

第2课时 有机化合物分子式和分子结构的确定

[核心素养发展目标] 1.学会测定有机化合物元素含量、相对分子质量的一般方法，并能据此确定有机化合物的分子式。2.能够根据化学分析和波谱分析确定有机化合物的结构。

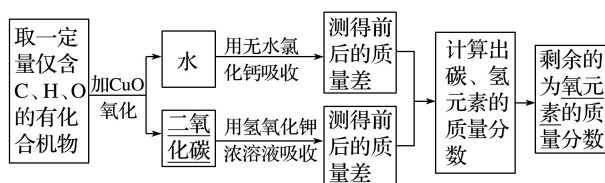
一、确定实验式和分子式

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 $C \rightarrow CO_2$, $H \rightarrow H_2O$)，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 $\xrightarrow{\div \text{摩尔质量}}$ C、H、O 的原子个数比 $\xrightarrow{\text{最简比}}$ 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很高的水平。

2. 确定分子式

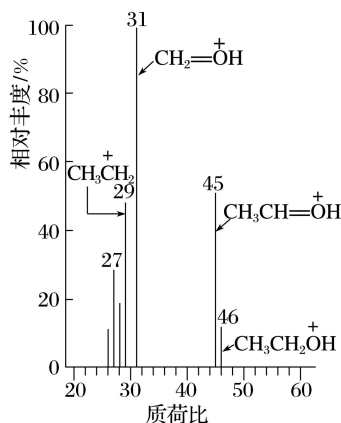
(1)质谱法

质谱法是快速、精确测定相对分子质量的重要方法。

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)其他方法

相对分子质量数值上等于摩尔质量(以 $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ 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。

$$M = \rho \times 22.4 \text{ L}\cdot\text{mol}^{-1}$$

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 。

$$M_A = d \times M_B。$$

③混合气体平均摩尔质量：
$$\overline{M} = \frac{m_{\text{总}}}{n_{\text{总}}}$$

【正误判断】

- (1)验证有机物属于烃时只需测定产物中的 CO_2 和 H_2O 的物质的量之比()
- (2)有机物燃烧后只生成 CO_2 和 H_2O 的物质不一定只含有碳、氢两种元素()
- (3)有机物的实验式、分子式一定不同()
- (4)元素分析法和质谱法能分别确定有机物的实验式和相对分子质量()
- (5)质谱图中最右边的谱线表示的数值为该有机物的相对分子质量()

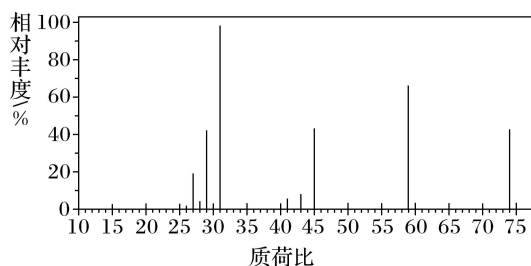
答案 (1)× (2)√ (3)× (4)√ (5)√

【理解应用】

1. 某有机物的结构确定：

(1)测定实验式：某含 C、H、O 三种元素的有机物，经燃烧分析实验测定其碳的质量分数是 64.86%，氢的质量分数是 13.51%，则其实验式是_____。

(2)确定分子式：如图是该有机物的质谱图，则其相对分子质量为_____；分子式为_____。



答案 (1)C₄H₁₀O (2)74 C₄H₁₀O

解析 (1)该物质中碳、氢、氧原子个数之比为 $\frac{64.86\%}{12} : \frac{13.51\%}{1} : \frac{21.63\%}{16} \approx 4 : 10 : 1$, 其实验式为 C₄H₁₀O。

(2)由质谱图知其相对分子质量为 74, 而其实验式的相对分子质量为 $12 \times 4 + 1 \times 10 + 16 = 74$, 故其分子式为 C₄H₁₀O。

2. 某烃 A 蒸气的密度是相同状况下氢气密度的 36 倍, 已知该烃中的碳、氢元素质量比为 5 : 1, 则:

(1)该烃的相对分子质量为_____。

(2)确定该烃的分子式为_____。

(3)该烃的同分异构体有_____种。

答案 (1)72 (2)C₅H₁₂ (3)3

解析 (1)已知烃 A 蒸气的密度是相同状况下氢气密度的 36 倍, 则烃 A 的摩尔质量为 $36 \times 2 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 72 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 所以该烃的相对分子质量为 72。

