

FENXIXIHEHUAXUEJIESHOUCE

分析化学手册

第七分册

核磁共振波谱分析



第二版



化学工业出版社
CHEMICAL INDUSTRY PRESS

分析化学手册

(第二版)

第七分册

核磁共振波谱分析

于德泉 杨峻山 主编

化学工业出版社

·北京·

(京)新登字 039 号

图书在版编目(CIP)数据

分析化学手册 第七分册:核磁共振波谱分析/于德泉,
杨峻山主编. —2版. —北京:化学工业出版社,1999.5
ISBN 7-5025-2474-6

I. 分… II. ①于… ②杨… III. ①化学分析-手册②核
磁共振谱法-波谱分析-手册 IV. 065-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 03016 号

分析化学手册

(第二版)

第七分册

核磁共振波谱分析

于德泉 杨峻山 主编

责任编辑:任惠敏 田 桦

责任校对:陈 静

封面设计:于 兵

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

新华书店北京发行所经销

北京市昌平振南印刷厂印刷

三河市前程装订厂装订

*

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 61 字数 1418 千字

1999 年 10 月第 2 版 1999 年 10 月北京第 1 次印刷

印 数:1—3000

ISBN 7-5025-2474-6/TQ·1118

定 价:125.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

《分析化学手册（第二版）》编辑委员会

主任：周同惠

副主任：汪尔康 陆婉珍

委员：

- 周同惠 中国科学院院士
中国医学科学院药物研究所
- 汪尔康 中国科学院院士
中国科学院长春应用化学研究所
- 陆婉珍 中国科学院院士
中国石油化工总公司石油化工科学研究院
- 高 鸿 中国科学院院士
西北大学
- 高小霞 中国科学院院士
北京大学
- 梁晓天 中国科学院院士
中国医学科学院药物研究所
- 卢佩章 中国科学院院士
中国科学院大连化学物理研究所
- 陈耀祖 中国科学院院士
浙江大学 兰州大学
- 王 夔 中国科学院院士
北京医科大学
- 黄本立 中国科学院院士
厦门大学
- 俞汝勤 中国科学院院士
湖南大学
- 畠山立子(日) 日本国工业技术院物质工学工业技术研究所
- 孙亦樑 北京大学
- 慈云祥 北京大学
- 李浩春 中国科学院大连化学物理研究所
- 邓家祺 复旦大学
- 邓 勃 清华大学
- 王敬尊 北京微量化学所

程介克 武汉大学
陈洪渊 南京大学
于德泉 中国医学科学院药物研究所
张玉奎 中国科学院大连化学物理研究所
张孙玮 杭州大学
刘振海 中国科学院长春应用化学研究所
丛浦珠 中国医学科学院药物研究所
彭图治 杭州大学
杨峻山 中国医学科学院药用植物研究所
柯以侃 北京化工大学
王国顺 杭州大学
任惠敏 化学工业出版社

第二版前言

分析化学是人们获得物质化学组成和结构信息的科学。由于多学科的交叉渗透，现代分析化学已发展成为一个庞大的学科体系，建立起了比较成熟的多种分析方法，包括色谱分析、电化学分析、光谱分析、波谱分析、质谱分析、化学分析、热分析、放射分析、生化分析等。它一方面在科学研究中起着至关重要的作用，极大地推动着其他学科的发展；另一方面还直接服务于国民经济和生产的需要。同时，当代科学技术和人类生产活动的飞速发展也向分析化学学科提出了严峻的挑战，并带来了前所未有的发展机会。

我国的分析化学学科在新中国建立以来，特别是改革开放以后，取得了长足的发展。到目前为止，在全国范围内已形成了一支以中国科学院和高等院校及各部委研究所为核心的分析化学科研队伍，和一个涉及生物、环境、材料、临床、医药、地质、冶金、石化、宇航、商检、法医、侦破和考古等领域的庞大分析检验队伍，共同构成了我国分析化学学科研究发展的源泉和推广应用的基地。在多年的发展过程中，无论是分析化学的基础理论，还是实际应用方面，都已形成了丰富的知识和经验的积累，需要进一步的总结和推广。

