

<<中药红外光谱分析与鉴定>>

图书基本信息

书名：<<中药红外光谱分析与鉴定>>

13位ISBN编号：9787122077950

10位ISBN编号：7122077950

出版时间：2010-6

出版时间：化学工业出版社

作者：孙素琴，周群，陈建波 著

页数：358

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>

## &lt;&lt;中药红外光谱分析与鉴定&gt;&gt;

## 前言

红外光谱法是化合物结构分析与鉴定的传统方法之一，主要用来确定化合物分子所含的官能团，或者根据其指纹特征对未知物样品进行鉴定。

正是由于不同化合物分子的红外光谱都有其独特的指纹性，各国药典都将红外光谱法作为确认化合物结构的重要手段。

作为复杂的混合物体系，中药（包括中药材、中药饮片和中药制剂等）的红外光谱具有不同于单纯化合物的“宏观指纹特征”，而在此基础之上建立的“多级红外光谱宏观指纹分析法”已经逐渐发展成为中药质量控制的重要方法手段之一。

中药红外光谱宏观指纹分析法是中药学与分析化学相结合的产物，是一种基于中药红外光谱宏观指纹特征的综合分析方法，主要由整体分析法、三级鉴别法和专家识别法等几类方法组成。

“整体解析法”包括主体成分解析、特定成分解析、相对含量比较等具体措施。

通过官能团指认或者与标准谱图比较，可以根据混合物红外光谱上的多种成分叠加峰或某种成分特征峰对混合物的成分进行定性分析，也可以根据特征峰相对强度的变化得知某些成分相对含量的改变。

“三级鉴别法”建立于傅里叶变换红外光谱、二阶导数红外光谱以及二维相关红外光谱三种分辨能力逐级递增的光谱之上，主要用于解决中药等混合物红外光谱上谱峰重叠而难以解析的问题。

将被测样品的红外光谱与相对标准的药材或制剂直接进行比对，从而鉴别中药的真伪与优劣，称为“一级鉴别”；谱峰叠加严重以致常规的红外光谱尚不足以对中药样本进行鉴别时，可利用分辨能力更高的二阶导数红外光谱进行分析比较，称为“二级鉴别”；如果不同样品间高度相似以致二阶导数红外光谱也难以区分，则需要使用二维相关红外光谱，称为“三级鉴别”。

与传统的光谱方法相比，二维相关光谱引入了外界扰动，将传统光谱在第二维上展开，因此具有更高的分辨能力。

“专家识别法”包括光谱数据库检索、相似度量评价、多组分定量分析等措施。

借助于光谱数据库、模式识别和多元校正模型，可以通过计算机软件完成对待测样本的分析，而无需十分专业的红外光谱知识。

通过基于红外光谱的模式识别和多元校正等化学计量学方法，既可以对中药的品种、产地和栽培方式等进行有效的分类识别，又可以对特定的指标成分进行快速准确的定量分析。

真实反映样品整体信息、宏观与微观相结合、定性与定量分析可同步进行等是红外光谱宏观指纹分析法的显著特点，是其适用于中药质量控制的根本所在。

## <<中药红外光谱分析与鉴定>>

### 内容概要

中药是成分复杂的混合物，其分析研究与质量控制一直是科研和实践领域的重大难题。

本书阐述了“中药红外光谱宏观指纹分析法”的理论基础与应用实例，提出了将红外光谱用于中药分析与质量控制的方法与特点优势。

全书共9章，前两章提出了红外光谱法用于混合物分析的基本理论和方法，以及将红外光谱法用于中药质量控制的方法优势，并对混合物红外光谱解析所需的一些化学计量学方法做了简单介绍。

第3章至第9章，用具体的研究实例说明红外光谱法在中药材、中药饮片和中药制剂等领域的研究应用，包括中药成分分析、炮制机理分析，以及中药提取物、中药配方颗粒和中药制剂的分析。

