

## 有机结构分析-核磁共振谱

姓名: \_\_\_\_\_ 学号: \_\_\_\_\_ 院系: \_\_\_\_\_

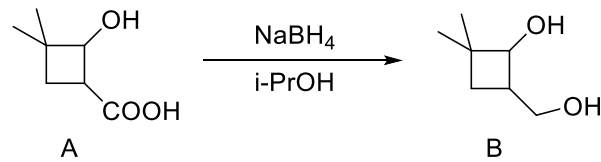
1. 某同学在实验室想用化合物 **A** 作原料来合成化合物 **B**, 当反应完成之后分离得到某一化合物 (不确定是不是目标产物), 想通过 HR-MS、IR 和 NMR 来鉴定结构, 得到的数据如下:

HRMS: 确定其分子式为  $C_7H_{12}O_2$

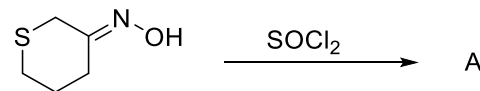
IR:  $1725\text{ cm}^{-1}$  有较强的一峰

$^1\text{H NMR}$ :  $\delta = 3.92\text{ (s, 2H)}$ ,  $1.00\text{ (s, 6H)}$ ,  $1.65\text{ (t, 2H, } J = 7.5\text{ Hz)}$ ,  $2.50\text{ (t, 2H, } J = 7.5\text{ Hz)}$ .

试判断所得到的产物是否为目标产物, 如果不是, 请推测产物分子结构。(注意: 不需要写出反应机理)



2. 化合物 A 可由以下反应生成:



化合物 A 的结构信息如下:

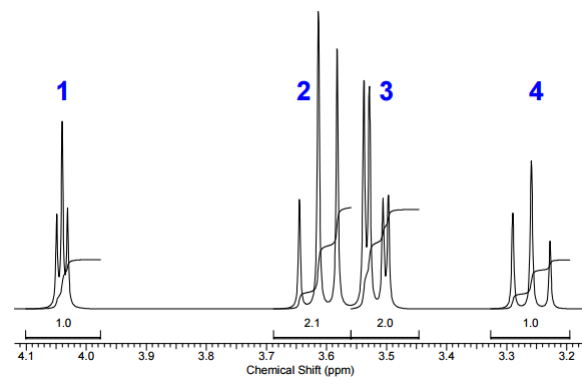
HRMS: 确定其分子式为  $C_5H_8NSCl$

IR: 在  $2250\text{ cm}^{-1}$  处有吸收峰

$^1\text{H NMR}$ :  $\delta = 2.0\text{ (m, 2H)}$ ,  $2.5\text{ (t, 2H)}$ ,  $2.9\text{ (t, 2H)}$ ,  $4.6\text{ (s, 2H)}$ .

试确定该化合物的结构, 并对以上 IR 和 NMR 谱图信号进行归属。

3. 某未知化合物分子是为  $C_6H_{12}O_6$ , 在  $D_2O$  中的一维核磁氢谱如下图 (溶剂和可以交换的质子没有显示,  $300\text{MHz}$ )。

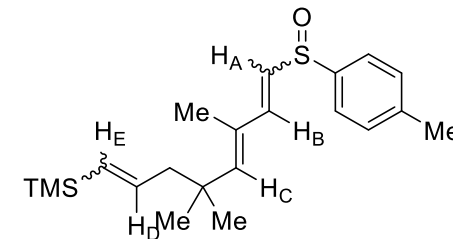


偶合常数 (Hz): 1 (2.8x2), 2 (9.6x2), 3 (2.8, 9.6), 4 (9.6x2)  
碳谱上有四个峰且都在 71 到 75 ppm 之间, 请判断结构是什么?

