**第3章 有机合成及其应用 合成高分子化合物**

**第2节 有机化合物结构的测定**

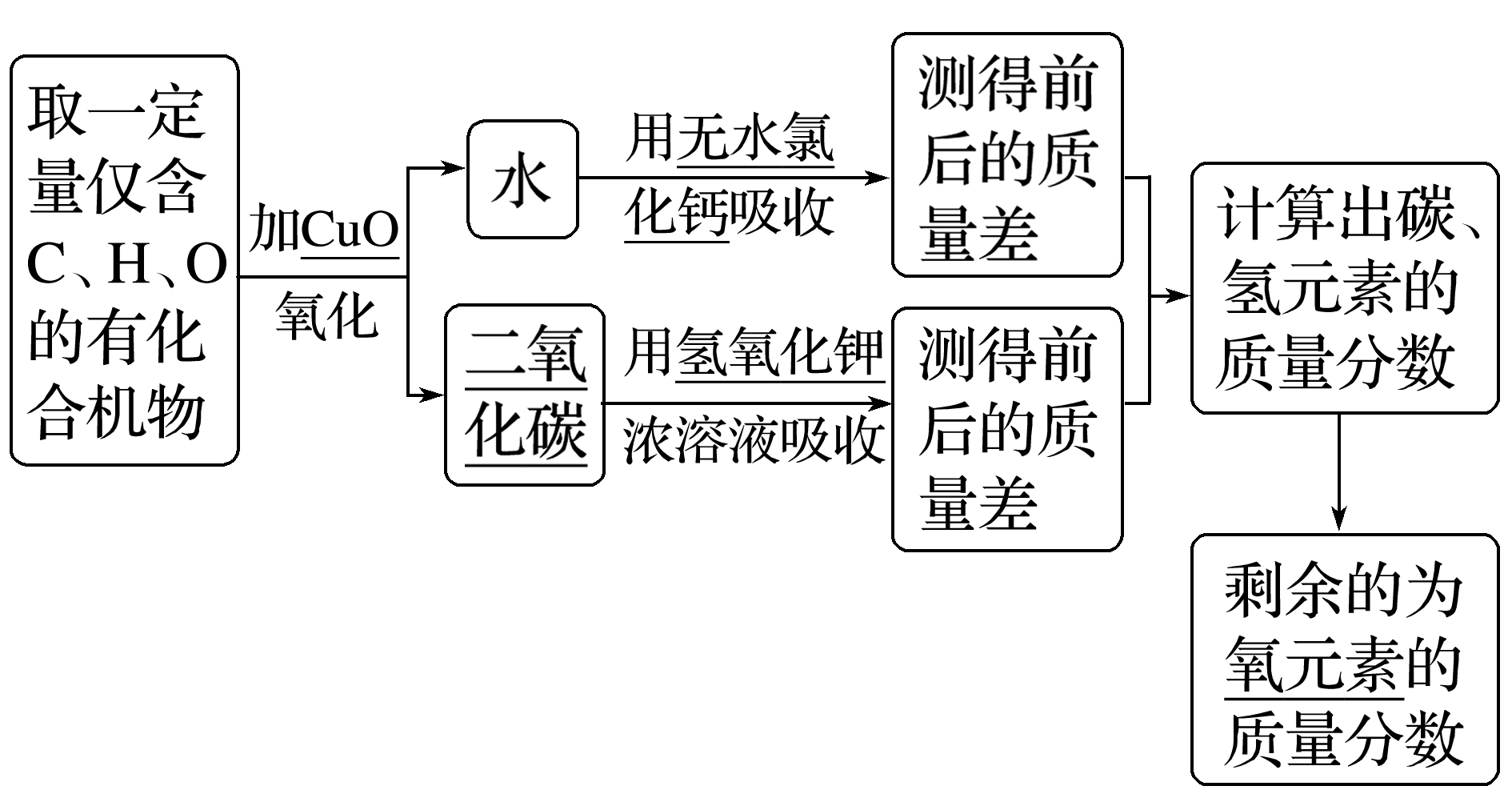
一、确定实验式和分子式

1．确定实验式

(1)原理：将一定量的有机化合物燃烧，转化为简单的无机化合物(如C→CO2，H→H2O)，并通过测定无机物的质量，推算出该有机化合物所含各元素的质量分数，然后计算出该有机化合物分子内各元素原子的最简整数比，确定其实验式(也称最简式)。

