

“核磁谱解析”的培训通知

1. 主题背景和培训必要性

核磁共振技术是有机物结构测定的强有力手段。从连续波核磁共振波谱发展为脉冲傅立叶变换波谱，从统一维谱到多维谱，技术不断发展，应用领域也越不断扩展。核磁共振技术在有机分子结构测定中扮演了非常重要的角色，核磁共振谱与紫外光谱、红外光谱和质谱一起被有机化学家们称为“四大波谱”，在表征有机化合物和有机金属化合物方面已得到广泛应用。近年来 X 射线衍射，电子衍射，TEM，SEM 等表征技术的进步使化合物结构表征工作日益深入，但核磁技术的快速发展使其依然稳坐各种表征技术的核心地位。在凡涉及到氢碳的新化合物科研领域通常都要求进行核磁表征，一些含磷氮及氟化合物也可通过核磁技术进行表征。在精细化工领域，随着核磁仪器的普及，核磁谱技术在日常生产中的应用也非常普遍。核磁的广泛使用主要得益于其操作简单，功能强大，以及不断扩展的应用空间。目前核磁的主要功能在于确定化合物的结构（结构分析，手性分析，立体结构分析等），以及分析样品的纯度等。

核磁共振技术在有机合成研究中，不仅可对反应物和产物进行结构解析和构型确定，在研究反应中的电荷分布及其定位效应、探讨反应机理等方面也有着广泛应用。核磁共振鉴定有机化合物结构一般根据化学位移鉴定基团；由耦合分裂峰数、耦合常数确定基团联结关系；根据各 H 峰积分面积定出各基团质子比。核磁共振谱可用于化学动力学研究，如分子内旋转，化学交换等，由于它们都影响核外化学环境，在谱图上都有所反映。核磁共振技术还可用于研究聚合反应机理和高聚物序列结构。核磁共振波谱能够精细地表征出各个氢核和碳核的电荷分布状况，通过研究配合物中金属离子与配体的相互作用，从微观层次上阐明配合物的性质与结构的关系，对有机合成反应机理的研究主要是通过对其产物结构的研究和动力学数据的推测来实现的。H 谱、C 谱是使用最广泛的核磁共振谱，常用的还有 F、P、N 等核磁共振谱。核磁技术和其它三大谱图技术相互验证，很多时候都可作为单晶衍射等表征技术的强有力的辅助手段。

核磁技术的长足发展使其得到广泛应用，但核磁谱的深层次解析需要一定的经验，入门则需要较长时间。对于从事有机合成、金属有机、生物化学和材料化学等领域的研究学者以及精细化工等生产领域的化学分析人员掌握核磁谱解析技术非常迫切，也非常

重要。本培训课程通过完整的理论教学及大量实例分析，让学员快速掌握核磁分析软件（Topspin, ACD, Mestrenova 等）的使用方法，碳氢谱图的测试和解析等技术。

2. 培训主要内容

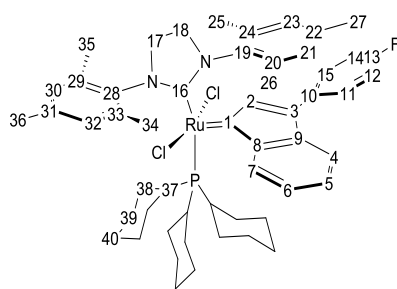
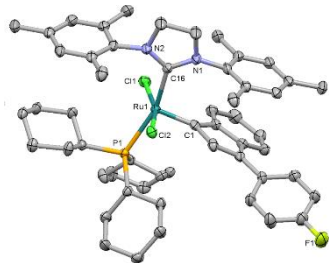
- 1). 讲解相关核磁软件（Topspin, ACD, Mestrenova 等）使用方法。讲解 Chemdraw 软件的核磁预测功能。讲解核磁的一般理论，核磁试剂特点，核磁用途，掌握核磁数据分布的一般规律以及核磁数据耦合裂分的一般规律等。
- 2). 掌握氢谱的化学位移图谱的一般规律，耦合等；掌握普通碳谱，去耦碳谱及 $^{13}\text{C}_{45}$, $^{13}\text{C}_{90}$, $^{13}\text{C}_{135}$ 及 $^{13}\text{C}_{\text{APT}}$ 的特点及规律，讲解一些特例；熟练掌握一维度氢谱碳谱数据的读取及意义；掌握二维 ^1H - ^1H COSY, NOESY (ROESY), TOCSY 及 ^1H - ^{13}C HSQC, HMBC 的实际应用等。
- 3). 通过系统的学习，熟练掌握核磁数据的读取及相应化合物的验证；通过一维或多维谱图的解释，能够对一般化合物实行碳氢峰在化合物结构上的实际归位。

