



天然有机化合物结构信息手册

天然有机化合物 核磁共振碳谱集

^{13}C NMR Spectroscopic Databook of Natural Products

上册

杨峻山 主编



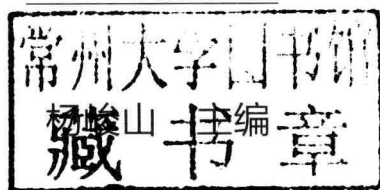
化学工业出版社



天然有机化合物结构信息手册

天然有机化合物 核磁共振碳谱集

上册



化学工业出版社

· 北京 ·

本书是《天然有机化合物结构信息手册》的一个分册,全面收集了生物碱类、萜类、皂、苷类、黄酮类、醌类、苯丙素类、甾体类、芳香族类、脂肪族类、木脂素、香豆素、氨基酸和糖类、海洋天然产物、抗生素等2万余种天然有机化合物的核磁共振碳谱数据,每一种化合物都给出了相应的名称、分子式、结构式、测试溶剂和碳的化学位移数据以及参考文献。书后还附有化合物中英文名称索引以及分子式索引等,详实的数据资料,对确定天然有机化合物的结构有很大帮助。

本书是天然产物研究与开发、有机合成、药物研发、核磁分析等领域的科研与技术人员实用的案头工具书。

图书在版编目(CIP)数据

天然有机化合物核磁共振碳谱集(上、下册)/杨峻山主编.
北京:化学工业出版社,2011.12
(天然有机化合物结构信息手册)
ISBN 978-7-122-12695-5

I. 天… II. 杨… III. 天然有机化合物-碳 13 核磁共振谱法
IV. ①0629②0657.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 218057 号

责任编辑:任惠敏 李晓红 傅聪智
责任校对:顾淑云 宋 夏

文字编辑:李锦侠 王 琪 徐雪华 陈 雨
装帧设计:刘丽华

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)
印 装:北京白帆印务有限公司
787mm×1092mm 1/16 印张204½ 字数4359千字 2011年12月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899
网 址: <http://www.cip.com.cn>
凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:488.00元(上、下册)

版权所有 违者必究

编写人员名单

主 编：杨峻山

副 主 编：杨秀伟 林文翰 邹忠梅 许旭东 赵毅民

董悦生 索茂荣

编写人员：（按姓氏汉语拼音排序）

陈 林	陈超男	丁 刚	董悦生	费姣冬
郭继芬	胡延保	贾红梅	雷崎方	李 厚
李珂珂	林文翰	刘 东	刘文财	刘乐平
刘月涛	马国需	钱 平	任凤霞	桑元斌
沈寿帽	斯建勇	孙迪安	孙广利	索茂荣
田新慧	王 迎	王 尧	王 悦	王洪平
吴 玲	吴 帅	吴海峰	吴丽珍	徐 锐
许旭东	杨 宁	杨 郁	杨峻山	杨鑫宝
杨秀伟	于能江	喻玲玲	张 杨	张小坡
赵毅民	郑庆霞	钟明亮	邹建华	邹忠梅

出版者的话

天然存在的物质——天然产物——是人类社会存在与发展的基础。化学使人们从分子水平上认识到物质的结构与其性能、功效之间的直接关系。随着化学学科的发展以及对物质组成及其代谢产物的探索与研究逐渐深入，从天然物质中分离提取到具有特殊功效的成分加以研究利用，或者从特定的需要出发合成具有特定功效的物质并加以利用，成为当前化学与生物学、医药学、材料学等众多科学共同的研究方向。

天然有机化合物结构复杂多样，并且常常是多组分的混合物。化学家在分离或合成出新的化合物之后，首要工作就是确定其结构与性质，然后再依据其性质进行研究与开发。

我国自然资源丰富，仅药用植物就有一万多种。目前国家投入大量人力和财力用于中药现代化研究，其基本方法也是从现有的天然资源（中草药）中发现并分离出活性物质，确定其化合物结构，用以说明祖国医药防病治病的物质基础。仿照活性化合物结构进行化学合成或结构修饰与改造，再从中筛选出活性最好的物质开发成新药已成为现代药物研究的重要手段。

