

红外光谱

【例 1】 试简述红外吸收光谱的主要特点。

解

(1) 红外吸收谱带的波长位置和吸收带的强度，反映了分子结构上的特点，可以以此定性鉴定未知物的结构组成和确定其官能团，也可利用谱带强度进行定量分析。

(2) 主要研究在振动中伴随有偶极矩变化的化合物（无偶极矩变化的振动在拉曼光谱出现），大多数有机物和无机物都在红外光区有吸收。

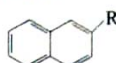
(3) 仪器价格低廉，构造简单，操作方便，重复性好。

(4) 分析特征强，气体、液体、固体样品都可测定，样品用量少（几毫克或微克），分析速度快，不损坏样品，样品可回收。

(5) 反映了化合物的一种真正独特的物理性质，除光学异构体外，没有两种化合物会有相同的红外光谱。

(6) 仅具有鉴别能力而无分离作用，对于复杂的样品不能直接进行定性和定量分析，需和分离技术配合。

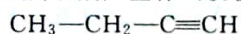
【例 2】 稠环芳烃和杂环化合物的特征吸收与苯系化合物相似，其碳氢面外变形振动吸收峰也取决于相邻氢的个数。推测如下化合物在 $650\sim 900\text{cm}^{-1}$ 范围产生 Ar—H 面外变形振动 $\gamma(\text{C—H})$ 吸收峰的个数和大致范围。



解 该化合物在此区域产生 3 个 Ar—H 面外变形振动吸收峰。

- (1) $900\sim 860\text{cm}^{-1}$ (孤立氢)；
- (2) $860\sim 800\text{cm}^{-1}$ (2 个氢相邻)；
- (3) $770\sim 735\text{cm}^{-1}$ (4 个氢相邻)

【例 3】 下面化合物在 IR 区域内预期产生什么吸收峰？



解

序号	波数	峰数	归属
(1)	约 3300cm^{-1}	1	$\nu_{\text{C—H}}$
(2)	$2960\sim 2850\text{cm}^{-1}$	4	$\nu_{\text{C—H}}(\text{CH}_2, \text{CH}_3)$
(3)	$2140\sim 2100\text{cm}^{-1}$	1	$\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$
(4)	约 1460cm^{-1}	1	$\delta(\text{CH}_2), \delta_{\text{as}}(\text{CH}_3)$
(5)	约 1380cm^{-1}	1	$\delta_s(\text{CH}_3)$

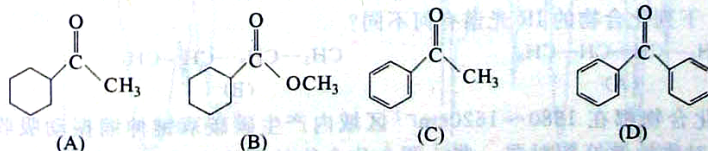
【例 4】 已知某化合物分子式为 $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$ ，而且结构中含有一个酯羰基 (1760cm^{-1}) 和一个端乙烯基 (1649cm^{-1})，试推断其结构。

解 首先计算该化合物的不饱和度： $U=1+4+1/2(0-6)=2$ ，说明分子中除了酯羰基和乙烯基外没有其他的饱和基团。对于分子式为 $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$ 的化合物，且符合不饱和度，又符合含有一个酯羰基和一个端乙烯基 ($-\text{CH}=\text{CH}_2$) 只能写出如下两种结构。



在 (A) 结构中酯羰基伸缩振动出现在 1710cm^{-1} (羰基和乙烯基共轭) 附近；(B) 结构中酯羰基伸缩振动出现在 1760cm^{-1} (烯酯和芳酯) 附近。所以该化合物的结构应是醋酸乙烯酯。

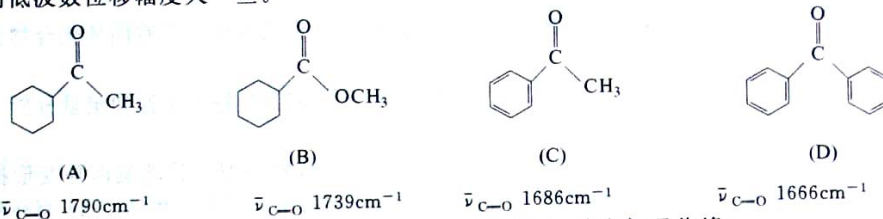
【例 5】 按 $\nu_{\text{C=O}}$ 频率增加的顺序排列下列化合物，并说明理由。



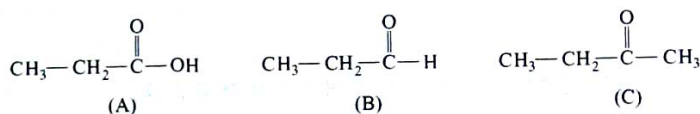
解 $\nu_{\text{C=O}}$ 频率增加的顺序：(D) < (C) < (A) < (B)。

化合物 B 由于 $-\text{OCH}_3$ 的诱导效应，酯羰基伸缩振动向高波数位移；化合物 C 由于与

苯环共轭，酯羰基伸缩振动向低波数位移；化合物 D 由于与二个苯环共轭，酯羰基伸缩振动向低波数位移幅度大一些。

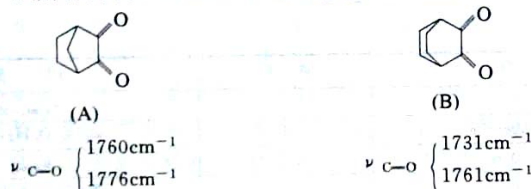


【例 6】下列化合物在 $4000\sim 1650\text{cm}^{-1}$ 的 IR 区域有何吸收峰？



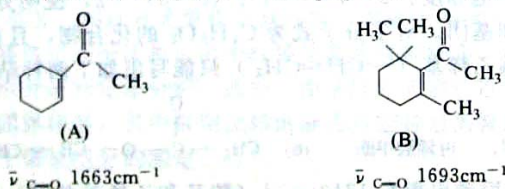
解 三个化合物在 $2960\sim 2850\text{cm}^{-1}$ 区域内均有强的羰基伸缩振动吸收峰；此外，酸 (A) 结构在 $3000\sim 2500\text{cm}^{-1}$ 范围内产生一个宽的羧基伸缩振动谱带；醛 (B) 结构在 2720cm^{-1} 和 2820cm^{-1} 附近产生两个弱的吸收峰。

【例 7】试解释为什么化合物 A 的 $\nu_{\text{C=O}}$ 频率大于化合物 B。



解 在上述两个化合物中，化合物 A 的两个羰基 ($\text{C}=\text{O}$) 处于五元环上，环张力较大；而化合物 B 的两个羰基 ($\text{C}=\text{O}$) 处于六元环上，环张力相对较小，化合物 A 的羰基伸缩振动吸收峰出现在高波数处，所以化合物 A 的 $\nu_{\text{C=O}}$ 频率大于化合物 B。

