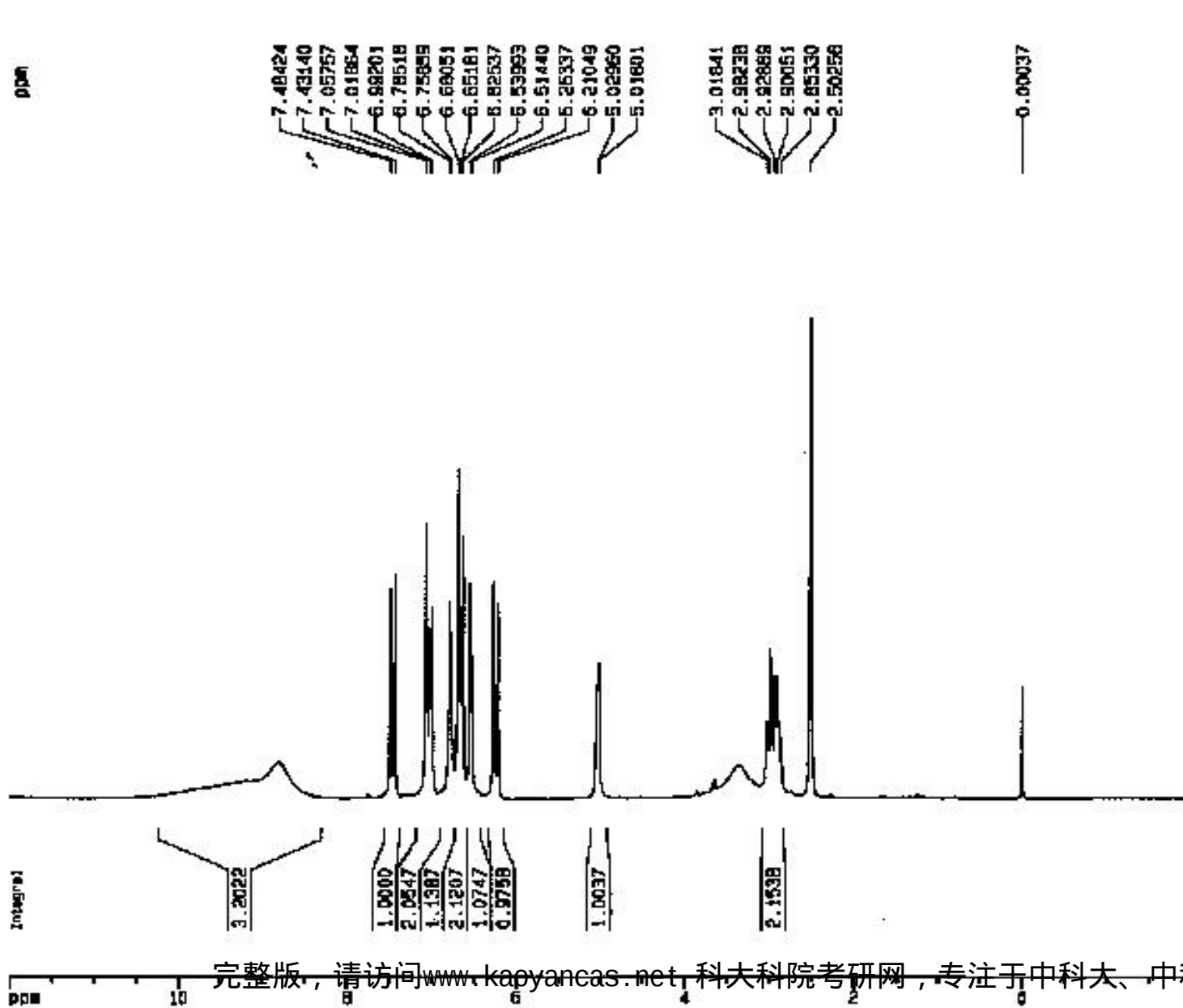


信号的裂分及偶合常数：

- 磁不等性的两个或两组 ^1H 核在一定距离内会因相互自旋偶合干扰而使信号发生裂分，而出现单峰，双峰，多重峰等。裂分间的距离称为**偶合常数**。其大小取决于间隔键的距离。按间隔键的多少可分为**偕偶**、**邻偶**及**远程偶合**。

