



# 席夫碱的制备与结构 表征

汇报人：

2024-01-15



# CATALOGUE

## 目录

- 引言
- 席夫碱的制备
- 席夫碱的结构表征
- 席夫碱的性质研究
- 席夫碱的应用研究
- 结论与展望





# PART 01

# 引言



REPORTING



CATALOGUE

# 研究背景与意义

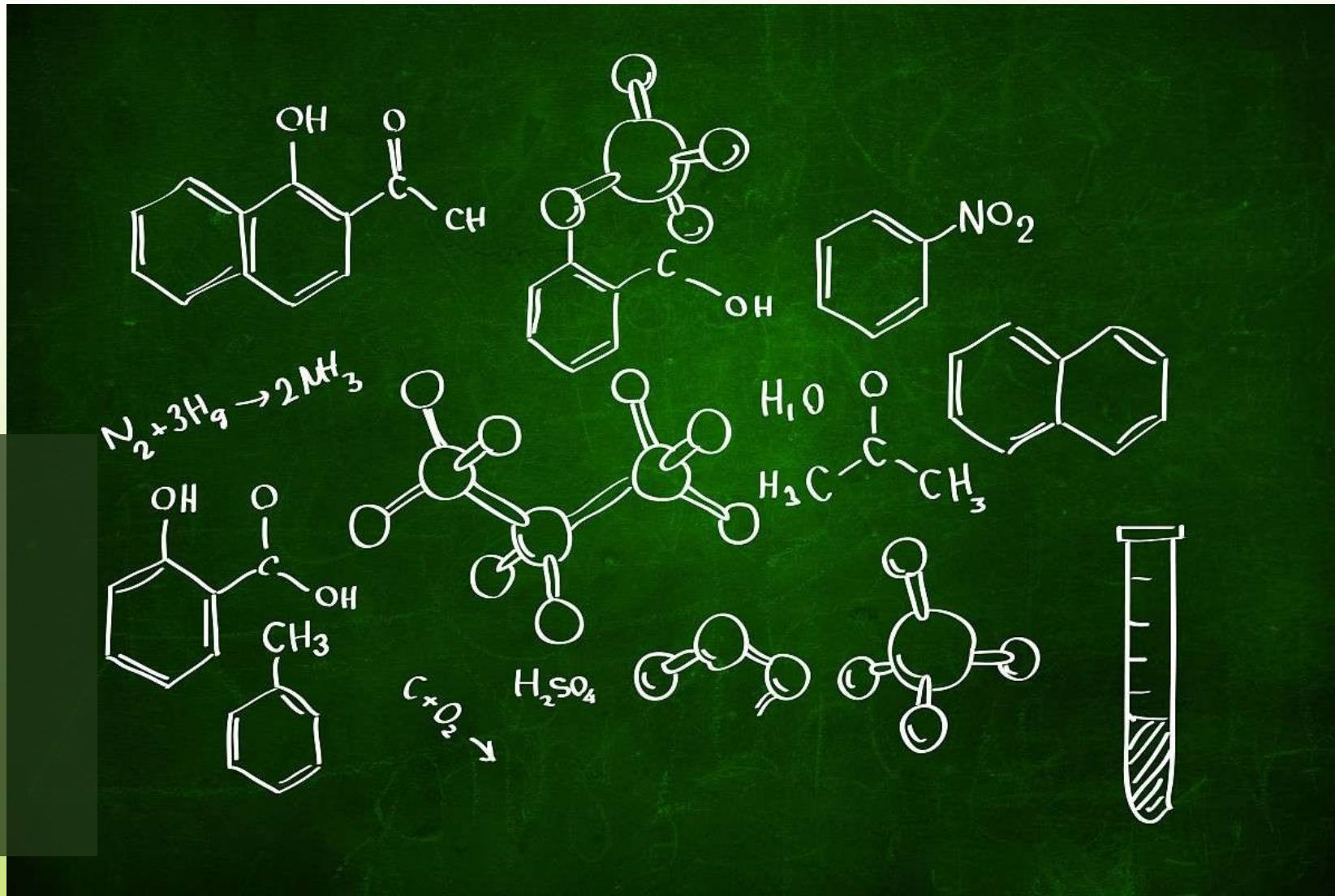


## 席夫碱的重要性

席夫碱是一类具有广泛生物活性和药理作用的化合物，对于药物设计、合成及新药开发具有重要意义。

## 结构表征的必要性

为了深入了解席夫碱的构效关系、药理作用机制及潜在的药物相互作用，需要对其进行准确的结构表征。



# 国内外研究现状及发展趋势

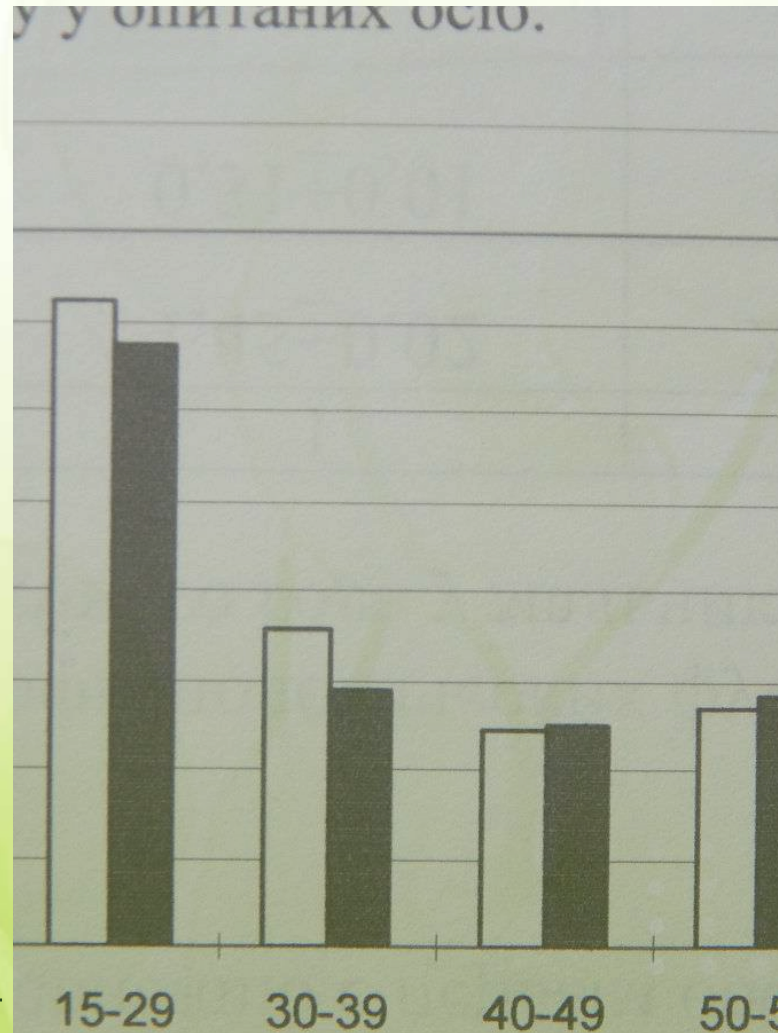


## 国内外研究现状

目前，国内外学者在席夫碱的制备、结构表征和药理活性研究方面已取得一定进展，但仍存在许多挑战和问题。

## 发展趋势

随着合成方法学、分析化学和计算机模拟等技术的不断发展，席夫碱的制备和结构表征手段将不断完善，为其在药物研发领域的应用提供更多可能性。