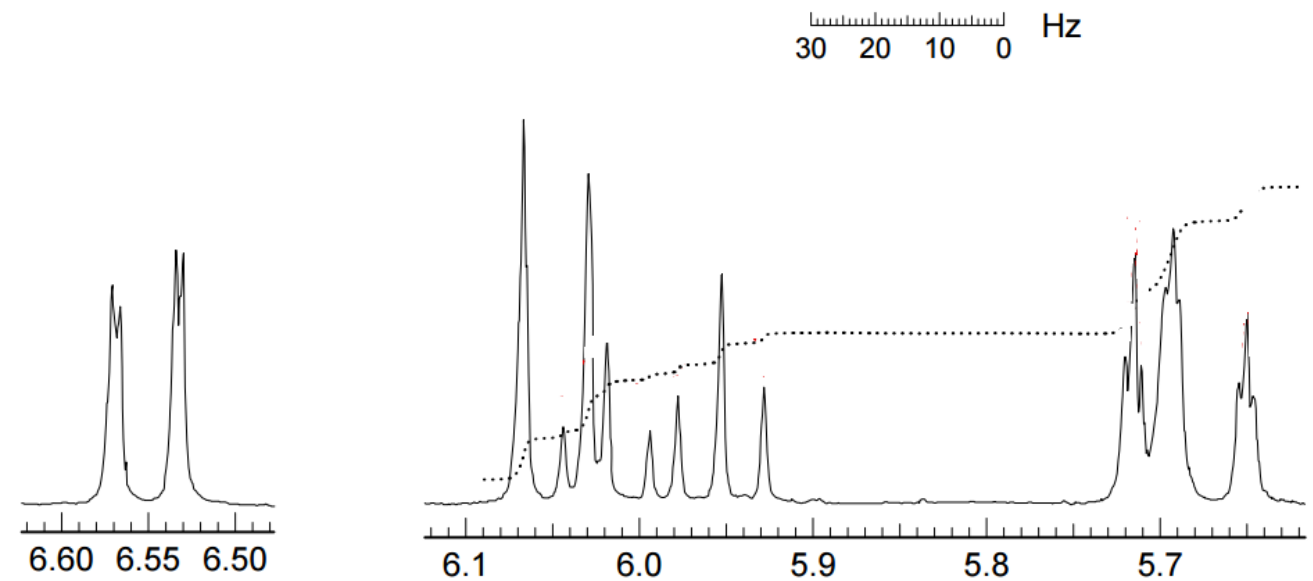
提示:

- 该化合物商品化;
- 连接两个氧原子的碳上的氢化学位移在 5 ppm 左右。

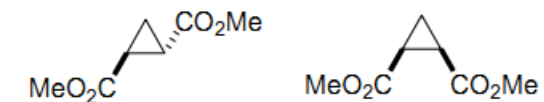
4. 请解释下面三烯的部分谱图。



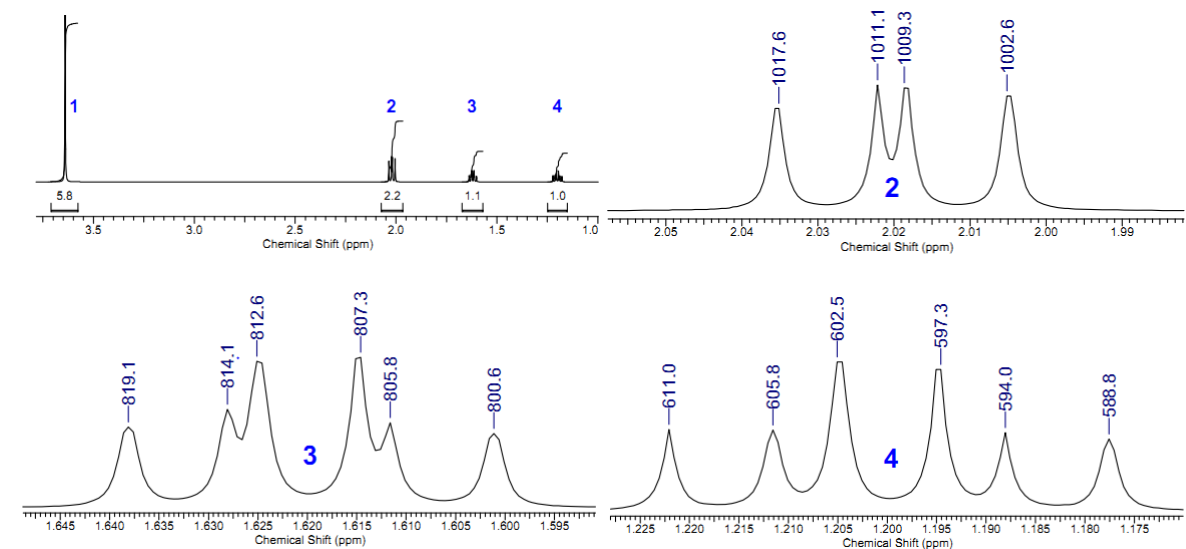
下面是  $H_A$  到  $H_E$  氢谱的放大图, 请分析偶合裂分情况 (一级谱) 并判断构型。



