

核磁共振碳谱

(一) 判断题 (正确的在括号内填“√”号; 错误的在括号内填“×”号。)

1. 自由衰减信号 (FID) 是频率域信号。()
2. 碳谱的化学位移范围较宽 (0~200), 所以碳谱的灵敏度高于氢谱。()
3. 在宽带去耦碳谱中, 不同类型的碳核产生的裂分峰数目不同。()
4. 在 ^{13}C NMR 谱中, 由于 ^{13}C - ^{13}C 相连的概率很低, 所以通常不考虑 ^{13}C 核之间的耦合。()
5. 含 ^{19}F 的化合物, 可观测到 ^{19}F 核对 ^{13}C 核的耦合, 且谱带裂分数符合 $n+1$ 规律。()
6. 在宽带去耦谱中通常只能消除 ^1H 对 ^{13}C 的耦合裂分, 而保留了 ^{19}F 和 ^{31}P 等对 ^{13}C 的耦合裂分。()
7. 但在固相核磁共振波谱中, 分子运动受到限制, 由于磁各向异性作用将使谱带变宽, 分辨率大大下降。()
8. 在碳谱中, ^{13}C - ^1H 会发生耦合作用, 但是 ^{13}C - ^1H 的耦合常数远比 ^1H - ^1H 之间的耦合常数小。()
9. 在 $^{135}\text{DEPT}$ 实验中, CH 、 CH_2 和 CH_3 均出正峰, 季碳原子不出现谱峰。()
10. 在 APT 实验中, CH 和 CH_3 均出正峰, CH_2 出负峰, 季碳原子不出现谱峰。()

(二) 选择题 (单项选择)

1. 下列原子核没有自旋角动量的是哪一种? ()
A. $^{14}\text{N}_7$; B. $^{12}\text{C}_6$; C. $^{31}\text{P}_{15}$; D. $^{13}\text{C}_6$ 。
2. 在 ^{13}C NMR 波谱中在 $\delta 125\sim 140$ 产生两个信号的化合物是 ()。
A. 1,2,3-三氯苯; B. 1,2,4-三氯苯; C. 1,3,5-三氯苯。
3. 在 ^{13}C NMR 波谱中在 $\delta 125\sim 140$ 产生六个信号的化合物是 ()。
A. 1,2,3-三氯苯; B. 1,2,4-三氯苯; C. 1,3,5-三氯苯。
4. 在 ^{13}C NMR 波谱中在 $\delta 125\sim 140$ 产生三个信号的化合物是 ()。
A. 对二氯苯; B. 邻二氯苯; C. 间二氯苯。
5. 在 ^{13}C NMR 中在 $\delta 0\sim 60$ 产生 3 个信号; 在 ^1H NMR 中在 $\delta 0\sim 5$ 产生 3 个信号 (最低场信号为多重峰) 的化合物是 ()。
A. 1,1-二氯丙烷; B. 1,2-二氯丙烷; C. 2,2-二氯丙烷; D. 1,3-二氯丙烷。
6. 在 ^{13}C NMR 中在 $\delta 0\sim 70$ 产生 2 个信号; 在 ^1H NMR 中在 $\delta 0\sim 5$ 产生 2 个信号 (最低场信号为三重峰) 的化合物是 ()。
A. 1,1-二氯丙烷; B. 1,2-二氯丙烷; C. 2,2-二氯丙烷; D. 1,3-二氯丙烷。
7. 下面原子核发生核磁共振时, 如果外磁场强度相同, 哪种核将需要最大照射频率 ()。
A. $^{19}\text{F}_9$; B. $^{13}\text{C}_6$; C. $^1\text{H}_1$; D. $^{15}\text{N}_7$ 。
8. 碳谱如果不采用标识技术很难解析的原因是 ()。
A. 碳谱灵敏度低; B. 碳核之间有耦合裂分;
C. 碳谱分辨率高; D. 碳核和氢核之间有耦合裂分。
9. 下面各类化合物中碳核化学位移最大的是 ()。
A. 苯环上碳; B. 酸酯羰基碳; C. 醛酮羰基碳; D. 与氧相连的饱和碳。
10. 在 ^{13}C 谱中, 常看到溶剂的多重峰, 如 DMSO- d_6 在 $\delta 39.5$ 附近的七重峰。溶剂产生多重峰的原因是 ()。
A. 硫核对碳核产生耦合; B. 氧核对碳核产生耦合;
C. 碳核之间产生耦合; D. D 核对碳核产生耦合。
11. 在 $^{135}\text{DEPT}$ 实验中, 谱图特征为 ()。
A. CH 和 CH_3 显示正峰; B. C 和 CH_2 显示正峰;
C. CH 和 CH_3 显示负峰; D. CH_2 和 CH_3 显示负峰。
12. 在 APT 实验中, 谱图特征为 ()。
A. CH 和 CH_3 显示正峰; B. C 和 CH_2 显示正峰;

