



中国科学院大连化物物理研究所

DALIAN INSTITUTE OF CHEMICAL PHYSICS, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

# Literature Report

## 氟谱解析

陈木旺

中国科学院大连化学物理研究所

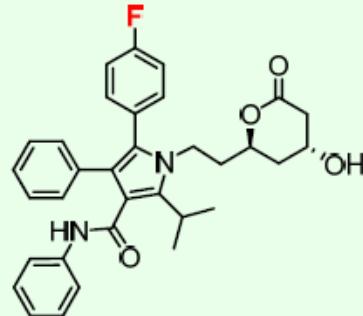
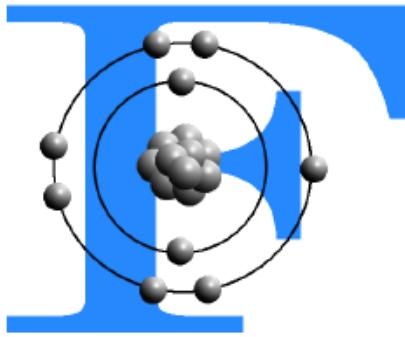
Email: chenmuwang2013@163.com

二零一九年九月二日

# 有机氟化学领域的重要性

## 含氟物质独特性能

- 稳定的C-F化学键
- “氟碳相”特性
- 亲脂性
- 伪拟效应
- 代谢稳定性
- 氢键作用



Lipitor, 销售额136亿美元, 2006

- **学术价值:** 由于氟原子独特的电负性(4.0)、电子效应与空间位阻效应，有机氟化学反应往往显示出与常规有机反应所不同的特征和规律，因此**有机氟化学研究可以对丰富化学基础理论作出重要贡献。**
- **应用价值:** 有机含氟物质普遍呈现出**非常独特的物理、化学以及生物特性**，比如高度物理和化学稳定性（可以用作极端条件下的特种材料），独特生物活性（广泛应用于生命科学）等。

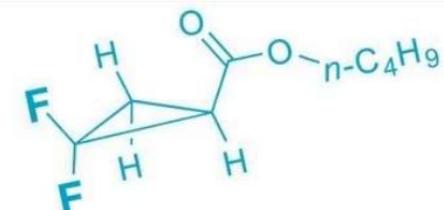
# 氟谱解析

## 1 氟谱的基本信息与特点

## 2 化学位移与偶合常数

## 3 分类详解

## 4 例题分析



GUIDE TO FLUORINE NMR  
FOR ORGANIC CHEMISTS

WILLIAM R. DOLBIER, JR.

WILEY

# 所有具有磁活性的核的核磁数据

同位素	自旋量子数	天然丰度%	灵敏度		T = 7.0464 对应的 MHz	参比化合物	检测范围
			相对 <sup>a</sup>	绝对 <sup>b</sup>			
<sup>1</sup> H	1/2	99.98	1.00	1.00	300.000	Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	10~0
<sup>2</sup> H	1	1.5×10 <sup>-2</sup>	9.65×10 <sup>-3</sup>	1.45×10 <sup>-6</sup>	46.051	Si(CD <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	10~0
<sup>3</sup> H	1/2	0	1.21	0	319.990	Si(CT <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	10~0
<sup>13</sup> C	1/2	1.108	1.59×10 <sup>-2</sup>	1.76×10 <sup>-4</sup>	75.432	Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	220~0
<sup>14</sup> N	1	99.63	1.01×10 <sup>-3</sup>	1.01×10 <sup>-3</sup>	21.671	<sup>14</sup> NH <sub>3</sub> (l) <sup>c</sup>	900~0
<sup>15</sup> N	1/2	0.37	1.04×10 <sup>-3</sup>	3.85×10 <sup>-6</sup>	30.398	<sup>15</sup> NH <sub>3</sub> (l) <sup>c</sup>	900~0
<sup>17</sup> O	5/2	3.7×10 <sup>-2</sup>	2.91×10 <sup>-2</sup>	1.08×10 <sup>-5</sup>	40.670	H <sub>2</sub> O	1700~-50
<sup>19</sup> F	1/2	100	0.83	0.83	282.231	CFCl <sub>3</sub>	260~-280
<sup>29</sup> Si	1/2	4.7	7.84×10 <sup>-3</sup>	3.69×10 <sup>-4</sup>	59.595	Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	80~-380
<sup>31</sup> P	1/2	100	6.63×10 <sup>-2</sup>	6.63×10 <sup>-2</sup>	121.442	85%H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	270~-480

<sup>a</sup> 在原子核数量相同的条件下； <sup>b</sup> 相对灵敏度和天然丰度的产物； <sup>c</sup> 25 °C

## 氟谱的基本信息与特点

核	自旋量子数	相对灵敏度	天然丰度	V(MHz)
$^1\text{H}$	1/2	100	99.98	60.0
$^{13}\text{C}$	1/2	1.59	1.11	15.1
$^{19}\text{F}$	1/2	83.3	100	56.4

- 在核磁共振学中，除了碳和氢，氟大概是被研究最广泛的元素。这一方面是因为氟原子核本身的特殊性，另一方面就在于含氟活性分子的重要性。
- 氟的天然同位素只有 $^{19}\text{F}$ ，丰度为100%，是研究NMR的理想核。
- $^{19}\text{F}$ 灵敏度是 $^1\text{H}$ 的0.83倍，化学位移值范围> 350ppm。  
自旋量子数是1/2，因此氟与邻近的氢，碳的偶合类似于 $^1\text{H}$ 。
- $^{19}\text{F}$ 的化学位移较难预测与推理，因为含氟有机物中 $^{19}\text{F}$ 核的反磁性屏蔽少于1%，而顺磁性屏蔽是主要影响因素。
- $^{19}\text{F}$ 中一般不使用质子去偶技术，因此谱图中不仅会出现相邻F-F偶合，也会出现F-H偶合。但是峰面积积分比对计算相对原子数目的准确度并不如 $^1\text{H}$ 高。

## 化学位移

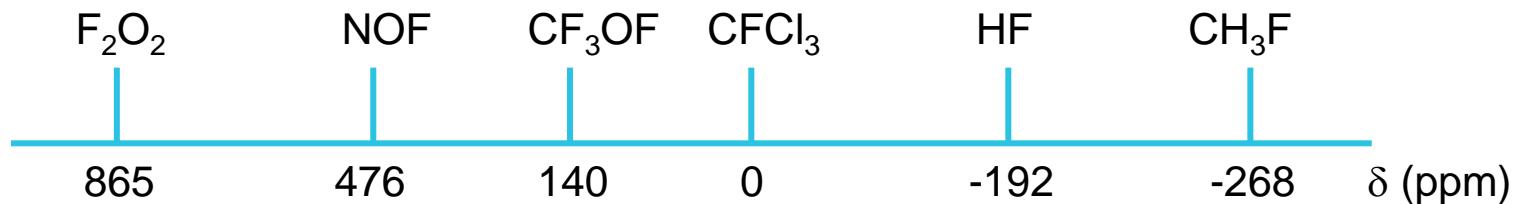
一氟三氯甲烷( $\text{CFCl}_3$ )是氟谱中比较常用的内标试剂，定标为0。  
 $\text{CFCl}_3$ 峰( $\delta = 0$ )往高场移动为负，低场移动为正。其他内标试剂有：

$\delta \text{CF}_3\text{CO}_2\text{H}$ : - 76.2 ppm

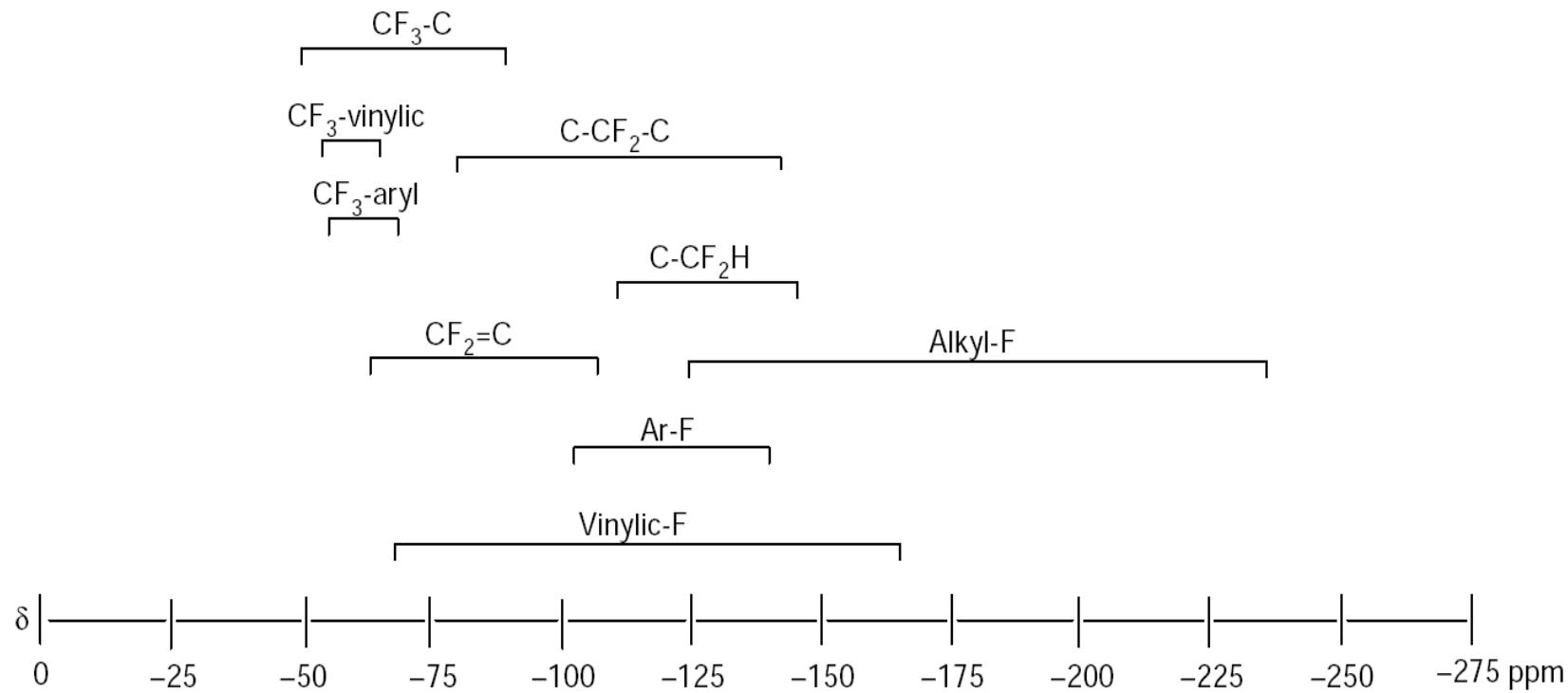
$\delta \text{PhCF}_3$  : - 63.2 ppm

$\delta \text{C}_6\text{F}_6$  : - 162.2 ppm

$\delta \text{CF}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$  : -75.8 ppm

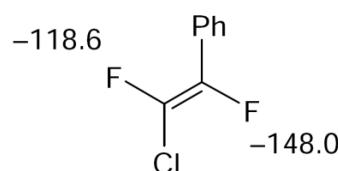


# 各类化合物的<sup>19</sup>F化学位移值图

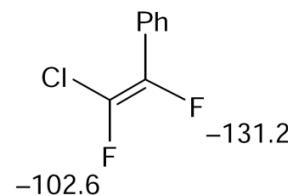


## 偶合常数

氟与氢核的自旋量子数都是 $1/2$ ，因此F谱一般呈一级谱图。谱线裂分符合 $n+1$ 规律。裂分峰强比也遵守帕斯卡三角的二项式展开[ $(a+b)^n$ 展开式的各项系数]。在非链状含氟化合物中影响F-F偶合和F-H偶合的主要因素是偶合的两个原子核之间的扭转角、化学环境以及邻近基团。



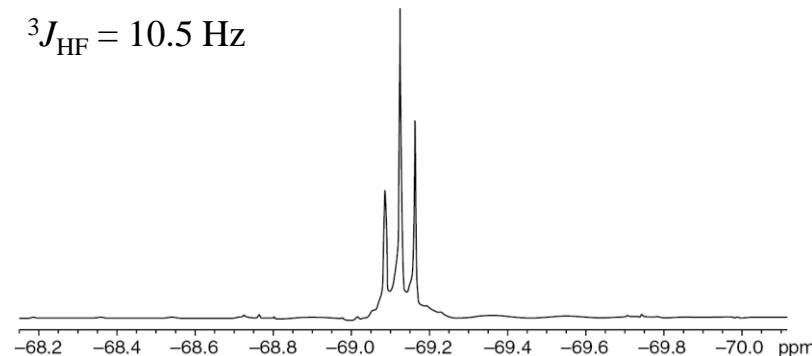
$$^3J_{FF} = 127 \text{ Hz}$$



$$^3J_{FF} = 12 \text{ Hz}$$



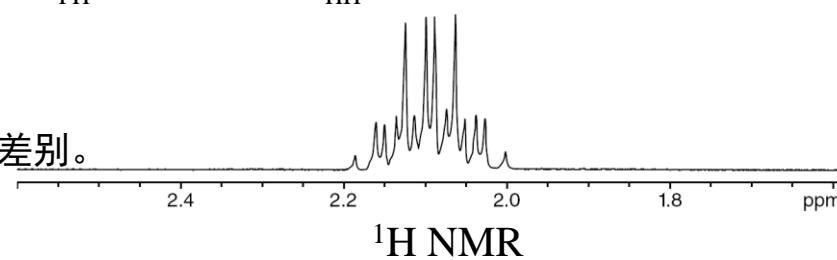
$$^3J_{HF} = 10.5 \text{ Hz}$$



$^{19}\text{F}$  NMR



$$^3J_{FH} = 10.5 \text{ Hz} \& ^3J_{HH} = 7.5 \text{ Hz}$$



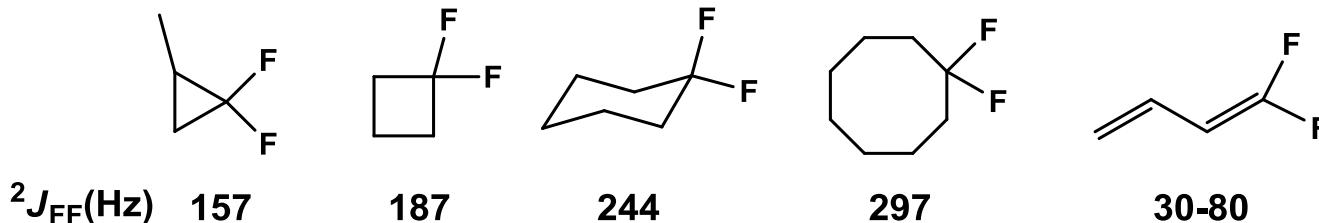
顺反异构的二氟烯烃偶合常数与化学位移都有很大差别。

# 氟-氟偶合

## ◆ 同碳偶合

$^2J_{FF} = 100\text{--}290 \text{ Hz}$  (烷烃) ;  $14\text{--}110 \text{ Hz}$  (烯烃)

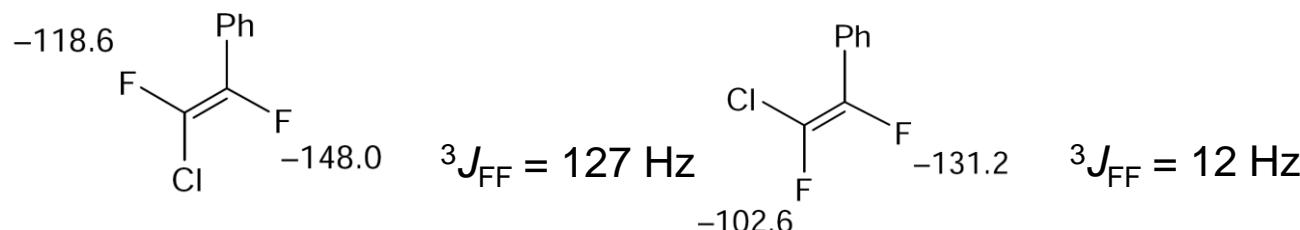
环状化合物同碳  $J_{FF}$  随环增大而增大,  $J_{FH}$  变化不明显; 环上  $J_{FF}$  较烯烃  $J_{FF}$  大。