《分析化学手册》是一部比较全面的反映现代分析技术，供化学工作者使用的专业工具套书。手册第一版自1979年出版以来，在读者中形成了一定的影响，已成为许多分析化实验室的必备图书。但由于受组稿时的历史条件所限，加上近20年来是世界和我国的科学技术，包括分析化学学科飞速发展的时期，原手册第一版在内容和编排上已不能全面反映当前我国分析化学的发展现状。因此，根据广大读者的要求，我们组织了这套《分析化学手册》的修订工作。

在第一版原有6个分册的基础上，这次经扩充和修订为以下10个分册：

第一分册 基础知识与安全知识

第二分册 化学分析

第三分册 光谱分析

第四分册 电分析化学

第五分册 气相色谱分析

第六分册 液相色谱分析

第七分册 核磁共振波谱分析

第八分册 热分析

第九分册 质谱分析

第十分册 化学计量学

其中第一分册为基础内容，收集了分析工作中常用的基础数据、分析实验

室的安全知识及分析数据的常规处理、计算机应用的基础知识。第十分册所涉及的化学计量学是近些年来发展非常迅速的化学学科的一个分支，与分析化学有着特殊密切的关系，它应用数学和统计学的方法，并引入计算机科学的发展成果，其研究对象几乎涉及分析化学的所有过程，对于设计或选择最优的分析方法，解析大量的化学分析数据以最大限度地获取化学信息等具有普遍的指导意义，因此修订时增加这一部分内容。其他各分册均是按分析方法及所采用的主要仪器类型来划分，大体包括两方面的内容：基础原理、基础数据部分和实际应用部分。

本次修订，在内容上我们着重收录了基础性的理论和发展较为成熟的方法及应用，注意推陈出新，更新有关数据，增补各自领域近些年的新发展新成果，特别是计算机应用、多种分析手段联用技术的发展，以及分析技术应用于生命科学等的内容。

在编排方式上，进一步突出了手册的可查性。各册均编排主题词索引，与目录相互补充。手册中所涉及的名词术语统一采用国家自然科学名词审定委员会发布的标准，计量单位参照国家标准《GB 3100~3102—93·量和单位》的有关规定贯彻执行。其他凡有国家标准的也一律采用相关最新标准。

第二版的重编修订工作得到了我国分析化学界的大力支持，包括11位中国科学院院士在内的近30位知名专家、学者应邀担任了手册修订的编委会成员，全套书的修订出版凝聚着他们大量的心血和期望，在此谨向他们，以及在编写过程中曾给予我们热情支持与帮助的有关院校、科研单位及厂矿企业的专家和同行们，致以衷心的感谢。同时我们也真诚地期待着广大读者的热情关注和批评指正。

《分析化学手册》编委会

1996年6月

本分册修订说明

本分册在第一版《分析化学手册》中作为第五分册出版至今已有 10 年左右，在此期间核磁共振波谱技术得到迅速发展，进入近代核磁共振谱时期，其特点是方法学千变万化，而其基本参数，基本原理则维持不变，即化学位移和偶合常数两大参数，对测定化学结构仍显示巨大威力。

在 ^1H 及 ^{13}C 核磁共振谱所能提供的数据中，最重要的是化学位移，其中 ^1H 谱的偶合常数也很重要。对于不少的亚结构，已有成熟的经验公式可以进行估算。但对于较复杂的结构，尤其是多环体系，则仍需与相近的已知结构对比才能说明问题。这些数据往往散见于文献中。查阅文献时如果碰到的对照化合物近似程度不够高，则有可能得出错误的结论，因而有一本比较完备的手册很有必要，本手册即为此目的而设。

但一本手册没有可能把浩如烟海的文献数据都汇集起来，必须有所侧重，力求在代表性与特殊性之间达成合理的仲裁。通过近年来本手册原有版本的应用情况，对手册内容进行了一些必要的增删，其中主要是删去了颇占篇幅的黄酮 ^1H 谱图，适当吸收了一些新数据，对工业产品有所照顾。这样可以进一步扩大手册的应用面。

