

核磁共振氢谱

(一) 判断题 (正确的在括号内填“√”号;错误的在括号内填“×”号。)

1. 核磁共振波谱法与红外吸收光谱法一样,都是基于吸收电磁辐射的分析法。()
2. 质量数为奇数,核电荷数为偶数的原子核,其自旋量子数为零。()
3. 自旋量子数 $I=1$ 的原子核在静磁场中,相对于外磁场,可能有两种取向。()
4. 氢质子在二甲基亚砜中的化学位移比在氯仿中要小。()
5. 核磁共振波谱仪的磁场越强,其分辨率越高。()
6. 核磁共振波谱中对于 OCH_3 、 CCH_3 和 NCH_3 , NCH_3 的质子的化学位移最大。()
7. 在核磁共振波谱中,耦合质子的谱线裂分数目取决于邻近氢核的个数。()
8. 化合物 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}(\text{CH}_3)_2$ 的 ^1H NMR 中,各质子信号的面积比为 $9:2:1$ 。()
9. 核磁共振波谱中出现的多重峰是由于邻近核的核自旋相互作用。()
10. 化合物 $\text{Cl}_2\text{CH}-\text{CH}_2\text{Cl}$ 的核磁共振波谱中, H 的精细结构为三重峰。()
11. 苯环和双键氢质子的共振频率出现在低场是由于 π 电子的磁各向异性效应。()
12. 氢键对质子的化学位移影响较大,所以活泼氢的化学位移在一定范围内变化。()
13. 不同的原子核核产生共振条件不同,发生共振所必需的磁场强度 (B_0) 和射频频率 (ν) 不同。()
14. $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$ 分子中 ^1H 核共振频率处于高场,比所有有机化合物中的 ^1H 核都高。()
15. 羟基的化学位移随氢键的强度变化而移动,氢键越强, δ 值就越小。()

(二) 选择题 (单项选择)

1. 氢谱主要通过信号的特征提供分子结构的信息,以下选项中不是信号特征的是 ()。
A. 峰的位置; B. 峰的裂分; C. 峰高; D. 积分线高度。
2. 以下关于“核自旋弛豫”的表述中,错误的是 ()。
A. 没有弛豫,就不会产生核磁共振; B. 谱线宽度与弛豫时间成反比;

C. 通过弛豫, 维持高能态核的微弱多数; D. 弛豫分为纵向弛豫和横向弛豫两种。

3. 具有以下自旋量子数的原子核中, 目前研究最多用途最广的是 ()。

A. $I=1/2$; B. $I=0$; C. $I=1$; D. $I>1$ 。

4. 下列化合物中的质子, 化学位移最小的是 ()。

A. CH_3Br ; B. CH_4 ; C. CH_3I ; D. CH_3F 。

5. 进行已知成分的有机混合物的定量分析, 宜采用 ()。

A. 极谱法; B. 色谱法; C. 红外光谱法; D. 核磁共振法。

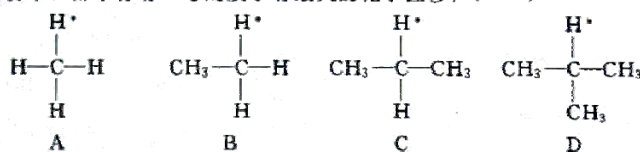
6. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$ 在核磁共振波谱图上有几组峰? 最低场信号有几个氢? ()

A. 3 (1H); B. 6 (1H); C. 3 (3H); D. 6 (2H)。

7. 下面化合物中在核磁共振中出现单峰的是 ()。

A. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$; B. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$; C. CH_3CH_3 ; D. $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 。

8. 下列 4 种化合物中, 哪个标有 * 号的质子有最大的化学位移? ()



9. 核磁共振波谱解析分子结构的主要参数是 ()。

A. 质荷比; B. 波数; C. 化学位移; D. 保留值。

10. 分子式为 $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$ 的化合物, 其 NMR 谱上只出现两个单峰, 最有可能的结构式为 ()。

A. $(\text{CH}_3)_2\text{CHCOCH}_3$; B. $(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{CHO}$;
C. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COCH}_3$; D. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COCH}_2\text{CH}_3$

11. 核磁共振波谱 (氢谱) 中, 不能直接提供的化合物结构信息是 ()。

A. 不同质子种类数; B. 同类质子个数;
C. 化合物中双键的个数与位置; D. 相邻碳原子上质子的个数。

12. 在核磁共振波谱分析中, 当质子核外的电子云密度增加时 ()。

A. 屏蔽效应增强, 化学位移值大, 峰在高场出现;
B. 屏蔽效应减弱, 化学位移值大, 峰在高场出现;
C. 屏蔽效应增强, 化学位移值小, 峰在高场出现;
D. 屏蔽效应增强, 化学位移值大, 峰在低场出现。

13. 下列原子核没有自旋角动量的是哪一种? ()

A. ^{14}N ; B. ^{29}Si ; C. ^{31}P ; D. ^{33}Si 。

14. 核磁共振波谱法在广义上说也是一种吸收光谱法, 但它与紫外-可见及红外吸收光谱法的关键差异之一是 ()。

A. 吸收电磁辐射的频率区域不同; B. 检测信号的方式不同;
C. 记录谱图的方式不同; D. 样品必须在强磁场中测定。

15. 在核磁共振波谱中, 如果一组 ^1H 受到核外电子云的屏蔽效应较小, 则它的共振吸收将出现在下列的哪种位置? ()