## ◆ 邻碳偶合

$^3J_{FF} = 2\text{--}135 \text{ Hz}$

一般饱和脂肪链化合物在  $15\text{--}16 \text{ Hz}$ , 但是随着取代基吸电子效应的增强, 去屏蔽化增强, 偶合常数减小。



## 氟-氢偶合

◆ 同碳偶合 $^2J_{FH}$ 与氟个数有关。

-F: 47-55 Hz

-CF<sub>2</sub>H: 57 Hz

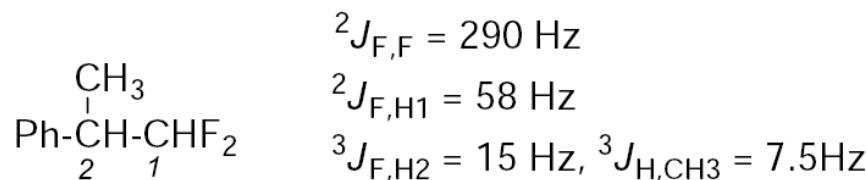
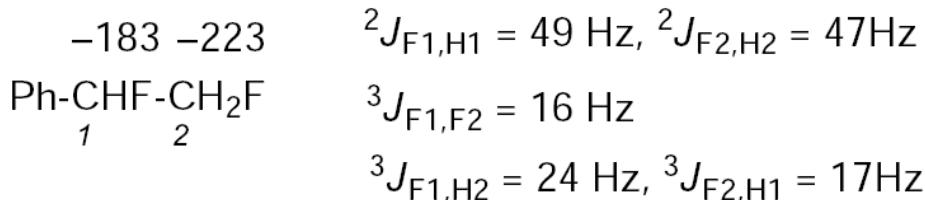
◆ 邻碳偶合 $^3J_{FH}$ 与碳上所连基团电负性有关。

-F: 21-27 Hz

-CF<sub>2</sub>H: 14-22 Hz

-CF<sub>3</sub>: 7-11 Hz

反式烯基氟 $^3J_{FH}$ : 35-52 Hz; 顺式烯基氟 $^3J_{FH}$ : 14-20 Hz



$$\delta_F = -130.0 \text{ and } -135.7 \text{ (AB system)}$$

$$\delta_H = 1.3, 3.1 \text{ and } 5.8$$

## 氟-碳偶合

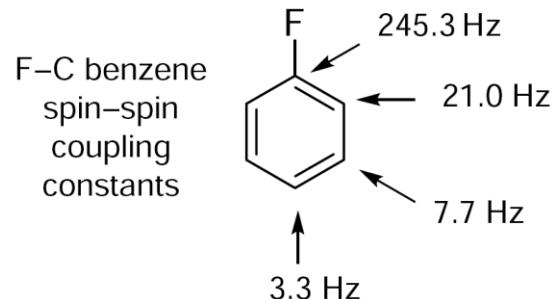
◆ 氟-碳偶合常数最主要由碳上取代的氟个数决定。

但是当氟被其他卤素取代后，偶合常数会增大(-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CH<sub>2</sub>F都遵循这一规律)；被氧族元素取代的规律不统一。

X	F	Cl	Br	I
CF <sub>3</sub> X, δ	122.4	118.0	112.9	78.2
<sup>1</sup> J <sub>FC</sub> (Hz)	259	288	323	344
HCF <sub>2</sub> X, δ	118.4	118.0	—	—
<sup>1</sup> J <sub>FC</sub> (Hz)	274	288	—	—
H <sub>2</sub> CFX, δ	109.4	—	—	—
<sup>1</sup> J <sub>FC</sub> (Hz)	235	—	—	—

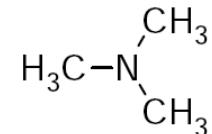
◆ 偶合常数会随着碳与氟之间键数增加而锐减。

这是一个十分重要的判断含氟化合物结构信息的工具。

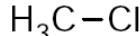


## 含氟化合物的氢谱

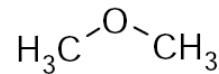
- ◆ 由于氟的强吸电子性，对氢核的去屏蔽作用较其他原子更强。



$\delta_{\text{H}}$       2.2



3.1

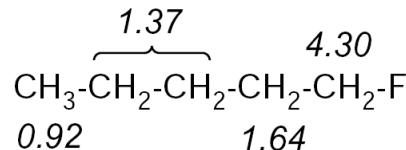
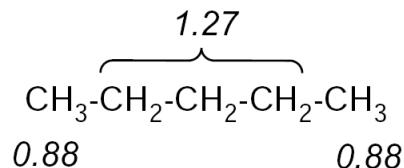


3.4

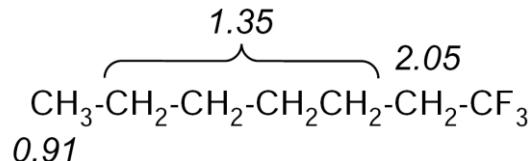


4.3

- ◆ 随着两核之间键数增加，化学位移值迅速减小。



- ◆ 三氟甲基效果类似于单氟取代。

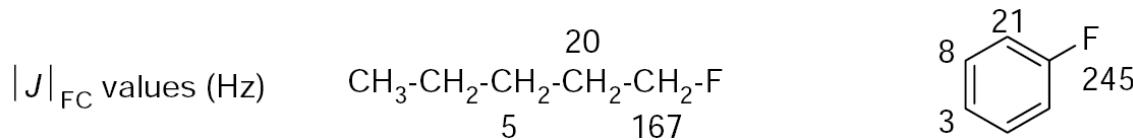


## 含氟化合物的碳谱

- ◆ 碳谱与氢谱类似，但是不与氟原子直接相连的碳化学位移偏移很小，只有与氟直接相连的碳会受到强的去屏蔽作用。

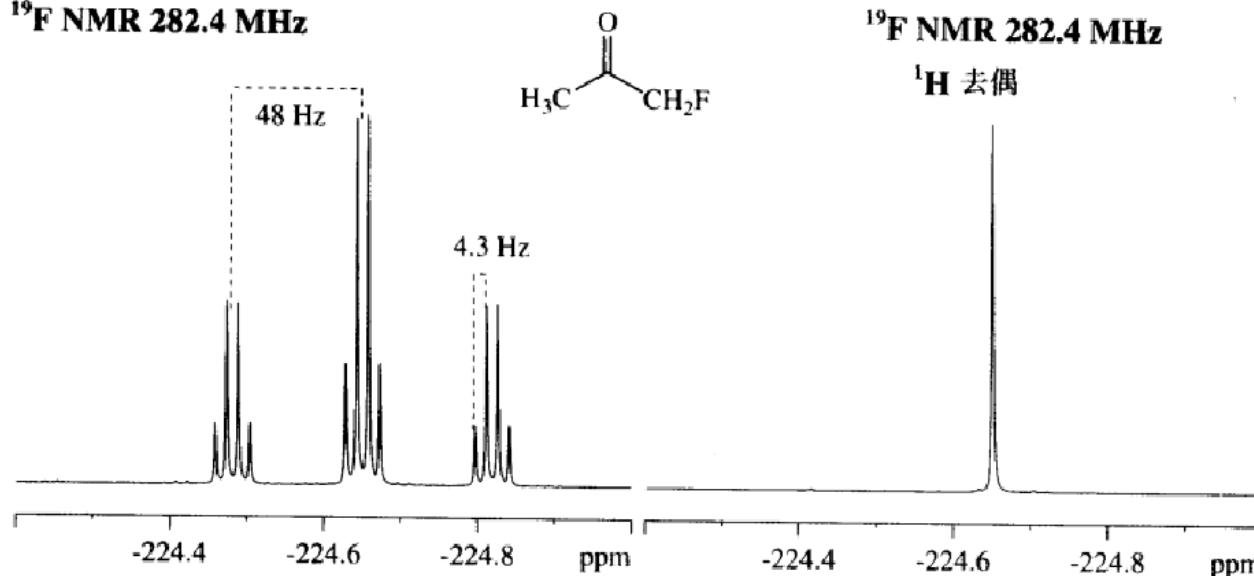


- ◆ 一个重要的另特征即是，F-C偶合常数(<sup>2</sup>J<sub>FC</sub>, <sup>3</sup>J<sub>FC</sub>, <sup>4</sup>J<sub>FC</sub>)基本是恒定不变的。