本分册由三部分（三篇）内容构成：第一部分是有关核磁共振波谱的基本原理、重要谱学方法和有关参数的定义、概念等基础知识与理论；鉴于在第一版中基础知识方面的内容过于精炼，不能适应 NMR 技术飞速发展的形势，在修订版中增补为第一篇“核磁共振波谱的基本学理，重要谱学方法和有关参数……”，以补充原版的不足。第二部分是各类有机化合物的结构与 ^1H 核磁共振的化学位移、偶合常数数据；在这部分中，删去了原第一版中一些不重要的图表，如黄酮类化合物等，而增加一些更具代表性结构的 ^1H NMR 数据，同时在选材方面充分考虑各类化合物的用途。第三部分是各类有机化合物的结构与 ^{13}C 核磁共振的化学位移，在每一章的开头增加了一些概念性的结论，供读者参考。书中还适当介绍了 ^{15}N 、 ^{19}F 、 ^{31}P 等核的化学位移，介绍了多维核磁共振方法。本书末尾的目录列出一些比较重要的有关 NMR 术语的缩写及英汉对照。

本书中注意贯彻了国家标准 GB《量和单位》的基本原则，注重所用单位及符号与有关的标准规定的一致性。例如，长期以来化学位移 (δ) 一直是以 ppm 作为单位，本次修订依据国际纯化学与应用化学联合会 (IUPAC) 1982 年关于 δ 的定义，将其单位改为 1 (即去掉数字后的 ppm)。

本书为从事核磁共振的技术人员及从事有机结构研究工作的人员提供了多种类型大量化合物 (特别是天然有机化合物) 的丰富、翔实的数据资料。上面已指出 ^1H 及 ^{13}C 的规律性 (取代基加和性经验公式) 还是很强的，读者往往可以比较精确地估计出类似结构的预期数值。其结果是在应用过程中能动地扩大了手册资料的实际收载量。因此可以预期，本手册的新版将在有机化合物结构鉴定工作中发挥良好的作用，成为得力的参考工具。

在这次修订过程中，我们认真听取各方意见，力求新版更充实实用。在编写修订大纲过程中得到梁晓天院士、王敬尊教授等有关专家的大力支持和指导，并提出许多宝贵意见，

在此致以衷心感谢。但由于编者水平所限，书中缺点错误之处在所难免，欢迎读者批评指正。

编者

1999年1月于北京

内 容 提 要

第二版《分析化学手册》在第一版的基础上做了较大幅度的调整、增删和补充。全套书由10个分册构成：基础知识与安全知识、化学分析、光谱分析、电分析化学、气相色谱分析、液相色谱分析、核磁共振波谱分析、热分析、质谱分析和化学计量学。

第二版《分析化学手册》中注意贯彻了国家标准 GB《量和单位》的基本原则，注重所用单位与有关国际规定的一致性。在取材上突出实用性，注重基础知识、基础数据与分析技术的最新进展并容。在内容上注重科学性与准确性。在编排上强调系统性与查阅方便。

本分册由三部分（三篇）内容构成：第一部分是有关核磁共振波谱的基本原理、重要谱学方法和有关参数的定义、概念等基础知识与理论；第二部分是各类有机化合物的结构与 ^1H 核磁共振的化学位移、偶合常数数据；第三部分是各类有机化合物的结构与 ^{13}C 核磁共振的化学位移数据。书中还适当介绍了 ^{15}N 、 ^{19}F 、 ^{31}P 等核的化学位移，介绍了多维核磁共振方法。