A. 扫场下的高场和扫频下的高频, 较小的化学位移值 (δ);
B. 扫场下的高场和扫频下的低频, 较小的化学位移值 (δ);
C. 扫场下的低场和扫频下的高频, 较大的化学位移值 (δ);
D. 扫场下的低场和扫频下的低频, 较大的化学位移值 (δ)。

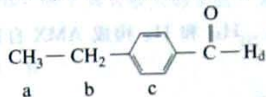
16. 乙烯质子的化学位移值 (δ) 比乙炔质子的化学位移值大还是小? 其原因是 ()。

A. 大, 因为磁的各向异性效应, 使乙烯质子处在屏蔽区, 乙炔质子处在去屏蔽区;
B. 大, 因为磁的各向异性效应, 使乙烯质子处在去屏蔽区, 乙炔质子处在屏蔽区;
C. 小, 因为磁的各向异性效应, 使乙烯质子处在去屏蔽区, 乙炔质子处在屏蔽区;
D. 小, 因为磁的各向异性效应, 使乙烯质子处在屏蔽区, 乙炔质子处在去屏蔽区。

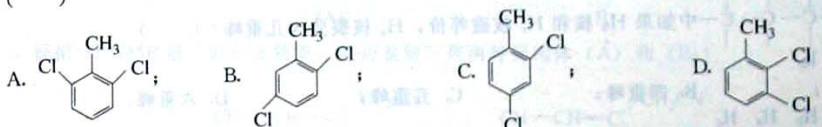
17. 化合物 $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$, 在 ^1H NMR 谱图上, 有几组峰? 从高场到低场各组峰的面积比为多少? ()。

A. 五组峰 (6:1:2:1:6); B. 三组峰 (2:6:2);

- C. 三组峰 (6:1:1); D. 四组峰 (6:6:2:2)。
 18. 在下列化合物中, 字母标出的 4 种质子, 它们的化学位移 (δ) 从大到小的顺序为 ()。



- A. $a > b > c > d$; B. $b > a > d > c$; C. $c > d > a > b$; D. $d > c > b > a$ 。
 19. 某二氯甲苯的 ^1H NMR 谱图中, 呈现一组单峰, 一组二重峰, 一组三重峰。该化合物为下列哪一种? ()



20. 2-丙醇 $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$ 的 ^1H NMR 谱, 若醇质子存在快速化学交换, 当仪器的分辨率足够时, 则下列哪一种预言是正确的? ()

- A. 甲基质子是单峰, 次甲基质子是七重峰, 醇质子是单峰;
 B. 甲基质子是二重峰, 次甲基质子是七重峰, 醇质子是单峰;
 C. 甲基质子是四重峰, 次甲基质子是十四重峰, 醇质子是单峰;
 D. 甲基质子是四重峰, 次甲基质子是十四重峰, 醇质子是二重峰。

21. 下面 4 种核, 能够用于核磁共振试验的有 ()。

- A. $^{19}\text{F}_9$; B. $^{12}\text{C}_6$; C. $^{16}\text{O}_8$; D. $^{32}\text{S}_{16}$ 。

22. 下面化合物中质子化学位移最大的是 ()。

- A. CH_4 ; B. CH_3F ; C. CH_3Cl ; D. CH_3Br 。

23. 化合物 在 ^1H NMR 中产生的信号数目为 ()。

- A. 3; B. 4; C. 5; D. 6。

24. 化合物 $\text{H}_3\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 在 ^1H NMR 中各信号的面积比为 ()。

- A. 3:4:1:3:3; B. 3:4:1:6; C. 9:4:1; D. 3:4:7。

25. 化合物 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ 的 ^1H NMR 中 CH_2 的质子信号受 CH_3 耦合裂分为 ()。

- A. 四重峰; B. 五重峰; C. 六重峰; D. 七重峰。

26. 自旋量子数 $I=0$ 的原子核是 ()。

- A. $^{19}\text{F}_9$; B. $^{12}\text{C}_6$; C. $^1\text{H}_1$; D. $^{15}\text{N}_7$ 。

27. 当外磁场强度 B_0 逐渐增大时, 质子由低能级跃迁至高能级所需要的能量 ()。

- A. 不发生变化; B. 逐渐变小;
 C. 逐渐变大; D. 可能不变或变小。

28. 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. $^{15}\text{N}_7$ 。

29. 化合物 CH_2F_2 质子信号的裂分峰数及强度比分别为 ()。

- A. 1 (1); B. 2 (1:1); C. 3 (1:2:1); D. 4 (1:3:3:1)。

30. 下列哪一个参数可以确定分子中基团的连接关系? ()

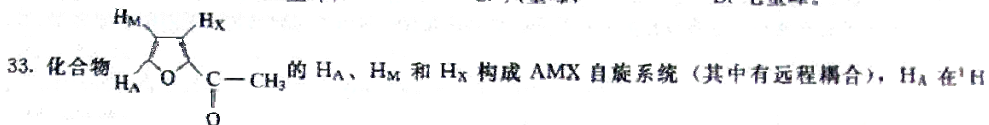
- A. 化学位移; B. 裂分峰数及耦合常数;
 C. 积分曲线; D. 谱峰强度。

31. 取决于原子核外电子屏蔽效应大小的参数是 ()。

- A. 化学位移; B. 耦合常数; C. 积分曲线; D. 谱峰强度。

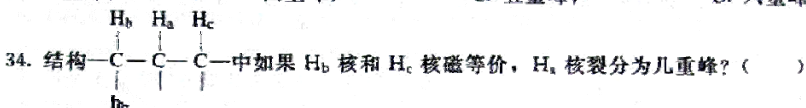
32. 化合物 在 ^1H NMR 中 H_a 的精细结构有几重峰? ()