【例 8】试解释为什么化合物 A 的 $\nu_{\text{C=O}}$ 频率小于化合物 B。



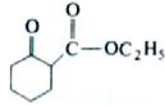
解 在上述两个化合物中，化合物 B 的立体障碍比较大，使脂环上双键 ($\text{C}=\text{C}$) 与羰基 ($\text{C}=\text{O}$) 的共轭受到限制，双键 ($\text{C}=\text{C}$) 与羰基 ($\text{C}=\text{O}$) 不能很好地共平面，吸收峰出现在高波数处，所以化合物 A 的 $\nu_{\text{C=O}}$ 频率小于化合物 B。

【例 9】下列化合物的 IR 光谱有何不同？

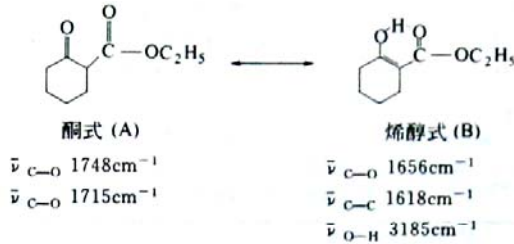


解 两个化合物都在 $1680\sim 1620\text{cm}^{-1}$ 区域内产生碳碳双键伸缩振动吸收峰；但由于 (A) 结构比较对称故谱峰相对弱一些。两个化合物的不饱和碳氢变形振动 $\delta(\text{C}=\text{H})$ 不同，(B) 结构为端烯故在 910cm^{-1} 和 990cm^{-1} 附近产生两个谱峰；(A) 结构可能在 690cm^{-1} (顺式) 或 970cm^{-1} (反式) 附近产生一个谱峰。

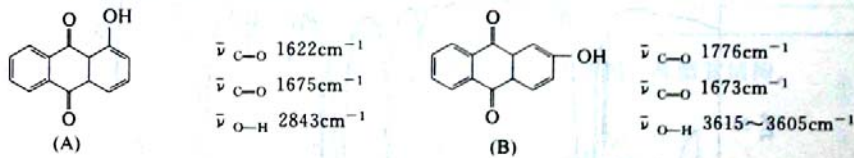
【例 10】 试解释为什么如下化合物在红外光谱中产生 1748cm^{-1} , 1715cm^{-1} , 1656cm^{-1} 三个羰基伸缩振动吸收峰?



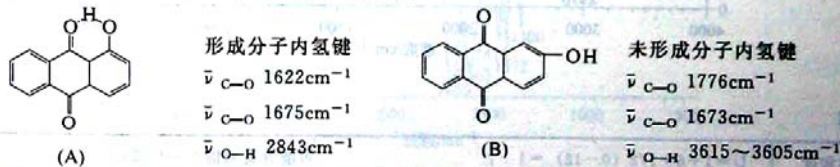
解 由于此化合物具有互变异构, 吸收峰将发生位移, 在红外光谱中能够出现各种异构体的吸收峰。



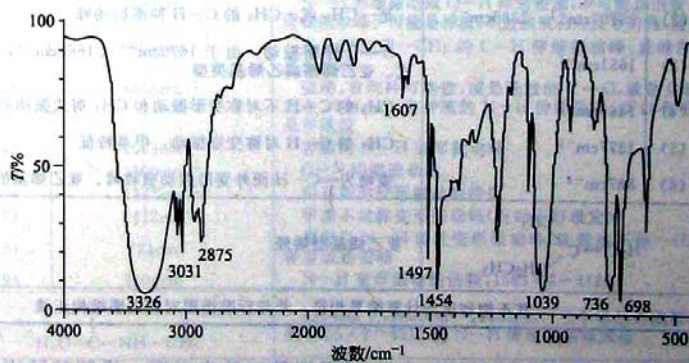
【例 11】 试解释为什么如下化合物 (A) 在红外光谱中的羰基伸缩振动吸收峰和羟基伸缩振动吸收峰都远远小于化合物 (B)?



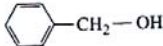
解 由于化合物 (A) 能够形成分子内氢键, 可使吸收峰将大幅度向低波数方向位移; 而化合物 (B) 不能够形成分子内氢键, 所以化合物 (A) 在红外光谱中的羰基伸缩振动吸收峰和羟基伸缩振动吸收峰都远远小于化合物 (B)。



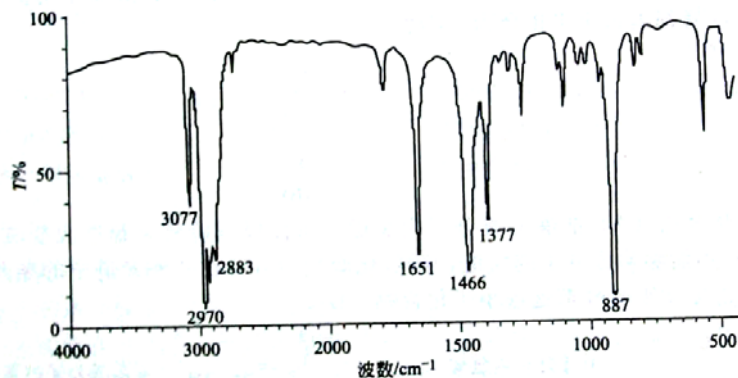
【例 12】 某化合物分子式 $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$, 试根据其红外光谱图, 推测其结构。



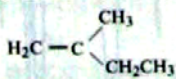
解

不饱和度	$U=1+7+1/2(0-8)=4$	可能含有苯环;
谱峰归属	(1) 3326 cm^{-1} (2) 3030 cm^{-1} (3) 2875 cm^{-1} (4) 1607 cm^{-1} (5) 1497 cm^{-1} , 1454 cm^{-1} (6) 1039 cm^{-1} (7) 736 cm^{-1} 698 cm^{-1}	O—H 伸缩振动 苯环上—C—H 伸缩振动,说明可能是芳香族化合物 饱和 C—H 伸缩振动峰 芳环 C—C 骨架伸缩振动 芳环 C—C 骨架伸缩振动 C—O 伸缩振动(伯醇) 苯环上相邻 5 个 H 原子—C—H 的面外变形振动和环骨架变形振动,苯环单取代的特征
推测结构		
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确	

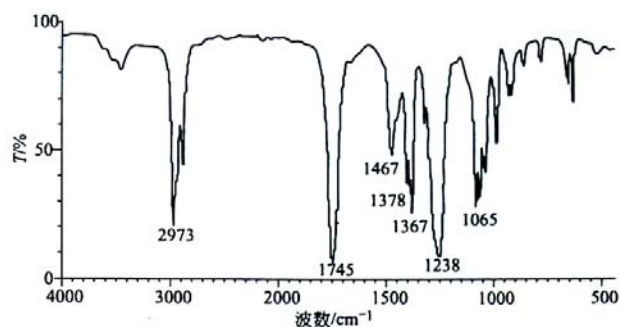
【例 13】某液体化合物分子式 C_6H_{12} , 试根据其红外光谱图, 推测其结构。



