

目录之欧侯瑞魂创作

创作时间：二零二一年六月三十日

第二章：紫外吸收光谱法

一、选择

1. 频率 (MHz) 为 $\times 10^8$ 的辐射, 其波长数值为

- (1) μ (2) μ (3) 670.7cm (4)

2. 紫外-可见光谱的发生是由外层价电子能级跃迁所致, 其能级差的年夜小决定了

- (1) 吸收峰的强度 (2) 吸收峰的数目 (3) 吸收峰的位置 (4) 吸收峰的形状

3. 紫外光谱是带状光谱的原因是由于

- (1) 紫外光能量年夜 (2) 波长短 (3) 电子能级差年夜

(4) 电子能级跃迁的同时陪陪伴振动及转动能级跃迁的原因

4. 化合物中, 下面哪一种跃迁所需的能量最高

- (1) $\sigma \rightarrow \sigma^*$ (2) $\pi \rightarrow \pi^*$ (3) $n \rightarrow \sigma^*$ (4) $n \rightarrow \pi^*$

5. $\pi \rightarrow \pi^*$ 跃迁的吸收峰在下列哪种溶剂中文量, 其最年夜吸收波长最年夜

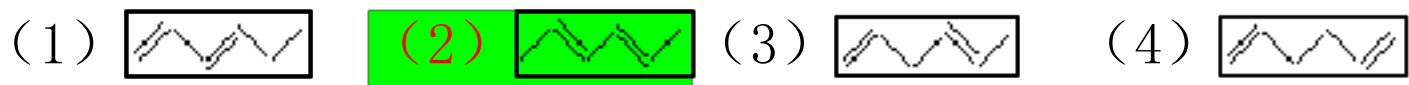
- (1) 水 (2) 甲醇 (3) 乙醇 (4) 正己烷

6. 下列化合物中, 在近紫外区 (200~400nm) 无吸收的是

创作时间：二零二一年六月三十日



7. 下列化合物，紫外吸收 λ_{\max} 值最年夜的是



20. 计算波长为 250nm 400nm 的紫外光频率、波数及其所具有的能量(以 eV 和 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 为单元暗示)。

$\times 10^{15} \text{Hz}, 40 \times 10^3 \text{cm}^{-1}, , \cdot \text{mol}^{-1};$

$\times 10^{15} \text{Hz}, 25 \times 10^3 \text{cm}^{-1}, , \cdot \text{mol}^{-1}$

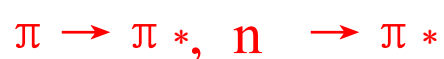
21. 计算具有和能量光束的波长及波数。

$827 \text{nm}, \times 10^3 \text{cm}^{-1}; 200 \text{nm}, 50 \times 10^3 \text{cm}^{-1}$

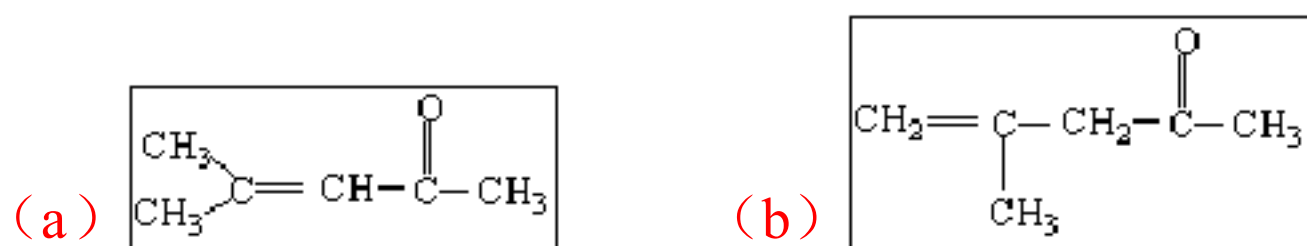
22. 已知丙酮的正己烷溶液有两吸收带，其波长分别为 189nm 和 280nm，分别属 $\pi \rightarrow \pi^*$ 跃迁和 $n \rightarrow \pi^*$ 跃迁，计算 π, n, π^* 轨道之间的能量差。

(1) $152 \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1};$ (2) $102.3 \text{kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$

24. 化合物 A 在紫外区有两个吸收带，用 A 的乙醇溶液测得吸收带波长 $\lambda_1 = 256 \text{nm}$ ， $\lambda_2 = 305 \text{nm}$ ，而用 A 的己烷溶液测得吸收带波长为 $\lambda_1 = 248 \text{nm}$ $\lambda_2 = 323 \text{nm}$ ，这两吸收带分别是何种电子跃迁所发生？A 属哪一类化合物？



25. 异丙叉丙酮可能存在两种异构体，它的紫外吸收光谱显示 (a) 在 $\lambda = 235 \text{nm}$ 有强吸收， $\epsilon \times 10^4$, (b) 在 $\lambda > 220 \text{nm}$ 区域无强吸收，请根据两吸收带数据写出异丙丙酮两种异构体的结构式。



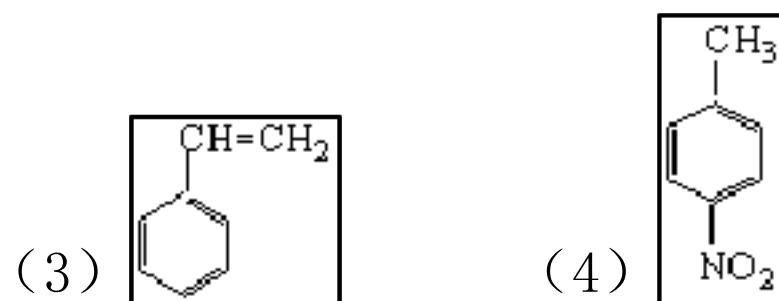
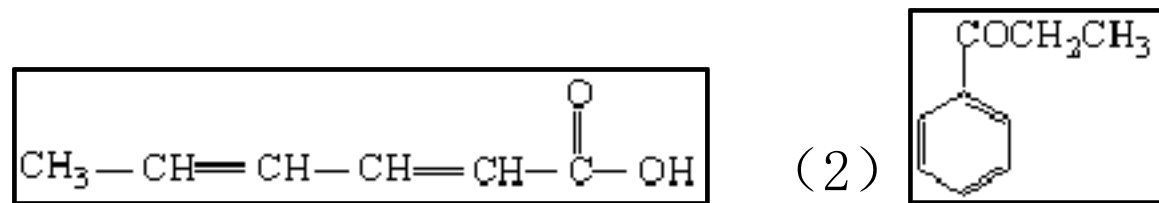
创作时间：二零二一年六月三十日

创作时间：二零二一年六月三十日

26. 某化合物的紫外光谱有 B 吸收带, 还有 $\lambda = 240\text{nm}$, $\epsilon = 13 \times 10^4$ 及 $\lambda = 319\text{nm}$, $\epsilon = 50$ 两个吸收带, 此化合物中含有什么基团? 有何电子跃迁?

