

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет естественных наук
Кафедра общей химии

АТЛАС СПЕКТРОВ ЯМР

для студентов 2 курса
факультета естественных наук и
медицинского факультета

Новосибирск
2011

Учебно-методическое пособие предназначено для студентов 2-го курса ФЕН специальности «Химия» и «Биология», а так же для студентов 2-го курса медицинского факультета, проходящих практикум по органической химии. Содержит спектры ЯМР некоторых базовых органических соединений, а также ряда соединений, синтезируемых в рамках практикума, интерпретацию спектров с отнесением сигналов относительно структурной формулы соединения.

Составители:

доц. К. Ю. Колтунов, ст. преп. А. В. Головин, доц. И. В. Ельцов

© Новосибирский государственный
университет, 2011

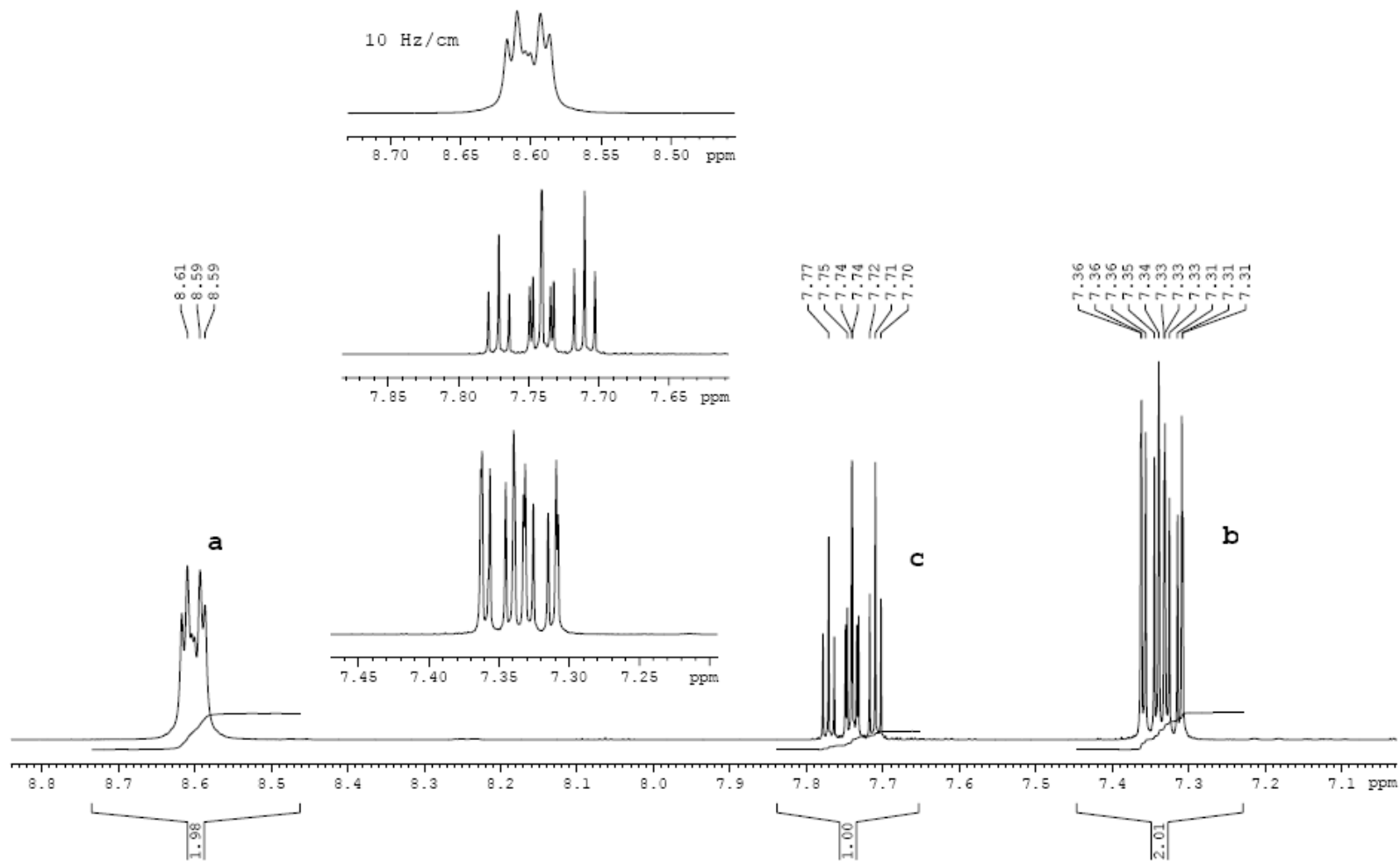
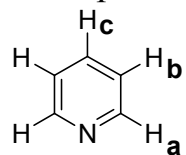
Содержание.

1. Пиридин.....	4
2. 1,3 - бутадиен.....	5
3. Октановая кислота.....	6
4. Акрилонитрил.....	7
5. Акриламид.....	8
6. Акриловая кислота.....	9
7. Акролеин.....	10
8. Аллиламид.....	11
9. N-Аллилацетамид.....	12
10. Бутен-1.....	13
11. Пропен.....	14
12. Аллиловый спирт.....	15
13. Эпихлоргидрин (1 – хлор – 2,3 – эпоксипропан).....	16
14. 2-Цианопиридин.....	17
15. Дибутилфталат.....	18
16. 1-Нитропропан.....	19
17. Этиловый спирт.....	20
18. Изопропиловый спирт (пропан–2–ол).....	21
19. Фурфурол (2-формилфуран).....	22
20. Этилформиат.....	23
21. 1,2 – Дифенилэтан.....	24
22. <i>n</i> -Нитротолуол (1 – метил – 4 – нитробензол).....	25
23. Бензойная кислота.....	26
24. Этилбензоат.....	27
25. <i>n</i> -Метоксибензойная кислота (анисовая кислота).....	28
26. <i>n</i> -Этоксibenзойная кислота.....	29
27. 2 – Фенилэтанол (β -фенилэтиловый спирт).....	30
28. Ацетофенон.....	31
29. Диэтилмалонат (диэтиловый эфир малоновой кислоты).....	32
30. Коричная (<i>транс</i> - β -фенилакриловая) кислота.....	33
31. Этиловый эфир коричной кислоты.....	34
32. <i>n</i> -Толуилглицин ((4-метил)бензоиламиноуксусная кислота).....	35
33. Этиловый эфир <i>n</i> -аминобензойной кислоты.....	36
34. Дибензальацетон.....	37
35. Этиловый эфир фенилуксусной кислоты.....	38
36. Гептан-2-он.....	39
37. 4-Оксопентановая кислота (γ -кетовалериановая кислота, левулиновая кислота).....	40
38. Этиловый эфир 4-оксопентановой кислоты.....	41
39. Кумарин.....	42
40. 2-Метилбутанол-2.....	43
41. 4-Метилфенолацетат.....	44
42. Пропилацетат.....	45
43. Бутанол-1.....	46
Растворители для исследования методом ЯМР.....	47
Список литературы, рекомендуемый для самостоятельной интерпретации спектров.....	48

1. Пиридин.

Растворитель: дейтерированный ацетон

Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.

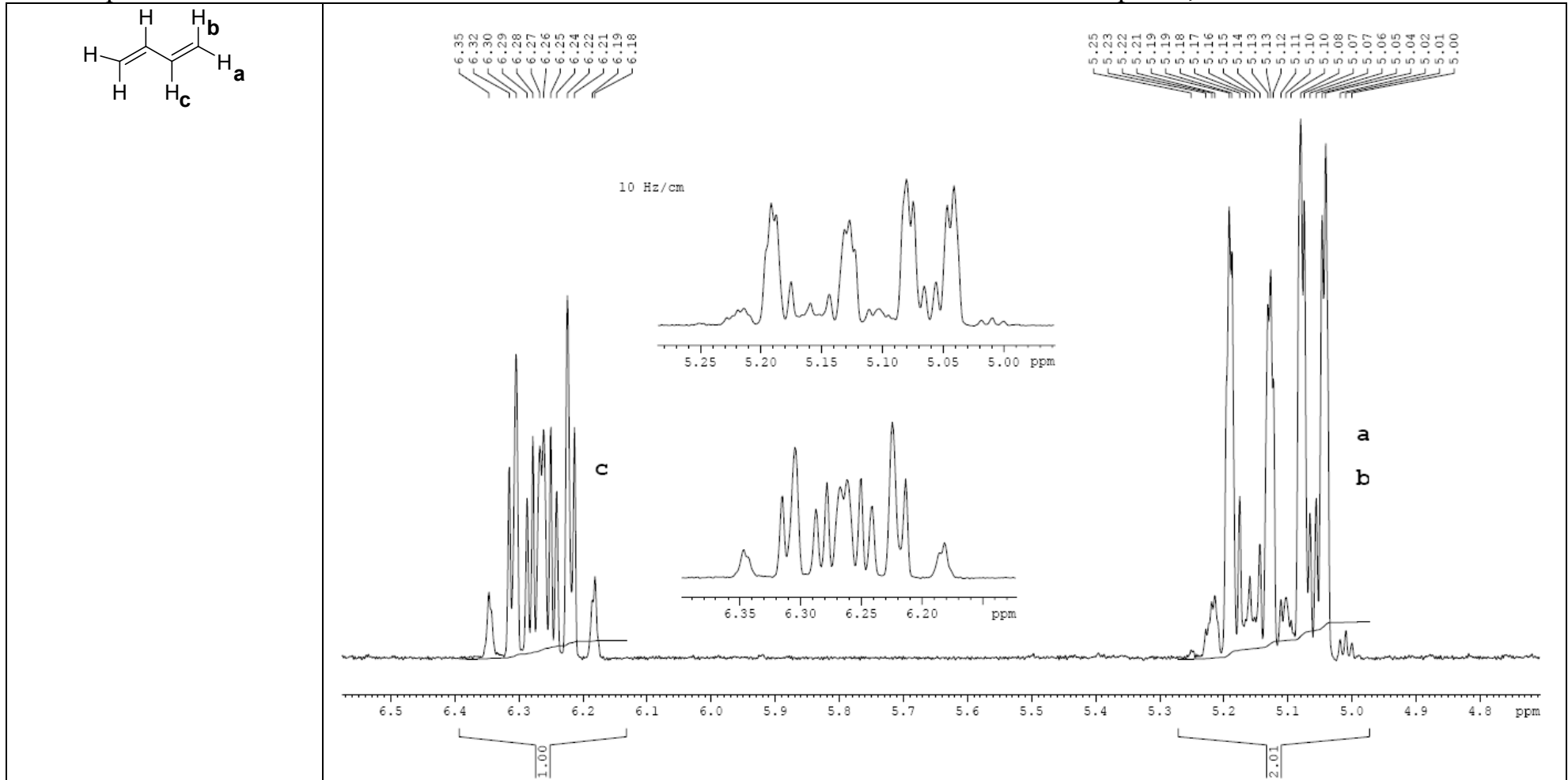


2. 1,3 - бутадиен.

Растворитель: четыреххлористый углерод

Стандарт: ТМС

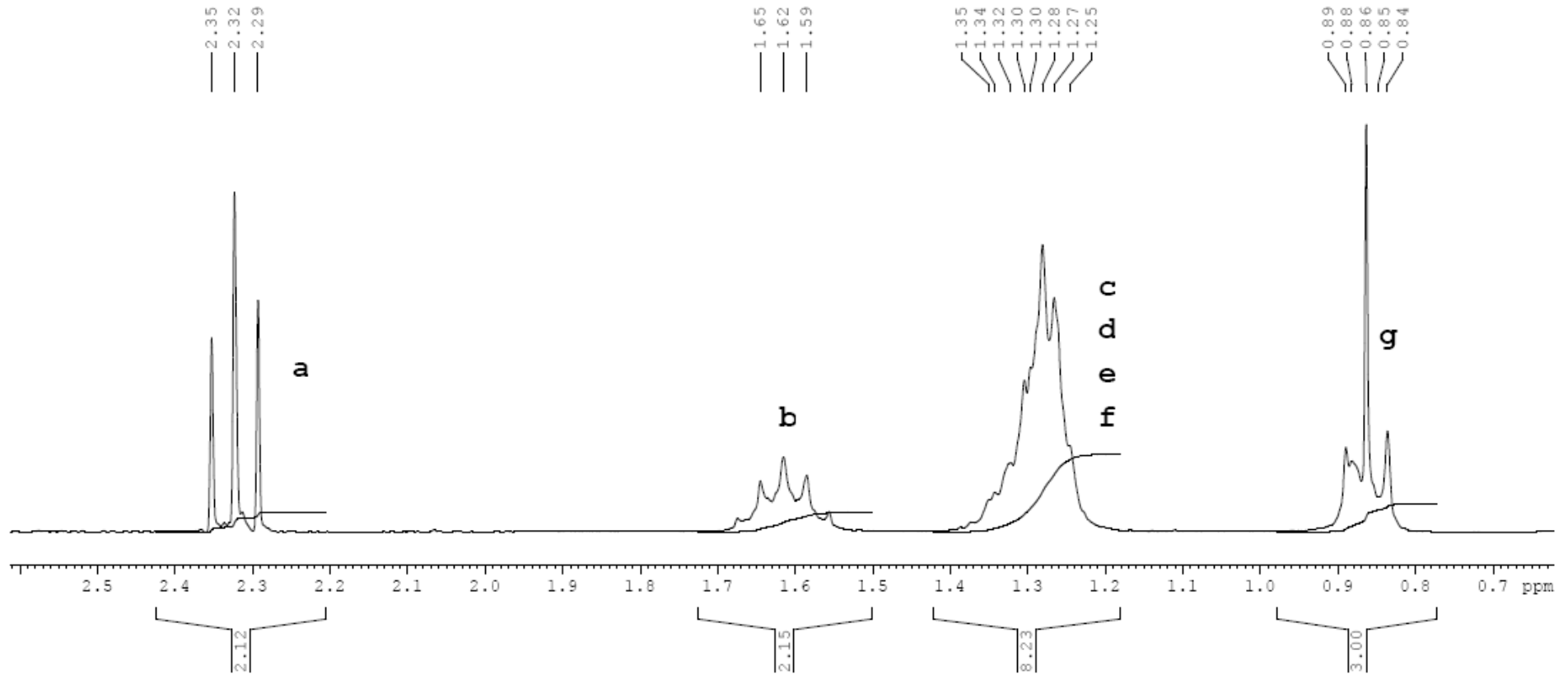
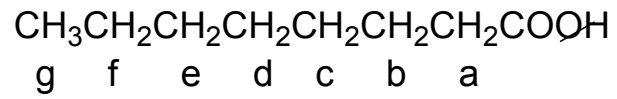
Химический сдвиг стандарта: 0,00 м.д.



3. Октановая кислота.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

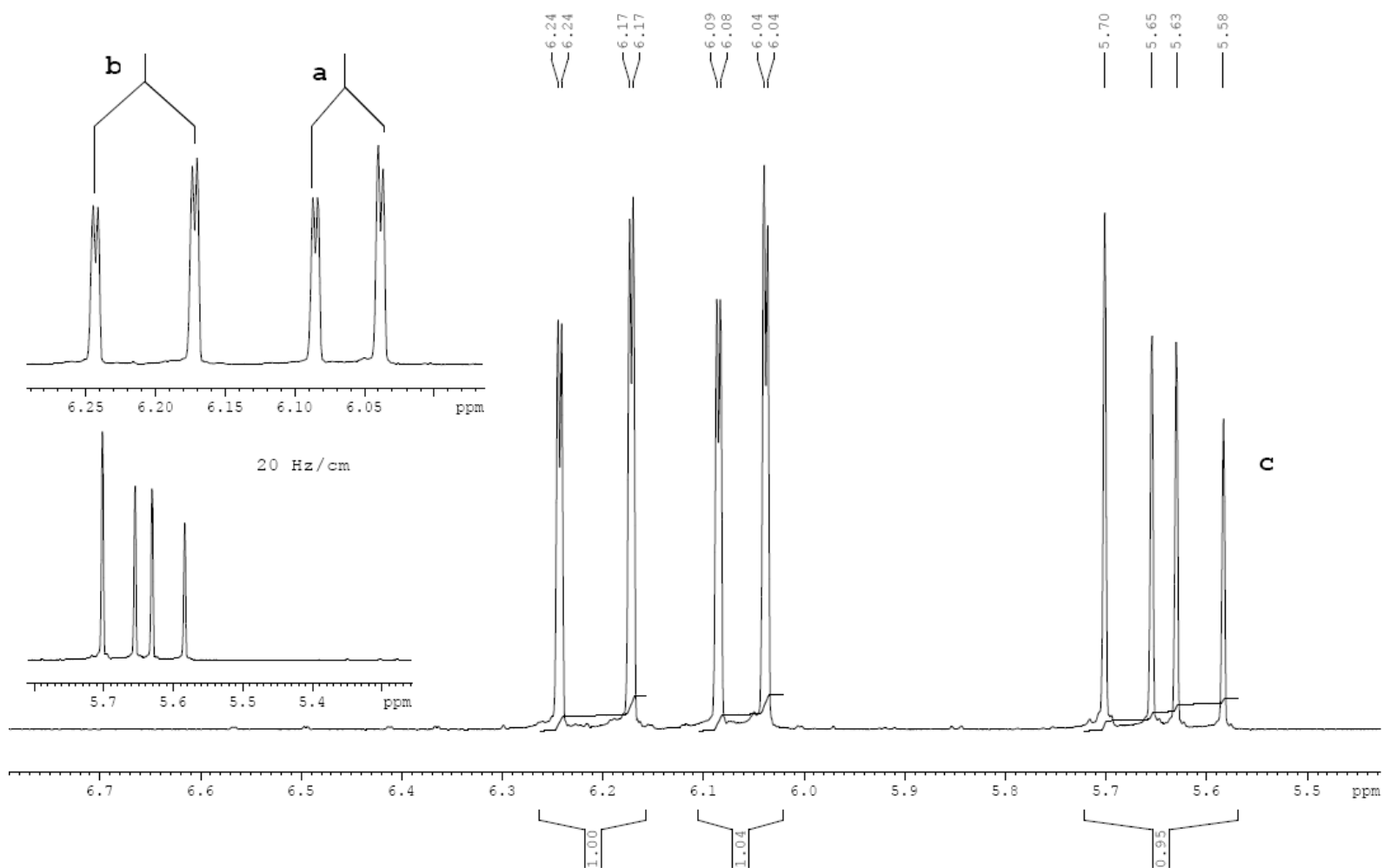
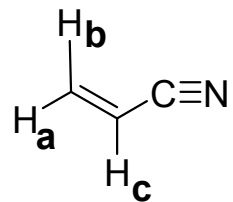
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



4. Акрилонитрил.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

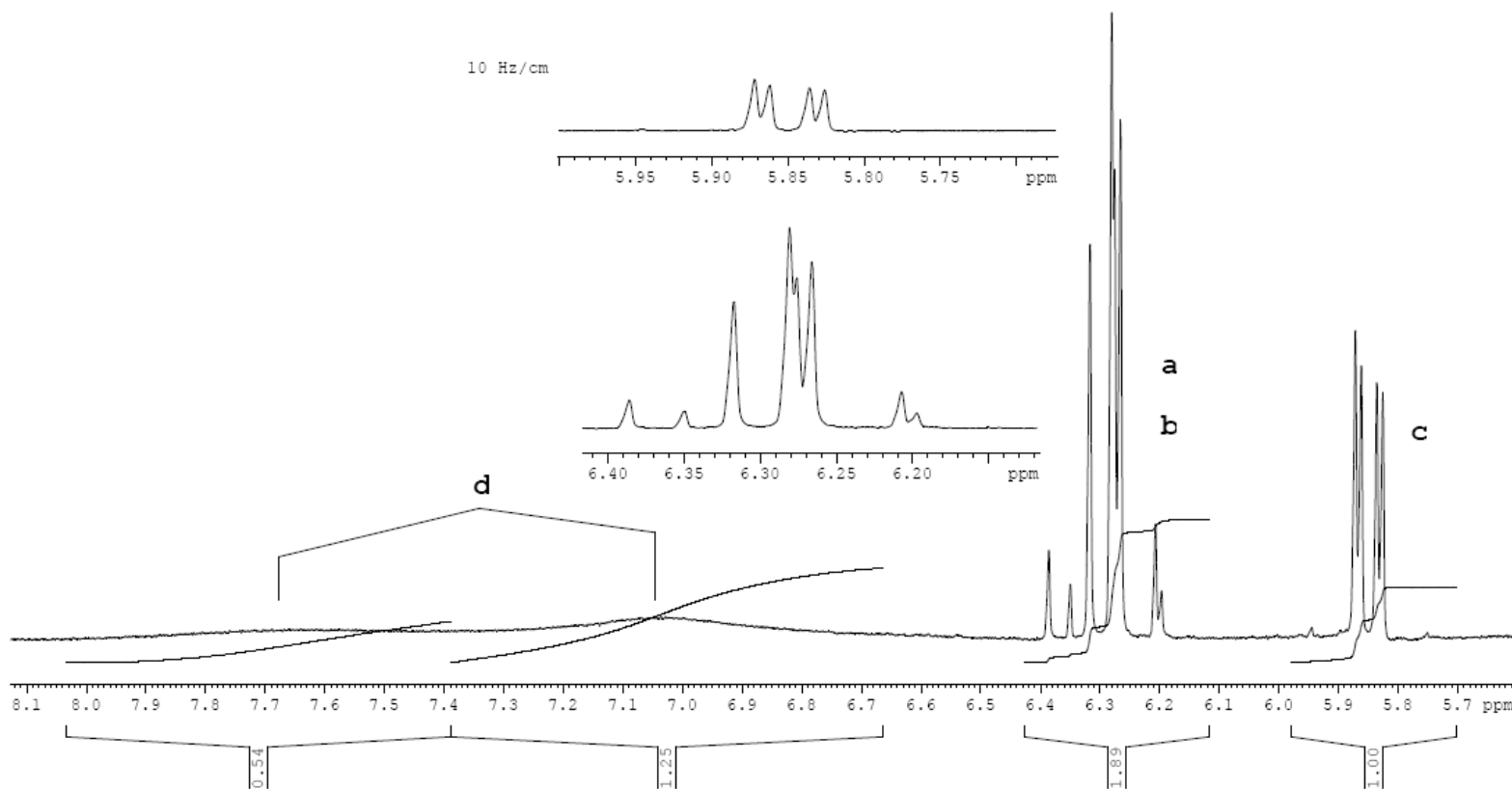
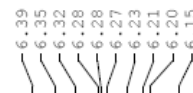
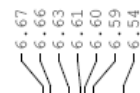
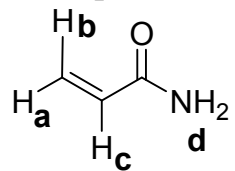
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



5. Акриламид.