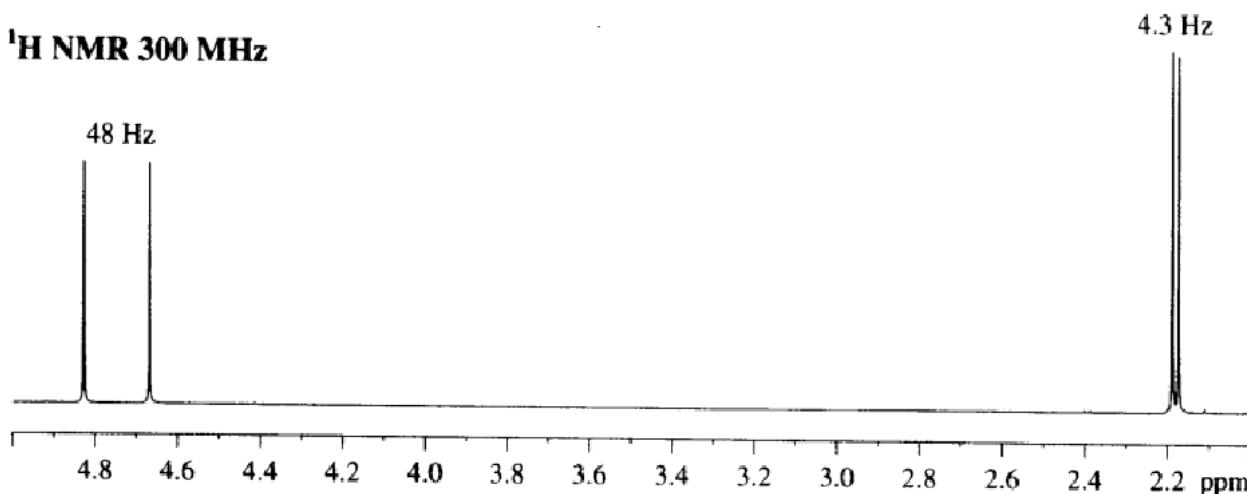


## 代表化合物举例

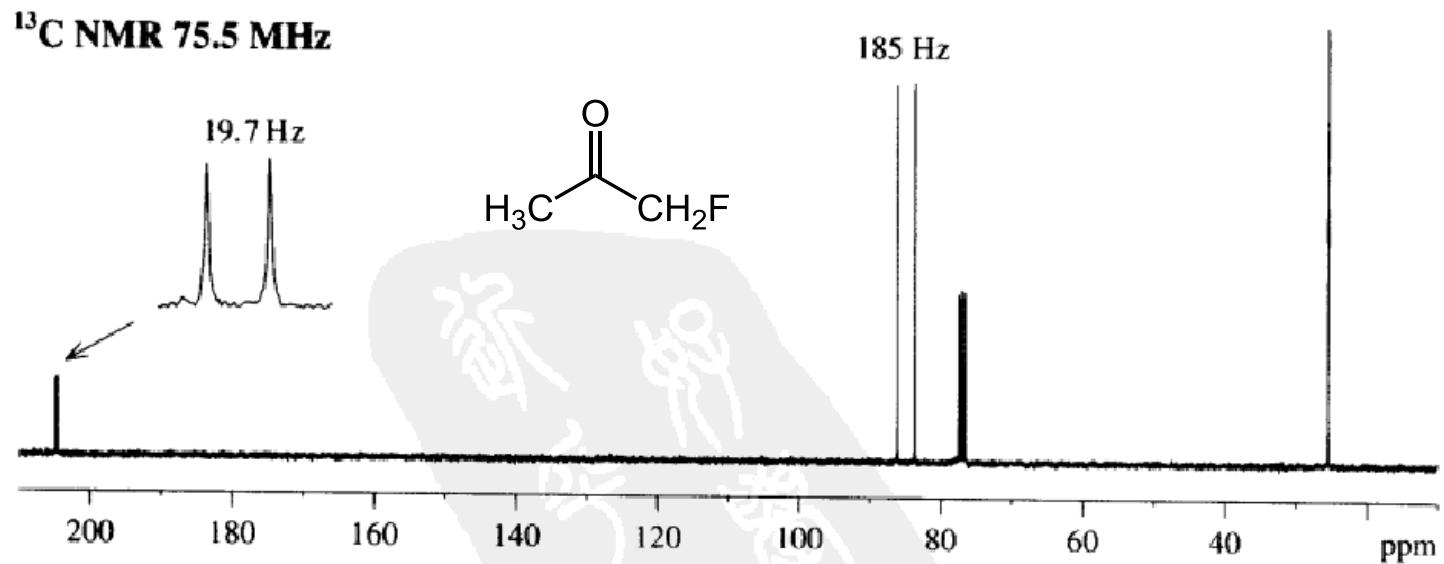
<sup>19</sup>F NMR 282.4 MHz



<sup>1</sup>H NMR 300 MHz

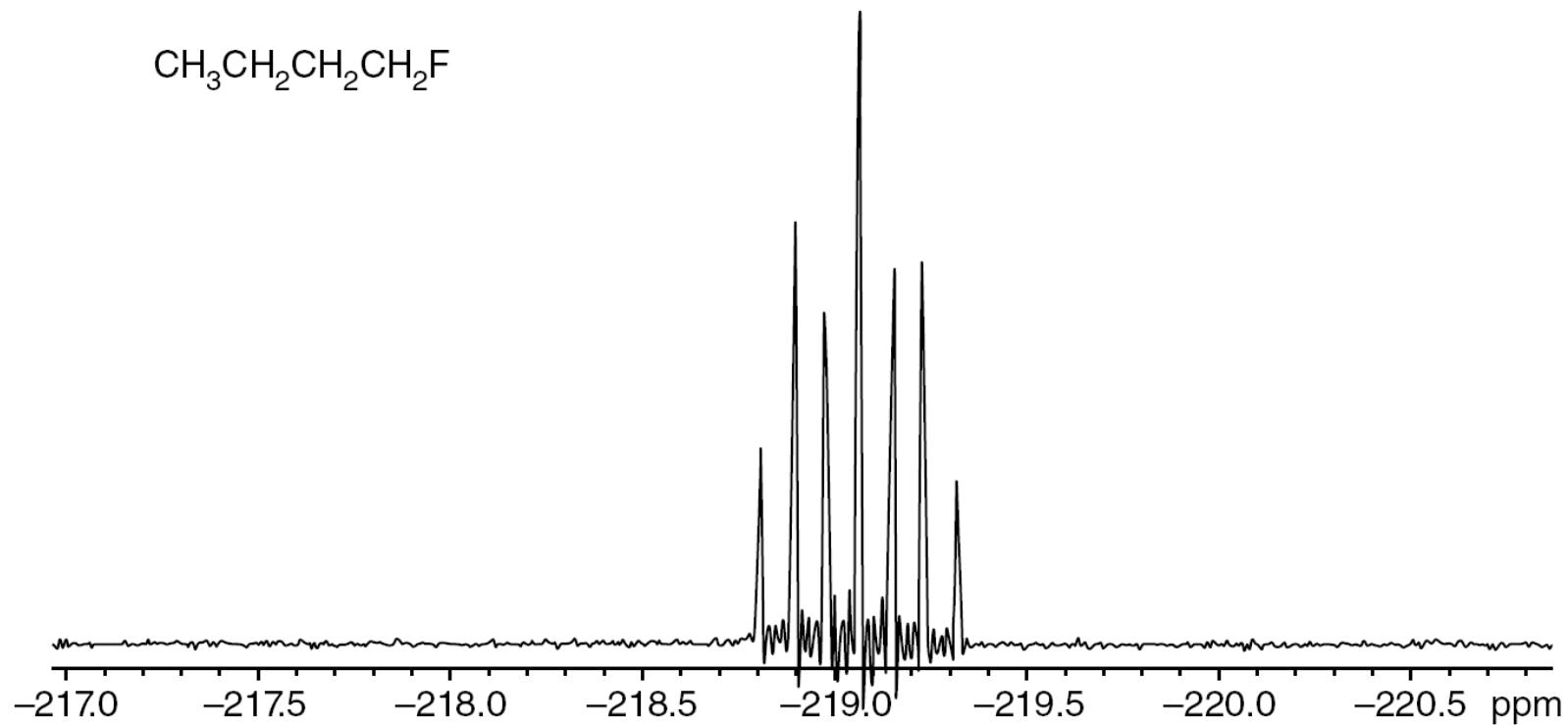


## 代表化合物举例



## 代表化合物举例

$^{19}\text{F}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$



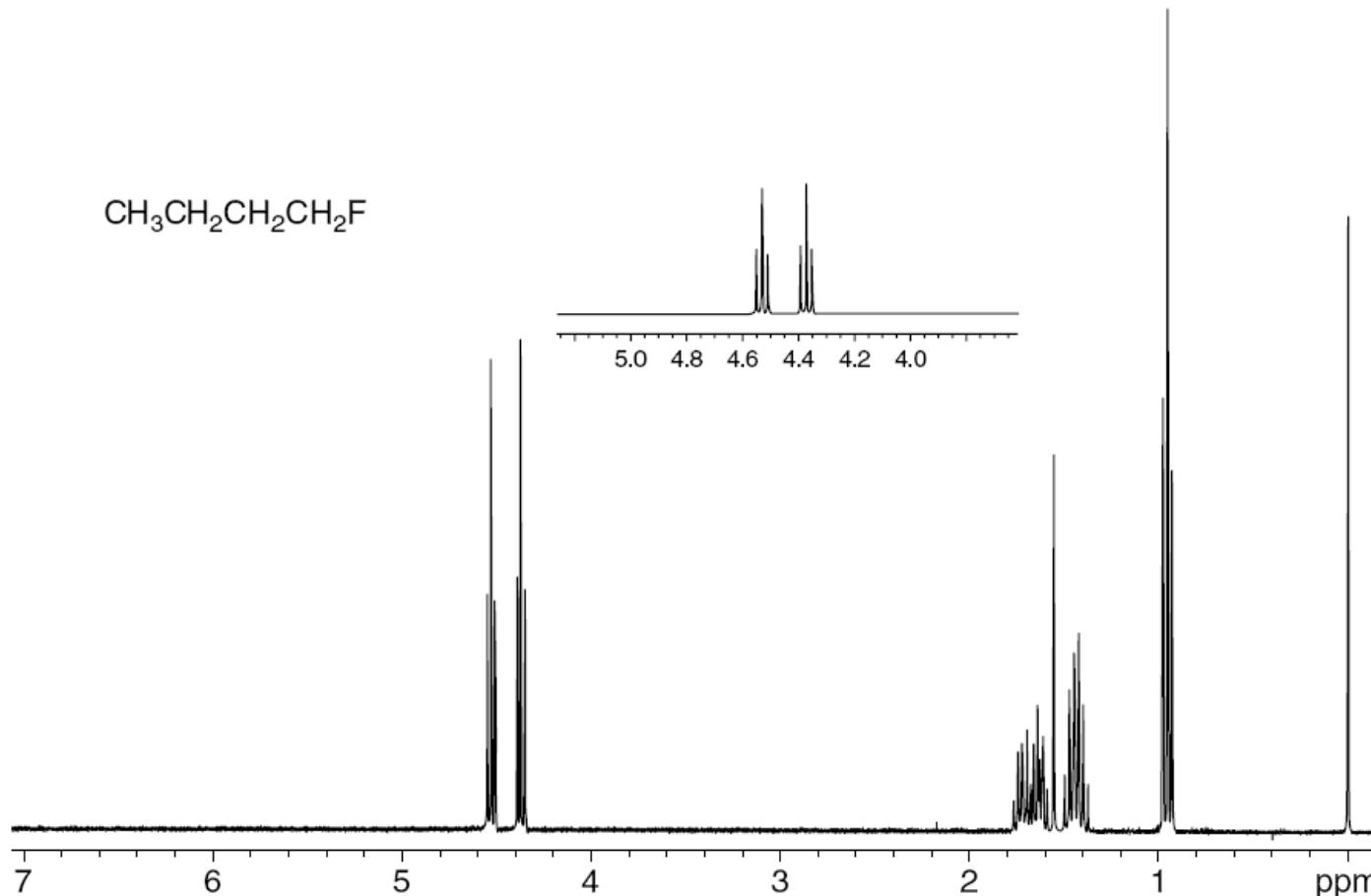
$$\delta = -219 \text{ ppm}$$

$$^2J_{\text{FH}} = 47-49 \text{ Hz}; ^3J_{\text{FH}} = 21-27 \text{ Hz}$$

偶合常数差一倍的三重峰与三重峰的叠加，近似于一个七重峰。

## 代表化合物举例

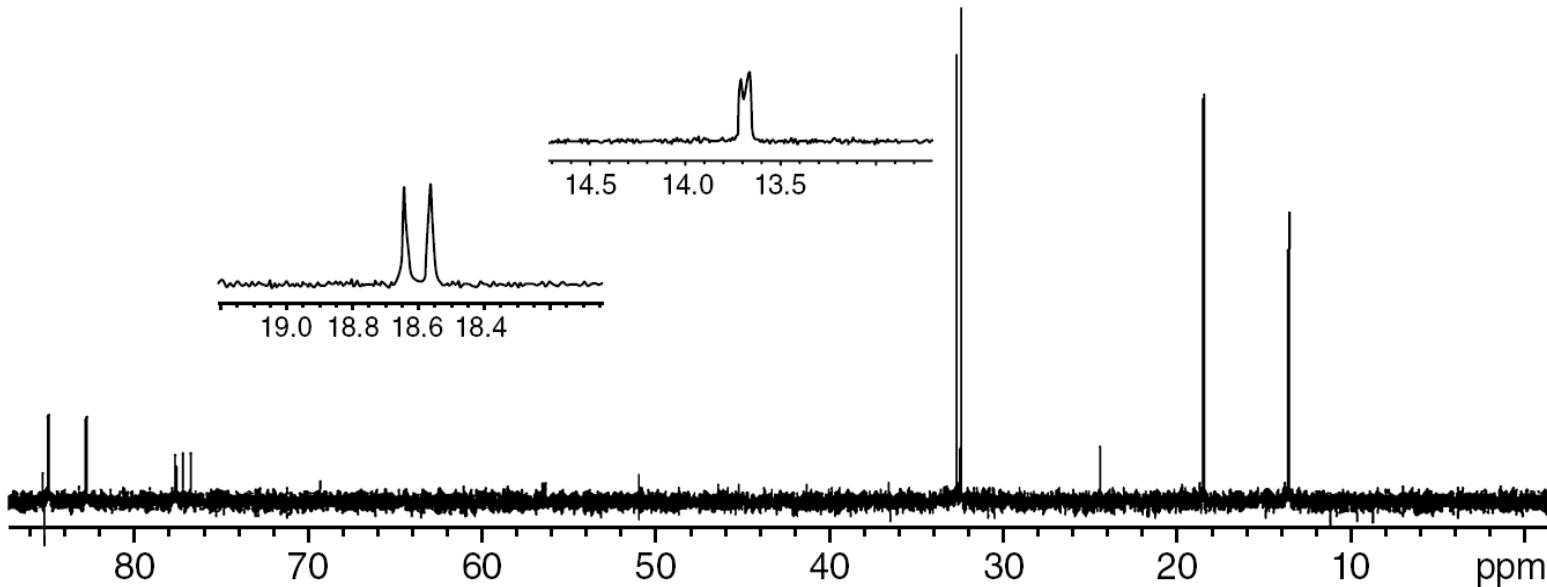
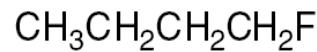
$^1\text{H}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$



$\delta$  0.95 (t,  $^3J_{\text{HH}}= 7.5$  Hz, 3H), 1.43(sextet,  $^3J_{\text{HH}}= 7.8$  Hz, 2H), 1.70 (d, pent,  $^3J_{\text{FH}}= 25$  Hz,  $^3J_{\text{HH}}= 7$  Hz, 2H), 4.45 ( t,  $^2J_{\text{HF}}= 47$ ,  $^3J_{\text{HH}}= 6.0$  Hz, 2H).

## 代表化合物举例

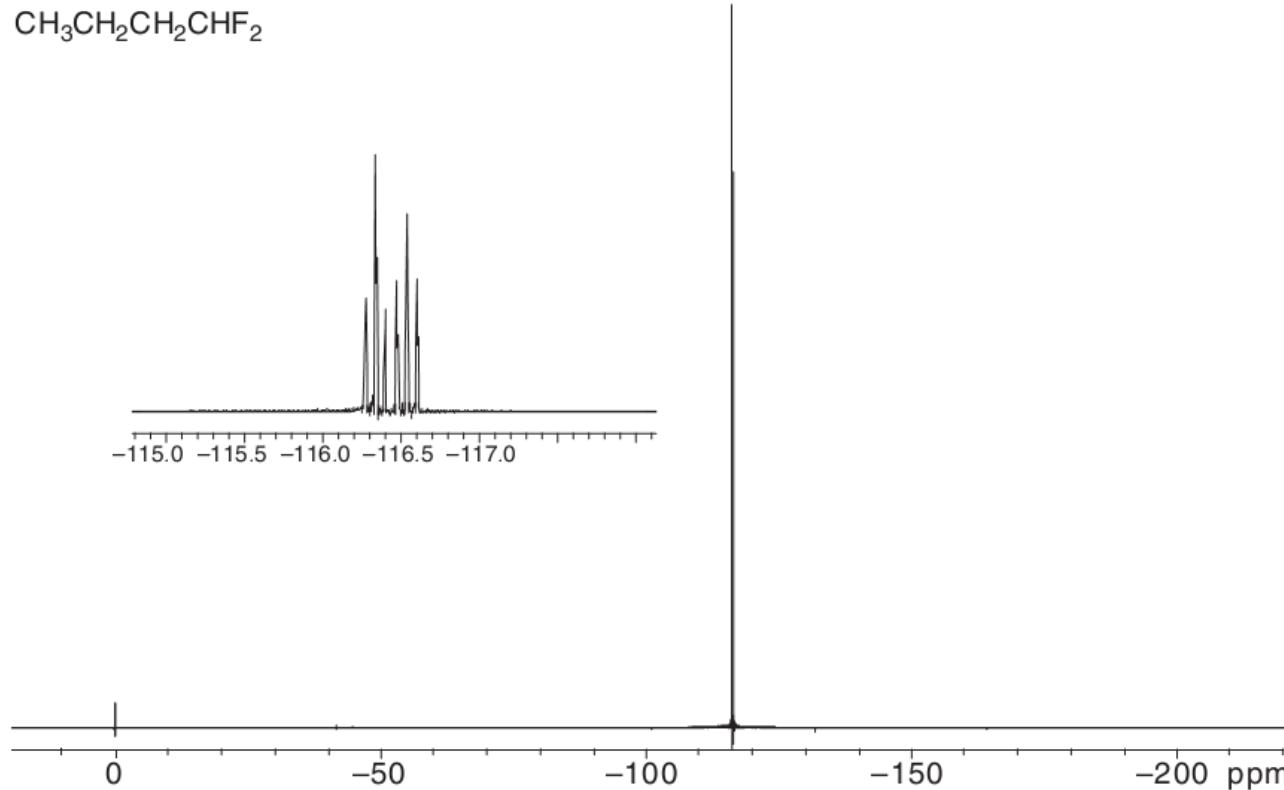
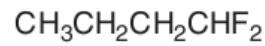
$^{13}\text{C}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$



$\delta$  83.9 (d,  $^1J_{\text{FC}} = 165 \text{ Hz}$ ), 32.7 (d,  $^2J_{\text{FC}} = 19 \text{ Hz}$ ), 18.6 (d,  $^3J_{\text{FC}} = 6 \text{ Hz}$ ), 13.7 (d,  $^4J_{\text{FC}} = 3 \text{ Hz}$ ).

## 代表化合物举例

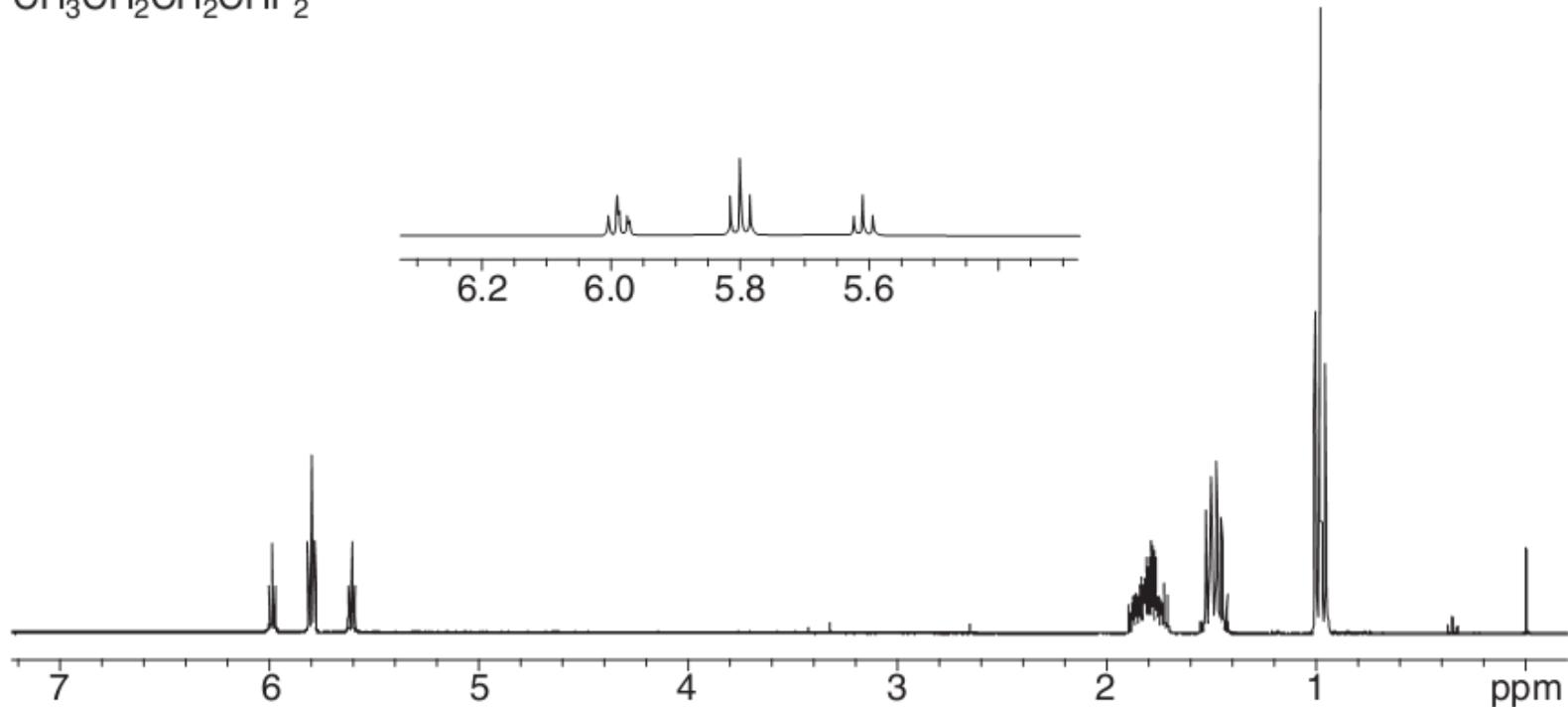
$^{19}\text{F}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHF}_2$



$\delta$  -116.4 ppm (d of t,  $^2J_{\text{FH}} = 58 \text{ Hz}$ ,  $^3J_{\text{FH}} = 16.6 \text{ Hz}$ )

## 代表化合物举例

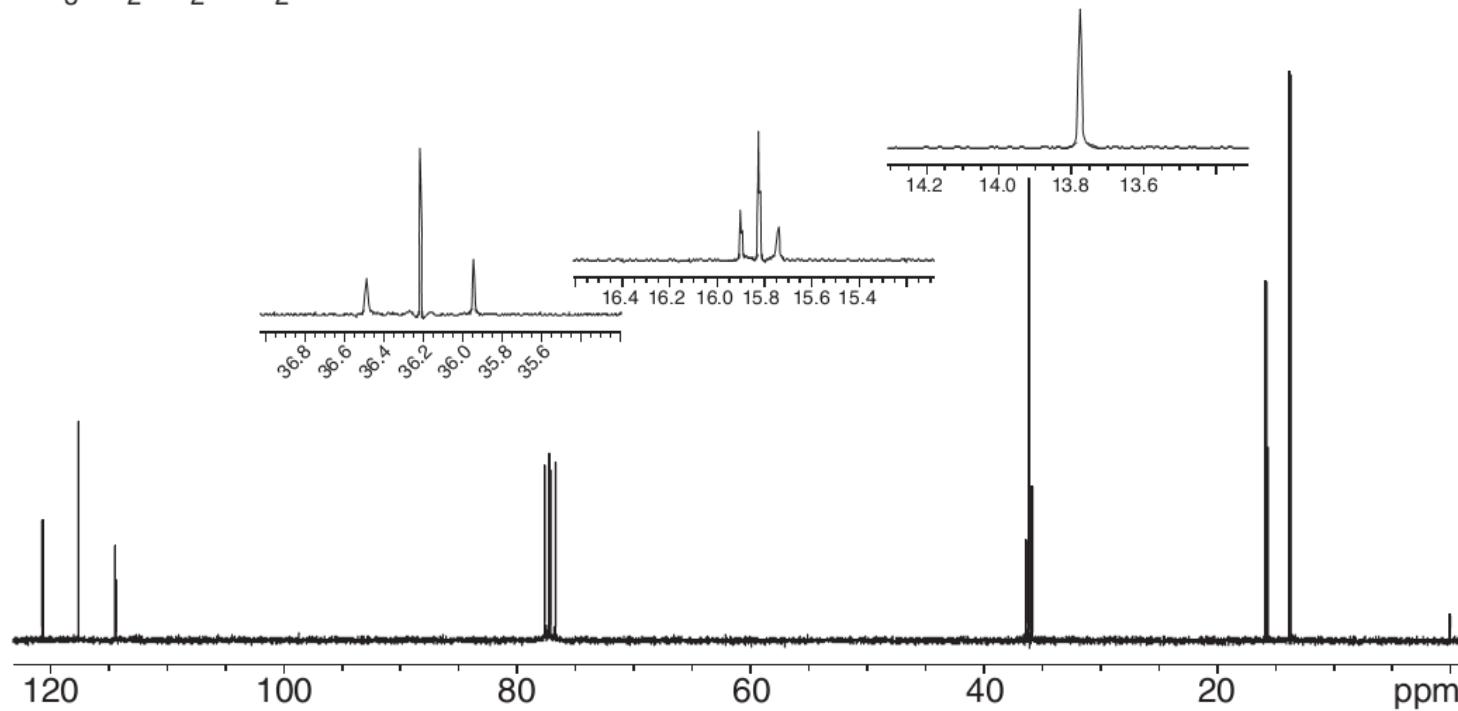
$^1\text{H}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHF}_2$



$\delta$  0.98 (t,  ${}^3J_{\text{HH}}=7.2$  Hz, 3H), 1.49 (sextet,  ${}^3J_{\text{HH}}=7.5$  Hz, 2H), 1.80 (m, 2H), 5.80 (t of t,  ${}^2J_{\text{FH}}=57$  Hz,  ${}^3J_{\text{HH}}=4.5$  Hz, 1H).