- A. 四重峰; B. 五重峰; C. 六重峰; D. 七重峰。

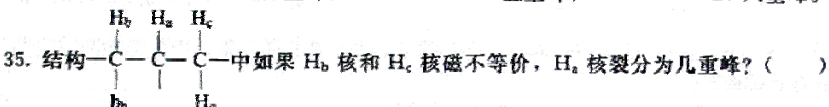


NMR 中有几重峰? ()

- A. 三重峰; B. 四重峰; C. 五重峰; D. 六重峰。



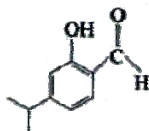
- A. 三重峰; B. 四重峰; C. 五重峰; D. 六重峰。



- A. 五重峰; B. 六重峰; C. 八重峰; D. 九重峰。

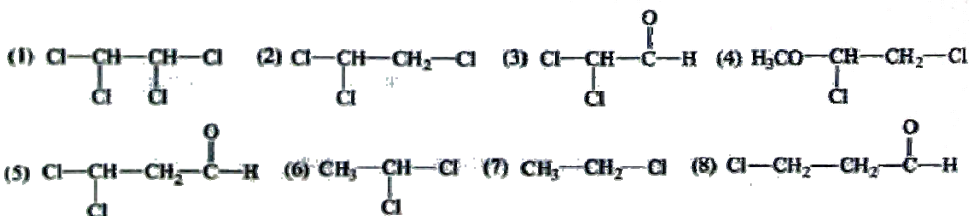
(三) 简答题

1. 试述产生核磁共振的条件是什么?
2. 核磁共振波谱基本原理是什么? 主要获取什么信息?
3. 一个自旋量子数为 $5/2$ 的核在磁场中有多少种能态? 各种能态的磁量子数取值为多少?
4. 什么是化学位移? 它是如何产生的? 影响化学位移的因素有哪些?
5. 简述自旋-自旋裂分的原理。
6. 何谓一级图谱? 一级图谱的自旋耦合裂分有哪些规律?
7. 什么是化学等同和磁等同? 试举例说明。
8. 脉冲傅立叶变换核磁共振波谱仪在原理上与连续波核磁共振波谱仪有什么不同? 它有哪些优点?
9. 射频辐射的频率固定时, 要使共振发生, 氟核和氢核哪一个将需要更大的外磁场? 为什么?
10. 使用 60.0MHz NMR 仪器时, TMS 的吸收与化合物中某质子之间的频率差为 180Hz 。如果使用 400MHz 的 NMR 仪器, 它们之间的频率差将是多少?
11. 三个不同质子 A、B 和 C, 它们的屏蔽系数大小次序为 $\sigma_B > \sigma_A > \sigma_C$ 。问它们在一样磁场强度下, 共振频率的大小次序为何?
12. 一个化合物估计不是二苯醚就是二苯甲烷, 试问能否利用 1H NMR 谱来鉴别这两个化合物, 并说明原因。
13. 在 1H NMR 谱中, 下列化合物中 OH 氢核的化学位移为 δ , 对于酚羟基来说这个化学位移比预计的结果在低场一些, 试解释原因。



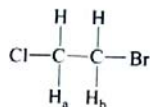
14. 对于醇类化合物来说, 如果测定时升高温度, 将对 OH 信号产生什么影响? 如果在测定时加几滴 D_2O , 将对 OH 信号产生什么影响?

15. 请指出下列分子中氢核属于什么自旋系统, 并指出氢核谱峰的裂分数。

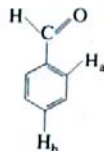


(四) 结构解析题

1. 在下列化合物中, 比较 H_a 和 H_b , 哪个具有较大的 δ 值? 为什么?

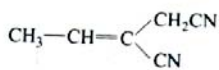


(A)

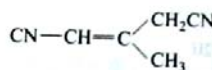


(B)

2. 根据 ^1H NMR 谱中的什么特点, 能否鉴别下列两种异构体 (A) 和 (B)?

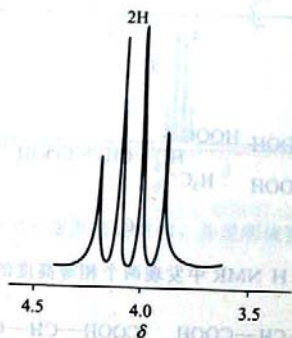


(A)

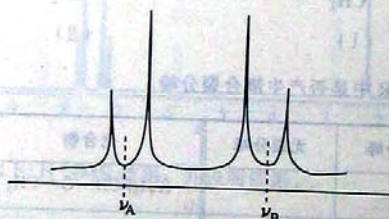


(B)

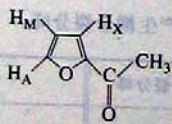
3. 一个分子的部分 ^1H NMR 谱图如下, 试根据峰位置及裂分峰数, 推断产生这种吸收峰的氢核的相邻部分的结构及电负性。



4. 某化合物的两个氢核的共振频率分别为 $\nu_A = 360\text{Hz}$ 和 $\nu_B = 300\text{Hz}$, $J_{AB} = 18\text{Hz}$, 其部分 ^1H NMR 谱图如下图所示, 请指出 A 和 B 两个氢核构成什么自旋系统, 并解释原因。



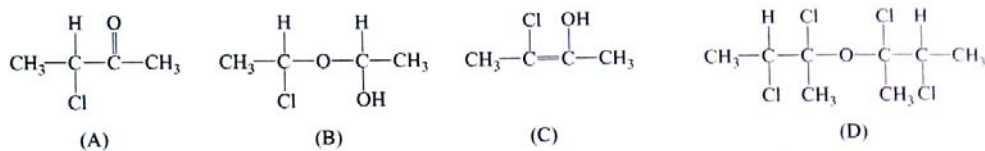
5. 在下列 AMX 系统中 (考虑远程耦合), H_A , H_M 和 H_X 各裂分为几重峰?



