

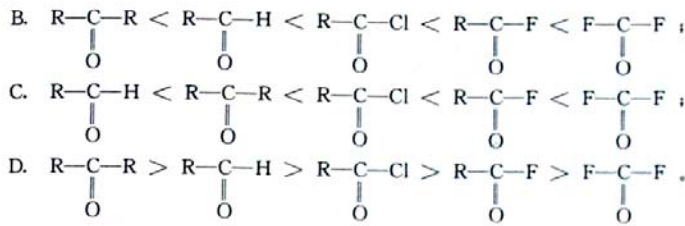
红外光谱

(一) 判断题

1. 红外光谱不仅包括振动能级的跃迁, 也包括转动能级的跃迁, 故又称为振转光谱。()
2. 同核双原子分子 $N \equiv N$, $Cl-Cl$, $H-H$ 等无红外活性。()
3. 由于振动能级受分子中其他振动的影响, 因此红外光谱中出现振动耦合谱带。()
4. 确定某一化合物骨架结构的合理方法是红外光谱分析法。()
5. 对称结构分子, 如 H_2O 分子, 没有红外活性, 水分子的 $H-O-H$ 对称伸缩振动不产生吸收峰。()
6. 红外光谱图中, 不同化合物中相同基团的特征频率峰总是在特定波长范围内出现, 故可以根据红外光谱图中的特征频率峰来确定化合物中该基团的存在。()
7. 不考虑其他因素的影响, 下列羰基化合物 $\nu_{C=O}$ 伸缩频率的大小顺序为: 酰卤 > 酰胺 > 酸 > 醛 > 酯。()
8. 醛基中 ν_{C-H} 伸缩频率出现在 2720cm^{-1} 。()
9. 红外光谱与紫外光谱仪在构造上的差别是检测器不同。()
10. 当分子受到红外光激发, 其振动能级发生跃迁时, 化学键越强吸收的光子数目越多。()
11. 游离有机酸 $C=O$ 伸缩振动 $\nu_{C=O}$ 频率一般出现在 1760cm^{-1} , 但形成多聚体时, 吸收频率会向高波数移动。()
12. 醛、酮、羧酸等的羰基 ($\text{C}=\text{O}$) 的伸缩振动在红外光谱中的吸收峰频率相同。()
13. 红外吸收峰的数目一般比理论振动数目少, 原因之一是有些振动是非红外活性的。()
14. 红外光谱的特点是一方面官能团的特征吸收频率的位置基本上是固定的; 另一方面它们又不是绝对不变的, 其频率位移可以反映分子的结构特点。()
15. Fermi 共振是一个基频振动与倍频 (泛频) 或组频之间产生耦合作用。()

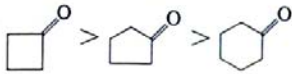
(二) 选择题 (单项选择)

1. 红外光可引起物质的能级跃迁是 ()。
A. 分子的电子能级的跃迁, 振动能级的跃迁, 转动能级的跃迁;
B. 分子内层电子能级的跃迁;
C. 分子振动能级及转动能级的跃迁;
D. 分子转动能级的跃迁。
2. CO_2 的振动自由度和在红外光谱中出现的吸收峰数目为 ()。
A. 4 和 4; B. 4 和 3; C. 4 和 2; D. 2 和 2。
3. H_2O 在红外光谱中出现的吸收峰数目为 ()。
A. 3; B. 4; C. 5; D. 2。
4. 在红外光谱中, $\text{C}=\text{O}$ 的伸缩振动吸收峰出现的波数 (cm^{-1}) 范围是 ()。
A. 1900~1650; B. 2400~2100; C. 1600~1500; D. 1000~650。
5. 在下列分子中, 不能产生红外吸收的是 ()。
A. CO_2 ; B. H_2O ; C. SO_2 ; D. H_2 。
6. 下列化学键的伸缩振动所产生的吸收峰波数最大的是 ()。
A. $C=O$; B. $C-H$; C. $C=C$; D. $O-H$ 。
7. 表示红外分光光度法通常用 ()。
A. HPLC; B. GC; C. IR; D. TLC。
8. 下列各答案中, $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动频率大小顺序正确的是 ()。
A. $R-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-R > R-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-Cl > R-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-H > R-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-F > R-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-F$;

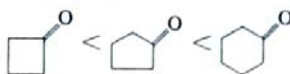


9. 在下列排序中, 正确的是 ()。

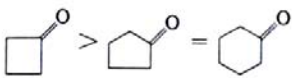
A. $\nu_{\text{C-O}}$ 的顺序为



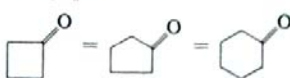
B. $\nu_{\text{C-O}}$ 的顺序为



C. $\nu_{\text{C-O}}$ 的顺序为



D. $\nu_{\text{C-O}}$ 的顺序为



10. 羰基化合物①RCOR、②RCOCl、③RCOH、④RCOF 中, C—O 伸缩振动频率最高的是 ()。

A. ①; B. ②; C. ③; D. ④。

11. 在醇类化合物中, O—H 伸缩振动频率随溶液浓度增加而向低波数移动, 原因是 ()。

A. 溶液极性变大; B. 分子间氢键增强; C. 诱导效应变大; D. 易产生振动耦合。

12. 某化合物在紫外光区 270nm 处有一弱吸收, 在红外光谱中有如下吸收峰: 2700~2900 cm^{-1} , 1725 cm^{-1} , 则该化合物可能是 ()。

A. 醛; B. 酮; C. 羧酸; D. 酯。

13. 某化合物在紫外光区 204nm 处有一弱吸收, 在红外光谱中有如下吸收峰: 3300~2500 cm^{-1} (宽峰), 1710 cm^{-1} , 则该化合物可能是 ()。

A. 醛; B. 酮; C. 羧酸; D. 酯。

14. CO_2 分子的平动、转动、振动自由度为 ()。

A. 3, 2, 4; B. 2, 3, 4; C. 3, 4, 2; D. 4, 2, 3。

15. 某化合物在紫外光区未见吸收, 在红外光谱上 3400~3200 cm^{-1} 有强烈吸收, 该化合物可能是 ()。

A. 羧酸; B. 酚; C. 醇; D. 醚。

16. 某种化合物, 其红外光谱上 3000~2800 cm^{-1} , 1450 cm^{-1} , 1375 cm^{-1} 和 720 cm^{-1} 等处有主要吸收带, 该化合物可能是 ()。