## 代表化合物举例

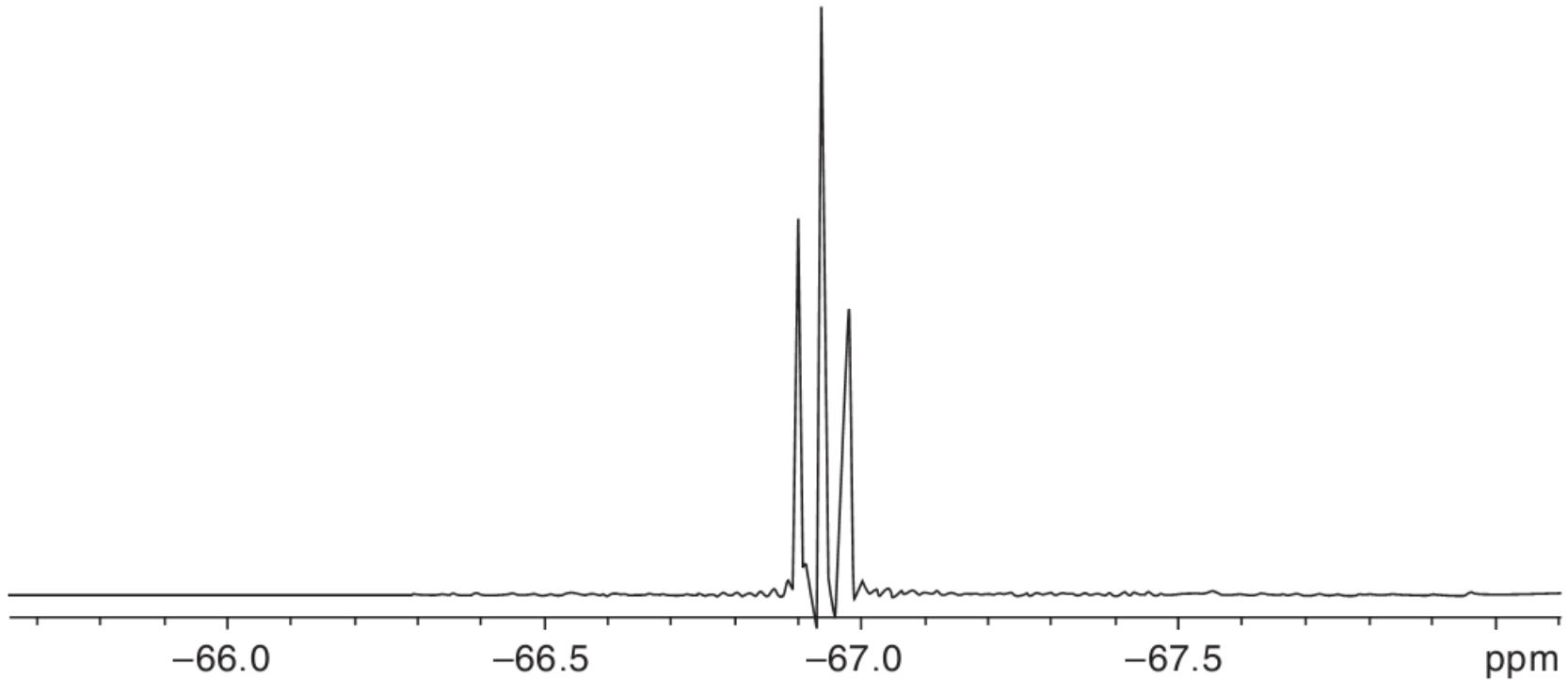
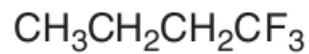
$^{13}\text{C}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHF}_2$



$\delta$  117.6 (t,  $^1J_{\text{FC}} = 239$  Hz), 36.2 (t,  $^2J_{\text{FC}} = 20$  Hz), 15.8 (t,  $^3J_{\text{FC}} = 6.0$  Hz), 13.8 (s)

## 代表化合物举例

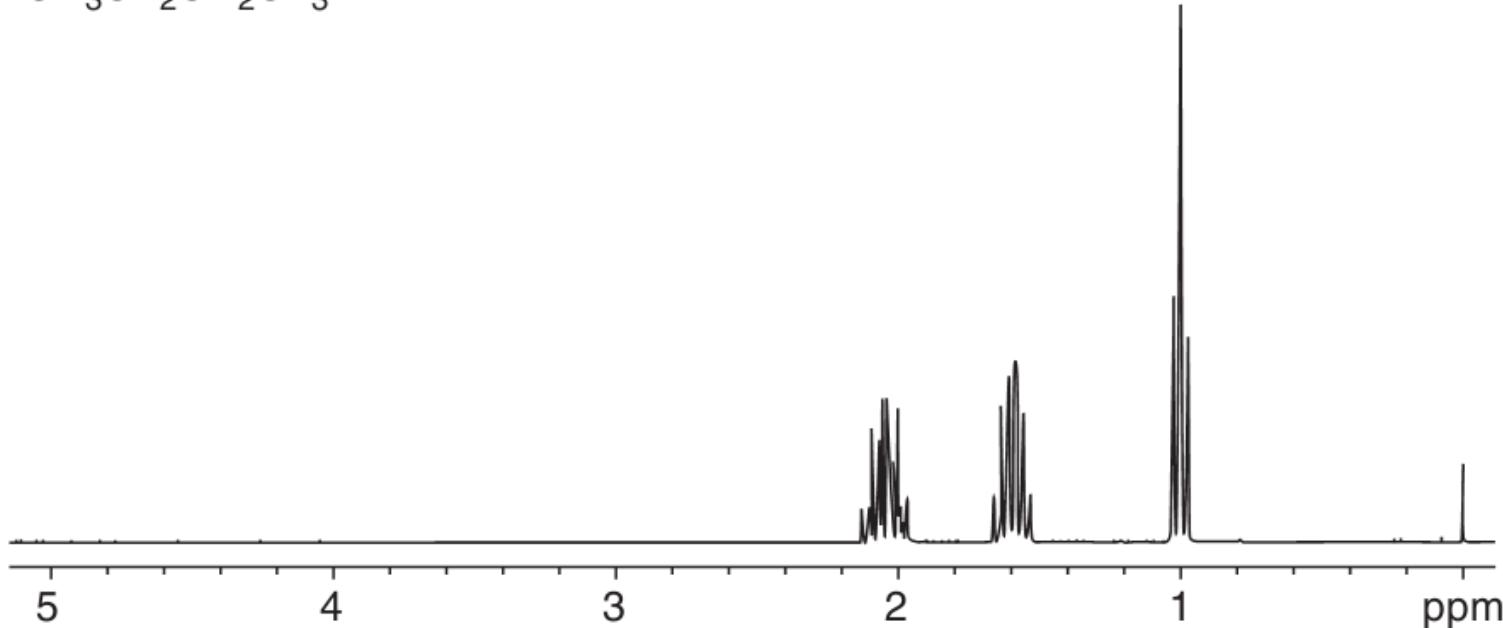
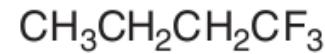
$^{19}\text{F}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$



$\delta = -68 \text{ ppm} (\text{t}, {}^3J_{\text{FH}} = 11 \text{ Hz})$

## 代表化合物举例

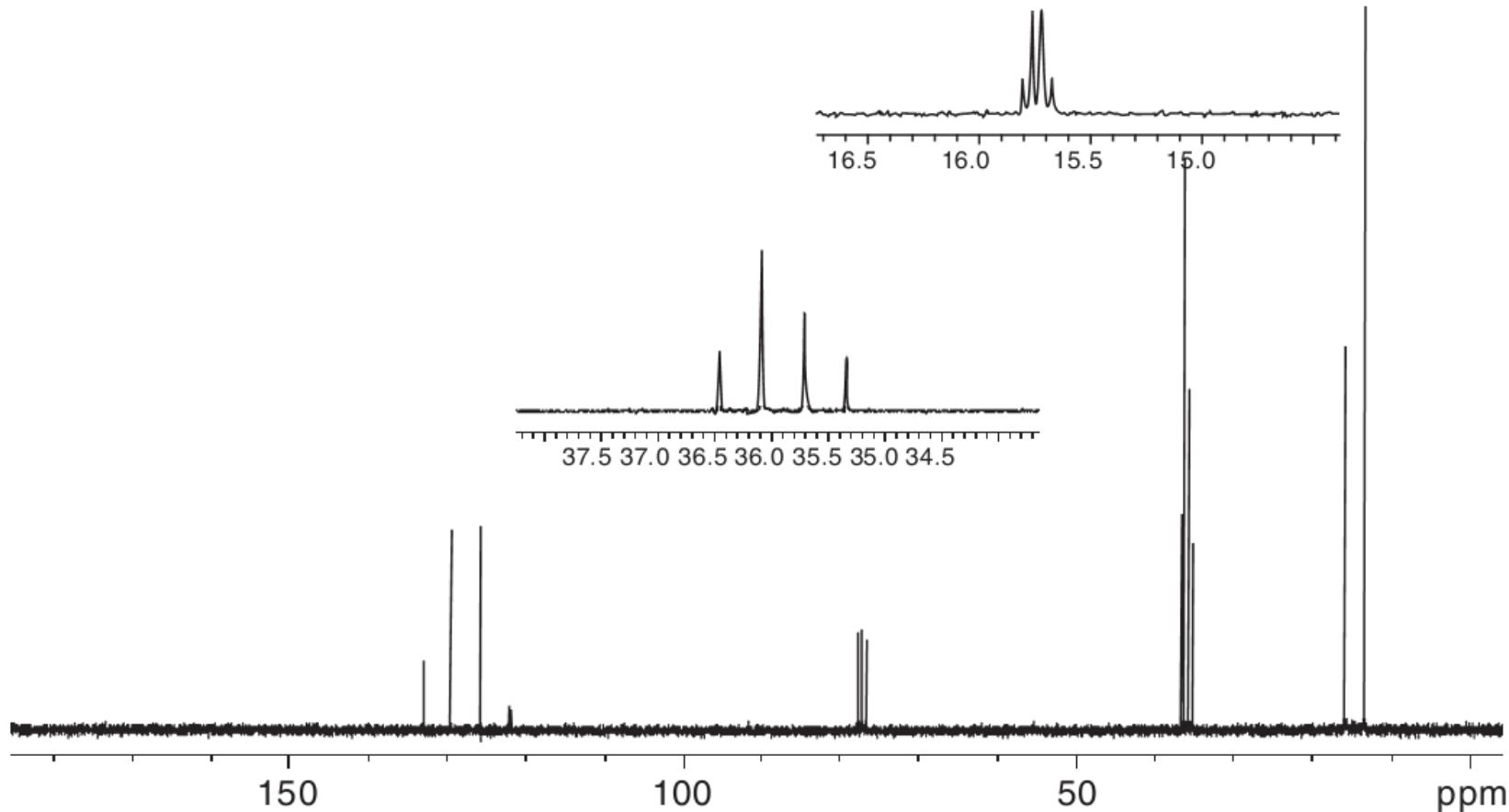
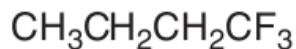
$^1\text{H}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$



$\delta$  1.01 (t,  ${}^3J_{\text{HH}} = 7$  Hz, 3H), 1.59 (sextet,  ${}^3J_{\text{HH}} = 8$  Hz, 2H), and 2.04 (m, 2H).

## 代表化合物举例

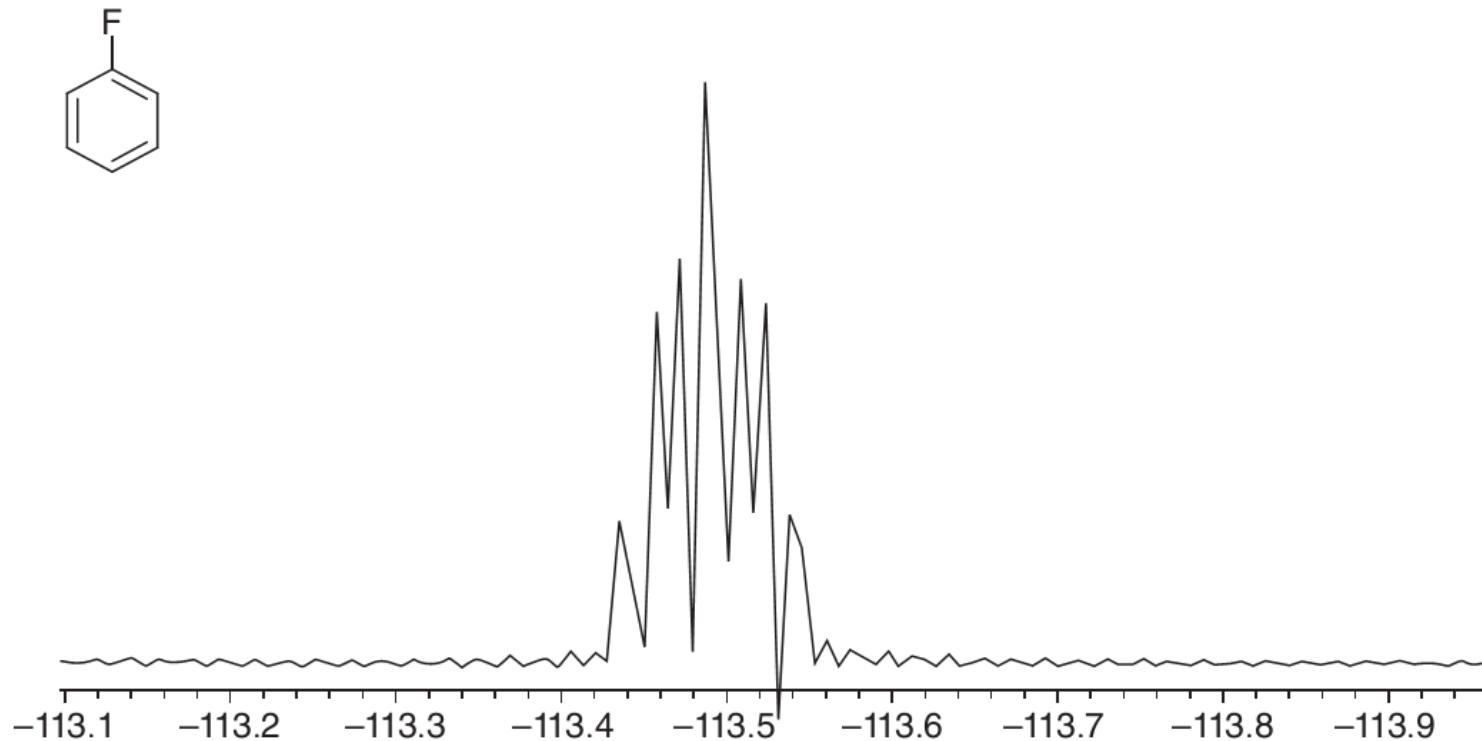
$^{13}\text{C}$  NMR of  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$



$\delta$  127.5 (q,  $^1J_{\text{FC}} = 276 \text{ Hz}$ ), 35.9 (q,  $^2J_{\text{FC}} = 28 \text{ Hz}$ ), 15.7(q,  $^3J_{\text{FC}} = 2.6 \text{ Hz}$ ), 13.4 (s).