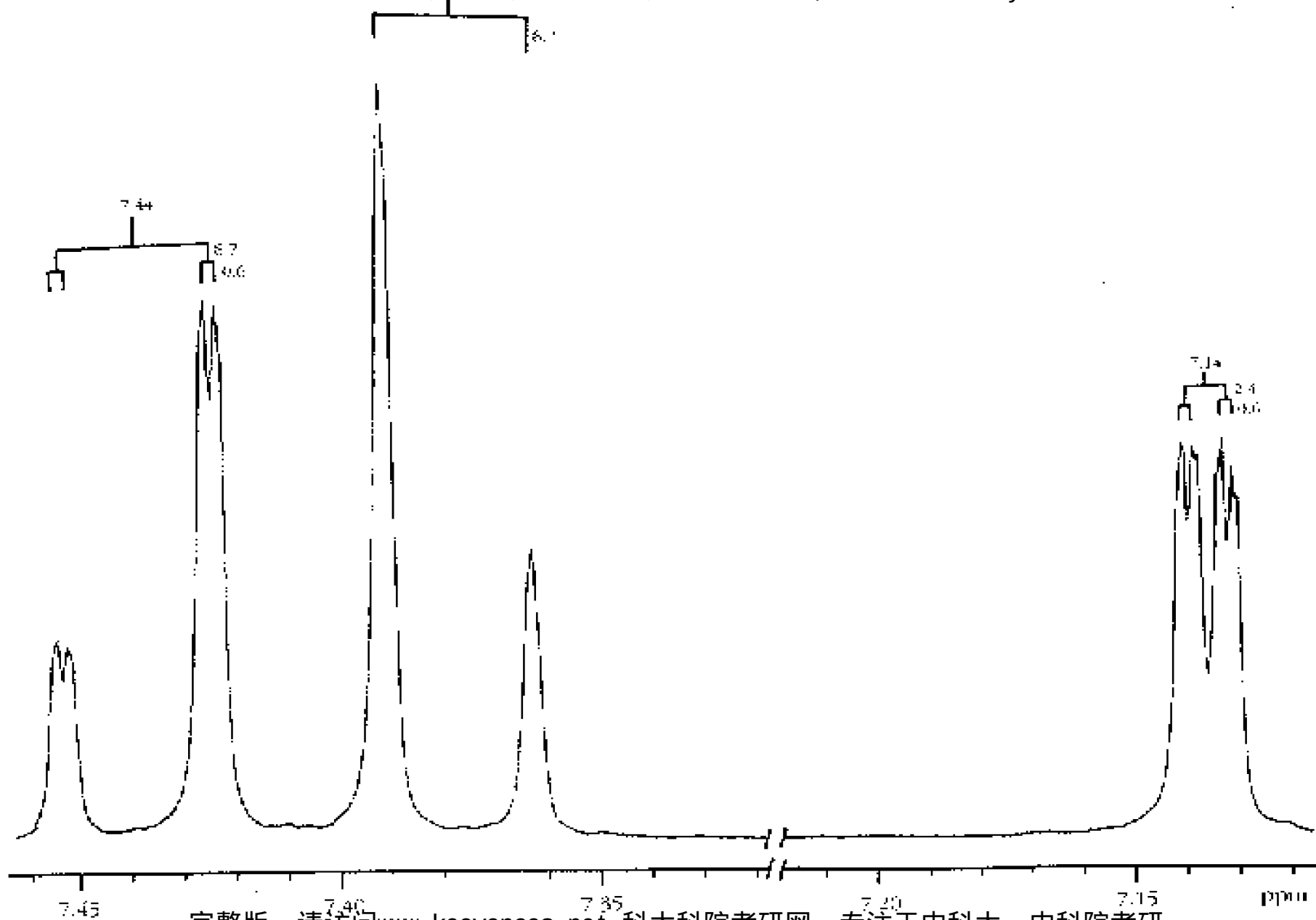


Current Data Parameters
NAME 1H
EXPNO 4103
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 200006
Time 9.29
INSTRUM arx300
PROBHD 5 mm QNP 1H
PULPROG zg
TD 16384
SOLVENT DMSO
NS 32
DS 8
SWH 4237.288 Hz
FIDRES 0.266824 Hz
AQ 1.5333629 sec
RG 3024
DH 118.000 usec
DE 147.50 usec
TE 300.6 K
D1 4.00000000 sec
P1 8.00 usec
DE 147.50 usec
SFO1 300.1314884 MHz
NUCLEUS 1H