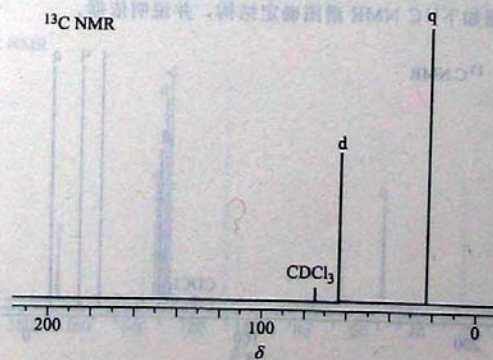
- C. C 和 CH 显示负峰;
13. 在 45° 的 DEPT 实验中, 谱图特征为 ()。
- A. C 和 CH₂ 显示正峰, CH、CH₃ 均出负峰; B. CH、CH₂ 和 CH₃ 均出负峰;
- C. C 和 CH₂ 显示负峰, CH、CH₃ 均出正峰; D. CH、CH₂ 和 CH₃ 均出正峰。
14. 在 90° 的 DEPT 实验中, 谱图特征为 ()。
- A. CH₂ 显示正峰, CH、CH₃ 均出负峰; B. CH₂ 出负峰, CH 和 CH₃ 不出峰;
- C. CH₂ 显示负峰, CH、CH₃ 均出正峰; D. CH 出正峰, CH₂ 和 CH₃ 不出峰。
15. 在偏共振去耦谱中, $\begin{matrix} \text{H} \\ | \\ \text{C}=\text{O} \\ | \\ \text{H} \end{matrix}$ 的偏共振多重性为 ()。
- A. 四重峰 (q); B. 三重峰 (t); C. 双重峰 (d); D. 单峰 (s)。
16. 在偏共振去耦谱中, R—C≡N 的偏共振多重性为 ()。
- A. 四重峰 (q); B. 三重峰 (t); C. 双重峰 (d); D. 单峰 (s)。
17. 在偏共振去耦谱中, $\begin{matrix} \text{R} \\ | \\ \text{C}=\text{O} \\ | \\ \text{H} \end{matrix}$ 的偏共振多重性为 ()。
- A. 四重峰 (q); B. 三重峰 (t); C. 双重峰 (d); D. 单峰 (s)。
18. 在宽带去耦谱中, 谱图特征为 ()。
- A. 除去了¹³C—¹H 二键以上的耦合; B. 除去了所有质子对¹³C 核的耦合;
- C. 除去了溶剂的多重峰; D. 除去了所有元素对¹³C 核的耦合。
19. 在 2.35T 的磁场中,¹H 核的共振频率为 100MHz,¹³C 核的共振频率为 ()。
- A. 100MHz; B. 60MHz; C. 25MHz; D. 15MHz。
20. ¹³C 核旋磁比 γ 为¹H 核的 ()。
- A. 2 倍; B. 1/2; C. 4 倍; D. 1/4。

(三) 简答题

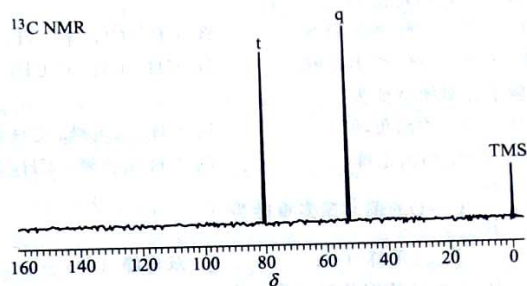
- ¹³C NMR 谱比较¹H NMR 谱有什么优点?
- 试说明为什么¹³C NMR 的灵敏度远远小于¹H NMR?
- 试说明在相同的外磁场中为什么¹H 核和¹³C 核共振频率不同?
- 试说明¹³C NMR 中采用谱标识技术的原因?
- 试说明¹³C NMR 中为什么溶剂 CDCl₃ 在 δ77.2 附近出现三重峰?
- 试说明什么是宽带去耦谱以及谱图特征?
- 试说明如何在偏共振去耦谱中推断碳原子的类型?
- 试说明 APT 实验中如何区分分子中的 CH₃、CH₂、CH 和季碳原子?
- 试说明 DEPT 实验中如何区分分子中的 CH₃、CH₂、CH 和季碳原子?
- 为了解决固体样品的 NMR 谱带增宽问题, 通常采用什么技术?