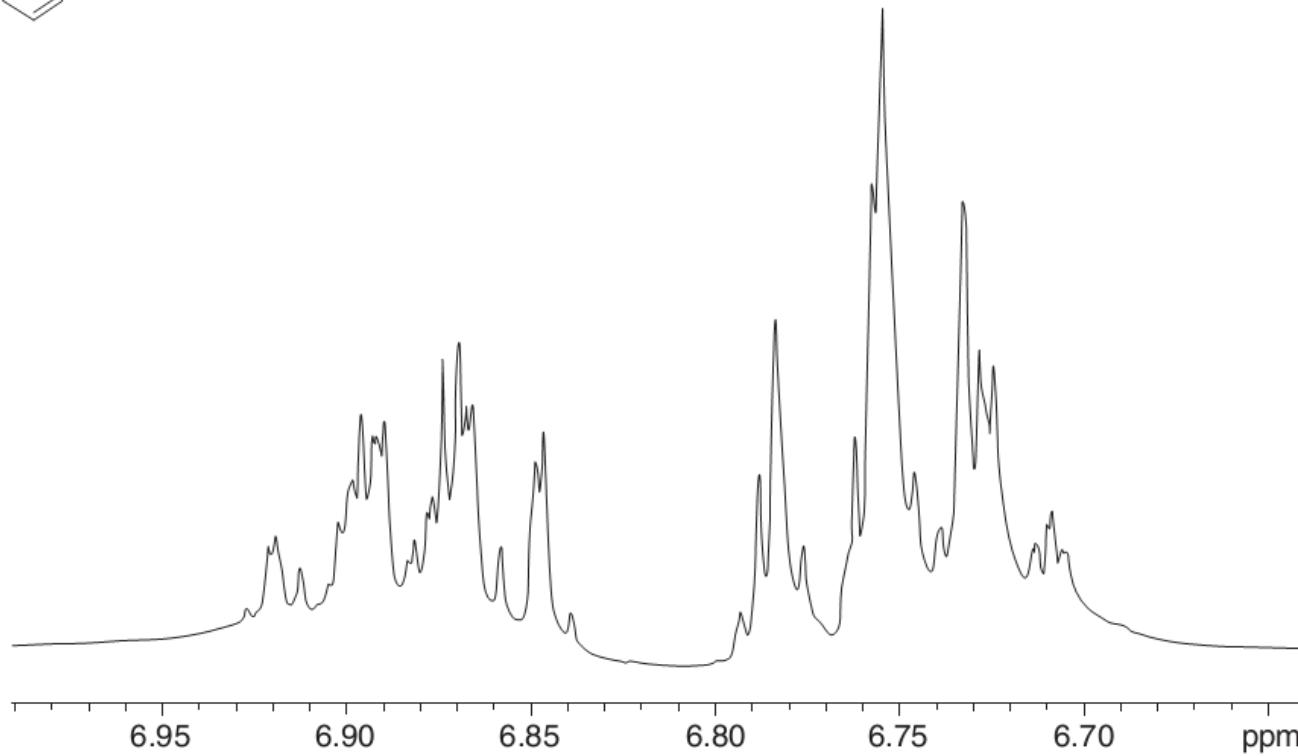
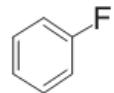
## 代表化合物举例