(2)已知烃 A 分子中碳、氢元素的质量比为 5 : 1, 1 mol 烃 A 的质量为 72 g, 则 1 mol 烃 A 分子中含 C 原子的物质的量为 $\frac{\frac{5}{6} \times 72 \text{ g}}{12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 5 \text{ mol}$, 含 H 原子的物质的量为 $\frac{\frac{1}{6} \times 72 \text{ g}}{1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 12 \text{ mol}$,

则烃 A 的分子式为 C₅H₁₂。

(3)根据戊烷的组成, 其可能的同分异构体有 CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃、CH₃CH(CH₃)CH₂CH₃ 和 C(CH₃)₄ 3 种。

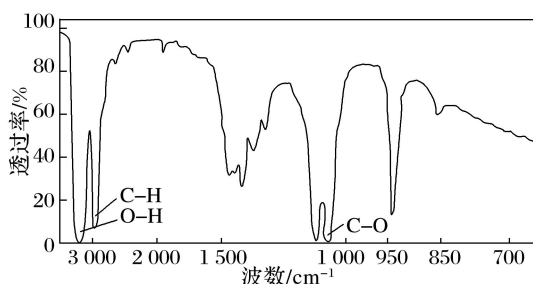
二、确定分子结构

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: 不同官能团或化学键吸收频率不同, 在红外光谱图上将处于不同的位置。

(2)红外光谱图



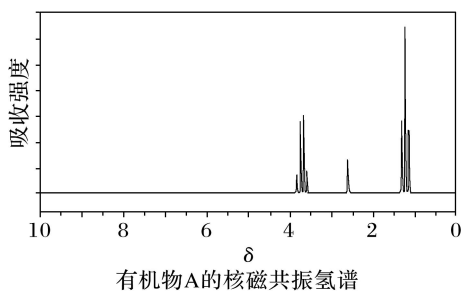
分析红外光谱图，可判断分子中含有的化学键或官能团的信息。如分子式为 C_2H_6O 的有机物 A 有如下两种可能的结构： CH_3CH_2OH 或 CH_3OCH_3 ，利用红外光谱来测定，分子中有 O—H(或—OH)可确定 A 的结构简式为 CH_3CH_2OH 。

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 C_2H_6O 的有机物 A 的核磁共振氢谱如图，可知 A 中有 3 种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 CH_3CH_2OH 。

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。

【正误判断】

- (1)核磁共振氢谱中有几个吸收峰就有几个氢原子()
- (2)质谱法、红外光谱法和核磁共振氢谱法均能确定有机化合物的分子结构()
- (3) CH_3COOCH_3 在核磁共振氢谱图中只有一个吸收峰()
- (4)质谱图中，相对丰度数值最大的质荷比等于相对分子质量()
- (5)X 射线衍射技术用于有机化合物晶体结构的测定，可以获得直接而详尽的结构信息()

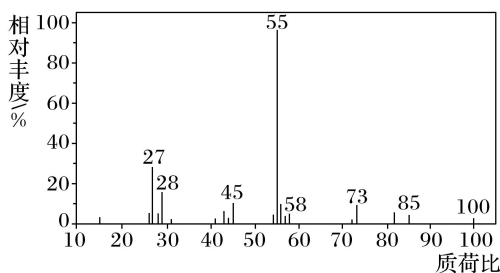
答案 (1)× (2)× (3)× (4)× (5)√

【深度思考】

有机物 X 是一种重要的有机合成中间体，用于制造塑料、涂料和黏合剂等高聚物。为研究 X 的组成与结构，进行如下实验：

(1)将 10.0 g X 在足量 O₂ 中充分燃烧，并将其产物依次通过足量的无水 CaCl₂ 和 KOH 浓溶液，发现无水 CaCl₂ 增重 7.2 g，KOH 浓溶液增重 22.0 g。该有机物 X 的实验式为_____。

(2)有机物 X 的质谱图如图所示，该有机物 X 的相对分子质量为_____。



(3)经红外光谱测定，有机物 X 中含有醛基；有机物 X 的核磁共振氢谱图上有 2 组吸收峰，峰面积之比为 3 : 1。该有机物 X 的结构简式为_____。

答案 (1)C₅H₈O₂ (2)100 (3)(CH₃)₂C(CHO)₂

解析 (1)无水 CaCl₂ 增重的 7.2 g 是水的质量，10.0 g X 中氢原子的物质的量为 $\frac{7.2 \text{ g}}{18 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \times 2$