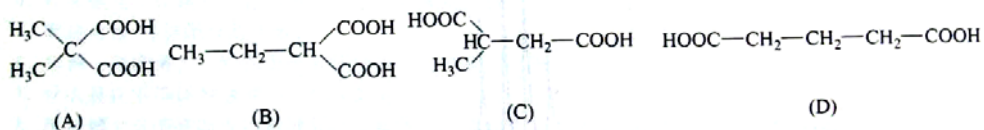
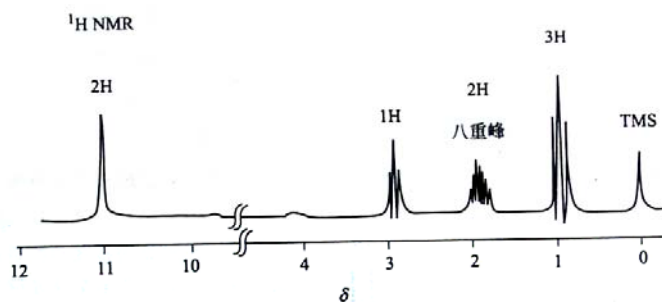
6. 某化合物元素分析结果为含 C 45.23%, 含 H 6.57%, 含 O 15.06%, 含 Cl 33.14%, ^1H NMR 数据为:

峰号	δ	裂分峰数目	积分线高度比
(1)	1.6	2	3
(2)	2.3	1	3
(3)	4.2	4	1

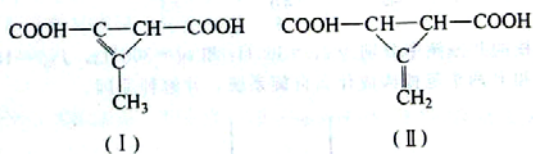
该化合物是下列的哪一种?



7. 某化合物分子式为 $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_4$, ^1H NMR谱如下。该化合物最可能为下列的哪一种?



8. Fiest's 酸的钠盐在 D_2O 溶液的 ^1H NMR 中发现两个相等高度的峰, 试述其属于下列何种结构?



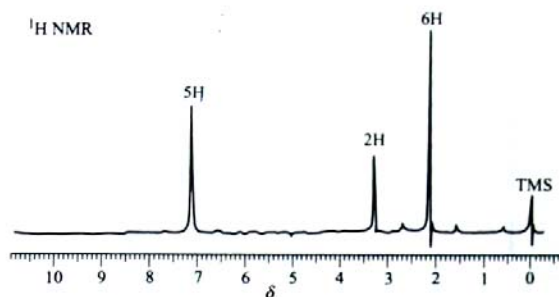
9. 指出下列化合物在 ^1H NMR 中是否产生耦合裂分峰。

化合物	有裂分峰	无裂分峰	化合物	有裂分峰	无裂分峰
$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3$			$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{O}-\text{CH}_3$		
$\text{Br}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{Br}$			$\text{Br}-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{Br}$		

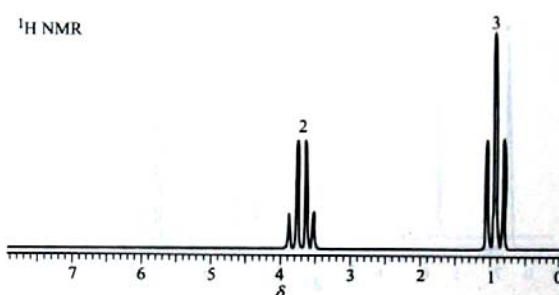
10. 指出下列化合物在 ^1H NMR 中是否产生耦合裂分峰

化合物	有裂分峰	无裂分峰	化合物	有裂分峰	无裂分峰
$\text{H}_3\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}_3$			$\text{Br}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{Br}$		

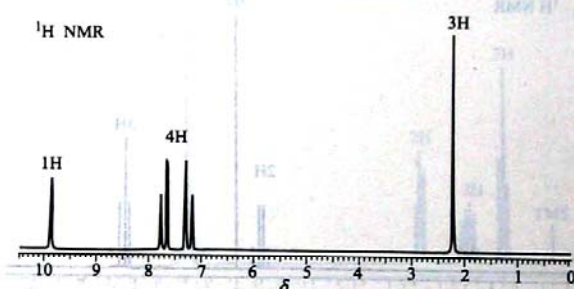
11. 某化合物的化学式为 $C_9H_{13}N$ ，其 1H NMR 谱图如下所示，试推断其结构。



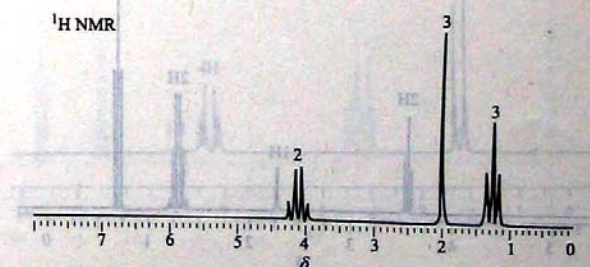
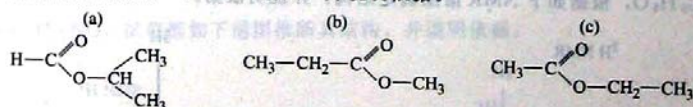
12. 化合物 $C_4H_{10}O$ ，根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



