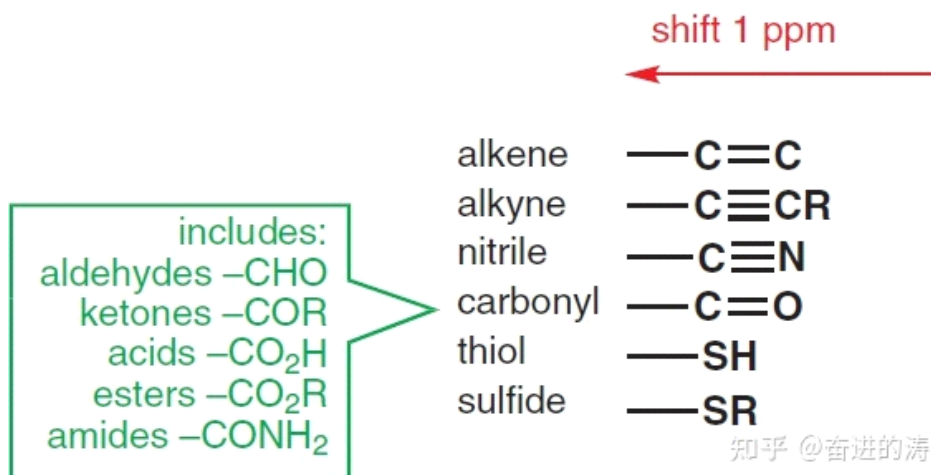
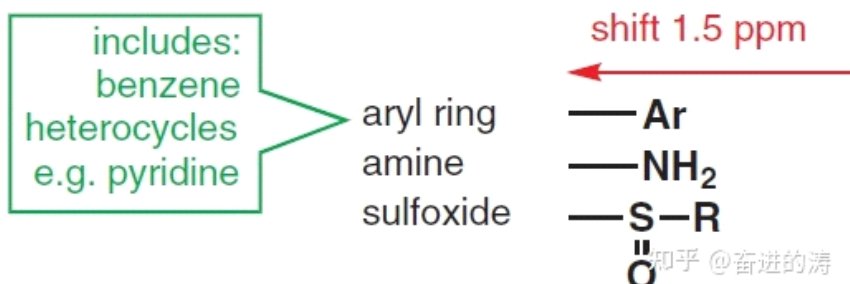


很多人都对一个新化合物的核磁谱图一头雾水，大部分人都知道芳香区在6789左右，醛基在9, 10等。这里我根据有机化学的经典教材总结一个简单的规律，可以帮你大致断定化学位移的位置，让你不必通过任何软件就能大致心中有数。

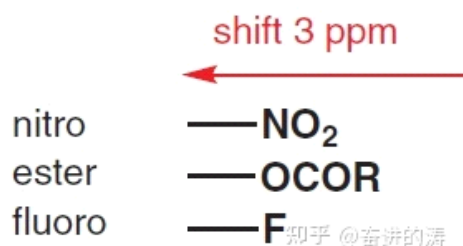
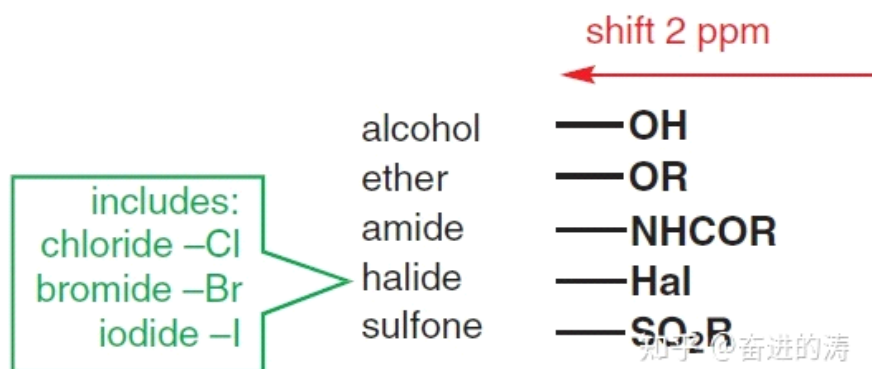
首先，你需要记忆一组数字 0.9, 1.3 和 1.7，这是个相差0.4的化学位移等差数列，他们分布代表了 CH₃, CH₂和CH 在什么取代基都没有的情况下的化学位移接下来我们要预测，比如一个CH₃-C=C 结构中CH₃ 的位移= 0.9 + 1 = 1.9CH₂-C=O 结构中的CH₂位移 = 1.3 + 1 = 2.3，依次类推，下面为能使得化学位移向左侧移动一个单位化学位移 (ppm) 的基团。



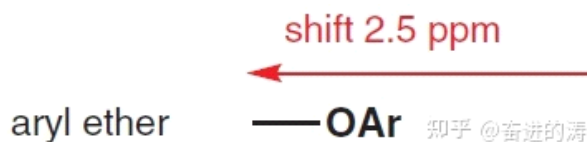
图一非常好记忆的，基本上都是pie 电子，最后两个是例外，还有一个例外就是芳香环的pie 为 + 1.5，毕竟苯环的拉电子效应更强一点。