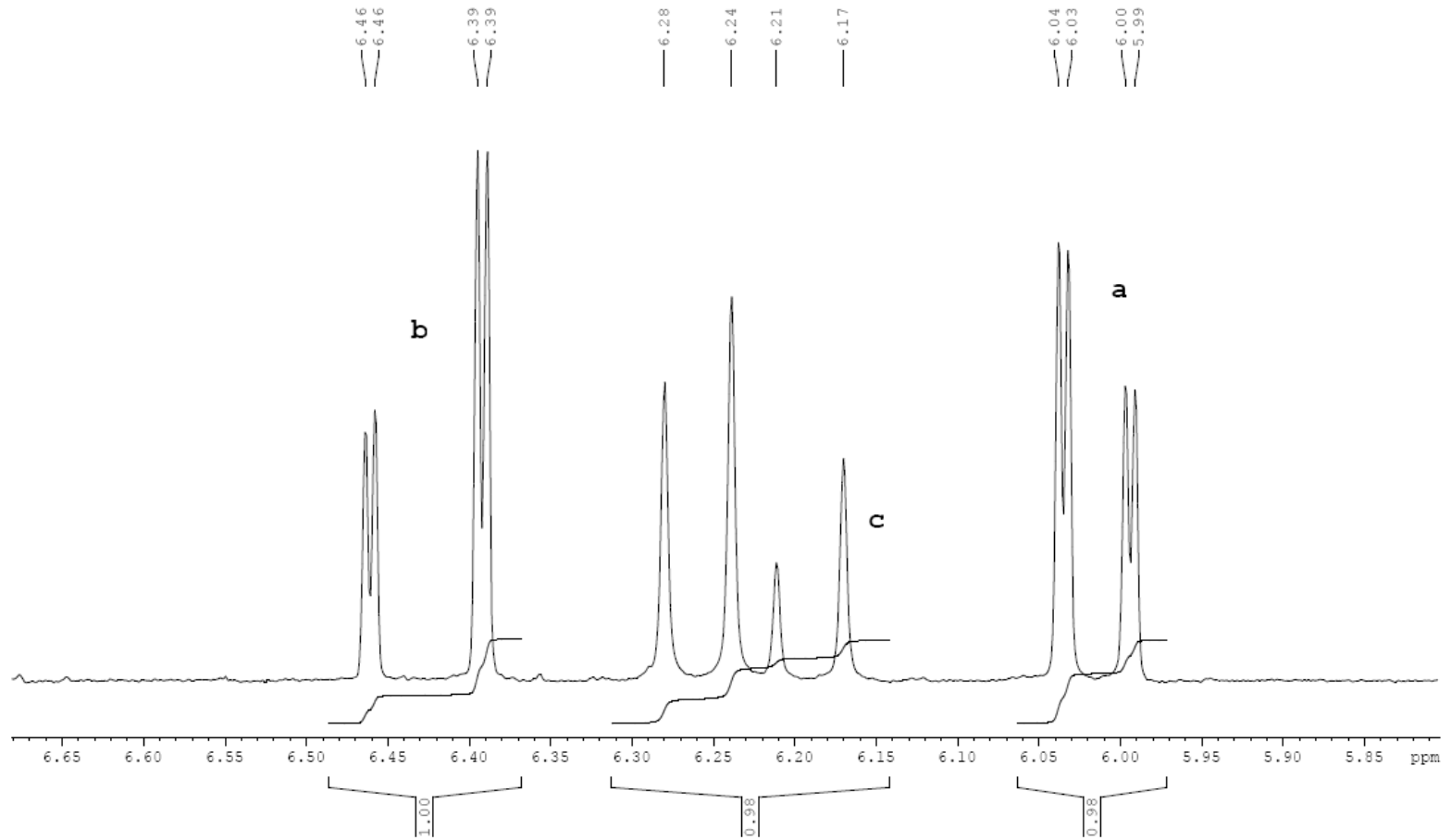
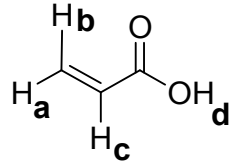
Растворитель: дейтерированный хлороформ

Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



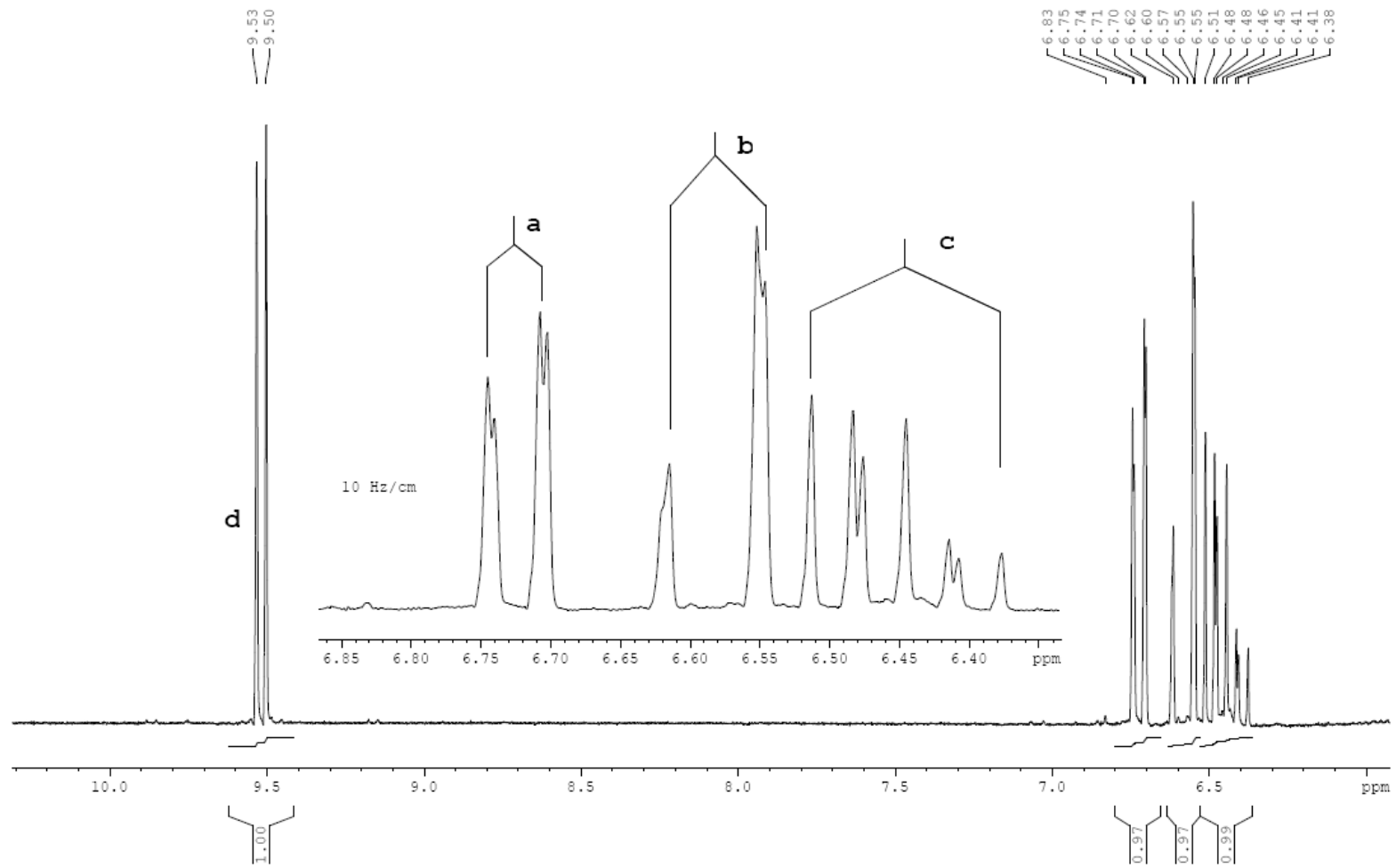
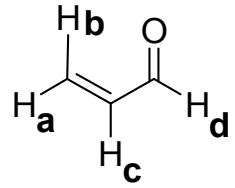
6. Акриловая кислота

Растворитель: дейтерированная вода



7. Акролеин.

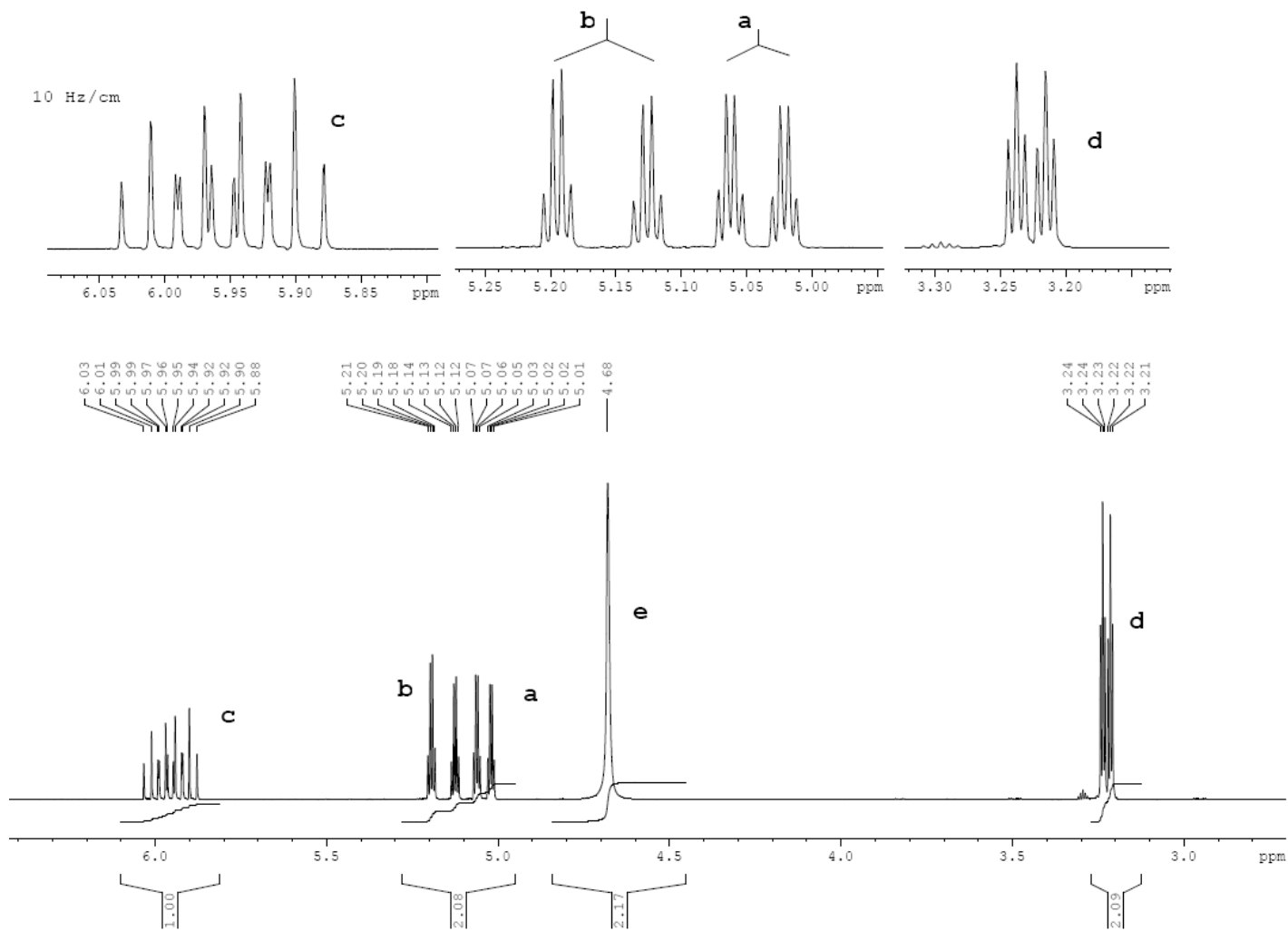
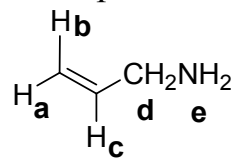
Растворитель: дейтерированная вода.



8. Аллиламид.

Растворитель: дейтерированный метанол

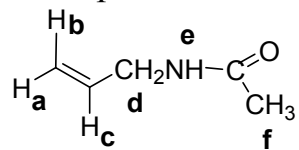
Химический сдвиг стандарта: 3,34 м.д.



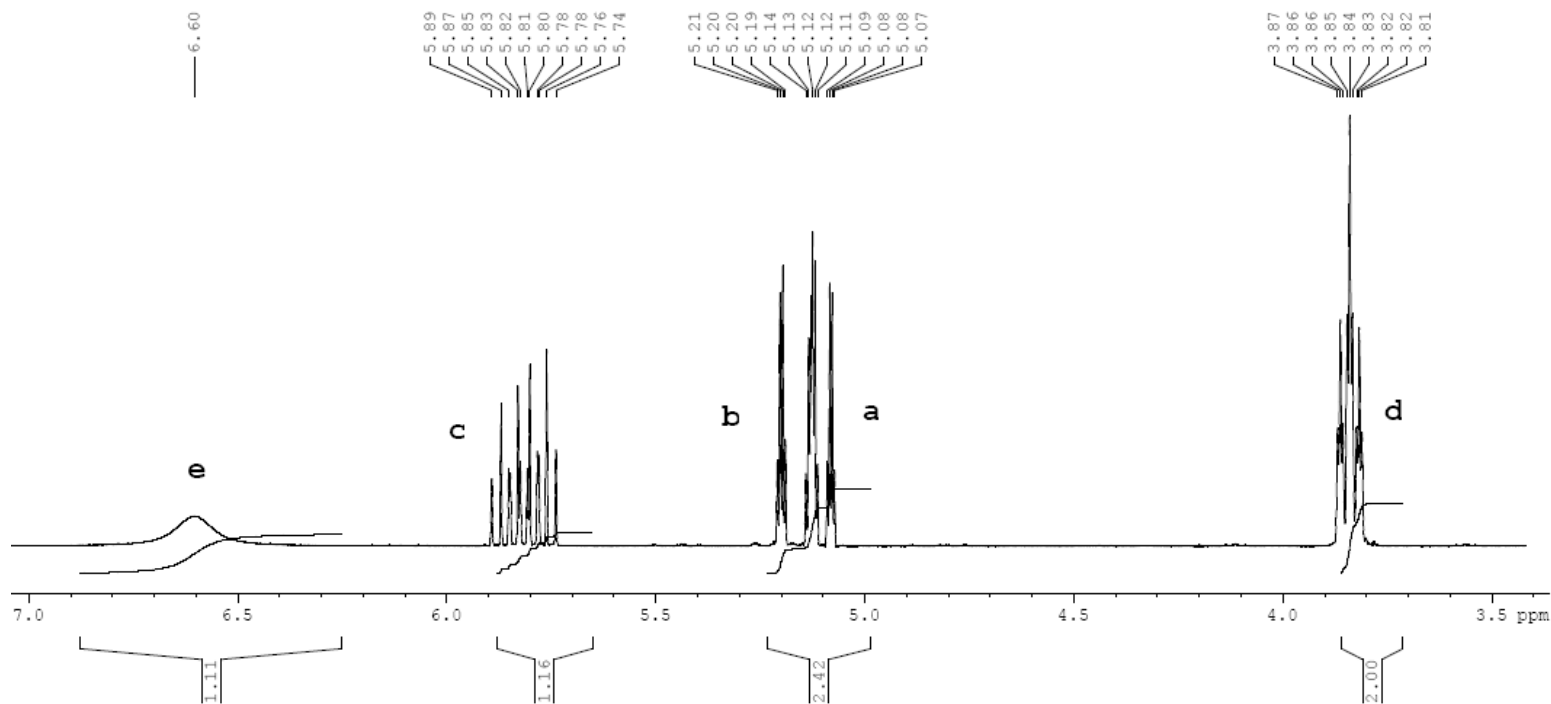
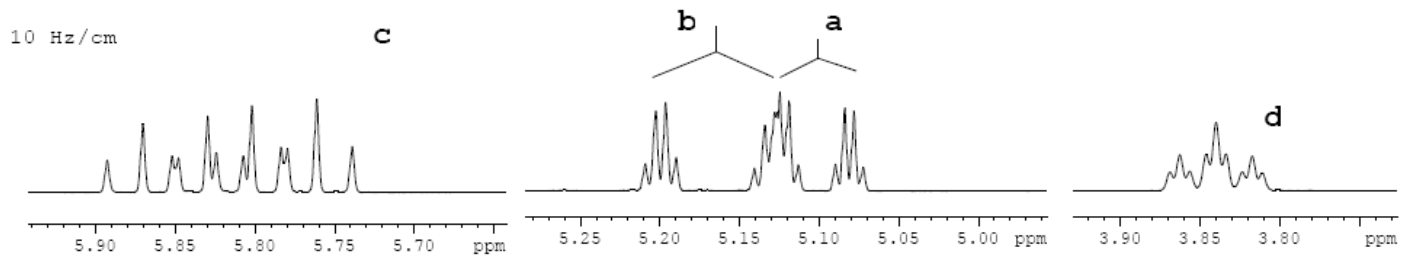
9..N-Аллилацетамид

Растворитель: дейтерированный хлороформ

Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



10 Hz/cm

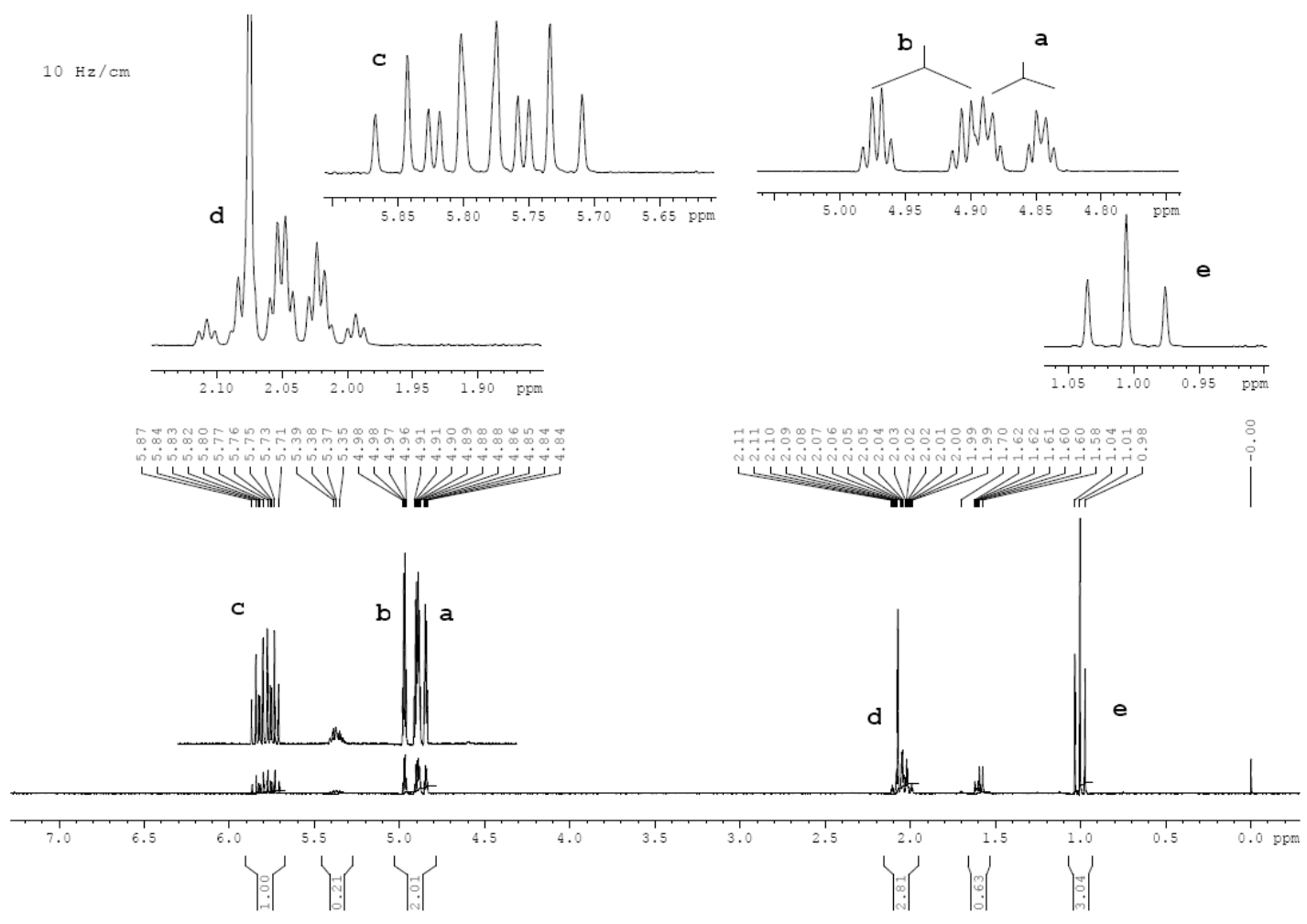
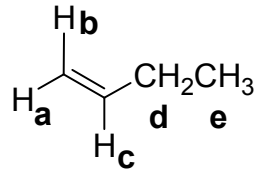


10. Бутен-1.

Растворитель: четыреххлористый углерод.