(2)元素分析方法

①李比希法



分析思路：C、H、O的质量分数C、H、O的原子个数比实验式。

②现代化的元素分析仪

分析的精确度和分析速度都达到了很高的水平。

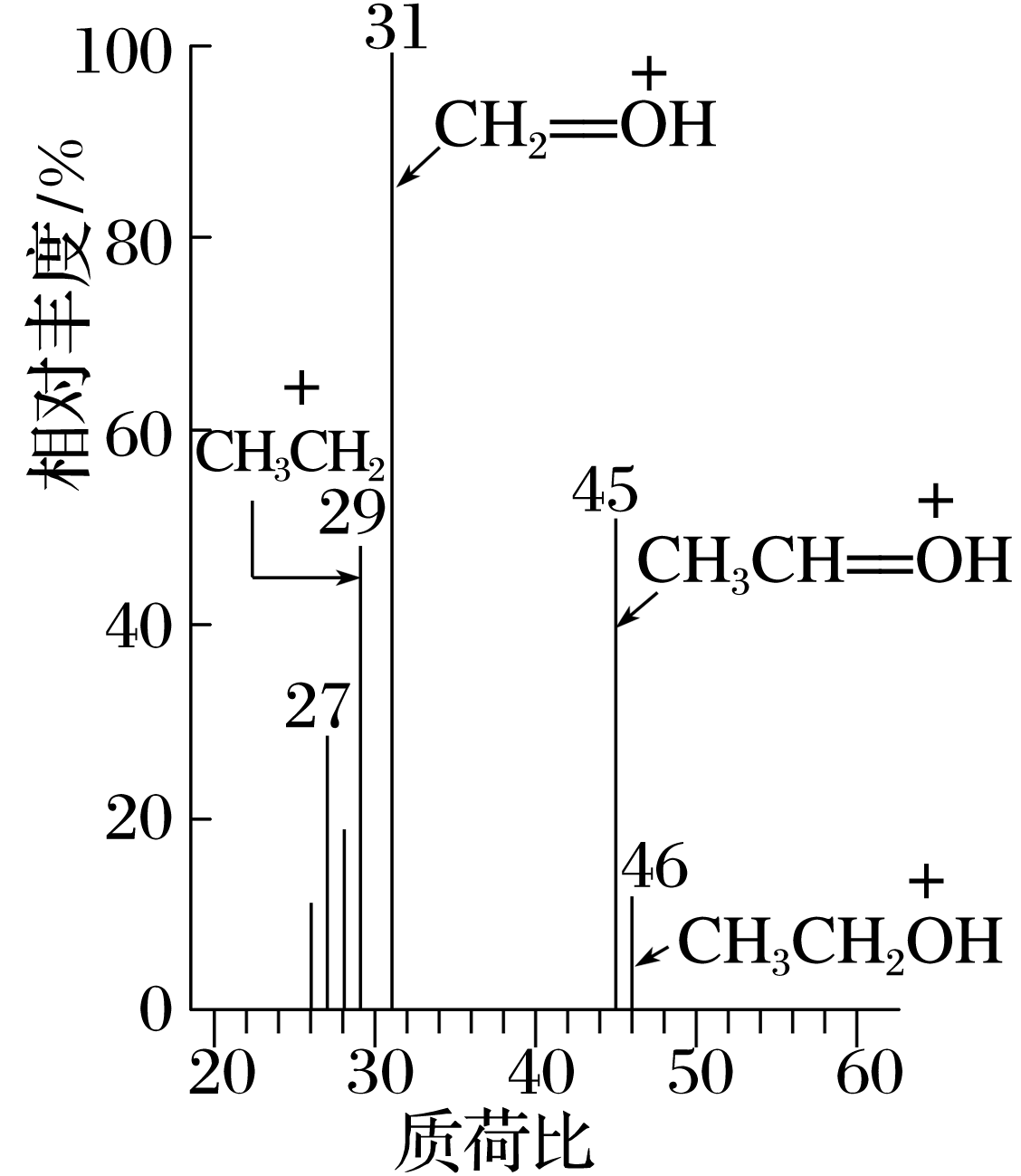
2．确定分子式

(1)质谱法——测定相对分子质量

①原理

质谱仪用高能电子流等轰击样品，使有机分子失去电子，形成带正电荷的分子离子和碎片离子等。这些离子因质量不同、电荷不同，在电场和磁场中的运动行为不同。计算机对其进行分析后，得到它们的相对质量与电荷数的比值，即质荷比。