(四) 结构解析题

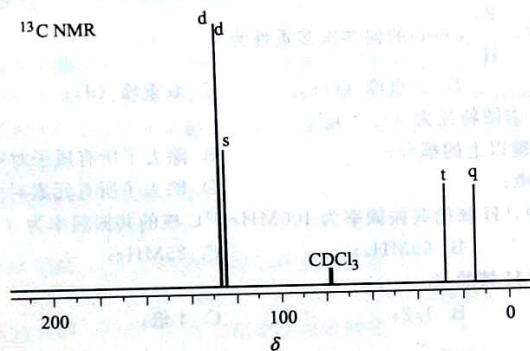
- 化合物 C₃H₈O, 根据如下¹³C NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



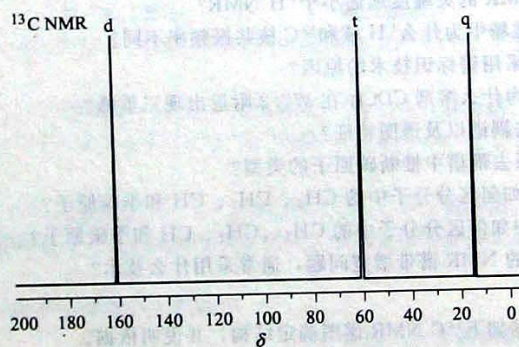
2. 化合物 $C_4H_{10}O_2$, 根据 ^{13}C NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



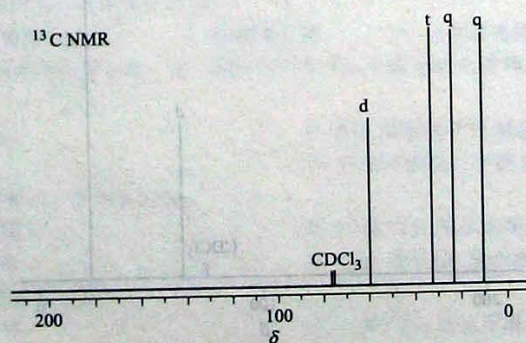
3. 化合物 C_8H_{10} , 根据如下 ^{13}C NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



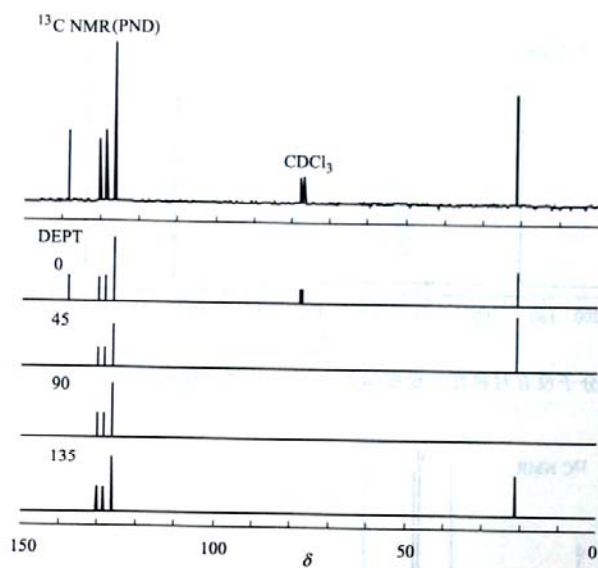
4. 化合物 $C_3H_4O_3$, 根据如下 ^{13}C NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



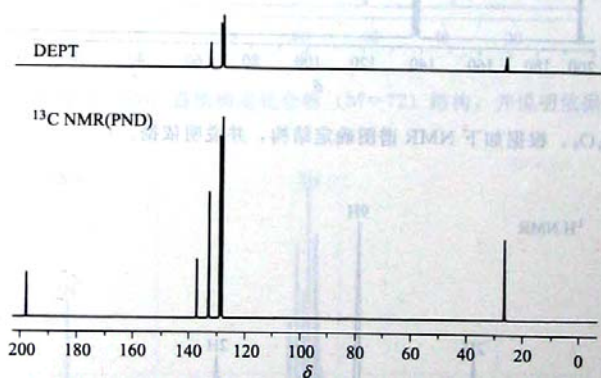
5. 化合物 $C_4H_{10}O$, 根据如下 ^{13}C NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



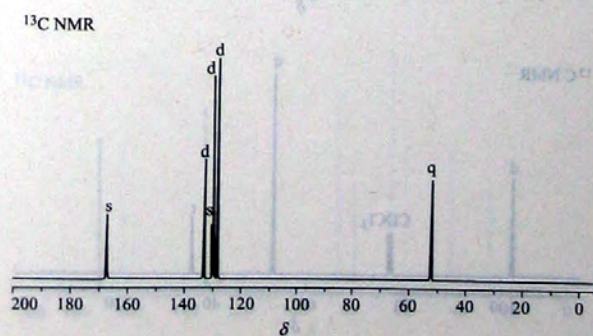
6. 某化合物 C_8H_{10} ，根据如下 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