本书为从事核磁共振分析工作的人员及从事有机结构研究工作的人员提供了大量化合物（特别是天然有机化合物）的丰富、翔实的数据资料。

目 录

第一篇 核磁共振谱的基本原理、重要谱学方法及参数

第一章 核磁共振的物理基础	1
第一节 核角动量和核磁矩	1
第二节 自旋核在外磁场中的行为	2
一、自旋核在外磁场中的取向	2
二、核在外磁场中的能量	3
三、能级的布居	4
四、宏观磁化量	4
五、核磁共振条件	4
第二章 核磁共振重要参数、术语和方法	5
第一节 核磁共振的重要参数	5
一、化学位移	5
二、自旋-自旋偶合	5
三、偶合常数	5
四、弛豫和弛豫时间	5
第二节 核磁共振的谱学方法	6
一、核磁共振信号的多重性	6
二、一级和高级谱图	7
三、化学等价和磁等价	8
四、连续波 (CW) 和 FT 核磁共振谱	8
五、自旋去偶	9
六、核欧沃豪斯效应	11
第三节 核磁共振术语	11
一、一般术语	11
二、方法	13
三、仪器	14
四、其他	14
第三章 用一维和二维核磁共振技术确定化合物结构	16
第一节 官能团的确认	16
一、 ^1H 化学位移	16
二、重氢交换	16
三、 ^{13}C 化学位移	17
四、 ^{15}N 化学位移	19
第二节 骨架结构 (基团间的连接)	19
一、 ^1H 谱峰多重性	19
二、C, H 峰多重性	20
三、H, H 偶合常数	23

四、C,H 偶合常数	27
五、N,H 偶合常数	29
六、H,H 相关二维核磁共振谱 (HH-COSY)	30
七、碳碳连接技术 (INADEQUATE 方法)	32
八、C,H 相关二维核磁共振谱 (CHCOSY)	35
九、C,H 远程核磁共振相关谱 (COLOC 或 HMBC)	35
第三节 相对构型和构象	38
一、H,H 偶合常数	38
二、C,H 偶合常数	41
三、N,H 偶合常数	42
四、 ¹³ C 化学位移	42
五、NOE 差谱	45
六、HH-NOESY 谱	47
第四节 绝对构型	47
一、非对映异构作用	47
二、手性位移试剂 (ee 值测定)	49
第五节 分子内和分子间的相互作用	50
一、各向异性效应	50
二、芳香化合物的环电流	51
三、分子内和分子间的氢键	52
四、质子化效应	52
第六节 分子动力学	53
一、变温 NMR 谱	53
二、 ¹³ C 自旋晶格弛豫时间	54
第七节 测定分子结构的程序综述	57
参考文献	58

第二篇 质子核磁共振谱的化学位移和偶合常数

第四章 一般有机化合物的质子核磁共振谱的化学位移和偶合常数	59
第一节 取代烃类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	59
一、取代烷烃化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	59
二、芳环取代烷基化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	64
第二节 含氧化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	65
一、醇和醚类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	65
二、醛酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	66
三、环醚化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	68
四、含羰基化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	69
第三节 含 N, S 化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	74
一、胺类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	74
二、硝基化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	75
三、含硫化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	75
第四节 脂环及含双键化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	78
一、三元环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	78
二、四元环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	80

三、五元环衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	83
四、六元环衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	88
五、桥环衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	91
六、其他不同脂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	92
七、含双键化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	93
八、不同双键和三键体系的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	95
第五节 芳香烃及其衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	98
一、取代苯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	98
二、取代萘衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	99
三、芳烃和脂芳烃衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	102
四、联苯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	103
五、二苯乙烯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	104
六、稠环芳烃化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	105
七、其他芳烃化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	107
第六节 五元芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	109
一、一般五元芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	109
二、吡咯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	110
三、咪唑衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	111
四、噻吩衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	114
五、其他五元芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	115
第七节 六元芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	115
一、一般六元芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	115
二、吡啶衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	116
三、二氮杂苯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	119
四、其他氮杂苯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	119
第八节 稠合芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	119
一、部分稠合芳杂环化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	119
二、喹啉及其衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	122
三、吲哚衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	123
第九节 氨基酸的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	123
第十节 常用溶剂氢核的化学位移	126
参考文献	127
第五章 质子核磁共振谱的偶合常数	130
第一节 同碳氢的偶合常数	130
第二节 邻位氢的偶合常数	140
一、饱和系统化合物的邻位氢偶合常数	140
二、直链双键化合物中邻位氢的偶合常数	159
三、环状双键邻位氢的偶合常数	164
第三节 芳烃及其衍生物的偶合常数	167
一、取代苯衍生物的偶合常数	167
二、其他芳环氢的偶合常数	174
三、芳杂环氢的偶合常数	176
四、芳氢与侧链烷基氢的偶合常数	184
五、稠环芳氢的偶合常数	185

