

课时 3. 2 有机化合物结构的测定

自主学案

【课标要求】

1. 了解有机化合物结构测定的一般步骤和程序，能进行确定有机化合物分子式的简单计算；
2. 能利用化学检验方法鉴定官能团；3. 初步了解一些测定有机化合物结构的现代手段。

【核心素养】

1. 证据推理与模型认知：建立研究有机物分子式和结构式的模型，并能运用相关的模型进行有机化合物的结构式和分子式的测定。
2. 科学探究与创新意识：能从有机物的结构出发，依据有机物的结构，确定有机物中各官能团，预测有机物的性质并设计实验进行探究。

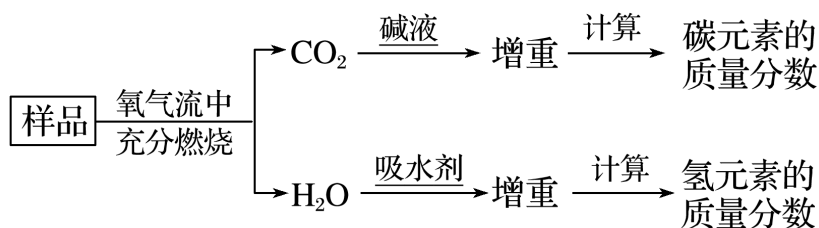
探究学习一 有机化合物分子式的确定

1. 检测有机物中含有哪些元素(定性分析)

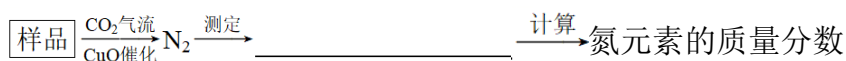
- (1) 将某有机物在 O_2 中充分燃烧后，各元素对应的燃烧产物： $C \rightarrow$ _____； $H \rightarrow$ _____； $S \rightarrow$ _____。
- (2) 若将有机物完全燃烧，生成物只有 H_2O (使无水 $CuSO_4$ 变蓝) 和 CO_2 (使澄清石灰水变浑浊)，则该有机物中一定含有的元素是 _____，可能含有的元素是 _____。
- (3) 判断是否含氧元素，可先求出产物 CO_2 和 H_2O 中 _____ 两元素的质量和，再与有机物的质量比较，若两者相等，则说明原有机物中 _____ 氧元素，否则有机物中 _____ 氧元素。

2. 确定有机物中各元素的质量分数(定量分析)

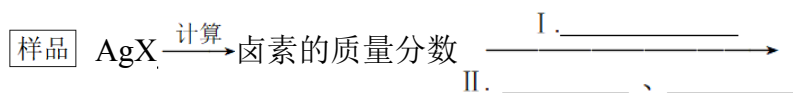
(1) 碳、氢元素质量分数的测定——燃烧分析法



(2) 氮元素质量分数的测定



(3) 卤素质量分数的测定

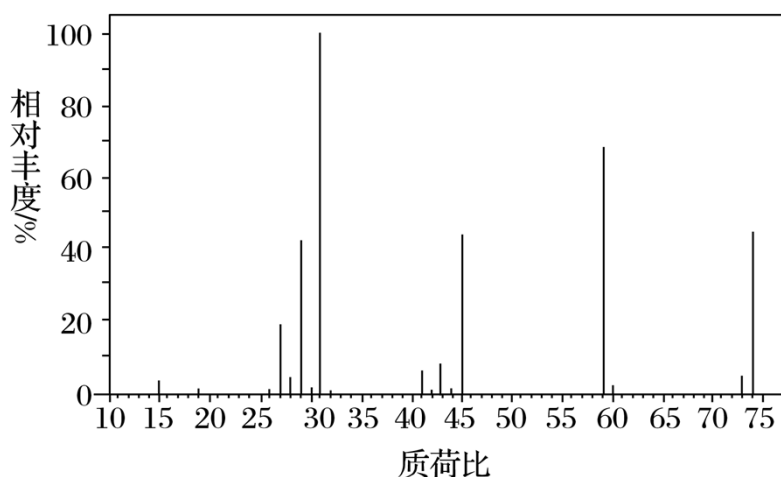


(4) 氧元素质量分数的计算

氧元素的质量分数 = $100\% - \text{其他元素质量分数之和}$ 。

2. 有机物相对分子质量的测定方法

质谱法：质谱图中质荷比最大的峰的数值就是该有机物的相对分子质量。某含碳、氢、氧三种元素的有机物 X 的质谱图如图所示，该有机物的相对分子质量为 74。



【理解应用】

1. 某化合物 6.4 g 在氧气中完全燃烧只生成 8.8 g CO_2 和 7.2 g H_2O 。下列说法正确的是()