Стандарт: TMS

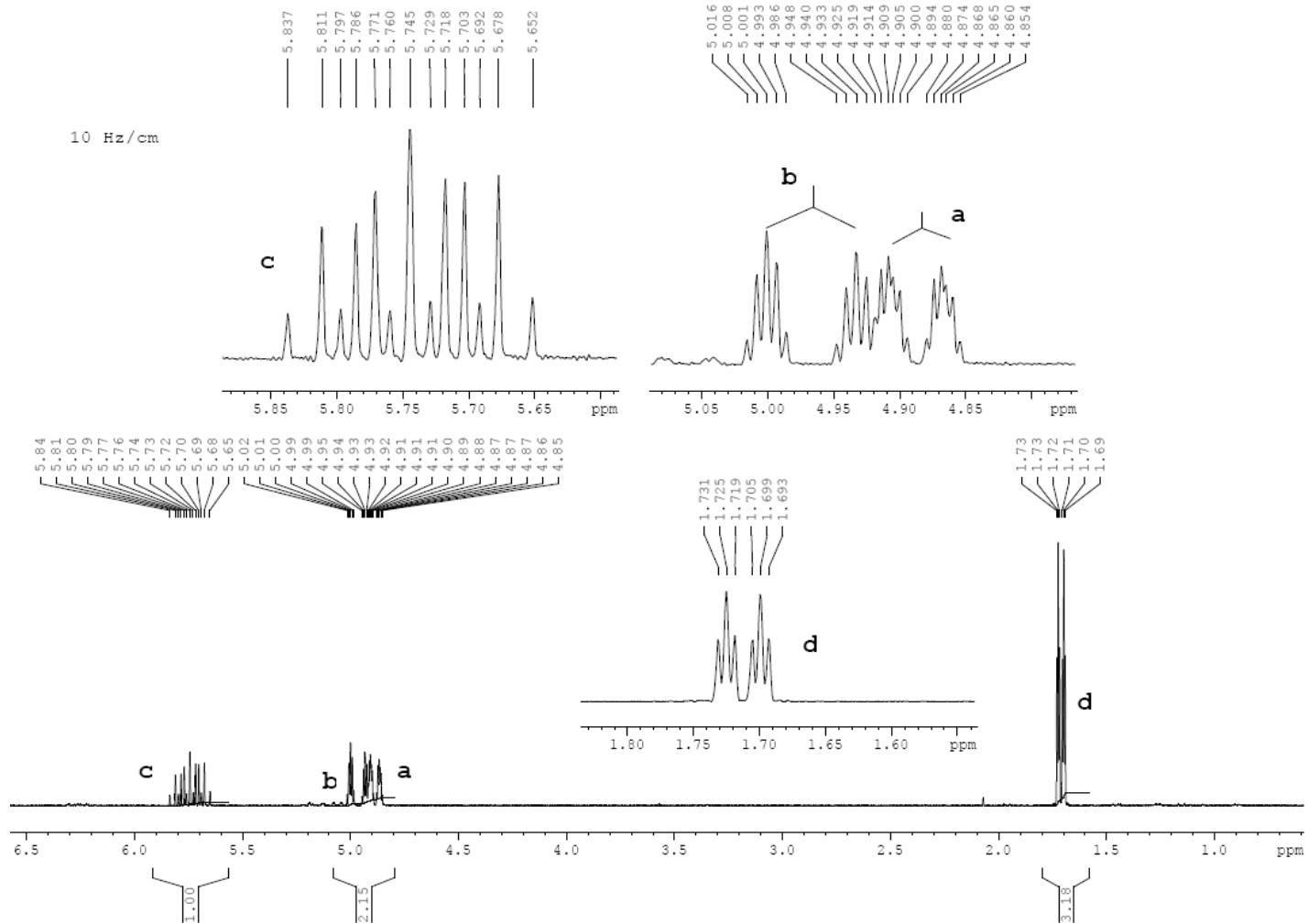
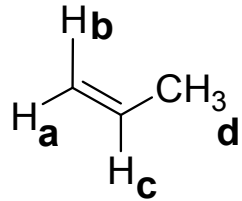
Химический сдвиг стандарта: 0,00 м.д.



11. Пропен.

Растворитель: четыреххлористый углерод
Стандарт: TMS

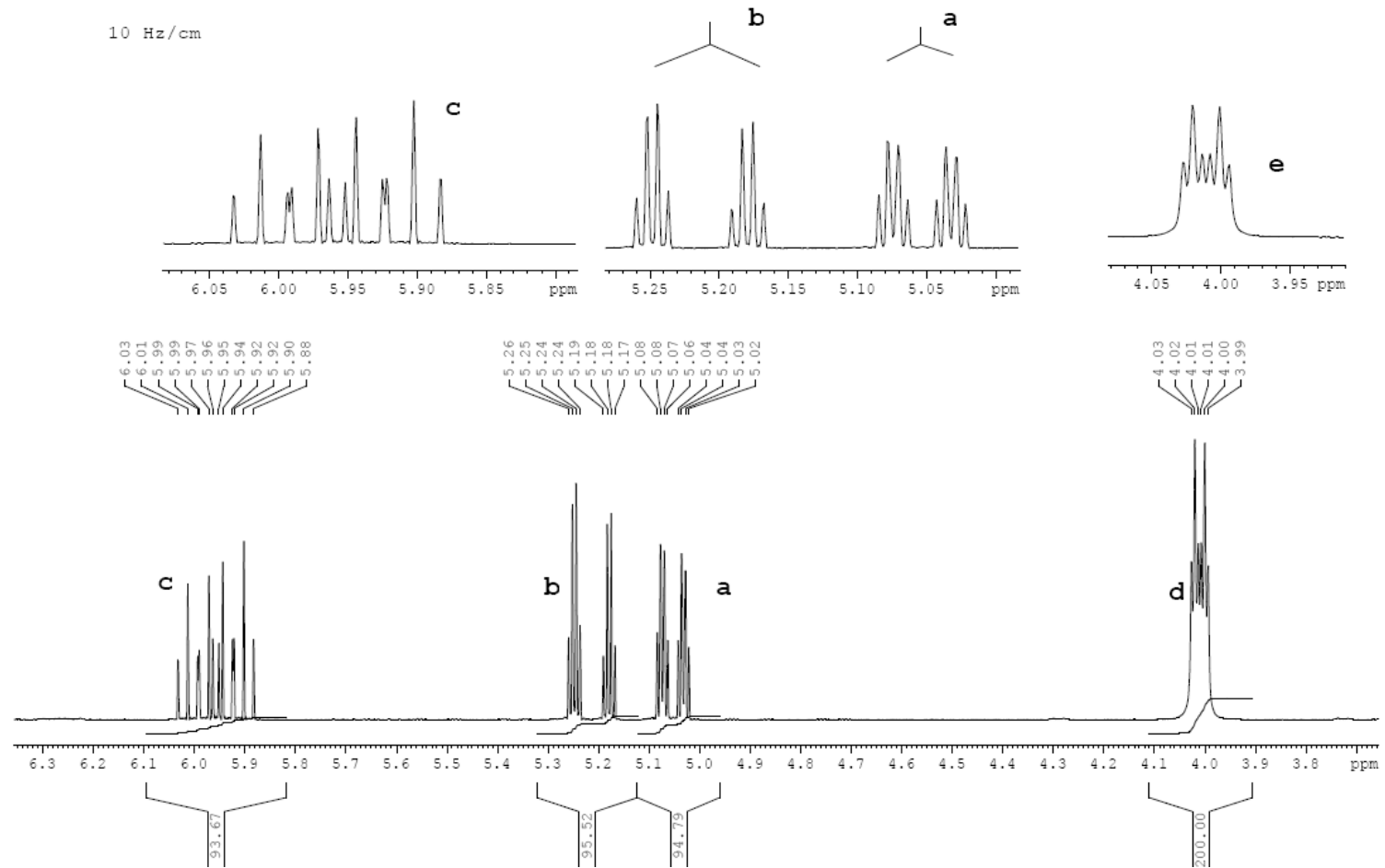
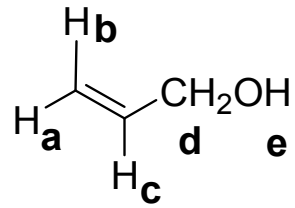
Химический сдвиг стандарта: 0,00 м.д.



12. Аллиловый спирт.

Растворитель: дейтерированный ацетонитрил

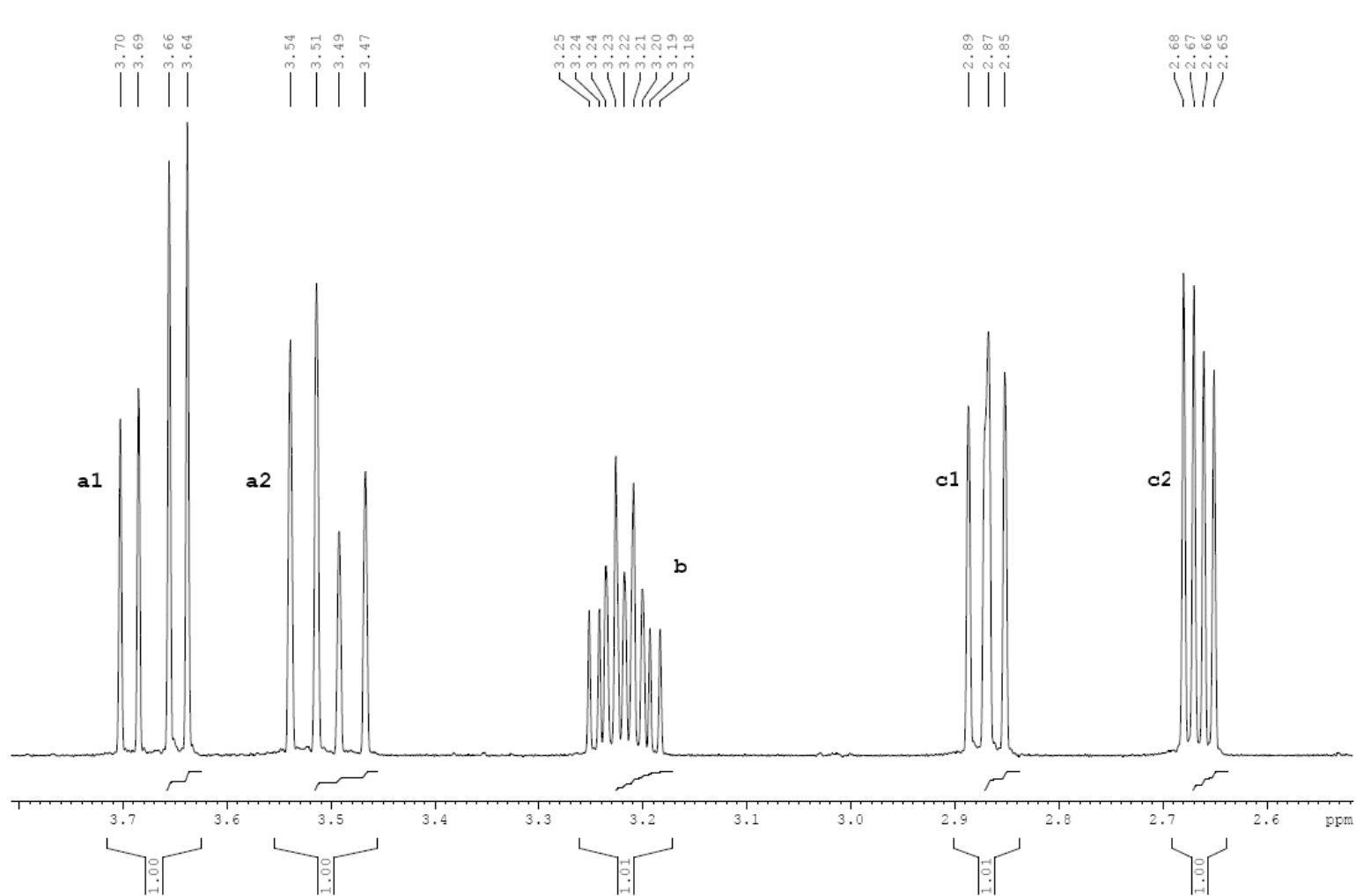
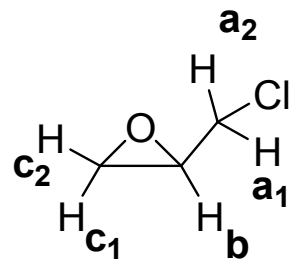
Химический сдвиг стандарта: 1,96 м.д.



13. Эпихлоргидрин (1 – хлор – 2,3 – эпоксипропан).

Растворитель: дейтерированный метилен

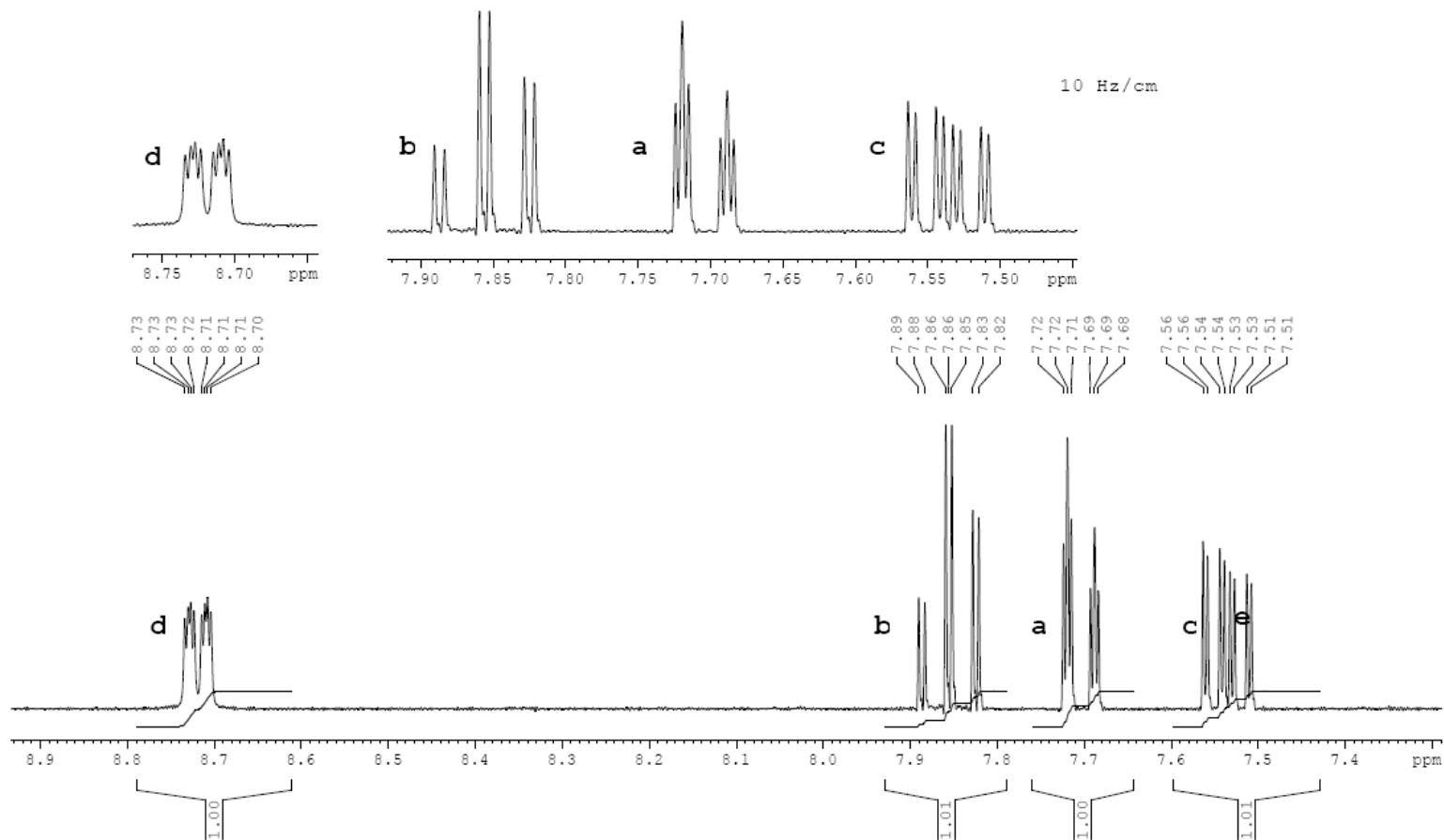
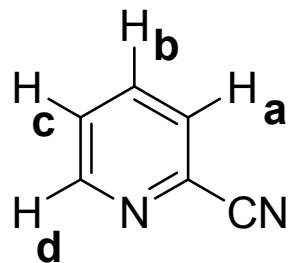
Химический сдвиг стандарта: 5,28 м.д.



14. 2-Цианопиридин

Растворитель: дейтерированный хлороформ

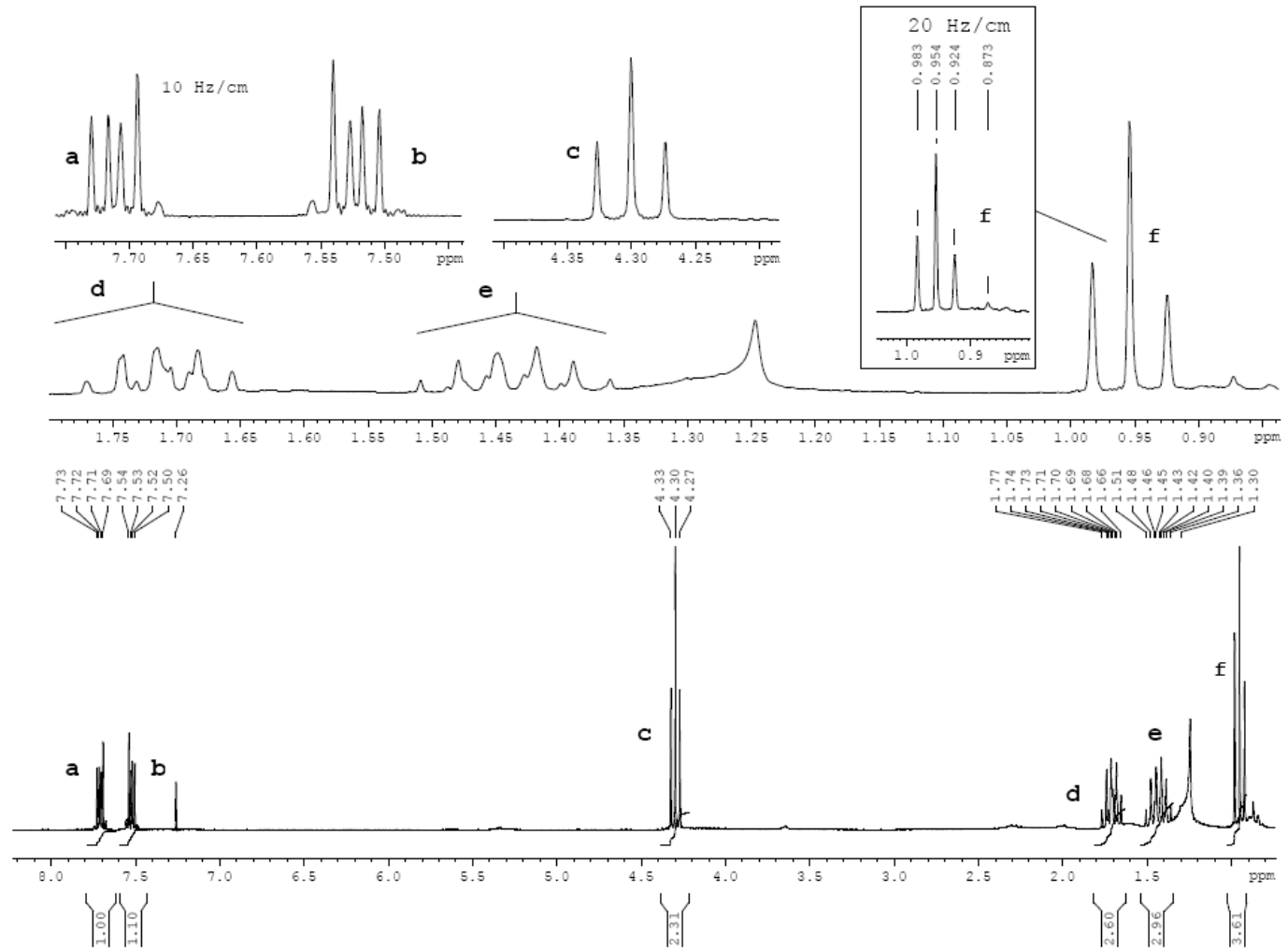
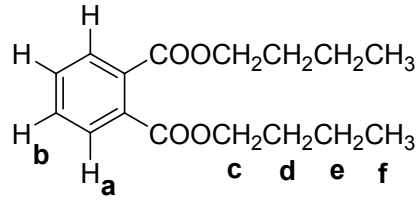
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



15. Дибутилфталат

Растворитель: дейтерированный хлороформ

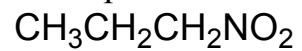
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



16. . 1-Нитропропан.

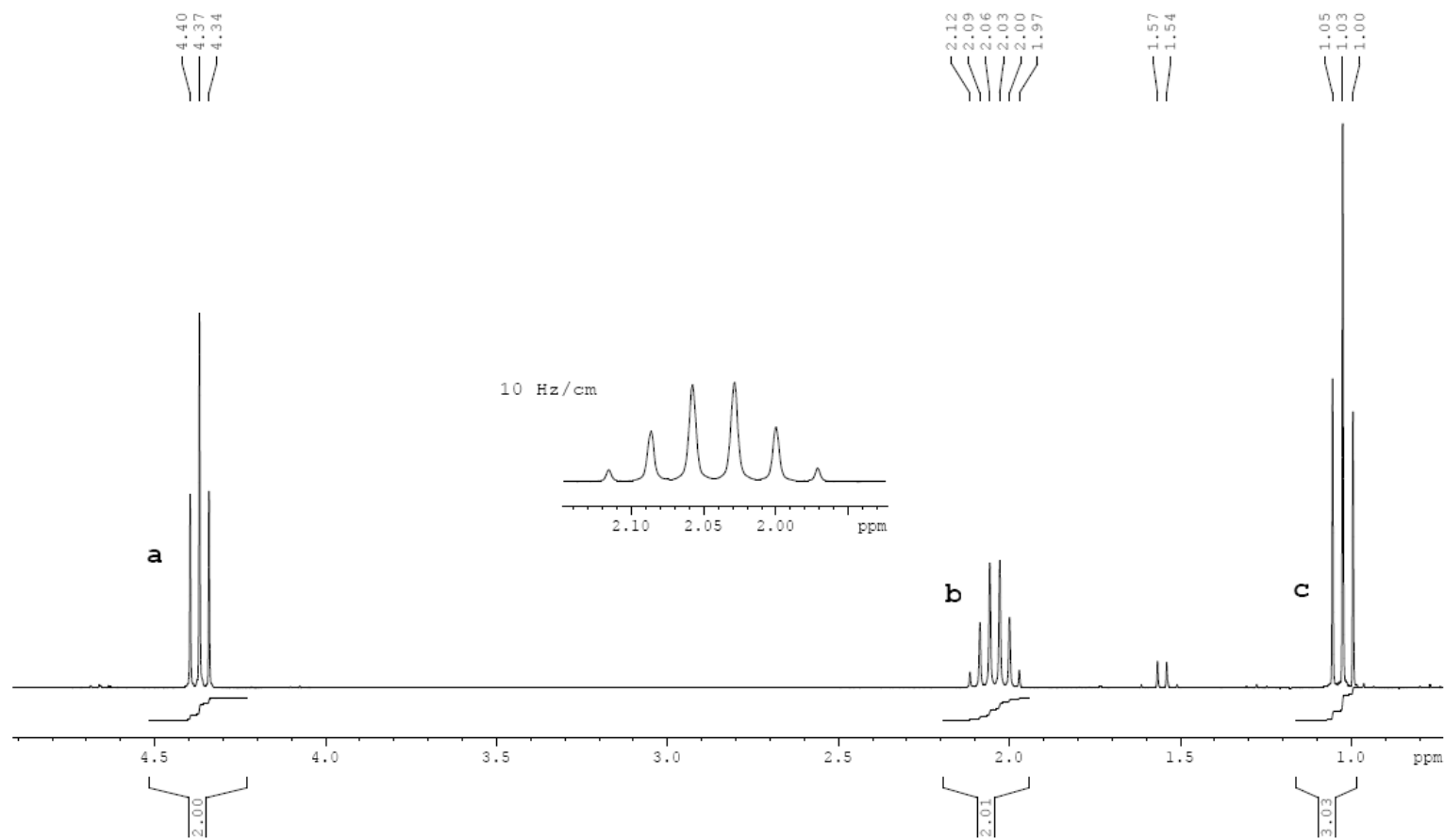
Растворитель: дейтерированный хлороформ

Стандарт: TMC



c b a

Химический сдвиг стандарта: 0,00 м.д.