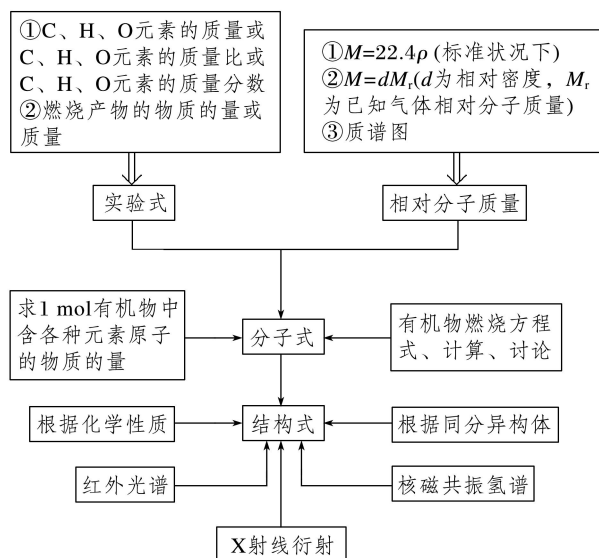
= 0.8 mol，KOH 浓溶液增重的 22.0 g 是二氧化碳的质量，10.0 g X 中碳原子的物质的量为 $\frac{22.0 \text{ g}}{44 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 0.5 \text{ mol}$ ，根据质量守恒，氧原子的质量为 $10.0 \text{ g} - 0.8 \text{ mol} \times 1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} - 0.5 \text{ mol}$

$\times 12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 3.2 \text{ g}$ ，则氧原子的物质的量为 $\frac{3.2 \text{ g}}{16 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 0.2 \text{ mol}$ ，则该分子中碳、氢、氧原

子的物质的量之比为 0.5 mol : 0.8 mol : 0.2 mol = 5 : 8 : 2，有机物 X 的实验式为 C₅H₈O₂。

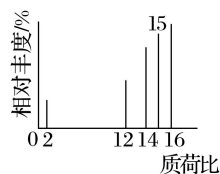
(2)质谱图中质荷比最大数值即为相对分子质量，由质谱图可知有机物 X 的相对分子质量为 100。(3)有机物 X 中含有醛基，有机物 X 的核磁共振氢谱图上有 2 组吸收峰，则分子中含有 2 种不同化学环境的氢原子，其中一种是醛基中的氢原子，又峰面积之比为 3 : 1，则含两个醛基，故其结构简式为 (CH₃)₂C(CHO)₂。

确定有机化合物结构的方法



随堂演练 知识落实

1. 设 H^+ 的质荷比为 β , 某有机物样品的质荷比如图所示(假设离子均带一个单位正电荷, 信号强度与该离子的多少有关), 则该有机物可能是()

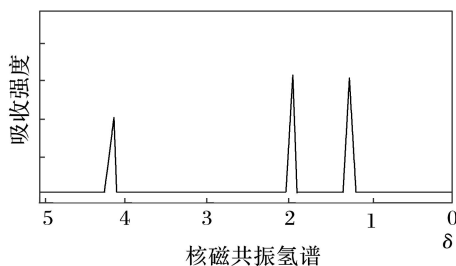


- A. 甲醇(CH_3OH) B. 甲烷
C. 丙烷 D. 乙烯

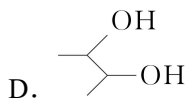
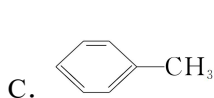
答案 B

解析 从题图中可看出其右边最大质荷比为 16, 即其相对分子质量为 16, 为甲烷。

2. 符合下面核磁共振氢谱图的有机物是()



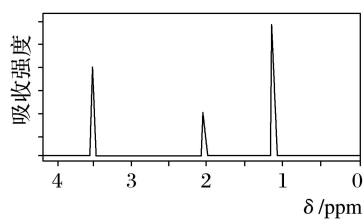
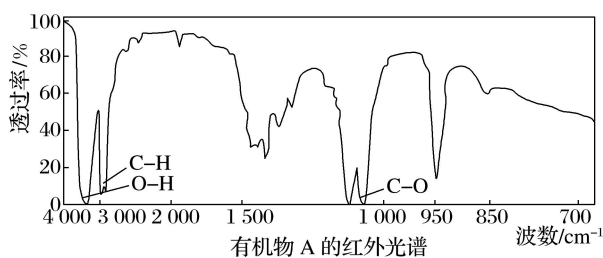
- A. $CH_3COOCH_2CH_3$ B. $CH_2=CHCH_2CH_3$