# 研究内容、目的和意义



## 研究内容

本研究旨在通过优化席夫碱的制备条件，提高其产率和纯度；同时，利用现代分析技术对席夫碱进行结构表征，揭示其构效关系。

## 研究目的

通过本研究，期望为席夫碱类药物的设计、合成及质量控制提供理论支持和实验依据，推动其在药物研发领域的应用和发展。

## 研究意义

本研究不仅有助于丰富席夫碱类药物的研究内涵，还可为相关领域的科研人员提供有价值的参考信息，促进多学科交叉融合和创新发展。



## PART 02

# 席夫碱的制备





## 醛类

如甲醛、乙醛等，作为席夫碱反应的主要原料之一。



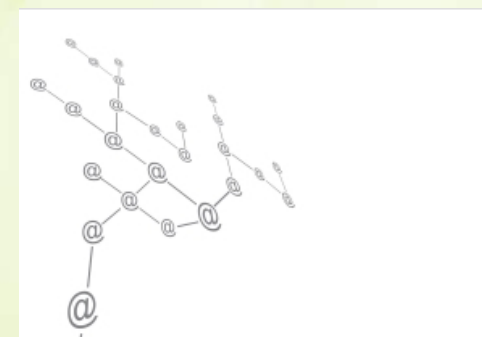
## 胺类

如氨、伯胺、仲胺等，与醛类发生缩合反应形成席夫碱。



## 溶剂

如乙醇、甲醇等，用于溶解原料和试剂，促进反应的进行。

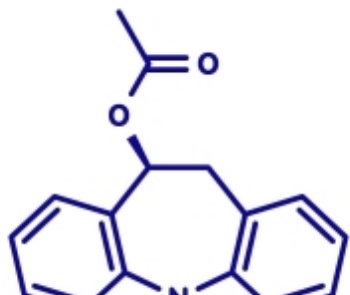


## 催化剂

如酸、碱等，可加速席夫碱反应的进行。

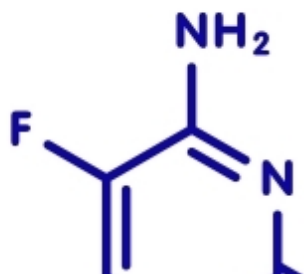