②质谱图：以质荷比为横坐标，以各类离子的相对丰度为纵坐标，根据记录结果所建立的坐标图。如图为某有机化合物的质谱图：



从图中可知，该有机物的相对分子质量为46，即质荷比最大的数据就是样品分子的相对分子质量。

(2)测定相对分子质量的其他方法

相对分子质量数值上等于摩尔质量(以g·mol－1为单位时)的值。

①标况密度法：已知标准状况下气体的密度*ρ*，求算摩尔质量。

*M*＝*ρ*×22.4 L·mol－1

②相对密度法：根据气体A相对于气体B(已知)的相对密度*d*。

*M*A＝*d*×*M*B

③混合气体平均摩尔质量：＝。

(3)确定分子式

在确定了物质的实验式(最简式)和相对分子质量之后，就可进一步确定其分子式。

计算依据：分子式是实验式的整数倍。

二、常见图谱确定分子结构

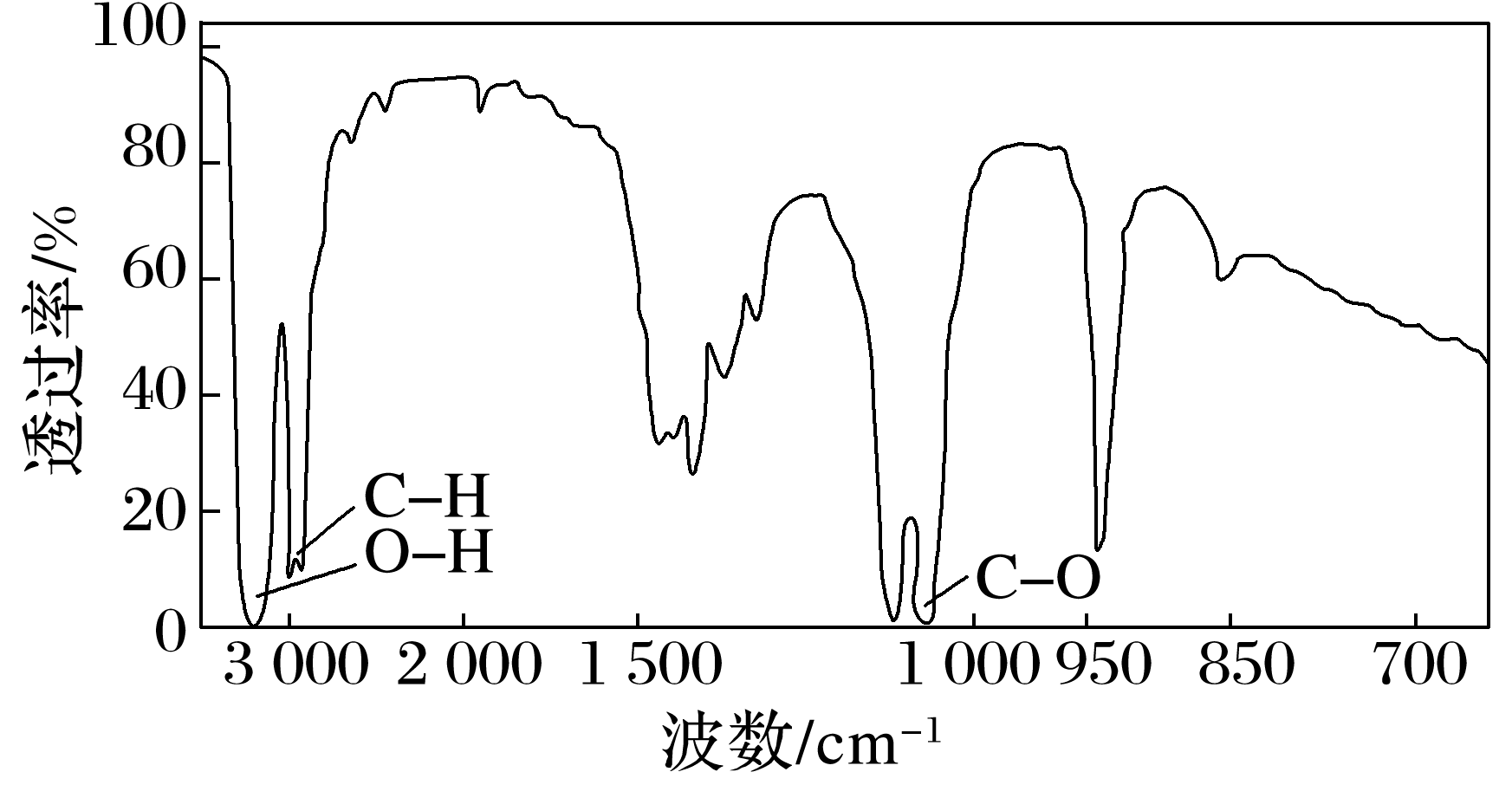
有机化合物中普遍存在同分异构现象，需要借助现代分析仪器确定分子结构。

1．红外光谱

(1)原理

不同的官能团或化学键的吸收频率不同，在红外光谱图上将处于不同的位置。

(2)红外光谱图



