

红外吸收光谱

1. 解:

根据公式
$$b = \frac{N}{2n} \left(\frac{1}{\bar{\nu}_1} - \frac{1}{\bar{\nu}_2} \right) = \frac{13}{2 \times 1.59} \left(\frac{1}{2800} - \frac{1}{2000} \right) = 0.005 \text{ cm}$$

2. 解:

$1 > \lambda = 5.86 \mu\text{m}$, $\bar{\nu} = 1/\lambda = 1706 \text{ cm}^{-1}$, 应该选择在该波数下“透明”的溶剂, 如氯

仿。

2> 溶液的吸光度至少应为 3 倍噪声时才能被检出。由题意, 有: ε

$$l = A/c = 0.40/2.0,$$

$$\text{故有: } c_0 = 3 \times 0.001/0.40/2.0 = 1.5 \times 10^{-2} \text{ mg/ml}$$

3. 解:

计算不饱和度 $\Omega = 4 + 1 - 10/2 = 0$ 。

1100 cm^{-1} 为 C-O-C 的伸缩振动, 可能为一脂肪醚

从 2950 cm^{-1} , 2850 cm^{-1} 处吸收峰的强度可判断化合物含等量的 $-\text{CH}_3$ 和 $-\text{CH}_2$

1380 cm^{-1} 处吸收峰的形状说明化合物不含偕二甲基。

据此推断化合物的可能结构为:



对照标准谱图可进一步确认该结构式正确。

4. 解:

计算不饱和度 $\Omega=5+1-8/2=2$ 。

1745cm^{-1} , 1240cm^{-1} , 1032cm^{-1} 三处的吸收峰的位置和峰形说明有

O

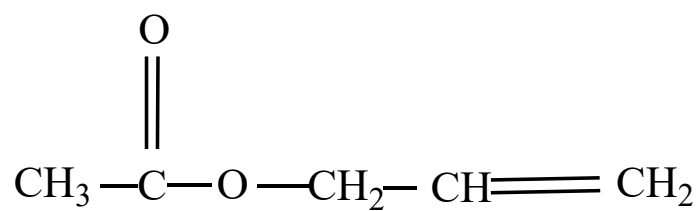
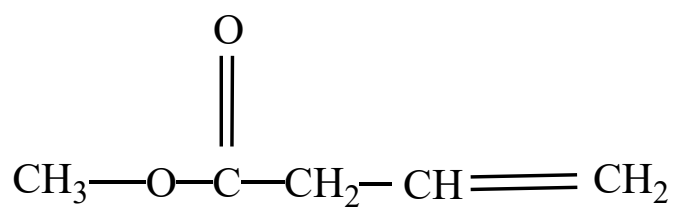
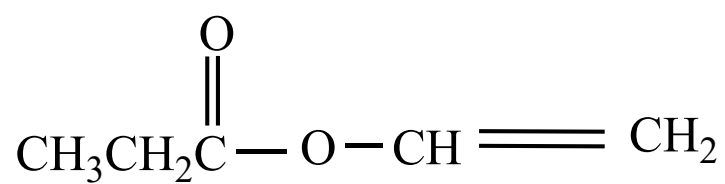
||

-C-O- 官能团, 但没有共轭。 1645cm^{-1} 左右的吸收说明有 -C=C- 存在。

931cm^{-1} , 989cm^{-1} 处的吸收, 说明是端烯。

1378cm^{-1} 处的吸收峰说明了 -CH₃ 的存在, 但无偕二甲基。

据此推断, 可能的结构有:



经与标准谱图对照，上述第三个结构式正确。

5. 解：

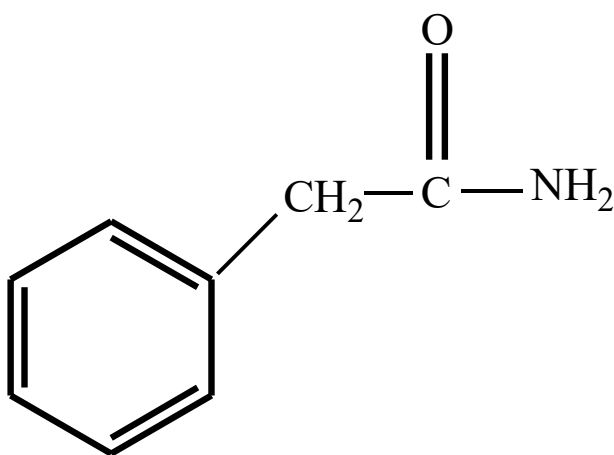
计算不饱和度 $\Omega=8+1-8/2=5$ ，可能含有苯环或吡啶环。

3000cm^{-1} 到 3500cm^{-1} 范围内两个吸收峰说明化合物含有 NH_2 ，故不可能含有吡啶环而应该是苯环。

1640cm^{-1} 处的强烈吸收峰说明了酰胺的存在。

1380cm^{-1} 处无吸收再结合指纹区的吸收特点说明化合物为单取代苯环，

故化合物结构式应为



与标准谱图对照后可进一步确认该结构式是正确的。