

<<核磁共振谱学>>

图书基本信息

书名：<<核磁共振谱学>>

13位ISBN编号：9787122071651

10位ISBN编号：7122071650

出版时间：2010-4

出版时间：王乃兴 化学工业出版社 (2010-04出版)

作者：王乃兴

页数：311

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>

## &lt;&lt;核磁共振谱学&gt;&gt;

## 前言

承蒙读者厚爱，本书得以再版。

《核磁共振谱学——在有机化学中的应用》第一版印数较多，仍在几年内基本售罄，说明NMR作为一门科学非常吸引人；作为一种“工具”，在有机化合物结构鉴定和诸多结构信息研究方面有着非常重要的作用。

目前NMR的研究发展很快，从学术研究层面来讲，自1952年美国科学家F.布洛赫和E.M.珀塞尔由于物质核磁共振现象的研究获得诺贝尔物理学奖以后，1991年瑞士科学家R.R.恩斯特由于发明了傅里叶变换核磁共振分光法和二维核磁共振技术（高分辨NMR）而荣获诺贝尔化学奖；2002年瑞士科学家K.维特里希由于发展用核磁共振谱测定溶液中生物大分子的三维结构而荣获诺贝尔化学奖。

这些成就代表了NMR科学研究的重要里程碑。

NMR的研究已经从化学跨越到生命科学领域，本书在第七章作了一些简要介绍。

从应用方面来说，NMR已经从剖析有机化合物的分子结构深入到目前的蛋白质科学和脑科学的研究，超导核磁共振仪在各大医院已经非常普遍，使用核磁共振成像技术进行医疗诊断已经为大家所熟悉。NMR的学术研究成果经常在国际核心化学刊物上发表出来，仪器的分辨率不断提高。

现在，国内许多研究型大学基本上都有了分辨率较高的NMR仪。

特别值得介绍的是中国科学院武汉物理与数学研究所从20世纪60年代就在NMR的基础理论和应用方面开展了深入的研究工作，目前还开展了NMR波谱仪的研制工作，生物核磁共振分析和固体核磁共振方法等研究方向具有很好的学术和应用前景。

关于氢谱的积分，由于涉及理论问题很少，初学者也很容易掌握，本书没有特别论述。

笔者在本书第一版出版后，连续多年来给研究生讲授本书中的主要内容，受到了意想不到的欢迎。

在讲授过程中，笔者也发现了一些问题：如第一版中二维谱的介绍较为简略；手性分子与NMR光谱的介绍太少；对NMR的前沿研究工作的进展介绍得较少等。

笔者在工作之余，把发表在国际核心科技期刊和其它方面的一些新进展积累起来，在第一版的基础上作了补充和修改。

在第一版编写完成之后，笔者在初版的后记中曾说：“希望为从事有机化学的同仁和学生、学者们敬献一本内容较新的工具书”。

但由于笔者水平有限，书中难免有误，敬请广大读者指正为盼！

## &lt;&lt;核磁共振谱学&gt;&gt;

## 内容概要

《核磁共振谱学：在有机化学中的应用》深入系统地论述了NMR谱学的几乎全部内容，作者主要参阅了近几年来国外这方面的诸多文献，对氢谱、碳谱、二维谱、蛋白质和核酸的NMR分析等问题作了深入的阐述。

在 $^1\text{H}$  NMR中，对氢谱涉及到的自旋—自旋耦合、核间奥氏效应（NOE效应）、分子立体结构和手性中心对相邻质子的作用等作了详细说明。

对 $^{13}\text{C}$  NMR谱的去耦技术和在非去耦条件下的 $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$ 耦合、 $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$ 耦合等问题作了概述。

用一章的篇幅对2D NMR作了专门的论述。

《核磁共振谱学：在有机化学中的应用》还对蛋白质、核酸生物大分子的核磁共振研究进展作了详细的介绍，并给出了大量参考文献。

在书的最后附了大量谱图供大家参考，特别是对许多谱图作了表征。

《核磁共振谱学：在有机化学中的应用》理论服务于实践，实用价值很大，是从事有机化学、药物化学、植物化学、生物化学、石油化学、化学工业、材料化学、生命科学等方面的科技人员和高等院校相关专业师生的一本很好的参考书和工具书，也可以作为NMR谱学的教科书使用。