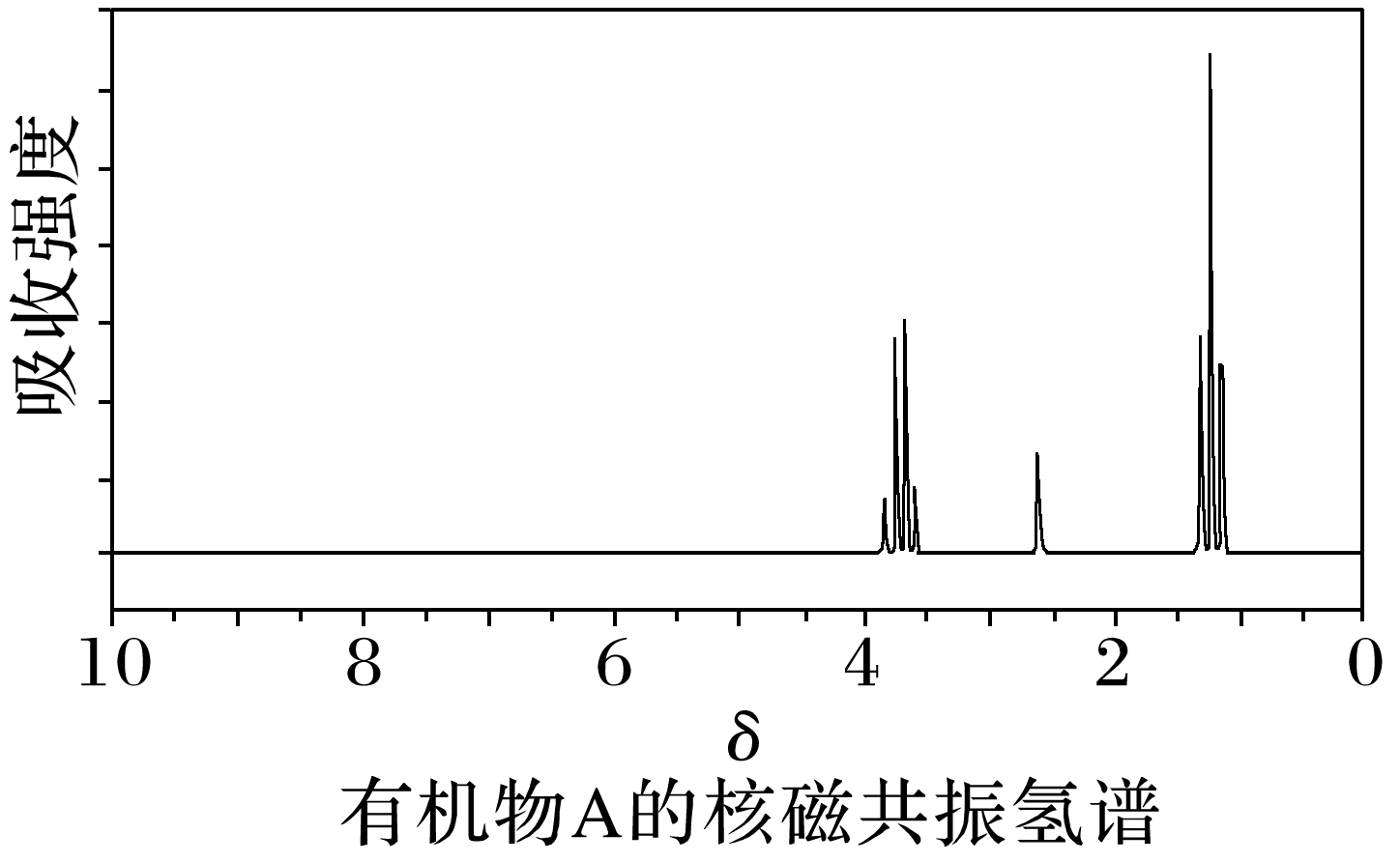
分析红外光谱图，可判断分子中含有的化学键或官能团的信息。如分子式为C2H6O的有机物A有如下两种可能的结构：CH3CH2OH或CH3OCH3，利用红外光谱来测定，分子中有O—H(或—OH)，可确定A的结构简式为CH3CH2OH。

2．核磁共振氢谱

(1)原理

处于不同化学环境中的氢原子因产生共振时吸收电磁波的频率不同，相应的信号在谱图中出现的位置不同，具有不同的化学位移，而且吸收峰的面积与氢原子数成正比，吸收峰的数目等于氢原子的类型。

(2)核磁共振氢谱图



如分子式为C2H6O的有机物A的核磁共振氢谱如图，可知A的分子中有3种处于不同化学环境的氢原子且个数比为3∶2∶1，可推知该有机物的结构简式应为CH3CH2OH。

3．X射线衍射

(1)原理

X射线是一种波长很短的电磁波，它和晶体中的原子相互作用可以产生衍射图。

(2)X射线衍射图

经过计算可获得分子结构的有关数据，如键长、键角等，用于有机化合物晶体结构的测定。

目前，X射线衍射已成为物质结构测定的一种重要技术。