3. 与本培训有关的学科和研究领域

凡涉及到有机合成的相关学科，如材料化学、生物化学、金属有机等，以及精细化工生产领域。

4. 培训专家介绍

于老师：比利时根特大学（世界百强大学）有机金属化学博士，在有机合成，有机金属合成，催化剂结构表征及催化剂催化性能表征，烯烃复分解反应方面有多年的研究经历，有较强的晶体和核磁理论功底和多年的晶体结构和核磁结构研究经验。该类工作代表作如下：



^1H -NMR (500 MHz, CDCl_3 , TMS, 20°C): (major isomer) δ 8.60 (d, $J_{\text{RH}} = 7.0$ Hz, 1 H, H-7), 7.94 (d, $J_{\text{RH}} = 8.2$ Hz, 1 H, H-13), 7.87-7.91 (m, 2 H, H-14, H-17), 7.74 (d, $J_{\text{RH}} = 7.0$ Hz, 1 H, H-11), 7.53 (t, $J_{\text{RH}} = 7.6$ Hz, 1 H, H-12), 7.46 (t, $J_{\text{RH}} = 7.0$ Hz, 1 H, H-15), 7.42 (s, 1 H, H-2), 7.37 (t, $J_{\text{RH}} = 7.6$ Hz, 1 H, H-16), 7.09-7.15 (m, 2 H, H-5, H-6), 7.06 (s, 1 H, H-34/36), 7.05 (s, 1 H, H-34/36), 6.68 (s, 1 H, H-25), 6.51 (d, $J_{\text{RH}} = 6.7$ Hz, 1 H, H-4), 6.04 (s, 1 H, H-27), 3.99-4.06 (m, 2 H, H-21), 3.80-3.92 (m, 2 H, H-22), 2.76 (s, 3 H, H-38/39), 2.69 (s, 3 H, H-38/39), 2.36 (s, 3 H, H-30), 2.34 (s, 3 H, H-40), 2.21 (s, 3 H, H-29), 1.77 (s, 3 H, H-31), 2.16 (m, 3 H, H-41), 1.55-1.62 (m, 6 H, H_{eq}-42), 1.41-1.46 (m, 9 H, H_{ax}-43, H_{eq}-44), 0.84-1.16 (m, 15 H, H_{ax}-42, H_{ax}-43, H_{ax}-44); $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (125.78 MHz, CDCl_3 , 20°C): δ 293.0 (d, $J_{\text{CF}} = 9.2$ Hz, C-1), 216.9 (d, $J_{\text{CF}} = 73.2$ Hz, C-20), 143.6 (C-8), 142.5 (C-9), 139.6 (C-2), 139.3 (C-33/37), 139.0 (C-33/37), 138.4 (C-35), 137.5 (C-3), 137.0 (C-23), 136.9 (C-26), 136.7 (C-28), 136.3 (C-24), 135.5 (C-32), 134.9 (C-10), 134.1 (C-19), 130.1 (C-18), 130.0 (C-34/36), 129.9 (C-34/36), 129.1 (C-25), 128.9 (C-7), 128.7 (C-27), 128.11 (C-14), 128.06 (C-6), 128.0 (C-13), 127.1 (C-17), 127.0 (C-5), 125.8 (C-15), 125.5 (C-12), 125.1 (C-16), 123.8 (C-11), 116.9 (C-4), 52.7 (d, $J = 4.6$ Hz, C-21), 52.0 (C-22), 33.47, 33.33 (C-41), 29.31 (C-42), 27.68, 27.66, 27.61, 27.58 (C-43), 26.2 (C-44), 21.2 (C-40), 20.9 (C-31), 20.3 (C-38/39), 20.2 (C-38/39), 19.0 (C-29), 18.9 (C-30); $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (202 MHz, CDCl_3 , 20°C): δ 27.6 (s, minor), 24.7 (s, major).