A. 烷烃; B. 烯烃; C. 炔烃; D. 芳烃。

17. 红外光谱解析分子结构的主要参数是 ()。

A. 质荷比; B. 波数; C. 耦合常数; D. 保留值。

18. 应用红外光谱法进行定量分析优于紫外光谱法的一点的是 ()。

A. 灵敏度高; B. 可测定的物质范围广;

C. 可以测定低含量组分; D. 测定误差小。

19. 时间域函数与频率域函数采用什么方法进行转换? ()

A. 测量峰面积; B. 傅立叶变换;

C. 使用 Michelson 干涉仪; D. 强度信号由吸光度改为透过率。

20. 测定有机化合物的相对分子质量, 应采用何法? ()

A. 气相色谱法; B. 红外光谱; C. 质谱分析法; D. 核磁共振法。

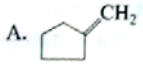
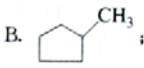
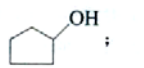
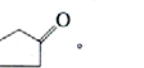
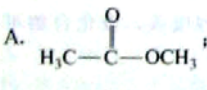
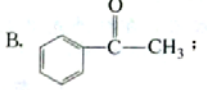
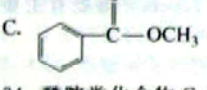
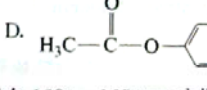
21. 下列气体中, 不能吸收红外光的是 ()。

A. H_2O ; B. CO_2 ; C. HCl ; D. N_2 。

22. 某一化合物在紫外光区未见吸收带, 在红外光谱的官能团区有如下吸收峰: 3000 cm^{-1} 左右, 1650 cm^{-1} 。该化合物可能是 ()。

A. 芳香族化合物; B. 烯烃; C. 醇; D. 酮。

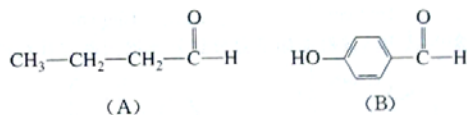
23. 线性分子变形振动的自由度为 ()。

- A. $3N-6$; B. $3N-5$; C. $2N-4$; D. $2N-5$ 。
24. 一种氯苯的红外光谱图在 $900\sim 690\text{cm}^{-1}$ 间无吸收带, 它的可能结构为 ()。
- A. 对二氯苯; B. 间三氯苯; C. 六氯苯; D. 四取代氯苯。
25. 一种能作为色散红外光谱仪的色散元件材料为 ()。
- A. 玻璃; B. 石英; C. 红宝石; D. 卤化物晶体。
26. 下列数据中, 哪一组数据能包括 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COH}$ 的吸收带 ()。
- A. $3000\sim 2700\text{cm}^{-1}$, $1675\sim 1500\text{cm}^{-1}$, $1475\sim 1300\text{cm}^{-1}$;
 B. $3300\sim 3010\text{cm}^{-1}$, $1675\sim 1500\text{cm}^{-1}$, $1475\sim 1300\text{cm}^{-1}$;
 C. $3300\sim 3010\text{cm}^{-1}$, $1900\sim 1650\text{cm}^{-1}$, $1000\sim 650\text{cm}^{-1}$;
 D. $3000\sim 2700\text{cm}^{-1}$, $1900\sim 1650\text{cm}^{-1}$, $1475\sim 1300\text{cm}^{-1}$ 。
27. 乙酰乙酸酯有酮式和烯醇式两种互变异构体, 与烯醇式结构相对应的一组特征红外吸收峰是 ()。
- A. 1738cm^{-1} , 1717cm^{-1} ; B. 3000cm^{-1} , 1650cm^{-1} ;
 C. 3000cm^{-1} , 1738cm^{-1} ; D. 1717cm^{-1} , 1650cm^{-1} 。
28. 红外吸收光谱是 ()。
- A. 吸收光谱; B. 发射光谱; C. 电子光谱; D. 线光谱。
29. 某化合物在 $1500\sim 2800\text{cm}^{-1}$ 无吸收, 该化合物可能是 ()。
- A. 烷烃; B. 烯烃; C. 芳烃; D. 炔烃。
30. 某化合物在 $3040\sim 3010\text{cm}^{-1}$ 和 $1680\sim 1620\text{cm}^{-1}$ 等处产生主要吸收带, 该化合物可能是 ()。
- A. ; B. ; C. ; D. 。
31. 芳香酮类化合物 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动频率向低波数位移的原因为 ()。
- A. 共轭效应; B. 氢键效应; C. 诱导效应; D. 空间效应。
32. 红外光谱给出分子结构的信息是 ()。
- A. 相对分子量; B. 骨架结构;
 C. 官能团; D. 连接方式。
33. 下列化合物 $\nu_{\text{C}=\text{O}}$ 频率最大的是 ()。
- A. ; B. ;
 C. ; D. 。
34. 酰胺类化合物 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动频率多出现在 $1680\sim 1650\text{cm}^{-1}$ 范围内, 比醛酮 $\text{C}=\text{O}$ 伸缩振动频率低的原因是 ()。
- A. 诱导效应和形成分子间氢键; B. 中介效应和形成分子间氢键;
 C. 诱导效应和形成分子内氢键; D. 中介效应和形成分子内氢键。
35. 酯类化合物的两个特征谱带是 ()。
- A. $1760\sim 1700\text{cm}^{-1}$ 和 $1300\sim 1000\text{cm}^{-1}$; B. $1760\sim 1700\text{cm}^{-1}$ 和 $900\sim 650\text{cm}^{-1}$;
 C. $3300\sim 2500\text{cm}^{-1}$ 和 $1760\sim 1700\text{cm}^{-1}$; D. $3000\sim 2700\text{cm}^{-1}$ 和 $1760\sim 1700\text{cm}^{-1}$ 。
36. 确定烯烃类型的两个谱带是 ()。
- A. $1680\sim 1630\text{cm}^{-1}$ 和 $1300\sim 1000\text{cm}^{-1}$; B. $1680\sim 1630\text{cm}^{-1}$ 和 $1000\sim 700\text{cm}^{-1}$;
 C. $2300\sim 2100\text{cm}^{-1}$ 和 $1000\sim 700\text{cm}^{-1}$; D. $3000\sim 2700\text{cm}^{-1}$ 和 $1680\sim 1630\text{cm}^{-1}$ 。
37. 确定苯环取代类型的两个谱带是 ()。
- A. $2000\sim 1650\text{cm}^{-1}$ 和 $1600\sim 1500\text{cm}^{-1}$; B. $3100\sim 3000\text{cm}^{-1}$ 和 $1600\sim 1500\text{cm}^{-1}$;
 C. $2000\sim 1650\text{cm}^{-1}$ 和 $900\sim 650\text{cm}^{-1}$; D. $3100\sim 3000\text{cm}^{-1}$ 和 $1300\sim 1000\text{cm}^{-1}$ 。
38. 通常所记录的红外光谱是一种透射光谱; 如果采用一些特殊附件可以测定反射光谱, 请指出 ATR 是 ()。
- A. 漫反射附件; B. 衰减全反射附件;