对于一个新的未知化合物，准确描述其结构是关键性的一步，也是一个复杂的过程，除了要依靠现代仪器设备获取详尽的数据资料外，还需要专业知识丰富的专门人才根据获取的已知物的资料进行综合分析推理。

我社组织国内天然产物化学界的知名专家和学者共同编撰了这部《天然有机化合物结构信息手册》，目的是为研究人员在确定化合物结构时提供准确可靠的参照标准。

本手册在国际上也属首例，全书共有四个分册，包括《有机化合物的分子量与分子式》、《天然有机化合物质谱图集》、《天然有机化合物核磁共振氢谱集》和《天然有机化合物核磁共振碳谱集》。手册以数据和谱图为主，同时兼有谱图与数据解析规律总结、索引等内容。其中，《有机化合物的分子量与分子式》是一部根据名义分子量计算和查阅有关化合物分子式的工具书，书中给出分子量在 800 以内的化合物可能存在的分子式；《天然有机化合物质谱图集》根据天然有机化合物的结构特征分类，书中收录了两千多个经典质谱谱图及相应的化合物结构，同时对每种类型的结构特征进行总结、归纳。《天然有机化合物核磁共振氢谱集》和《天然有机化合物核磁共振碳

谱集》两个分册是根据天然有机化合物的结构特征分类，每册收录了一万余个天然有机化合物的结构与相应的核磁共振谱数据。综合运用这四个分册，可帮助读者确定未知化合物的结构。

本套手册获得了国家出版基金的资助，期望本手册的出版可推动国内天然产物化学研究的进程，培养一批具有天然有机化合物结构解析能力的专业队伍，加快我国自主创新研制与开发天然药物的步伐，促进化学、材料等学科的发展有所裨益。

出版者

2011 年 5 月

前 言

碳谱 (Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance Spectrum) 是 20 世纪 70 年代得到广泛应用的一项核磁共振新技术, 80 年代后又产生出二维核磁共振新技术, 并得到迅速发展和广泛应用。在天然有机化合物的化学结构研究中, 碳谱和氢谱相互补充、相互印证, 相得益彰, 特别是在化合物的鉴别、化学结构的测定、异构体的识别、化学结构中的构型构象分析、合成化学的反应机理研究, 以及生物化学和生物合成中都发挥出巨大的作用, 目前已成为天然有机化学研究领域非常重要的有力工具。

在我国, 我们特有的中草药是我们的祖先在数千年同疾病的斗争中发展起来的, 是我们的宝贵财富, 在历史的发展中曾一度辉煌。但是我们不能不看到, 由于历史的原因, 我们的中草药相对落后了, 这样就必须使其现代化, 使我们的中草药国际化, 为我们的社会主义建设服务, 为人类的健康事业做出更大贡献。而中草药现代化就必须用现代科学技术, 研究清楚它们防病治病的原理, 研究其防病治病的物质基础, 也就是研究它们的有效成分、无效成分、有毒成分、有副作用的成分以及这些成分之间的相互关系, 在这些研究工作中经常会遇到这些化学成分的鉴定和新化合物的结构测定问题。鉴定一个已知结构的化学成分或是测定一个未知结构的化学成分, 都需要对它们进行各种波谱的测定, 其中 ^{13}C NMR 谱测定是重要的常用的手段之一, 是将测定的谱学数据参数与文献中报道的已知物的数据参数进行比较, 从而达到鉴定未知化合物的目的, 或者通过测定的各种波谱数据参数的分析, 解析未知化合物的结构。由于近来分离分析技术的进步, 微量的化学成分和难以分离的化学成分以及大分子水溶性的化学成分都能比较好地分离, 得到单体化合物, 研究这些新的化合物就更离不开波谱的测定。尤其是这些有机化合物多数仅仅是由碳、氢、氧组成的, 测定得到的化合物的 ^{13}C NMR 谱, 解析这些数据参数是非常必需的。应用这一新技术有助于揭示中草药防病治病的物质基础, 从而使我国祖国的医药事业在世界上再度辉煌。