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 300.1299984 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.30 Hz
GB 0
PC 4.00

1D NMR plot parameters
CX 251.00 cm
FIP 12.000 ppm
F1 2601.58 Hz
F2 -2.000 ppm
F2 -600.26 Hz
PPM0 0.70000 ppm/cm
HZCM 210.09100 Hz/cm



- 此外还有同核去偶、重氢交换，加入反应试剂、及各种双照射技术等许多帮助结构分析的辅助技术。

(2) ^{13}C -核磁共振 (^{13}C -NMR)

脉冲傅立叶变换核磁共振技术及计算机的引入，才使 ^{13}C -NMR得以投入实际应用。

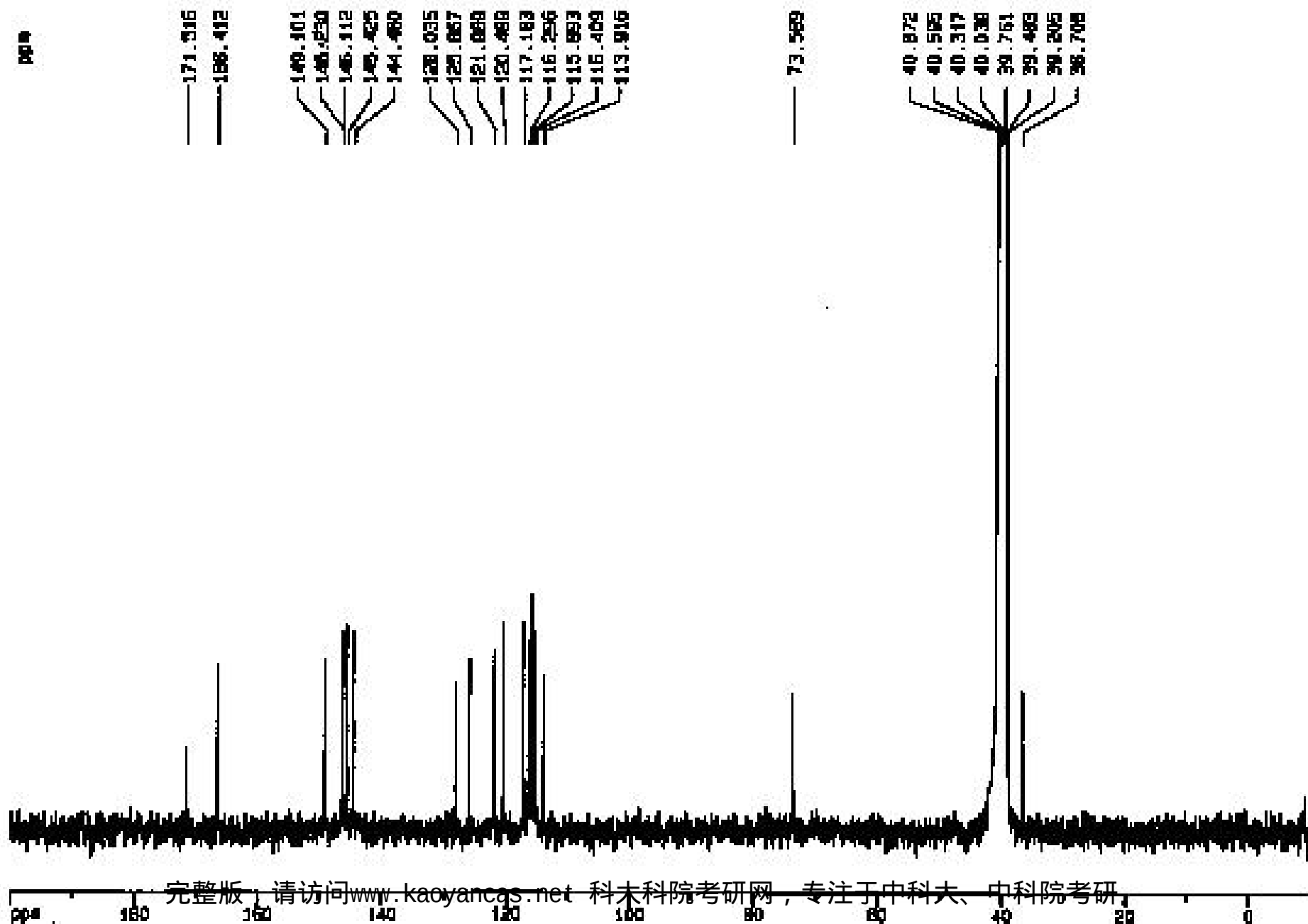
^{13}C -NMR在确定化合物结构时比 ^1H -NMR起着更为重要的作用。

