



**Tsinghua University**  
Department of Chemistry

# 有机化学B

## 第三次习题课（对映异构体，波谱分析）

---

杨彪

2019/12/8

---

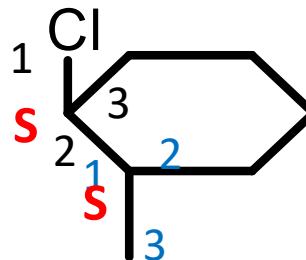
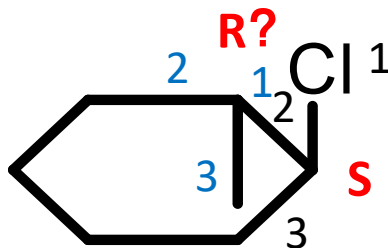
# 对映异构体

- 判断方法，最小基团放在远处，其余三个官能团面向观察者，从**大到小**划圈。



## Tips:

- 1) 如果小基团面朝观察者，不需要颠倒过来看，直接判断RS，然后再颠倒即可。
- 2) 结构式表示的空间关系不一定是正确的，需要考虑实际的空间关系。



# 作业题讲解

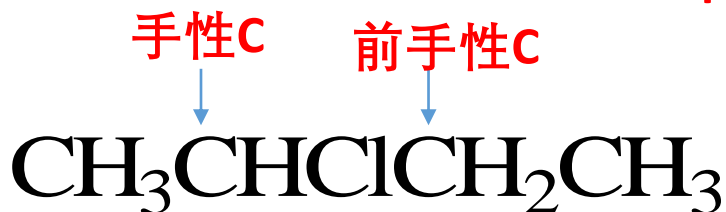
7. 下列化合物中各有几种等价质子。



2

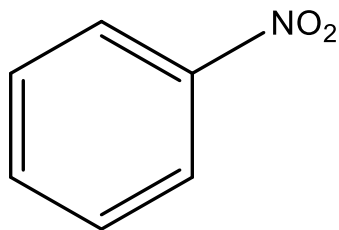


4

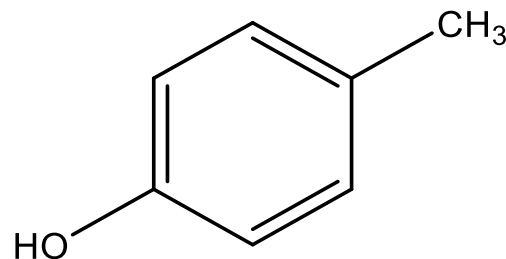


4或5

$\frac{4}{5}$ ,    ? ? ?