B, K, R, 苯环及含杂原子的不饱和基团, $\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$

29. 下列化合物的紫外吸收光谱可能呈现什么吸收带? 并请估计其吸收波长及摩尔吸光系数的范围. (1)

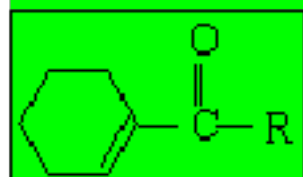


(1) K, R; (2) K, B, R; (3) K, B; (4) K, B, R

30. 化合物 A 和 B 在环己烷中各有两个吸收带, A: $\lambda_1 = 210\text{nm}$, $\epsilon_1 \times 10^4$, $\lambda_2 = 330\text{nm}$, $\epsilon_2 = 37$. B: $\lambda_1 = 190\text{nm}$, $\epsilon_1 \times 10^3$, $\lambda_2 = 280\text{nm}$, $\epsilon_2 = 25$, 判断化合物 A 和 B 各具有什么样结构? 它们的吸收带是由何种跃迁所发生?

(A) $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{COR}$ (B) RCOR

31. 下列 4 种不饱和酮, 已知它们的 $n \rightarrow \pi^*$ 跃迁的 K 吸收带波长分别为 225nm, 237nm, 349nm 和 267nm, 请找出它们对应的化合物.

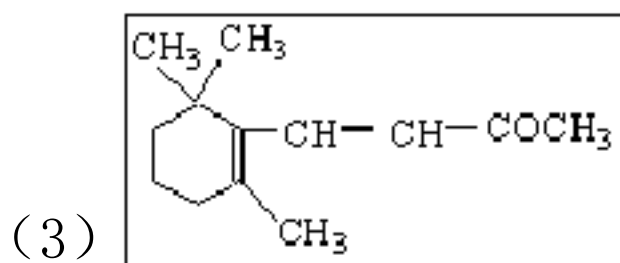
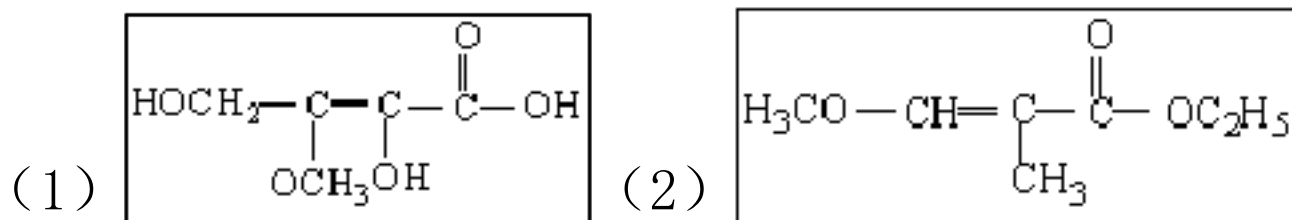


创作时间：二零二一年六月三十日

创作时间：二零二一年六月三十日

(1) 267nm; (2) 225nm; (3) 349nm; (4) 237nm

32. 计算下列化合物在乙醇溶液中的 K 吸收带波长.



(1) 270nm (2) 238nm (3) 299nm

34. 已知化合物的分子式为 $C_7H_{10}O$, 可能具有 α, β 不饱和羰基结构, 其 K 吸收带波长 $\lambda = 257nm$ (乙醇中), 请确定其结构.

35. 对甲胺基苯甲酸在分歧溶剂中吸收带变动如下, 请解释其原因. 在乙醇中 $\lambda = 288nm, \epsilon \times 10^4$ 在乙醚中 $\lambda = 277nm, \epsilon \times 10^4$ 在稀 HCl 中 $\lambda = 230nm, \epsilon \times 10^4$

36. 某化合物的 $\epsilon \times 10^5$, 计算浓度为 $\times 10^{-6} mol \cdot L^{-1}$ 的乙醇溶液的透过率和吸光度 (吸收池厚度 1cm) . .

37. 已知氯苯在 $\lambda = 265nm$ 处的 $\epsilon \times 10^4$, 现用 2cm 吸收池测得氯苯在己烷中的吸光度, 求氯苯的浓度. $\times 10^{-5} mol \cdot L^{-1}$

39. 已知浓度为 $\cdot L^{-1}$ 的咖啡碱 (摩尔质量为 $212g \cdot mol^{-1}$) 在 $\lambda = 272nm$ 处测得吸光度. 为了测定咖啡中咖啡碱的含量, 称取咖啡, 于 500ml 容量瓶中配成酸性溶液, 测得该溶液的吸光度, 求咖啡碱的摩尔吸光系数和咖啡中咖啡碱的含量. $\epsilon \times 10^4, 3.26\%$

40. 用分光光度法测定含乙酰水杨酸和咖啡因两组份的止痛片, 为此称取止痛片溶解于乙醇中, 准确稀释至浓度为 $\cdot L^{-1}$, 分别丈量 $\lambda = 225nm$ 和 $\lambda = 270nm$ 处的吸光度, 得 A_1, A_2 , 计算止痛片中乙酰水杨酸和咖啡因的含量. (乙酰水杨酸 $\epsilon_{225}^1 = 8210, \epsilon_{270}^1 = 1090$, 咖啡因 $\epsilon_{225}^2 = 5510, \epsilon_{270}^2 = 8790$. 摩尔质量: 乙酰水杨酸为 $180g \cdot mol^{-1}$, 咖啡因为 $194g \cdot mol^{-1}$). 乙酰水杨酸 83.5%, 咖啡因 6.7%

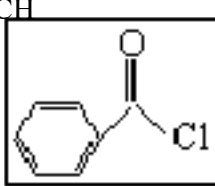
创作时间：二零二一年六月三十日

第三章

红外吸收光谱法

一、选择题

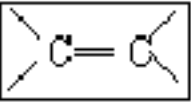
1. CH_3-CH_3 的哪种振动形式是非红外活性的
 (1) $\nu_{\text{C-C}}$ (2) $\nu_{\text{C-H}}$ (3) $\delta_{\text{CH}}^{\text{as}}$ (4) $\delta_{\text{CH}}^{\text{s}}$

2.  化合物中只有一个羰基，却在 1773cm^{-1} 和 1736cm^{-1} 处呈现两个吸收峰，这是因为

- (1) 诱导效应 (2) 共轭效应 (3) 费米共振 (4) 空间位阻

3. 一种能作为色散型红外光谱仪的色散元件资料为
 (1) 玻璃 (2) 石英 (3) 红宝石 (4) 卤化物晶体

4. 预测 HS_2 分子的基频峰数为
 (1) 4 (2) 3 (3) 2 (4) 1

5. 下列官能团在红外光谱中吸收峰频率最高的是
 (1)  (2) $-\text{C}\equiv\text{C}-$ (3)  (4) $-\text{O}-\text{H}$