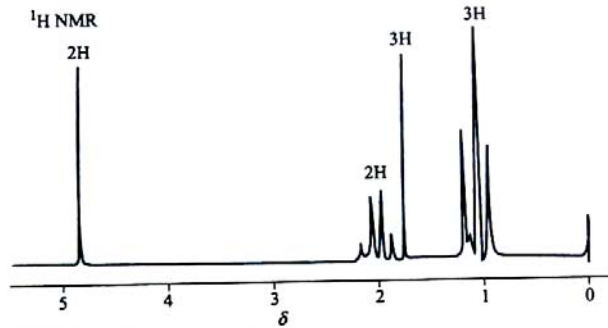
13. 化合物 C_8H_8O ，根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



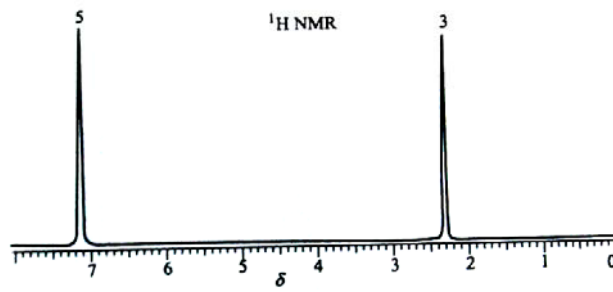
14. 下列哪个化合物符合如下 1H NMR 谱图，并说明依据。



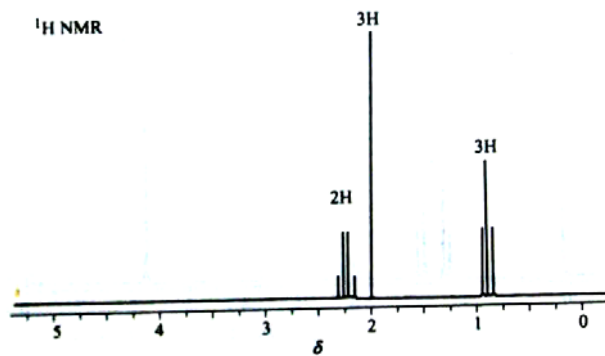
15. 化合物 C_5H_{10} ，根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



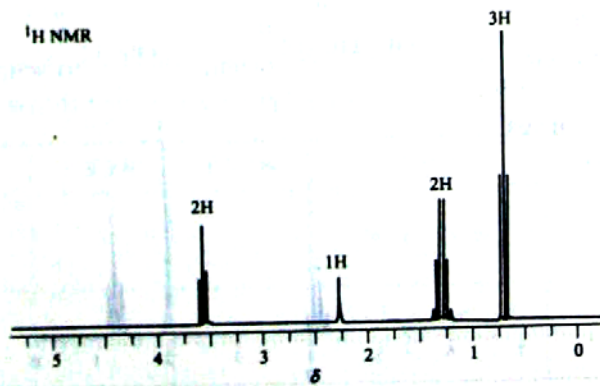
16. 根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



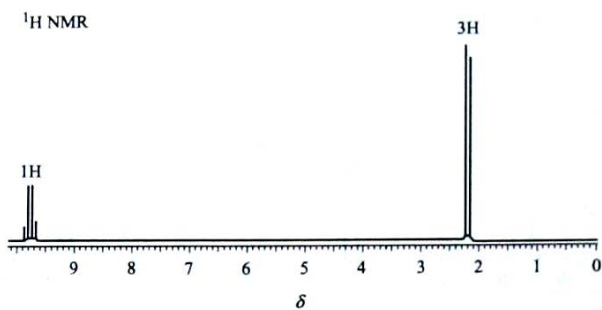
17. 化合物 C_4H_8O ，根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