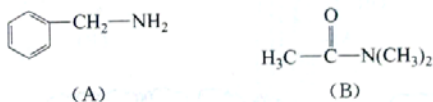
- C. 镜反射附件； D. 光声光谱附件。
39. 在透射法红外光谱中，固体样品一般采用的制样方法是（ ）。
- A. 直接研磨压片测定； B. 与 KBr 混合研磨压片测定；
- C. 配成有机溶液测定； D. 配成水溶液测定。
40. 在 CO_2 的四种振动自由度中，属于红外非活性振动而拉曼活性振动的是（ ）。
- A. 不对称伸缩振动； B. 对称伸缩振动；
- C. 面内变形振动； D. 面外变形振动。

(三) 问答题

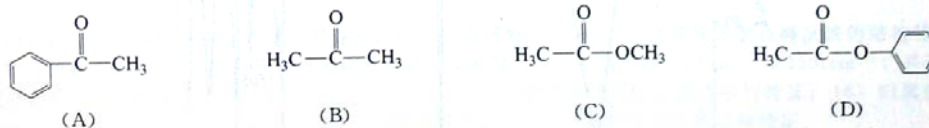
- 试论述红外光谱产生的条件？
- 试论述红外吸收峰的数目一般比理论振动数目少的原因？
- 甲基- CH_3 的振动类型有哪些？
- 试说明什么是红外活性？什么非红外活性？
- 试论述产生频率位移的因素？
- 试分别计算乙炔和苯分子自由度总数及振动自由度数目。
- 乙烯分子中 $\text{C}=\text{C}$ 对称伸缩振动有无吸收峰，为什么？
- $\text{C}-\text{H}$ 键与 $\text{C}-\text{Cl}$ 键的伸缩振动峰哪个要强一些，为什么？
- $\nu_{\text{C}=\text{O}}$ 与 $\nu_{\text{C}-\text{C}}$ 吸收峰均出现在 1660cm^{-1} 附近，试问哪一个峰强一些，为什么？
- 为什么醇- OH 伸缩振动频率随溶液浓度增大而向低波数方向位移？
- 分别预测下列化合物在红外光谱中哪一区域有吸收，各因什么振动类型引起？



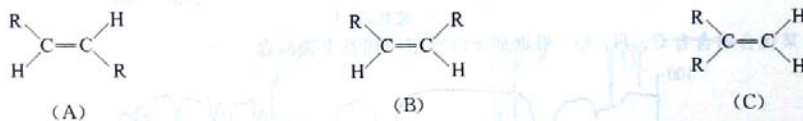
12. 下列两个化合物的红外光谱有何不同？



13. 顺式 1,2-环戊二醇的 CCl_4 的稀溶液，在 3620cm^{-1} 及 3455cm^{-1} 处出现两个峰，为什么？
14. 按 $\nu_{\text{C}=\text{O}}$ 频率增加的顺序排列下列化合物，并说明理由。



15. 下列化合物在红外光谱的什么区域有不同的特征吸收？



(四) 结构解析题

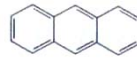
1. 如何利用红外光谱鉴定如下两个化合物？



2. 推测如下化合物 (A) 和 (B) 在 $650\sim 900\text{cm}^{-1}$ 范围产生 $\text{Ar}-\text{H}$ 面外变形振动 $\gamma_{\text{C}-\text{H}}$ 吸收峰的个数和大致范围。

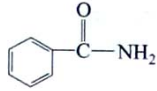


(A)

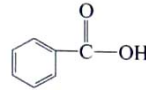


(B)

3. 下面化合物在 IR 区域内预期产生什么吸收峰?

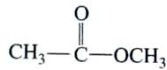


(A)

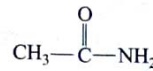


(B)

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

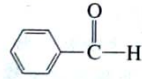


(A)

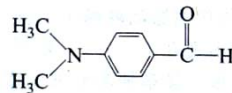


(B)

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



(A)

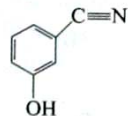


(B)

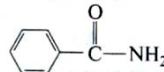
$\nu_{\text{C=O}} \quad 1690\text{cm}^{-1}$

$\nu_{\text{C=O}} \quad 1660\text{cm}^{-1}$

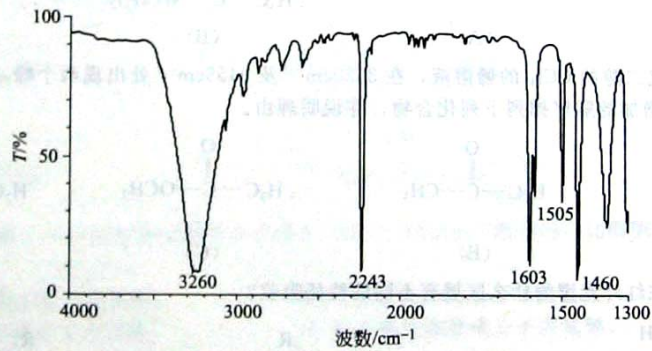
6. 某化合物其可能的结构为 A 或 B, 试根据如下部分红外光谱图确定其结构。



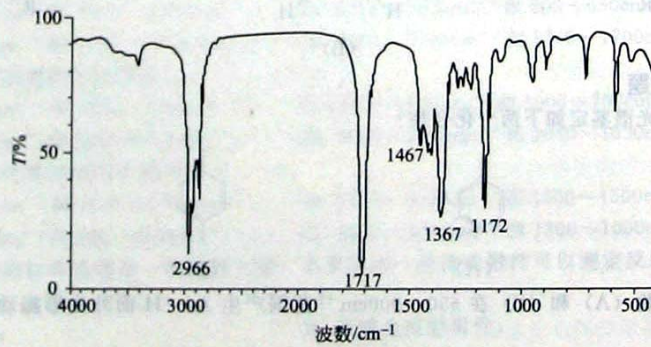
(A)