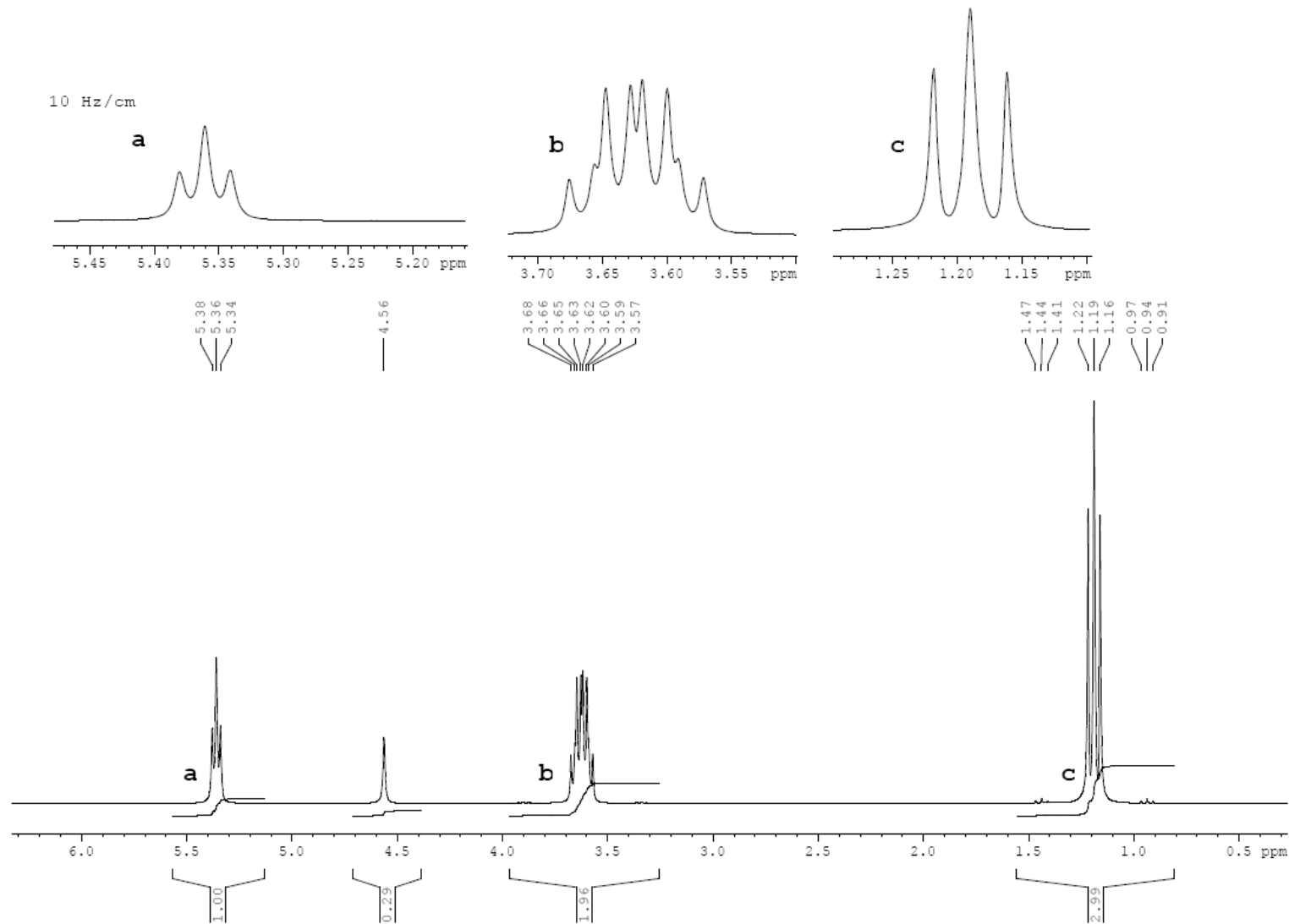
17. Этиловый спирт.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



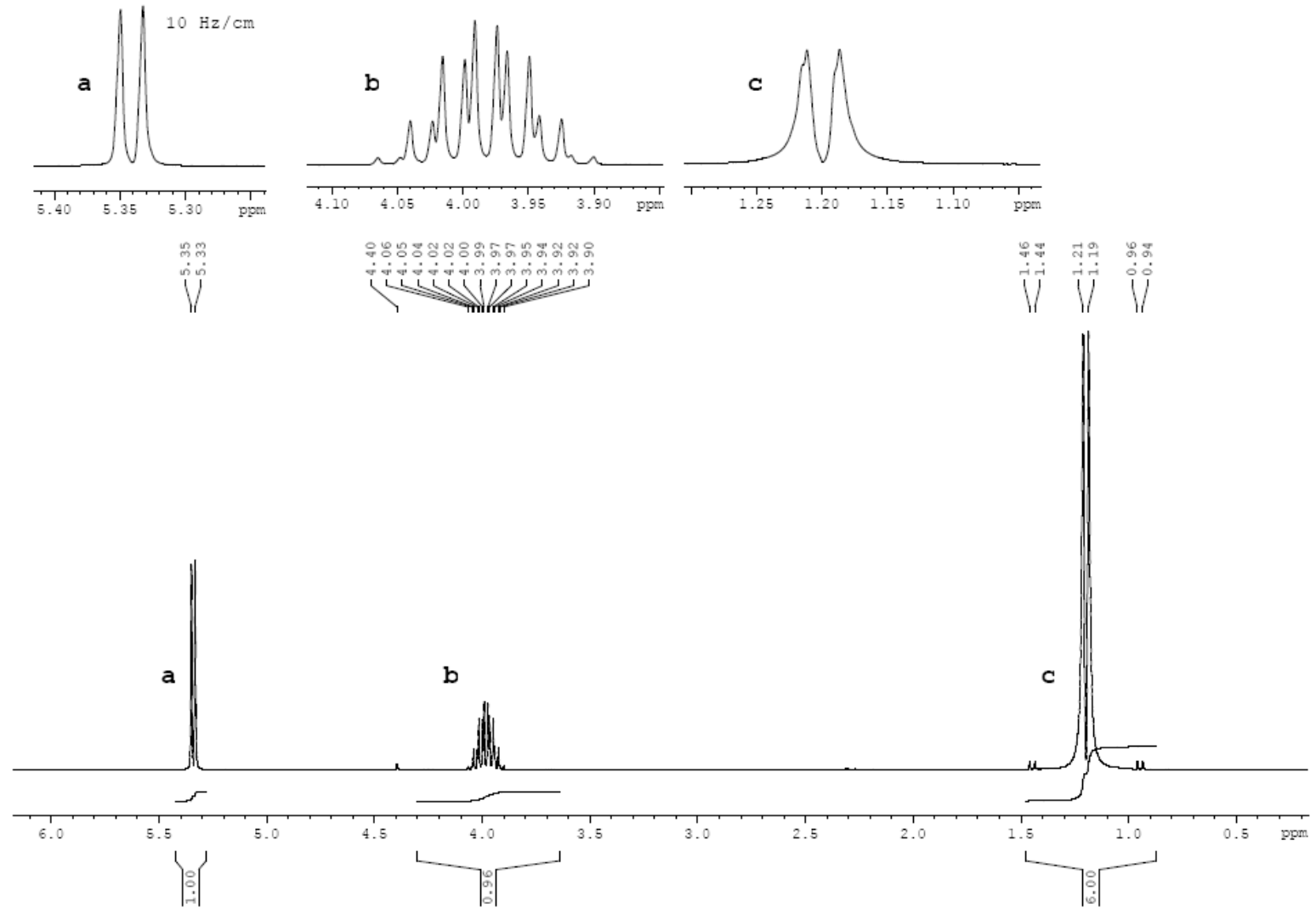
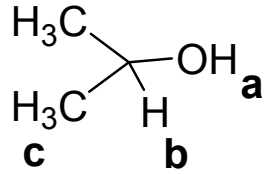
c b a



18. Изопропиловый спирт (пропан-2-ол).

Растворитель: дейтерированный хлороформ

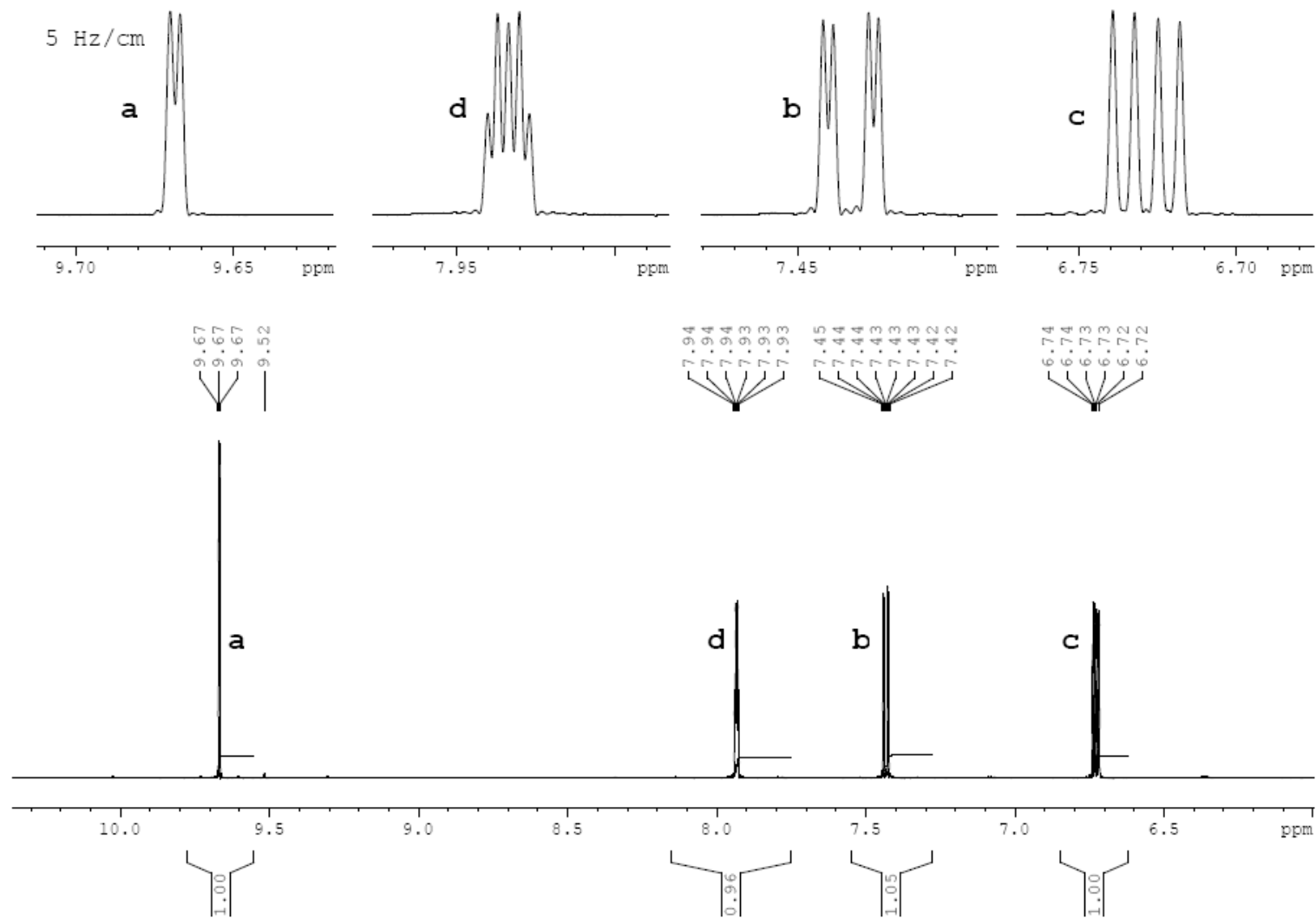
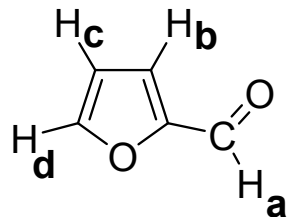
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



19. Фурфурол (2-формилфуран).

Растворитель: дейтерированный ацетон

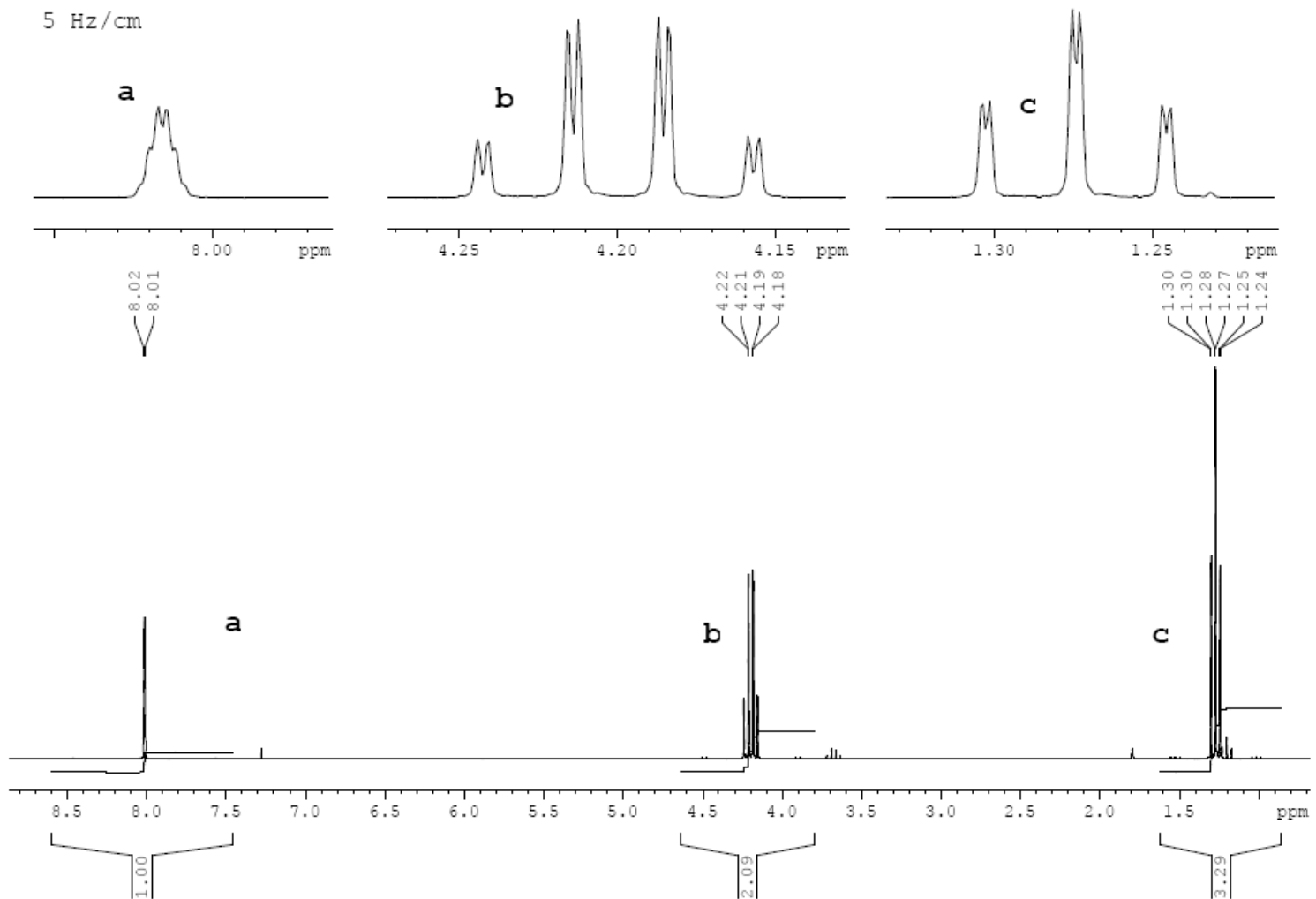
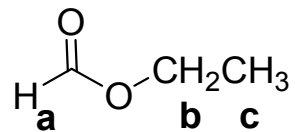
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



20. Этилформиат.

Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.

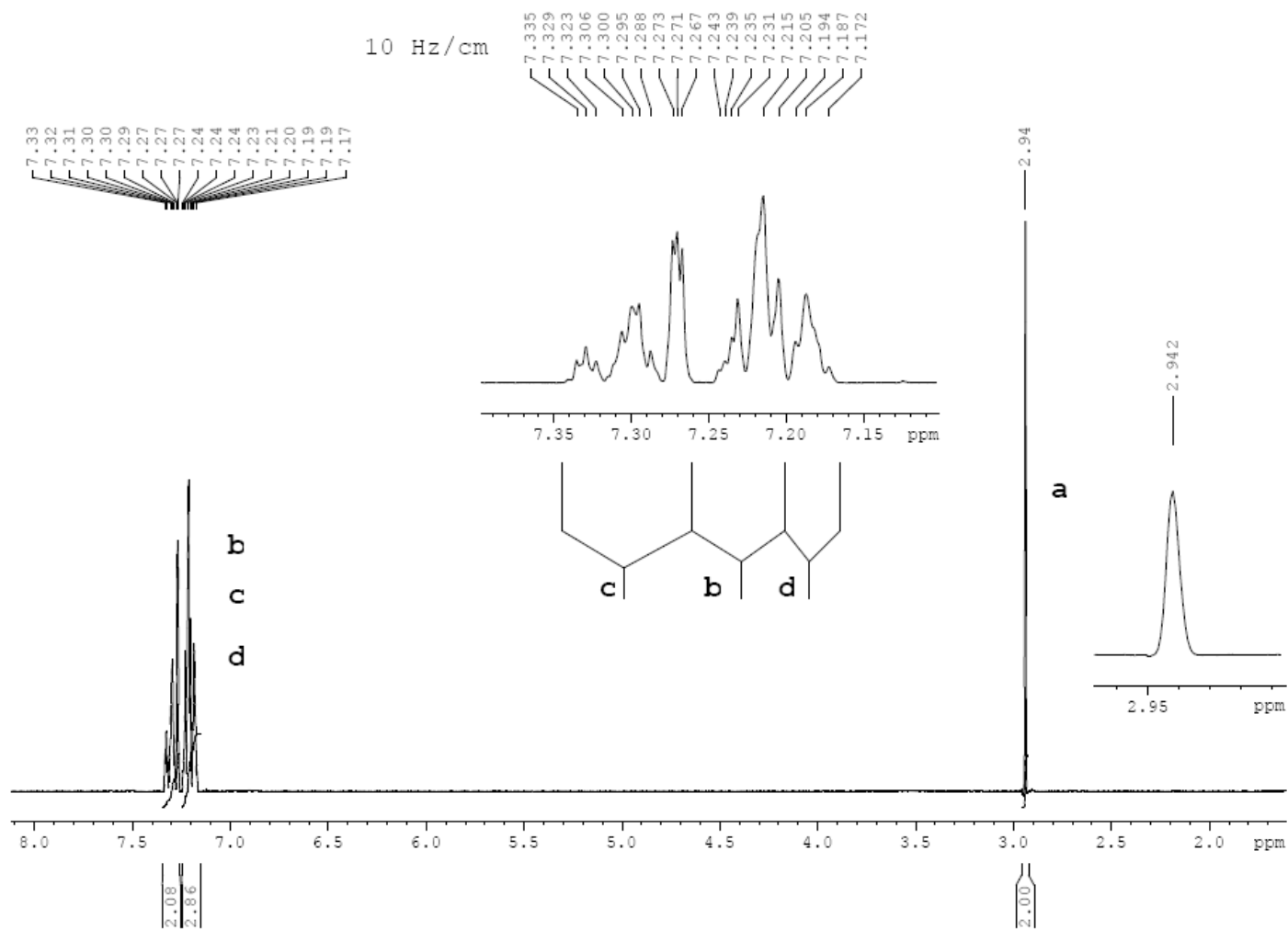
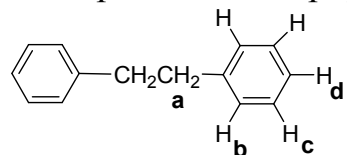
Растворитель: дейтерированный хлороформ



21. 1,2 – Дифенилэтан.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

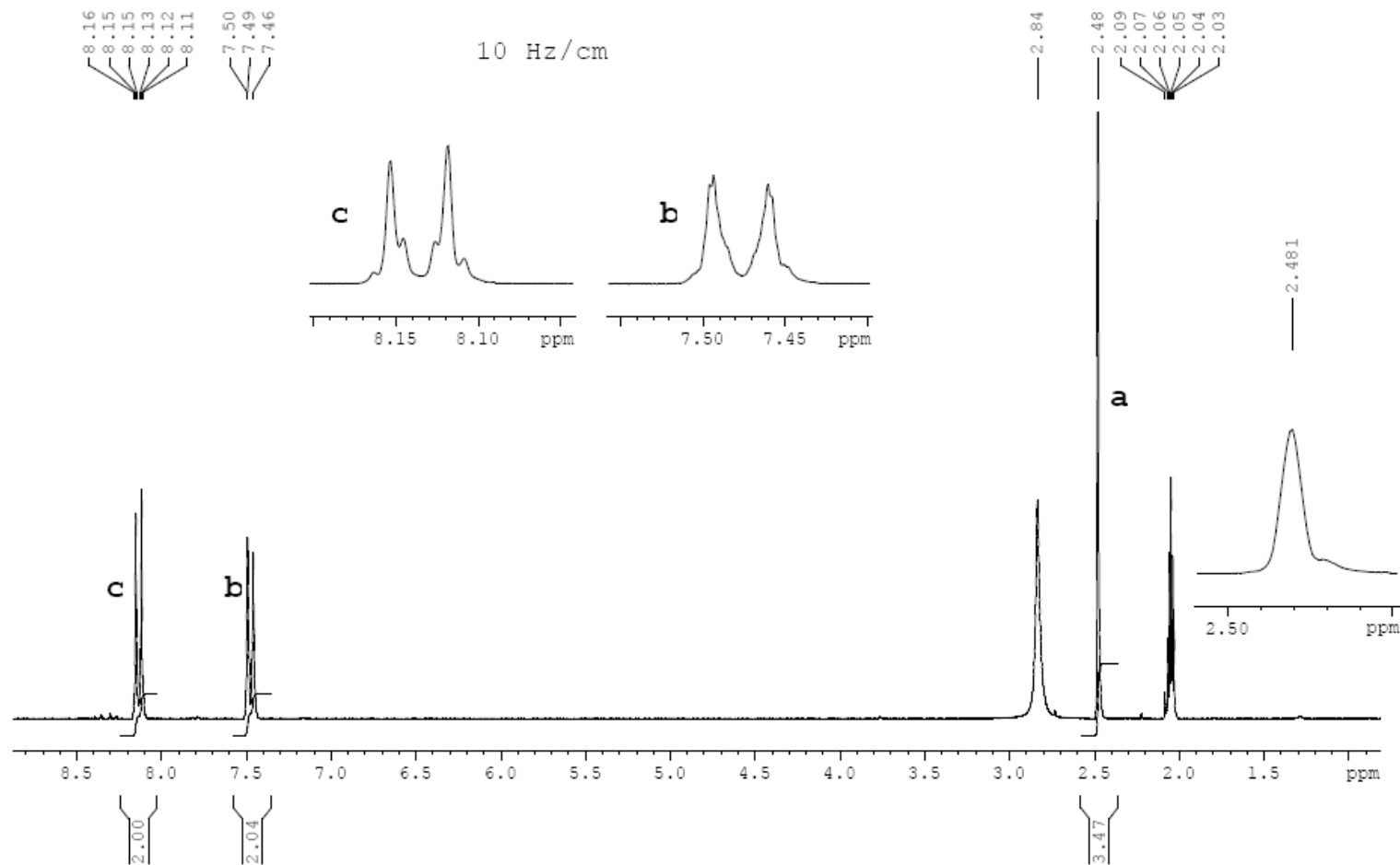
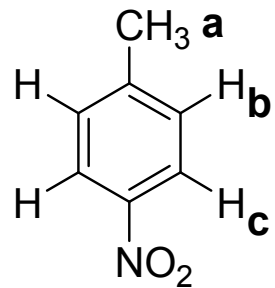
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



22. *p*-Нитротолуол (1 – метил – 4 – нитробензол).

