非弹性碰撞；
    b. 等离子激发：晶体是出于点阵固定位置的正离子和漫散在整个空间的价电子云组成的电中性体，因此可以把晶体看成是等离子体，入射电子会引起价电子的

集体振荡；

i. 价电子的这种集体振荡的能量是：$\Delta E_p = \frac{\hbar}{2\pi} \cdot \omega_p$，这种能量量子称为等离子；

c. 声子激发：晶格振动的能量也是量子化的，它的能量量子称之为声子：$\Delta E = \frac{\hbar}{2\pi}\omega$，0.026eV；

i. 入射电子和晶格的作用可以看作是电子激发声子(或吸收声子)的碰撞过程；

ii. 碰撞后，电子发生大角度散射，能量变化很小，动量改变可以相当大；

12. 内层电子激发的弛豫过程：当内层电子被运动电子轰击脱离原子后，原子处于高度激发状态，它将跃迁到能量较低状态，这个过程称作弛豫过程；
    a. 辐射跃迁，即特征X射线发射；
    b. 非辐射跃迁：即俄歇电子；
13. 作用深度：
    a. 俄歇电子：0.4-2nm；
    b. 二次电子：5-10nm；
    c. 背散射电子：100nm-1um；
    d. X射线光子：500nm-5um；
14. 思考题：
    a. 电子的弹性散射有什么特点？用于什么分析？
    b. 什么是二次电子用于什么分析？
    c. 电子和物质相互作用产生的信号有哪些？相应的基本理论是什么？
    d. 举例说明各种物理信号产生的深度和广度范围。

第六课：透射电子显微镜

Thursday, September 19, 2019 2:15 AM

1. 透射电子显微镜：
    a. 以波长极短的电子束作为照明源，用电子透镜聚焦成像的一种具有高分辨率、高放大倍数的电子光学仪器；
    b. 应用：微区形貌分析、组织分析、结构分析；
2.

第七课：振动光谱

Thursday, September 26, 2019 2:54 AM

1. 红外光谱：绝大多数的有机物和无机离子的化学键基频吸收都出现在中红外区，通常说的红外光谱实指中红外光谱区；
   a. 波长：$2.5\sim50\mu m$；
   b. 来源：分子对入射光子能量的吸收而产生振动能级的跃迁；
2. 不同有机分子基团具有不同的共振频率；
3. 分子中基团特性与共振频率关系：
   a. 双原子分子：
      i. 折合质量：$\mu=\frac{m_1\times m_2}{m_1+m_2}$；
      ii. 共振频率：$\sigma=\frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$，$k$为分子键参数；
      iii. 化学键越强，相对原子质量越小，共振频率越高；
4. 多原子分子的振动方式：

$$\text{分子振动方式}\begin{cases}\text{伸缩振动v(键长变，键角不变)}\begin{cases}\text{对称伸缩振动}v_s\\\text{不对称伸缩振动}v_{as}\end{cases}\\\text{弯曲振动δ(键长不变，键角变)}\begin{cases}\text{面内弯曲振动β}\begin{cases}\text{剪式振动}\\\text{平面摇摆震动r}\end{cases}\\\text{面外弯曲振动γ}\begin{cases}\text{纽绞振动t}\\\text{面外摇摆震动w}\end{cases}\end{cases}\end{cases}$$