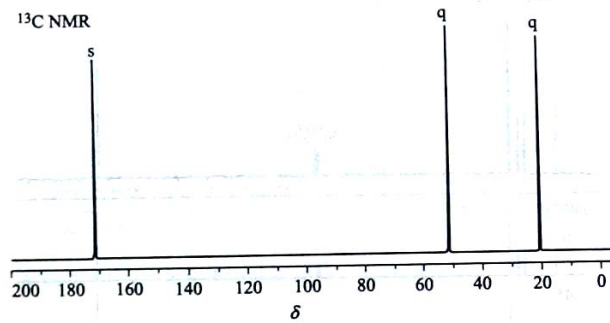
7. 化合物 C_8H_8O ，根据如下 ^{13}C NMR 谱图确定结构，并说明依据。



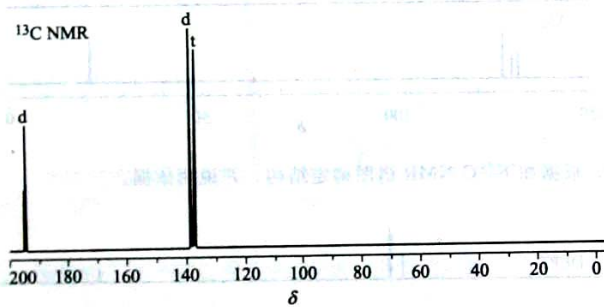
8. 某化合物 $C_8H_8O_2$ ，根据如下 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



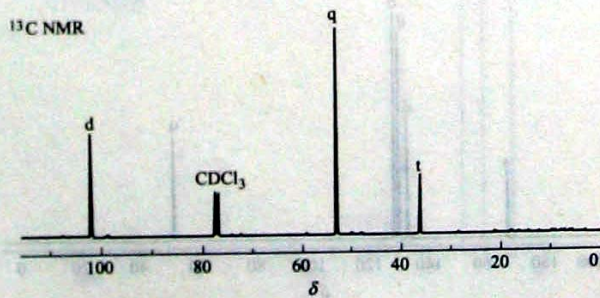
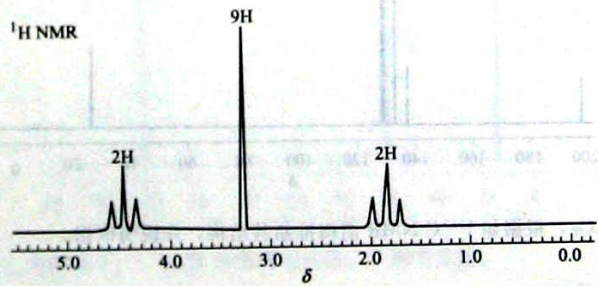
9. 某化合物 $C_3H_6O_2$ ，根据如下 ^{13}C NMR 谱图推断其结构，并说明依据。



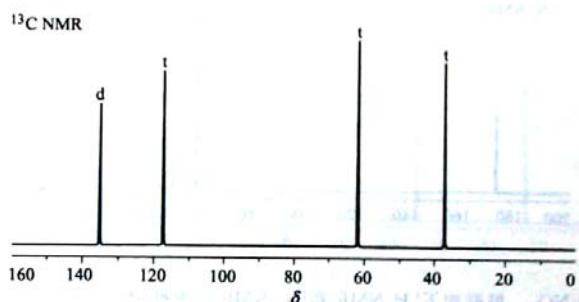
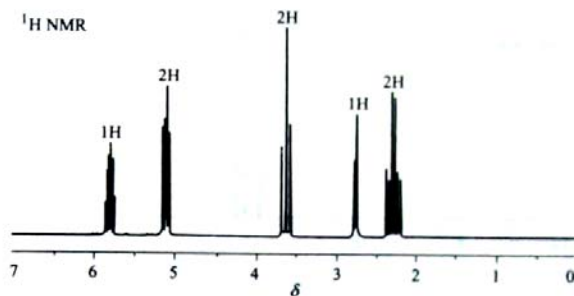
10. 某含氧化合物分子没有对称性，根据如下 ^{13}C NMR 谱图确定结构，并说明依据。