由于大自然的神奇力量, 使天然有机化合物的种类、数量非常繁多, 结构也是多种多样, 新分子骨架的化合物不断涌现, 特别是近 30 年的时间里经世界各国科学家们的努力, 文献中报道的天然有机化合物碳谱化学位移数据与日俱增, 我们在本书中收集了尽可能多的碳谱数据以供大家在天然产物的研究中参考。第一章的绪言部分简述了碳谱的原理、参数以及测定的实用技术; 第二章是生物碱类化合物, 共收集了 2446 个化合物的碳谱数据; 第三章和第四章是萜类化合物, 共 5693 个; 第五章是木脂素类

化合物，共 809 个；第六章是香豆素类化合物，共 573 个；第七章是黄酮类和醌类化合物，共 1711 个；第八章是甾烷类化合物，共 1084 个；第九章是脂肪族化合物，共 414 个；第十章是芳香族化合物，共 481 个；第十一章是糖类、多元醇、氨基酸和寡肽类化合物，共 431 个，第十二章是海洋天然产物，共 1932 个；第十三章是抗生素类化合物，共 1619 个。本书共收集了 17193 个天然有机化合物的 ^{13}C NMR 化学位移数据，供从事天然产物研究的同行们参考。

诚然，编写这本书由于时间和我们的水平有限，不可能全面地查阅所有的文献，遗漏与错误之处在所难免，还望同道们不吝赐教，批评指正。待再版时修改补充。

杨峻山

中国医学科学院药用植物研究所

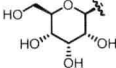
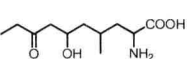
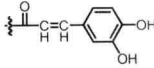
2011 年 8 月

测试溶剂缩写符号与官能团缩略语说明

测试溶剂缩写符号说明：

符 号	名 称	符 号	名 称
A	重氢丙酮	DMF- <i>d</i> ₇	重氢二甲基甲酰胺
B	重氢苯	M	重氢甲醇
C	重氢氯仿	P	重氢吡啶
D	重氢二甲基亚砜	W	重水

官能团缩略语表：

缩略语	名 称	结 构	缩略语	名 称	结 构
\c	Acetyl 乙酰基		Bn	Benzyl 苄基	
\ll	Allosyl 阿洛糖基		Boc	<i>t</i> -Butoxycarbonyl 叔丁氧羰基	
\llom	6-deoxy-3-O-methyl-D-allopyranosyl 6-去氧-3-氧甲基-阿洛吡喃糖基		Boi	Boivinopyranosyl 波伊文吡喃糖基	
\MAE	2-[(2'-aminopropyl)-methylamino]-ethanol 2-[(2'-氨基丙基)-甲基氨基]-乙醇		<i>n</i> -Bu	<i>n</i> -Butyl 正丁基	
\MHOD	2-amino-4-methyl-6-hydroxy-8-oxo-decanoic acid 2-氨基-4-甲基-6-羟基-8-氧-癸酸		But	Butyryl 丁酰基	
\ng	Angelyl 当归酰基		ⁱ But	Isobutyryl 异丁酰基	
\pi	Apiosyl 芹菜糖基		Bz	Benzoyl 苯甲酰基	
\pi f	呋喃芹菜糖基				
\ra	Arabinosyl 阿拉伯糖基		Caff	Caffeoyl 咖啡酰基	
\ra(f)	阿拉伯呋喃糖		Can	Canarosyl	