5. 偶极矩：μ = q · d, d: 正负电荷中心距离, μ: 用于描述分子极性大小;
   a. 对称分子：振动时无偶极矩变化，显示红外非活性；
   b. 红外光谱研究对象：极性基团和非对称分子；
6. 红外吸收光谱的强度取决于：
   a. 偶极矩变化的大小：变化大的，吸收强度越大；
   b. 分子或基团的浓度：浓度越高，吸收强度越大；
7. 非基本吸收谱带：倍频、组合频、偶合和费米共振；
8. 基团特征频率：具有相同化学键或官能团的一系列化合物有近似共同的吸收频率；
9. 光谱大致分区：
   a. 官能团区：$4000-1330\ \text{cm}^{-1}$；
      i. X-H伸缩振动区：$4000-2500\ \text{cm}^{-1}$，醇、酚、酸等；
         1) O-H：3650-3100；
            a) 低浓度(峰形尖锐)：3650-3580；
            b) 高浓度(强宽峰)：3400-3200；
         2) N-H：3500-3100，胺、酰胺等，可干扰O-H峰；
            a) 饱和：3000以上；
            b) 不饱和：3000以下；
         3) C-H：3000左右；
            a) 饱和-C-H：3000-2800；
               i) $-CH_3$：2960，2870；
               ii) $-CH_2$：2930，2850；
            b) 不饱和=C-H：3010-3040；

b) 不饱和=C-H：3010-3040；
    i) 末端=CH：3085；
c) 不饱和≡C-H：2890-3300
    i) 较弱：2890；
    ii) 较强：3300；
d) ArC-H：3030；
    i) 比饱和C-H峰弱，但峰形却更尖锐；

ii. 三键及积累双键(反对称伸缩振动)区：$2500-2000\ \mathrm{cm}^{-1}$；
1) RC≡CH：2100-2140；
2) RC≡CR'：2196-2260，R=R'则无红外吸收；
3) C≡N：
    a) 非共轭：2240-2260，分子中有N、H、C，峰强且锐；
    b) 共轭：2220-2230，有O则弱，离基团越近则越弱；

iii. 双键伸缩振动(及苯环的骨架振动和芳香族化合物的倍频谱带)区：$2000\text{-}1500\ \mathrm{cm}^{-1}$；
1) C=O：1900-1650，强峰。是判断酮、醛、酸、酯及酸酐的特征吸收峰，其中酸酐因振动耦合而具有双峰；
2) C=C：1680-1620，峰较弱(但对称性较高)。在1600和1500附近有2-4个峰(苯环骨架振动)，用于识别分子中是否有芳环；
3) 苯衍生物的泛频：2000-1650，C-H面外、C=C面内变形振动，很弱，但很特征(可用于取代类型的表征)；

iv. 部分单键振动及指纹区(伸缩振动及芳环的C-H弯曲振动)：$1500-600\ cm^{-1}$；
1) 在红外分析中，通常一个基团有多个振动形式，同时产生多个谱峰(基团特征峰及指纹峰)，各类峰之间相互依存、相互佐证。通过一系列峰才能准确确定一个基团的存在；
2) 单、双键伸缩振动(不含氢)：C-O(1300-1000)，C-(N、F、P)，P-O，Si-O；
3) 面外弯曲振动：用于顺反式结构、取代类型的确定；

b. 指纹区：$1330-400\ \mathrm{cm}^{-1}$；

第八课：振动光谱

Thursday, October 17, 2019 2:19 AM

1. 拉曼位移：$\Delta v = \frac{|v_O - v_S|}{2}$；
   a. 其取决于分子振动能级的改变，所以是特征的，与入射光波长无关；
2. 拉曼活性：
   a. 互斥排斥规则：凡有对称中心的分子，若有拉曼活性，则红外是非活性的；若有红外活性，则拉曼是非活性的；
   b. 互相允许规则：若分子无任何对称性，则他们的红外光谱与拉曼光谱就非常相似；
   c. 互相禁止原则：少数分子的振动模式，既非拉曼活性，又非红外活性。如乙烯分子的弯曲，在红外和拉曼光谱中均观察不到振动谱带；
   d. 拉曼光谱和红外光谱互补；
3. 拉曼光谱的优点：
   a. 拉曼光谱是一个散射过程，任何尺寸、形状、透明度的样品，只要能够倍激光照射到，就可以用拉曼光谱测试；
   b. 水的拉曼散射极弱，拉曼散射可用于测量含水样品。玻璃的拉曼散射也比较弱；
   c. 对于聚合物及其他分子，拉曼散射的选择性定则的限制较小，可以得到丰富的谱带；
   d. 拉曼效应可应用光导纤维传递，因此可以进行传输和远程测量；
4. 拉曼光谱的缺点：
   a. 强烈的荧光散射会掩盖样品的信号，采用傅里叶变换拉曼仪可以克服；

