



核磁共振波谱仪鉴定 未知化合物的分子结构

苏州大学材料与化学化工学部
李晓虹 副教授

实验目的

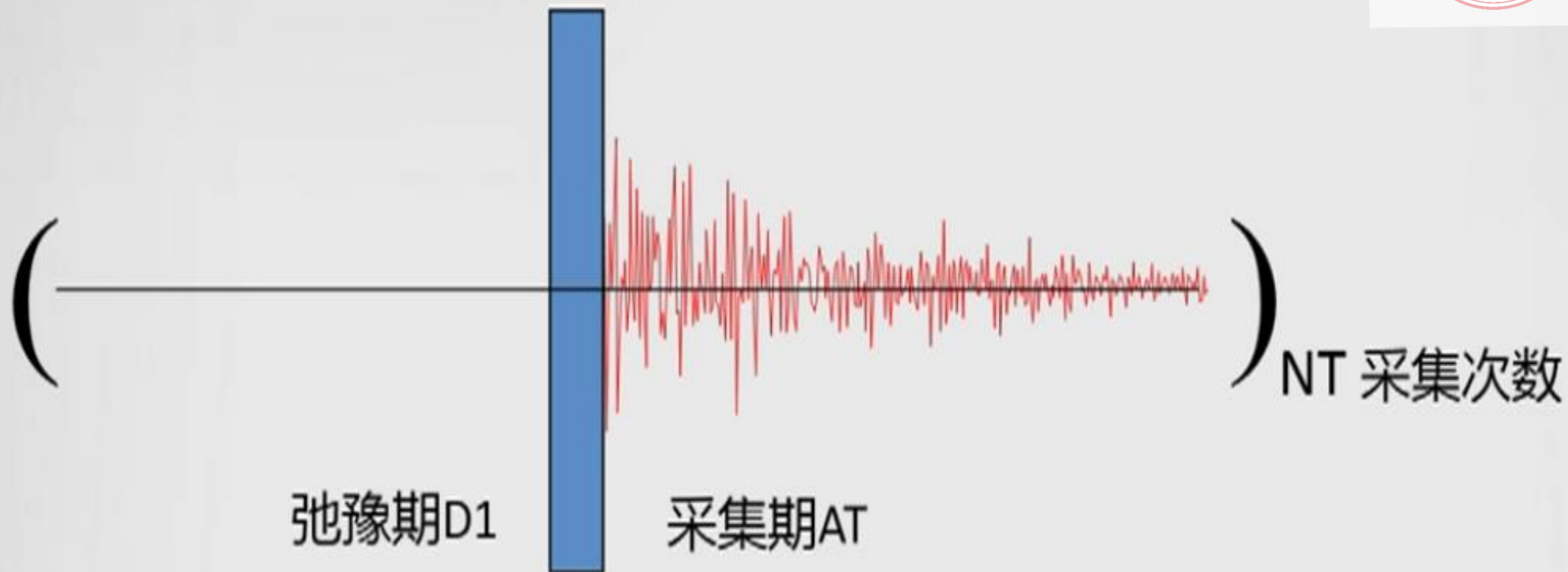


- 1. 理解核磁共振波谱法的基本原理**
- 2. 熟悉仪器结构，掌握软件操作方法**
- 3. 学会核磁共振波谱图的处理解析方法**
- 4. 利用核磁共振波谱测定未知样品化学结构**