续表

缩略语	名 称	结 构	缩略语	名 称	结 构
Cinn	Cinnamoyl 肉桂酰基		Fru	Fructosyl 果糖基	
CM	Carboxymethyl 羧甲基	$-\text{CH}_2-\text{COOH}$	Fuc	Fucosyl 呋糖基	
CMM	Carboxymethylmethyl ester 羧甲基甲酯	$-\text{CH}_2-\text{COOCH}_3$	ⁱ Feru	Isoferuloyl 异阿魏酰基	
Coum	Coumaroyl 香豆酰基		Gal	Galactosyl 半乳糖	
Cym	Cymarosyl 磁麻糖基		Gall	Galloyl 没食子酰基	
DAP	Diaminopimelic acid 二氨基庚二酸		Gen	Gentiobiosyl 龙胆二糖基	
dF	2-Deoxyfucose 2-脱氧岩藻糖		Glu	Glucosyl 葡萄糖基	
Dig	Digitoxypyranosyl 毛地黄毒糖基		GluNAc	2-Acetylaminoglucose 2-乙酰氨基葡萄糖	
Dgn	Diginopyranosyl 脱氧毛地黄糖基		GluUA	Glucuronic acid 葡萄糖醛酸	
Dgt	Digitalopyranosyl 毛地黄糖基		GluA	Glucuronic acid 葡萄糖醛酸	
DMA	1,1-Dimethylallyl 1,1-二甲基烯丙基		3HBA	3-Hydroxybutanoic acid 3-羟基丁酸	
DME	1,1-Dimethylethyl 1,1-二甲基乙基		HMEB	4-Hydroxy-2-methylenebutanoate 4-羟基-2-亚甲基丁酸酯	
1,1-DMPE	1,1-Dimethyl-2-propenyl 1,1-二甲基-2-丙烯基		Ido	Idopyranosyl 艾杜吡喃糖基	
1,2-DMPE	1,2-Dimethyl-2-propenyl 1,2-二甲基-2-丙烯基		Mar	Margaroyl 十七酰基	
Et	Ethyl 乙基	CH_2CH_3	MBE	3-Methyl-2-butenyl 3-甲基-2-丁烯基	
Feru	Feruloyl 阿魏酰基		MeBut	2-Methylbutanoyl 2-甲基丁酰基	

续表

缩略语	名 称	结 构	缩略语	名 称	结 构
MHB	3-Methoxy-4-hydroxybutyryl 3-甲基-4-羟基丁酰基		Sar	Sarmentopyranosyl 沙门酰基	
MOA	2-Methyloctanic acid 2-甲基辛酸		Sen	Senecioidyl 异戊烯酰基	
Nic	Nicotioidyl 烟酰基		Sin	Sinapoyl 芥子酰基	
Ole	Oleandropyranosyl 齐墩果糖		Sop	Sombubiosyl 槐糖基	
Oli	Olivopyranosyl		Stea	Stearoyl 十八酰基	
Palm	Palmityl 十六酰基		Tetradeca	Tetradecanoyl 十四酰基	
Ph	Phenyl 苯基		The	Thevetosyl 黄花夹竹桃糖基	
phb	p-Hydroxybenzoyl 对羟基苯甲酰基		Thp	Tetrahydropyran 四氢吡喃基	
Pip	Piperidyl 哌啶基		Thz	Thiazole 噻唑	
Pro	Propanoyl 丙酰基		Tig	Tiglate 巴豆酸酯	
Qui	Quinolinylnyl 喹啉基		ival	Isovaleric acid 异戊酰基	
Rha	Rhamnosyl 鼠李糖基		Van	Vanilloyl 香草酰基	
Rob	Robinosyl 洋槐二糖基		Xyl	Xyosyl 木糖基	
Sam	Sambubiosyl				