$^{19}\text{F}$  NMR of fluorobenzene



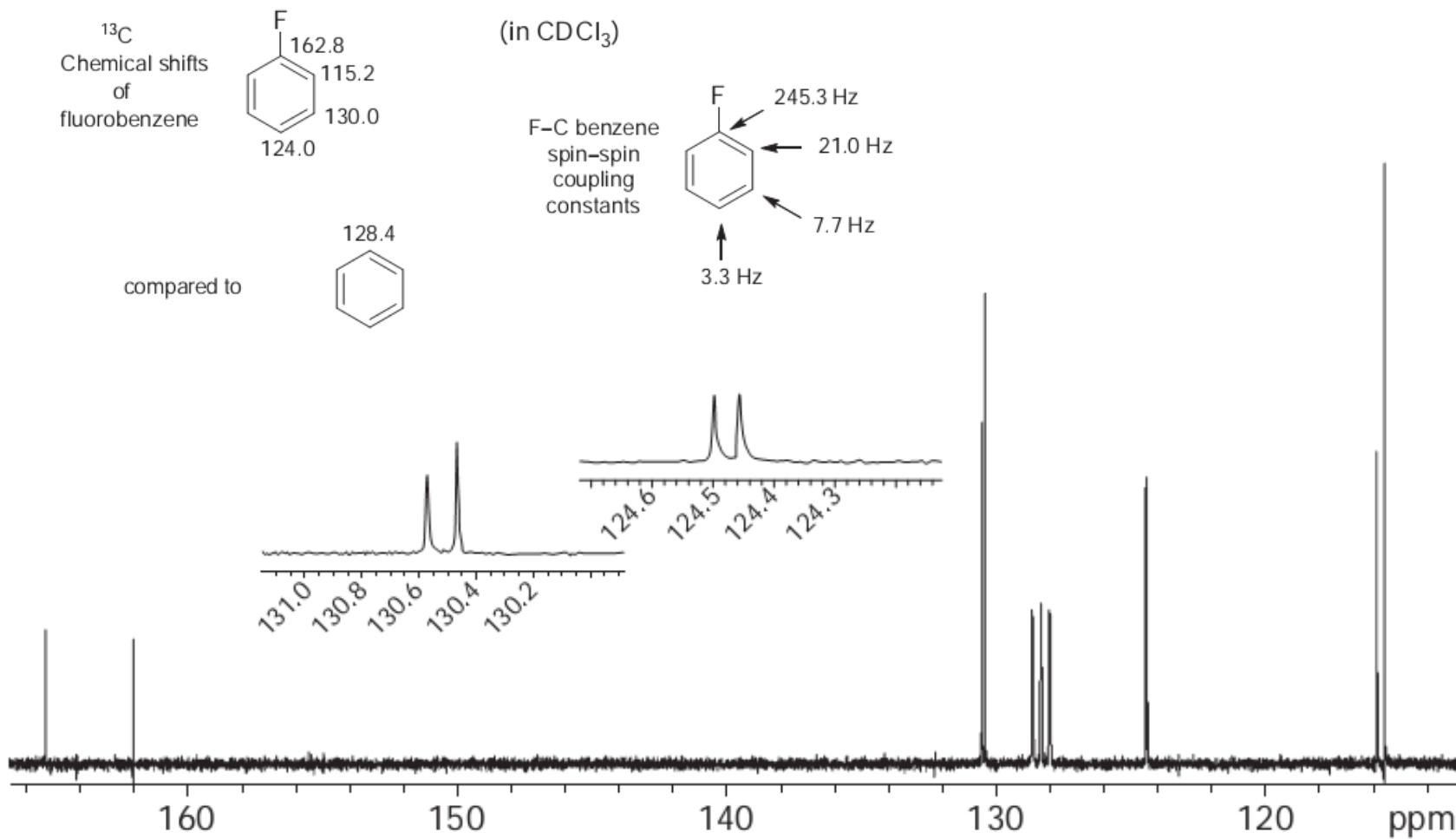
## 代表化合物举例

### $^1\text{H}$ NMR of fluorobenzene

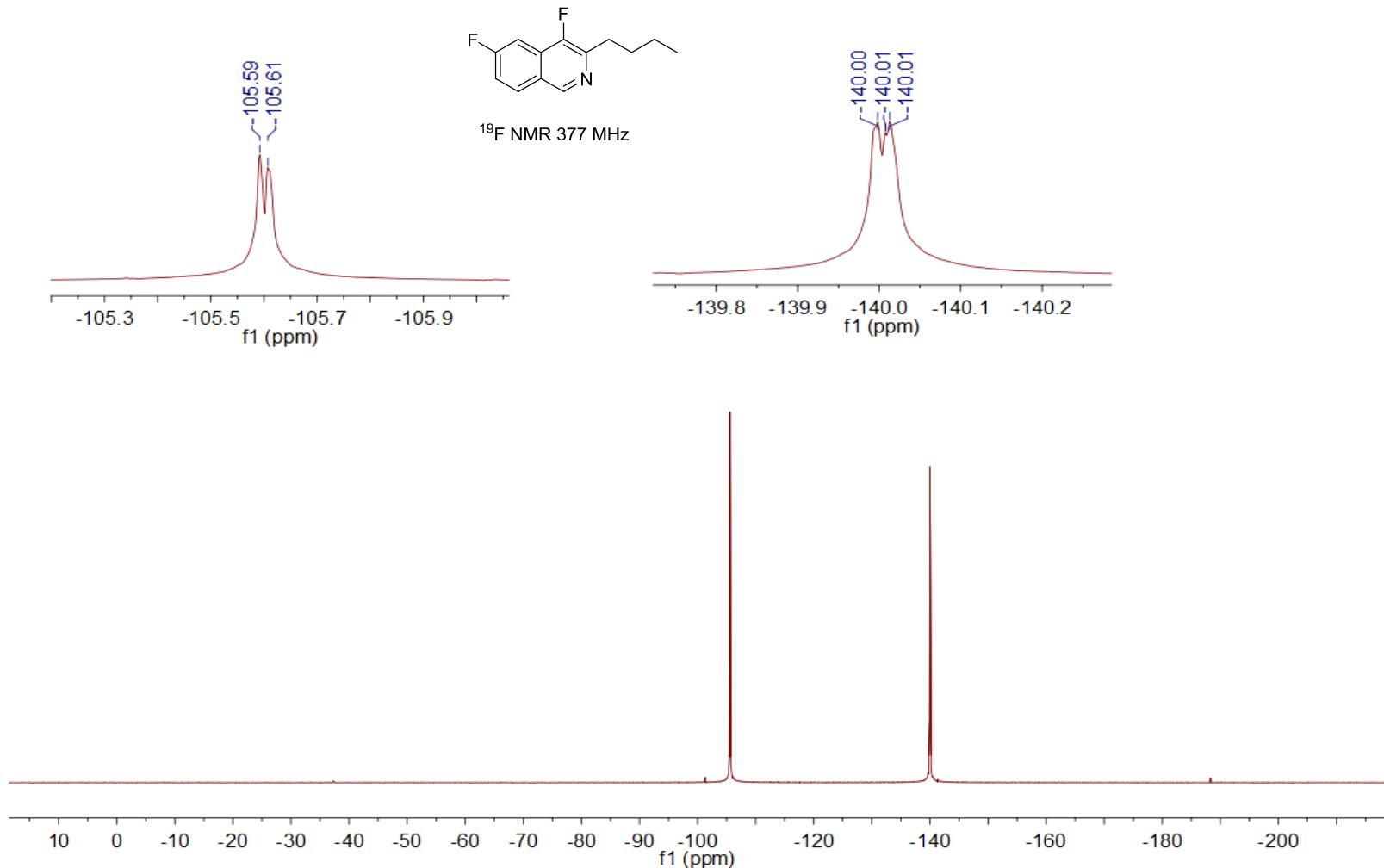


## 代表化合物举例

### <sup>13</sup>C NMR of fluorobenzene

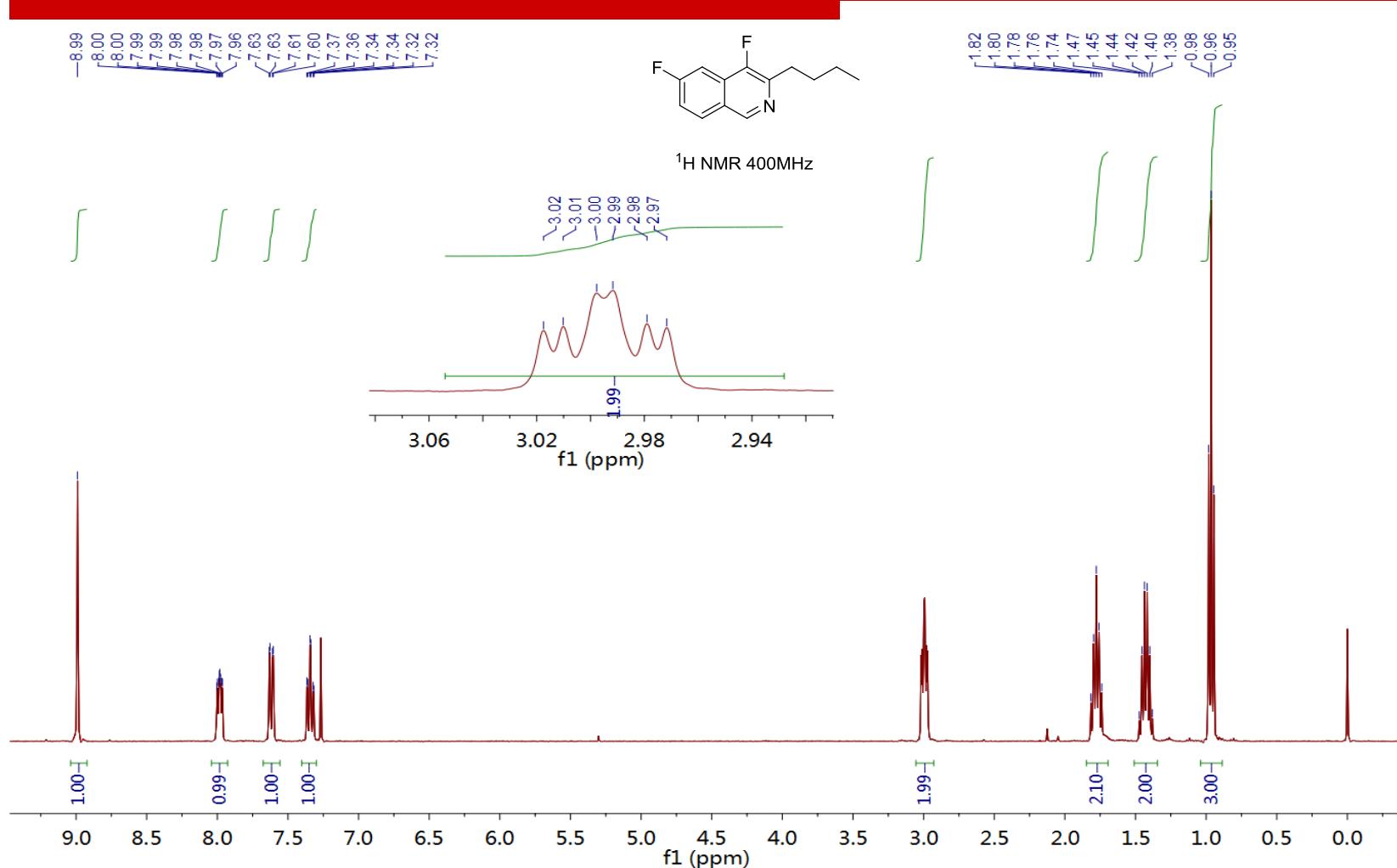


## 代表化合物举例



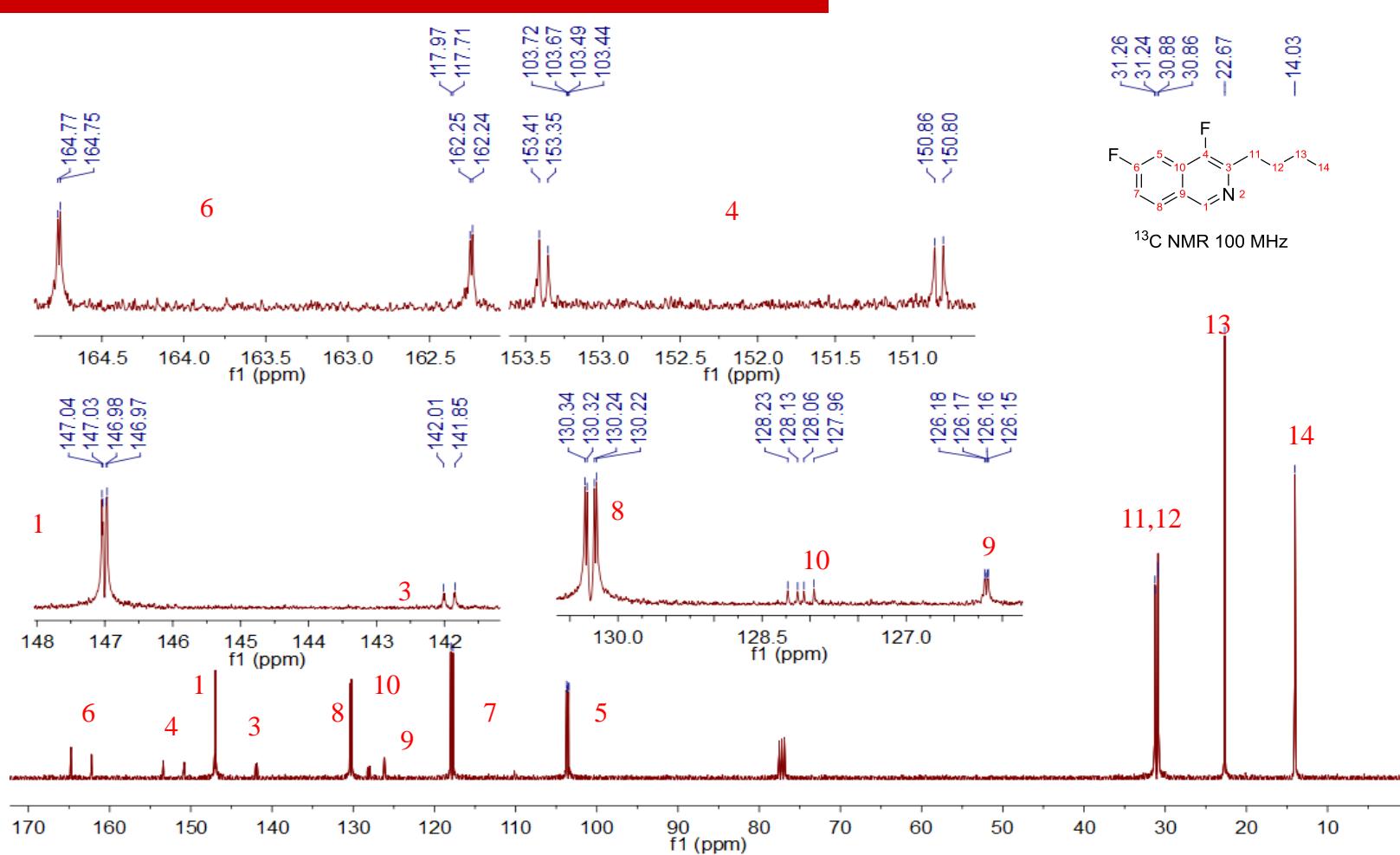
$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  -105.6 (d,  $^3J_{\text{FH}} = 5.9$  Hz), -139.7 – -140.3 (m).

## 代表化合物举例



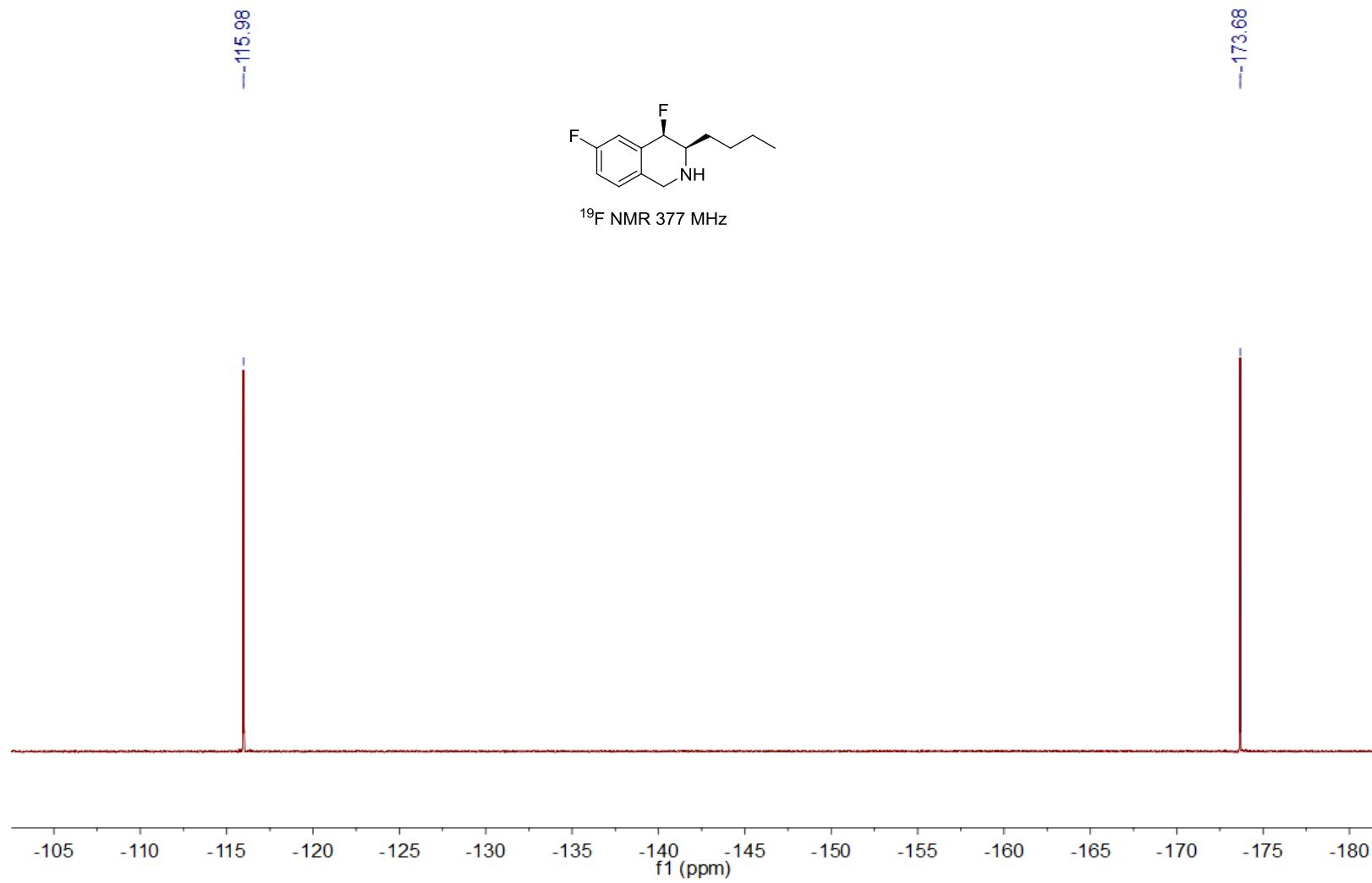
$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  8.99 (s, 1H), 7.98 (ddd,  $J = 8.7, 5.2, 1.5$  Hz, 1H), 7.62 (dd,  $J = 9.4, 2.0$  Hz, 1H), 7.34 (td,  $J = 8.8, 2.3$  Hz, 1H), **2.99 (td,  $J = 8.0, 2.9$  Hz, 2H)**, 1.85-1.69 (m, 2H), 1.51-1.34 (m, 2H), 0.96 (t,  $J = 7.4$  Hz, 3H).

## 代表化合物举例



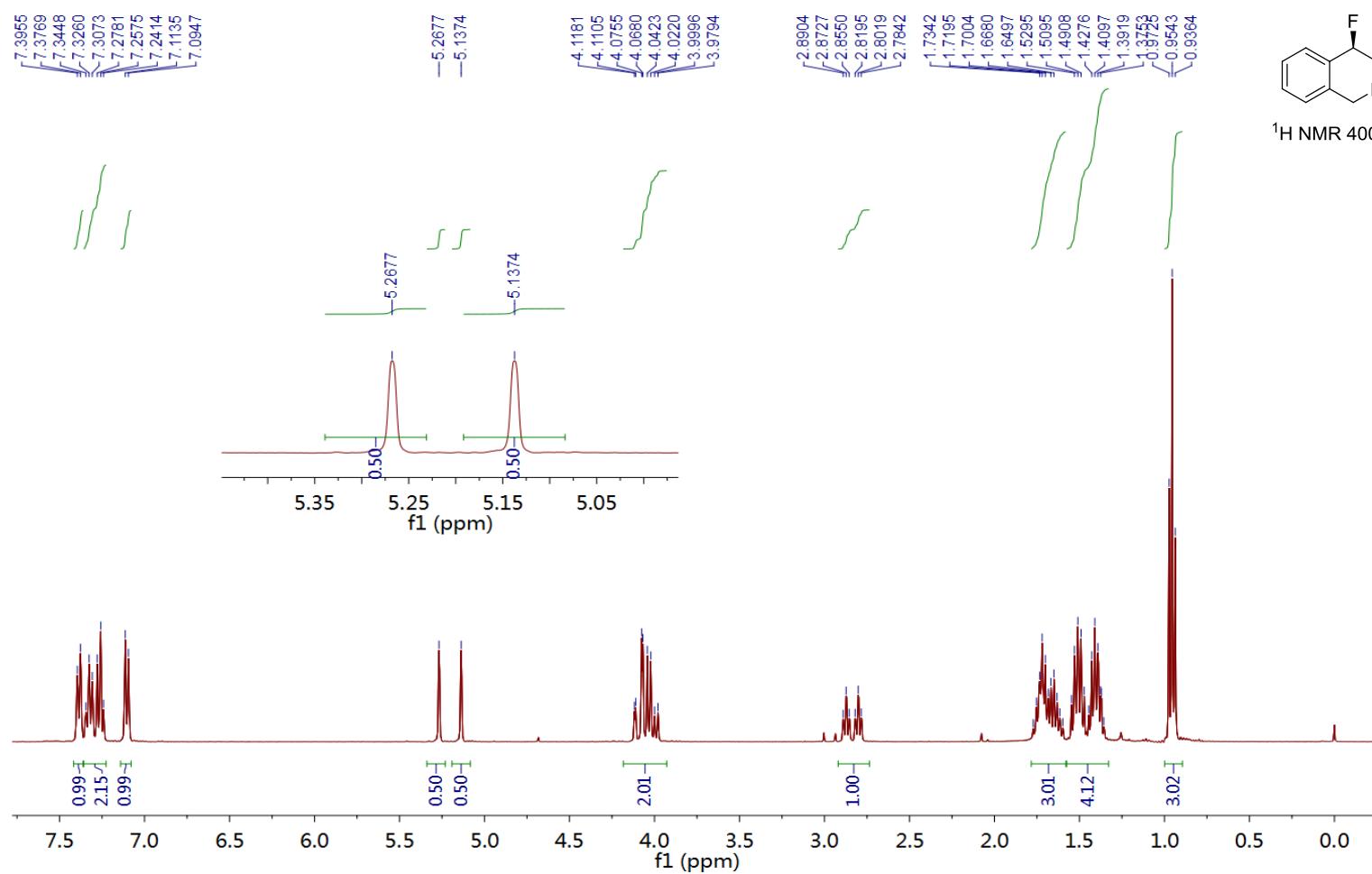
$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  163.5 (dd,  $^1J_{\text{FC}} = 253.1 \text{ Hz}$ ,  $^4J_{\text{FC}} = 1.4 \text{ Hz}$ ), 152.1 (dd,  $^1J_{\text{FC}} = 256.9 \text{ Hz}$ ,  $^4J_{\text{FC}} = 5.7 \text{ Hz}$ ), 147.0 (dd,  $^4J_{\text{FC}} = 6.2 \text{ Hz}$ ,  $^5J_{\text{FC}} = 1.4 \text{ Hz}$ ), 141.9 (d,  $^2J_{\text{FC}} = 16.9 \text{ Hz}$ ), 130.3 (dd,  $^3J_{\text{FC}} = 10.0$ ,  $^4J_{\text{FC}} = 2.2 \text{ Hz}$ ), 128.1 (dd,  $^3J_{\text{FC}} = 17.0 \text{ Hz}$ ,  $^4J_{\text{FC}} = 10.4 \text{ Hz}$ ), 126.2 (dd,  $^3J_{\text{FC}} = 2.7 \text{ Hz}$ ,  $^4J_{\text{FC}} = 1.1 \text{ Hz}$ ), 117.8 (d,  $^2J_{\text{FC}} = 26.6 \text{ Hz}$ ), 103.6 (dd,  $^2J_{\text{FC}} = 23.5$ ,  $^3J_{\text{FC}} = 5.1 \text{ Hz}$ ), 31.3 (d,  $^3J_{\text{FC}} = 2.0 \text{ Hz}$ ), 30.9 (d,  $^3J_{\text{FC}} = 1.7 \text{ Hz}$ ), 22.7 (s), 14.0 (s).

## 代表化合物举例

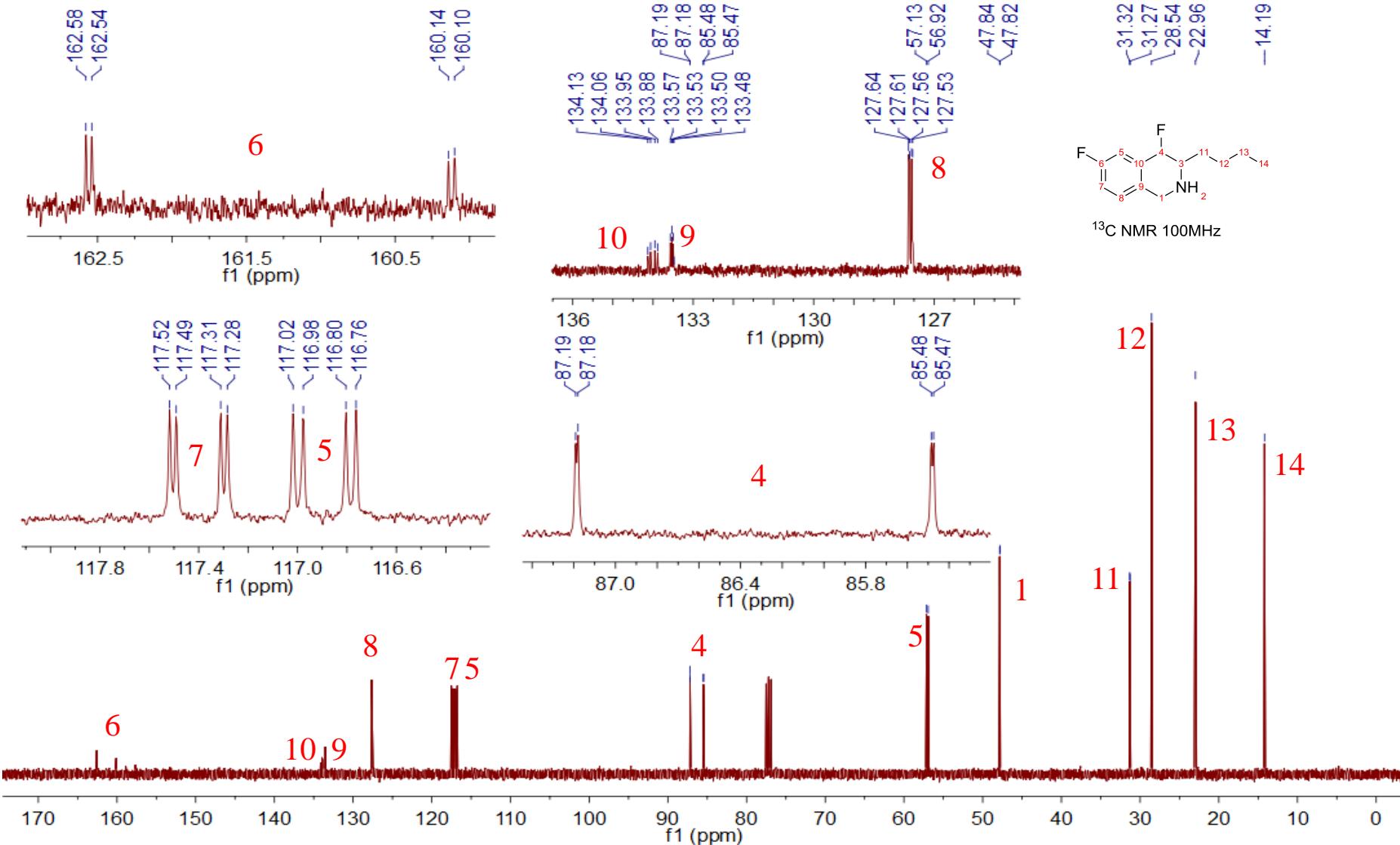


$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  -116.0 (s), -173.7 (s).