解

不饱和度	$U=1+6+1/2(0-12)=1$	可能含有双键 C=C 或环
谱峰归属	(1) 3077 cm^{-1} (2) 2970 cm^{-1} , 2888 cm^{-1} (3) 1651 cm^{-1} (4) 1466 cm^{-1} (5) 1377 cm^{-1} (6) 887 cm^{-1}	双键—C—H 伸缩振动,说明可能是烯烃 是—CH ₂ 或—CH ₃ 的 C—H 伸缩振动峰 C=C 伸缩振动,由于 1670 cm^{-1} < 1660 cm^{-1} , 所以应属于顺式、亚乙烯基或乙烯基类型 CH ₃ 的 C—H 不对称变形振动和 CH ₂ 剪式振动的叠合 CH ₃ 的 C—H 对称变形振动,甲基特征 强峰为—C—H 面外变形振动吸收峰。亚乙烯基的特征
确定结构		亚乙烯基型烯烃
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确	

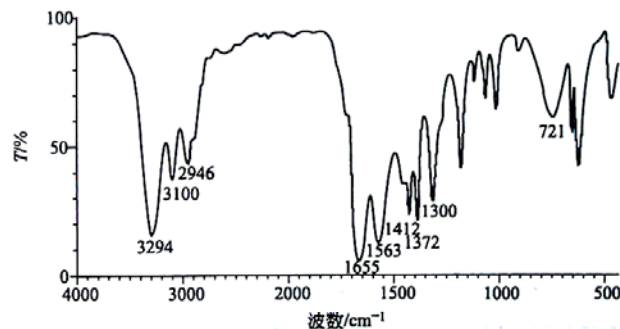
【例 14】某化合物分子式 $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_2$, 试根据其红外光谱图, 推测其结构。



解

不饱和度	$U=1+5+1/2(0-10)=1$		可能含有 C=O、C=C 或环。
谱峰归属	(1)	2973cm ⁻¹	是 -CH ₂ 或 -CH ₃ 的 C-H 伸缩振动峰
	(2)	1745cm ⁻¹	强峰, C=O 伸缩振动峰, 可能是酯
	(3)	1467cm ⁻¹	甲基不对称变形振动峰和 CH ₂ 剪式振动的叠合
	(4)	1378cm ⁻¹	甲基对称变形振动的特征
	(5)	1238cm ⁻¹	C-O-C 不对称伸缩振动峰, 酯的特征
	(6)	1065cm ⁻¹	C-O-C 对称伸缩振动峰
确定结构	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$		甲酸酯 C-O-C 不对称伸缩振动峰为 1180cm ⁻¹ ; 甲酯 C-O-C 不对称伸缩振动峰为 1160cm ⁻¹ ; 乙酸酯 C-O-C 不对称伸缩振动峰为 1240cm ⁻¹
结构验证	其不饱和度与计算结果相符, 并与标准谱图对照证明结构正确		

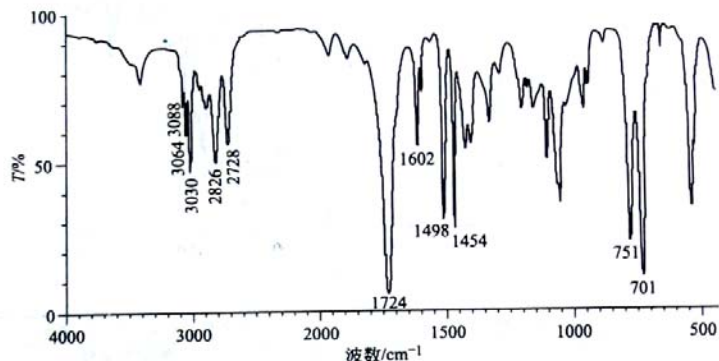
【例 15】某化合物分子式 C₃H₇NO, 试根据其红外光谱图, 推测其结构。



解

不饱和度	$U=1+3+1/2(1-7)=1$		可能含有 C=O、C=C 或环。
谱峰归属	(1)	3294cm ⁻¹	N-H 伸缩振动或 O-H 伸缩振动, 不可能是伯胺, 因为伯胺 -NH ₂ 应该是双峰。可能是仲胺, 不过强度有点反常的强, 需查明原因
	(2)	2946cm ⁻¹	是 -CH ₂ 或 -CH ₃ 的 C-H 伸缩振动峰, 此峰较弱, 所以不可能是长链的
	(3)	1655cm ⁻¹	强峰, 有两种可能性, 或是酰胺的 C=O, 或是共轭的酮 C=O, 既然在 3294cm ⁻¹ 有仲胺的 N-H 伸缩振动, 所以有可能是酰胺, 而且是仲酰胺
	(4)	1563cm ⁻¹	仲胺的 N-H 变形振动峰
	(5)	1300cm ⁻¹	C-N 伸缩振动峰
	(6)	1372cm ⁻¹	甲基对称变形振动的特征
	(7)	1412cm ⁻¹	甲基不对称变形振动峰(有时不好确定)
	(8)	721cm ⁻¹	宽带是 N-H 面外变形振动峰, 注意这不是一(CH ₂) ₄ — 的峰, 后者应该是尖峰
	(9)	3100cm ⁻¹	N-H 变形振动的倍频, 1563×2=3126
确定结构	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}-\text{CH}_3$		3294cm ⁻¹ , 1655cm ⁻¹ , 1563cm ⁻¹ 三个峰是仲酰胺的特征。羰基倍频 1655×2=3310 使 N-H 伸缩振动峰加高
结构验证	其不饱和度与计算结果相符, 并与标准谱图对照证明结构正确		

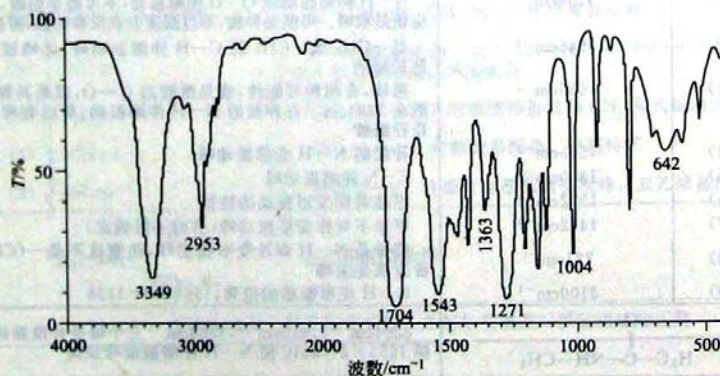
【例 16】 某化合物分子式 C_8H_8O ，试根据其红外光谱图，推测其结构。