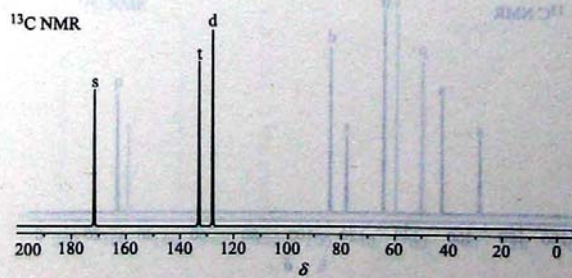
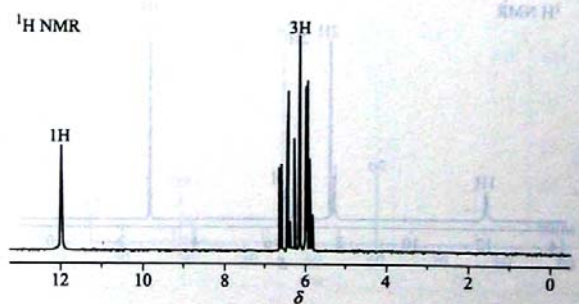
11. 化合物 $C_7H_{16}O_4$ ，根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



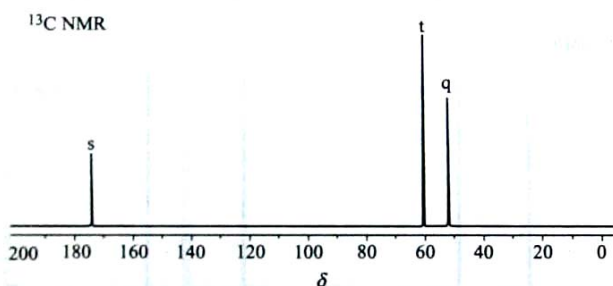
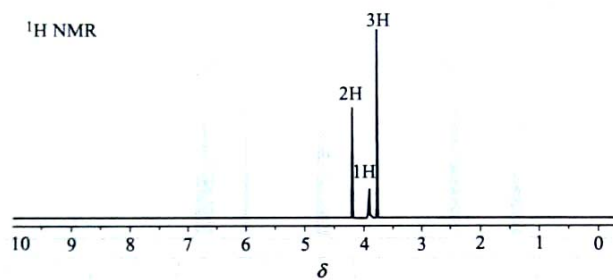
12. 化合物 C_4H_8O , 根据如下 1H NMR 和 ^{13}C NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



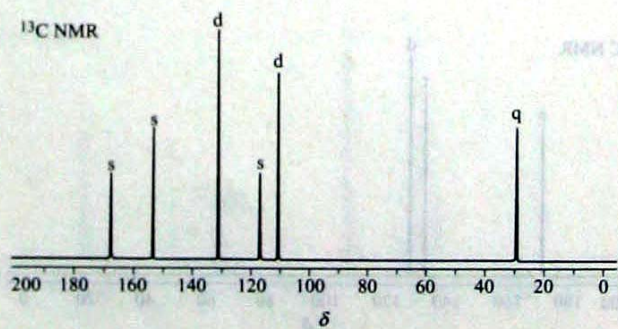
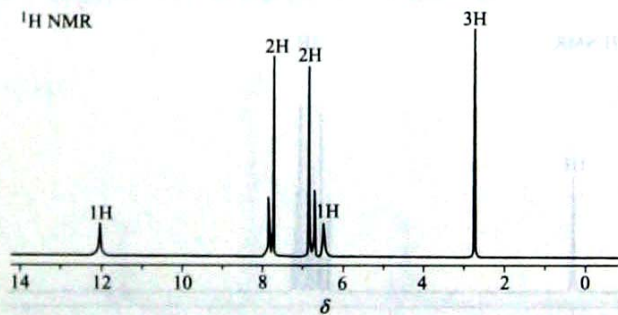
13. 根据如下 1H NMR 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=72$) 结构, 并说明依据。



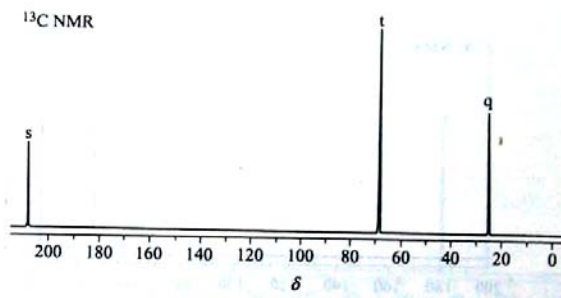
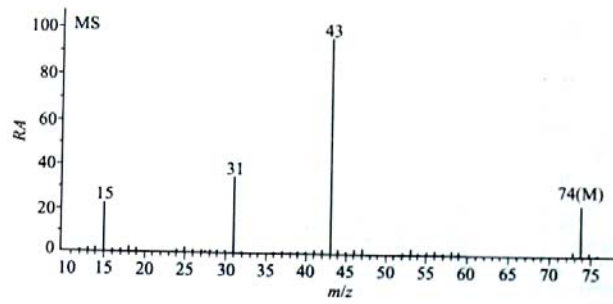
14. 根据如下 ^1H NMR 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=90$) 结构, 并说明依据。