第四节 远程偶合常数	186
一、芳香化合物的远程偶合常数	186
二、芳杂环化合物的远程偶合常数	187
三、相隔 4 个键的远程偶合常数	188
四、烯丙体系的偶合常数	192
五、相隔 5 个键的远程偶合常数	193
六、相隔 6 个键的远程偶合常数	195
七、其他类型的远程偶合常数	196
第五节 活泼氢的偶合常数	197
第六节 氢氟和氢磷的偶合常数	198
一、氢氟间的偶合常数	198
二、氢磷间的偶合常数	199
参考文献	199
第六章 生物碱的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	208
第一节 异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	208
一、简单异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	208
二、苄基异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	209
三、阿朴啡生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	210
四、双苄基异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	223
五、原小蘖碱和普托品类生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	227
六、螺环苄基异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	232
七、苯啡啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	232
八、苯酞异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	234
九、其他异喹啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	235
十、石蒜生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	240
十一、刺桐生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	241
十二、吗啡生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	242
第二节 吡咯里西啶、吲哚里西啶及喹诺里西啶生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	244
一、吡咯里西啶生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	244
二、吲哚里西啶生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	246
三、喹诺里西啶生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	247
第三节 吡啶及六氢吡啶生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	249
第四节 喹啉、喹唑啉、咪唑、胍类生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	252
一、喹啉和喹唑啉生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移与偶合常数	252
二、咪唑和胍类生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移及偶合常数	253
第五节 吲哚类生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	254
第六节 二萜生物碱类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	266
一、乌头生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	266
二、六种基本骨架 (I ~ VI 型) C ₁₉ 二萜生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	268
三、柴杉烷类二萜生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	273
四、石松生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移	280
第七节 环肽类生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	281
第八节 其他类型生物碱的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	287
参考文献	289

第七章 黄酮类化合物的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	299
第一节 黄酮及黄酮醇类化合物的¹H-NMR 化学位移及偶合常数	299
一、黄酮化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	299
二、黄酮醇类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	301
三、异黄酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	305
第二节 二氢黄酮及二氢黄酮醇类化合物的¹H-NMR 化学位移	306
一、二氢黄酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	306
二、二氢黄酮醇类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	308
三、二氢异黄酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	309
第三节 双黄酮、色酮、吡酮类化合物的¹H-NMR 化学位移	311
一、双黄酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	311
二、色酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	312
三、吡酮类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	313
第四节 黄酮类化合物的¹H-NMR 谱图	314
参考文献	317
第八章 单萜及倍半萜化合物的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	319
第一节 单萜类化合物的¹H-NMR 化学位移	319
第二节 倍半萜类化合物的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	324
一、甜没药烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	324
二、萜橙茄烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	326
三、愈创木烷衍生物类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	328
四、伪愈创木烷衍生物类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	336
五、其他五·七环和三·七环倍半萜类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	338
六、佛木烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	341
七、吉马烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	346
八、桉叶烷衍生物类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	363
九、石竹烷衍生物类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	369
十、其他三环倍半萜类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	370
参考文献	385
第九章 二萜及三萜类化合物的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	388
第一节 二萜类化合物的¹H-NMR 化学位移	388
一、贝壳松烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	388
二、阿替烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	395
三、海松烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	396
四、半日花烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	397
五、克罗烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	414
六、大戟二萜类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	415
七、其他二萜类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	416
第二节 二倍半萜叠烯衍生物及三萜类化合物的¹H-NMR 化学位移	428
一、二倍半萜及叠烯衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	428
二、齐墩果烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	428
三、羽扇豆烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	434
四、无羁萜烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	435
五、其他三萜及甾体化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	436