Растворитель: дейтерированный ацетон

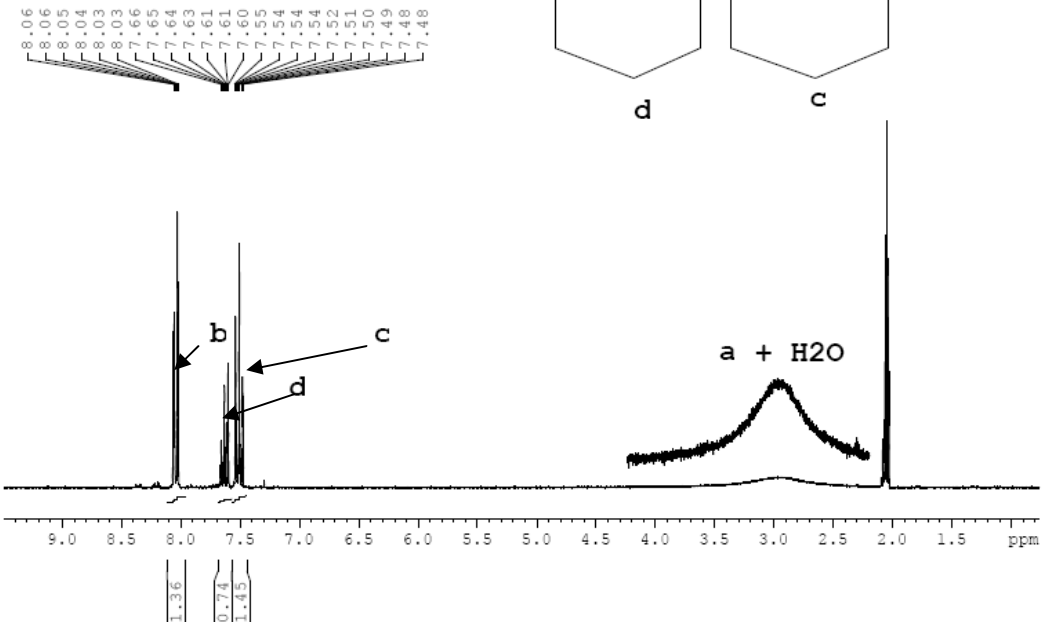
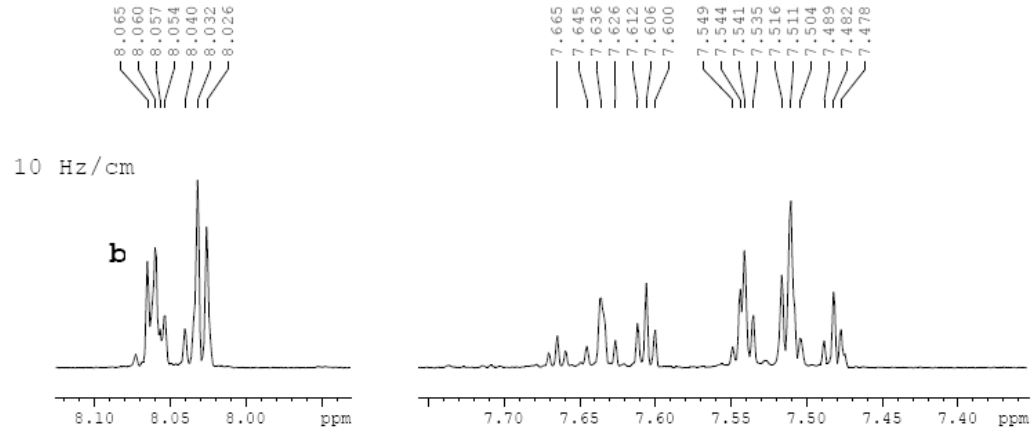
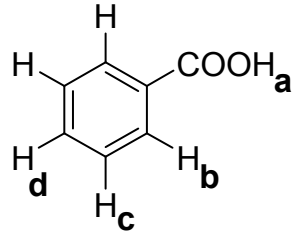
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



23. Бензойная кислота.

Растворитель: дейтерированный ацетон

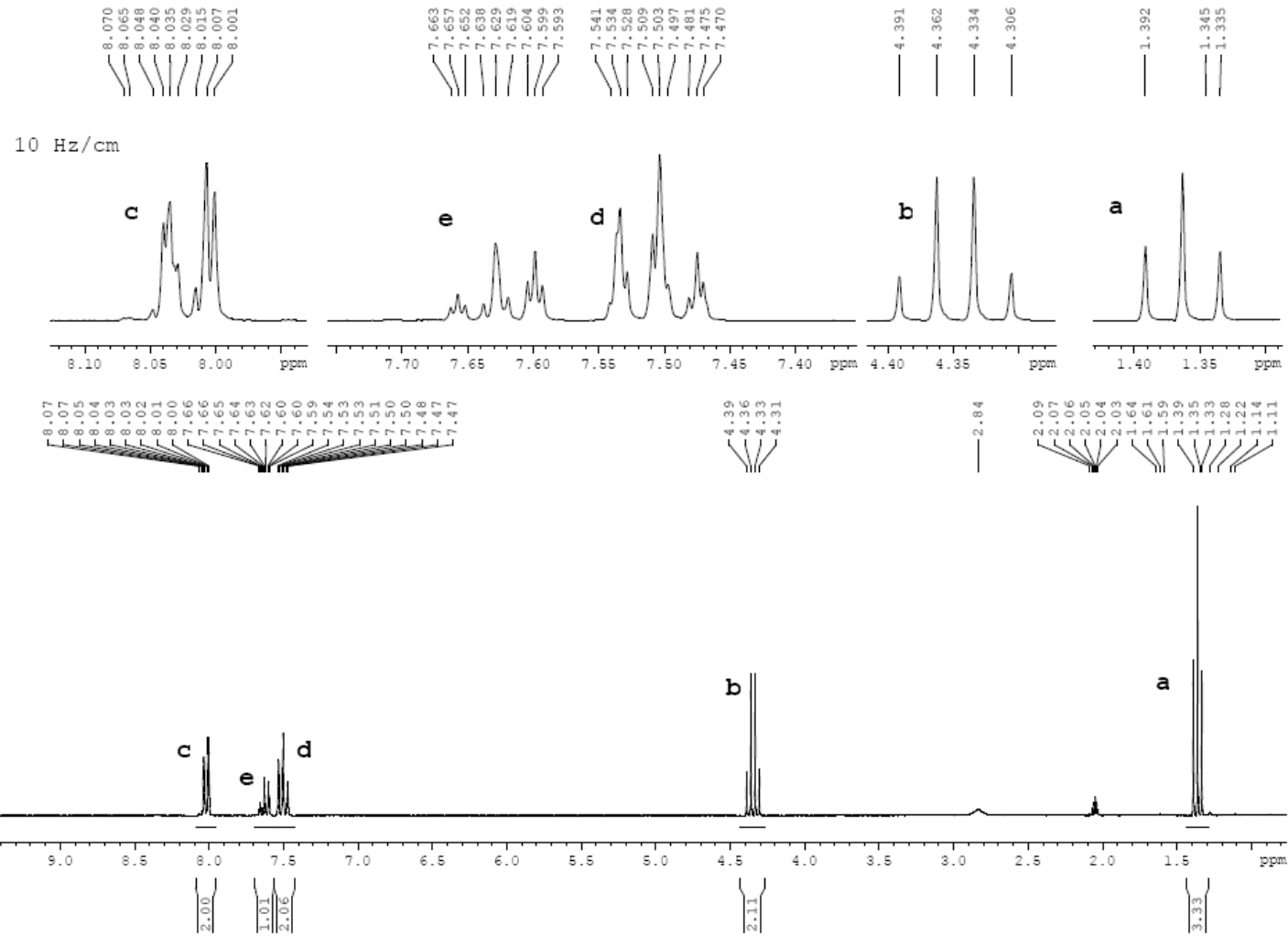
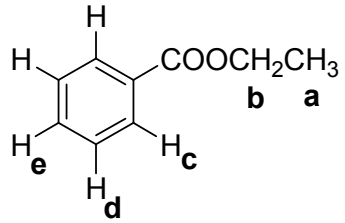
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



24. Этилбензоат.

Растворитель: дейтерированный ацетон

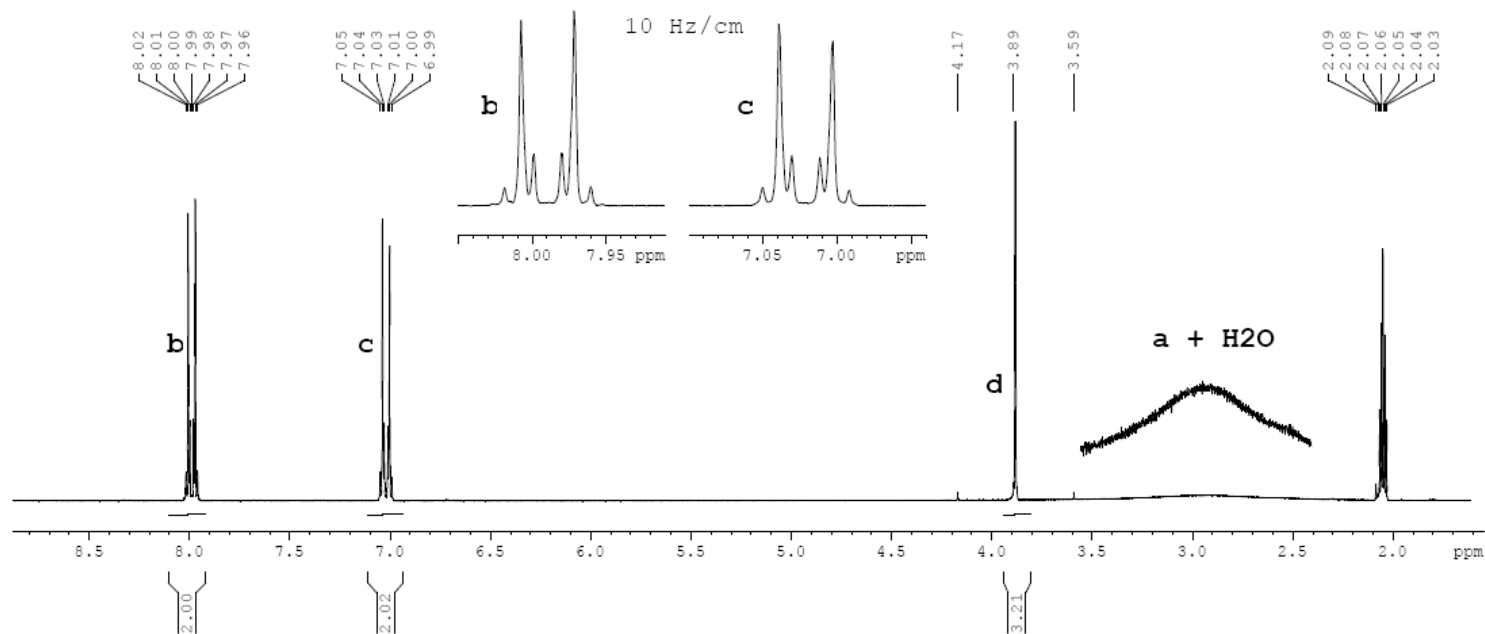
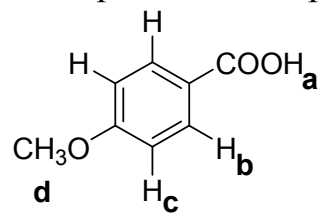
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



25. *p*-Метоксибензойная кислота (анисовая кислота).

Растворитель: дейтерированный ацетон

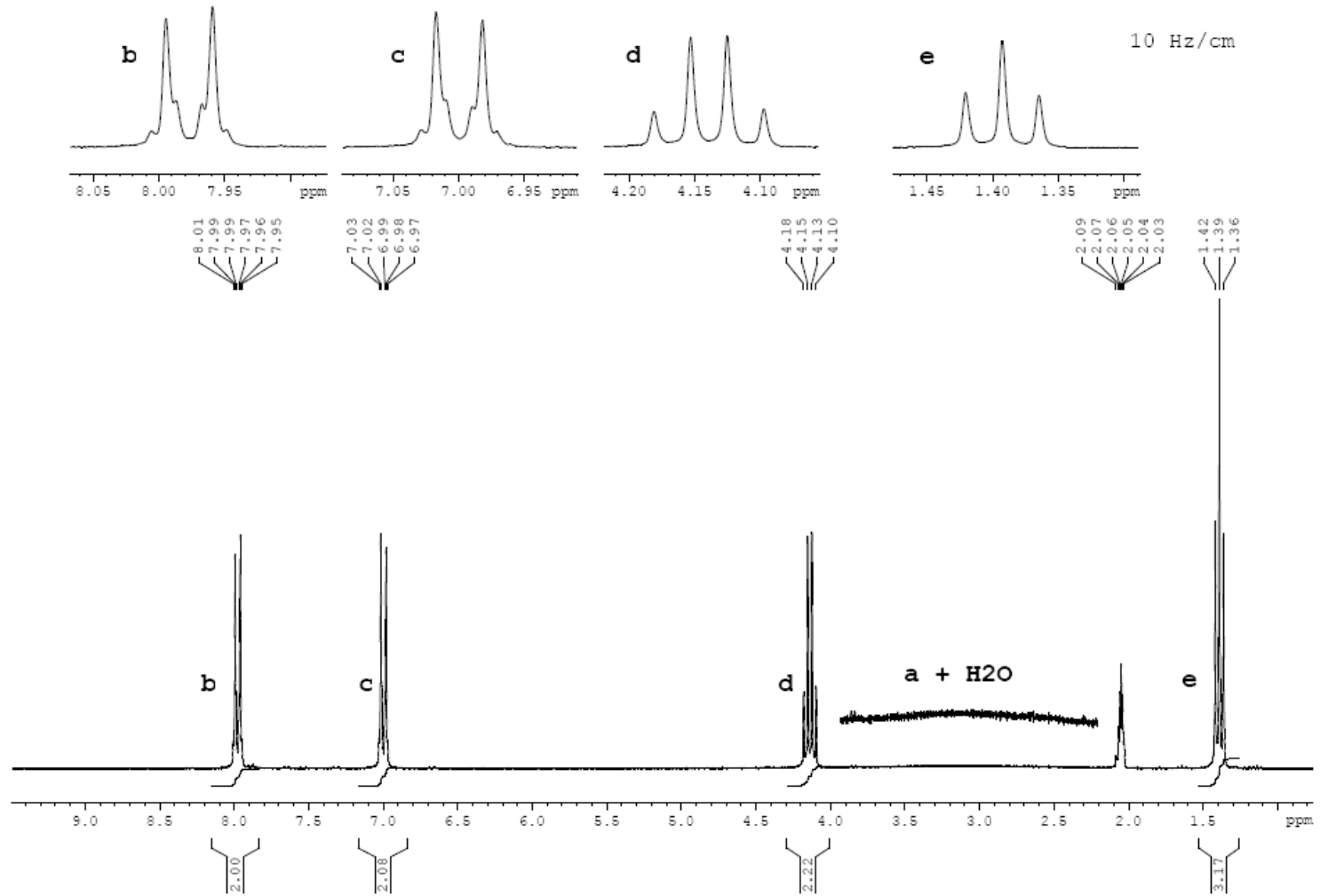
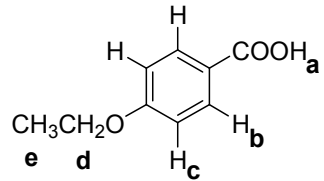
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



26. *n*-Этоксibenзойная кислота.

Растворитель: дейтерированный ацетон

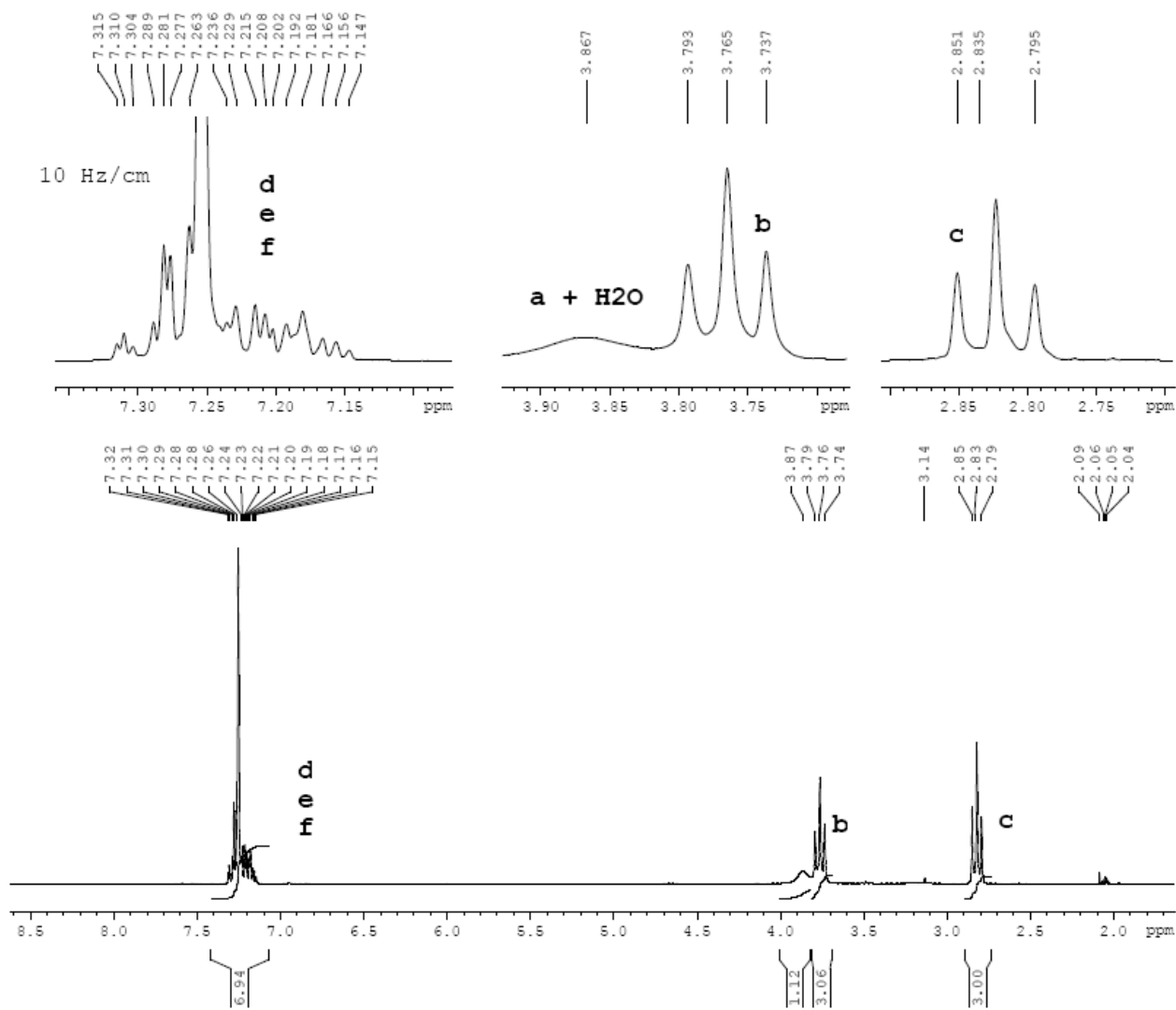
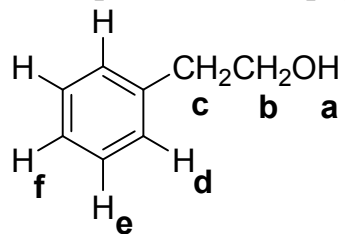
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



27. 2-Фенилэтанол (β -фенилэтиловый спирт).