## 代表化合物举例

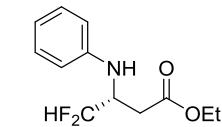


$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.39 (d,  $J = 7.4$  Hz, 1H), 7.33 (t,  $J = 7.5$  Hz, 1H), 7.26 (t,  $J = 7.3$  Hz, 1H), 7.10 (d,  $J = 7.5$  Hz, 1H), 5.20 (d,  $^2J_{\text{FH}} = 52.1$  Hz, 1H), 4.05 (qd,  $^5J_{\text{FH}} = 17.1, 5.6$  Hz, 2H), 2.84 (dt,  $^3J_{\text{FH}} = 28.3, 7.1$  Hz, 1H), 1.90-1.58 (m, 3H), 1.59-1.28 (m, 4H), 0.95 (t,  $J = 7.2$  Hz, 3H).



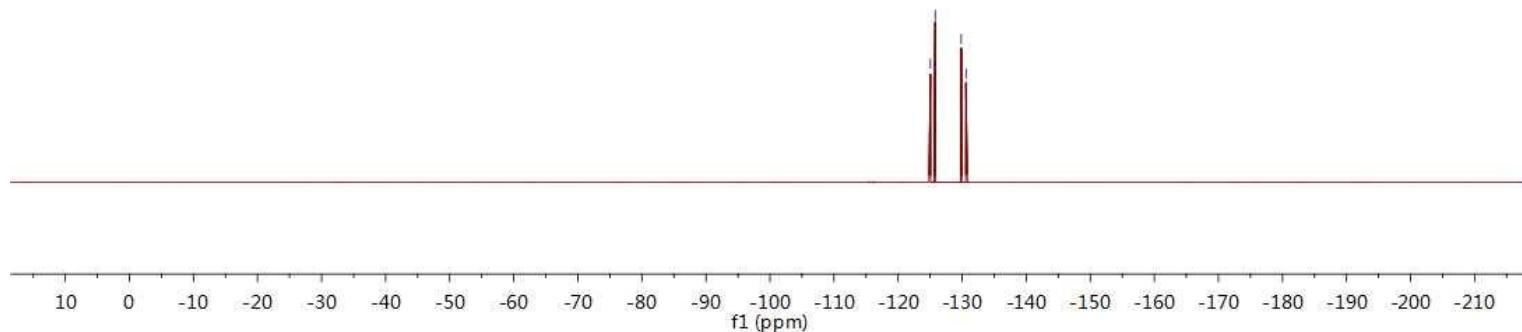
$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  161.3 (dd,  $^1\text{J}_{\text{FC}} = 245.3$  Hz,  $^4\text{J}_{\text{FC}} = 4.1$  Hz), 134.0 (dd,  $J = 17.8, 7.1$  Hz), 133.5 (dd,  $^3\text{J}_{\text{FC}} = 6.2$  Hz,  $^4\text{J}_{\text{FC}} = 2.9$  Hz), 127.6 (dd,  $^3\text{J}_{\text{FC}} = 7.7$  Hz,  $^4\text{J}_{\text{FC}} = 2.5$  Hz), 117.4 (dd,  $^2\text{J}_{\text{FC}} = 20.8$  Hz,  $^4\text{J}_{\text{FC}} = 2.7$  Hz), 116.9 (dd,  $^2\text{J}_{\text{FC}} = 21.5$  Hz,  $^3\text{J}_{\text{FC}} = 4.1$  Hz), 86.3 (dd,  $^1\text{J}_{\text{FC}} = 171.7$  Hz,  $^4\text{J}_{\text{FC}} = 1.1$  Hz), 57.0 (d,  $^2\text{J}_{\text{FC}} = 20.9$  Hz), 47.8 (d,  $^4\text{J}_{\text{FC}} = 1.7$  Hz), 31.3 (d,  $^3\text{J}_{\text{FC}} = 4.8$  Hz), 28.5 (s), 23.0 (s), 14.2 (s). <sup>33</sup>

## 代表化合物举例



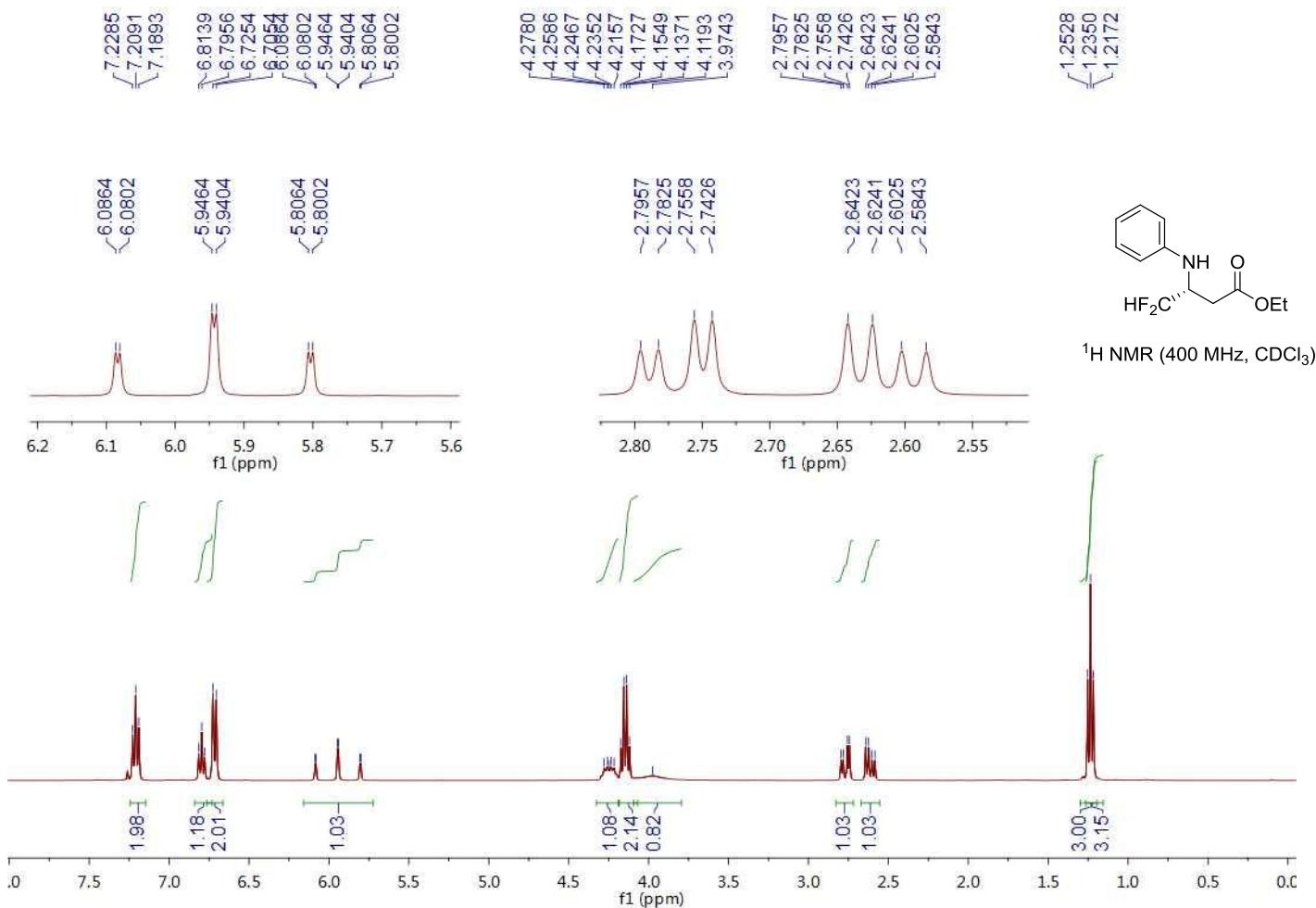
$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )

125.0408  
125.7928  
129.8487  
130.6005



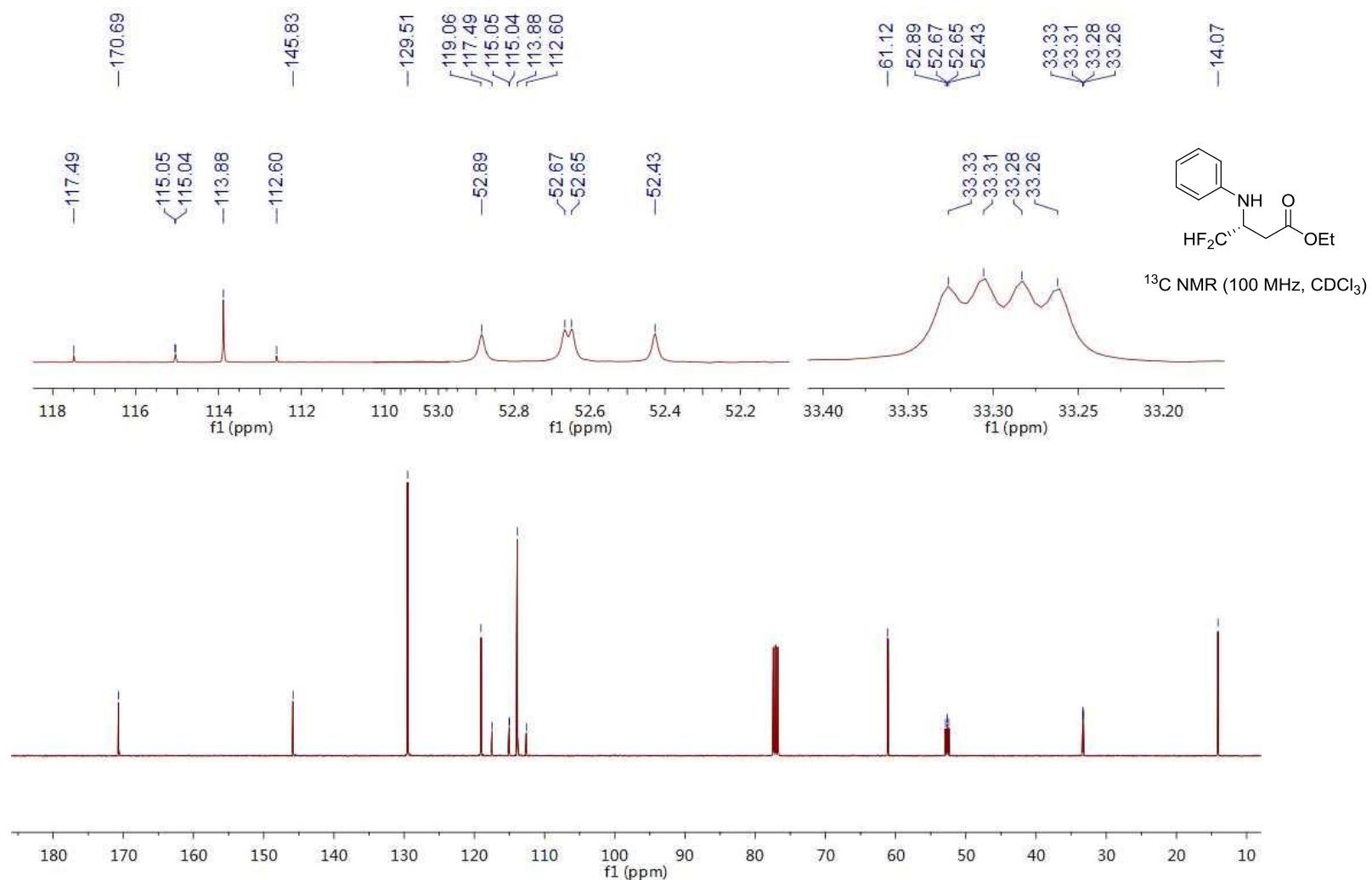
$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  -125.4 (d,  $J = 282.7$  Hz, 1F), 130.2 (d,  $J = 282.7$  Hz , 1F).

## 代表化合物举例



$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.21 (t,  $J = 7.8$  Hz, 2H), 6.80 (t,  $J = 7.3$  Hz, 1H), 6.72 (d,  $J = 8.0$  Hz, 2H), **5.94 (td,  $J = 56.1, 2.5$  Hz, 1H)**, **4.33 – 4.19 (m, 1H)**, 4.15 (q,  $J = 7.1$  Hz, 2H), 3.97 (s, 1H), **2.77 (dd,  $J = 15.9, 5.3$  Hz, 1H)**, **2.61 (dd,  $J = 15.9, 7.3$  Hz, 1H)**, 1.24 (t,  $J = 7.1$  Hz, 3H).

## 代表化合物举例



<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 170.7, 145.8, 129.5, 119.1, **115.1** (t, *J* = 245.0 Hz), 113.9, 61.1, **52.6** (dd, *J* = 24.0 Hz), **33.3** (dd, *J* = 5.0, 2.0 Hz), 14.1.

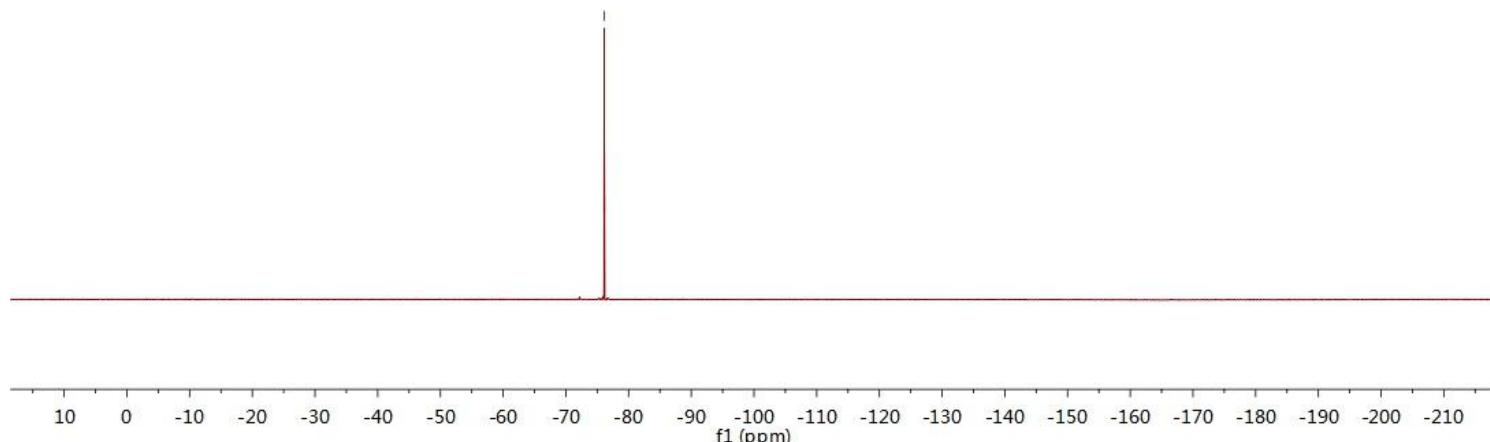
## 代表化合物举例

$^{19}\text{F}$  NMR MC-21-32 in  $\text{CDCl}_3$

—76.1066

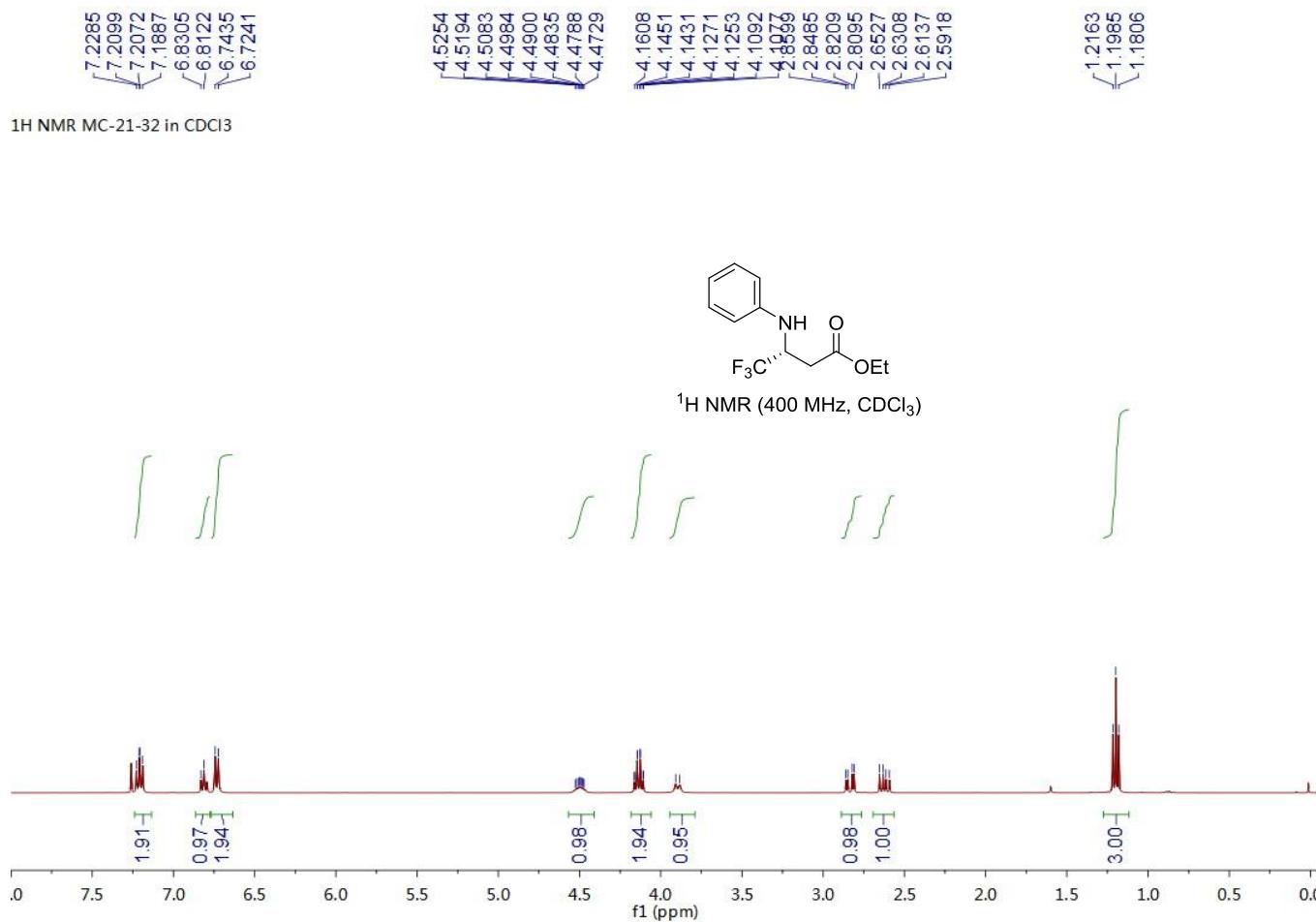


$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )



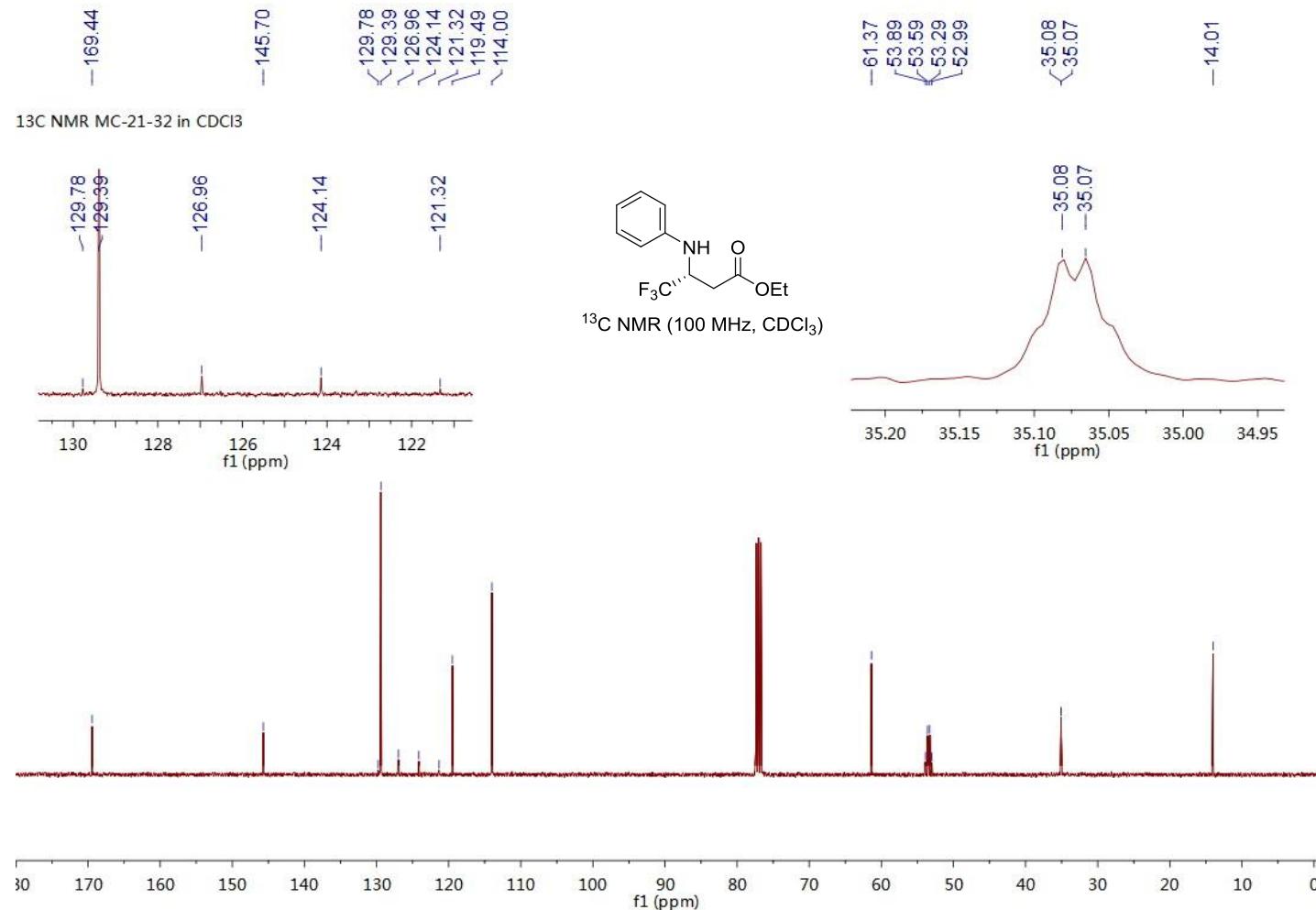
$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  -76.1

## 代表化合物举例



${}^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  7.24 – 7.17 (m, 2H), 6.81 (t,  $J = 7.4$  Hz, 1H), 6.73 (d,  $J = 7.8$  Hz, 2H), **4.56 – 4.42 (m, 1H)**, 4.19 – 4.05 (m, 2H), **3.90 (d,  $J = 9.9$  Hz, 1H)**, **2.83 (dd,  $J = 15.6, 4.5$  Hz, 1H)**, **2.62 (dd,  $J = 15.6, 8.8$  Hz, 1H)**, 1.20 (t,  $J = 7.1$  Hz, 3H).

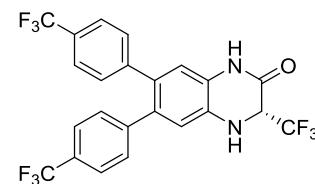
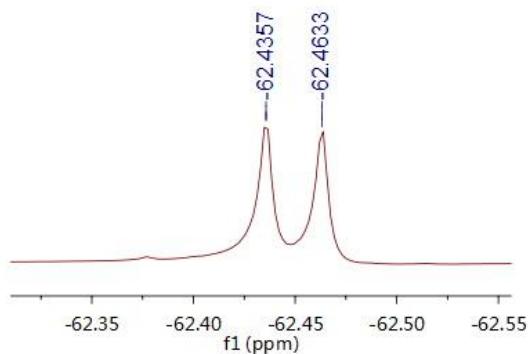
## 代表化合物举例



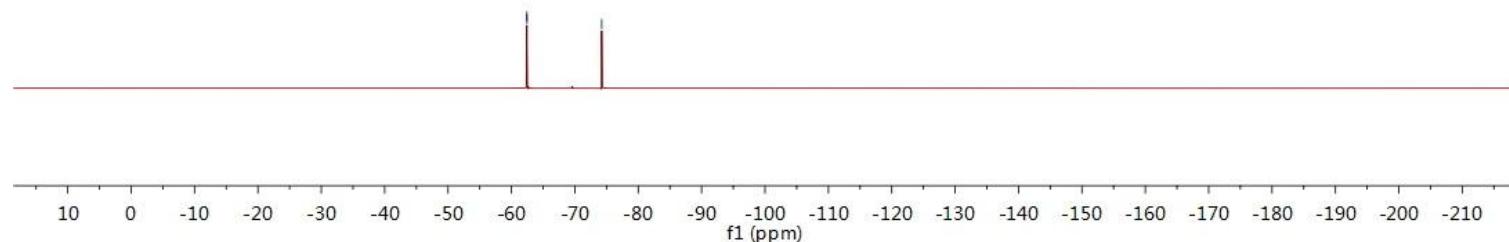
$^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  169.4, 145.7, 129.4, 125.6 (q,  $J = 282.0 \text{ Hz}$ ), 119.5, 114.0, 61.4, 53.4 (q,  $J = 30 \text{ Hz}$ ), 35.1 (q,  $J = 1.0 \text{ Hz}$ ), 14.0.

## 代表化合物举例

$^{19}\text{F}$  NMR MC-20-77A in  $\text{CDCl}_3$

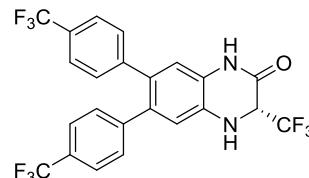
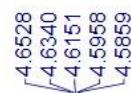
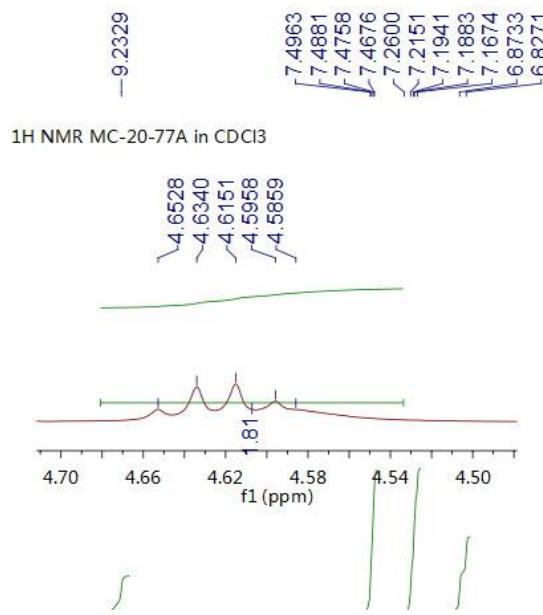


$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )

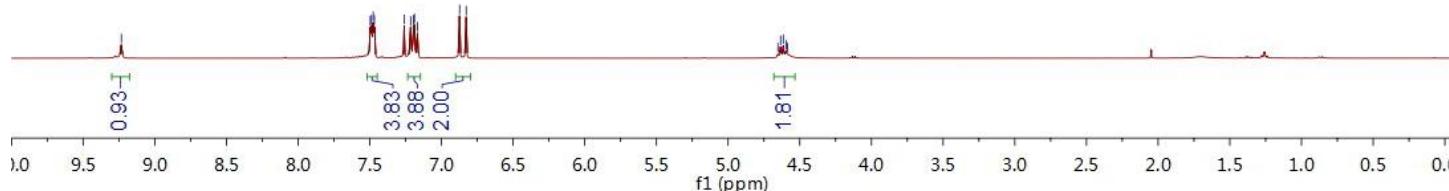


$^{19}\text{F}$  NMR (376 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  - 62.4, - 62.5, - 74.2.

## 代表化合物举例

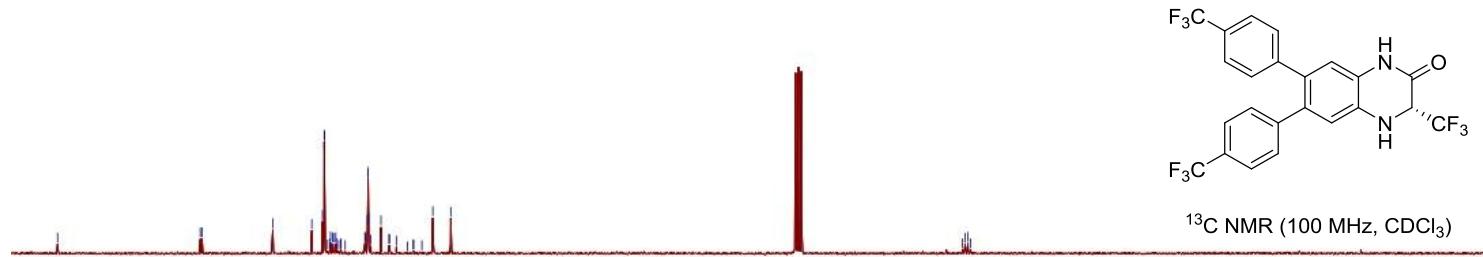
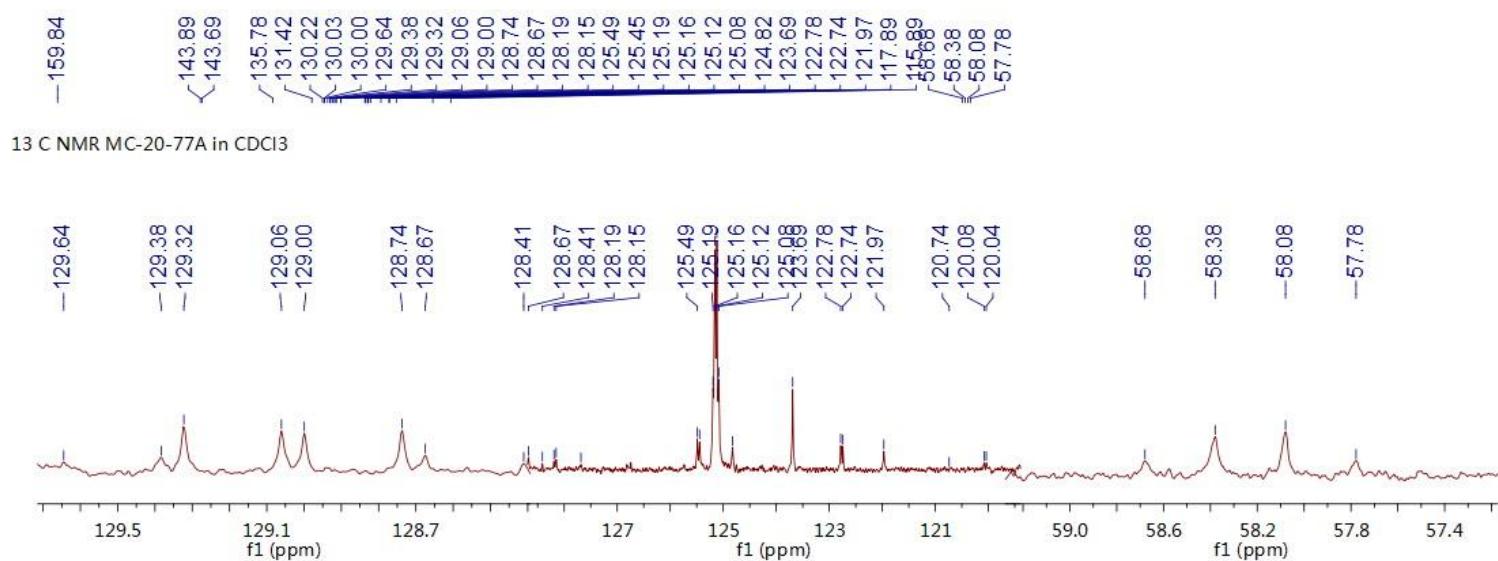


<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>)



<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ 9.23 (brs, 1H), 7.48 (dd, *J* = 8.2, 3.3 Hz, 4H), 7.19 (dd, *J* = 10.7, 8.4 Hz, 4H), 6.85 (d, *J* = 18.5 Hz, 2H), 4.62 (**q, *J* = 7.5 Hz, 1H**), 4.59 (brs, 1H).

## 代表化合物举例



<sup>13</sup>C NMR (100 MHz, CDCl<sub>3</sub>)  $\delta$  159.8, 143.9, 143.7, 135.8, 131.4, 130.2, 130.1, 130.0, 129.2 (q,  $J = 32.0$  Hz), 128.9 (q,  $J = 32.0$  Hz), 125.1 (dq,  $J = 3.0$  Hz, 2C), 124.1 (q,  $J = 271.0$  Hz), 124.0 (q,  $J = 271.0$  Hz), 123.7, 123.4 (q,  $J = 285.0$  Hz), 117.9, 115.9, 58.2 (q,  $J = 30.0$  Hz).

# 致谢

---

本课件内容部分参考了上海有机所卿凤翎, 胡金波等老师的授课课件, 在此对所有有机所及国内从事氟化学研究的老师们表示敬意与感谢!