目 录

第一章 绪言	1	第七节 异喹啉类生物碱	105
第一节 碳谱的原理	1	一、简单异喹啉类生物碱	105
第二节 碳谱的发展史	1	二、苄基异喹啉类生物碱	108
第三节 碳谱的参数	2	三、原阿朴菲类生物碱	111
一、化学位移	2	四、阿朴菲类生物碱	114
二、偶合常数	4	五、原小檗碱类生物碱	120
三、弛豫	4	六、酰胺型异喹啉类生物碱	126
第四节 碳谱的种类	5	七、普托品类生物碱	128
一、全去偶碳谱	5	八、苯酞异喹啉类生物碱	130
二、偏共振质子去偶谱	5	九、螺环苄基异喹啉类生物碱	134
三、INEPT (低灵敏核极化转移 增强法) 谱	6	十、吐根碱异喹啉类生物碱	136
四、DEPT 谱	6	十一、苯基异喹啉类生物碱	139
五、APT 谱	7	十二、吗啡烷类生物碱	143
第五节 碳谱测定时使用的溶剂	7	十三、双苄基异喹啉类生物碱	146
第六节 有机化合物的各种官能团碳的 化学位移	11	十四、苯并菲啶类生物碱	152
		十五、其他类生物碱	157
第二章 生物碱类化合物	14	第八节 喹诺里西啶类生物碱	164
第一节 有机胺类生物碱	14	一、简单喹诺里西啶化合物	168
一、麻黄碱类化合物	14	二、三环喹诺里西啶化合物	171
二、秋水仙碱类化合物	14	三、苦参碱类化合物	173
三、天然酰胺类化合物	17	四、金雀儿碱类化合物	173
四、其他有机胺类生物碱	20	五、呋喃喹诺里西啶、石松碱类 化合物	176
第二节 吡咯类生物碱	25	第九节 吲哚类生物碱	177
第三节 吡咯里西啶类生物碱	44	一、简单吲哚类生物碱	177
第四节 托品类生物碱	52	二、卡巴唑类化合物	186
第五节 吡啶和氢化吡啶类生物碱	66	三、咔巴林类化合物	187
第六节 喹啉类生物碱	78	四、吡啶咔巴唑类化合物	188
一、简单喹啉类生物碱	85	五、育亨宾类化合物	189
二、喹啉-2-酮类生物碱	86	六、吐根吲哚类化合物	194
三、喹啉-4-酮类生物碱	87	七、沃洛亭类化合物	197
四、氢化喹啉类生物碱	91	八、波里芬类化合物	198
五、多取代喹啉类生物碱	93	九、阿马林类化合物	200
六、金鸡纳类生物碱	102	十、长春花碱类化合物	201
		十一、白坚木碱类化合物	204

十二、长春胺类化合物	213
十三、柯楠碱类化合物	215
十四、长春蔓啉碱类化合物	219
十五、氧化吡啶类化合物	222
十六、其他单吡啶类化合物	231
十七、双吡啶类化合物	236
十八、麦角碱类化合物	242
十九、其他双吡啶类化合物	245
二十、色胺吡啶类化合物	248
二十一、半萜吡啶类化合物	252
二十二、二聚吡啶类化合物	253
第十节 吡啶里西啶类化合物	263
第十一节 吡啶酮类生物碱	279
第十二节 萜类生物碱	289
一、单萜类生物碱	289
二、倍半萜类生物碱	290
三、二萜类生物碱	292
四、三萜类生物碱	326
第十三节 甾类生物碱	339
一、一般甾体类生物碱	339
二、环孕甾烷类生物碱	356
三、异甾体类生物碱	362
第十四节 核苷类生物碱	374
一、腺嘌呤类生物碱	374
二、简单嘌呤衍生物类生物碱	376
三、吡咯并嘧啶类生物碱	377
四、多取代嘌呤衍生物类生物碱	379
第十五节 环肽类和其他类型生物碱	381
一、环肽类生物碱	381
二、其他类型生物碱	392

第三章 单萜、倍半萜和二萜类化合物

第一节 开环类单萜化合物	401
第二节 单环类单萜化合物	406
第三节 双环类单萜化合物	429
第四节 环烯醚萜化合物	440
第五节 无环倍半萜类化合物(直链)	536
第六节 单环倍半萜类化合物	559
第七节 双环倍半萜类化合物	617
第八节 三环倍半萜类化合物	692
第九节 无环二萜类化合物	715

第十节 单环二萜类化合物	718
第十一节 双环二萜类化合物	732
第十二节 三环二萜类化合物	840
第十三节 四环二萜类化合物	913
第十四节 五环二萜类化合物	962
第十五节 二聚二萜类化合物	963

第四章 二倍半萜、三萜和多萜类化合物

第一节 二倍半萜类化合物	968
第二节 无环三萜类化合物	973
第三节 单环三萜类化合物	975
第四节 双环三萜类化合物	977
第五节 三环三萜类化合物	981
第六节 四环三萜-羊毛脂烷型化合物	985
第七节 四环三萜-达玛烷型化合物	1078
第八节 四环三萜-四去甲型化合物	1141
第九节 苦木素类三萜化合物	1175
第十节 五环三萜-齐墩果烷型化合物	1196
第十一节 五环三萜-木栓烷型化合物	1271
第十二节 五环三萜-乌苏烷型化合物	1279
第十三节 五环三萜-羽扇豆烷型化合物	1298
第十四节 五环三萜-霍烷型化合物	1339
第十五节 其他三萜类化合物	1347
第十六节 多萜类化合物	1367