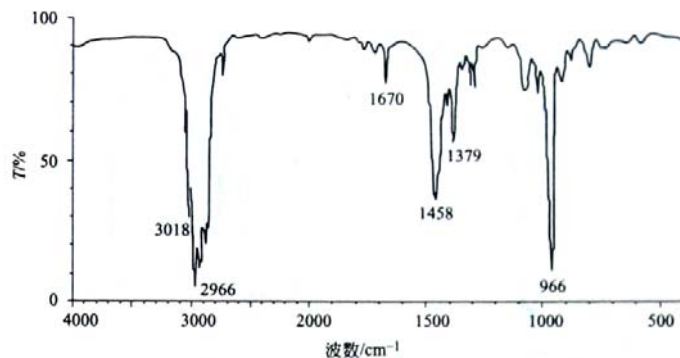
(B)



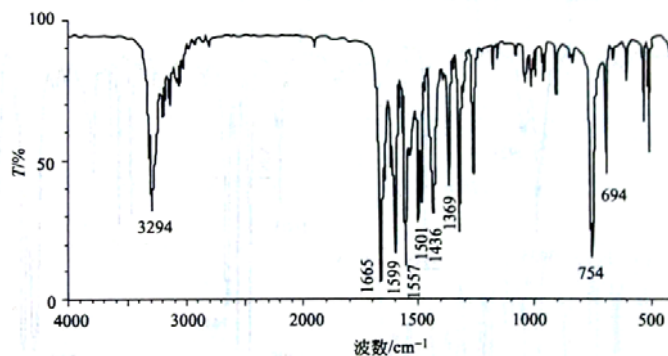
7. 某化合物含有 C、H、O, 根据如下红外谱图回答下面问题:



- (1) 该化合物是脂肪族还是芳香族？(2) 是否为醇类化合物？(3) 是否为醛、酮、酸、酯类化合物？
 (4) 是否含有双键或三键？(5) 综合以上问题给出该化合物可能的类型。
 8. 根据如下红外谱图回答下面问题：

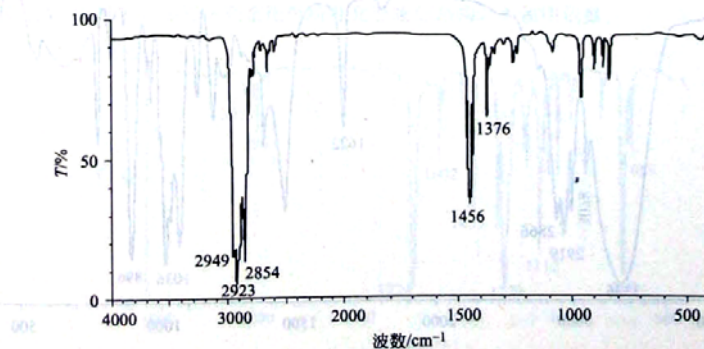


- (1) 该化合物是脂肪族还是芳香族？(2) 是否为含有—OH、—NH₂ 或 C—O？(3) 是否含有甲基？
 (4) 是否含有双键或三键？(5) 综合以上问题给出该化合物可能的类型。
 9. 根据如下红外光谱图回答问题：



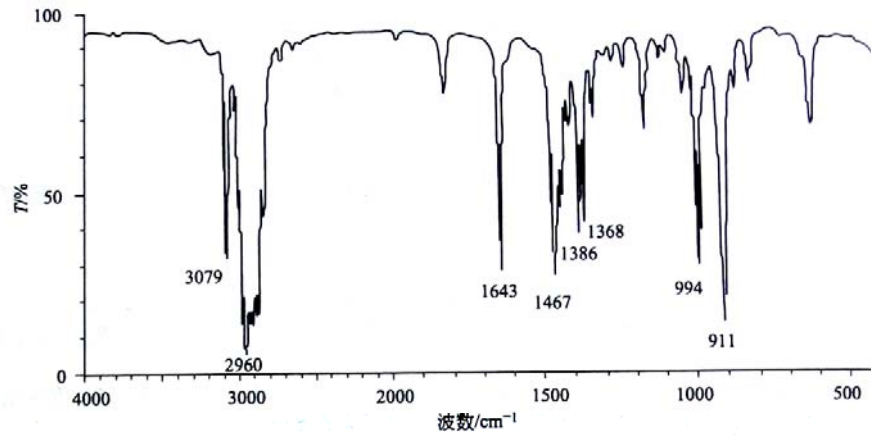
- (1) 指出该化合物是脂肪族还是芳香族；(2) 归属谱峰 3294cm⁻¹，并说明该吸收峰反映的结构特征；
 (3) 归属谱峰 1665cm⁻¹，并说明该吸收峰反映的结构特征；(4) 归属谱峰 1599cm⁻¹和 1501cm⁻¹，并说明该组吸收峰反映的结构特征；
 (5) 归属谱峰 1369cm⁻¹，并说明该吸收峰反映的结构特征；(6) 归属谱峰 754cm⁻¹和 694cm⁻¹；并说明该组吸收峰反映的结构特征；(7) 指出该化合物的结构特征。