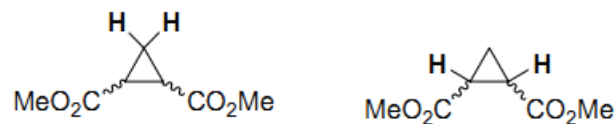
5. 1,2-环丙烷二羧酸二甲酯有顺式和反式:



下图是其中一种异构体的一维核磁氢谱:

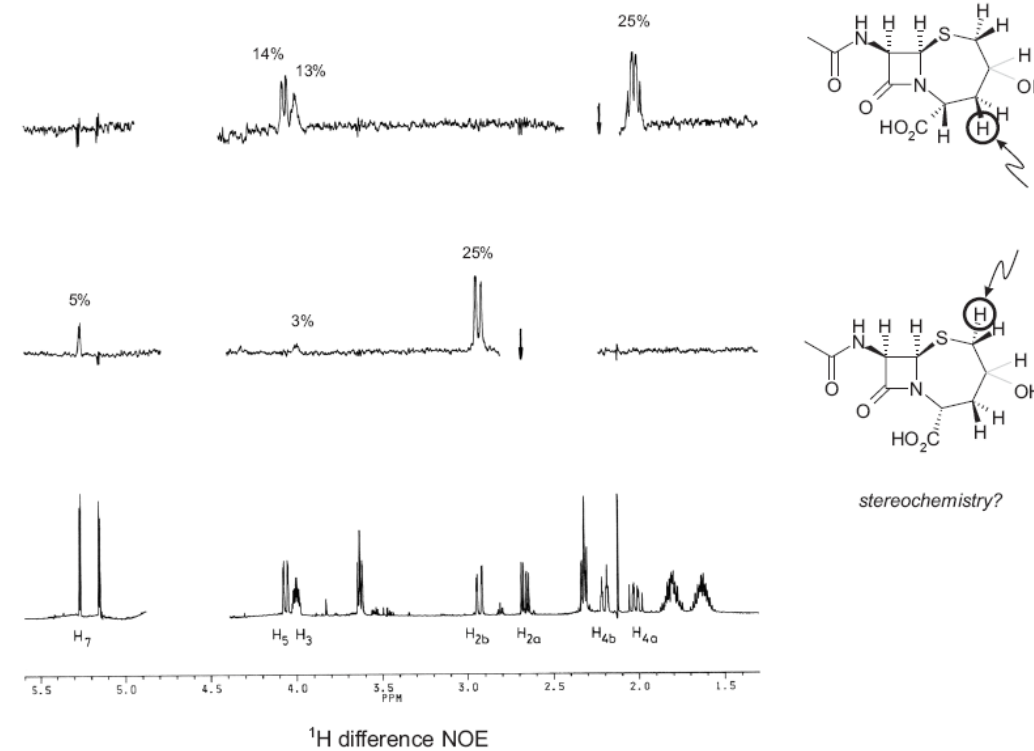


(1)判断各种异构体中一对质子的关系(homo-, enantio-, or diastereotopic relationships)。



(2)顺式和反式异构体分别出现几种不同的峰? (3)计算一下 H<sub>2</sub>、H<sub>3</sub>、H<sub>4</sub> 的耦合常数。

(4)判断一下该化合物是顺式还是反式?