第五章 木脂素类化合物

第一节 丁烷衍生物类木脂素	1400
第二节 四氢呋喃类木脂素	1428
第三节 二苯基四氢呋喃并四氢呋喃类木脂素	1451
第四节 苯基四氢萘类木脂素	1464
第五节 苯基四氢萘并丁内酯类木脂素	1489
第六节 苯并呋喃类木脂素	1500
第七节 联苯类木脂素	1506
第八节 氢化苯并呋喃类木脂素	1518
第九节 并二氧六环类木脂素	1524
第十节 环辛烷类木脂素	1528
第十一节 其他类木脂素	1530

第六章 香豆素类化合物	1544
第一节 简单香豆素	1544
第二节 呋喃香豆素	1560
第三节 吡喃香豆素类化合物	1597
第四节 多聚香豆素类化合物	1614
第七章 色原酮类化合物	1630
第一节 黄酮类化合物	1630
第二节 二氢黄酮类化合物	1657
一、二氢黄酮	1660
二、二氢黄酮单糖苷	1662
三、二氢黄酮双糖苷	1663
四、异戊烯基二氢黄酮	1664
五、其他取代二氢黄酮	1665
第三节 黄酮醇类化合物	1674
一、黄酮醇类化合物	1685
二、单糖基黄酮醇类化合物	1691
三、双糖基黄酮醇类化合物	1699
四、三糖基黄酮醇类化合物	1705
五、四糖基黄酮醇类化合物	1708
六、异戊烯基及其衍生物取代 黄酮醇类化合物	1709
七、异戊烯基或苯丙素基取代糖 苷黄酮醇类化合物	1710
八、多取代黄酮醇类化合物	1712
第四节 二氢黄酮醇类化合物	1723
一、二氢黄酮醇苷元类化合物	1726
二、二氢黄酮醇苷类化合物	1729
三、异戊烯基取代二氢黄酮醇类 化合物	1730
四、水飞蓟二氢黄酮醇类化合物	1731
五、其他取代基二氢黄酮醇类 化合物	1732
第五节 异黄酮类化合物	1738
一、异黄酮苷元	1740
二、异黄酮单糖苷	1741
三、异黄酮多糖苷	1742
四、其他类型异黄酮	1744
第六节 二氢异黄酮类化合物	1746
一、二氢异黄酮苷元	1747

二、异戊烯基取代二氢异黄酮 苷元	1748
第七节 查耳酮类化合物	1751
一、查耳酮苷元	1755
二、取代基查耳酮	1762
第八节 二氢查耳酮类化合物	1771
第九节 黄烷类化合物	1775
一、黄烷	1779
二、茶黄素及其衍生物	1786
三、二聚黄烷类	1789
第十节 异黄烷类化合物	1795
第十一节 花青素类化合物	1800
第十二节 xanthone 类化合物	1807
第十三节 橙酮类化合物	1839
第十四节 高异黄酮(烷)类化合物	1846
第十五节 紫檀烷类化合物	1855
第十六节 鱼藤酮类化合物	1865
第十七节 双黄酮类化合物	1870
第十八节 醌类化合物	1884
一、苯醌类化合物	1884
二、萘醌类化合物	1890
三、蒽醌类化合物	1900
四、菲醌类化合物	1910
五、蒽醌及其他类化合物	1916

第八章 甾烷类化合物	1927
第一节 雄甾烷类化合物	1927
第二节 心甾内酯类化合物	1933
第三节 胆甾烷类化合物	1942
第四节 孕甾烷类化合物	1979
第五节 雌甾烷类化合物	2058
第六节 胆酸类化合物	2060
第七节 螺甾烷类化合物	2063
第八节 麦角甾烷类化合物	2113
第九节 植物甾烷类化合物	2141

第九章 脂肪族化合物	2148
第一节 脂肪酸类化合物	2148
第二节 脂肪醇类化合物	2160
第三节 脂肪烃类化合物	2170
第四节 脑苷脂类化合物	2182

