

有机化合物的吸收光谱及溶剂的影响

一. 实验目的

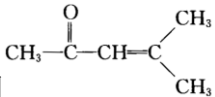
1. 学习紫外吸收光谱的绘制方法，利用吸收光谱进行化合物的鉴定。
2. 了解溶剂的性质对吸收光谱的影响。
3. 掌握紫外-可见分光光度计的使用。

二. 实验原理

紫外吸收光谱带宽而平坦，数目不多，虽然不少化合物结构差别很大，但只要分子中含有相同的发色团，其吸收光谱的形状就大体相似。因此，依靠紫外吸收光谱很难独立解决化合物结构的问题。但紫外光谱对共轭体系的研究有独到之处。可以利用紫外光谱的经验规则——伍德沃德-费塞尔(Woodward-Fieser)规则进行分子结构的推导验证。

利用紫外吸收光谱进行定性分析，是将未知化合物与已知纯样品在相同的溶剂中配制成相同浓度，在相同条件下分别绘制吸收光谱，比较两者是否一致。或者是将未知物的吸收光谱与标准谱图（如萨特勒紫外光谱图）比较。两种光谱图的 λ_{\max} 和 ϵ_{\max} 相同，表明它们有可能同一有机化合物。

极性溶剂对紫外吸收光谱吸收峰的波长、强度及形状可能产生影响。极性溶剂有助于 $n \rightarrow \pi^*$ 跃迁向短波移动，而使 $\pi \rightarrow \pi^*$ 跃迁向长波移动。典型化合物如

异丙叉丙酮 ，同时含有这两种形式的跃迁，可观察到随溶剂极性改变相应吸收谱带的波长变化趋势。

此外，在没有紫外吸收的物质中检查具有高吸收系数的杂质，也是紫外吸收光谱的重要用途之一。例如，检查乙醇中是否有苯杂质，只需看在 256 nm 处有无苯的吸收峰。

三. 仪器与试剂

仪器：普析通用 TU-1901 紫外-可见分光光度计；石英比色皿；50 mL 容量瓶 7 个。

试剂：苯酚；苯；异丙叉丙酮；正己烷；甲醇；邻甲苯酚；0.1 mol/L HCl；0.1 mol/L NaOH；乙醇。

四、实验步骤

1. 芳香化合物吸收光谱的测定

领取未知试样的水溶液，用 1 cm 石英比色皿，以去离子水为参比，在 200～360 nm 测量其吸收光谱。

2. 乙醇中杂质苯的检查

用 1 cm 石英比色皿，以纯乙醇为参比液，在 230～280 nm 测量含有杂质苯的乙醇试样的吸收光谱。

3. 溶剂性质对吸收光谱的影响

(1) 配制浓度为 0.124 g/L 的邻甲苯酚溶液，其溶剂是：① 0.1 mol/L HCl；②纯乙醇溶液；③0.1 mol/L NaOH 溶液。

(2) 配制浓度为 5.2 mg/L 的异丙叉丙酮溶液，其溶剂分别为①正己烷、②甲醇、③去离子水。

(3) 用 1 cm 石英比色皿，以相应的溶剂为参比，测量各溶液在 210～350 nm 范围的吸收光谱。

五. 结果处理

1. 记录未知化合物的吸收光谱条件，确定峰值波长。

2. 记录乙醇试样的吸收光谱及实验条件，根据吸收光谱确定是否有苯吸收峰，峰值波长是多少？

3.记录各邻甲苯酚溶液的吸收光谱及实验条件，比较吸收峰的变化，结论如何？

4.记录各异丙叉丙酮溶液的吸收光谱及实验条件，比较吸收峰的波长随溶剂极性的变化，结论如何？

六、注意事项

1. 本实验所用试剂均应为光谱纯或经提纯处理。

2. 石英比色皿每换一种溶液或溶剂必须清洗干净，并用被测溶液或参比液荡洗三次。

七. 思考题

1. 试样溶液浓度过大或过小对测量有什么影响？应如何调整？
2. 紫外-可见分光光度计狭缝宽度大小对吸收光谱轮廓、波长位置及吸光系数有什么影响？