# ●●●● 制备方法步骤



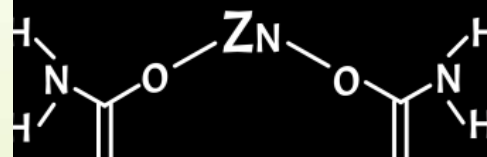
01

1. 将醛类和胺类按一定比例混合，加入适量的溶剂。



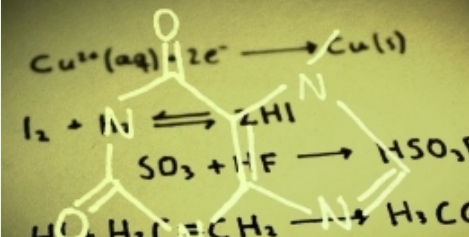
02

2. 在催化剂的作用下，加热回流一定时间，使醛类和胺类充分反应。



03

3. 反应结束后，将反应液冷却至室温，过滤得到席夫碱粗品。



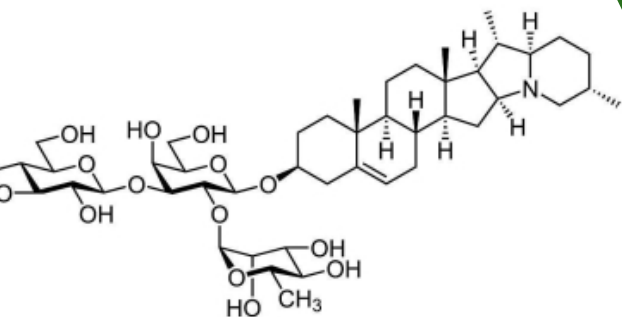
04

4. 对粗品进行重结晶或柱层析等纯化操作，得到纯净的席夫碱产品。

# 产物表征与性质



Solanine



## 物理性质

席夫碱一般为结晶性固体，具有特定的熔点和沸点。

## 化学性质

席夫碱具有还原性，可与氧化剂发生氧化还原反应。同时，席夫碱还具有配位能力，可与金属离子形成配合物。

## 光谱性质

通过红外光谱（IR）、紫外光谱（UV）、核磁共振（NMR）等光谱手段可对席夫碱的结构进行表征。例如，IR谱图中可观察到C=N双键的特征吸收峰；UV谱图中可观察到共轭体系的特征吸收峰；NMR谱图中可观察到氢原子和碳原子的化学位移等信息。