- A. 该化合物仅含碳、氢两种元素 B. 该化合物中碳、氢原子个数比为 1:2
 C. 无法确定该化合物中是否含氧元素 D. 该化合物中一定含氧元素

规律总结 完全燃烧只生成 H_2O 和 CO_2 的有机物不一定含有氧元素，可根据氧原子守恒判断有机物中是否含有氧元素。

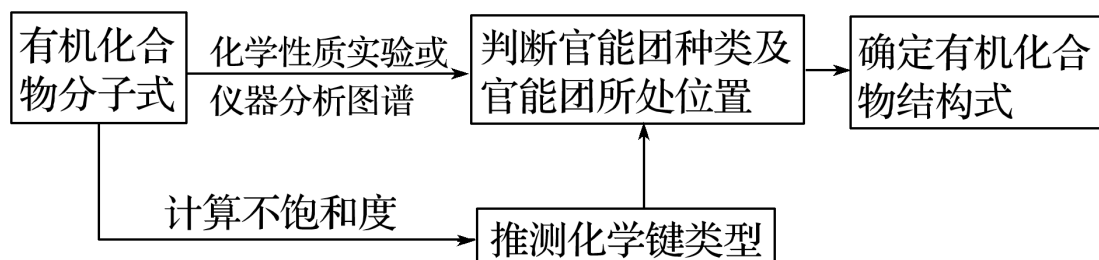
2. 燃烧某有机物 A 1.50 g，生成 1.12 L(标准状况) CO_2 和 0.05 mol H_2O 。该有机物的蒸气对空气的相对密度是 1.04，该有机物的分子式为_____。

3. 实验测得某碳氢化合物 A 中，含碳 80%，含氢 20%，该化合物的实验式为_____，又测得该化合物的相对分子质量是 30，该化合物的分子式为_____。

4. 某有机化合物仅由碳、氢、氧三种元素组成，经测定其相对分子质量为 90。取该有机物样品 1.8 g，在纯氧中完全燃烧，将产物先后通过浓硫酸和碱石灰，两者分别增重 1.08 g 和 2.64 g。该有机物的分子式为_____。

探究学习二 有机化合物结构式的确定

1. 确定有机化合物结构式的流程



2. 有机化合物分子不饱和度的计算

(1) 计算公式: $\Omega = n(\text{C}) + 1 - \frac{n(\text{H})}{2}$ 。 $n(\text{C})$ 为碳原子数; $n(\text{H})$ 为氢原子数。

- ① 若有机化合物分子中含有卤素原子, 可将其视为氢原子;
- ② 若含有氧、硫原子, 可不予考虑;
- ③ 若含有氮原子, 就在氢原子总数中减去氮原子数。

(2) 几种常见官能团的不饱和度

官能团	不饱和度	化学键	不饱和度
一个碳碳双键	_____	一个碳碳叁键	_____
一个羰基	_____	一个苯环	_____
一个脂环	_____	一个氰基	_____

3. 确定有机化合物的官能团

(1) 化学实验法检验官能团

官能团种类	检测试剂	判断依据
碳碳双键 或碳碳叁键	溴的四氯化碳溶液或溴水	_____
	酸性 KMnO_4 溶液	_____
卤素原子	NaOH 溶液(加热), 稀硝酸、 AgNO_3 溶液	有沉淀生成, 根据沉淀的颜色判断卤素的种类
醇羟基	钠	有_____放出
酚羟基	_____溶液	_____

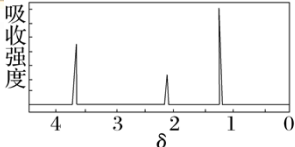
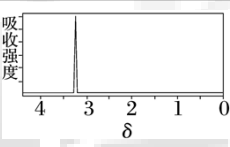
	_____(足量)	有_____生成
醛基	银氨溶液(水浴)	有_____生成
	新制氢氧化铜悬浊液(加热)	有_____生成
羧基	NaHCO ₃ 溶液或Na ₂ CO ₃ 溶液	有_____