3



4

# 四大波谱

红外光谱

分子中键的振动

紫外光谱

分子中价电子的跃迁

质谱

分子、离子碎片峰

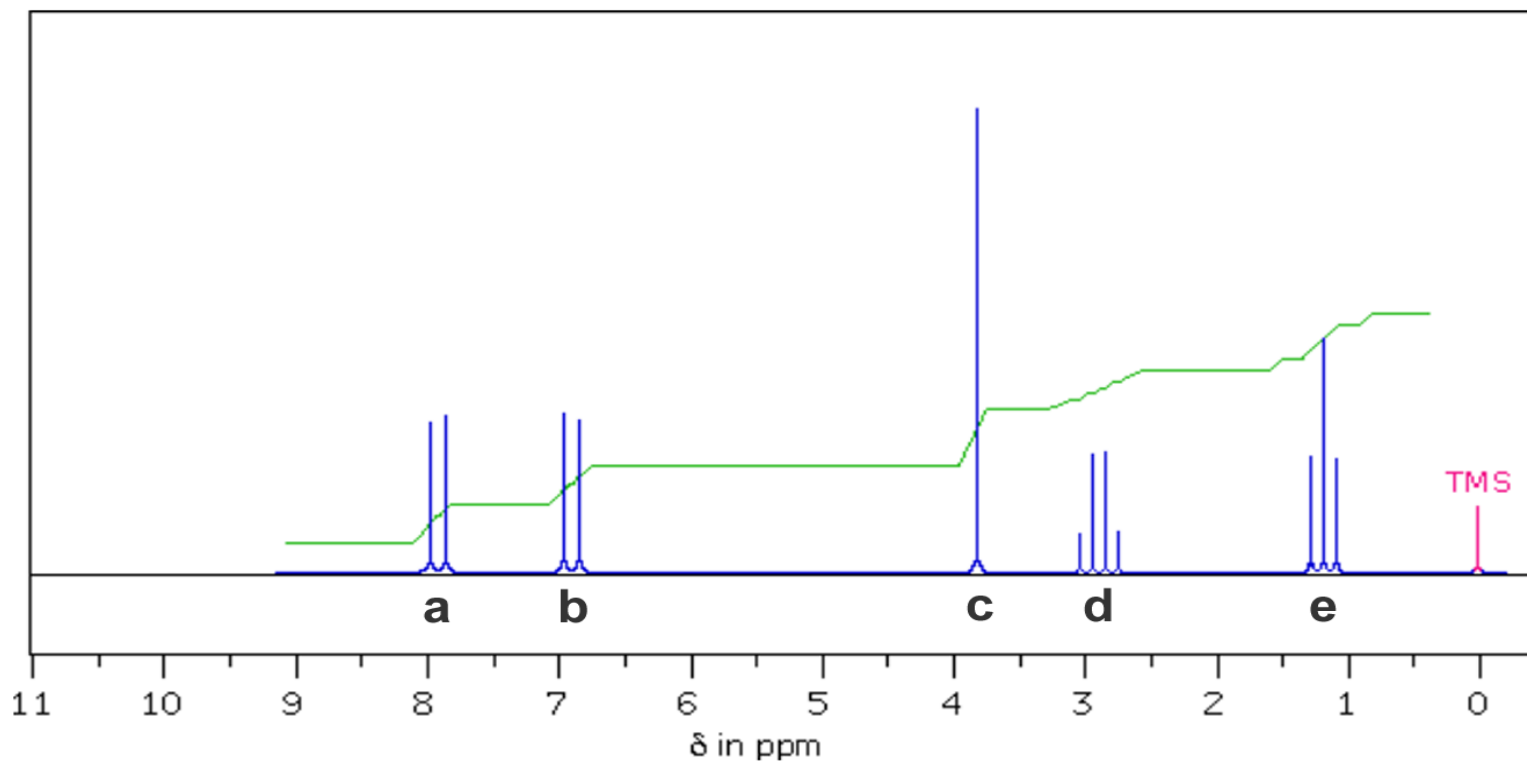
核磁共振谱

H原子或其他原子的磁信号

# 习题讲解

1. 化合物A的分子式为 $C_{10}H_{12}O_2$ ，人们用90 MHz核磁共振仪获得了它的核磁谱图（如下图所示）。请根据核磁谱图回答以下问题：

- (1) 请判断A化合物中有几种不同化学环境的氢原子？
- (2) 该谱图中在 $\delta = 3.8$  ppm处有一个单峰，请根据相对化学位移的定义，计算该核磁峰与内标四甲基硅（TMS）核磁共振频率相差多少赫兹？
- (3) 请根据图中的积分曲线判断每一个核磁峰对应几个氢原子？
- (4) 请给出化合物A的可能结构，写出合理的推导过程。



# 习题讲解

(1) 5种不同化学环境的氢原子。

(2)  $3.8 \text{ ppm} \times 90 \text{ MHz} = 342 \text{ Hz}$

(3) 2,2,3,2,3。

(4) **不饱和度** =  $(10 \times 2 + 2 - 12) / 2 = 5$ ，结合  $\delta = 6.8 \sim 8.0 \text{ ppm}$  之间有4个H，可以判断含有一个**苯环**且苯环为**对位二取代**，剩余一个不饱和度为**双键或者成环**。