Растворитель: дейтерированный ацетон

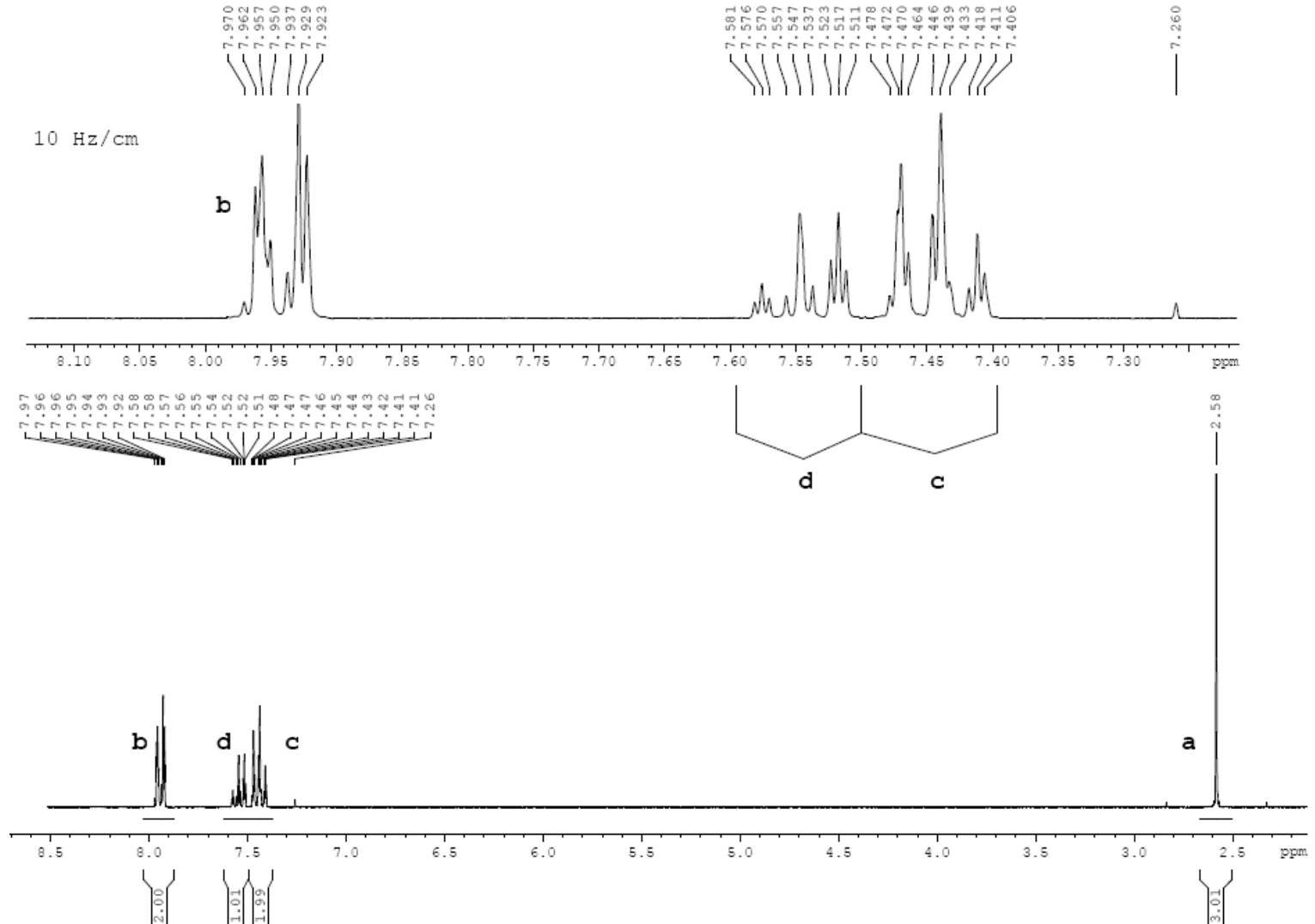
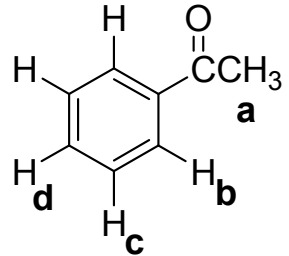
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



28. Ацетофенон.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

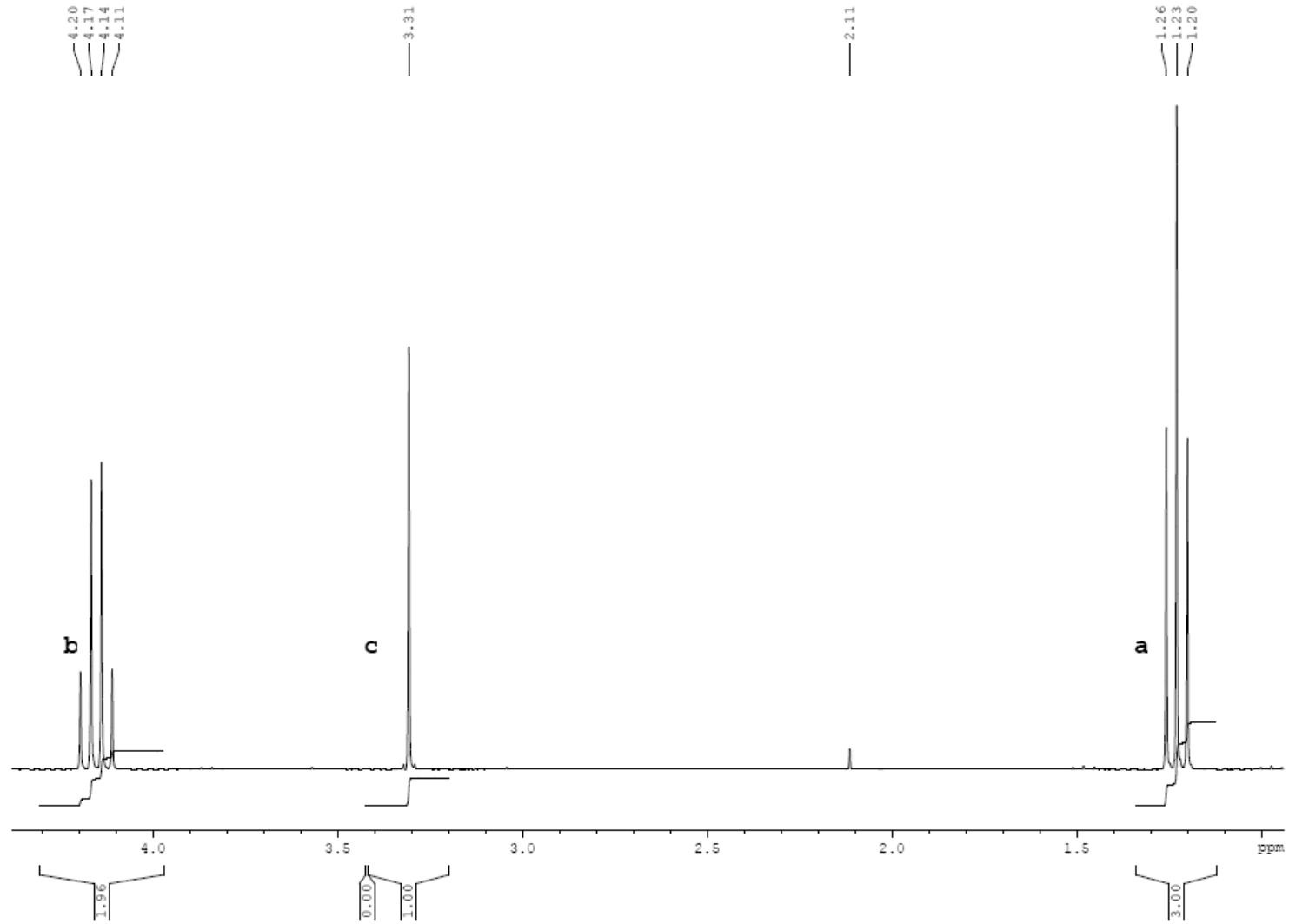
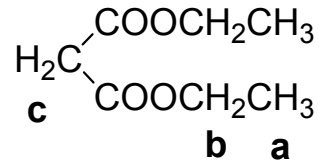
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



29. Диэтилмалонат (диэтиловый эфир малоновой кислоты).

Растворитель: дейтерированный хлороформ

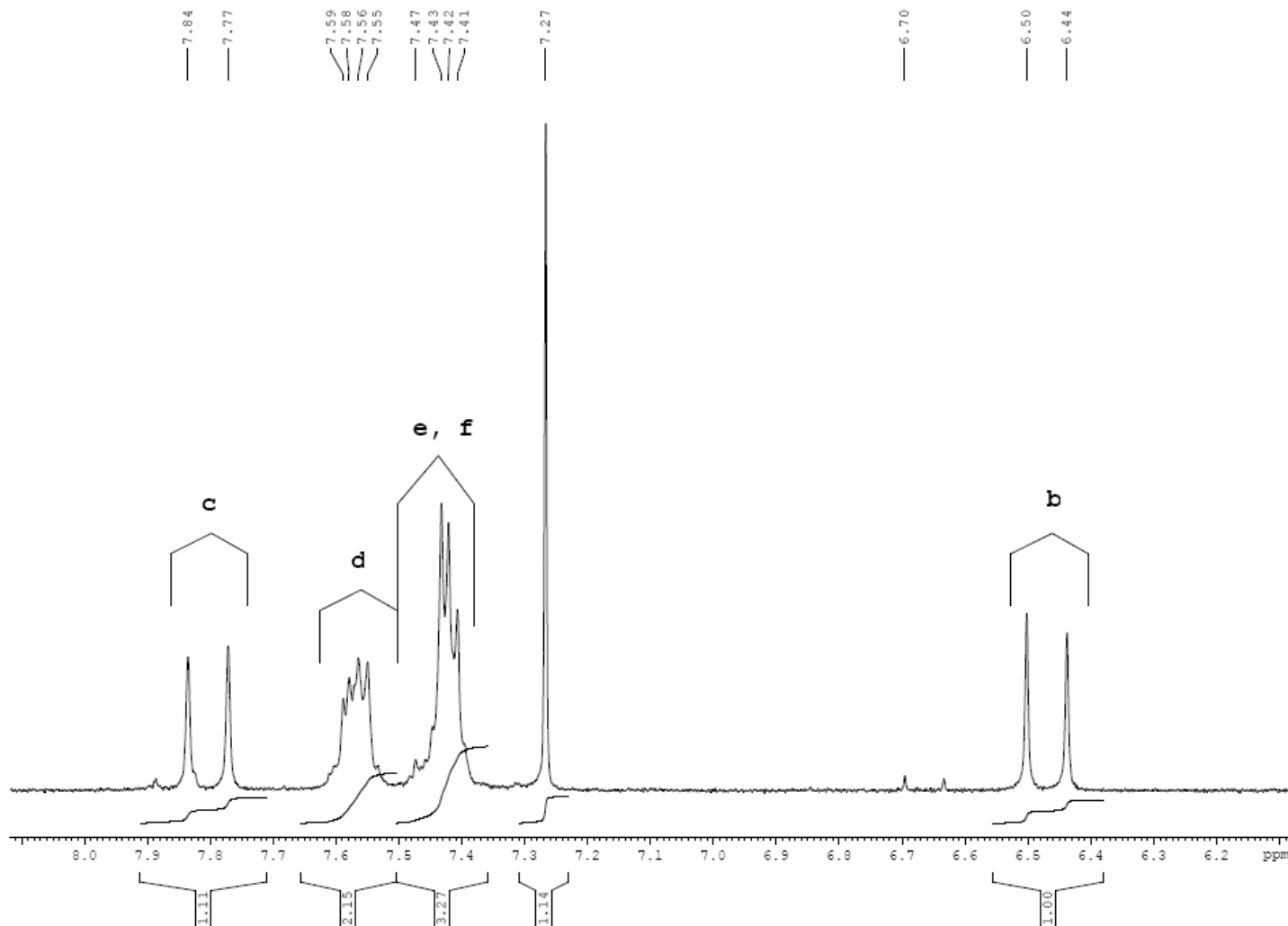
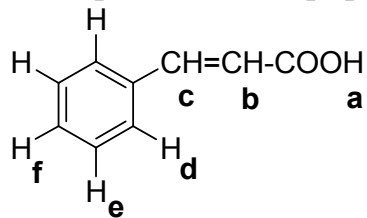
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



30. Коричная (*транс*- β -фенилакриловая) кислота.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

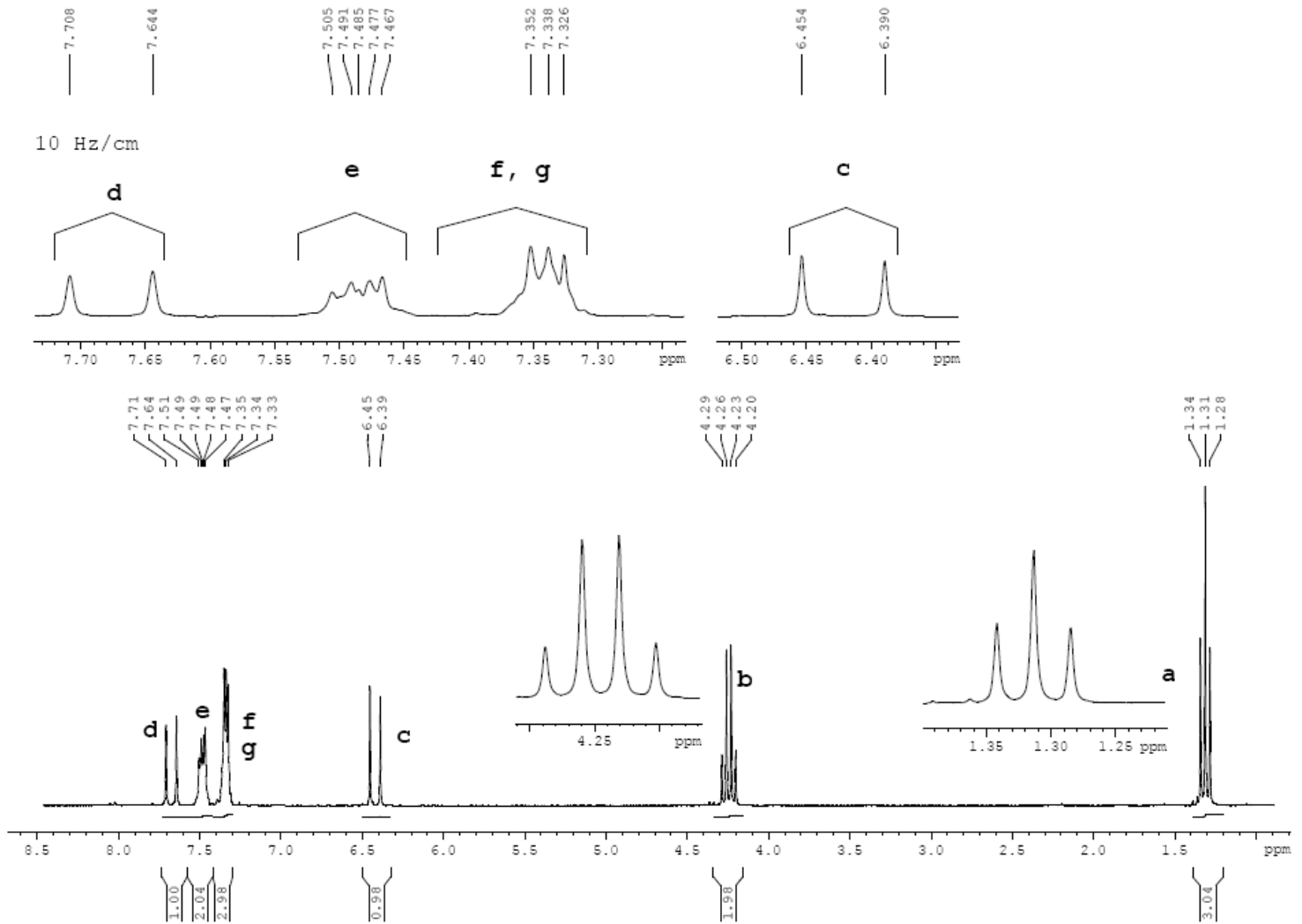
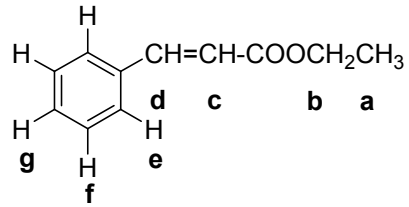
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



31. Этиловый эфир коричной кислоты.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

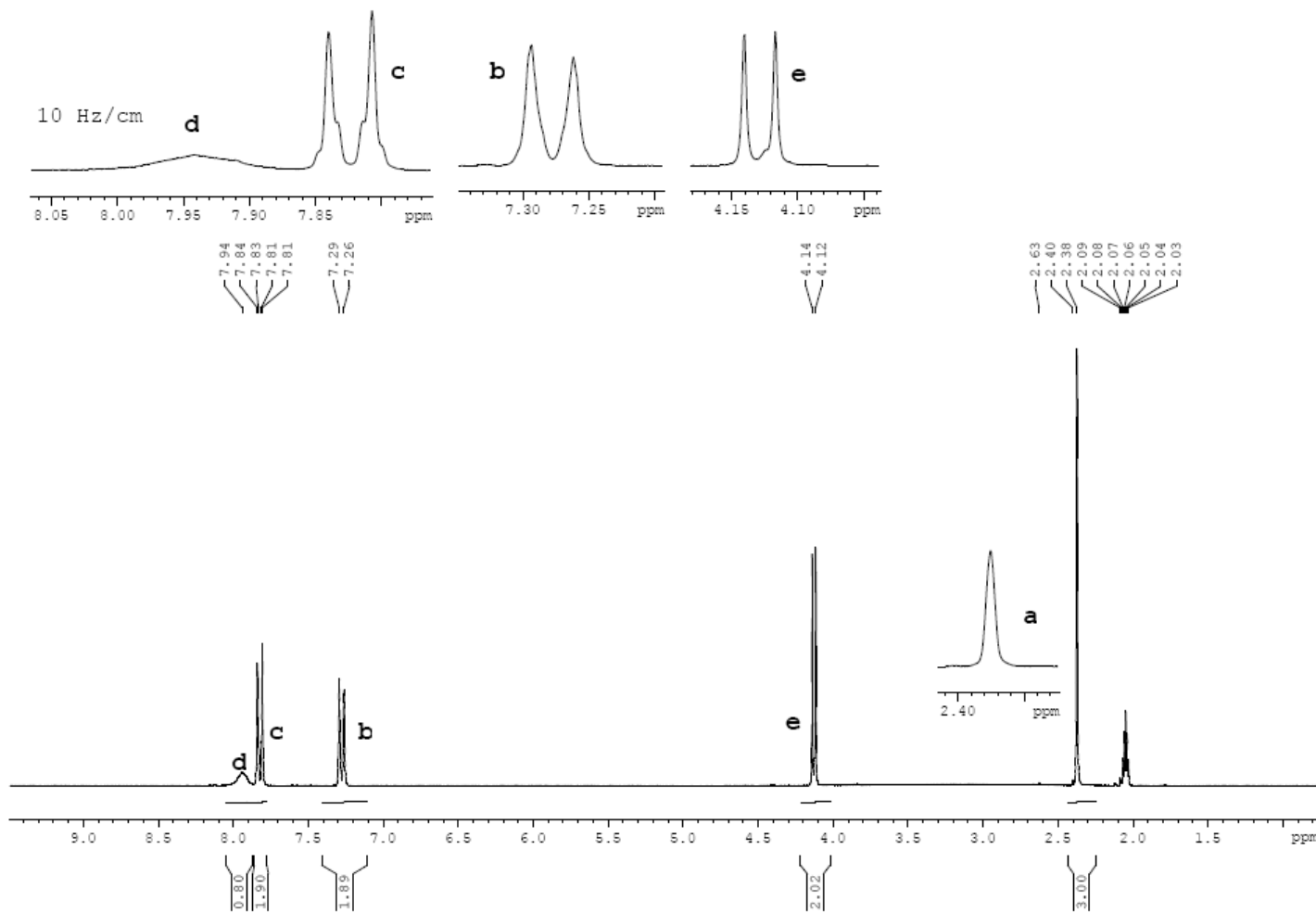
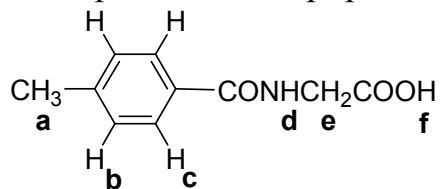
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



32. *n*-Толуилглицин ((4-метил)бензоиламиноуксусная кислота).

Растворитель: дейтерированный ацетон

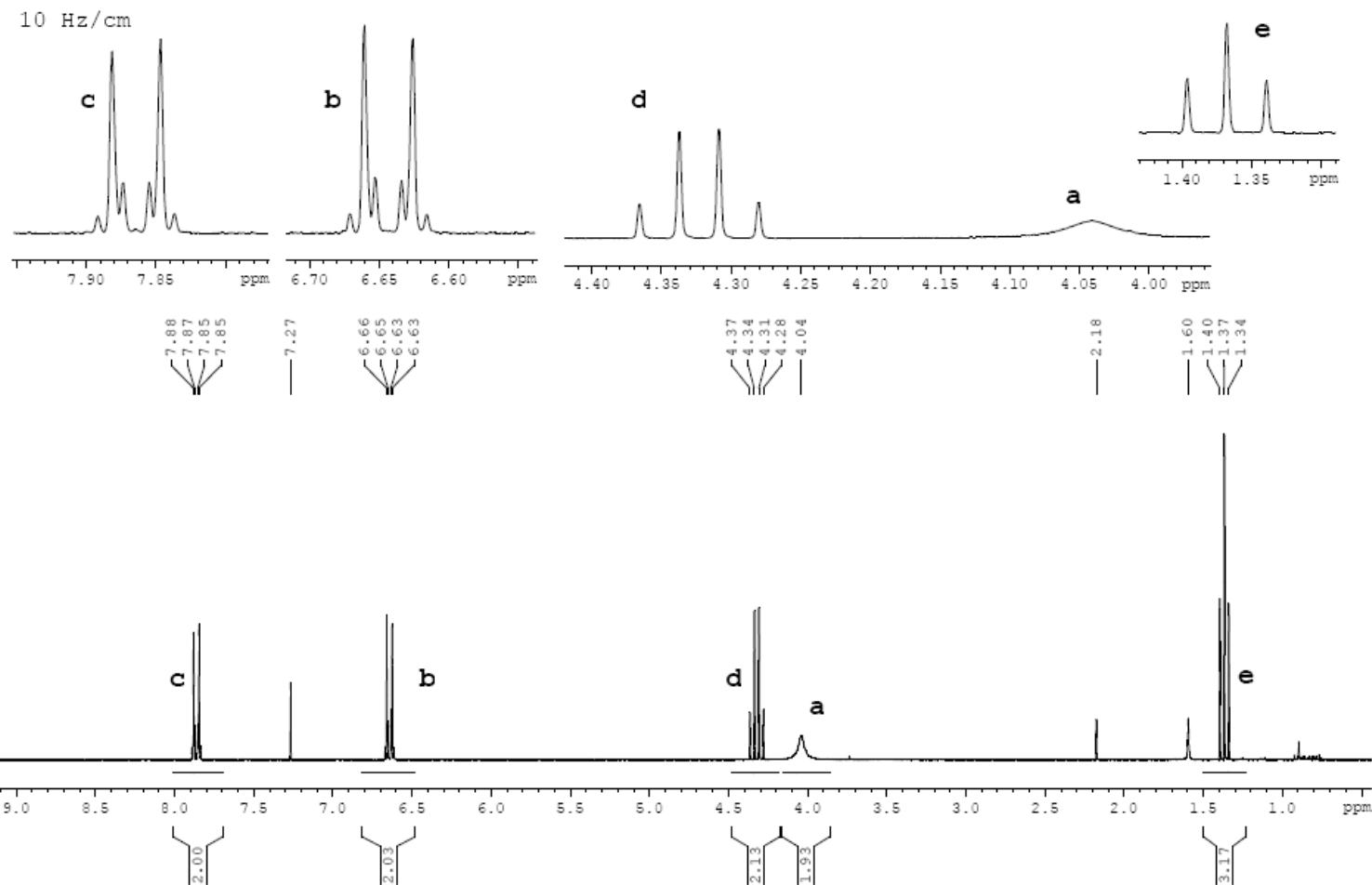
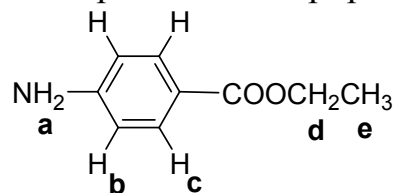
Химический сдвиг стандарта: 2,04 м.д.