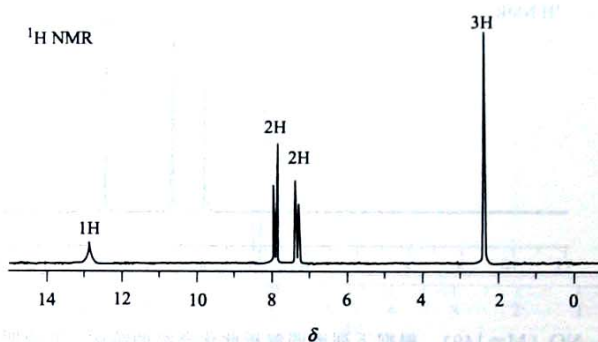
18. 化合物 C_5H_8O ，根据如下 NMR 谱图确定结构，并说明依据。



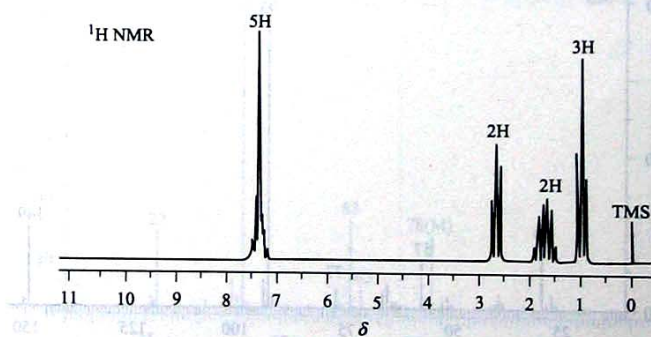
19. 根据如下 NMR 谱图确定结构, 并说明依据。



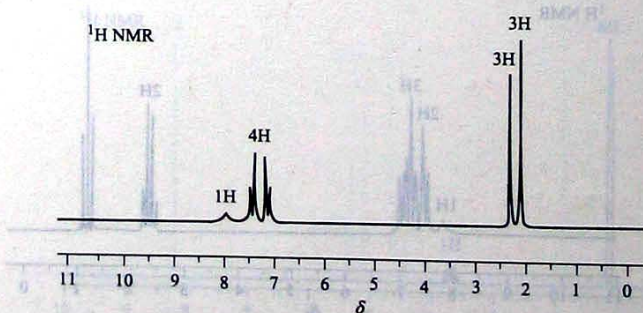
20. 某化合物 $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_2$, 根据如下 $^1\text{H NMR}$ 谱图推断其结构, 并说明依据。



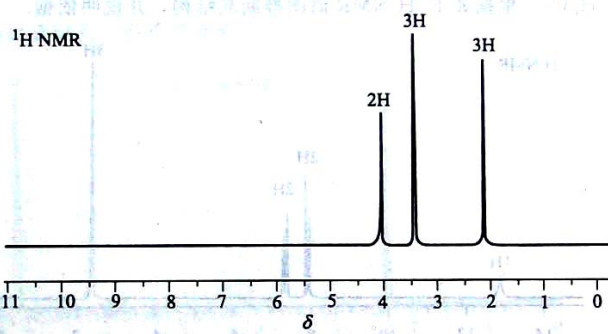
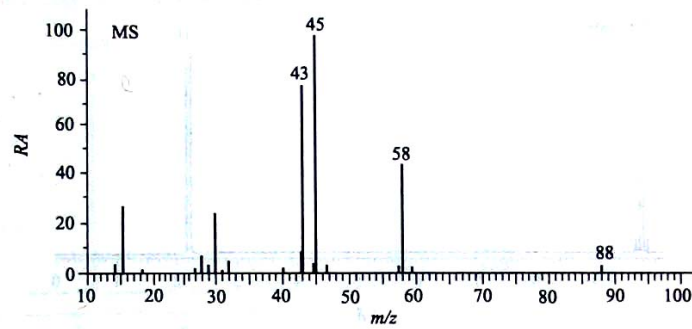
21. 某化合物 C_9H_{12} , 试根据如下谱图推断其结构, 并说明依据。



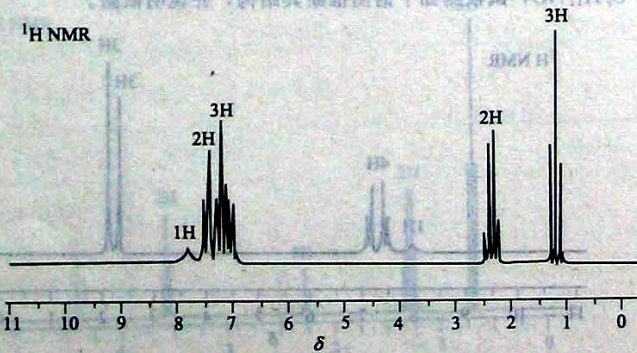
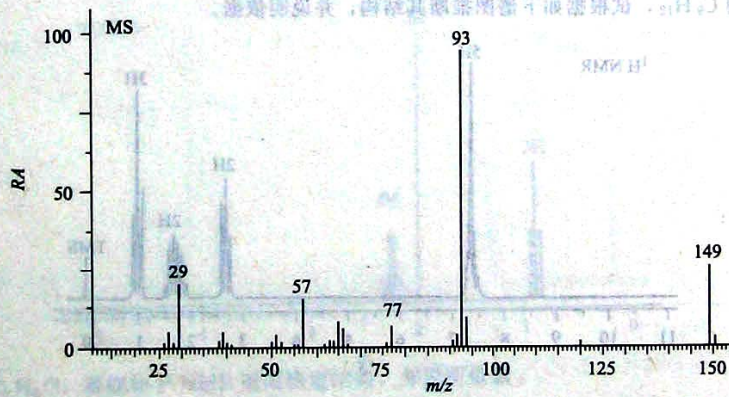
22. 某化合物 $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{NO}$, 试根据如下谱图推断其结构, 并说明依据。



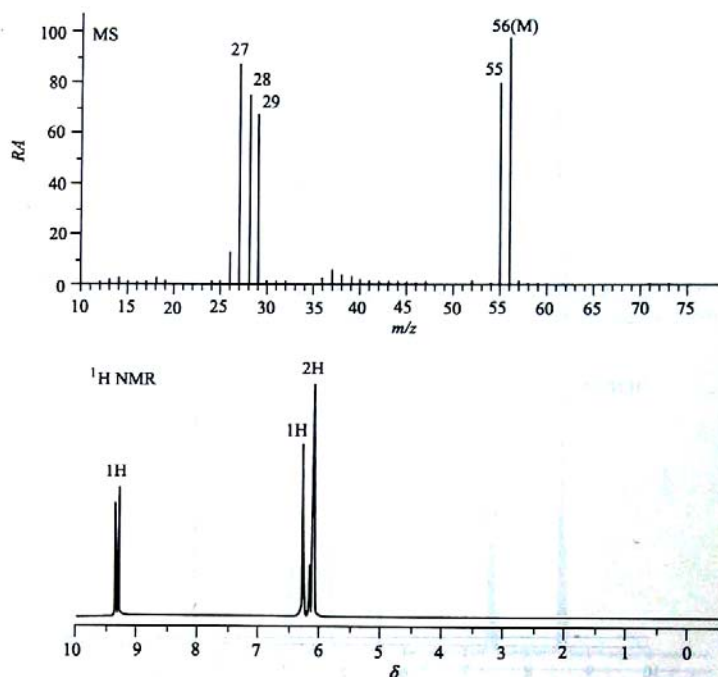
23. 某化合物 $C_4H_8O_2$ ($M=88$), 根据下列谱图解析此化合物的结构, 并说明依据。