- ^{13}C -NMR中常应用的参数是碳核的化学位移，异核偶合常数（ J_{CH} ）及弛豫时间（ T_1 ），其中我们常应用的是化学位移。
- ^{13}C -NMR谱中 ^{13}C - ^{13}C 之间的偶合很弱，一般不予考虑，而 ^1H - ^{13}C 之间的偶合作用却很强。

■ 常见的 ^{13}C -NMR谱类型及其特征

a. 噪音去偶谱（全氢去偶或宽带去偶）

采用宽频电磁辐射照射 ^1H ，使其对 ^{13}C 耦合全部消除， ^{13}C 信号以单峰形式出现，对于判断其化学位移十分方便。



b.选择氢核去偶及远程选择氢核去偶：
对某个氢核进行选择性照射，以消除其偶合影响，与之相关联的 ^{13}C 信号发生改变，根据峰的裂分变化情况，结合化学位移，可以推断分子中存在的片段结构。

c.DEPT谱：

通过改变照射 ^1H 核的脉冲宽度 (θ) 或设定不同的弛豫时间，使不同类型的 ^{13}C 在图谱上呈现单峰并分别呈现正向峰或倒置峰。

$\theta = 45^\circ$ 时 季C信号消失，其它都向上

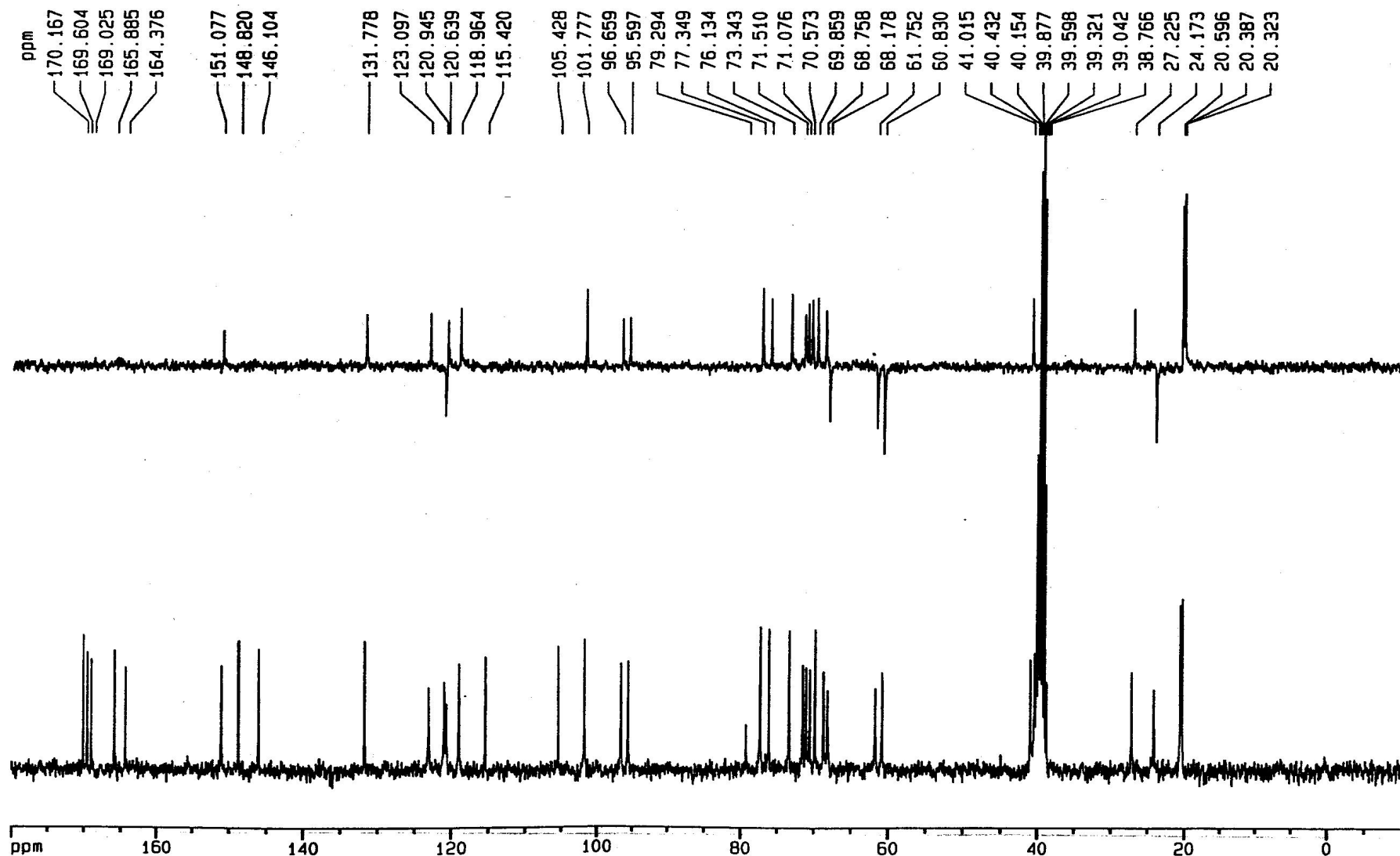