答案 A

解析 A 中物质有 3 种不同化学环境的氢原子，个数之比为 2 : 3 : 3；B 中物质有 4 种不同化学环境的氢原子，个数比为 2 : 1 : 2 : 3；C 中物质有 4 种不同化学环境的氢原子，个数比为 3 : 2 : 2 : 1；D 中物质有 3 种不同化学环境的氢原子，个数比为 3 : 1 : 1。核磁共振氢谱图中有 3 种不同化学环境的氢原子，再由氢原子个数(吸收强度)之比可知 A 项符合。

3. 已知某有机物 A 的红外光谱和核磁共振氢谱如图所示，下列说法错误的是()



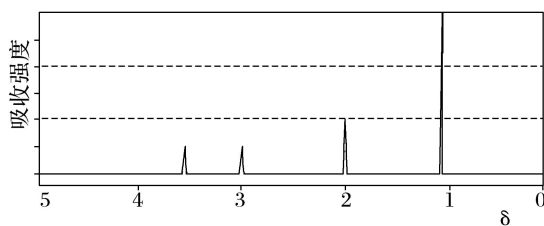
- A. 由红外光谱可知，该有机物中至少有三种不同的化学键
 B. 由核磁共振氢谱可知，该有机物分子中有三种不同化学环境的氢原子
 C. 仅由有机物 A 的核磁共振氢谱无法得知其分子中的氢原子总数
 D. 若有机物 A 的化学式为 C_2H_6O ，则其结构简式为 CH_3-O-CH_3

答案 D

解析 红外光谱图中给出的化学键有 C—H、O—H 和 C—O 三种，A 正确；核磁共振氢谱图中峰的个数即代表氢原子的种类，B 正确；核磁共振氢谱峰的面积表示氢原子的数目比，在没有明确化学式的情况下，无法得知氢原子总数，C 正确；若 A 为 CH_3-O-CH_3 ，则无 O—H，与所给红外光谱图不符，且其核磁共振氢谱图应只有 1 组峰，与核磁共振氢谱图不符，D 错误。

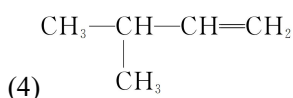
4. 根据研究有机物的步骤和方法填空：

- (1)测得 A 的蒸气密度是同状况下甲烷的 4.375 倍。则 A 的相对分子质量为_____。
- (2)将 5.6 g A 在足量氧气中燃烧，并将产物依次通过浓硫酸和碱石灰，分别增重 7.2 g 和 17.6 g。则 A 的实验式为_____；A 的分子式为_____。
- (3)将 A 通入溴水，溴水褪色，说明 A 属于_____，若不褪色，则 A 属于_____。
- (4)A 的核磁共振氢谱如图：

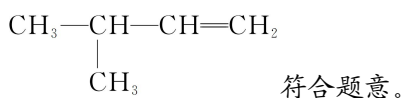


综上所述，A 的结构简式为_____。

答案 (1)70 (2) CH_2 C_5H_{10} (3)烯烃 环烷烃



解析 (1)根据公式 $M = d \cdot M(\text{CH}_4)$ 计算该有机物的相对分子质量为 $16 \times 4.375 = 70$ 。(2)由 A 的燃烧反应知，5.6 g A 含 $m(\text{C}) = 17.6 \text{ g} \times \frac{12}{44} = 4.8 \text{ g}$ ， $m(\text{H}) = 7.2 \text{ g} \times \frac{2}{18} = 0.8 \text{ g}$ ，确定该有机物只含碳、氢两种元素，实验式为 CH_2 ，设分子式为 $(\text{CH}_2)_n$ ，则 $12n + 2n = 70$ ， $n = 5$ ，分子式为 C_5H_{10} 。(3)符合分子式为 C_5H_{10} 的有烯烃和环烷烃，若能使溴水褪色，则为烯烃，若不能，则为环烷烃。(4)该核磁共振氢谱图共有 4 组吸收峰，吸收峰面积之比为 1:1:2:6，则