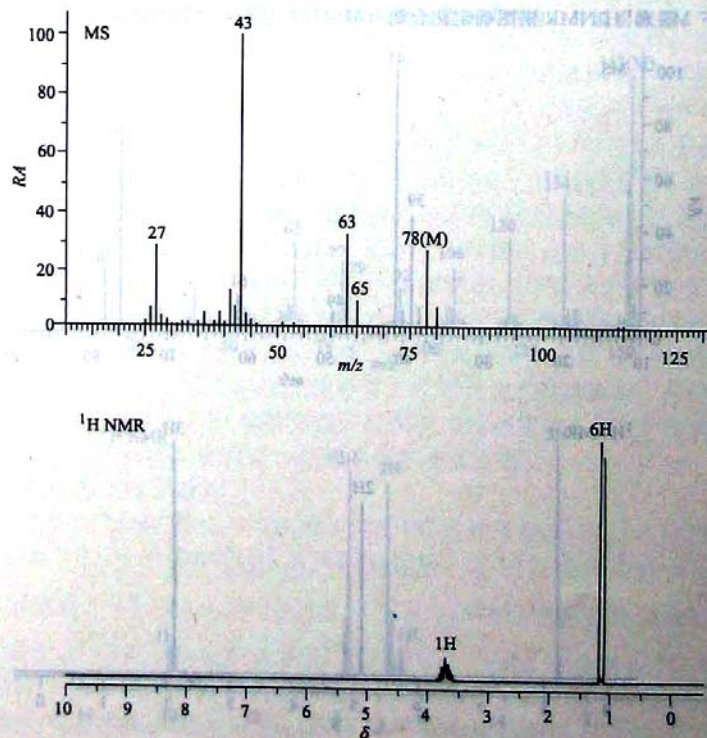
24. 某化合物 $C_9H_{11}NO$ ($M=149$), 根据下列谱图解析此化合物的结构, 并说明依据。



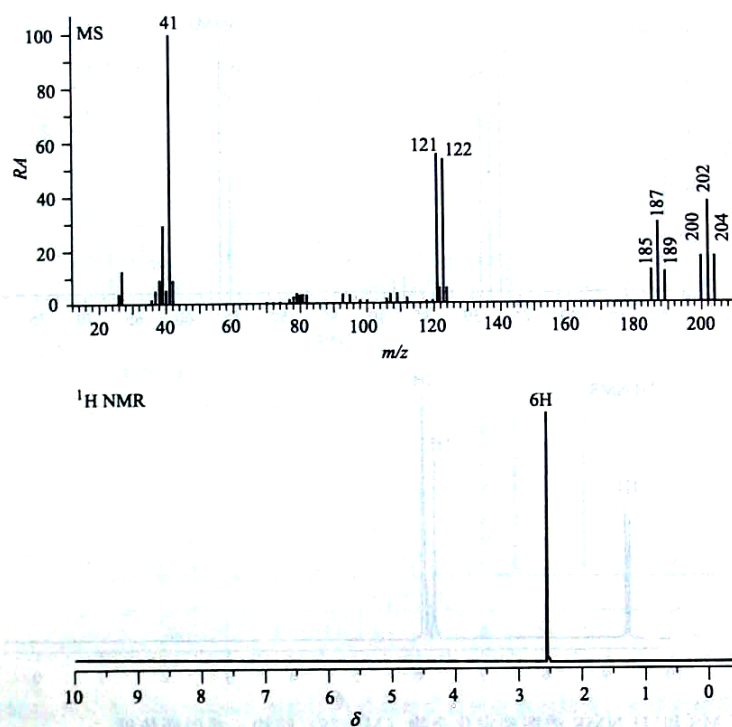
25. 根据如下 MS 和 ^1H NMR 谱图确定化合物 ($M=56$) 结构, 并说明依据。



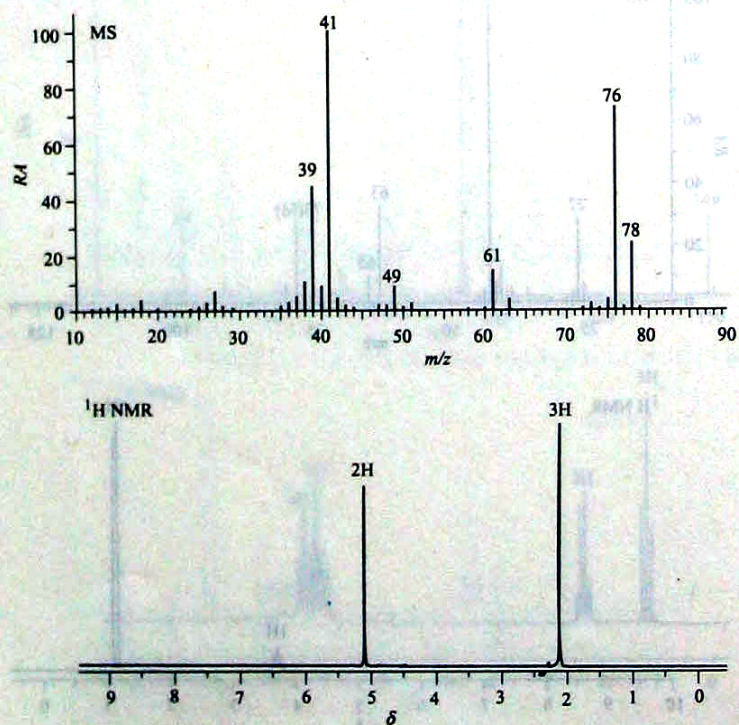
26. 根据如下 MS 和 ^1H NMR 谱图确定化合物 ($M=78$) 结构, 并说明依据。