第九课：核磁共振吸收光谱

Thursday, October 24, 2019 9:57 AM

1. 核磁共振光谱：
   a. 核磁共振：原子核在吸收了电磁波后从一个自旋能级跃迁到另一个自旋能级而产生的波谱(吸收谱)；
   b. 核磁共振光谱能够反映碳氢骨架连接的方式和状态；
   c. 通过核磁共振光谱可以推测有机化合物的分子结构；
   d. 波长在射频区$10^6 - 10^9 \mu m$，频率为兆赫兹数量级，能量很低$10^{-6} - 10^{-9} eV$的电磁波照射分子；
      i. 这种电磁波不会引起分子振动或转动能级跃迁，更不会引起电子能级的跃迁；
      ii. 这种电磁波能与磁性原子核相互作用；
      iii. 磁性原子核的能量在强磁场的作用下可以分裂为两个或以上能级，吸收射频辐射后发生磁能级跃迁；
   e. 应用：有机材料的化学组成、形态、结构、构象机动力学信息；
2. 核自旋：核自旋角动量的简称；
   a. 原子核的自旋角动量为质子和中子的自旋角动量和轨道角动量之和；
   b. 核自旋量子数：以约化普朗克常数为衡量单位，核自旋角动量I的最大投影值称为核自旋，也叫核自旋量子数；
   c. 核处于基态时，偶A核的自旋为零或整数，其中偶偶核的自旋为零，奇奇核的自旋为整数；
   d. 奇A核的自旋为半整数；
   e. 自旋为零或整数的偶A核属于玻色子，属于玻色-爱因斯坦分布；
   f. 自旋为半整数的奇A核属于费米子，遵从费米-狄拉克分布核泡利不相容原理；
3. 玻尔兹曼分布：
   $$n_m = \omega_m e^{-\alpha-\beta\varepsilon_m}$$
4. 玻色分布：
   $$n_m = \frac{\omega_m}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_m} - 1}$$
5. 费米分布：
   $$n_m = \frac{\omega_m}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_m} + 1}$$
6. 参数α和β确定的条件：
   $$N = \Sigma_m n_m, \qquad E = \Sigma_m \varepsilon_m n_m$$
7. 自旋量子数的情况：
   a. 自旋量子数为零，没有自旋现象，没有磁矩，不产生共振吸收；
   b. 自旋量子数等于1或大于1的原子核，原子核像椭圆体，电荷分布不均匀，共振吸收较复杂，无法分析
   c. 自旋量子数为$\frac{1}{2}$的原子核便于分析：氢谱(HNMR)和碳谱(CNMR)；
8. 核磁共振现象：
   a. 当氢核围绕着它的自旋轴转动时就产生磁场；
   b. 由于氢核带正电荷，转动时产生的磁场方向可由右手螺旋定则确定；
   c. 原子核自旋具有自旋角动量P：

c. 原子核自旋具有自旋角动量：

$$p = I \cdot \frac{h}{2\pi}$$

d. 自旋产生的磁矩为：

$\mu = \gamma p,$　　γ为旋磁比

e. 原子核绕H_0的进动频率ω_0符合拉莫方程：

$\omega_0 = \gamma \cdot H_0 = 2\pi v_0$

其中,$\omega_0(\mathrm{rad/s})$或$\mathrm{v}_0(\mathrm{Hz})$称为拉莫频率;