解

不饱和度	$U=1+8+1/2(0-8)=5$		可能含有苯环和含有 C—O、C=C 或环
谱峰归属	(1)	3088 cm^{-1} 3064 cm^{-1} 3030 cm^{-1}	苯环上—C—H 伸缩振动,说明可能是芳香族化合物
	(2)	2826 cm^{-1} 2728 cm^{-1}	醛的 C—H 伸缩振动和变形振动 Fermi 共振耦合峰,醛基的特征峰
	(3)	1724 cm^{-1}	C—O 的特征吸收峰(一般醛基 C—O 伸缩振动吸收峰在 1725 cm^{-1}),如果 C—O 和苯环直接相连共轭效应使吸收频率向低波数位移,所以连接方式可能是 C—O 没有直接与苯环相连
	(4)	1602 cm^{-1} 1498 cm^{-1}	芳环 C=C 骨架伸缩振动
	(5)	751 cm^{-1} 701 cm^{-1}	苯环上相邻 5 个 H 原子—C—H 的面外变形振动和环骨架变形振动,苯环单取代的特征
推测结构			
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确		

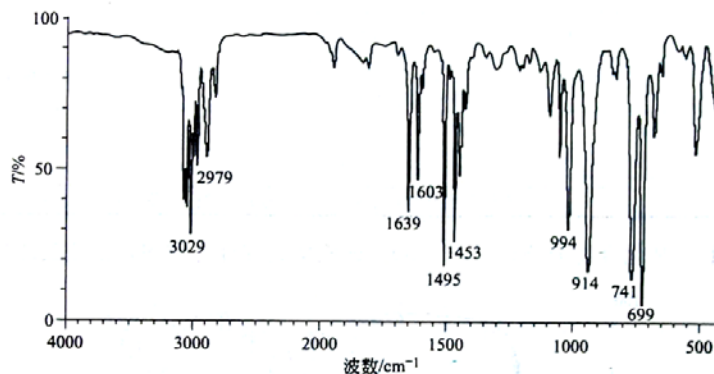
【例 17】 某化合物 $C_3H_7NO_2$ ，试根据如下谱图推断其结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U = 3 + (1 - 7) / 2 + 1 = 1$	
IR 解析	波数/cm ⁻¹	归属
	3349 2953 1704 1543 1363 1271, 1004 642	仲胺 N-H 伸缩振动特征峰 饱和碳氢 C-H 伸缩振动 ν_{C-H} 羰基伸缩振动 $\nu_{C=O}$ N-H 变形振动吸收峰 甲基对称变形振动 $\delta_s(CH_3)$ C-O-C 伸缩振动 N-H 变形振动吸收峰
结构式	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{CH}_3 - \text{NH} - \text{C} - \text{O} - \text{CH}_3 \end{array}$	

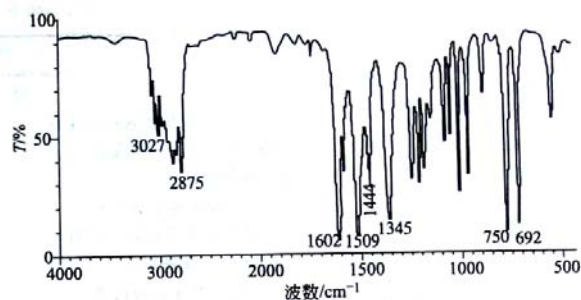
【例 18】 某化合物分子式 C₉H₁₀，试根据其红外光谱图，推测其结构。



解

不饱和度	$U = 1 + 9 + 1/2(0 - 10) = 5$		可能含有苯环和含有 C=O、C=C 或环
谱峰归属	(1)	3029cm ⁻¹	多个峰不饱和碳氢=C-H 伸缩振动,说明可能是芳香化合物,可能含有 C=C 饱和碳氢 C-H 伸缩振动 烯烃 C=C 伸缩振动,小于 1600cm ⁻¹ ,可能是乙烯基、顺式或亚乙烯基型烯烃,吸收频率偏低,可能是共轭所致 芳环 C=C 骨架伸缩振动。1495cm ⁻¹ 吸收峰比较强。说明没有共轭基团与苯环相连 -C-H 面外变形振动,-CH=CH ₂ 特征峰 苯环上相邻 5 个 H 原子-C-H 的面外变形振动和环骨架变形振动,苯环单取代的特征
	(2)	2979cm ⁻¹	
	(3)	1639cm ⁻¹	
	(4)	1603cm ⁻¹	
	(5)	1495cm ⁻¹ 1453cm ⁻¹ 994cm ⁻¹ 914cm ⁻¹	
	(6)	741cm ⁻¹ 699cm ⁻¹	
推测结构	$\text{C}_6\text{H}_5 - \text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH}_2$		
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确		

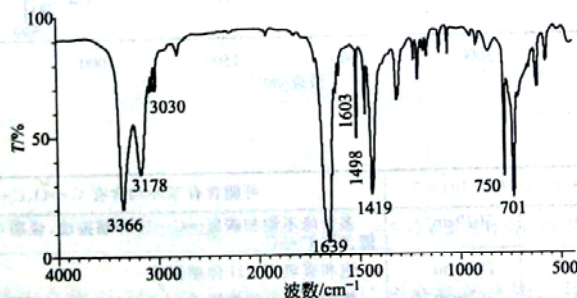
【例 19】 某化合物 C₈H₁₁N，试根据如下谱图推断其结构，并说明依据。



解

不饱和度		$U = 8 + (1 - 11) / 2 + 1 = 4$
IR 解析	波数/cm ⁻¹	归属
	3027 2875 1602, 1577 1509, 1444 1345 750, 692	不饱和碳氢 C—H 伸缩振动 ν_{C-H} 饱和碳氢 C—H 伸缩振动 ν_{C-H} 芳环骨架伸缩振动 ν_{C-C} 芳环骨架伸缩振动 ν_{C-C} C _A -N 伸缩振动 ν_{C-N} 苯环上相邻 5 个 H 原子—C—H 的面外变形振动和环骨架变形振动, 苯环单取代的特征
结构式		
结构验证	其不饱和度与计算结果相符, 并与标准谱图对照证明结构正确	

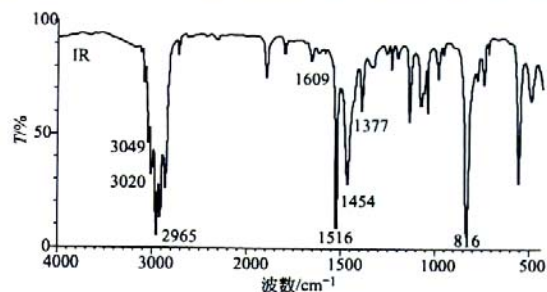
【例 20】 某化合物分子式 C₈H₉NO, 试根据其红外光谱图, 推测其结构。