二、解答及解析题

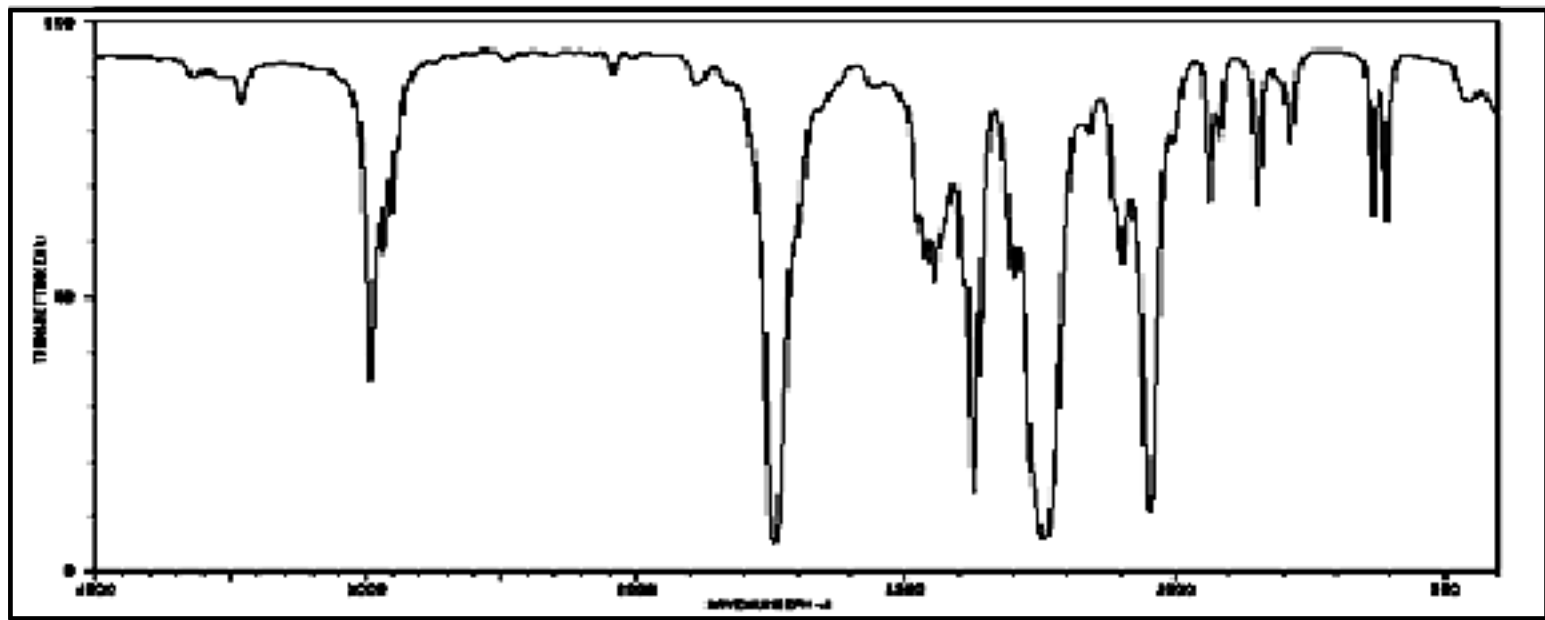
3. 红外吸收光谱图横坐标、纵坐标各以什么标度？
 纵坐标 吸收强度 横坐标 波长

16. 一种能作为色散型红外光谱仪色散元件资料为：(1) 玻璃；(2) 石英；(3) 红宝石；(4) 卤化物晶体

20. 某一液体化合物，分子量为 113，其红外光谱见下图.NMR在 δ ppm (3H) 有三重峰， δ (2H) 有单峰， δ (2H) 有四重峰，试推断该化合物的结构. $\text{CHOOC}-\text{CH}_2\text{CN}$

21. 下图为分子式 $\text{CH}_6\text{O}_5\text{N}$ 的红外光谱，写出预测的结构.

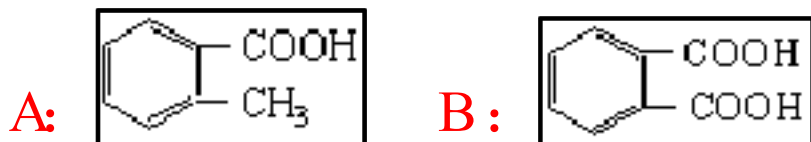
27. 有一种液体化合物，其红外光谱见下图，已知它的分子式为 CHO ，沸点 77°C ，试推断其结构.



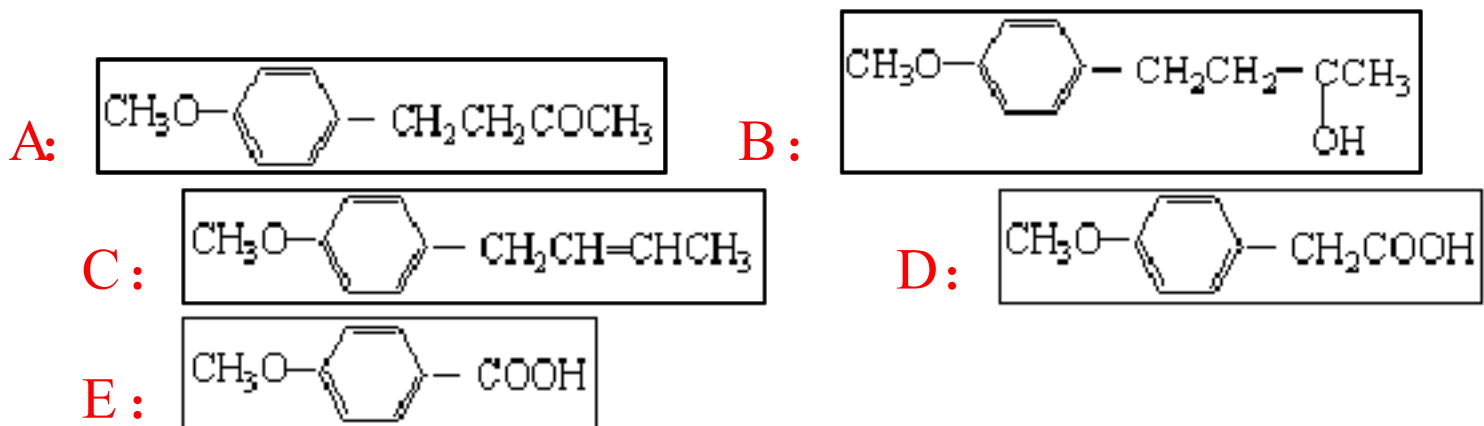
CHC₃

OOCH₂⁵

28. 一个具有中和当量为 136 ± 1 的酸 A, 不含 X、N、S. A 不能使冷的高锰酸钾溶液褪色, 但此化合物的碱性溶液和高锰酸钾试剂加热 1 小时后, 然后酸化, 即有一个新化合物 (B) 沉淀而出. 此化合物的中和当量为 83 ± 1 , 其红外光谱见下图, 紫外吸收峰 λ_{max} 甲醇 = 256nm, 问 A 为何物?