进动频率v_0与H_0成正比，与核的磁旋比γ相关，而与质子原子核在磁场方向的倾斜角度θ无关；

f. 如果外加在某些磁性原子核的能量恰好等于原子核分裂后相邻两个能级只差，则该核就可能吸收能量，从低能态跃迁到高能态；

9. 核磁共振条件：

$$v_0 = \frac{\gamma}{2\pi} \cdot H_0$$

a. 旋磁比：与核的特性有关，特定的原子核具有特定旋磁比；

10. 化学位移：

a. 实验证明：在恒定射频场中，同种核的共振位置不是一个定值，而是随着核的化学环境不同而有细微差别；

b. 产生的原因：分子中的磁性核都不是裸核，核外都有电子，每个质子实际上受到的磁场强度并不完全与外部磁场强度相同；

第十课：化学位移

Monday, October 28, 2019 10:04 AM

1. 化学位移的产生和表示方法：

$$\nu_0 = \frac{\gamma}{2\pi} \cdot H_0$$

   a. 屏蔽作用：核周围的电子对抗外加磁场所起的作用；
      i. 屏蔽作用的因素：

$$\sigma = \sigma_A + \sigma_M + \sigma'$$

         1) σ_A原子的屏蔽(近程屏蔽)；
            a) S电子造成抗磁屏蔽；
            b) P电子造成顺磁屏蔽；
         2) σ_M分子内部的屏蔽；
            a) 诱导效应；
            b) 共轭效应；
            c) 磁各向异性效应；
            d) 氢键效应；
            e) 范德华效应；
            f) 顺磁效应；
         3) σ'分子间的屏蔽；
   b. 一般选用四甲基硅烷(TMS)作为标准物；
   c. 化学位移：

$$\delta = \frac{\nu_s - \nu_{参}}{\nu_{参}} \times 10^6 ppm$$

      其中，ν_s样品吸收峰，$\nu_{参}$参考物吸收峰；
      i. 化学位移越大，表示屏蔽作用越小，吸收峰出现在低场；
      ii. 化学位移越小，表示屏蔽作用越大，吸收峰出现在高场；
2. 影响化学位移的因素：
   a. 取代基的诱导效应与共轭效应：
      i. 与质子相连元素的取代基电负性越强，吸电子作用越强，质子周围的电子云密度越小，屏蔽作用减弱，信号峰在低场出现，δ_H值越大；
      ii. 取代基的共轭效应分为吸电子核供电子两种，吸电子使δ_H增大，供电子使δ_H减小。主要发生在含π键的取代衍生物中；
   b. 芳环、双键核羰基屏蔽的各向异性效应；
   c. 氢键的影响；
      i. 氢键质子比没有形成氢键的质子有较小的屏蔽效应，共振吸收峰出现在低场上，δ_H值增大；
3. 作业待办：
   a. 化合物(a)，(b)，(c)分子式均为$C_3H_6Cl_2$，它们的NMR数据如下，试推测它们的结构：

      (a).

      δ: 5.3 1H 三重峰
      2.0 2H 多重峰
      1.0 3H 三重峰

      (b)

(b).

δ: 2.8 $2H$ 五重峰

1.6 $4H$ 三重峰

(c).

δ: 5.0 $1H$ 多重峰

3.2 $2H$ 二重峰

1.6 $3H$ 二重峰

b. 化合物$C_3H_6O_2$ 的^{1}H-NMR谱图如下：

(1).有3种类型质子：

a. $\delta = 1.2$ 三重峰

b. $\delta = 2.1$ 四重峰

c. $\delta = 10.2$ 单峰

(2).峰面积比$a: b: c = 3: 2: 1$

写出它的结构式，并解释原因；

c.

第十一课：成分和价键结构分析

Thursday, October 31, 2019 3:00 AM

1. X射线：波长$0.001\sim50nm$的电磁波；
2. X射线的产生：
   a. 初级：由高速运动的粒子与某种物质相撞击后猝然减速，释放大量动能，从而激发物质中内层电子；
3. X射线谱：X-ray强度I随波长λ而变化的关系曲线；
   a. 连续X射线谱：$I_m = KZiU^2$
   b. 特征X射线谱：$v_{n_1\to n_2} = \frac{E_{n_1}-E_{n_2}}{h}$