第十章 芳香族化合物	2212
第一节 简单的酚及酚酸(酯).....	2212
第二节 缩酚酸及其酯.....	2220
第三节 缩酚酮酸及其酯.....	2233
第四节 二苯乙基类化合物.....	2244
一、单倍体.....	2244
二、二聚体.....	2259
三、二苯乙基类三聚体.....	2271
四、多聚体.....	2277
第五节 苯丙素类化合物.....	2285

第十一章 糖、多元醇和氨基酸类化合物	2327
第一节 单糖类化合物.....	2327
第二节 双糖类化合物.....	2336
第三节 三糖类化合物.....	2346
第四节 四糖类化合物.....	2352
第五节 五糖类化合物.....	2355
第六节 多糖类化合物.....	2356
第七节 多元醇类化合物.....	2358
第八节 氨基酸及多肽类化合物.....	2359

第十二章 海洋天然产物	2364
第一节 萜类化合物.....	2364

第二节 生物碱类化合物.....	2485
第三节 酚醌类化合物.....	2557
第四节 甾醇类化合物.....	2589
第五节 肽类化合物.....	2623
第六节 大环内酯类化合物.....	2651
第七节 脂肪酸类化合物.....	2670

第十三章 抗生素	2675
第一节 糖及糖苷类抗生素.....	2675
第二节 大环内酯类抗生素.....	2692
第三节 醌类抗生素.....	2765
第四节 氨基酸及多肽类抗生素.....	2822
第五节 氮杂环类抗生素.....	2865
第六节 氧杂环抗生素.....	2915
第七节 萜类抗生素.....	2960
第八节 苯类抗生素.....	2980
第九节 烷烃类抗生素.....	3002

化合物名称索引	3019
英文名称索引.....	3019
中文名称索引.....	3170

化合物分子式索引	3203
-----------------------	------

第一章 绪 言

碳谱是指有机化合物的碳-13 核磁共振波谱(Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance Spectrum)的简称,是有机化合物结构研究的重要手段之一。它包括有机化合物的质子宽带去偶谱、偶合谱、偏共振质子去偶谱等。具体应用方法主要包括 INEPT 谱、DEPT 谱、APT 谱、特定氢去偶谱或选择性去偶谱、门控去偶谱和反转门控去偶谱等。我们在本书中收集整理了文献中主要天然产物结构类别的有机化合物的质子宽带去偶碳谱数据,以供同行在研究天然有机化合物结构时参考。

第一节 碳谱的原理

众所周知,原子核存在自旋运动,碳-13 核也和氢-1 核一样,在外磁场作用下,碳-13 核存在两种能态:基态和激发态,当用一频率的射频波去照射碳核体系,此射频波正好等于碳核从基态跃迁至激发态所需能量时,碳-13 核体系吸收这一射频波的能量而使一些碳-13 核从基态跃迁到激发态上去,这就是所谓的核磁共振现象。

在发现核磁共振现象后,又发现了化合物分子中同一种碳-13 核,由于它所处的化学环境不同,发生共振所需频率稍有不同,这就是化学位移效应,被用来研究化合物分子的结构就有着重要作用。

第二节 碳谱的发展史

碳和氢都是构成有机化合物分子的主要元素,但是碳谱比氢谱发展晚了十多年,这主要是由于碳-13 在自然界中存在丰度比较低,大约占碳-12 核的 1.1%,自然丰度比较高的碳-12 核因为它的自旋量子数是零,不发生能级分裂,从而不产生核磁共振。再加上碳-13 的磁旋比小,不足氢-1 核的磁旋比的 1/4,其信号相对强度只有质子的 1/64。在天然丰度的相对灵敏度只有氢的 1/6000。这样不难看出,在核磁共振发展初期,想要测定这种微弱的信号是非常困难的。