29. 不溶于水的中性化合物 A ($\text{C}_{11}\text{H}_{14}\text{O}_2$), A 与乙酰氯不反应, 但能与热氢碘酸作用. A 与次碘酸钠溶液作用生成黄色沉淀. A 经催化加氢得化合物 B ($\text{C}_{11}\text{H}_{16}\text{O}_2$), 而 B 在 Al_2O_3 存在下经加热反应得主要产物 C ($\text{C}_{11}\text{H}_{14}\text{O}$). 小心氧化 C 得碱性化合物 D ($\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_3$). 将上述的任一种化合物经强烈氧化可生成化合物 E, 中和当量为 152 ± 1 , 红外光谱如下图所示. 试推断 A 的结构.



30. 一个化合物分子式为 $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$, 已知含一个酯羰基和一个乙烯基. 用溶液法制作该化合物的红外光谱有如下特征谱带: 3090cm^{-1} (强), 1765cm^{-1} (强), 1649cm^{-1} (强), 1225cm^{-1} (强). 请指出这些吸收带的归属, 并写出可能的结构式. $\text{CH}_3\text{COOCH}=\text{CH}_2$

第四章

NMR习题

一、选择题

1. 若外加磁场的强度 H_0 逐渐加年夜时, 则使原子核自旋能级的低能态跃迁到高能态所需的能量如何变动?

创作时间：二零二一年六月三十日

(1) 不变 (2) 逐渐变年夜 (3) 逐渐变小 (4) 随原核而变

2. 下列哪种核不适宜核磁共振测定

(1) ^{12}C (2) ^{15}N (3) ^{19}F (4) ^{31}P

3. 下列化合物中哪些质子属于磁等价核

(1) $\text{H}_a\text{HC}=\text{CF}_b$ (2) CH_aHF_b (3) $\text{R}-\text{CO}-\text{NH}_a\text{H}_b$ (4)



4. 苯环上哪种取代基存在时，其芳环质子化学位移最年夜

(1) $-\text{CH}_2\text{CH}_3$ (2) $-\text{OCH}_3$ (3) $-\text{CH}=\text{CH}_2$ (4) $-\text{CHO}$

5. 质子的化学位移有如下顺序：苯() > 乙烯() > 乙炔() > 乙烷()，其原因是

(1) 导效应所致 (2) 杂化效应和各向异性效应协同作用的结果
(3) 向异性效应所致 (4) 杂化效应所致

6. 在通常情况下， $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$ 在核磁共振谱图中将呈现几组吸收峰

(1) 3 (2) 4 (3) 5 (4) 6

7. 化合物 $\text{Ph}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CO}-\text{CH}_3$ 中的两个亚甲基属于何种自旋体系

(1) AX_{22} (2) AB_{22} (3) AX (4) AB

8. 3 个分歧的质子 H_a 、 H_b 、 H_c ，其屏蔽常数的年夜小为 $\sigma_b > \sigma_a > \sigma_c$ ，则它们的化学位移如何？

(1) $\delta_a > \delta_b > \delta_c$ (2) $\delta_b > \delta_a > \delta_c$ (3) $\delta_c > \delta_a > \delta_b$
(4) $\delta_c > \delta_b > \delta_a$

9. 一化合物经元素分析 $\text{C}: 88.2\%$, $\text{H}: 11.8\%$ ，它们的 $^1\text{H NMR}$ 谱只有一个峰，它们可能的结构是下列中的哪个？ 1

10. 下列化合物中，甲基质子化学位移最年夜的是

(1) CH_3CH_3 (2) $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$ (3) $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CH}$ (4)



11. 确定碳的相对数目时，应测定

(1) 全去偶谱 (2) 偏共振去偶谱 (3) 门控去偶谱 (4) 反门控去偶谱

创作时间：二零二一年六月三十日

12. $^1J_{CH}$ 的数值小与该碳杂化轨道中 S 成份
 (1) 成反比 (2) 成正比 (3) 变动无规律 (4) 无关
13. 下列化合物中羰基碳化学位移 δ_c 最大的是
 (1) 酮 (2) 醛 (3) 羧酸 (4) 酯
14. 下列哪种谱可以通过 J_{CC} 来确定分子中 C—C 连接关系
 (1) COSY (2) INADEQUATE (3) HETCOR (4) COLOC
15. 在四谱综合解析过程中，确定苯环取代基的位置，最有效的方法是
 (1) 紫外和核磁 (2) 质谱和红外 (3) 红外和核磁 (4) 质谱和核磁

二、解答及解析题

12. 一化合物分子式为 C_6H_7NO ，其 1H 谱如图 4-1，赔偿扫描信号经重水交换后消失，试推断化合物的结构式. 12.

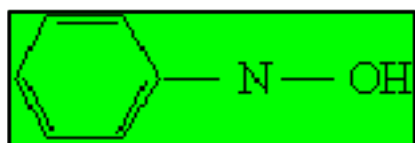


图 4-1 C_6H_7NO 的 1H -NMR 谱图

13. 某化合物 $C_6H_{12}Cl_2O_2$ 的 1H 谱如下图 4-2 所示，试推断化合物结构式.