课时对点练

基础对点练

题组一 元素分析法

1. 某有机物在氧气中充分燃烧，生成 CO_2 和 H_2O 的物质的量之比为 1:2，则下列说法中正确的是()

- A. 分子中 C、H、O 原子个数之比为 1:2:3
- B. 分子中 C、H 原子个数之比为 1:4
- C. 该有机物中一定含有氧元素
- D. 该有机物的最简式为 CH_4

答案 B

解析 只根据生成物 CO_2 和 H_2O 无法确定该有机物中是否含有氧元素。由题意知 $N(\text{C}):N(\text{H}) = 1:4$ 。

2. 下列有关说法错误的是()

- A. 李比希法是定量研究有机物中元素组成的方法
- B. 元素分析仪可用于分析有机物中的元素组成
- C. 利用李比希法可以确定有机物分子的实验式

D. 元素分析可以确定未知物的分子式

答案 D

解析 元素分析只能确定组成分子的原子的最简单的整数比, 不能确定未知物的分子式。

3. 某气态有机物 X 含 C、H、O 三种元素。现欲确定 X 的分子式, 下列条件中所需的最少条件是()

①X 中碳的质量分数 ②X 中氢的质量分数 ③X 在标准状况下的体积 ④质谱图确定 X 的相对分子质量 ⑤X 的质量

- A. ①②
B. ①②④
C. ①②⑤
D. ③④⑤

答案 B

解析 由①②可得有机物的实验式, 由①②④可得有机物的分子式。

4. 某有机物蒸气完全燃烧需三倍于其体积的氧气, 产生二倍于其体积的二氧化碳(体积均在相同状况下测定), 该有机物可能是()

- A. C_3H_7OH
B. CH_3CHO
C. CH_3COCH_3
D. C_2H_4

答案 D

解析 设有机物分子式为 $C_xH_yO_z$, 燃烧的通式为 $C_xH_yO_z + (x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2})O_2 \xrightarrow{\text{点燃}} xCO_2 + \frac{y}{2}H_2O$,

由题意得, $x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} = 3$; $x = 2$, 则 $y - 2z = 4$ 。由 $x = 2$ 知 A、C 项不合题意; B 项, 把 $y = 4$,

$z = 1$ 代入 $y - 2z = 4$ 知不合题意。

题组二 谱图分析

5. 下列能够获得有机物所含官能团信息的方法是()

- A. 红外光谱
B. 质谱法
C. 色谱法
D. 核磁共振氢谱

答案 A

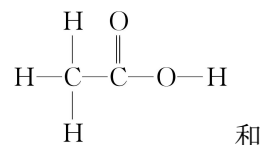
解析 红外光谱可测定有机物的化学键以及官能团。

6. 下列关于物质研究方法的说法错误的是()

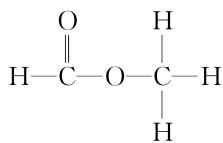
- A. X 射线衍射法利用 X 射线透过晶体时记录的分立斑点或衍射峰测定分子结构
B. 核磁共振氢谱能反映出未知有机化合物中不同化学环境氢原子的种类和个数
C. 根据红外光谱图的分析可以初步判断有机化合物中具有哪些基团
D. 质谱法可测定有机化合物的相对分子质量

答案 B

解析 核磁共振氢谱反映出不同化学环境氢原子的种类和个数比。



7. 乙酸和甲酸甲酯互为同分异构体，其结构式分别如下：



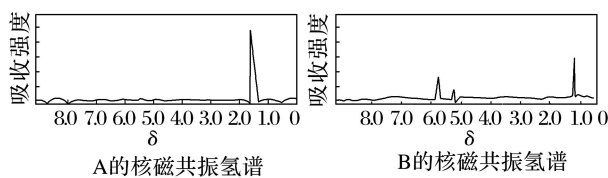
。在下列哪种检测仪上显示出的信号是完全相同的()

- A. 李比希元素分析仪 B. 红外光谱仪
C. 核磁共振仪 D. 质谱仪

答案 A

解析 李比希元素分析仪检测的是元素的种类，乙酸和甲酸甲酯的元素种类相同，都含有 C、H、O 三种元素，A 正确；红外光谱仪检测的是化学键和官能团的结构特征，乙酸中含有羧基、甲酸甲酯中含有酯基，信号不完全相同，B 错误；核磁共振仪检测的是氢原子的种类，乙酸中含有 2 种处于不同化学环境的氢原子，有 2 组峰且峰面积之比为 3:1，甲酸甲酯中含有 2 种处于不同化学环境的氢原子，有 2 组峰且峰面积之比为 1:3，峰的位置不完全相同，C 错误；质谱仪检测的是分子的相对分子质量，二者的相对分子质量相同，但分子碎片的相对质量不完全相同，D 错误。