1957 年 Lauterbur 首次报道了碳-13 核核磁共振的观测,这些试验表明碳-13 核直接观测对比质子的研究上有一定的优势,但是也有很多难题。直到 20 世纪 70 年代,脉冲傅里叶变换技术的应用,以及电子技术和计算机的应用,碳谱才得到迅速发展和广泛应用,逐步成为有机化合物结构研究的不可或缺的重要工具。现在碳谱几乎普及到绝大多数从事有机化合物研究的高等院校和专门的科研机构。因此,可以说碳-13 核磁共振的发展,就是不断地提高其测定样品的灵敏度。

提高测定的灵敏度的方法很多,下面就是曾经用过的几种方法:

1. 增加样品中碳-13 核的浓度, 这个方法是提高测试样品的浓度, 使碳-13 的浓度增加, 从而提高灵敏度, 但是这受到样品溶解度的限制和样品来源的限制; 另外就是用大口径样品管进行测定, 可以用 8mm、10mm、15mm 样品管测定。也有的采用富集的碳-13 的样品, 但是成本太高, 一般情况下, 都不采用。近年来, 微量核磁管的应用使得微量样品的碳-13 波谱测定成为可能。

2. 增加磁场的强度, 例如外加磁场强度由 60MHz 增加到 250MHz, 灵敏度提高 8 倍, 现在主要是采用超导磁场仪器, 300MHz、400MHz、500MHz、600MHz、700MHz 或更高磁场强度的核磁仪都在应用。

3. 利用提高射频的方法, 信号强度会随着照射功率的增加而增大, 但是也会有些因素影响其灵敏度的提高。

4. 进行波谱的累加, 这也是一种提高灵敏度的办法。方法是将同一份样品, 在相同的条件下进行多次扫描, 用计算机进行累加。因为信噪比(灵敏度)与扫描次数的平方根成正比, 所以如果扫描 100 次灵敏度就可以增加 10 倍。

5. 由于质子自旋使碳-13 信号分裂, 从而使信噪比降低。因此常用双共振质子去偶法来提高灵敏度, 在碳-13 谱中一个不等价的碳就是一个信号, 灵敏度自然也就增大了。

6. 在有机分子中绝大多数的碳都是与氢相连接, 当氢-1 进行去偶照射时, 相连接的碳的共振信号大大增加, 这个现象就是核奥威豪斯效应(nuclear Overhauser effect), 也可简称为 NOE 增强效应, 它产生于在碳-13 和氢-1 这样一对异核的分子内偶极-偶极弛豫。在质子的去偶实验中, 由于用强功率的射频照射质子, 质子完全饱和, 不能很快通过同核之间弛豫来恢复到原来的平衡状态, 必须借助于异核之间偶极-偶极相互作用, 将能量转移给碳-13 核, 接受了能量的碳-13 核就像被射频照射一样, 发生跃迁和弛豫, 共振信号得到加强。

7. 脉冲傅里叶变换核磁共振(pulse Fourier transform nuclear magnetic resonance), 它是用一射频脉冲系列代替连续变化频率的射频波。它所获得的信号是自由感应衰减(FID)信号, 它需要经傅里叶变换才能转化为我们大家所知道的信号形式。目前傅里叶变换核磁共振仪上都具有快速变换功能的计算机系统。脉冲傅里叶变换核磁共振(PFTNMR)比连续波核磁共振(continuous wave nuclear magnetic resonance, 简称 CWNMR)可以使碳-13 灵敏度提高 20~56 倍, 在相同灵敏度的条件下测定的时间可以缩短至原来的 1/3000。

从上述发展情况可以这样说, 碳谱的发展史, 就是提高其灵敏度的历史。

第三节 碳谱的参数

一、化学位移

碳谱的化学位移与氢谱的化学位移一样, 是以适当的基准物的拉莫尔频率作基准, 其他各原子核信号的相对化学位置, 用希腊字母 δ 来表示, 对碳谱来说也可以用 δ_c 来表示。在碳谱发展的初期, 多以二硫化碳、苯等作基准, 现在几乎全以四甲基硅烷(tetramethylsilane, 简称为 TMS)为基准, 以 TMS 为基准, 是因为它去偶后表示出一个单峰信号, 而且由于屏蔽作用强, 一般有机化合物碳大部分信号都出现在它的左边。一般情况下氢谱的谱宽在 δ 0~20 之间, 而碳谱的谱