六、少数不同类型三萜及甾体化合物 438~470 的 ¹ H-NMR 化学位移	444
参考文献	446
第十章 香豆素及醌类化合物的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	449
第一节 香豆素类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	449
一、简单香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	449
二、6,8-双烯基取代香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	450
三、7-羟基香豆素的香叶烷基倍半萜衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	451
四、呋喃及吡喃香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	452
五、二氢呋喃及二氢吡喃香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	453
六、3-烯基取代香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	458
七、多取代呋喃香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	458
八、不同取代基香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	460
九、其他香豆素化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	460
十、香豆素化合物的 ¹ H-NMR 特征鉴别	463
第二节 萘醌化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	464
第三节 天然蒽醌类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	467
第四节 其他天然蒽醌衍生物 133~146 的 ¹ H-NMR 化学位移	468
参考文献	468
第十一章 其他天然有机化合物的¹H-NMR 化学位移和偶合常数	470
第一节 甾体化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	470
一、雄甾烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	470
二、胆甾烷衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	473
三、甾体皂甙元化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	476
第二节 木脂素类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	480
第三节 天然烯炔类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	485
一、天然多烯类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	485
二、天然烯炔类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	486
第四节 糖类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	492
一、五碳吡喃糖衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	492
二、五碳呋喃糖衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	494
三、六碳吡喃糖衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移和偶合常数	495
四、几种低聚糖甙的 ¹ H-NMR 化学位移	498
第五节 天然芳香化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	502
第六节 番荔枝内酯化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	517
第七节 类胡萝卜素衍生物的 ¹ H-NMR 化学位移	520
第八节 前列腺素和大环内酯类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	523
一、前列腺素类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	523
二、大环内酯类化合物的 ¹ H-NMR 化学位移	526
参考文献	527

第三篇 ¹³C 核磁共振谱的化学位移和偶合常数

第十二章 烃类化合物的¹³C-NMR 化学位移	530
第一节 链烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移及其计算	530
一、链烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	530

二、取代正辛烷的 ¹³ C-NMR 化学位移	531
三、烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移的计算经验式	531
四、各种甲基的 ¹³ C-NMR 化学位移	533
第二节 环烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	534
一、环烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	534
二、取代的三元环烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	534
三、单取代环己烷的 ¹³ C-NMR 化学位移	534
四、取代环己烷的化学位移的计算	535
五、几个取代环己烷的 ¹³ C-NMR 化学位移	536
第三节 并合的环烷烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	537
第四节 链烯化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	541
一、链烯化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移的计算	541
二、由于单取代基的影响乙烯的 ¹³ C-NMR 化学位移数据的加和值	541
三、单烯化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	542
四、多烯化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	543
第五节 环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	544
一、环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移数据	544
二、三元环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	544
三、四元环和五元环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	545
四、六元环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	545
五、并环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	546
六、大环烯烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	548
第六节 炔烃化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	549
一、取代炔烃化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	549
二、直链炔烃的 ¹³ C-NMR 化学位移	549
第七节 芳香化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	550
一、各种芳香化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移数据	550
二、单取代苯的 ¹³ C-NMR 化学位移数据的加和值	551
三、多取代苯的 ¹³ C-NMR 化学位移数据	552
四、联苯类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	553
五、脂环并苯类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	554
六、萘及其衍生物的 ¹³ C-NMR 化学位移	554
七、其他芳香化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	556
参考文献	556
第十三章 醇、酚及醚类化合物的¹³C-NMR 化学位移	561
第一节 醇类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	561
一、饱和醇类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	561
二、不饱和醇类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	566
第二节 酚类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	568
第三节 醚类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	569
一、脂肪醚类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	569
二、芳香醚类化合物的 ¹³ C-NMR 化学位移	574
三、过氧化物的 ¹³ C-NMR 化学位移	576
参考文献	576