## PART 03

# 席夫碱的结构表征



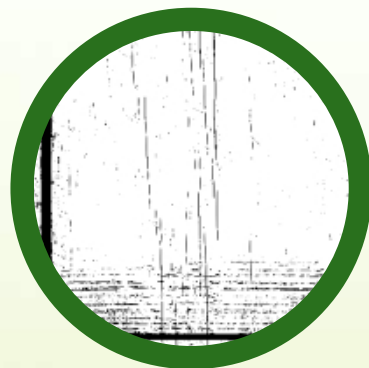


# 红外光谱分析



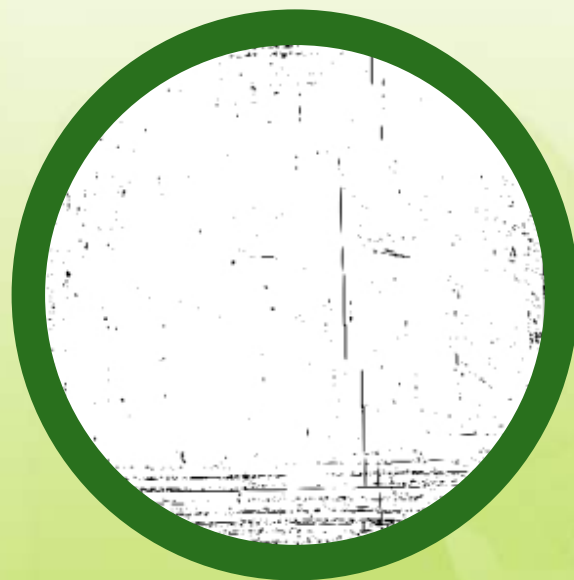
## 官能团识别

红外光谱可用于识别席夫碱中的官能团，如C=N键、羟基、胺基等。特定波数下的吸收峰可对应不同的官能团振动。



## 化学键振动

通过分析红外光谱中的吸收峰位置、强度和形状，可以推断出席夫碱分子中化学键的类型和振动模式。



## 结构鉴定

红外光谱还可用于鉴定席夫碱的异构体或确定其立体构型，通过比较不同异构体或构型的红外光谱特征差异。



# 核磁共振波谱分析

1

## 氢谱分析

通过核磁共振氢谱 ( $^1\text{H}$  NMR) 可以确定席夫碱分子中氢原子的种类和数目, 以及它们所处的化学环境。

2

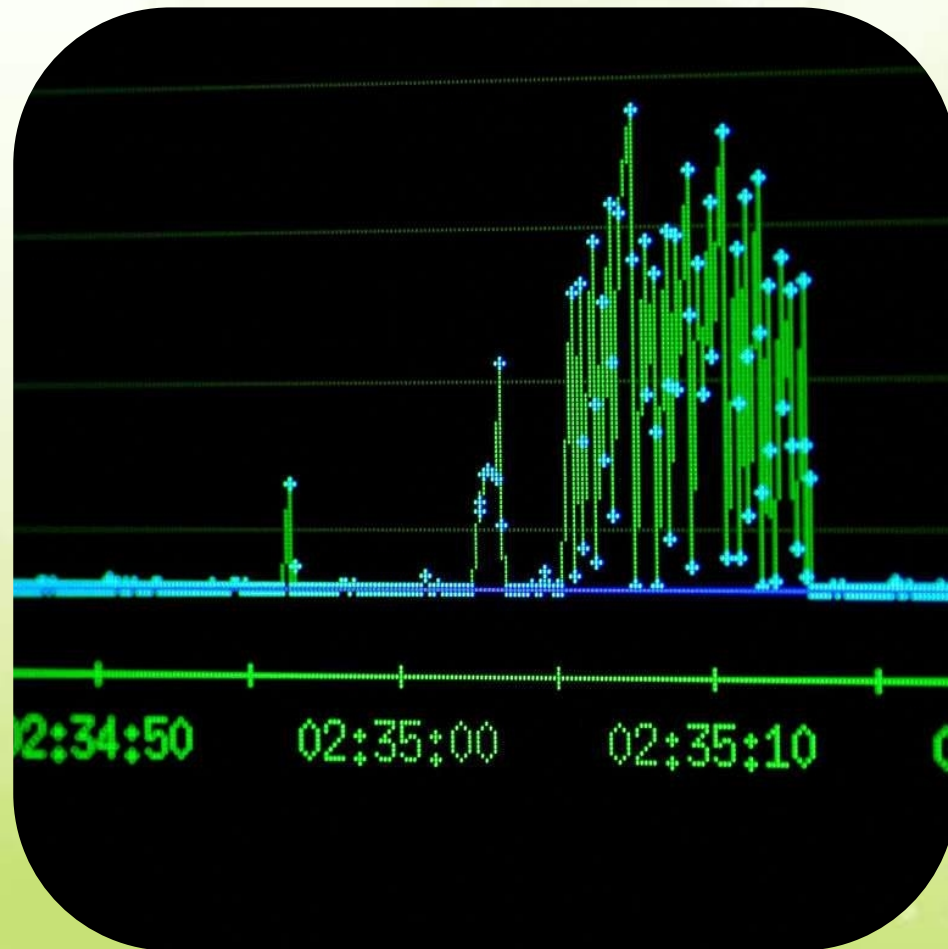