10. 化合物 C₇H₁₄，根据如下红外光谱图回答问题。

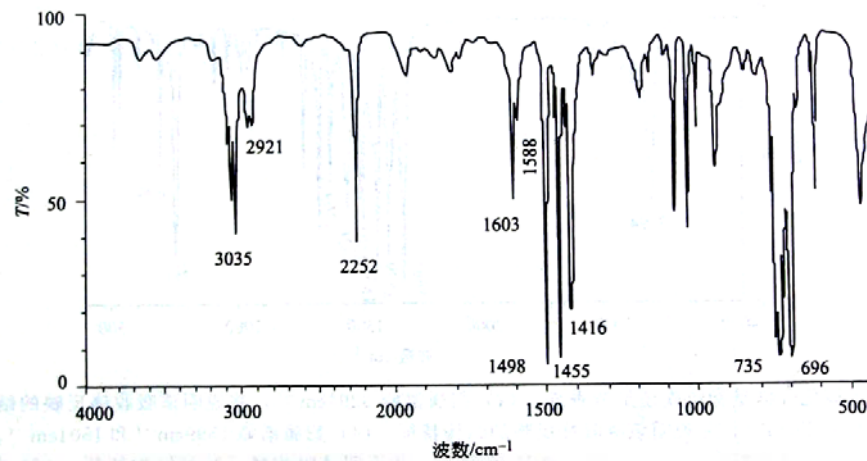


(1) 指出该化合物的类型；(2) 归属各谱峰，并说明该谱峰反映的结构特征；(3) 指出该化合物的结构特征。

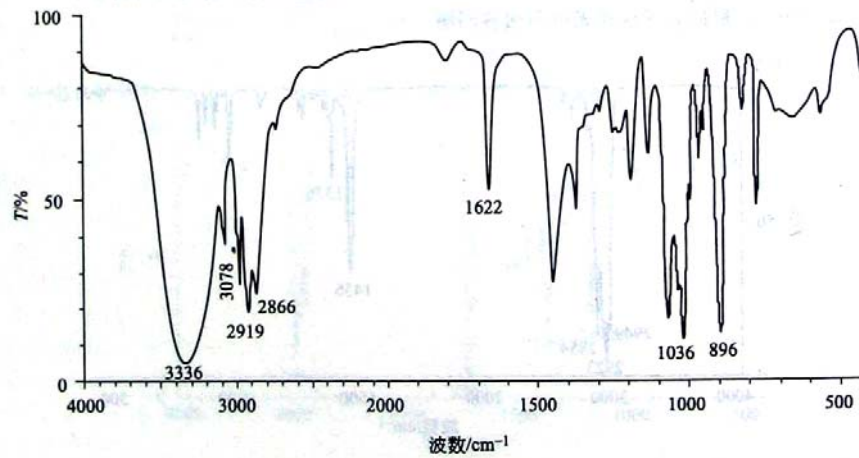
11. 化合物 C_6H_{12} ，根据如下 IR 谱图确定结构，并说明依据。



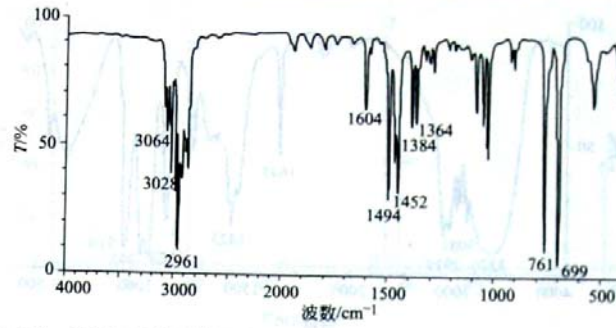
12. 化合物 C_8H_7N ，根据如下 IR 谱图确定结构，并说明依据。



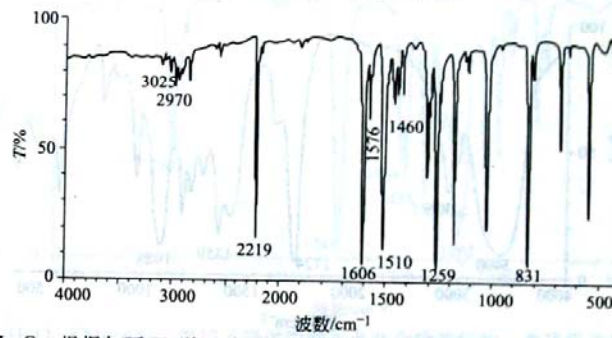
13. 化合物 C_4H_8O ，根据如下 IR 谱图确定结构，并说明依据。



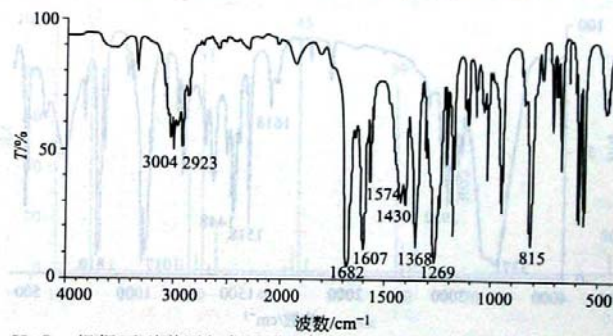
14. 化合物 C_9H_{12} ，根据如下 IR 谱图确定结构，并说明依据。



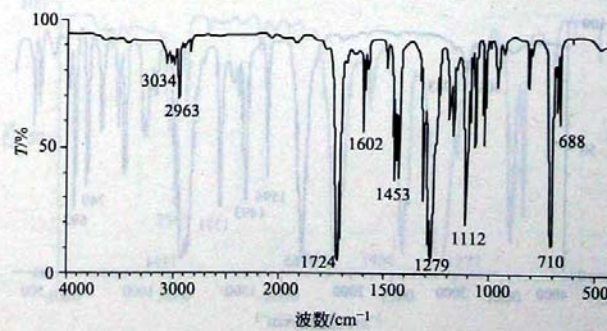
15. 化合物 C_8H_7NO ，根据如下 IR 谱图确定结构，并说明依据。



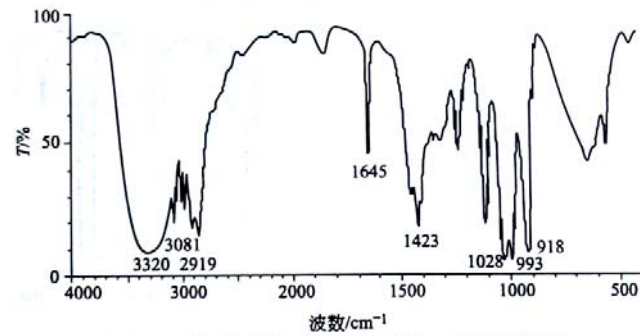
16. 化合物 $C_9H_{10}O$ ，根据如下 IR 谱图确定结构，并说明依据。