解

不饱和度	$U = 1 + 8 + 1/2(1 - 9) = 5$	可能含有苯环和含有 C=O、C—C 或环
谱峰归属	(1) 3367cm ⁻¹ 3178cm ⁻¹	N—H 伸缩振动, 双峰说明可能为—NH ₂
	(2) 3030cm ⁻¹	不饱和碳氢 C—H 伸缩振动 ν_{C-H}
	(3) 1639cm ⁻¹	C=O 吸收峰和 N—H 变形振动吸收峰重叠, 因为分子中有 N, 吸收频率较低可能为伯酰胺
	(4) 1603cm ⁻¹ 1498cm ⁻¹	芳环 C—C 骨架伸缩振动。1603cm ⁻¹ 吸收峰强度较小, 说明没有共轭基团与苯环相连
	(5) 1419cm ⁻¹	和 CH ₂ 的 C—H 变形振动, 波数低移, 可能与羰基相连
	(6) 750cm ⁻¹ 701cm ⁻¹	苯环上相邻 5 个 H 原子—C—H 的面外变形振动和环骨架变形振动, 苯环单取代的特征
推测结构		
结构验证	其不饱和度与计算结果相符, 并与标准谱图对照证明结构正确	

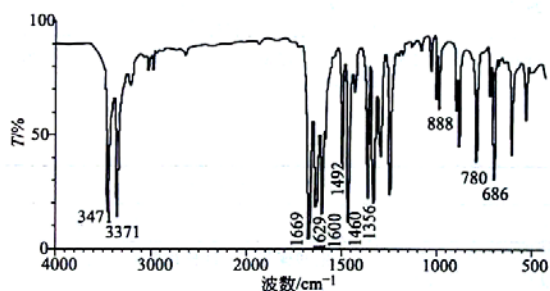
【例 21】 某化合物 C_9H_{12} ，试根据如下谱图推断其结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U=1+9+1/2(0-12)=4$	可能含有苯环
	(1) 3049 cm^{-1} , 3020 cm^{-1} (2) 2965 cm^{-1} (3) 1609 cm^{-1} , 1516 cm^{-1} (4) 1454 cm^{-1} (5) 1377 cm^{-1} (6) 816 cm^{-1}	苯环上—C—H 伸缩振动,说明可能是芳香族化合物 饱和碳氢 C—H 伸缩振动 ν_{C-H} 芳环 C—C 骨架伸缩振动。1609 cm^{-1} 吸收峰强度较小,说明没有共轭基团与苯环相连 和 CH_3 的 C—H 变形振动 苯环上相邻 2 个 H 原子—C—H 的面外变形振动,苯环对位取代的特征
推测结构	<chem>CC1=CC=C(C)CC1</chem>	
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确	

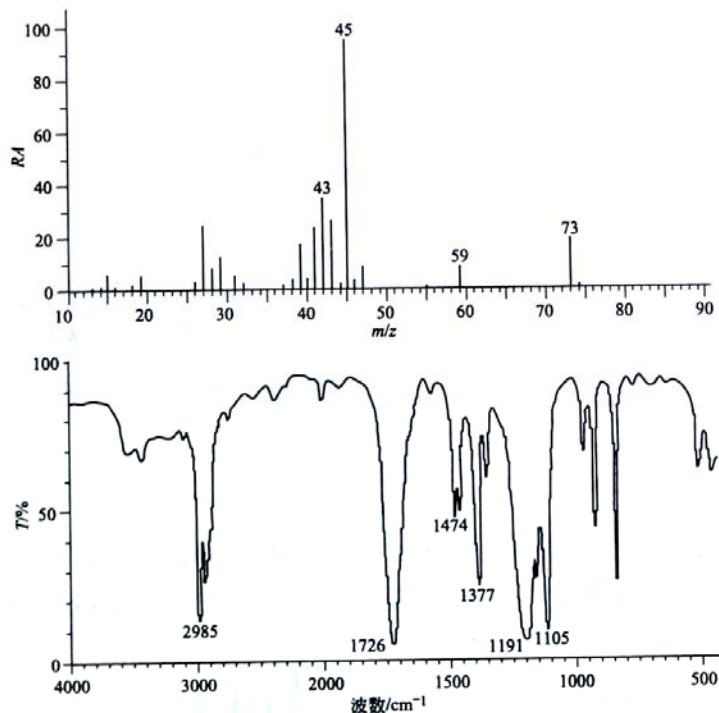
【例 22】 某化合物分子式 C_8H_9NO ，试根据其红外光谱图，推测其结构。



解

不饱和度	$U=1+8+1/2(1-9)=5$	可能含有苯环和含有 C=O, C=C 或环
谱峰归属	(1) 3471 cm^{-1} (2) 3371 cm^{-1} (3) 1669 cm^{-1} (4) 1629 cm^{-1} (5) 1600 cm^{-1} (6) 1492 cm^{-1} (7) 1456 cm^{-1} (8) 1356 cm^{-1} (9) 888 cm^{-1} (10) 780 cm^{-1} (11) 686 cm^{-1}	N—H 伸缩振动,双峰说明可能为—NH ₂ C=O 吸收峰,吸收频率较低可能与苯环共轭 N—H 变形振动吸收峰 芳环 C—C 骨架伸缩振动。1600 cm^{-1} 吸收峰强度大,说有共轭基团与苯环相连 $C_{Ar}-N$ 伸缩振动 ν_{C-N} , 芳胺的特征 $C_{Ar}-C(=O)$ 伸缩振动 ν_{C-C} , 芳酮的特征 和 CH_3 的 C—H 变形振动,波数低移,可能与羰基相连 苯环上 H 原子—C—H 的面外变形振动和环骨架变形振动,苯环间位取代的特征
推测结构	<chem>CC(=O)C1=CC=C(N)C=C1</chem>	
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确	

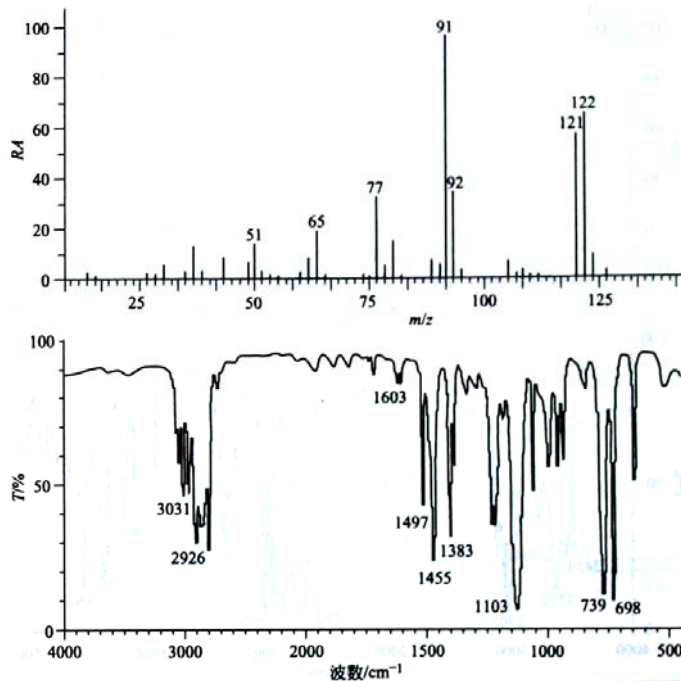
【例：23】 某化合物 $C_4H_8O_2$ ($M=88$)，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