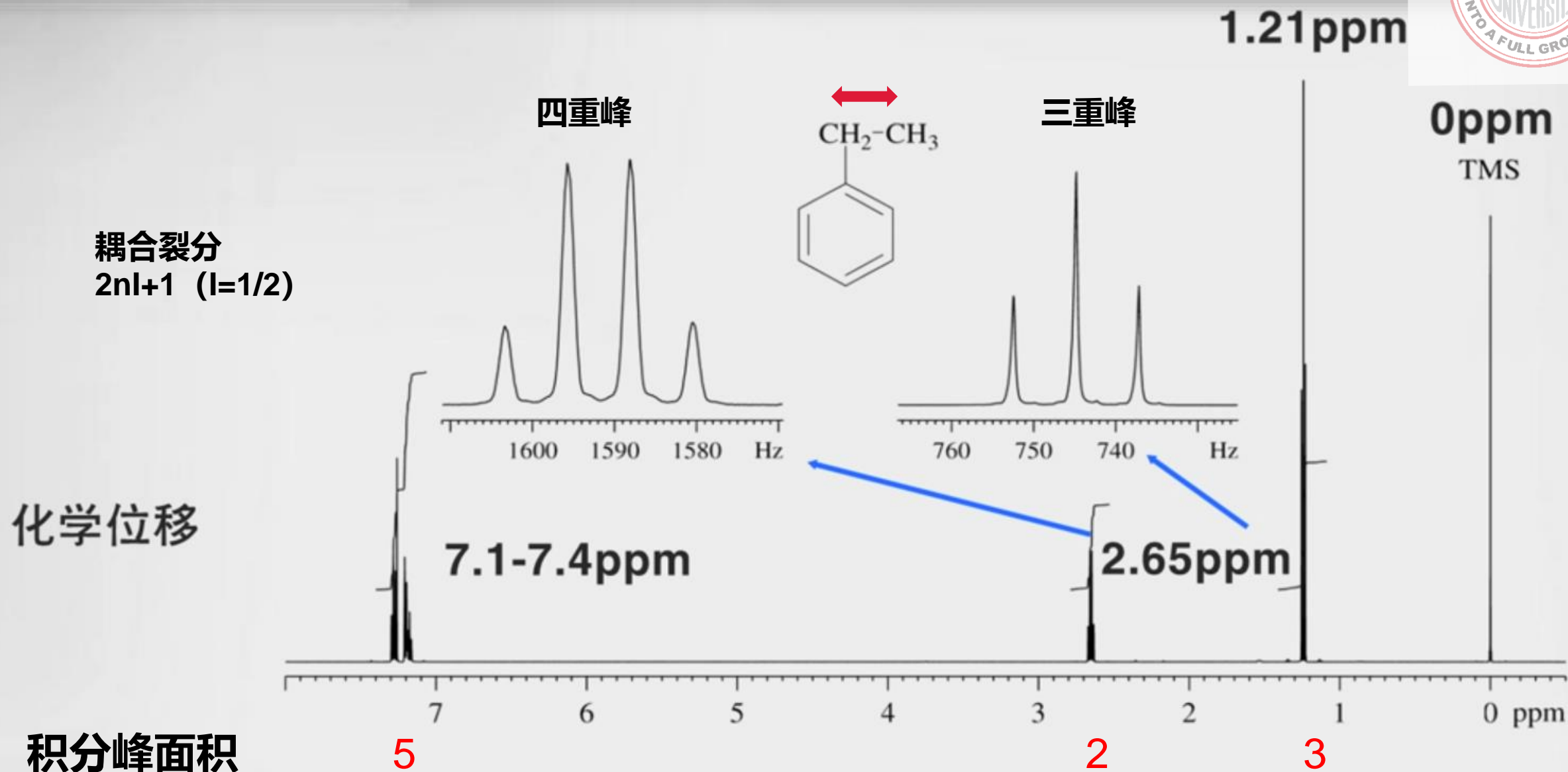
磁距不为0的原子核在外磁场作用下，自旋能级发生塞曼分裂，共振吸收某一定频率的射频辐射物理过程。