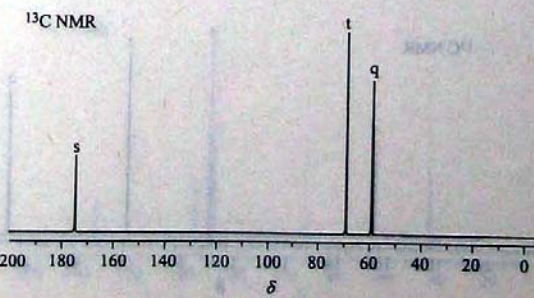
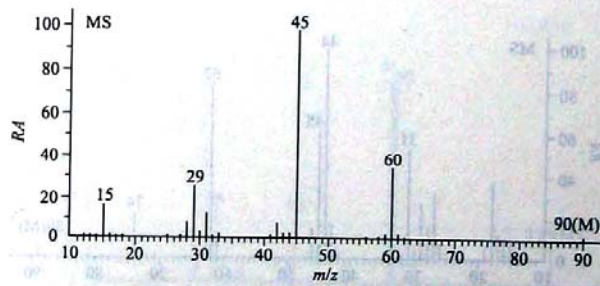
15. 某化合物 $\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2$, 根据如下 ^1H NMR 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构, 并说明依据。



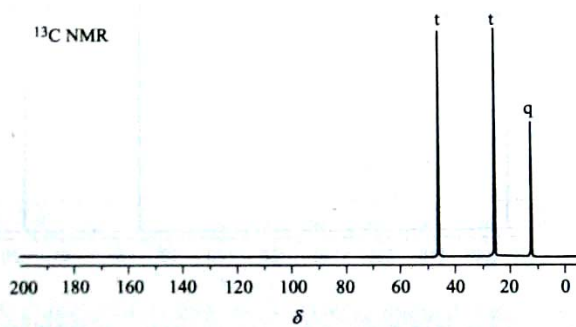
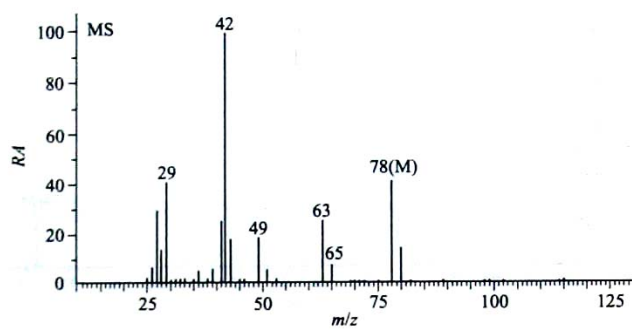
16. 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=74$) 结构, 并说明依据。



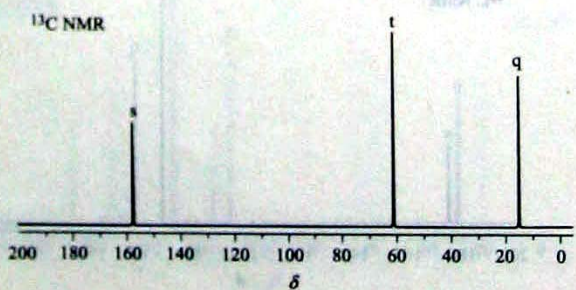
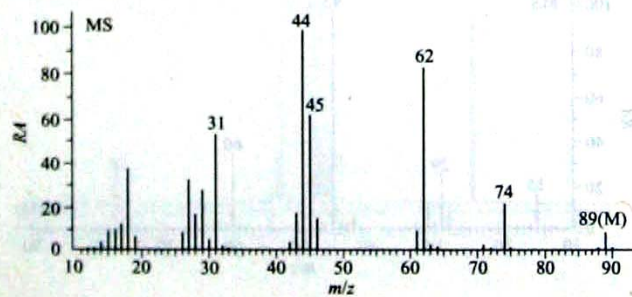
17. 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=90$) 结构, 并说明依据。



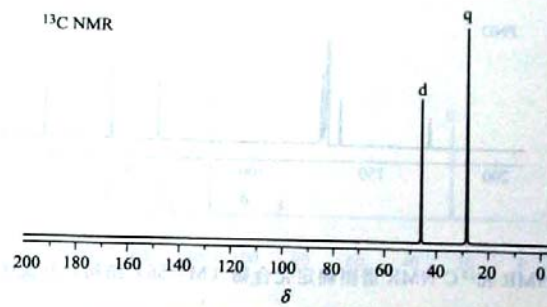
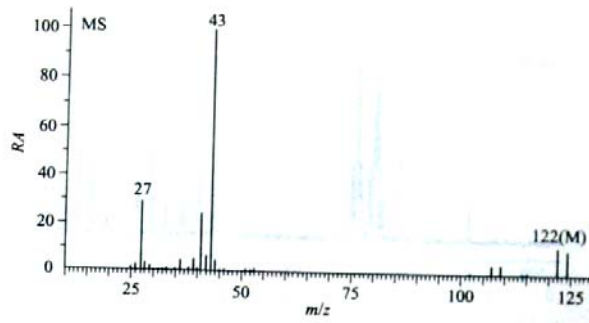
18. 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=78$) 结构, 并说明依据。