解

不饱和度		$U = 4 + (0 - 8) / 2 + 1 = 1$	
IR 解析	波数/ cm^{-1}		归属
	2985		饱和碳氢 C-H 伸缩振动 ν_{C-H}
	1726		羰基伸缩振动 $\nu_{C=O}$
	1474		饱和碳氢变形振动
	1377		甲基对称变形振动 $\delta_s(CH_3)$
1191, 1105		C-O-C 伸缩振动(酯吸收带)	
MS 解析	m/z	离子	断裂反应
	88	$M^{+\cdot}$	
	73	$(M-CH_3)^+$	
	59	$(M-HC-O)^+$	
	45	$HO-C=O^+$	
43	$(CH_3)_2CH^+$		
结构式	$ \begin{array}{c} O \quad CH_3 \\ \quad \\ H-C-O-CH-CH_3 \end{array} $		

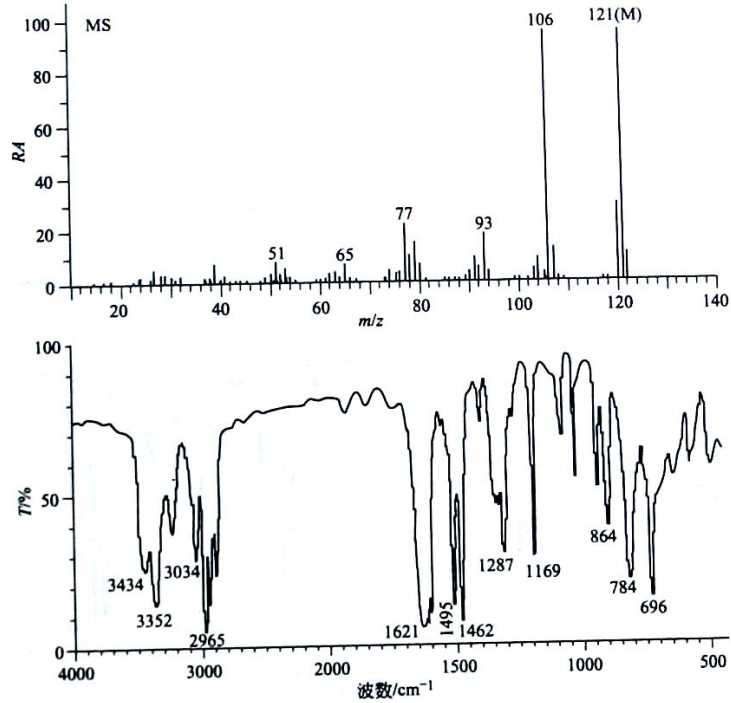
【例 24】某化合物 $C_8H_{10}O$ ($M=122$)，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



解

不饱和度		$U=8+(0-10)/2+1=4$		
IR 解析		波数/ cm^{-1}	归属	
		3031	苯环上碳氢 C-H 伸缩振动 ν_{Ar-H}	
		2926	饱和碳氢 C-H 伸缩振动 ν_{C-H}	
		1606, 1497, 1455	苯环骨架伸缩振动 ν_{C-C}	
		1374	甲基对称变形振动 $\delta_s(CH_3)$	
		1103	C-O 伸缩振动	
		739, 698	苯环单取代特征吸收峰	
MS 解析		m/z	离子	断裂反应
		122	$M^{+\cdot}$	
		121	$[M-(\cdot H)]^+$	
		92	$[M-(HCHO)]^+$	
		91	$[M-CH_2O]^+$	
		77	$C_6H_5^+$	
结构式				

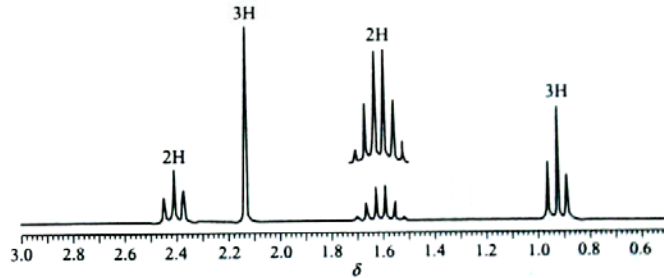
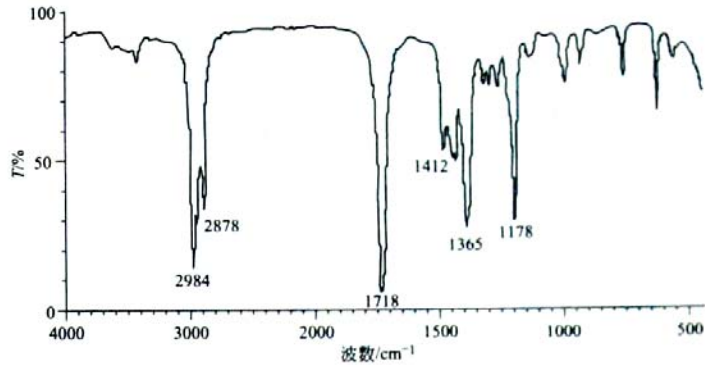
【例：25】某化合物 $C_8H_{11}N$ ($M=121$)，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U=8+(1-11)/2+1=4$	
IR 解析	波数/ cm^{-1}	归属
	3434, 3352 3034 2965 1621 1495, 1462 864, 784, 696	伯胺 N—H 伸缩振动特征峰 苯环上不饱和和碳氢 C—H 伸缩振动 ν_{C-H} 饱和碳氢 C—H 伸缩振动 ν_{C-H} N—H 变形振动吸收峰 苯环骨架伸缩振动 ν_{C-C} 苯环间位取代特征吸收峰
MS 解析	m/z	断裂反应
	121 106 93	<p>离子</p> <p>$M^{\cdot+}$ $(M-CH_3)^+$ $(M-C_2H_5)^+$</p> <p> $CH_2-CH_3 \uparrow^{+}$ $m/z=121 \rightarrow m/z=94 \rightarrow m/z=93$ CH_2^+ $m/z=106 \rightarrow m/z=93 \rightarrow m/z=77$ </p>
结构式		