## 书籍目录

第1章 绪论1.1 概述1.2 基本原理1.3 基本概念1.3.1 角动量和核磁矩1.3.2 核磁共振 (NMR) 谱1.4 相关应用进展第2章 化学位移2.1 概述2.2 屏蔽效应探讨2.2.1 化学位移的计算2.2.2 示例2.2.3 化学位移的产生2.3 影响屏蔽效应的一些因素2.3.1 局部抗磁 (屏蔽) 效应2.3.2 局部顺磁 (去屏蔽) 效应2.3.3 邻位基团2.3.4 影响化学位移的其他因素2.4 对化学位移的进一步探讨2.4.1 质子电荷密度对化学位移的影响2.4.2 对邻碳原子的电荷密度的影响2.4.3 相邻原子和化学键的诱导磁矩对化学位移的影响2.4.4 环共轭 电子体系2.4.5 环丙烷环上的磁异性2.4.6 极性基团的电场效应和范德华效应2.4.7 氢键对化学位移的影响2.5 相关有机金属化合物的化学位移2.6 经验取代基常数2.7 一些重要有机化合物中质子的化学位移第3章 自旋-自旋耦合3.1 概述3.2 多重峰的一般规律3.3 比率 $J/(0)$ 的意义3.4 自旋-自旋耦合和分子结构的关系3.4.1 耦合常数的大小与分子几何构型的关系3.4.2 耦合常数和分子化学结构的关系3.5 自旋系统的分类3.5.1 模式3.5.2 与一个自旋量子数 $I = 1/2$ 的原子核耦合 (AX系统) 3.5.3 AX<sub>2</sub>、AX<sub>3</sub>、AX<sub>n</sub>系统3.5.4 AMX系统3.5.5 AB、AB<sub>2</sub>系统3.5.6 ABX系统3.5.7 ABC系统3.5.8 几个四旋系统和其他系统3.6 1H与 $I = 1/2$ 和 $I > 1/2$ 的原子核耦合3.6.1 1H与 $I = 1/2$ 的原子核耦合3.6.2 1H与 $I > 1/2$ 的原子核耦合3.7 等价原子核3.8 强耦合作用3.9 手性效应3.10 远程耦合3.10.1 概述3.10.2 远程耦合理论3.10.3 位移试剂3.11 与杂原子相连的质子的NMR和溶剂效应3.12 化学交换3.12.1 对称的构象变换3.12.2 不对称的构象变换3.13 有机化合物的自旋-自旋耦合常数表第4章 复杂耦合现象和NOE效应4.1 磁等价4.1.1 概念4.1.2 磁等价性理论4.2 复杂谱4.3 自旋晶格弛豫4.3.1 自旋晶格弛豫4.3.2 自旋晶格弛豫的来源4.4 NOE效应 (核间奥氏效应或核极化效应) 4.5 四极弛豫4.6 NOE效应及其应用4.6.1 季碳原子4.6.2 CH和CH<sub>2</sub>中的碳4.6.3 NOE值对结构的确定4.6.4 NOE效应对蛋白质结构的确定4.6.5 分子动态结构研究第5章 <sup>13</sup>C-NMR谱5.1 概述5.2 几种去耦方法5.2.1 质子宽带去耦5.2.2 偏共振去耦5.2.3 选择性质子去耦5.2.4 门控去耦5.2.5 反转门控去耦5.3 其他问题5.3.1 氘代的影响5.3.2 化学位移等价5.3.3 <sup>13</sup>C-<sup>1</sup>H耦合常数5.3.4 <sup>13</sup>C-<sup>13</sup>C耦合常数5.4 <sup>13</sup>C NMR谱的化学位移第6章 二维谱6.1 概述6.2 相关波谱分析法6.3 <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY谱6.4 双量子过滤的<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY谱6.4.1 化合物ipenol6.4.2 石竹烯氧化物6.5 <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C COSY异核化学位移相关谱 (HETCOR谱) 6.6 质子检出的HETCOR异核多量子相干谱 (HMQC谱) 6.7 质子检测的远程<sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C异核相关谱 (HMBC谱) 6.8 <sup>13</sup>C-<sup>13</sup>C相关谱 (非常规天然丰度双量子转移实验, INADEQUATE实验) 6.9 全相关谱6.10 梯度NMR第7章 生物大分子NMR简介7.1 蛋白质的NMR分析简介7.1.1 概述7.1.2 溶解条件的优化7.1.3 标记与表达7.1.4 相关实验7.1.5 蛋白质相互作用的NMR分析参考文献7.2 核酸的NMR分析简介7.2.1 概述7.2.2 样品的制备7.2.3 用于多核NMR标记的核酸的制备7.2.4 分析策略——新的灵敏度优化7.2.5 氢键的NMR检出7.2.6 J耦合的测定7.2.7 残余偶极耦合——用于阐明结构7.2.8 对核酸弛豫作用的研究7.2.9 结论参考文献7.3 通过氢键的标量耦合7.3.1 概述7.3.2 生物大分子中的氢键标量耦合7.3.3 与化学位移的关系7.3.4 几何形态的影响7.3.5 应用7.3.6 结论参考文献7.4 生物活性大分子NMR研究新进展7.4.1 <sup>13</sup>C / <sup>15</sup>N标记的蛋白质中H键7.4.2 蛋白质结构中<sup>13</sup>C和<sup>15</sup>N的化学位移7.4.3 镧系示踪原子对蛋白质结构测定的应用7.4.4 生物大分子中的亚甲基的弛豫优化7.4.5 嘌呤和嘧啶碱基中的偶极耦合7.4.6 细胞因子的NMR分析7.4.7 魔角旋转固态NMR表征RNA中的氢键7.4.8 NMR谱在啤酒成分鉴定中的应用参考文献第8章 若干NMR谱图附录 相关NMR溶剂数据表全书主要参考文献