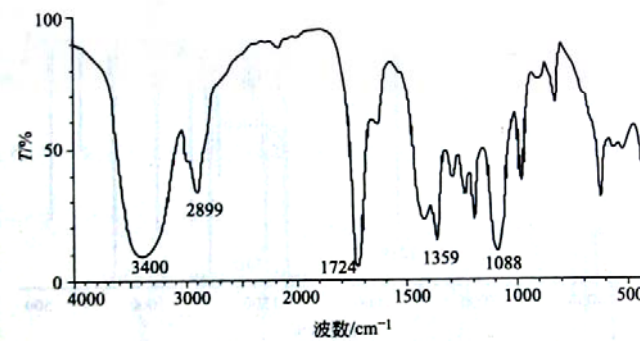
17. 某化合物 C_8H_8O ，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



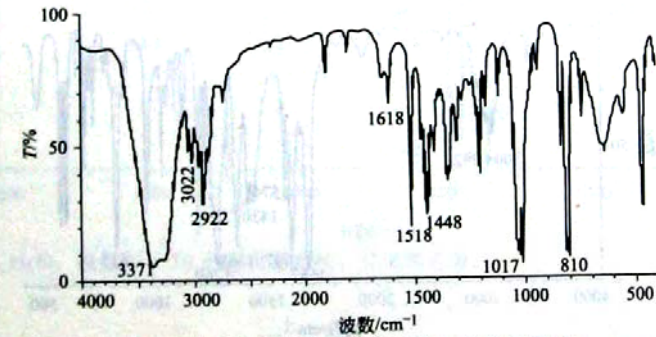
18. 某化合物 C_3H_6O ，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



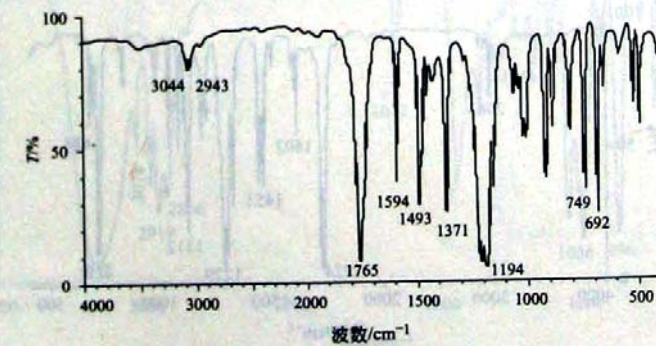
19. 某化合物 $C_3H_6O_2$ ，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



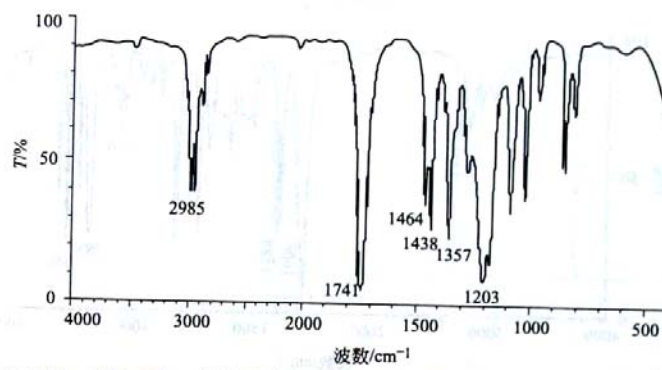
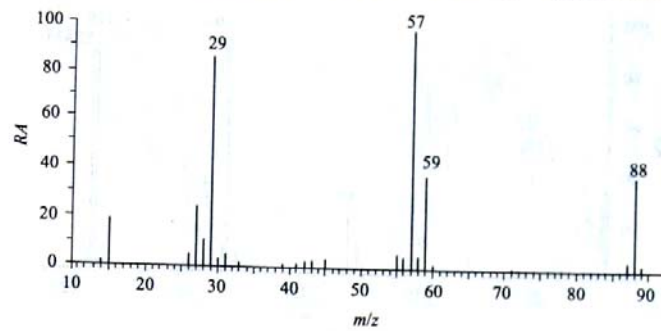
20. 某化合物 $C_8H_{10}O$ ，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



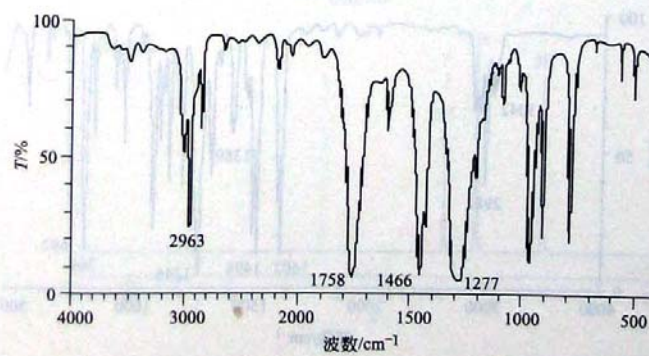
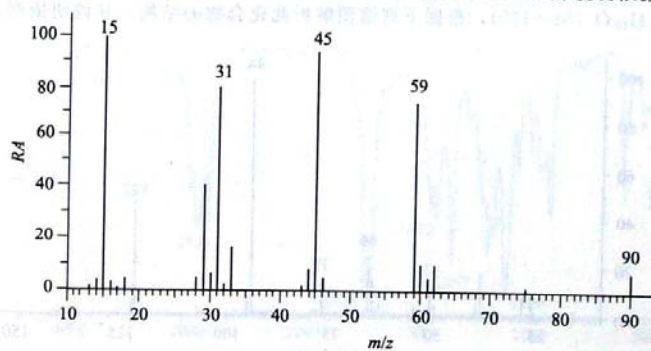
21. 某化合物 $C_8H_8O_2$ ，根据下列谱图解析此化合物的结构，并说明依据。