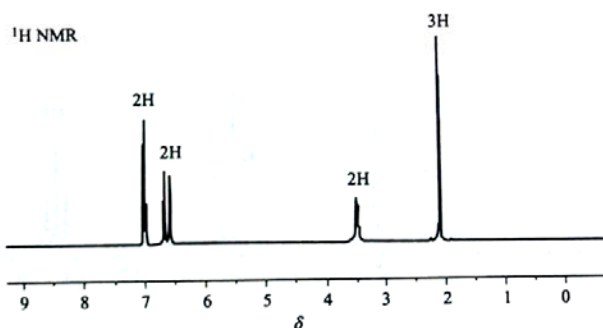
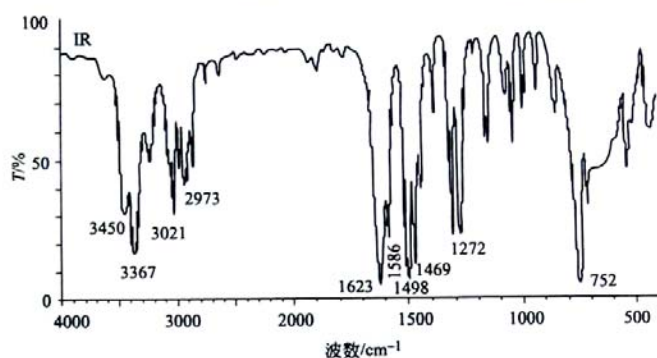
【例 26】 化合物 $C_5H_{10}O$ ，根据如下谱图确定结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U = 1 + 5 + 1/2(0 - 10) = 1$				可能含有 C—O (或 C—C 或环)	
1H 谱峰归属	峰号	δ	积分	裂分峰数	归属	推断
	(a)	0.92	3H	三重峰	CH_3	3 个氢, 1 个 CH_3 峰, 三重峰, 与 CH_2 耦合, 可能有 $-CH_2-CH_3$ 结构
	(b)	1.61	2H	多重峰	CH_2	2 个氢, 1 个 CH_2 峰, 多重峰, 与多个质子相邻, 可能 $CH_2-CH_2-CH_3$
	(c)	2.13	3H	单峰	CH_3	$CH_3-C=O$
IR 谱峰归属	峰号	波数/ cm^{-1}			推断	
	(a)	2984, 2778			是 $-CH_2$ 或 $-CH_3$ 的 C—H 伸缩振动峰	
	(b)	1718			C=O 的特征吸收峰 (酮羰基)	
	(c)	1412			CH ₃ 的 C—H 不对称变形振动和 CH ₂ 剪式振动的叠合	
确定结构	$CH_3-\overset{O}{\parallel}C-CH_2-CH_2-CH_3$				CH_2-CH_3 : 化学位移查表 $\delta = 0.8 \sim 1.4$; $CH_2-CH_2-CH_3$ 化学位移查表 $\delta = 1.2 \sim 1.5$; $CH_3-C=O$ 质子化学位移 $\delta = 2.1 \sim 2.4$, 故结构正确	
					结构验证	

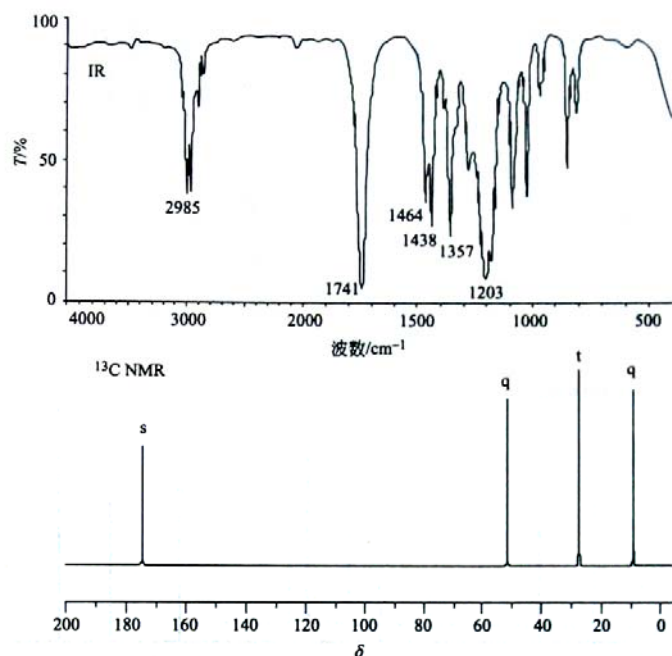
【例 27】 化合物 C_7H_9N ，根据如下 IR 和 1H NMR 谱图确定结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U=1+7+1/2(1-9)=4$				可能含有苯环	
IR 谱峰归属	(1)	$3450\text{cm}^{-1}, 3367\text{cm}^{-1}$	N—H 伸缩振动(双峰伯胺特征)			
	(2)	3021cm^{-1}	不饱和 C—H 伸缩振动(Ar—H)			
	(3)	2973cm^{-1}	饱和 C—H 伸缩振动			
	(4)	$1623\text{cm}^{-1}, 1586\text{cm}^{-1}$	N—H 变形振动和芳环骨架伸缩振动(C—C)叠合			
	(5)	$1498\text{cm}^{-1}, 1469\text{cm}^{-1}$	芳环骨架伸缩振动(C—C)			
	(6)	1272cm^{-1}	C—N 伸缩振动(芳胺特征)			
	(7)	752cm^{-1}	芳环 C—H 变形振动(邻位取代特征)			
1H 谱峰归属	峰号	δ	积分	裂分峰数	归属	推断
	(a)	2.1	3H	单峰	CH_3	1 个 CH_3 峰, 单峰, 可能有 $\text{Ar}-\text{CH}_3$
	(b)	3.5	2H	单峰	NH_2	1 个 NH_2 峰, 单峰, 可能 $\text{Ar}-\text{NH}_2$
(c)	6.5~7.2	2H+2H	多重峰	Ar—H	苯环双取代(非对位取代)	
确定结构					$\text{Ar}-\text{CH}_3$ 化学位移查表 $\delta \sim 2.1$; $\text{Ar}-\text{NH}_2$ 化学位移查表 $\delta = 2.9 \sim 5.0$, 故结构正确	