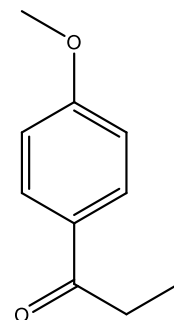
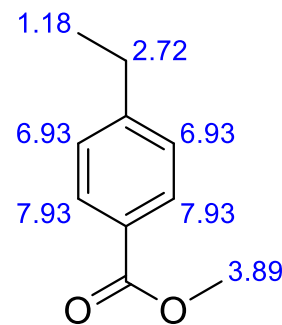
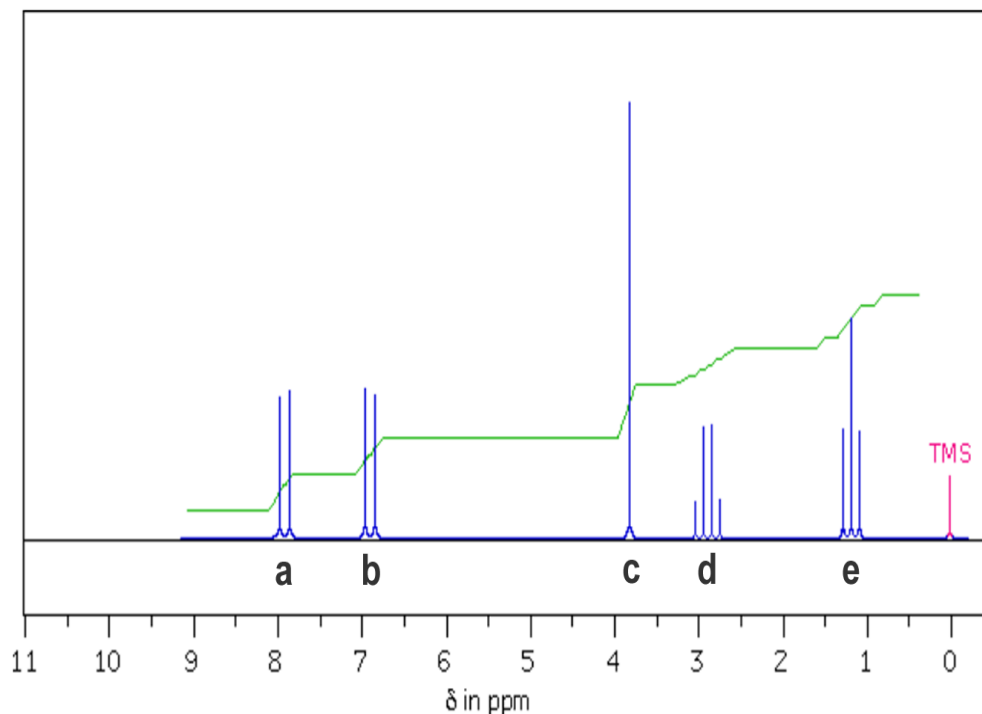
$\delta = 1.2 \text{ ppm}$ 处积分高度为**3**的**三峰**，应为受**亚甲基**裂分的**-CH<sub>3</sub>**；

$\delta = 2.9 \text{ ppm}$ 处积分高度为**2**的**四重峰**，应为受甲基裂分的亚甲基，向低场移动至**2.9 ppm**说明该亚甲基与-苯环相连，因此含有与苯环相连的**-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>**片段。

$\delta = 3.8 \text{ ppm}$ 处积分高度为**3**的**单峰**应为甲基，且由于其化学位移向低场移动很多，达到**3.8 ppm**，应是与-O-相连，因此含有**-OCH<sub>3</sub>**片段。