(2)物理测试法

①红外光谱：可以获得有机物分子中含有_____的信息。

(2)核磁共振氢谱：处于不同化学环境中的氢原子种类等于核磁共振氢谱中的峰的个数；处于不同化学环境的氢原子的数目比等于峰的面积比。

例如：分子式为C₂H₆O的有机物的核磁共振氢谱如下

	乙醇	甲醚
核磁共振氢谱		
吸收峰数目	_____	_____
不同吸收峰面积比	2 : 1 : 3	
结构简式	_____	_____

4. 医用胶单体的结构确定

(1)测定实验式

燃烧 30.6 g 医用胶的单体样品，实验测得生成 70.4 g CO₂、19.8 g H₂O、2.24 L N₂(已换算成标准状况)，确定其实验式的计算步骤如下：

①计算各元素的物质的量：

$$n(\text{CO}_2) = \underline{\hspace{2cm}}, \quad n(\text{C}) = \underline{\hspace{2cm}} \text{ mol};$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \underline{\hspace{2cm}} \text{ mol}, \quad n(\text{H}) = \underline{\hspace{2cm}} \text{ mol};$$

$$n(\text{N}_2) = \underline{\hspace{2cm}}, \quad n(\text{N}) = \underline{\hspace{2cm}} \text{ mol};$$

$$n(\text{O}) = \underline{\hspace{2cm}} = \underline{\hspace{2cm}} \text{ mol}.$$

②确定实验式

$n(\text{C}) : n(\text{H}) : n(\text{N}) : n(\text{O}) = \underline{\hspace{2cm}}$ ，则实验式为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

(2)确定分子式

已知：由质谱分析法测定出该样品的相对分子质量为 153.0。

设该化合物的分子式 $(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{NO}_2)_n$ ，则 $n = \underline{\hspace{2cm}}$ ，则该化合物的分子式为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

(3)推导结构式

①计算不饱和度。不饱和度 $= n(\text{C}) + 1 - \frac{[n(\text{H}) - n(\text{N})]}{2} = 8 + 1 - \frac{(11 - 1)}{2} = 4$ 。

②用化学方法推测分子中的官能团

- 加入溴的四氯化碳溶液，红棕色退去，说明可能含有 $\underline{\hspace{2cm}}$ 或 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。
- 加入 $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2$ 溶液、硫酸及 KOH 的甲醇溶液，无明显变化，说明不含有 $\underline{\text{—NO}_2}$ 。
- 加入稀碱水溶液并加热，有氨气放出，说明含有 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

③推测样品分子的碳骨架结构和官能团在碳链上的位置。样品分子核磁共振氢谱图和核磁共振

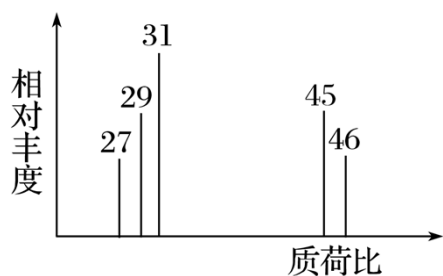
碳谱图提示：该化合物分子中含有 $\text{CH}_2=\text{C}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{R}$ 和 $-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 基团。

④确定结构简式。

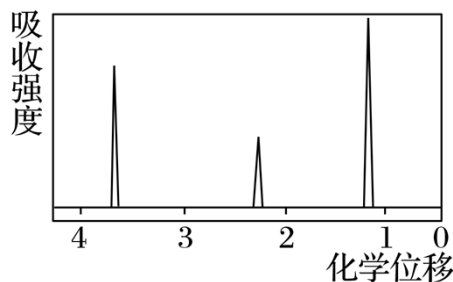
综上所述，医用胶单体的结构简式为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

【理解应用】

1. 为测定某有机物 A 的结构，设计了如下实验：①将 2.3 g 该有机物完全燃烧，生成了 0.1 mol CO_2 和 2.7 g H_2O ；②用质谱仪实验得质谱图；③用核磁共振仪处理该化合物得核磁共振氢谱图，图中三个峰的面积比为 1 : 2 : 3。试回答下列问题：