$\theta = 90^\circ$ 时 季C信号消失

CH_3, CH_2 信号消失

$\text{CH} \uparrow$

$\theta = 135^\circ$ 时 季C信号消失

$\text{CH}_3, \text{CH} \uparrow \quad \text{CH}_2 \downarrow$

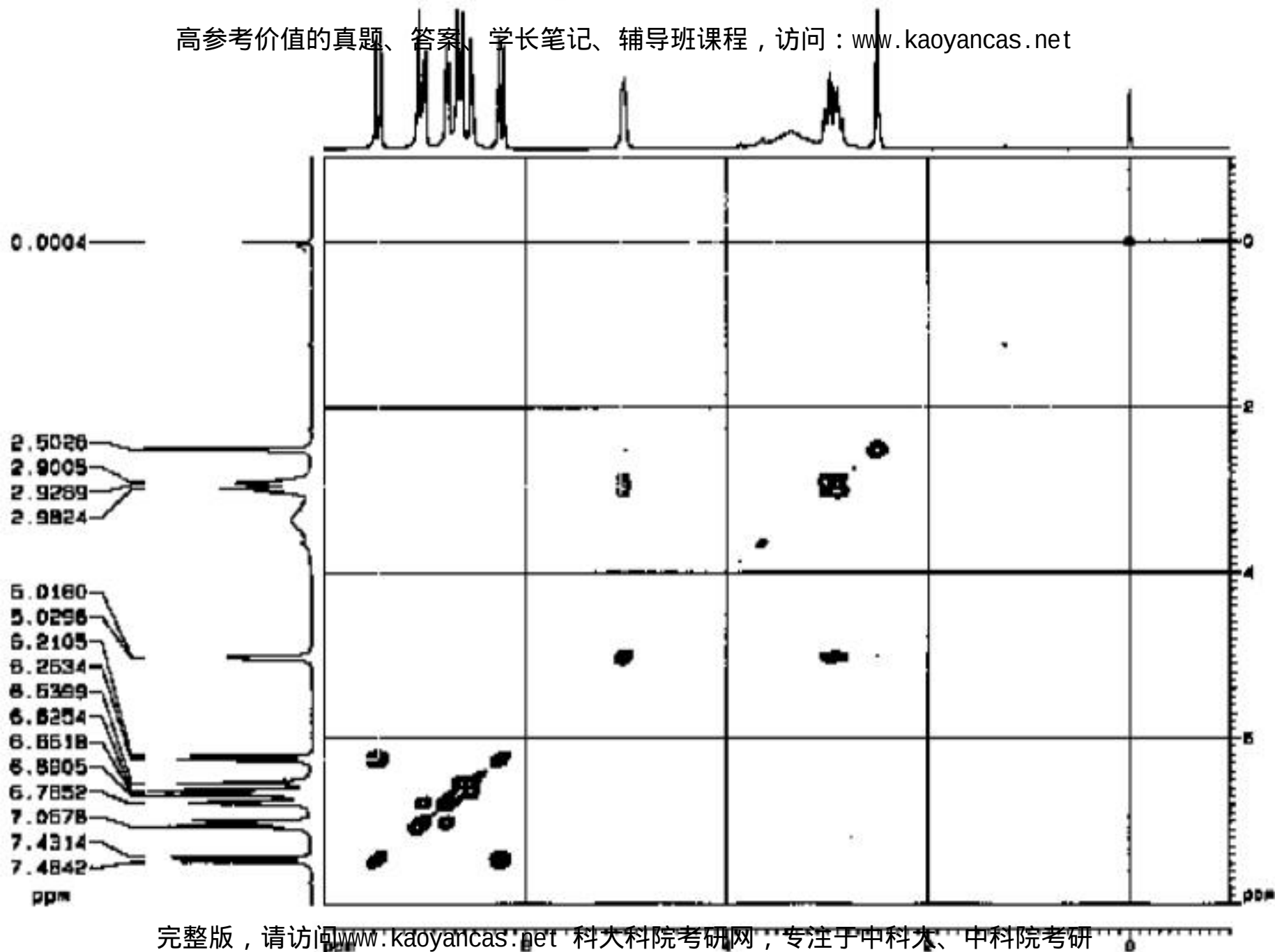


(3) 二维核磁共振波谱 (2D-NMR)