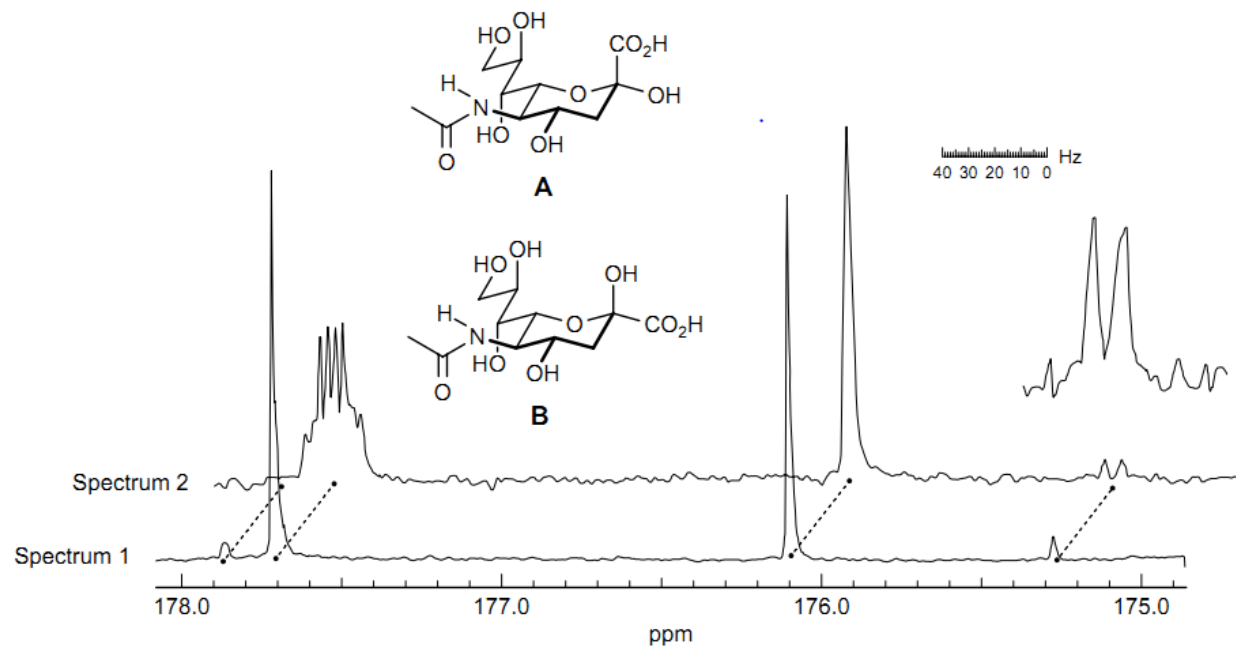


6. 下图是唾液酸两种异构体 10:1 混合物的部分碳谱, 谱图 1 是质子去偶谱, 谱图 2 没有去偶。

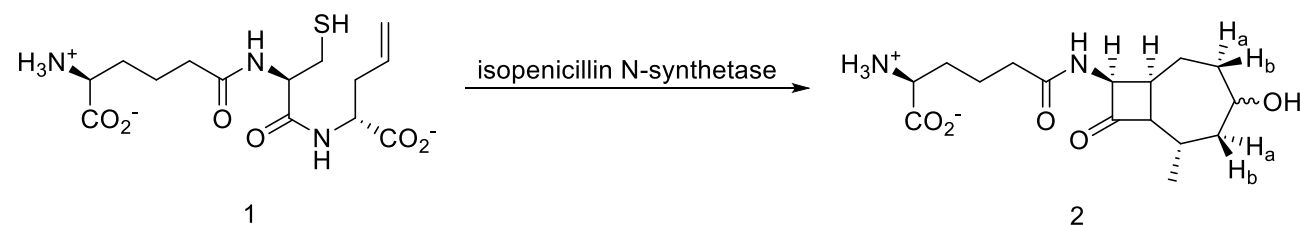
(a) 碳谱上对应唾液酸结构上哪一个碳原子, 请注明。