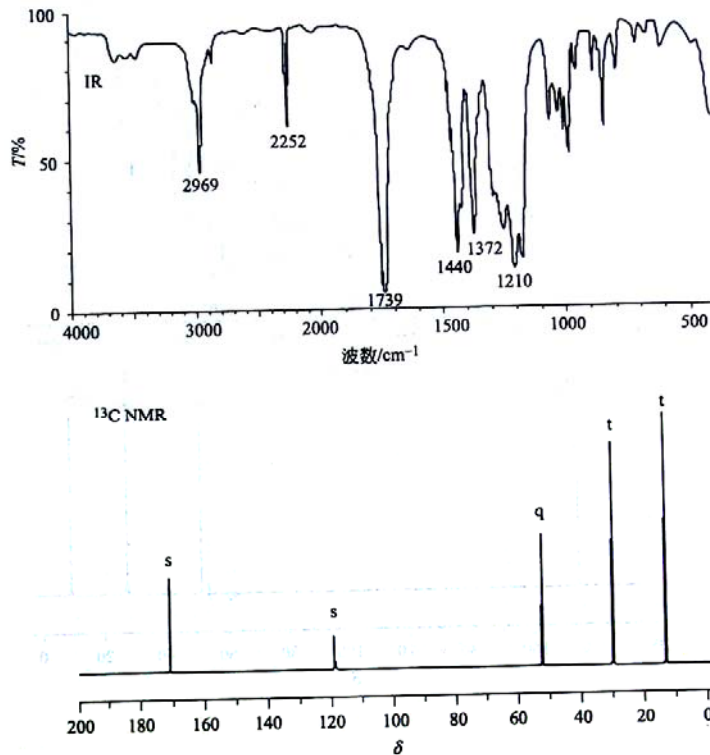
【例 28】 某化合物 $C_4H_8O_2$ ，根据如下 IR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U = 1 + 4 + 1/2(0 - 8) = 1$		可能含有 C=O		
IR 谱峰归属	(1)	2985cm^{-1}	饱和 C-H 伸缩振动		
	(2)	1741cm^{-1}	C=O 的特征吸收峰(酯羰基)		
	(3)	$1464\text{cm}^{-1}, 1357\text{cm}^{-1}$	饱和 C-H 变形振动		
	(4)	1203cm^{-1}	酯 C-O-C 伸缩振动		
C NMR 谱峰归属	峰号	δ	偏共振多重性	归属	推断
	(a)	9.0	q	CH_3	$\text{C}-\text{C}^*\text{H}_3$
	(b)	28.0	t	CH_2	$\text{C}-\text{C}^*\text{H}_2-\text{C}-\text{O}$
	(c)	51.0	q	CH_3	$\text{O}-\text{C}^*\text{H}_3$
(d)	176.0	s		C	C=O(酯羰基)
确定结构	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$			分子中有 4 个碳谱图中产生 4 个峰,分子没有对称性; $\text{O}-\text{C}^*\text{H}_3$ 化学位移查表 $\delta = 50 \sim 60$,故结构正确	
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确				

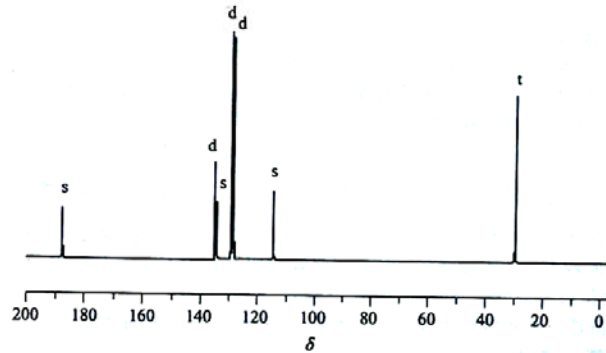
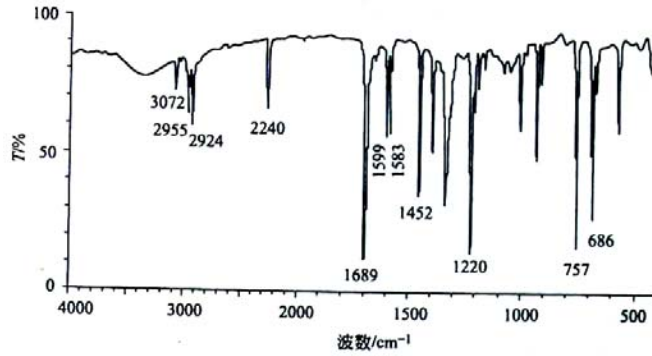
【例 29】某化合物 $C_5H_7O_2N$ ，根据如下 IR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U=1+5+1/2(1-7)=3$		可能含有 C—O、C≡N		
IR 谱峰归属	(1)	2969cm^{-1}	饱和 C—H 伸缩振动		
	(2)	2252cm^{-1}	氰基 C≡N 伸缩振动特征峰		
	(3)	1739cm^{-1}	C—O 的特征吸收峰(酯羰基)		
	(4)	$1440\text{cm}^{-1}, 1372\text{cm}^{-1}$	饱和 C—H 变形振动		
	(5)	1210cm^{-1}	酯 C—O—C 伸缩振动		
NMR 谱峰归属	峰号	δ	偏共振多重性	归属	推断
	(a)	13.0	t	CH_2	$\text{C}-\text{C}^* \text{H}_2-\text{C}\equiv\text{N}$
	(b)	29.8	t	CH_2	$\text{O}-\text{C}-\text{C}^* \text{H}_2-\text{C}$
	(c)	52.3	q	CH_3	$\text{C}^* \text{H}_3-\text{O}$
	(d)	118.8	s	C	$\text{C}^* \equiv \text{N}$
(e)	170.8	s	C	C^*-O	
确定结构	$\text{N}=\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$			查表该结构化学位移符合实测结果,故结构正确	
结构验证	其不饱和度与计算结果相符,并与标准谱图对照证明结构正确				

【例 30】 某化合物 C_9H_7NO ，根据如下 IR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



解

不饱和度	$U=1+9+1/2(1-7)=7$		可能含有苯环、 $C=O$ 、 $C\equiv N$		
IR 谱峰归属	(1)	3072cm^{-1}	不饱和 $C-H$ 伸缩振动 ($Ar-H$)		
	(2)	2969cm^{-1}	饱和 $C-H$ 伸缩振动		
	(3)	2240cm^{-1}	氰基 $C\equiv N$ 伸缩振动特征峰		
	(4)	1689cm^{-1}	$C=O$ 的特征吸收峰		
	(5)	$1599\text{cm}^{-1}, 1583\text{cm}^{-1}$	芳环骨架伸缩振动 ($C=C$)		
	(6)	1452cm^{-1}	芳环骨架伸缩振动 ($C=C$)		
	(7)	$757\text{cm}^{-1}, 686\text{cm}^{-1}$	芳环 $C-H$ 变形振动和环骨架变形振动 (单取代特征)		
NMR 谱峰归属	峰号	δ	偏共振多重性	归属	推断
	(a)	29.6	t	CH_2	$O=C-CH_2-C\equiv N$
	(b)	114.4	s	C	$C\equiv N$
	(c)	128.6	d	CH	苯环没取代碳
	(d)	129.2	d	CH	苯环没取代碳
	(e)	134.3	s	C	苯环取代碳
	(f)	134.8	d	CH	苯环没取代碳
(g)	187.8	s	C	$C=O$	
确定结构			查表该结构化学位移符合实测结果, 故结构正确		
结构验证	其不饱和度与计算结果相符, 并与标准谱图对照证明结构正确				