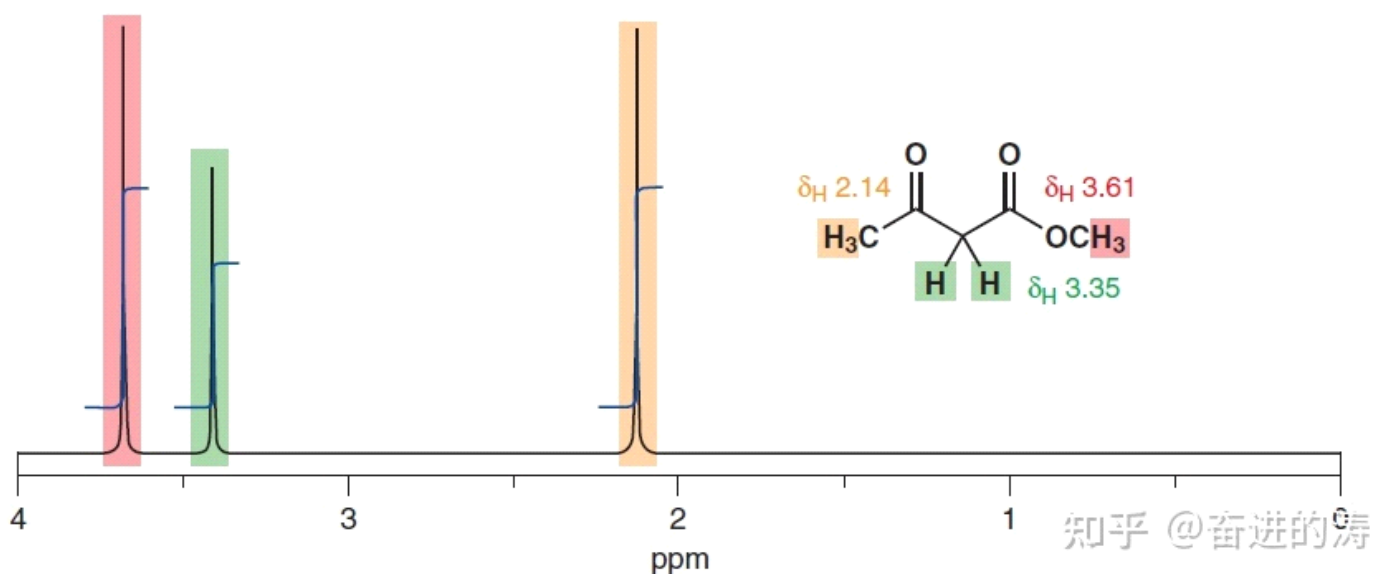
我们看，从图一到图三，经历了pie > O 的过度，图三的 +2 区基本都含有一个氧原子，而+ 2 区域的例外卤素和氮元素，又可被看为时，自 O > F/NO +3 区域的过度



+3 区基本时最好记忆了，就这么三个。最后还有一个很特别的过度，芳基醚，介于 +2 > +3 之间。



如何记忆是你的自由，基本上我们其实就是在在 0.9, 1.3, 1.7 的基础上记忆比如如果我们假定一个单独O=2, 那么从 +1.5 的图二，到 -OAr 的最后一个图，就是+3.5，但考虑到苯环位于β位置，其实作用小于1.5很多，修正为 +2.5已知-C=O 代表 +1，且如上所述O=2，那么- O-CO- 就是 +2+1= +3. 根据你的理解你可以只记住很少几个而推导出其他的，对于极个别的，说实话，就算一个一个记，好像也没几个。现在来看一个实例：



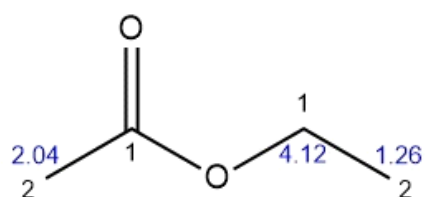
右侧CH₃ : = 0.9 + 2 (O) + 1(CO)= 3.9, 实际值为3.61

CH₂ : = 1.3 + 1(CO) + 1(CO)= 3.3, 实际值为 3.35

左侧CH₃ : = 0.9 + 1 (CO)= 1.9, 实际为 2.14

再看我们最熟悉的乙酸乙酯，

ChemNMR ^1H Estimation



ethyl acetate

知乎 @奋进的涛

右侧CH₃ : = 0.9, 实际1.26

CH₂ : = 1.3 + 3 (-OCO) = 4.3, 实际4.12

左侧 CH₃ : = 0.9 + 1 = 1.9, 实际 2.04

可以看到三个位置中有两个都是十分准确的, 第一个不准确的原因在于我们没有考虑 β 位置的氧对右侧的影响。

作者: 奋进的涛

链接: <https://zhuanlan.zhihu.com/p/355537777>

来源: 知乎

著作权归作者所有。商业转载请联系作者获得授权, 非商业转载请注明出处。