## 章节摘录

插图：这件似乎不可能的任务是在双量子过滤的帮助下完成的。

在DQF-COSY实验中，双量子过滤除去了所有的单自旋过渡态，在本例中被分隔的 $^{13}\text{C}$ 只有由两个或更多自旋子的体系（AB体系和AX体系）的过渡态才能在采样期被检测到谱图（如图6.15所示）。

假定在合适的锁场溶剂中这个化合物有一定的溶解度，则实验中的主要问题就是样品量的大小。

对于低相对分子质量的化合物（相对分子质量小于500），在现代的NMR波谱仪条件下，在0.5 mL的氘代溶剂中溶解200 ~ 300 mg才是合适的。

但0.5 mL氘代溶剂中能完全溶解50 ~ 100 mg样品已经很不错了。

特别是 $^{13}\text{C}$  NMR实验，要求处于完全溶解状态下的样品量是较大的。

可行的方法是将其模拟为DQ-COSY实验，不过F1、F2都是碳轴。

从理论上讲这个实验是可行的，但从实际考虑，为了获得完全的双量子过滤，INADEQUATE实验稍微有些不同。

在如图6.16所示的石竹烯氧化物的INADEQUATE谱中发现F2轴是我们熟悉的碳轴，当然，这与 $t_2$ 采样期相关，而F1轴我们却不太熟悉，需要进一步解释。

在 $t_1$ 期，产生的频率并不是在典型的COSY谱中出现的耦合核的化学位移值，而是在 $t_1$ 期产生的耦合核的化学位移的总和。

## 后记

NMR是一门科学，一种工具，也是有机合成研究发表论文的极为重要的依据。

作者2000年从美国Rice大学回国后入选中国科学院“百人计划”，任中国科学院理化所研究员和博士生导师。

该书于2006年出版以后，我于2007年就给中国科学院研究生院化学学院讲授“有机化合物光谱解析”，选用的主要教材就是本书。

连续几年来，选课的研究生每年近150多人，受到了意想不到的好评。

说明本书选作谱学课的教程也是较好的。

在讲授过程中，我发现了一些问题：如第一版中二维谱的介绍较为简略，自学较为困难。

手性分子与NMR光谱的介绍太少；对NMR的最前沿研究工作的进展介绍较少等等。

我又花费了大量时间，把发表在国际核心科学刊物和其他方面的一些新进展积累起来，在第一版的基础上作了补充和修改。

对二维谱的修改和补充下了较大工夫，对手性分子的NMR光谱作了补充，也对第一版中的一些错误作了修改。

希望本书第二版为从事有机化学的研究生、同仁和学者们敬献一本内容更新的NMR书！

不足之处敬请指正为盼。

<<核磁共振谱学>>

编辑推荐

《核磁共振谱学:在有机化学中的应用(第2版)》是由化学工业出版社出版的。

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>