(b) 请解释一下在谱图 2 中 177.7 ppm 处多重度并大致计算一下耦合常数。

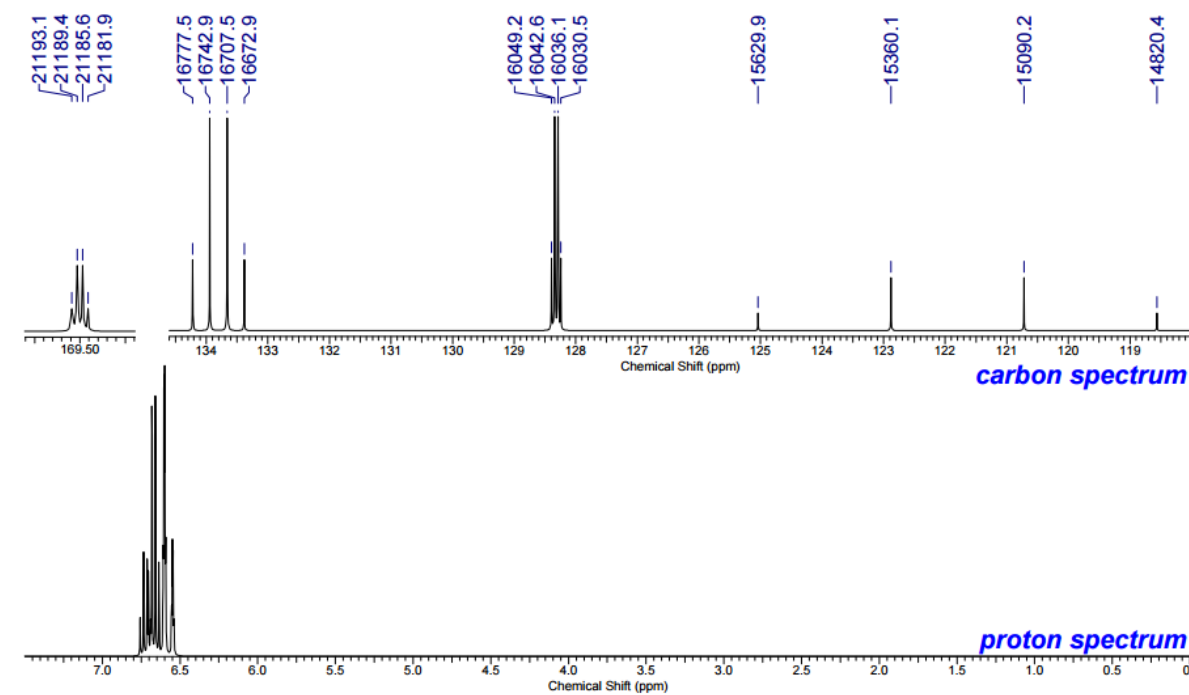
(c) 判断一下主要的异构体是 A 还是 B, 请说明理由。



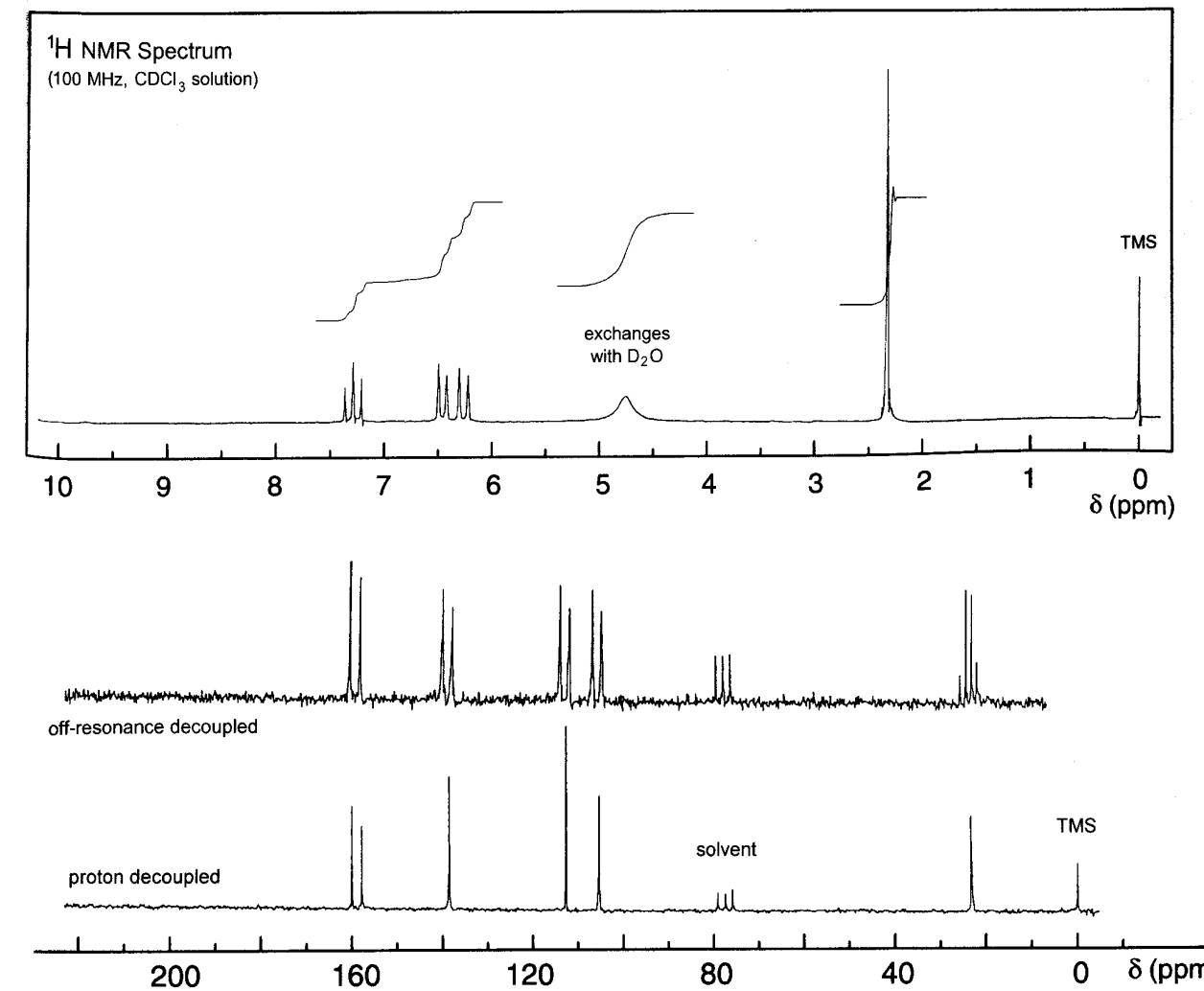