这两个片段与对位二取代苯环片段连接后分子组成和分子式一致。

综上，可能的结构是：

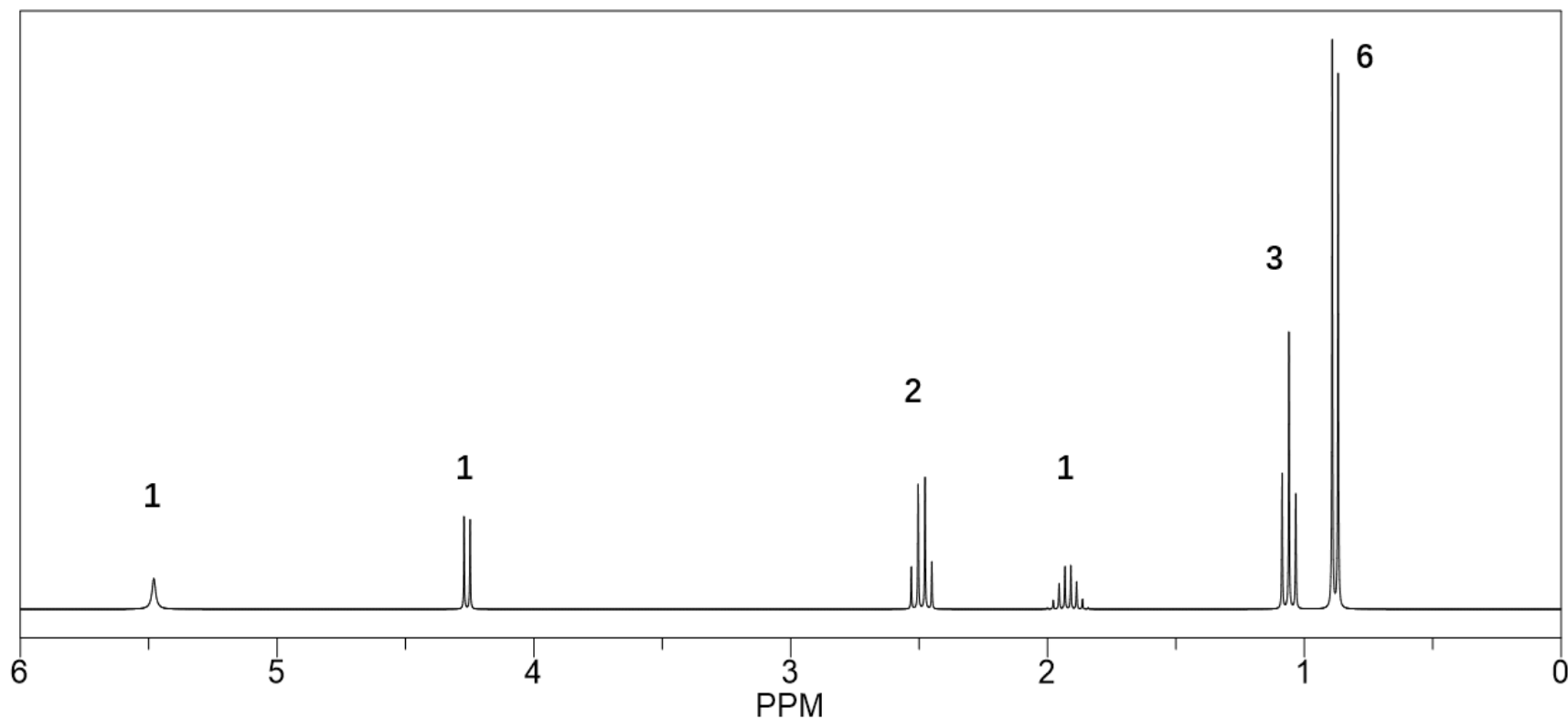


(单位: ppm)

# 习题讲解

2.某化合物元素分析的结果是C: H: O=64.6%: 10.8%: 24.6%, 其核磁H谱如下所示; 在红外谱图中, 有一个 $3400\text{cm}^{-1}$ 的宽峰。

- 推断该分子的分子式
- 推断该分子的结构式, 并写出详细的推断依据。



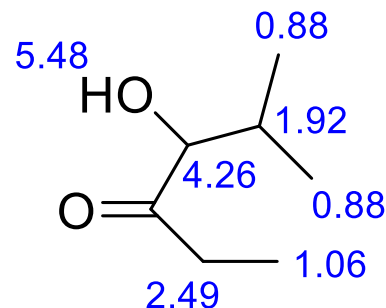
# 习题讲解

(1) 原子数C: H: O=0.646/12 : 0.108/1 : 0.246/16 =7: 14: 2

因此最简式为 $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}_2$

(2) 不饱和度为1, 说明分子中含有一个双键或者成环

- $\delta=5.5 \text{ ppm}$ 处有一个积分为1的包峰, 且红外谱中有一个 $3400\text{cm}^{-1}$ 的宽峰, 说明该分子含有 $-\text{OH}$ 。
- $\delta=1.1 \text{ ppm}$ 处有一个积分为3的三重峰, 应为一个甲基, 且与一个亚甲基相连。 $\delta=2.5 \text{ ppm}$ 处有一个积分为2的四重峰, 应为一个亚甲基, 且与一个甲基相连。因此该分子含有一个 $-\text{CH}_2\text{CH}_3$ 结构, 且应为此亚甲基往低场移动至 $2.5 \text{ ppm}$ , 很有可能是与一个双键相连( $\text{C}=\text{C}$ 或 $\text{C}=\text{O}$ )。
- $\delta=0.9 \text{ ppm}$ 处有一个积分为6的双峰, 应为两个甲基, 且与一个次甲基相连, 该次甲基应是四重峰或以上裂分。发现 $\delta=1.9 \text{ ppm}$ 处有一个积分为1的多重峰, 应该是此次甲基, 因此含有 $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 结构, 并且这个次甲基往低场移动, 且为多重峰, 应受到其他H的裂分。
- $\delta=4.3 \text{ ppm}$ 处有一个积分为1的双峰, 应是与 $-\text{OH}$ 相连的一个次甲基的峰, 至此, 结合之前已有的碎片, 可以判断双键应为 $\text{C}=\text{O}$ 双键, 且 $-\text{CH}(\text{OH})-$ 与 $\text{C}=\text{O}$ 双键及 $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 相连。
- 最终的结构式如右图:  
分子式为 $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}_2$





# 习题讲解