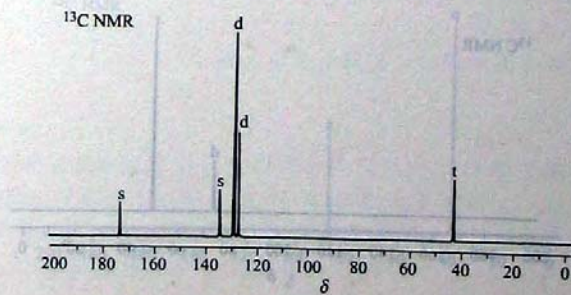
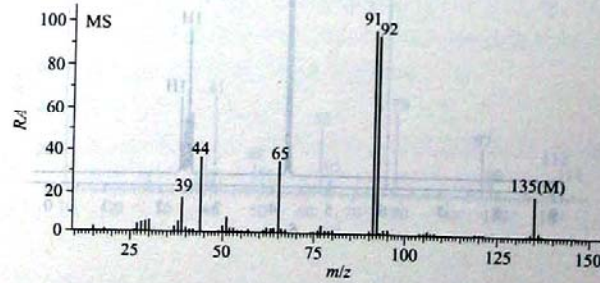
19. 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=89$) 结构, 并说明依据。



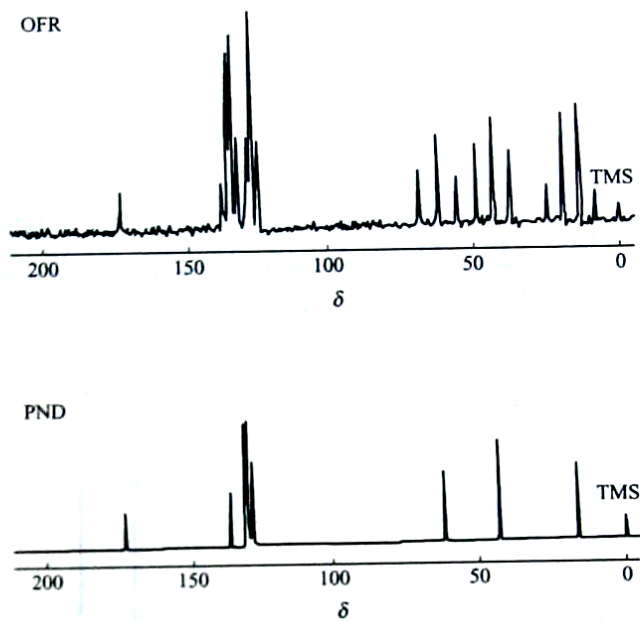
20. 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=122$) 结构, 并说明依据。



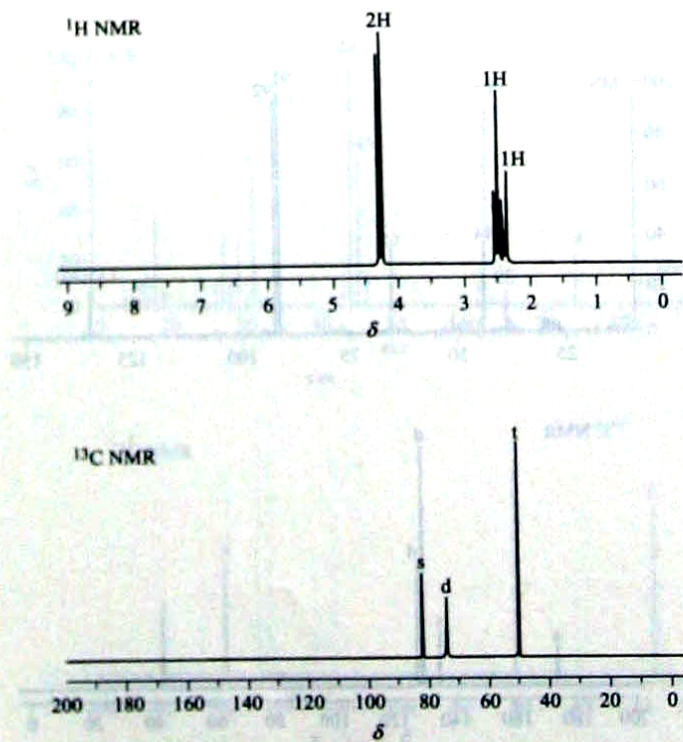
21. 某化合物 $\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}$, 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图推断其结构, 并说明依据。