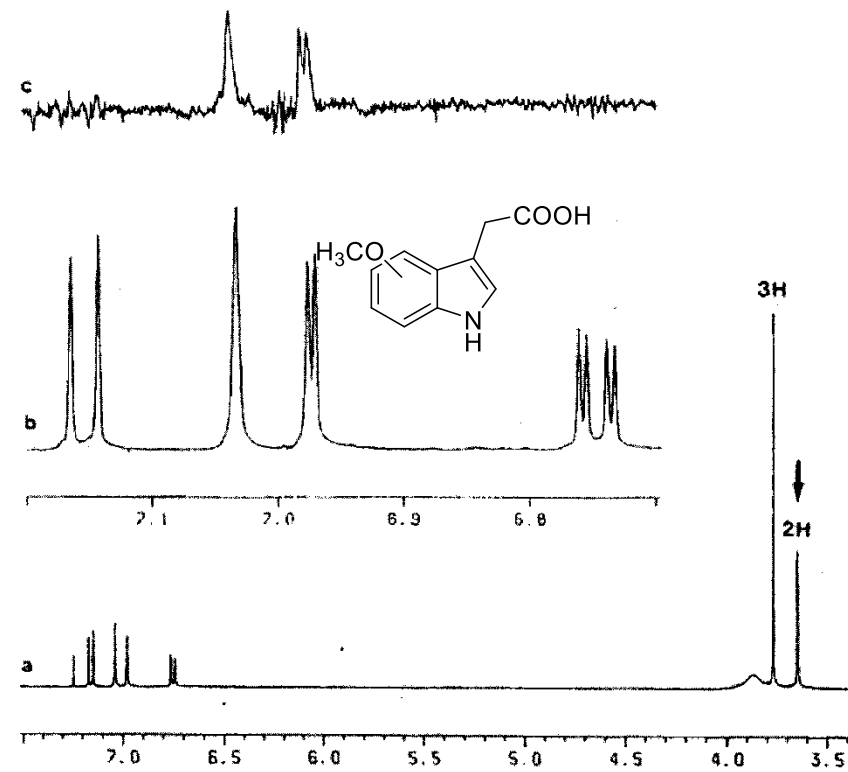
7. 在 isopenicillin N-synthetase 的作用下, 化合物 1 立体选择性的转化为化合物 2, 请根据下列 NOE 谱图判断 C<sub>3</sub> 的立体构型。