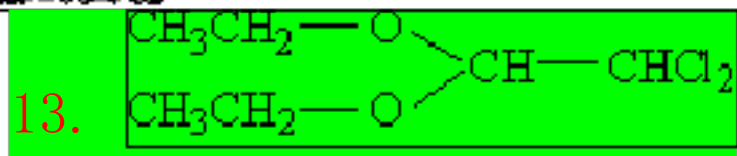
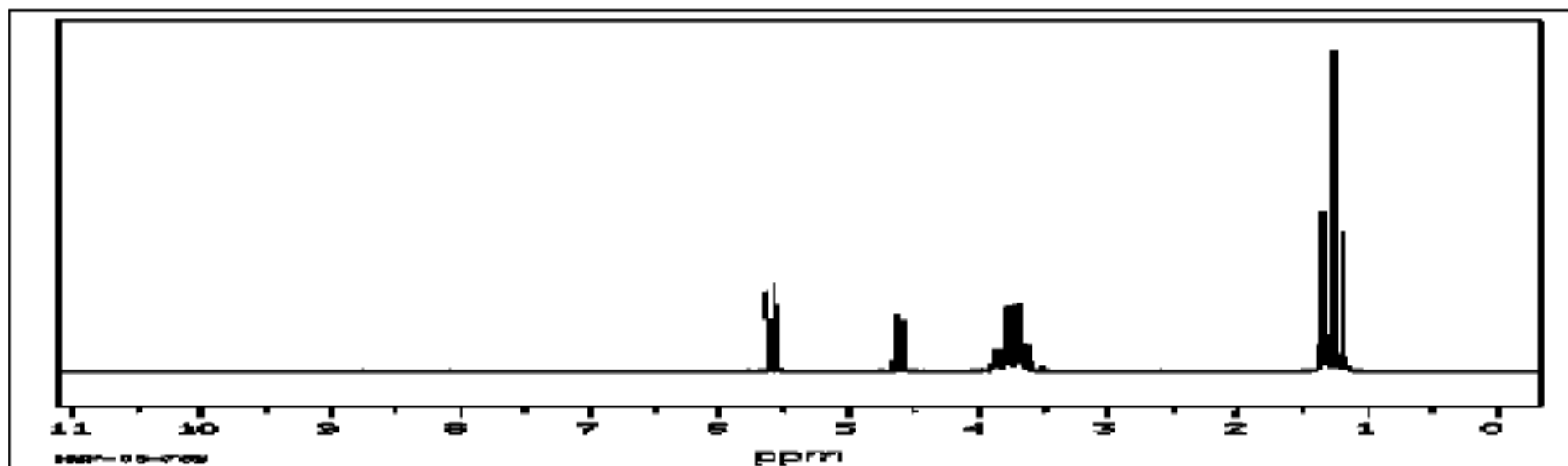


图 4-2

14. 根据核磁共振图 (图 4-3)，推测 C_8H_9Br 的结构.

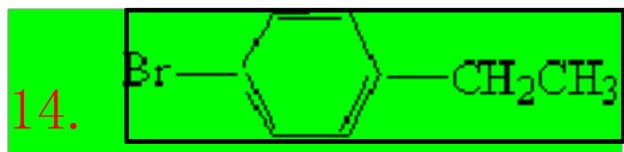
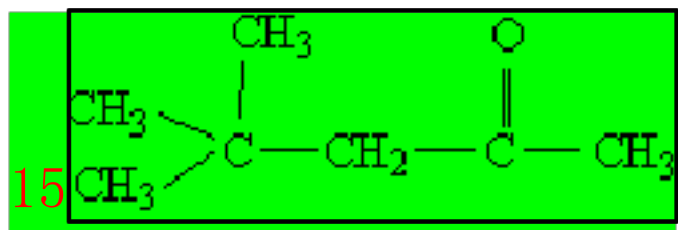


图 4-3 C H Br 的 ¹H-NMR 谱图

15. 由核磁共振图 (图 4-4), 推断 $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$ 的结构.

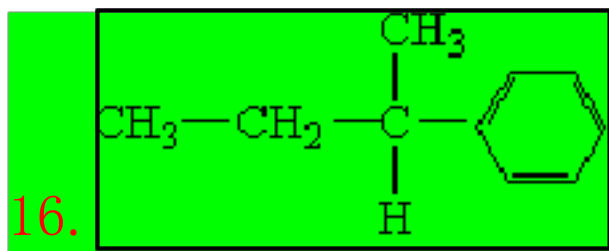
图 4-4 $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$ 的 ¹H-NMR 谱图

的 ¹H-NMR 谱图



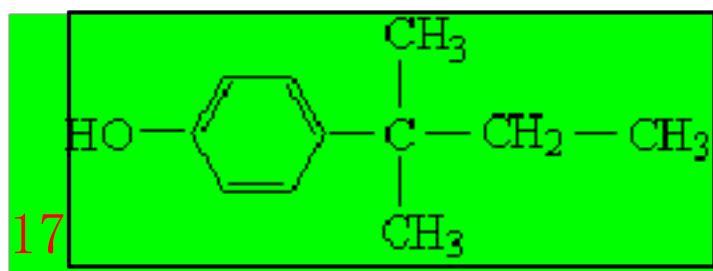
16. 由核磁共振图 (图 4-5), 推断 $\text{C}_{10}\text{H}_{14}$ 的结构.

图 4-5 $\text{C}_{10}\text{H}_{14}$ 的 ¹H-NMR 谱图



17. 由核磁共振图 (图 4-6), 推断 $\text{C}_{11}\text{H}_{16}\text{O}$ 的结构.

图 4-6 $\text{C}_{11}\text{H}_{16}\text{O}$ 的 ¹H-NMR 谱图



18. 由核磁共振图 (图 4-7), 推断 $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2$ 的结

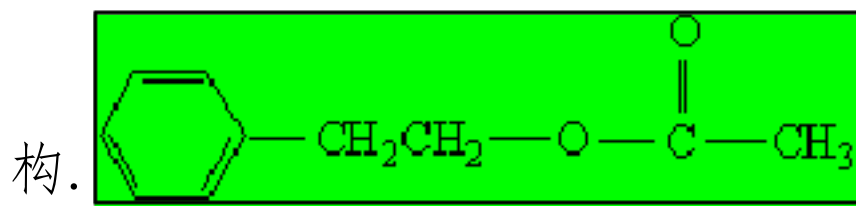


图 4-7 $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2$ 的 ¹H-NMR 谱图

19. 由核磁共振图 (图 4-8), 推断 $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$ 的结

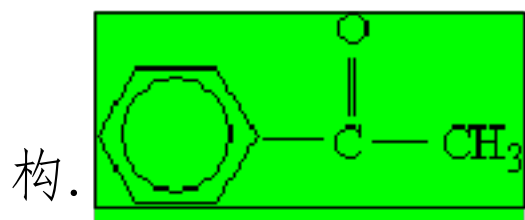


图 4-8 $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$ 的 ¹H-NMR 谱图

20. 某未知物分子式 $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{O}$, 其红外光谱在 3300cm^{-1} 附近是宽吸收带, 在 1050cm^{-1} 有强吸收, 其核磁图如图 4-9 所示, 试确定该化合物的结构. $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_2\text{OH}$