33. Этиловый эфир *n*-аминобензойной кислоты.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

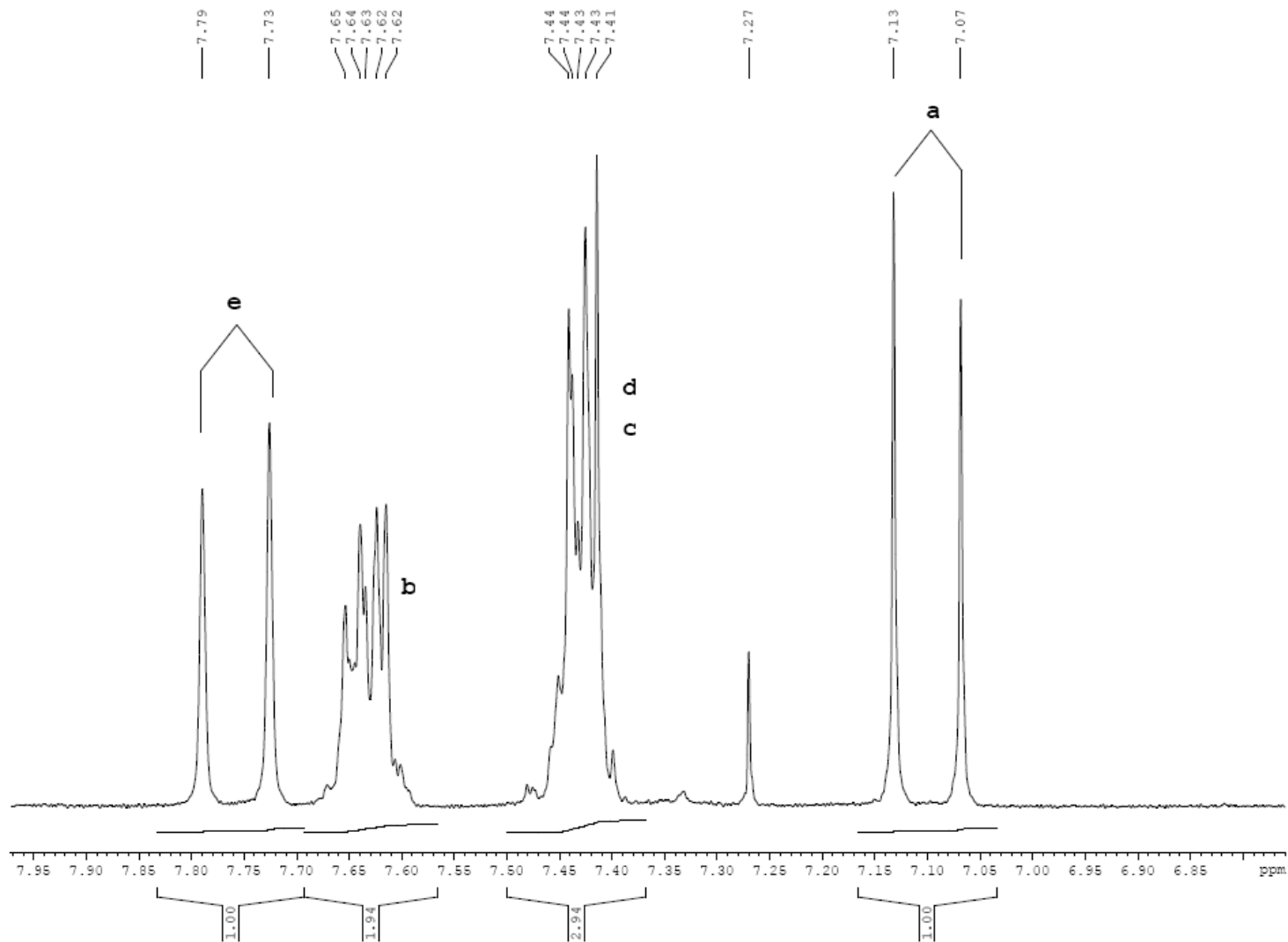
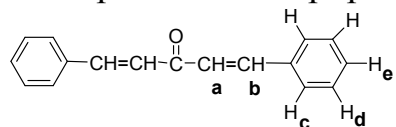
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



34. Дибензальцетон.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

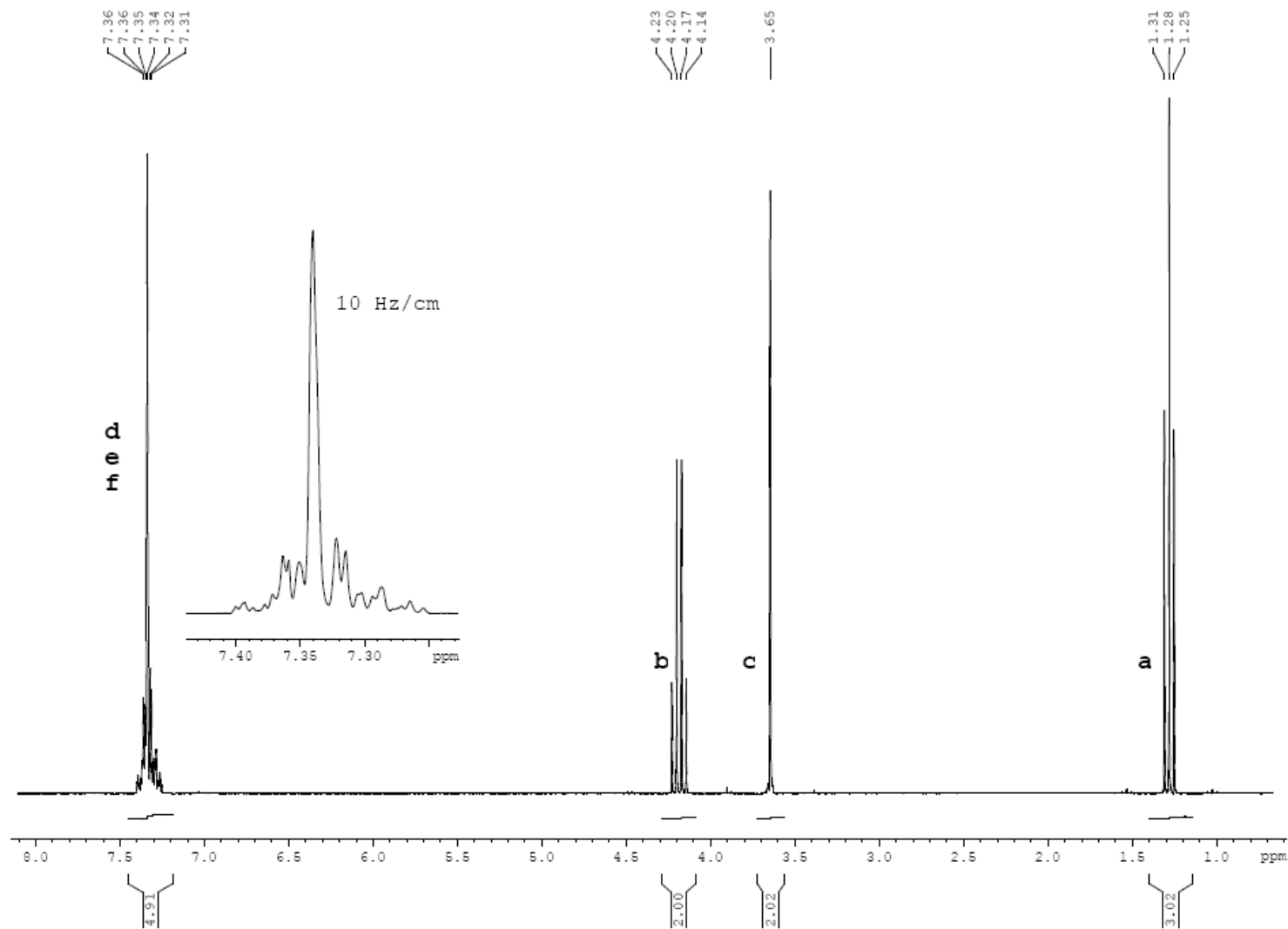
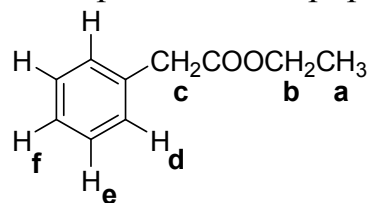
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



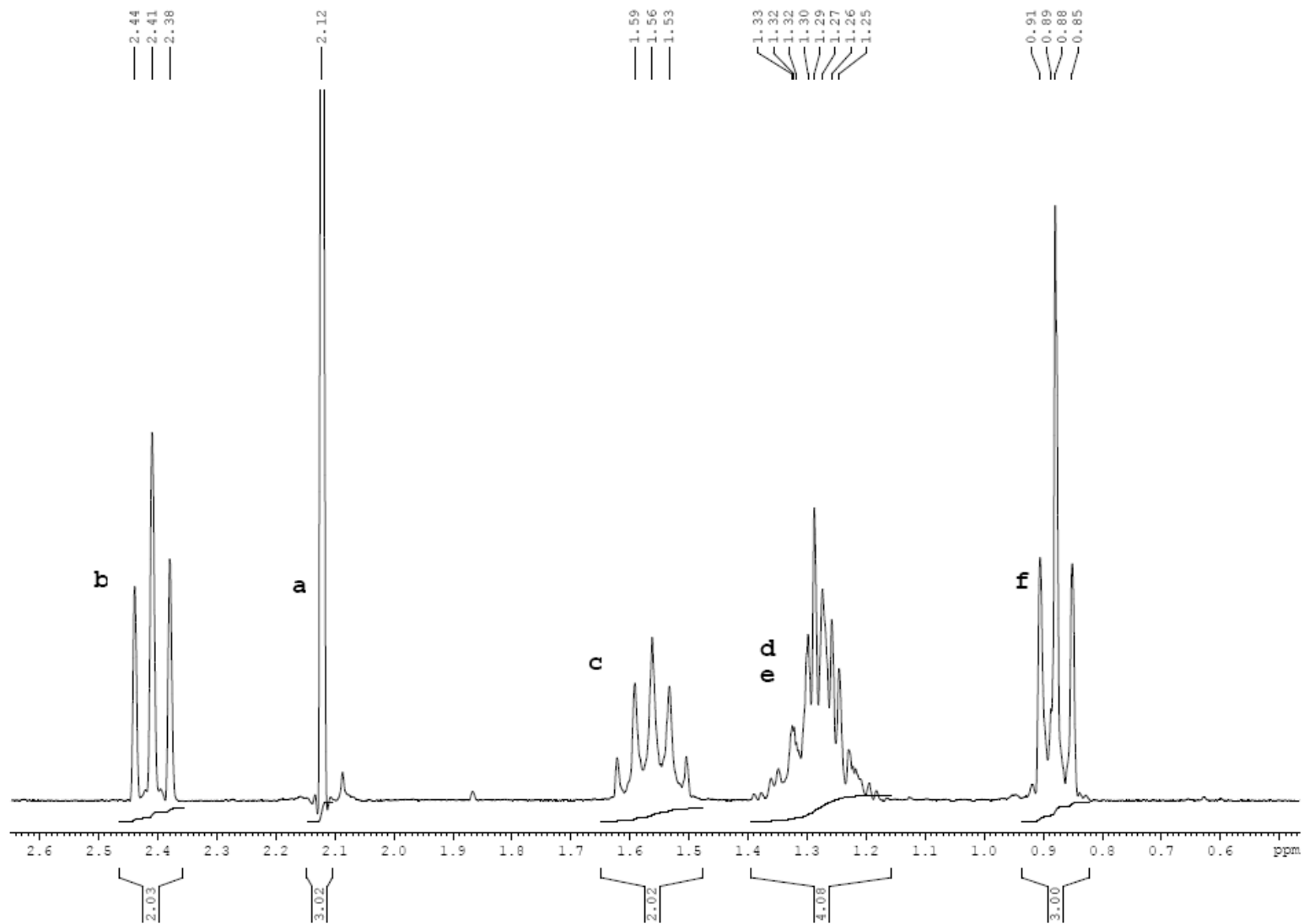
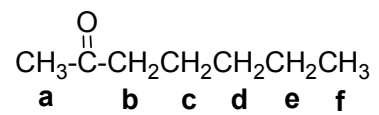
35. Этиловый эфир фенилуксусной кислоты.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



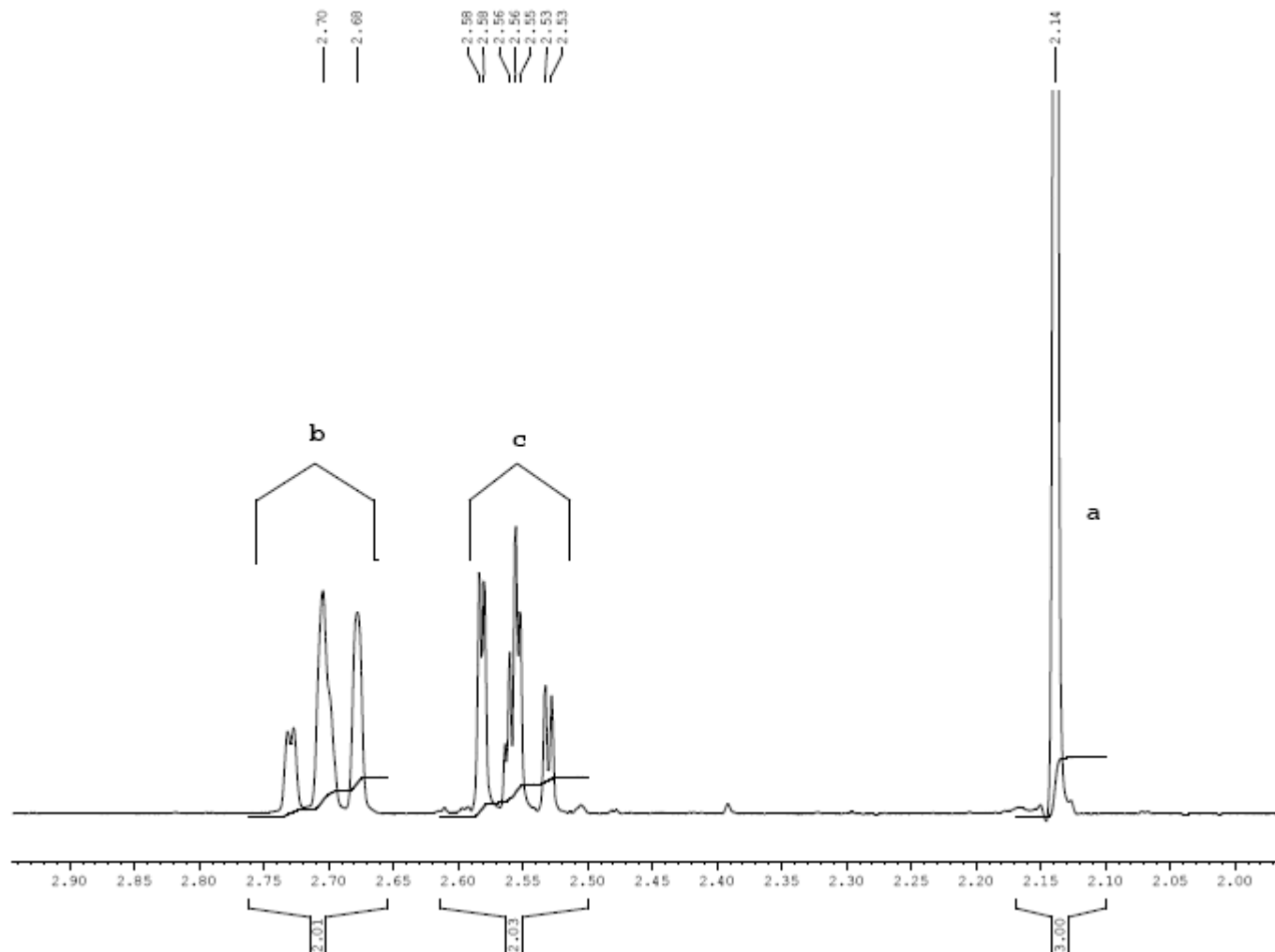
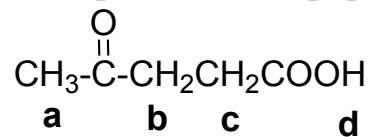
36. Гептан-2-он.



37. 4-Оксопентановая кислота (γ-кетовалериановая кислота, левулиновая кислота).

Растворитель: дейтерированный хлороформ.

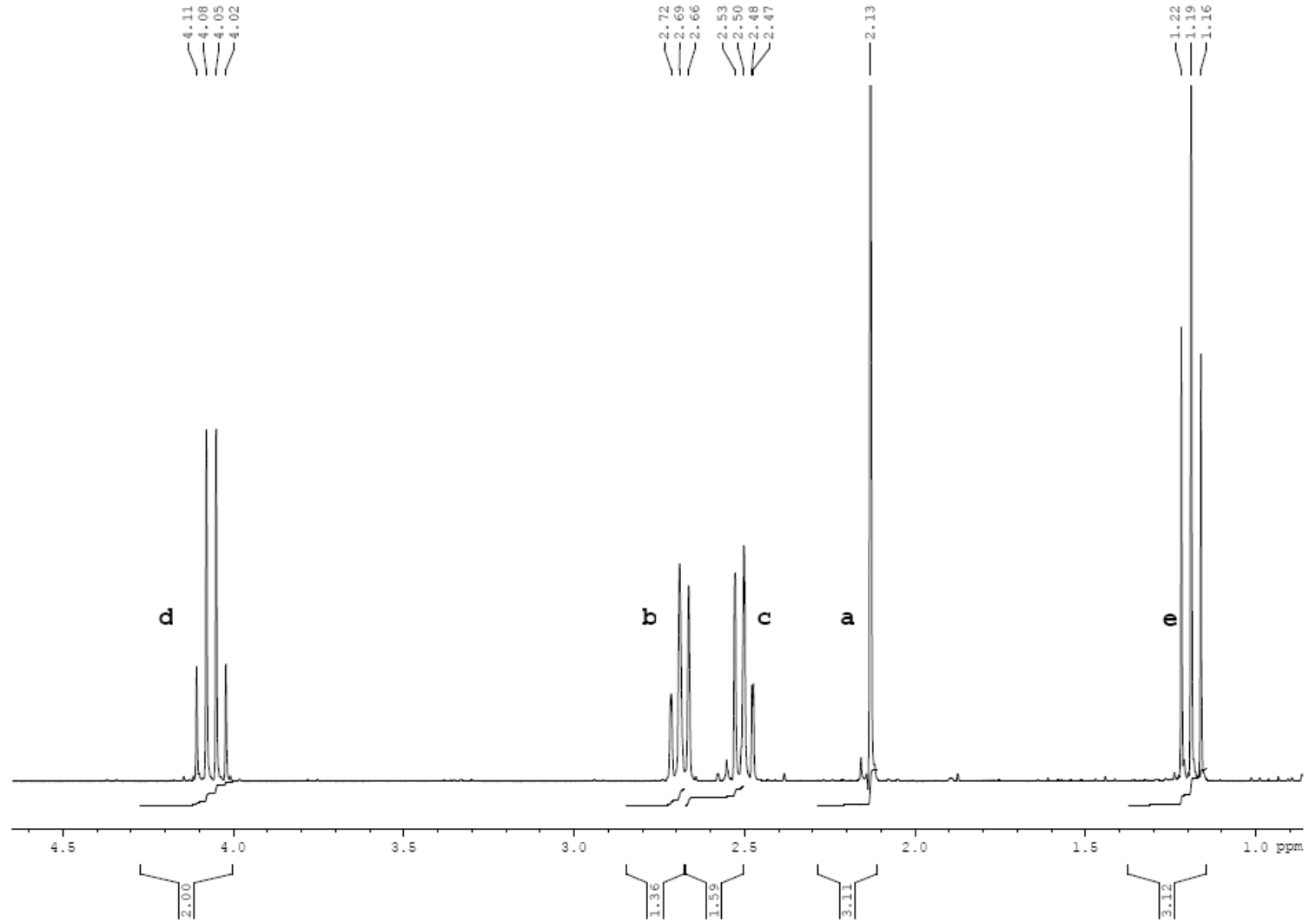
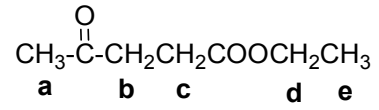
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



38. Этиловый эфир 4-оксопентановой кислоты.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

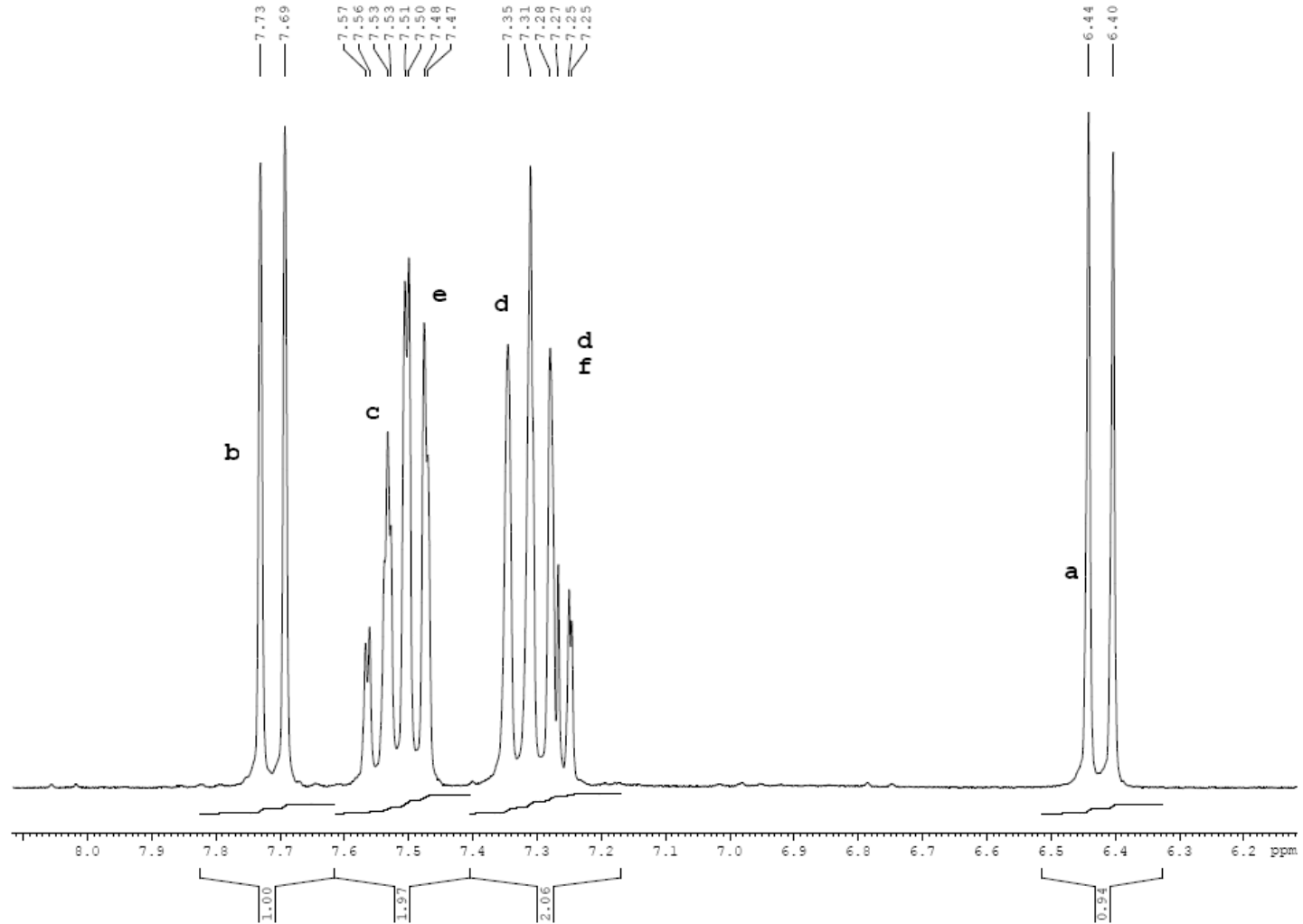
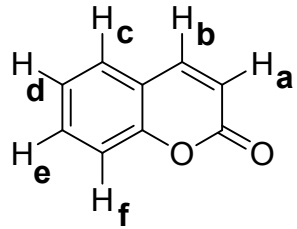
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