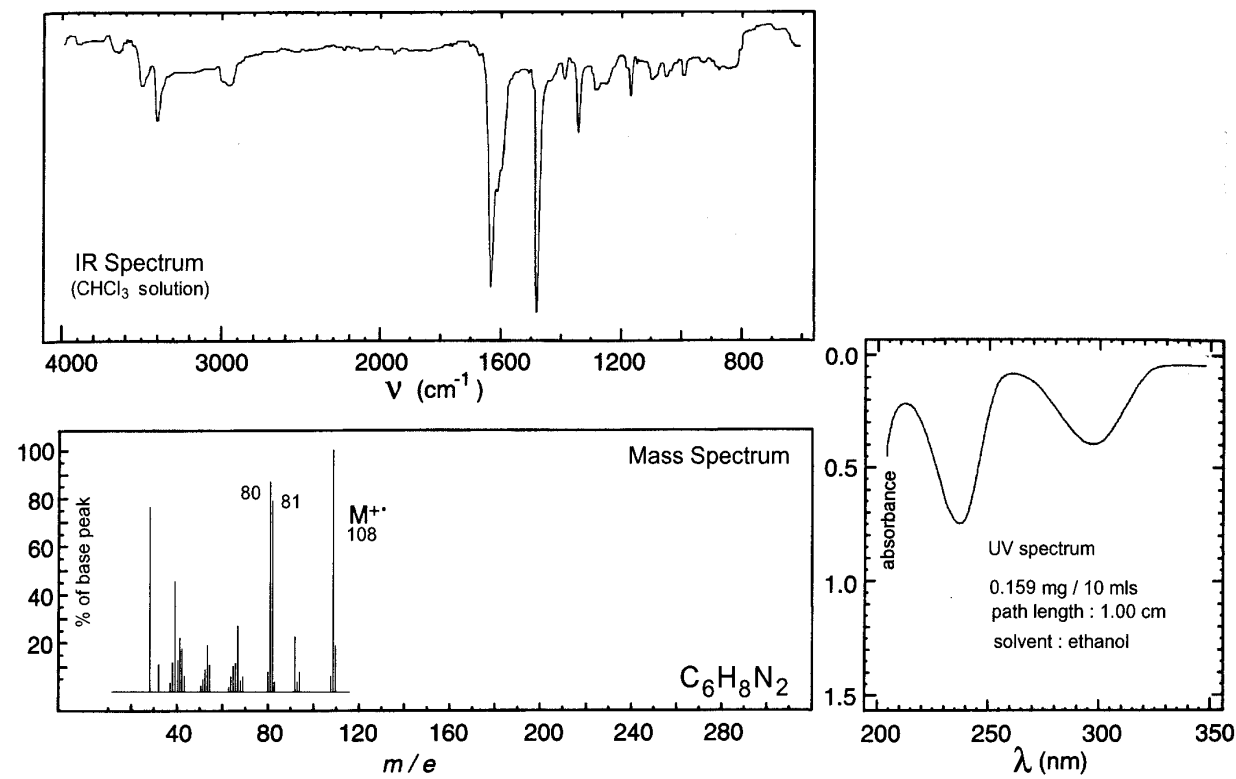
8. 某化合物分子式为 C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>F<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, 请确定该未知化合物结构, 如果有必要请确定一下相对立体构型。请计算一下耦合常数并将碳谱和结构对应好。