8. 如图分别是 A、B 两种有机物的核磁共振氢谱图，已知 A、B 两种有机物都是烃类，都含有 6 个氢原子，根据两种有机物的核磁共振氢谱可推测出()

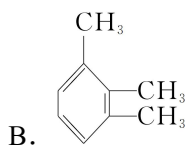


- A. A 是 C₃H₆, B 是 C₆H₆ B. A 是 C₂H₆, B 是 C₃H₆
C. A 是 C₂H₆, B 是 C₆H₆ D. A 是 C₃H₆, B 是 C₂H₆

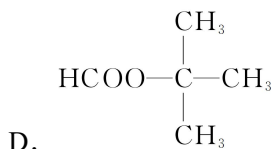
答案 B

解析 A 的核磁共振氢谱只有一组峰，说明 A 分子中只有 1 种化学环境的氢原子，对照选项判断 A 为 CH₃CH₃(即 C₂H₆)；同理 B 中有 3 种不同类型的氢原子，且个数比为 1:2:3，故 B 为 CH₃CH=CH₂(即 C₃H₆)。

9. 下列有机物分子中，在核磁共振氢谱中强度(个数)比为 1:3 的是()



A. 丙烷

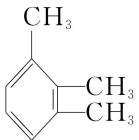


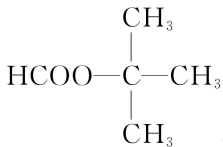
C. 异丙醇

D.

答案 A

解析 丙烷的结构简式为 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ ，分子中的氢原子在核磁共振氢谱中强度(个数)比是

$2:6 = 1:3$ ，A 正确； 分子中的氢原子在核磁共振氢谱中强度(个数)比是 $6:3:2:1$ ，B 错误；异丙醇分子中的氢原子在核磁共振氢谱中强度(个数)比是 $6:1:1$ ，C

错误； 分子中的氢原子在核磁共振氢谱中强度(个数)比是 $9:1$ ，D 错误。

10. 某化合物由碳、氢、氧三种元素组成，其红外光谱图有 $\text{C}-\text{H}$ 、 $\text{O}-\text{H}$ 、 $\text{C}-\text{O}$ 的振动吸收，该有机物的相对分子质量是 60，其核磁共振氢谱只有 3 组峰，则该有机物的结构简式是 ()

A. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$

B. $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$

C. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

D. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$

答案 B

解析 由红外光谱图知该有机物的分子中含 $\text{C}-\text{H}$ 、 $\text{O}-\text{H}$ 、 $\text{C}-\text{O}$ ，A 项中无 $\text{O}-\text{H}$ ，D 项中无 $\text{O}-\text{H}$ 、 $\text{C}-\text{O}$ ，B、C 项含有 $\text{C}-\text{H}$ 、 $\text{O}-\text{H}$ 、 $\text{C}-\text{O}$ 三种化学键且相对分子质量都是 60，B 项核磁共振氢谱有 3 组峰，C 项有 4 组峰，故 B 项正确。

综合强化练

11. 以下关于有机物的说法正确的是()

A. 甲醚($\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_3$)中含有两个甲基，故它的核磁共振氢谱图中有两个吸收峰

B. 某有机物在过量氧气中充分燃烧，只生成 CO_2 和 H_2O ，由此可知该有机物中一定只含有碳、氢两种元素

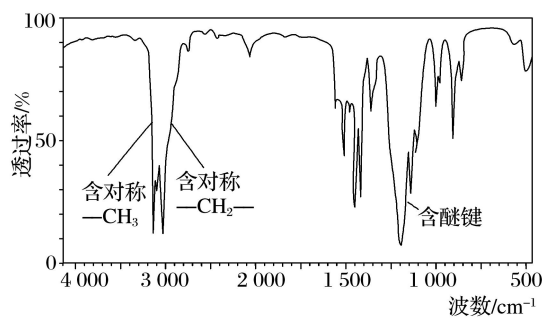
C. 核磁共振氢谱通常用于分析有机物的相对分子质量

D. 不同化学键或官能团对红外光的吸收频率不同，故可以利用红外光谱图来分析有机物含有的化学键和官能团

答案 D

解析 A 项，甲醚中 6 个氢原子的化学环境相同；B 项，只生成 CO_2 和 H_2O 不能定性判断原来没有 O 原子；C 项，质谱仪分析有机物的相对分子质量。