图 4-9 $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{O}$ 的 ¹H-NMR 谱图

1. 在质谱仪中当收集正离子的狭缝位置和加速电压固按时，若逐渐增加磁场强度 H ，对具有分歧质荷比的正离子，其通过狭缝的顺序如何变动？

- (1) 从年夜到小 (2) 从小到年夜 (3) 无规律 (4) 不变

2. 含奇数个氮原子有机化合物，其分子离子的质荷比值为

- (1) 偶数 (2) 奇数 (3) 分歧定 (4) 决定于电子数

3. 二溴乙烷质谱的分子离子峰 M 与 $M+2$ $M+4$ 的相对强度为

- (1) 1 : 1 : 1 (2) 2 : 1 : 1 (3) 1 : 2 : 1 (4) 1 : 1 : 2

4. 在丁酮质谱中，质荷比为 29 的碎片离子是发生了

- (1) α -裂解 (2) I-裂解 (3) 重排裂解 (4) γ -H 迁移

5. 在通常的质谱条件下，下列哪个碎片峰不成能呈现

- (1) $M+2$ (2) $M-2$ (3) $M-8$ (4) $M-18$

二、解答及解析题

1. 样品分子在质谱仪中发生的断裂过程，会形成具有单元正电荷而质荷比 (m/z) 分歧的正离子，当其通过磁场时的动量如何随质荷比的分歧而改变？其在磁场的偏转度如何随质荷比的分歧而改变

m/z 值愈年夜，动量也愈年夜； m/z 值愈年夜，偏转度愈小。

2. 带有电荷为 e 、质量为 m 的正离子，在加速电场中被电位 V 所加速，其速度达 v ，若离子的位能 (eV) 与动能 ($mv^2/2$) 相等，当电位 V 增加两倍时，此离子的运动速度 v 增加几多倍？

$$eV = \frac{1}{2}mv^2 \quad v = \sqrt{\frac{2eV}{m}}, v \text{ 增加一倍.}$$

3. 在双聚焦质谱仪中，质量为 m ，电荷为 e 、速度为 v 的正离子由离子源进入电位为 E 的静电场后，由于受电场作用而发生偏转. 为实现能量聚焦，要使离子坚持在半径为 R 的径向轨道中运动，此时的 R 值受哪些因素影响？

$$eV = \frac{mv^2}{R}, \quad R = \frac{mv^2}{eE}$$

在双聚焦质谱仪中，质量为 m ，电荷为 e 、速度为 v 的正离子由电场进入强度为 H 的磁场后，受磁场作用，再次发生偏转，偏转的半径为 r ，此时离子受的向心力 (Hev) 和离心力 (mv^2/R) 相等，此时离子受的质荷比受哪些因素影响？

4. $Hev = \frac{mv^2}{r}$, $m/e(m/z) = \frac{Hr}{v} = \frac{H^2 r^2}{2V}$

5. 在质谱仪中当收集正离子的狭缝位置和加速电压 V 固按时，若逐渐增年夜磁场强度 H ，对具有分歧荷比的正离子，其通过狭缝的顺序如何确定？

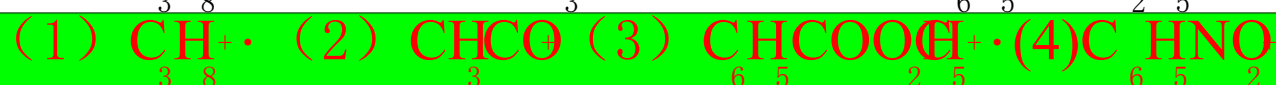
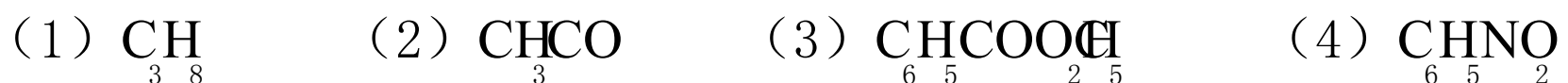
6. $m/e(m/z) = \frac{H^2 r^2}{2V}$ ，因 r 和 V 为定值， m/z 比值小的首先通过狭缝

6. 在质谱仪中当收集正离子的狭缝位置和磁场强度 H 固按时，若把加速电压 V 值逐渐加年夜，对具有分歧质荷比的正离子，其通过狭缝的顺序如何确定？

6. $m/e(m/z) = \frac{H^2 r^2}{2V}$ ，因 r 和 H 为定值， m/z 比值年夜的首先通过狭缝

7. 在有机质谱中使用的离子源有哪几种？各有何特点？

8. 试确定具有下述分子式的化合物，其形成的分子离子具有偶数电子还是奇数电子？



9. 试确定下述已知质荷比离子的可能存在的化学式：

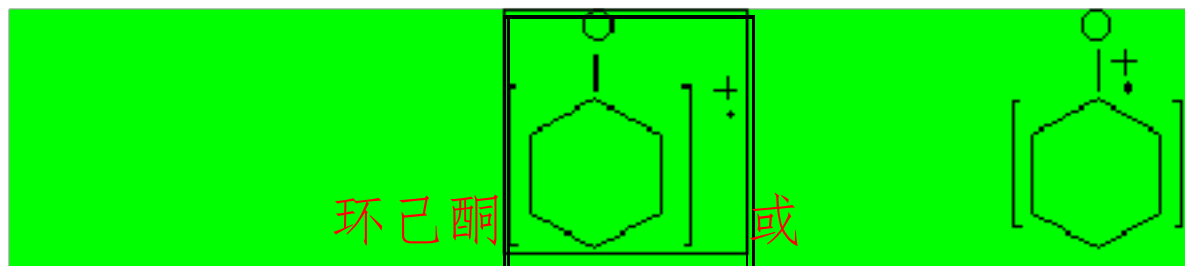
- (1) m/z 为 71，只含 C、H、O 三种元素
- (2) m/z 为 57，只含 C、H、N 三种元素
- (3) m/z 为 58，只含 C、H 两种元素