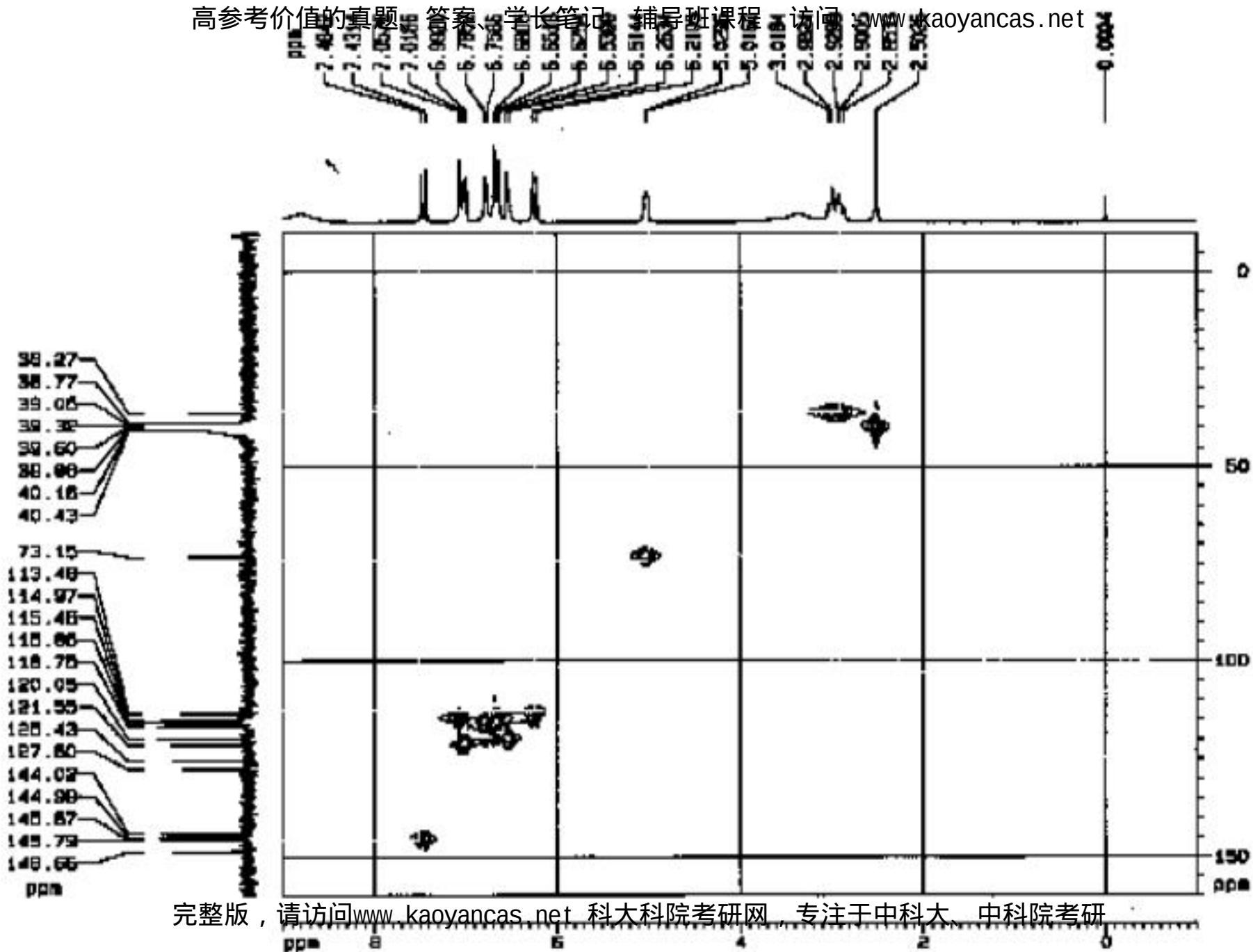
2D-NMR技术使一维核磁共振谱中复杂和堆积难于分辨的信号得以识别。

包括：同核的 ^1H - ^1H 化学位移相关 (^1H - ^1H COSY) 谱，异核的 ^{13}C - ^1H COSY 谱、以及 NOESY (示氢核之间的 NOE 关系) 谱等。

- 同核的 ^1H - ^1H 化学位移相关谱（ ^1H - ^1H COSY），是同一个偶合体系中质子之间的偶合相关谱。可以用来确定质子的化学位移以及质子之间的偶合关系和连接顺序。



- ^1H 检测的异核化学位移相关谱特别是 ^{13}C - ^1H 化学位移相关谱，对于鉴定化合物的结构是十分重要的方法。它包括HMQC谱和HMBC谱。
- HMQC谱是通过 ^1H 检测的异核多量子相关谱，此谱反映 ^1H 核和与其直接相连的 ^{13}C 的关联关系。



- **HMBC**谱是通过 ^1H 检测的异核多键相关谱，反映 ^1H 核和与其远程偶合的 ^{13}C 的关联关系。