## 碳谱分析

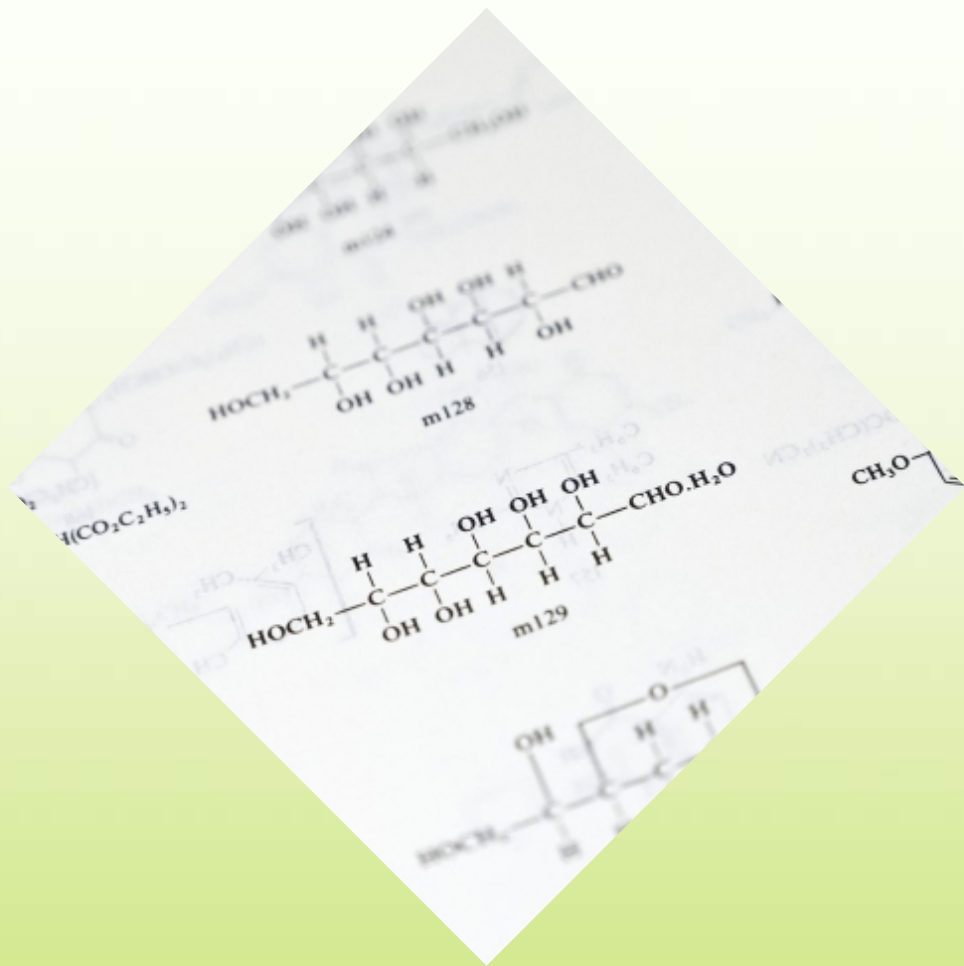
核磁共振碳谱 ( $^{13}\text{C}$  NMR) 可以提供席夫碱分子中碳原子的类型、数目和化学环境信息。

3

## 结构推断

结合氢谱和碳谱数据, 可以推断出席夫碱的分子结构, 包括官能团的位置、碳骨架的连接方式等。





## 分子质量测定

质谱分析可以确定席夫碱分子的相对分子质量，从而验证其分子式。

## 碎片离子分析

通过分析质谱中的碎片离子峰，可以了解席夫碱分子的裂解方式和结构特点。

## 结构确认

结合其他表征手段，如红外光谱和核磁共振波谱，质谱数据可以为席夫碱的结构确认提供有力支持。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：  
<https://d.book118.com/916102115122010151>