质谱图



核磁共振氢谱图

(1)有机物 A 的相对分子质量为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

(2)有机物 A 的实验式为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

(3)根据 A 的实验式 $\underline{\hspace{2cm}}$ (填“能”或“不能”)确定 A 的分子式。

(4)A 的分子式为 $\underline{\hspace{2cm}}$ ，结构简式为 $\underline{\hspace{2cm}}$ 。

【归纳总结】 有机化合物结构式的确定方法

(1)根据价键规律确定

某些有机物根据价键规律只存在一种结构，则直接根据分子式确定其结构式。例如： C_2H_6 ，只能是 CH_3CH_3 ， CH_4O 只能是 CH_3OH 。

(2)通过定性实验确定

实验→有机物表现的性质及相关结论→确定官能团→确定结构式。

2. 某研究性学习小组为确定某蜡状有机物 A 的结构和性质，他们拟用传统实验的手段与现代技术相结合的方法进行探究。请你参与过程探究。

I. 实验式的确定

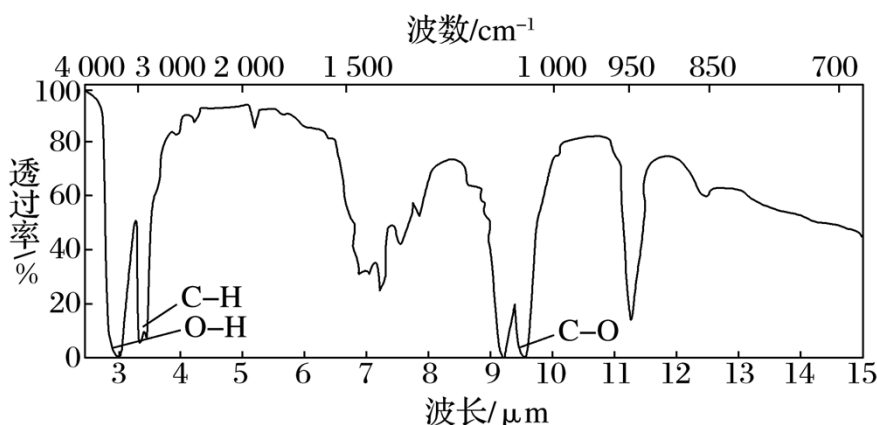
(1)取样品 A 进行燃烧法测定，发现燃烧后只生成 CO_2 和 H_2O ，某次燃烧后，经换算得到了 0.125 mol CO_2 和 0.15 mol H_2O 。据此得出的结论是_____。

(2)另一实验中，取 3.4 g 蜡状有机物 A 在 3.36 L(标准状况下，下同)氧气中完全燃烧，两者均恰好完全反应，生成 2.8 L CO_2 和液态水。由此得出 A 的实验式是_____。

II. 结构式的确定(经测定 A 的相对分子质量为 136)

(3)取少量样品熔化，加入钠有氢气放出，说明 A 分子中含有_____。

(4)进行核磁共振，发现只有两组特征峰，且峰面积比为 2：1，再做红外光谱，发现与乙醇一样透过率在同一处波数被吸收。图谱如下：



则 A 的结构简式为_____。

【基础过关】

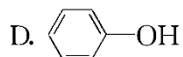
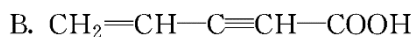
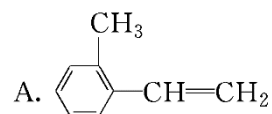
1. 燃烧 0.2 mol 某有机物，得到 0.2mol CO_2 和 0.4 mol H_2O ，由此可得出的结论是()

A. 分子中 C、H、O 个数比为 1：2：3 B. 分子中 C、H 个数比为 1：3

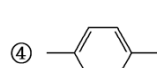
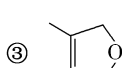
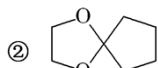
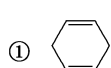
C. 分子中含有氧元素

D. 此有机物的最简式为 CH_4

2. 确定有机化合物的不饱和度是判断有机物结构的重要内容之一, 下列 4 种物质中, 不饱和度为 4 的是()



3. (2019·海南高考改编) 分子中只有两种不同化学环境的氢, 且数目比为 3 : 2 的化合物有()



A. ①②

B. ②③

C. ③④

D. ②④

4. 某芳香族有机物的分子式为 $\text{C}_8\text{H}_6\text{O}_2$, 它的分子(除苯环外不含其他环)中不可能有()

A. 两个羟基

B. 一个醛基

C. 两个醛基

D. 一个羧基

5. 二甲醚和乙醇互为同分异构体, 其鉴别可采用化学方法或物理方法, 下列鉴别方法中不能对二者进行鉴别的是()

