

<<有机波谱学谱图解析>>

图书基本信息

书名：<<有机波谱学谱图解析>>

13位ISBN编号：9787030258595

10位ISBN编号：7030258592

出版时间：2010-5

出版时间：科学出版社

作者：宁永成

页数：380

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<有机波谱学谱图解析>>

前言

本书是《有机化合物结构鉴定与有机波谱学（第二版）》（宁永成，科学出版社，2000）的姊妹篇。

《有机化合物结构鉴定与有机波谱学》出版以来，在国内有关研究所的研究人员和高校的有关专业的教师、研究生和本科生中得到广泛的应用。

作为大陆此领域的第一部著作，1991年在台湾出版繁体字版，同年秋季获得国家教委优秀教材二等奖。

该书第二版在2003年被教育部研究生工作办公室选为首批79部研究生教学用书之一（全国化学类著作仅两部入选，清华大学仅此一部入选），以后更进一步得到推广。

目前除在台湾出版的繁体字版的印数未知以外，《有机化合物结构鉴定与有机波谱学》在内地的累计印数已经超过25000册（第二版每年都重印）。

2005年春，该书的英译加增补版Structural Identification of Organic Compounds with Spectroscopic Techniques由国际知名出版公司Wiley-VCH出版。

英文版被很多国外的高校和研究所收藏，的确是走向了世界。

但是从另一方面考虑，该书所阐述的理论较深，自学比较困难。

由于讲述理论所占据的篇幅较大，对于谱图解析的阐述就不够详尽，而很多读者恰恰对于谱图解析更为关注。

正是基于这个考虑，本书的出版势在必行。

应用有机波谱学来鉴定有机化合物结构的方法已广为人知。

国内已经出版大量的著作。

但是关于核磁共振的部分，一些重要的内容（如对称面原则）没有讨论、二维谱的内容不够；质谱部分，没有介绍软电离质谱、串联质谱的解析；更没有专门推导结构的著作。

从国外的出版物来看，不乏推导未知物结构的著作，可以分为三类：1.以核磁共振为手段推导未知物结构 这类著作很多，涉及的未知物结构也很复杂。

然而它们的主要不足之处在于仅用核磁共振谱图，不用质谱和红外数据。

这样显然是不全面的。

2.以核磁共振、质谱和红外光谱的综合解析来推导未知物结构 虽然它们仍然提倡几种谱图的综合解析，但是涉及的未知物结构太简单。

3.单独的质谱和红外光谱的著作 由于它们不采用核磁共振谱图，解决的未知物结构特别简单，没有很高的参考价值。

鉴于上述情况，这三类著作都不理想。

总体来讲，不能满足有关读者的需求，更何况解析谱图需要掌握不少的技巧和具体的方法，需要深入讨论。

作者开始写作时的想法是以综合解析各种谱图来推导未知物结构或者确认化合物结构为主；把本书和《有机化合物结构鉴定与有机波谱学》（第二版）（宁永成，科学出版社，2000）配合使用。

后来作者考虑还是把目前这本书写成一本独立的书比较好。

本书共6章。

第1~5章分别讨论核磁共振氢谱、核磁共振碳谱、核磁共振二维谱、质谱和红外光谱的解析，介绍每种谱图解析的技巧和方法。

第6章为各种谱图的综合解析，占本书23的篇幅，从简到繁地讨论了20个例题。

<<有机波谱学谱图解析>>

内容概要

本书是《有机化合物结构鉴定与有机波谱学(第二版)》(宁永成, 科学出版社, 2000)的姊妹篇。全书共6章, 第1~5章分别介绍核磁共振氢谱、核磁共振碳谱、核磁共振二维谱、质谱、红外光谱解析的基础知识和解析方法, 第6章列举了大量有机化合物结构解析的实例, 通过实例可了解各种谱图的功能。