39. Кумарин.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

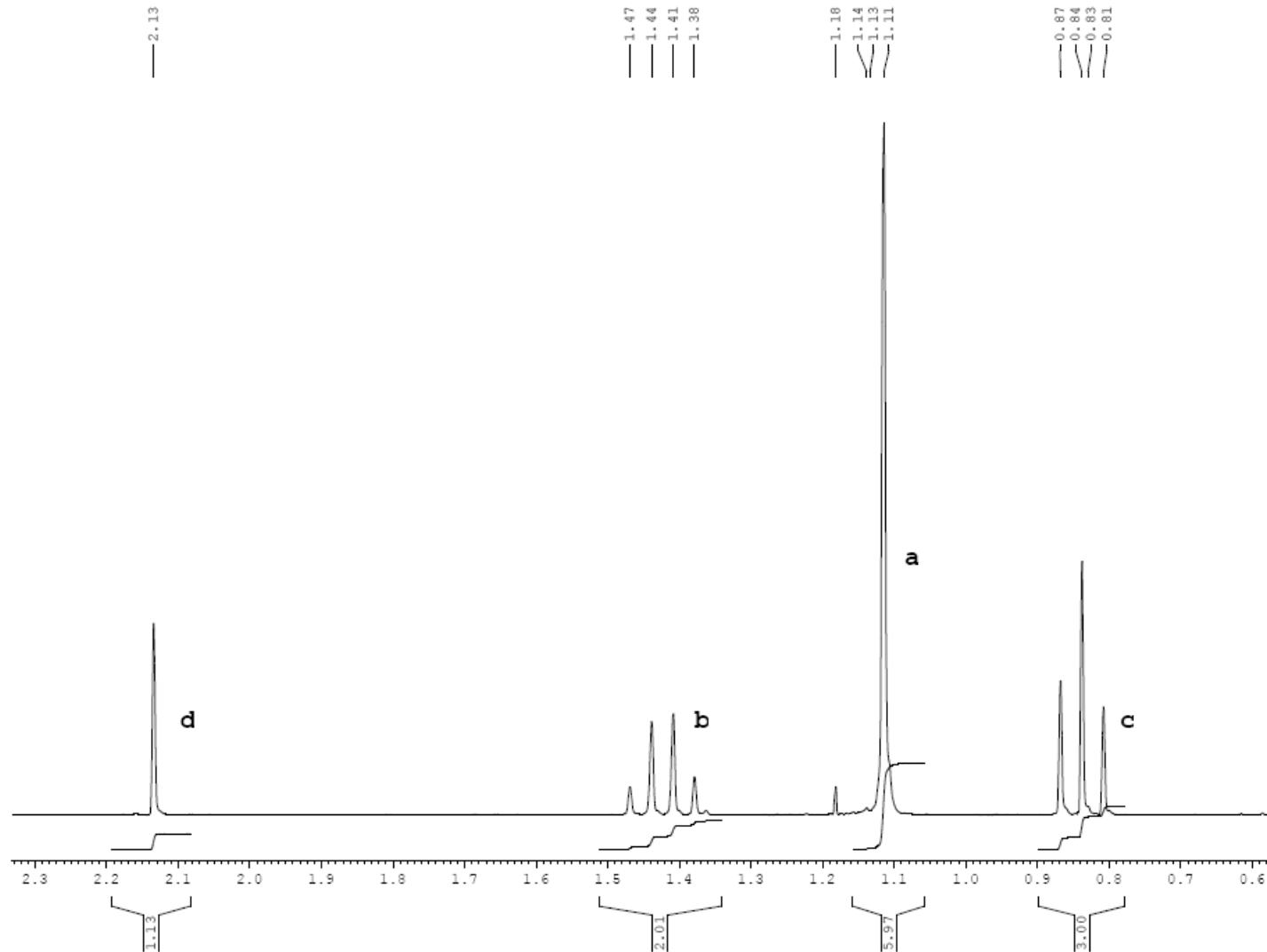
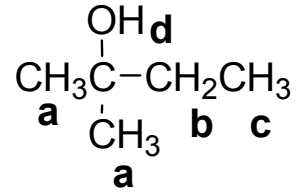
Химический сдвиг стандарта: 7,25 м.д.



40. 2-Метилбутанол-2

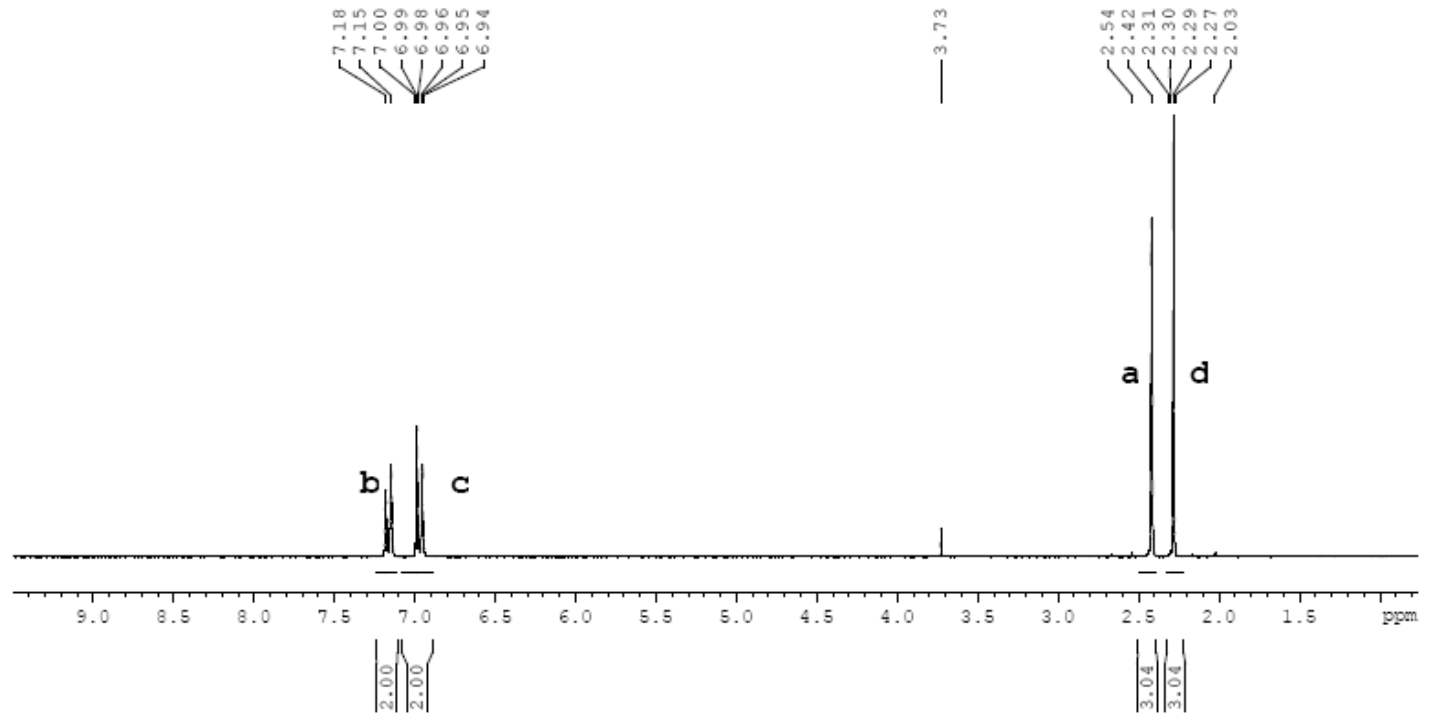
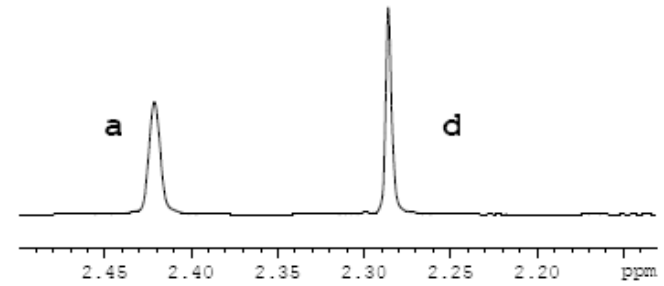
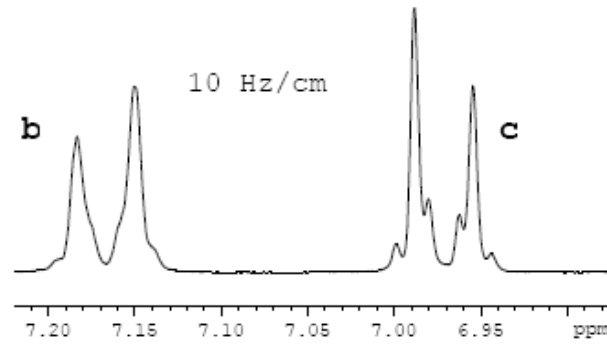
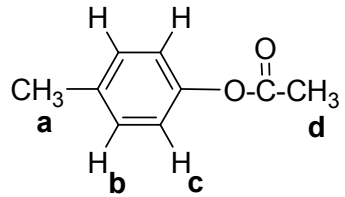
Растворитель: дейтерированный хлороформ

Химический сдвиг стандарта: 7,24 м.д.



41. 4-Метилфенолацетат.

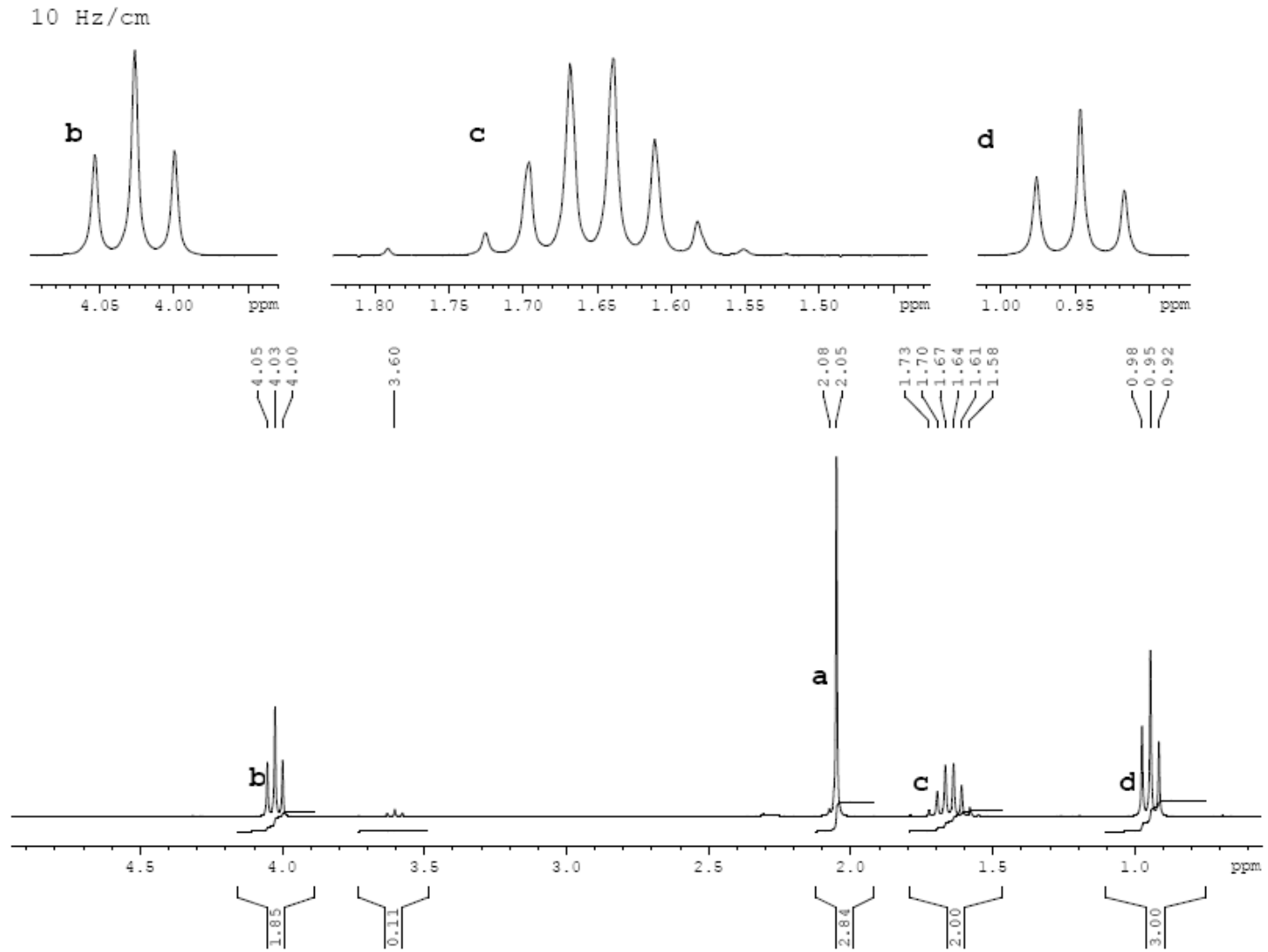
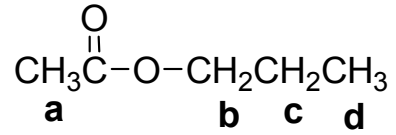
Растворитель: четыреххлористый углерод.



42. Пропилацетат.

Растворитель: дейтерированный хлороформ

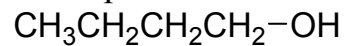
Химический сдвиг стандарта: 7,24 м.д.



43. Бутанол-1.

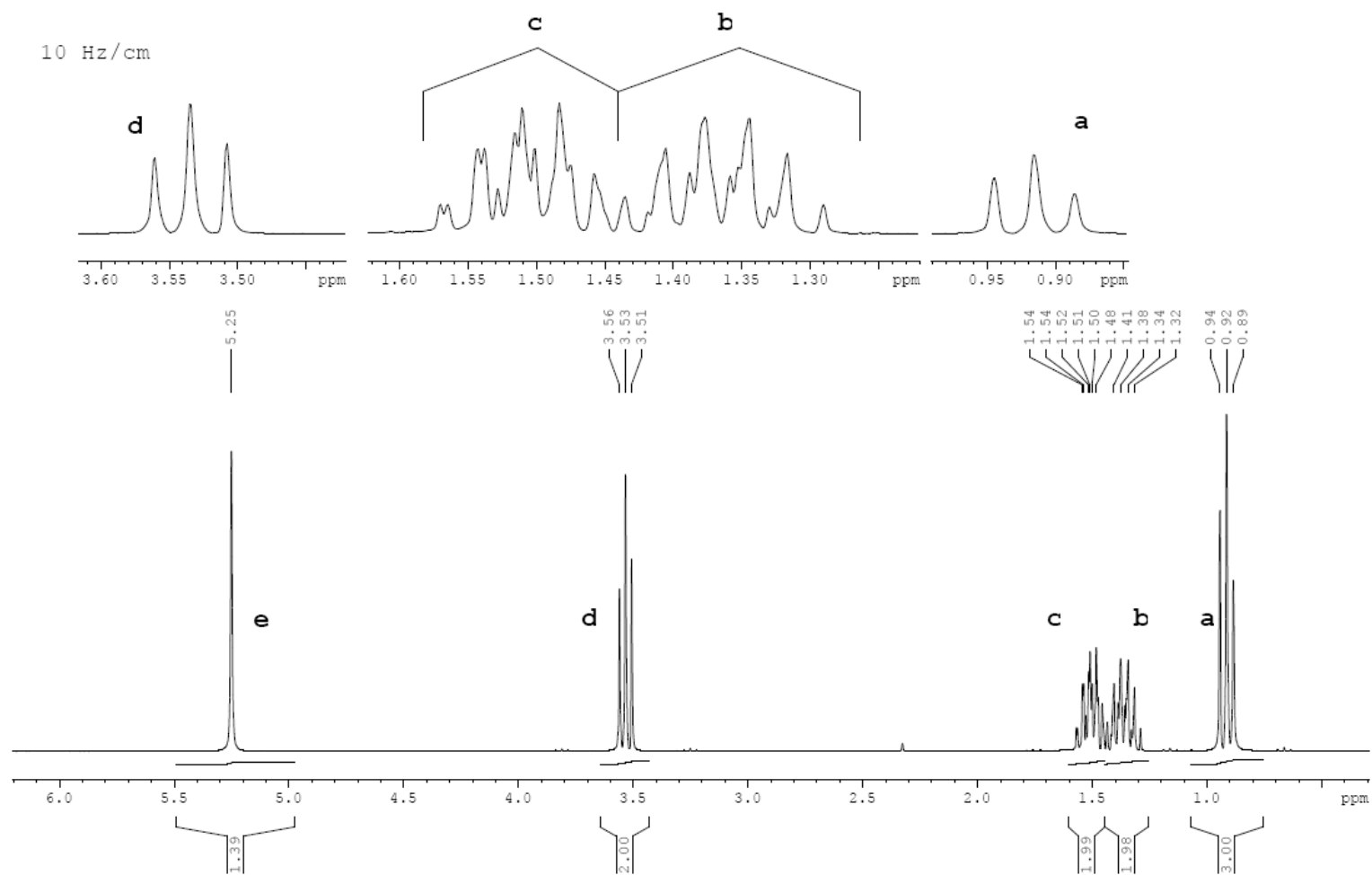
Растворитель: дейтерированный хлороформ

Стандарт: TMS



a b c d e

Химический сдвиг стандарта: 0,00 м.д.



Растворители для исследования методом ЯМР

Растворитель	Формула	Т. кип. °С	Т. пл., °С	Сигналы остаточных протонов (относительно ТМС), м. д.
Ацетон-D ₆	CD ₃ COCD ₃	56,2	-95,4	2,07
Ацетонитрил-D ₃	CD ₃ CN	81,6	-45,7	1,96
Бензол-D ₆	C ₆ D ₆	80,1	5,5	7,24
Бромбензол-D ₅	C ₆ D ₅ Br	156	-30,8	7,1-7,5
Бромформ-D ₁	CDBr ₃	150	8,3	6,82
трет-Бутиловый спирт-D ₁₀	(CD ₃) ₃ CO	82	25,5	1,22; 1,35 ^a
Гексаметилфосфортриамид-D ₁₈	[(CD ₃) ₂ N] ₃ PO	232	40	2,64
Дейтерохлорид (38% в D ₂ O)	DCl	110	-61	8,5 ^a
Диметилсульфоксид-D ₆	CD ₃ SOCD ₃	189	11,8	2,50
		(разл.)		
Диметилформамид-D ₇	DCON(CD ₃) ₂	152	-35	2,79; 2,94; 7,90
<i>n</i> -Диоксан-D ₈	C ₄ D ₈ O ₂	102	-116	3,56
1,2-Дихлорэтан-D ₄	ClCD ₂ CD ₂ Cl	83,5	-89,5	3,69
Диэтиловый эфир-D ₁₀	C ₂ D ₅ OC ₂ D ₅	34,5	-97,5	1,2; 3,4
Изопропанол-D ₈	CD ₃ CDODCD ₃	82,4	-95,1	1,2; 1,6 ^a ; 4,0
Метанол-D ₄	CD ₃ OD	64,5	—	3,34; 4,1 ^a
			126,6	
Метиленхлорид-D ₂	CD ₂ Cl ₂	40	8,4	5,28
Метилциклогексан-D ₁₄	C ₆ D ₁₁ CD ₃	100,9	5,8	0,8-1,8
Муравьиная кислота-D ₂	DCOOD	10!	-28,5	8,2; 10,8 ^a
Нитробензол-D ₅	C ₆ D ₅ NO ₂	211	3,82*	7,4-8,3
Нитрометан-D ₃	CD ₃ NO ₂	101	-56,8	4,29
Окись дейтерия	D ₂ O	101,42*	—	4,61
			41,8	
<i>n</i> -Октан-D ₁₈	CD ₃ (CD ₂) ₆ CD ₃	125,7	14,35*	0,7-1,4
Пиридин-D ₅	C ₅ D ₅ N	115,6	-65	7,0-7,8; 8,57
Серная кислота-D ₂	D ₂ SO ₄	>300	28,9	10,9 ^a
Тетрагидрофуран-D ₈	C ₄ D ₈ O	67	-1	1,6—2,0; 3,5- 3,8
Тетраметиленсульфон-D ₈	C ₄ D ₈ SO ₂	283	-95	2,0-2,5; 2,8- 3,5
Толуол-D ₈	C ₆ D ₅ CD ₃	110,6	15,75*	2,31; 7,10
Трифторуксусная кислота-D ₁	CF ₃ COOD	72,4	-63,5	11,34
2,2,2-Трифторэтанол-D ₃	CF ₃ CD ₂ OD	73,5	6,55	6,1; 6,6 ^a
Уксусная кислота-D ₄	CD ₃ COOD	118	-120,0	2,06; 12,0 ^a
Хлороформ-D ₁	CDCl ₃	61,7	-114,5	7,25
Циклогексан-D ₁₂	C ₆ D ₁₂	80,7		1,42
Этанол-D ₆ (95% в D ₂ O)	CD ₃ CD ₂ OD в D ₂ O	78,15		1,17; 3,59; 4,1 ^a
Этанол-D ₆ (безводн.)	CD ₃ CD ₂ OD	78,3		1,17; 3,59; 4,1 ^a

^a Положения этих пиков могут значительно изменяться в зависимости от температуры и растворенного вещества

**Список литературы, рекомендуемый для самостоятельной
интерпретации спектров**

1. *А. Гордон, Р. Форд* Спутник химика. М.: Мир, 1976
2. *Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер* Определение строения органических соединений. М.: Мир, 2006.

Учебное издание

Колтунов Константин Юрьевич

Головин Анатолий Васильевич

Ельцов Илья Владимирович

Атлас спектров ЯМР

Учебно-методическое пособие