5. 培训日程表:

注:

1. 考虑到学员可能具有不同的研究方向和基础,实际培训的具体内容可能有少许变动。
2. 学员需自带笔记本电脑。

第一天	8:30-9:00	学员报到注册, 领取培训资料
	9:00-9:50	介绍课程培训内容; 讲解核磁测试的理论基础, 核磁信号的产生及迁移规律等。
	9:50-10:00	茶歇与讨论
	10:00-10:50	通过氢谱来讲解核磁软件的使用, 如何读取核磁数据信息及一些软件相关功能。结合实际案例讲解化学位移及耦合常数, 耦合裂分等。
	10:50-11:00	茶歇与讨论
	11:00-12:00	介绍一般基团的理论出峰位置, 然后根据实际案例介绍分析样品信息。
	12:00-13:30	酒店午餐
	13:30-14:20	结合出峰规律及峰裂分等一般规律及软件预测, 给一些实例进行氢归位。
	14:20-14:30	茶歇与讨论
	14:30-17:00	结合课上所学内容, 对一些未知数据进行化合物结构解析。
	17:00-17:10	茶歇与讨论
	17:10-18:00	温习课上习题, 答疑
第二天	9:00-9:50	核磁氢谱的实际应用: 反应中目标化合物的鉴定, 以及与反应物进行对比等。
	9:50-10:00	茶歇与讨论
	10:00-10:50	其它与氢谱有关内容, 如溶剂峰位置, 常用溶剂,

		测试氢谱样品用量以及质子交换等。
	10:50-11:00	茶歇与讨论
	11:00-12:00	碳谱的由来，测试手段，裂分特点。 $^{13}\text{C}_{45}$, $^{13}\text{C}_{90}$, $^{13}\text{C}_{135}$, $^{13}\text{C}_{\text{APT}}$ 谱图特点及意义。碳谱去耦的多种测试方法及可定量不可定量碳谱。
	12:00-13:30	酒店午餐
	13:30-14:20	介绍一般基团的出峰位置，根据一般规律及软件预测，给一些实例进行碳谱归位。
	14:20-14:30	茶歇与讨论
	14:30-17:00	结合碳谱的一般耦合特点，结合碳谱的裂分规律，对化合物进行结构鉴定。
	17:00-17:30	一维谱图的其它应用， ^{17}F 谱， ^{31}P 谱图等
	17:30-18:00	温习课堂例题，答疑
第三天	9:00-9:50	COSY, TOCSY, NOESY(ROESY), HSQC 和 HMBC 的意义及实用。
	9:50-10:00	茶歇与讨论
	10:00-10:50	练习 COSY 谱图的应用，通过 1D 氢谱和 2D-COSY 对化合物的氢谱进行归位。
	10:50-11:00	茶歇与讨论
	11:00-12:00	练习 TOCSY 及 NOESY 谱图的意义及应用，通过 1D 氢谱和 TOCSY 和 NOESY 对化合物的氢谱进行归位。
	12:00-13:30	酒店午餐
	13:30-14:20	HSQC 的意义及应用，通过已确定氢谱峰对化合物的碳谱进行归位练习。
	14:20-14:30	茶歇与讨论
	14:30-15:20	HMBC 的意义及应用，通过已确定氢谱峰对化合物的碳谱进行归位练习。

	15:20-16:30	茶歇与讨论
	17:30-18:00	温习课堂例题, 答疑
第四天	9:00--12:00	综合练习, 对复杂化合物进行结构分析推理
	12:00-13:30	酒店午餐
	13:30-18:00	结合学员实际研究实例, 对复杂化合物进行结构分析推理
	培训结束	

6. 培训时间/地点

时间: 2018年8月16-19日(四整天)

地点: 福州市(详细地点见邮件通知)

7. 培训费用

RMB 5000(包括培训费、餐费, 不包含差旅及住宿费), 限28人;

报名费可现场支付, 若2018年8月6日前付款则只需支付RMB 4600。

8. 汇款账户

账户名: 福州水草云信息咨询有限公司

账户: 1402029109601062247

开户行: 中国工商银行福州洪山支行

9. 报名参加

填写报名表(见下页), 并发送到邮箱: service@shuicao Yun.com

或通过网站提交报名: www.shuicao Yun.com

10. 联系方式

Mobile: 15205019786 赵女士

Email: service@shuicao Yun.com





报名信息表

培训主题： 核磁谱解析			
学员信息			
姓名*		单位*	
邮箱*		电话*	
支付培训费*	银行转账, or 现场支付	发票抬头*	
学员类别	研究生, 老师, 公司职员, or 其它人员	从事的研究 方向	

注：*为必填项，请将此表发送到邮箱： service@shuicaooyun.com