本书介绍了谱图综合解析的方法, 突出了各类谱图解析的规律、方法和技巧, 读者通过对本书的学习, 可加强谱图解析能力。

本书的英文版由威利(Wiley)出版公司同步出版。

本书可供高等院校高年级本科生、研究生使用, 也可供涉及有机化合物结构鉴定工作的科研人员参考。

<<有机波谱学谱图解析>>

作者简介

宁永成，1962年毕业于清华大学，留校任教。

1971年因两地分居调到沈阳化工研究院，开始从事有机化合物结构鉴定。

1978年调回清华大学。

1981年12月～1984年1月在法国天然物质化学研究所进修。

1989年，独自编著的《有机化合物结构鉴定与有机波谱学》在清华大学出版社出版。

<<有机波谱学谱图解析>>

书籍目录

前言	第1章 核磁共振氢谱的解析	1.1 化学位移	1.1.1 化学位移的概念	1.1.2 影响化学位移的因素
	1.2 耦合常数J	1.2.1 耦合作用和耦合常数	1.2.2 分类讨论耦合常数	1.3 化学等价和磁等价
	1.3.1 化学等价	1.3.2 磁等价	1.3.3 核磁共振氢谱的分类	1.4 一些常见官能团的核磁共振氢谱特征
	1.4.1 取代苯环	1.4.2 取代的杂芳环	1.4.3 正构烷基—	1.4.4 羰基化合物
	1.4.5 活泼氢	1.4.6 含有氟或者磷的化合物	1.5 核磁共振氢谱的解析方法	
	1.5.1 区分杂质峰, 注意所使用的溶剂	1.5.2 计算未知物的不饱和度	1.5.3 确定每个峰组所对应的氢原子的数目	1.5.4 确定未知物所含的官能团
	1.5.5 分析峰组的耦合裂分	1.5.6 组合可能的结构式	1.5.7 对推导出的结构进行指认	1.5.8 对推导出的结构进行核验
	1.6 核磁共振氢谱解析的例子	第2章 核磁共振碳谱的解析	2.1 核磁共振碳谱的特点和优点	2.2 核磁共振碳谱的主要参数——化学位移
	2.3 常见官能团核磁共振碳谱的化学位移及其主要影响因素	2.3.1 链状烷烃及其衍生物	2.3.2 环烷烃和取代环烷基	2.3.3 取代的烯基
	2.3.4 取代苯环	2.3.5 羰基	2.4 碳原子级数的确定	2.5 核磁共振碳谱的解析方法
	2.5.1 区分杂质峰, 鉴别溶剂峰	2.5.2 计算未知物的不饱和度	2.5.3 碳谱谱峰化学位移数值的考虑	2.5.4 确定碳原子的级数
	2.5.5 推测未知物的组成基团	第3章 核磁共振二维谱的解析	3.1 核磁共振二维谱的一般知识	3.2 同核位移相关谱
	3.3 异核位移相关谱	3.4 长程异核位移相关谱	3.5 NOESY谱和ROESY谱	3.6 同核总相关谱
	第4章 质谱的解析	4.1 有机质谱的基本知识	4.1.1 质谱谱图	4.1.2 有机质谱中的电离方法
	4.1.3 有机质谱中的各种离子	4.2 质谱中的同位素离子峰簇	4.3 电子(轰击)电离质谱(EI—MS)的解析	4.3.1 分子离子峰的确定
	4.3.2 碎片离子峰的解析	4.3.3 重排离子峰的解析	4.3.4 脂环化化合物的复杂断裂	4.3.5 常见官能团的质谱裂解模式
	4.3.6 EI质谱解析的方法和例题	4.4 软电离质谱的解析	4.4.1 由电喷雾电离产生的质谱	4.4.2 由化学电离产生的质谱
	4.4.3 由FAB产生的质谱	4.4.4 由MALDI产生的质谱	第5章 红外光谱的解析	第6章 谱图的综合解析
	附录 常见官能团红外吸收特征频率表			

<<有机波谱学谱图解析>>

章节摘录

第6章 谱图的综合解析 前面5章分别阐述了各种谱图的解析,本章讨论几种谱图的综合解析。

首先,需要说明:本书把谱图综合解析的方法集中于最常见的方法,即利用核磁共振氢谱、碳谱、DEPT谱、COSY谱、HMQC、谱(或HSQC谱)和HMBC谱,以及必要的其他数据(如从质谱得到的相对分子质量,串联质谱的数据)推导未知物的结构,或确认化合物结构。

这是因为上述方法是目前最常用,也是很可靠的方法。

由于作图的条件苛刻(如2D-INADEQUATE谱)或其他原因,其他方法比前述方法的应用少得多,因此没有在此介绍。

其次,在本章的实例中,以指认为主而确认化合物结构的例题占了比较大的比例。

这是因为如果真正要推导结构完全未知而又很复杂的化合物结构时,上述方法的确还存在困难。

此时往往需要应用X射线单晶衍射来确定复杂化合物的结构。

如果有X射线单晶衍射的基础,上述方法可以完成其衍生物的结构推导。

也经常看到,在报道化合物结构的文献中往往通过对比以前文献的相关数据而确定结构。

另外,有时遇见的未知物结构并不是很复杂,但是在未知物结构中季碳原子及杂原子比较多,这使COSY谱、HSQC谱和HMBC谱的功效大受影响,也使上述常用方法遇到困难。

不管怎样,通过本章的讨论,读者可以掌握这套方法,并学会怎样从谱图得到尽可能多的结构信息。

6.1 常用的方法和步骤 为推导一个未知物的结构,一般情况下需要质谱的相对分子质量数据或者元素组成式。

虽然核磁共振氢谱和碳谱给出了碳原子和氢原子详尽的信息,但是它们仅对于某些杂原子给出直接的信息(如碳谱中的羰基)和间接的信息(如氢谱中的NH、OH,氟原子产生的氢谱和碳谱谱线的裂分),对若干杂原子不能给出信息(如硫醚),此时如果没有质谱的数据是不可能完成推导未知物结构的任务的。

一般情况下,采取逐次分析各种谱图,得到有关的信息,最后进行未知物结构的组装或者结构的确认。

解析谱图的顺序及应该得到的信息如下: 1.核磁共振氢谱 一般情况下首先分析核磁共振氢谱。

核磁共振氢谱能够给出化合物结构的丰富信息: (1)从核磁共振氢谱可以得到未知物结构的一个总体认识:是脂肪族化合物还是芳香族化合物?

如果是脂肪族化合物,其碳链是正构还是分枝?

分枝是多还是少?
……

<<有机波谱学谱图解析>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>