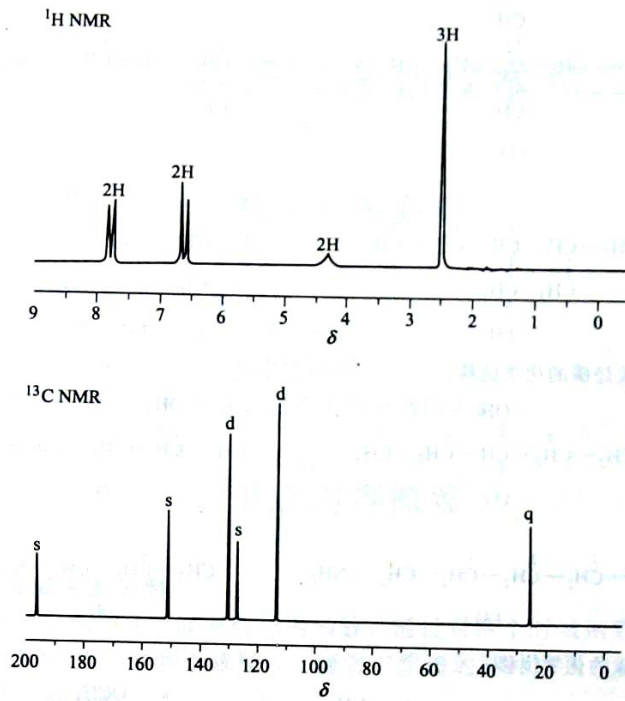
22. 化合物 $C_{10}H_{12}O_2$ ，根据如下 ^{13}C NMR 谱确定结构，并说明依据。



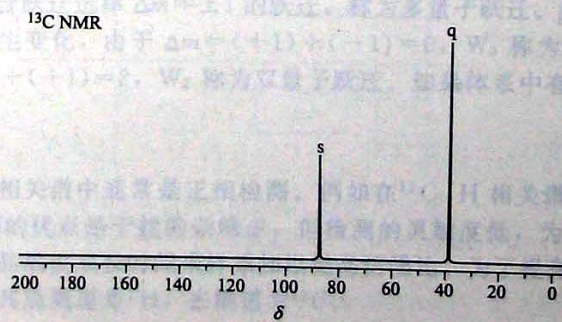
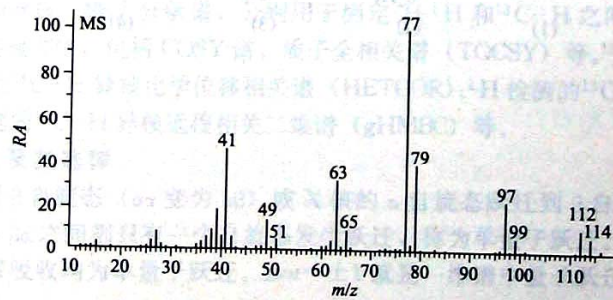
23. 根据如下 1H NMR 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=56$) 结构，并说明依据。



24. 某化合物 C_8H_9NO , 试根据如下 ^{13}C NMR 和 1H NMR 谱图推断其结构, 并说明依据。(15)

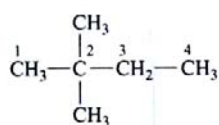


25. 根据如下 MS 和 ^{13}C NMR 谱图确定化合物 ($M=112$) 结构, 并说明依据。

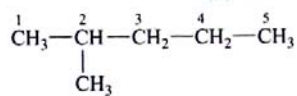


(五) 计算题

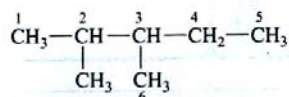
1. 计算下列烷烃碳的化学位移。



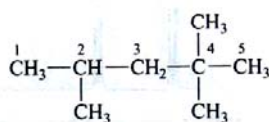
(1)



(2)

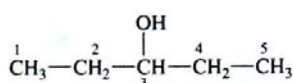


(3)

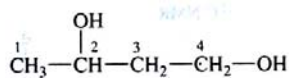


(4)

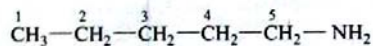
2. 计算下列取代烷烃碳的化学位移。



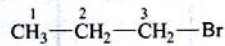
(1)



(2)



(3)

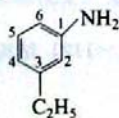


(4)

3. 计算下列芳烃碳的化学位移。



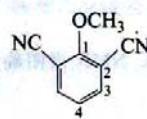
(1)



(2)



(3)



(4)