本书重在实践，可供化学和药学等相关专业的师生、中医药领域的科研人员以及中药生产企业的管理和检验人员参考。

## &lt;&lt;中药红外光谱分析与鉴定&gt;&gt;

## 书籍目录

第1章 红外光谱法概述 1.1 红外光谱法发展简史 1.2 红外吸收的基本原理 1.2.1 光的性质与分子光谱 1.2.2 谐振子模型 1.2.3 多原子分子振动 1.3 红外光谱仪 1.3.1 红外光谱仪的组成 1.3.2 色散型红外光谱仪 1.3.3 傅里叶变换红外光谱仪 1.4 红外样品测试技术 1.4.1 液体样品 1.4.2 固体样品 1.4.3 气体样品 1.4.4 附件技术 1.5 红外谱图的数据处理 1.5.1 谱图坐标 1.5.2 背景与差谱 1.5.3 平滑 1.5.4 基线校正 1.5.5 归一化 1.6 红外光谱与分子结构 1.6.1 官能团的特征吸收频率 1.6.2 官能团吸收频率的影响因素 1.7 红外光谱的解析方法 1.7.1 红外光谱解析三要素 1.7.2 光谱间相关系数的计算 1.8 红外光谱法的特点与应用 参考文献第2章 混合物红外光谱解析方法 2.1 混合物红外光谱分析原理与方法 2.1.1 混合物分析的难题与红外光谱法的优势 2.1.2 混合物红外光谱宏观指纹特征 2.1.3 混合物红外光谱解析难题 2.2 混合物红外光谱分析方法 2.2.1 整体解析法——主体成分解析 2.2.2 整体解析法——特定成分解析 2.2.3 整体解析法——相对含量比较 2.2.4 三级鉴别法——经典红外光谱 2.2.5 三级鉴别法——二阶导数光谱 2.2.6 三级鉴别法——二维相关光谱 2.2.7 专家识别法——光谱数据库检索 2.2.8 专家识别法——相似度量评价 2.2.9 专家识别法——多组分定量分析 2.3 混合物红外光谱分析优势 2.4 中药标准化与红外光谱法 参考文献第3章 中药材成分红外光谱分析 3.1 中药材主体成分分析 3.1.1 高油脂类药材 3.1.2 高蛋白类药材 3.1.3 高淀粉类药材 3.1.4 高蔗糖类药材 3.1.5 高水苏糖类药材 3.1.6 高鞣质类药材 3.2 中药材所含无机物分析 3.2.1 草酸盐 3.2.2 硫酸盐 3.2.3 磷酸盐 3.2.4 碳酸盐 3.2.5 硅酸盐 3.3 中药材特定成分分析 3.3.1 黄连-盐酸小檗碱 3.3.2 淫羊藿-淫羊藿苷类 3.3.3 葛根-葛根素 3.3.4 肉苁蓉-肉苁蓉苷类 参考文献第4章 中药材红外光谱三级鉴别 4.1 药材真伪鉴别 4.1.1 甘草与刺果甘草 4.1.2 防风与沙茴香 4.1.3 党参与夜关门 4.1.4 八角茴香与莽草 4.1.5 柴胡与大叶柴胡 4.1.6 东阿阿胶与假阿胶 4.1.7 山茱萸与山楂 4.2 药材产地鉴别 4.2.1 不同产地广藿香 4.2.2 不同产地贝母 4.3 药材部位鉴别 4.3.1 草乌不同部位 4.3.2 刺五加不同部位 4.4 药材栽培方式鉴别 4.4.1 野生与栽培丹参 4.4.2 不同方式栽培人参 参考文献第5章 中药材红外光谱模式识别第6章 中药炮制红外光谱分析第7章 中药配方颗粒红外光谱分析第8章 中药提取物红外光谱分析第9章 中药制剂红外光谱分析附录A 中药红外光谱实验方法345 附录B 常见有机化合物的特征红外吸收347

## &lt;&lt;中药红外光谱分析与鉴定&gt;&gt;

## 章节摘录

混合物中含有很多不同的分子，这些分子具有多种多样的官能团。根据红外光谱的基本理论可以知道，分子官能团的红外吸收是有规律可循的。在不同的化学环境下，同一种官能团的吸收峰位置会有所差别，但总是在一定的光谱区域内出现。混合物中多种分子可能具有同一种官能团，虽然所处的分子结构有所不同，但是其吸收峰位置也必然会存在于某一特定的光谱区域内。因此，可以将不同分子中的同一类官能团看作一个整体，根据其在混合物红外光谱上表现出的叠加峰进行整体成分结构鉴定，给出混合物中所含物质群组的信息。

红外光谱具有极强的指纹特征性，物质在结构或含量上的变化都会在其红外光谱上表现出来。混合物的红外光谱与其所含成分密切相关，当混合物的组成有所变化时，其红外光谱必然也会随之发生相应的改变。

这种光谱上的改变可能是极其微弱的，但是使用具有足够分辨能力的谱图解析技术，总是能够将其发掘出来的。

因此，可以根据红外光谱上的差异对不同的混合物样本进行整体鉴别。

混合物的红外光谱可以近似看作所含各种组分红外光谱的叠加，因此某些特定成分的特征吸收峰依然可以在其中表现出来，只是其强度和数量会因为该组分含量的差异而有所不同。

通过一定的光谱分辨率增强技术和化学计量学方法，可以根据混合物的红外光谱对所含某种特定成分进行定性与定量分析。

根据上述分析可知，混合物的红外光谱所具有的特性不同于传统意义上纯化合物红外光谱的指纹特征。

例如，纯化合物的红外光谱吸收峰给出其结构中所含官能团的信息，而混合物的吸收峰则说明其中含有某类具有相似官能团的分子。

另外，不同纯化合物的红外光谱差异比较显著，一般通过直接观察即可分辨，而不同混合物的红外光谱差异可能很微弱，需要借助一些如导数光谱等分辨率增强技术来进行鉴别。

为了区分混合物与纯化合物红外光谱的性质差异，我们将混合物红外光谱的指纹特征称为“宏观指纹特征”，而基于这种光谱特征的一系列混合物红外光谱分析方法，可称为“多级红外光谱宏观指纹分析法”，其基本思想是：根据混合物红外光谱上的叠加峰得到其中所含物质群组的结构信息，使用相应的光谱分辨率增强技术对不同样本进行区分鉴别，借助一定的化学计量学方法对某些特定成分进行定性与定量分析。

<<中药红外光谱分析与鉴定>>

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>