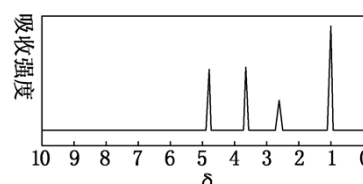
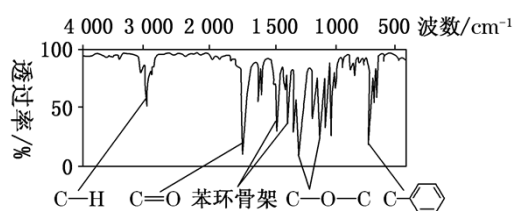
A. 利用金属钠或金属钾

B. 利用质谱法

C. 利用红外光谱法

D. 利用核磁共振氢谱法

6. 化合物 A 经李比希法和质谱法分析得知其相对分子质量为 136, 分子式为 $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_2$ 。A 的核磁共振氢谱有 4 组峰且面积之比为 1 : 2 : 2 : 3, A 分子中只含 1 个苯环且苯环上只有 1 个取代基, 其红外光谱与核磁共振氢谱如图。关于 A 的下列说法中正确的是()



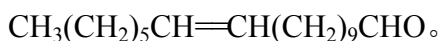
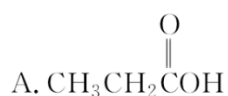
A. A 属于酯类化合物, 在一定条件下不能发生水解反应

B. A 在一定条件下可与 4 mol H_2 发生加成反应

C. 与 A 属于同类化合物的同分异构体只有 2 种

D. 符合题中 A 分子结构特征的有机物只有 1 种

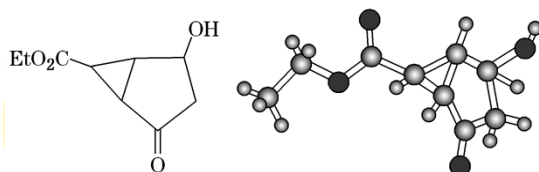
7. 有机物分子式 $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2$ 可与新制的 $\text{Cu}(\text{OH})_2$ 在加热时反应生成砖红色沉淀, 经检测核磁共振氢谱中有三个共振峰, 面积比为 3 : 2 : 1, 该有机物的结构简式是()



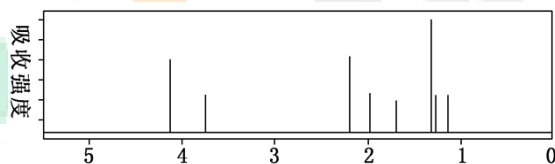
8. 下列关于检验该信息素中官能团的试剂和顺序正确的是()

- A. 先加入酸性高锰酸钾溶液；后加银氨溶液，水浴加热
- B. 先加入溴水；后加酸性高锰酸钾溶液
- C. 先加入新制氢氧化铜悬浊液，加热；酸化后再加入溴水
- D. 先加入银氨溶液；再另取该物质加入溴水

9. 某化合物的结构(键线式)及球棍模型如下：



该有机分子的核磁共振氢谱图如下(单位是 ppm)：



下列关于该有机物的叙述不正确的是()

- A. 该有机物不同化学环境的氢原子有 8 种
- B. 该有机物与氢氧化钠的醇溶液共热时可以发生消去反应
- C. 键线式中的 Et 代表的基团为 $-\text{CH}_2\text{CH}_3$
- D. 1 mol 该有机物最多可以与 1 mol NaOH 反应

【素养提升】

10. 有机物 A 只由 C、H、O 三种元素组成，常用作有机合成的中间体，测得 8.4 g 该有机物经燃烧生成 22.0 g CO_2 和 7.2 g 水。质谱图表明其相对分子质量为 84；红外光谱分析表明 A 中含有 $-\text{OH}$ 和位于分子端的 $-\text{C}\equiv\text{CH}$ ，其核磁共振氢谱显示有 3 组峰，且峰面积之比为 6 : 1 : 1。

(1) 写出 A 的分子式：_____。

(2) 写出 A 的结构简式：_____。

(3)下列物质能与 A 发生反应的是_____ (填字母)。

a. 氢溴酸 b. 酸性高锰酸钾溶液 c. 溴的四氯化碳溶液 d. Na

(4)有机物 B 是 A 的同分异构体, 1 mol B 可以与 1 mol Br₂ 加成, B 分子中所有碳原子在同一平面上, 核磁共振氢谱显示有 3 组峰, 且峰面积之比为 6 : 1 : 1。则 B 的结构简式是_____。

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/826132020220010222>