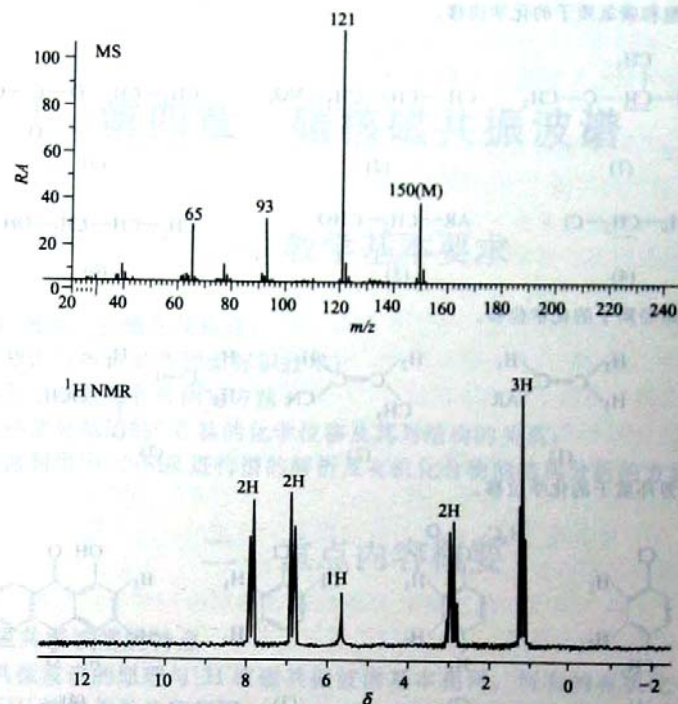
27. 根据如下 MS 和 ^1H NMR 谱图确定化合物 ($M=200$) 结构, 并说明依据。



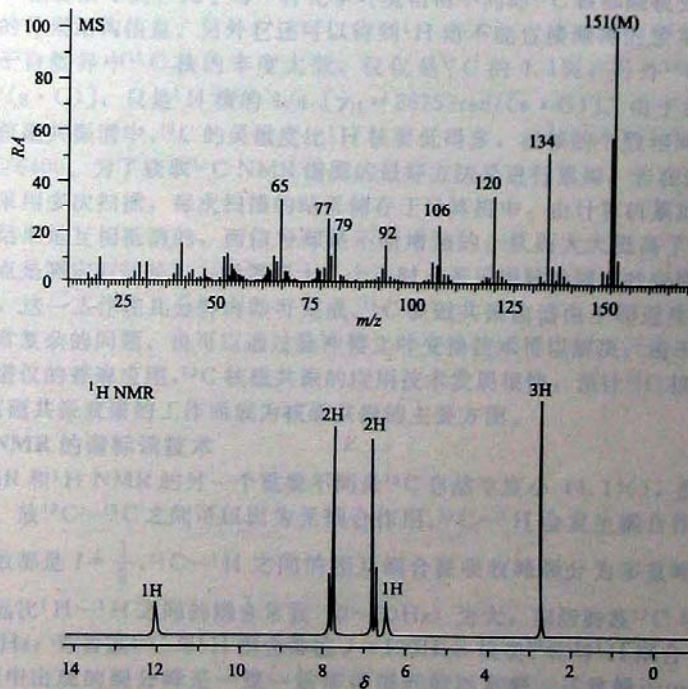
28. 根据如下 MS 和 ^1H NMR 谱图确定化合物 ($M=76$) 结构, 并说明依据。



29. 根据如下 MS 和 ^1H NMR 谱图确定化合物 ($M=150$) 结构, 并说明依据。

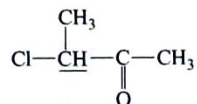


30. 某化合物 $\text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_2$, 根据如下 MS 和 ^1H NMR 谱图推断其结构, 并说明依据。

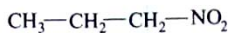


(五) 计算题

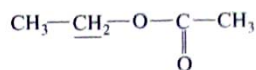
1. 计算下列饱和碳氢质子的化学位移。



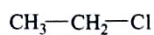
(1)



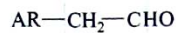
(2)



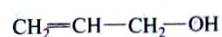
(3)



(4)

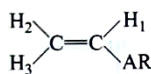


(5)

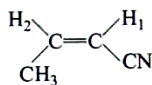


(6)

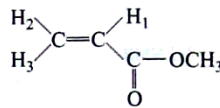
2. 计算下列烯烃质子的化学位移。



(1)

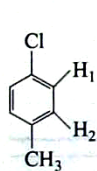


(2)

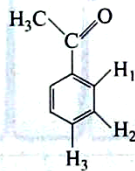


(3)

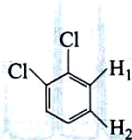
3. 计算下列芳环质子的化学位移。



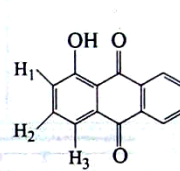
(1)



(2)



(3)



(4)