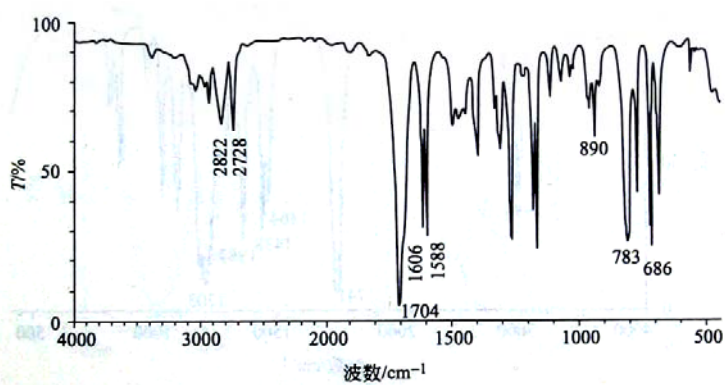
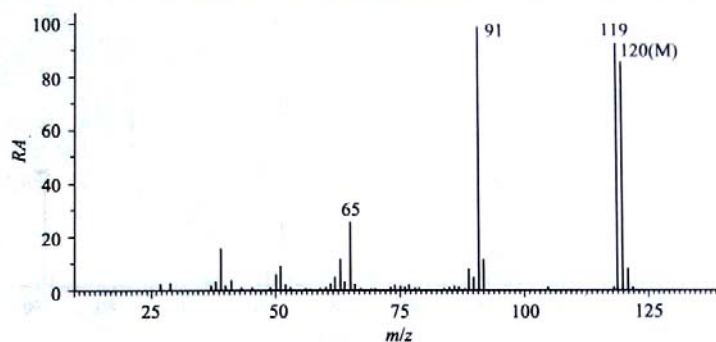
22. 某化合物 $C_4H_8O_2$ ($M=88$), 根据下列谱图解析此化合物的结构, 并说明依据。



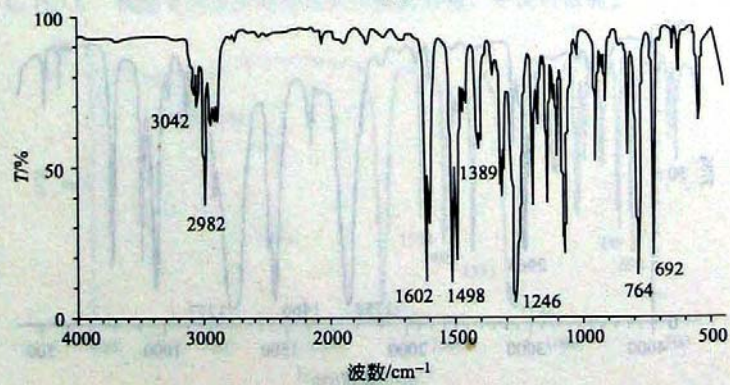
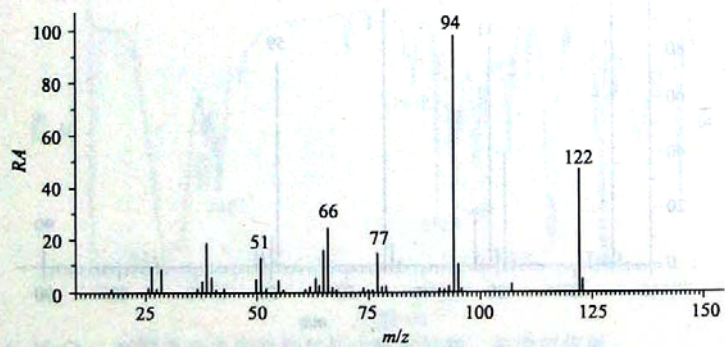
23. 某化合物 $C_3H_6O_3$ ($M=90$), 根据下列谱图解析此化合物的结构, 并说明依据。



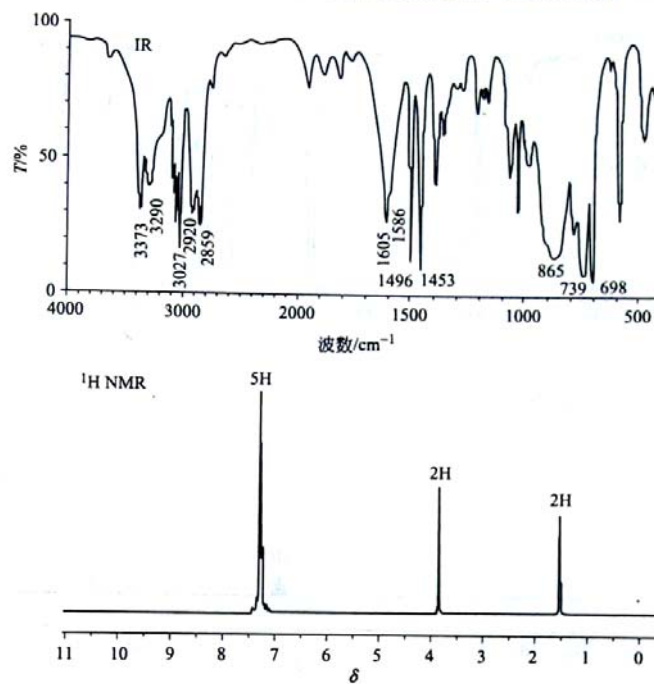
24. 某化合物 C_8H_8O ($M=120$), 根据下列谱图解析此化合物的结构, 并说明依据。



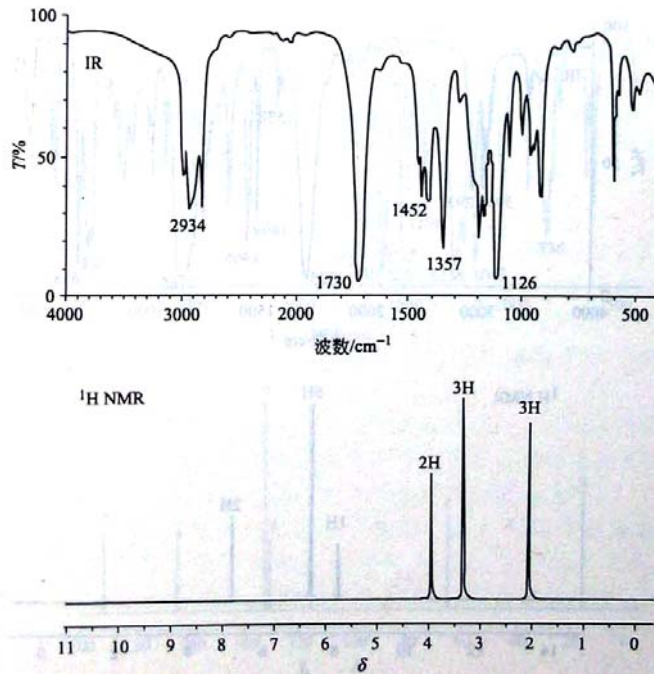
25. 某化合物 $C_8H_{10}O$ ($M=122$), 根据下列谱图解析此化合物的结构, 并说明依据。