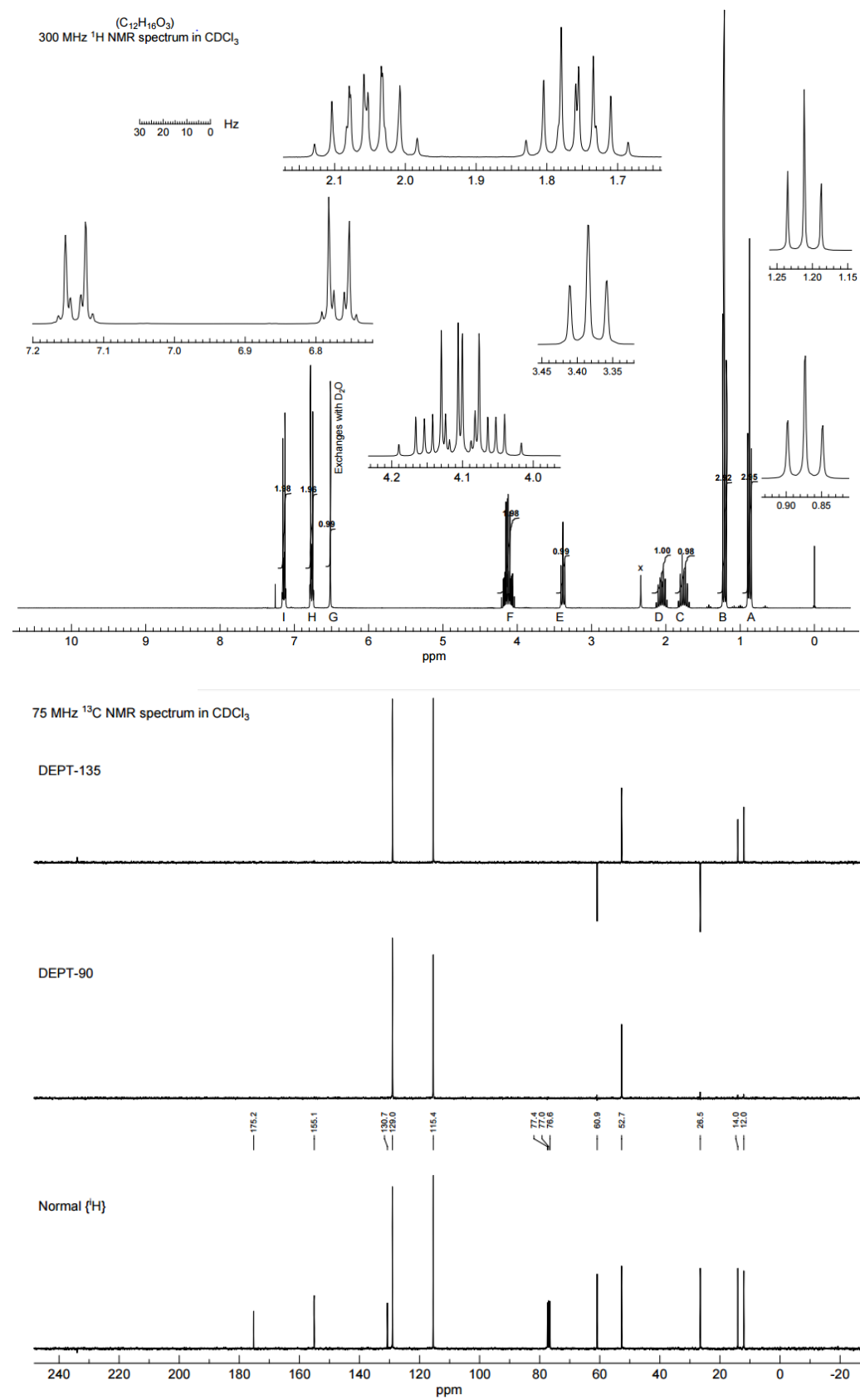
9. 某化合物的  $^1\text{H}$  NMR 和  $^1\text{H}$  NOE 谱图如下, 请指出甲氧基 (MeO) 的位置并简述理由。



10. 某化合物的分子式为  $\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2$ , 请根据 MS, IR, UV,  $^1\text{H}$  NMR 和  $^{13}\text{C}$  NMR 推断结构, 简述理由。



11. 下面是某化合物(C<sub>12</sub>H<sub>16</sub>O<sub>3</sub>)的氢谱和碳谱, 请推断该化合物最有可能的结构。



12. 某化合物的红外光谱, 核磁共振谱图如下, 试推断可能的结构。