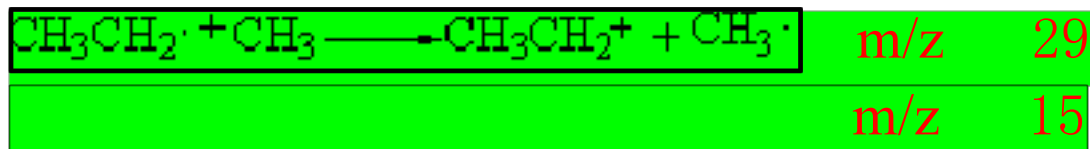
10. 试写出苯和环己烯的分子离子式。



11. 写出环己酮和甲基乙烯醚的分子离子式。



12. 写出丙烷分子离子的碎裂过程，生成的碎片是何种正离子，其 m/z 是几多？



13. 试解释溴乙烷质谱图中 m/z 分别为 29、93、95 三峰生成的原因？

14. 有一化合物其分子离子的 m/z 为 120，其碎片离子的 m/z

为 105，问其亚稳离子的 m/z 是几多？

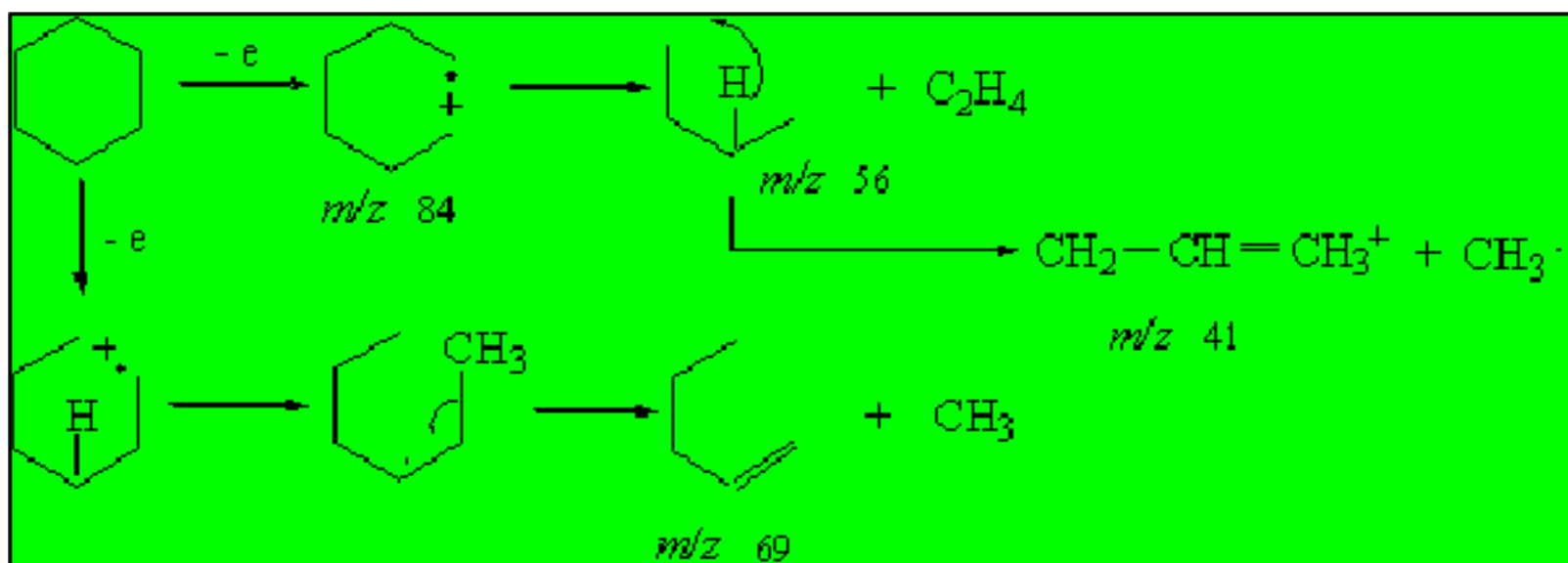
$$m/z^* = \frac{(m_2)^2}{m_1} = \frac{(105)^2}{120} = 91.9$$

16. 下述断裂过程： 所发生的亚稳

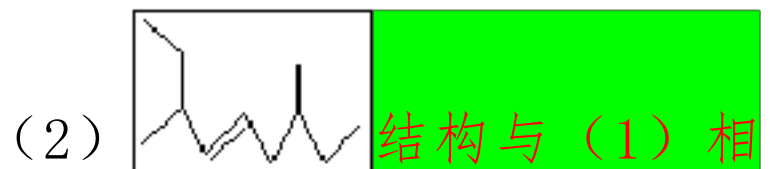
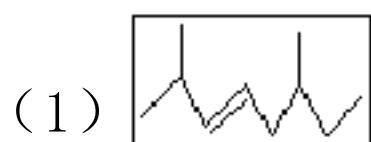
离子，其 m/z 是几多？ $m_1 = 105, m_2 = 77,$

$$m/z^* = \frac{(m_2)^2}{m_1} = \frac{(77)^2}{105} = 56.5$$

17. 试解释环己烷质谱图中发生 m/z 分别为 84、69、56、41 离子峰的原因？

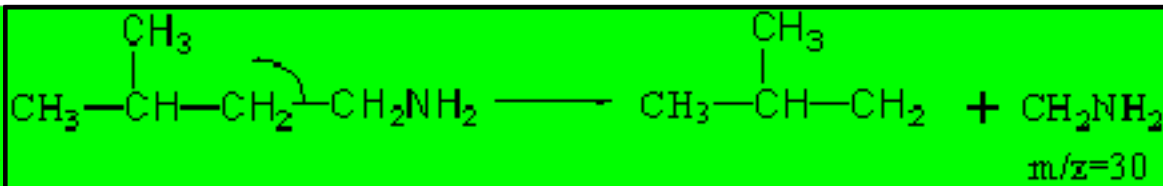


18. 某有机化合物 ($M=140$) 其质谱图中有 m/z 分别为 83 和 57 的离子峰，试问下述哪种结构式与上述质谱数据相符合？



19. 某有机胺可能是 3-甲基丁胺或 1, 1-二甲基丙胺，在质谱图中其分子离子峰和基峰的 m/z 分别为 87 和 30，试判断其为哪种有机胺？

3-甲基丁胺



20. 某有机物可能是乙基正丁基醚或甲基正戊基醚，其质谱图上呈现离子峰的 m/z 分别为 102、87、73、59、31，试确定其为何物？

其为乙基正丁基醚, m/z 102 为分子离子峰

21. 在碘乙烷的质谱图中呈现 m/z 分别为 156、127、29 的离子峰，试说明其形成的机理

m/z 156 为 CH_2CHI 的分子离子峰

22. 在丁酸甲酯的质谱图中呈现 m/z 分别为 102、71、59、43、31 的离子峰，试说明其碎裂的过程。

m/z 102 为丁酸甲酯的分子离子峰

(1)

(2)

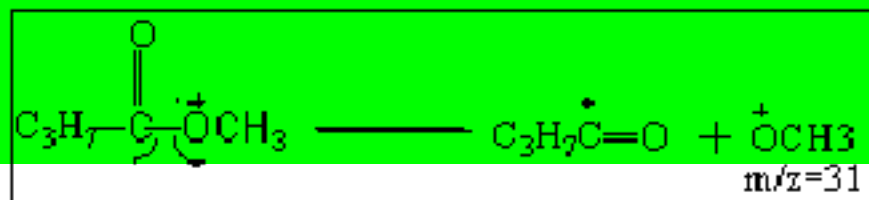
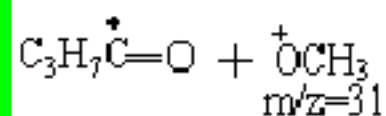
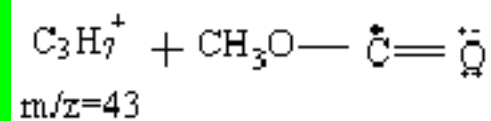
(3)