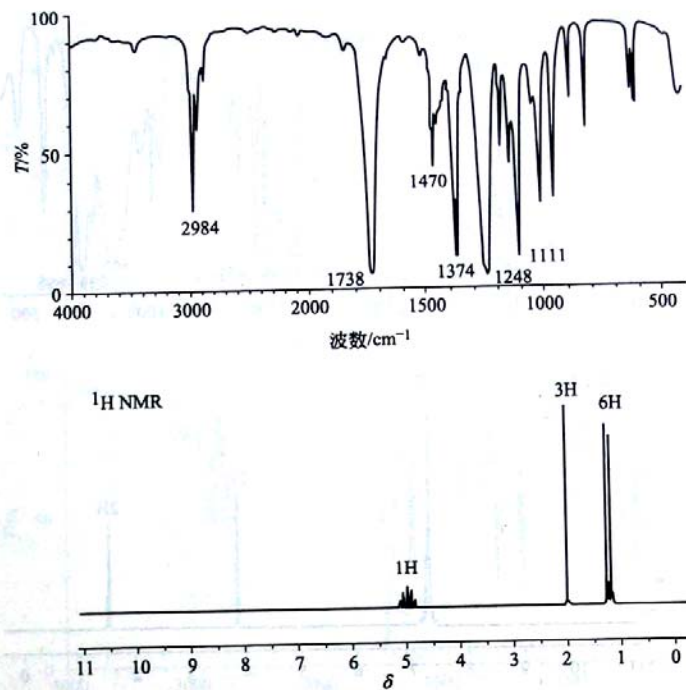
26. 某化合物 C_7H_9N ，根据如下 IR 和 1H NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



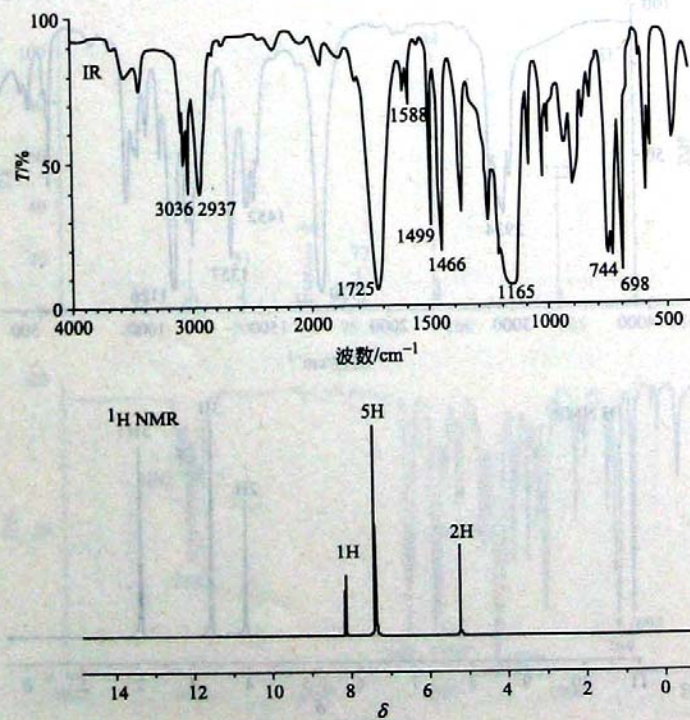
27. 某化合物 $C_4H_8O_2$ ，根据如下 IR 和 1H NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



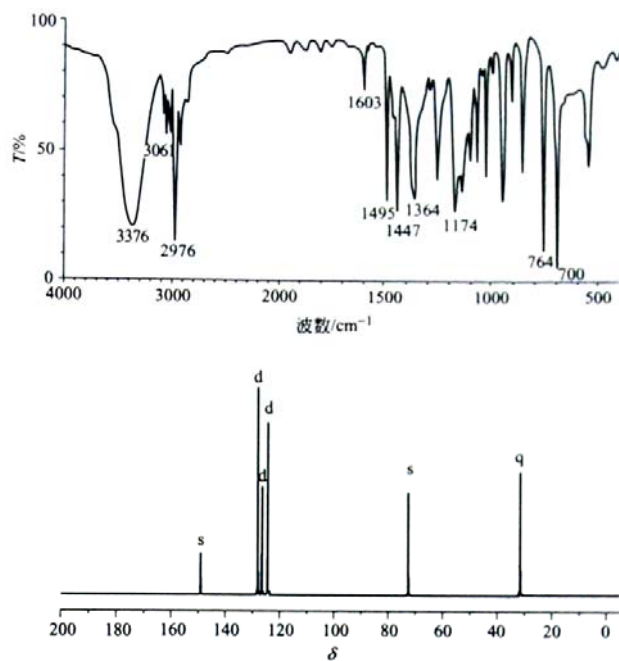
28. 某化合物 $C_5H_{10}O_2$ ，根据如下 IR 和 1H NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



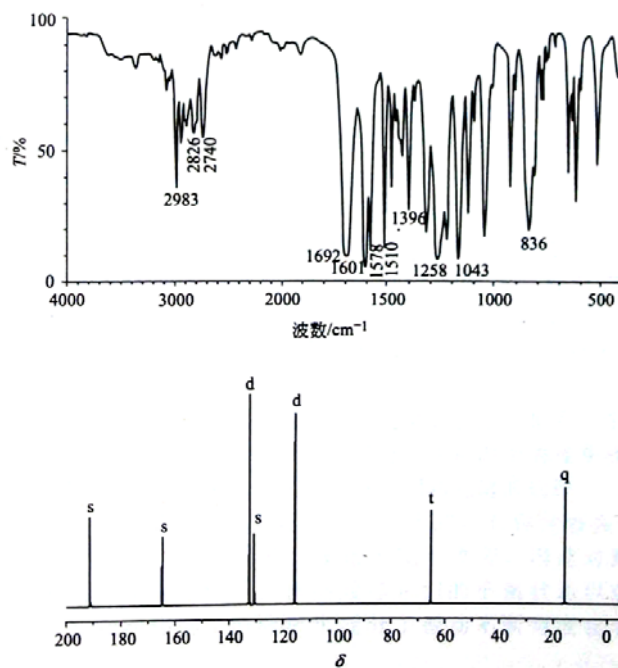
29. 某化合物 $C_8H_8O_2$ ，根据如下 IR 和 1H NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



30. 某化合物 $C_9H_{12}O$ ，根据如下 IR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



31. 某化合物 $C_9H_{10}O_2$ ，根据如下 IR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



32. 某化合物 $C_9H_{10}O_2$ ，根据如下 IR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。