激发脉冲PW

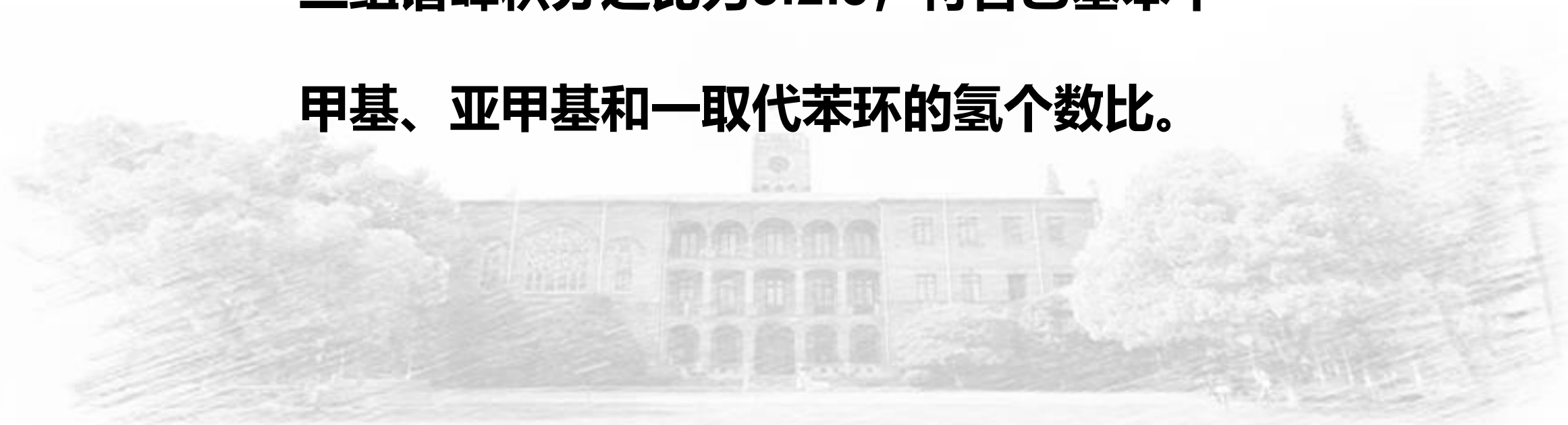


二、实验原理





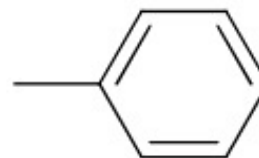
**这一判断被随后的峰面积积分信息证实，
三组谱峰积分之比为3:2:5，符合乙基苯中
甲基、亚甲基和一取代苯环的氢个数比。**