(4)

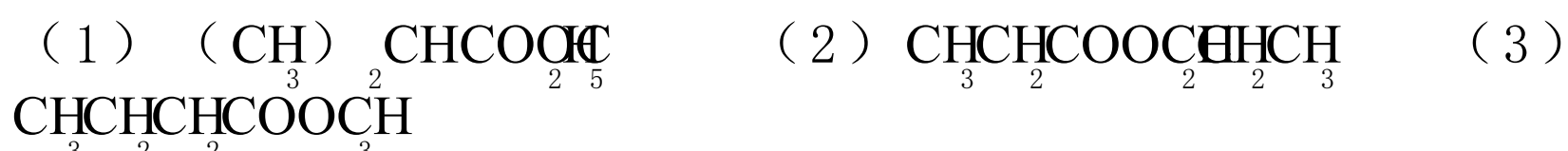
(5)

(6)

(7)



某酯 (M=116) 的质谱图上呈现 m/z (丰度) 分别为 57 (100%)、43 (27%) 和 29 (57%) 的离子峰, 试确定其为下述酯中的哪一种.



为 (2) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

由于 α 开裂生成: $\text{C}_2\text{H}_5\text{C}\equiv\text{O}^+$ m/z57; $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^+$ m/z43; $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO}^+$ m/z29

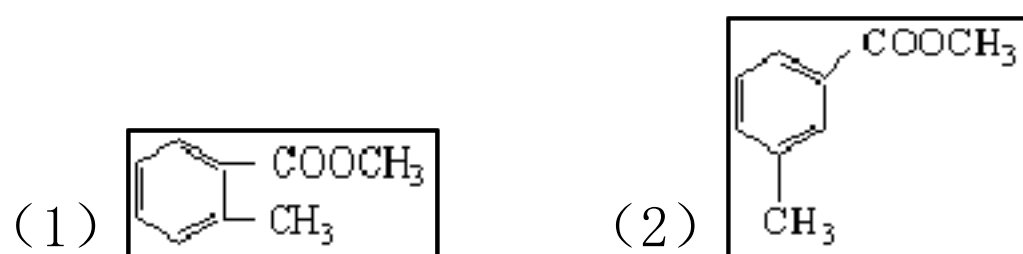
24. 某化合物 (M=138) 的质谱图中呈现 m/z 为 120 的强离子峰, 试判断

其为下述两种化合物中的哪一种?



为 (1)

25. 某酯 (M=150) 的质谱图中呈现 m/z 为 118 的碎片峰, 试判断其为下述两种化合物中的哪一种?



为 (1)

(1)
(2)

26. 已知某取代苯的质谱图如下图所示, 试确定下述 4 种化合物的哪一种结构与谱图数据相一致? (主要考虑 m/z 分别为 119, 105 和 77 的离子峰)



结构 (4) 与谱图相一致

m/z119 相当于苊基离子开裂失去 CH_2

m/z105 相当于苊基离子开裂失去 CH_3

m/z77 为乙烯基开裂后的产物 $\text{CH}_2=\text{CH}^+$

27. 说明由三乙胺 (M=101) 的 α 、 β 开裂生成 m/z 为 86 的离子峰及随后又进行 H 重排并开裂生成 m/z 为 58 的离子峰的过程机理.

(1)

(2)

28、某未知烃类化合物的质谱如下图所示，写出其结构式。

为 3-甲基戊烷： $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$

29、某未知烃类化合物的质谱如下图所示，写出其结构式并说明谱图的主要特点。

29. 为 3-苯基丙烯： $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{C}_6\text{H}_5$

30. 某未知烃类化合物的质谱如下图所示，写出其结构式并说明谱图的主要特点。

30. 为 苯乙炔： $\text{C}_6\text{H}_5\text{C}\equiv\text{CH}$

31. 某未知仲胺化合物的质谱如下图所示，试写出其结构式。

31. 为 N-甲基苄基胺： $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{NHCH}_3$

32. 某含氮化合物质谱如下图所示，写出其结构式，并说明 m/z 为 77 基峰生成的原因。

32. 为 硝基苯： $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ ，m/z 77 为 $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5^+ + \text{NO}_2^-$

波谱分析试卷 A

一、选择题：每题 1 分，共 20 分

1、波长为 10^6 的辐射，其频率 (MHz) 数值为 ()

- A、 $\times 10^8$ B、 $\times 10^7$ C、 $\times 10^6$
D、 $\times 10^{10}$

2、紫外光谱的发生是由电子能级跃迁所致，能级差的年夜小决定了 ()

- A、吸收峰的强度 B、吸收峰的数目 C、
吸收峰的位置 D、吸收峰的形状

3、紫外光谱是带状光谱的原因是由于 ()

- A、紫外光能量年夜
B、波长短
C、电子能级跃迁的同时陪陪伴振动及转动能级跃迁的原因
D、电子能级差年夜

创作时间：二零二一年六月三十日

4、化合物中，下面哪一种跃迁所需的能量最高？（ ）

A、 $\sigma \rightarrow \sigma^*$ B、 $\pi \rightarrow \pi^*$ C、 $n \rightarrow \sigma^*$ D、 $n \rightarrow \pi^*$


5、 $n \rightarrow \pi^*$ 跃迁的吸收峰在下列哪种溶剂中丈量，其最年夜吸收波长最年夜。（ ）

A、水 B、甲醇 C、乙醇 D、正已

烷

6、 $\text{CH}_3\text{-CH}_3$ 的哪种振动形式是非红外活性的。（ ）

A、 $\nu_{\text{C-C}}$ B、 $\nu_{\text{C-H}}$ C、 $\delta_{\text{as CH}}$ D、 $\delta_{\text{s CH}}$

7、化合物中只有一个羰基，却在 1773cm^{-1} 和 1736cm^{-1} 处呈现两个吸收峰，这是因为：

() A、诱导效应 B、共轭效应 C、费米共振 D、空间位阻

8、一种能作为色散型红外光谱仪的色散元件资料为：（ ）

A、玻璃 B、石英 C、红宝石 D、卤化物结体

9、预测 HS_2 分子的基频峰数为：（ ）

A、4 B、3 C、2 D、1

10、若外加磁场的强度 H_0 逐渐加年夜时，则使原子核自旋能级的低能态跃迁到高能态所需的能量是如何变动的？（ ）

A、不变 B、逐渐变年夜 C、逐渐变小 D、随原核而变

创作时间：二零二一年六月三十日

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/988062112132006077>