12. 某有机物 A 的分子式为 $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ ，红外光谱图如图所示，则 A 的结构简式为()

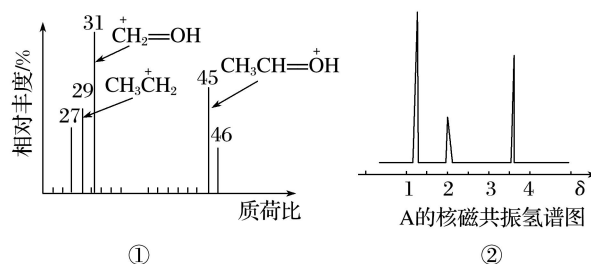


- A. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ B. $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
 C. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ D. $(\text{CH}_3)_2\text{CHOCH}_3$

答案 A

解析 红外光谱图中显示存在对称的甲基、对称的亚甲基和醚键可得分子的结构简式为 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 。

13. 某有机物 A 用质谱仪测定如图①, 核磁共振氢谱示意图如图②, 则有机物 A 的结构简式可能为()

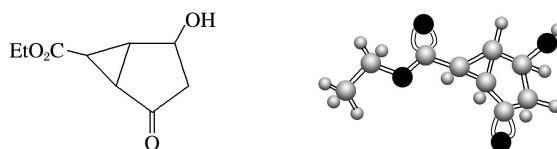


- A. HCOOH B. CH_3CHO
 C. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ D. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$

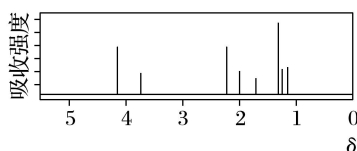
答案 C

解析 根据图示可知, 该有机物的最大质荷比为 46, 则 A 的相对分子质量为 46, 故 B、D 错误; 根据图示核磁共振氢谱可知, A 分子的核磁共振氢谱有 3 组吸收峰, 则其分子中有 3 种处于不同化学环境的氢原子, 且峰面积之比为 3:2:1, HCOOH 分子中含有 2 种处于不同化学环境的氢原子, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ 分子中含有 3 种处于不同化学环境的氢原子, 且峰面积之比为 3:2:1, 故 C 正确。

14. 某化合物的结构(键线式)及分子结构模型如下:



该有机物分子的核磁共振氢谱图如下:



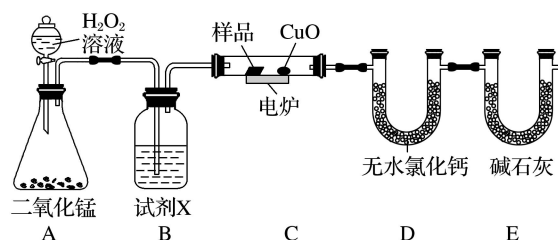
下列关于该有机物的叙述正确的是()

- A. 该有机物中处于不同化学环境的氢原子有 6 种
- B. 该有机物属于芳香族化合物
- C. 键线式中的 Et 代表的基团为—CH₃
- D. 该有机物在一定条件下能完全燃烧生成 CO₂ 和 H₂O

答案 D

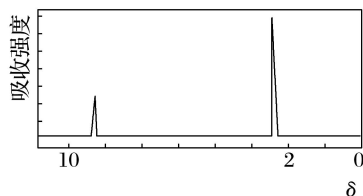
解析 A 项, 由核磁共振氢谱图可知有 8 种不同化学环境的氢原子, 错误; B 项, 由键线式可看出, 该物质中无苯环, 不属于芳香族化合物, 错误; C 项, 由键线式和球棍模型对照可知 Et 为—CH₂CH₃, 错误; D 项, 该有机化合物分子中只含有碳、氢、氧三种元素, 完全燃烧生成 CO₂ 和 H₂O, 正确。

15. 下列装置中有机物样品在电炉中充分燃烧, 通过测定生成的 CO₂ 和 H₂O 的质量, 来确定有机物的分子式。



请回答下列问题:

- (1) B 装置中试剂 X 可选用_____。
- (2) D 装置中无水氯化钙的作用是_____；E 装置中碱石灰的作用是_____。
- (3) 若实验中所取样品只含 C、H、O 三种元素中的两种或三种, 准确称取 0.44 g 样品, 经充分反应后, D 装置质量增加 0.36 g, E 装置质量增加 0.88 g, 已知该物质的相对分子质量为 44, 则该样品的化学式为_____。
- (4) 若该有机物的核磁共振氢谱如图所示。



则其结构简式为_____。

- (5) 某同学认为 E 和空气相通, 会影响测定结果准确性, 应在 E 后再增加一个 E 装置, 其主要目的是_____。

答案 (1) 浓硫酸 (2) 吸收生成的水 吸收生成的二氧化碳 (3) C₂H₄O (4) CH₃CHO

(5) 吸收空气中的二氧化碳和水蒸气

解析 (1)B 装置用于干燥通入 C 中的氧气, 试剂 X 可选用浓硫酸。

(2)D 装置中无水氯化钙的作用是吸收生成的水; E 装置中碱石灰的作用是吸收生成的二氧化碳。

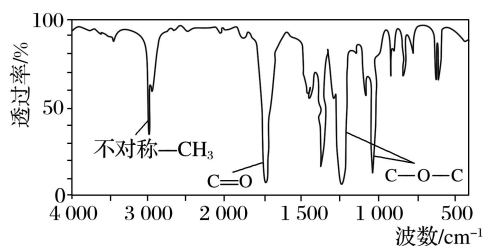
(3)E 装置质量增加 0.88 g 为二氧化碳的质量, 可得碳元素的质量: $0.88 \text{ g} \times \frac{12}{44} = 0.24 \text{ g}$, D 装置质量增加 0.36 g 是水的质量, 可得氢元素的质量: $0.36 \text{ g} \times \frac{2}{18} = 0.04 \text{ g}$, 从而可推出含氧元素的质量: $(0.44 - 0.24 - 0.04) \text{ g} = 0.16 \text{ g}$, 设最简式为 $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z$, 则 $x : y : z = \frac{0.24}{12} : \frac{0.04}{1} : \frac{0.16}{16}$

$= 2 : 4 : 1$, 即最简式为 $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$, 又由该物质的相对分子质量为 44, 可得该物质的化学式为 $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ 。

(4)根据该有机物的核磁共振氢谱图, 峰面积之比为 1 : 3, 则其结构简式为 CH_3CHO 。

16. 按要求回答下列问题:

(1)有机物 X 的分子式为 $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$, 其红外光谱图如图所示:



则该有机物可能的结构为 _____ (填字母)。

A. $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$

B. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOCH}_3$

C. $\text{HCOOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

D. $(\text{CH}_3)_2\text{CHCOOH}$

(2)有机物 Y 的结构可能有 $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$ 和 $\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$ 两种, 要对其结构进行物理方法鉴定, 可用 _____。

①若有机物 Y 为 $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$, 则红外光谱中应该有 _____ 个振动吸收; 核磁共振氢谱中应有 _____ 组峰。

②若有机物 Y 为 $\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$, 则红外光谱中应该有 _____ 个振动吸收; 核磁共振氢谱中应有 _____ 组峰。

答案 (1)AB (2)红外光谱法 ①5 2 ②3 2

解析 (1)A、B 项都有两个 $-\text{CH}_3$, 且不对称, 都含有 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}-\text{O}-\text{C}$, 所以 A、B 项符合图示; C 项只有一个 $-\text{CH}_3$, 不会出现不对称的现象; D 项中没有 $\text{C}-\text{O}-\text{C}$, 且 $-\text{CH}_3$ 为对

称结构。(2)① $\text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$ 中, 化学键有 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}-\text{O}$ 、 $\text{O}-\text{H}$ 、 $\text{C}-\text{C}$ 、 $\text{C}-\text{H}$, 所以红外光谱中共有 5 个振动吸收; 分子中含有 2 种处于不同化学环境的氢($-\text{CH}_3$ 、 $-\text{OH}$), 所以核

磁共振氢谱中应有 2 组吸收峰。② $\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$ 中, 化学键有 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ 、 $\text{C}-\text{H}$, 所以红外光谱中共有 3 个振动吸收; 分子中含有 2 种处于不同化学环境的氢($-\text{CH}_3$ 、

$\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-$), 所以核磁共振氢谱中应有 2 组峰。