未知样品可能结构



甲苯



乙酸乙酯



乙醇





如果在7ppm以上看到了氢谱峰，说明含有苯环，那么样品可能是甲苯或者乙苯，请注意观察是否存在甲基或乙基峰，以及他们与苯环氢积分之比来进行验证。



仪器结构



台式核磁共振波谱仪

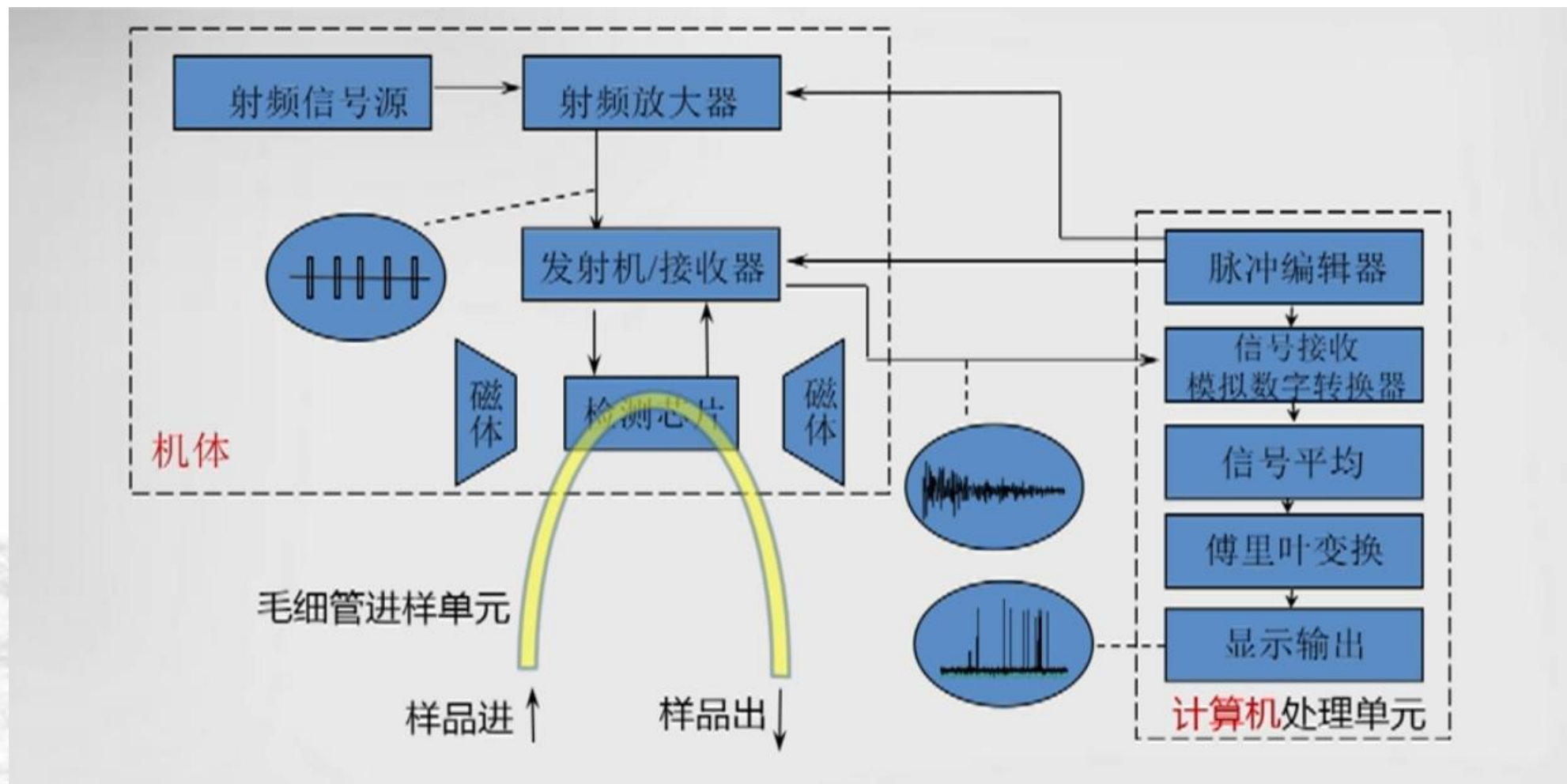
仪器结构



台式核磁共振波谱仪

型号是Thermo Pocospin 80，氢质子在这台磁体中发生共振的频率为80兆赫兹，其磁场强度约为2特斯拉。为获得更高的信号强度，采用液体纯样品经由毛细管直接进样，不使用氘代溶剂。

仪器结构



★使用注射器向毛细管进样口中注入空气，排除系统中的残留液体

★选取已准备好的样品（1-4号），记录其号码，使用注射器将样

品注入进样口，观察到出样口有液滴流出，说明样品已充满毛细管

进样单元。反复1~3次进样，充分润洗，完成进样。

★ 打开火狐网页，输入核磁仪上显示的IP地址，建立电脑操作系统与仪器的连接。

★ 点击文本代码 “Scripts” ，选择 “One pulse” 单脉冲实验，点击 “Start Run” 。显示 “Run in progress” ，开始采集谱图。

★ 当采集结束时，屏幕显示 “Run Complete” 完成采样

◆ 点击“Download Data”，下载数据，对采集得到谱图进行处理。

熟练掌握相位校正，基线压平操作。

◆ 将谱图中最右侧的一组谱峰中心作为参考峰，定标至1ppm，标出其

余各谱峰化学位移，对各选择区域峰面积进行积分。

◆ 通过氢谱中各峰化学位移，峰型裂分及峰面积积分比等信息分析得出

未知样品结构。



感谢观看！

T h a n k s f o r w a t c h i n g .
