

Bảng 6.3. Dung môi dùng trong cộng hưởng từ hạt nhân

Dung môi	¹ H NMR, δ (ppm)		¹³ C NMR		t _{nc} *	t _s *
	¹ H còn sót	Nước ẩm	δ (ppm)	Độ bội, J(¹³ C, D), (Hz)		
[D ₆] Axeton (CD ₃ COCD ₃)	2,04	~2,75	29,3 206,3	septet, 20 multiplet, < 1	-95	56
[D ₁] Axetonitril (CD ₃ CN)	1,93	~2,2	1,3 117,7	septet, 21 multiplet, < 1	- 45	82
Axit [D ₄] Axetic (CD ₃ COOD)	2,03 11,53		20,0 178,4	septet, 20 multiplet, < 1	17	118
[D ₆] Benzen, (C ₆ D ₆)	7,27		128,0	triplet, 24	6	80
[D ₁] Bromofom (CDBr ₃)	6,83		10,2	triplet, 31,5	8	150
Carbon tetraclorea (CCl ₄)	-		96,0	singlet	- 23	77
Carbon disunfua (CS ₂)	-		192,8	singlet	- 112	46
[D ₁] Clorofom (CDCl ₃)	7,24	~1,6	77,0	triplet, 32	- 64	61
[D ₂] Diclorometan (CD ₂ Cl ₂)	5,32		53,5	quintet, 27	- 97	40
[D ₆] Dimetylsunfoxit (CD ₃ SOCD ₃)	2,49	~3,3	39,7	septet, 21	19	189
[D ₄] Dioxane (C ₄ D ₈ O ₂)	3,58		66,5	quintet, 22	12	102
[D ₁₄] Hexametyl phosphoric triamit [(CD ₃) ₃ N] ₃ PO	2,53		35,8	septet, 21	7	233
[D ₄] Metanol (CD ₃ OD)	3,35 4,78	~4,88	49,3	septet, 21	- 98	64
[D ₅] Nitrobenzen (C ₆ D ₅ NO ₂)	7,50; 7,67 8,11				6	211
[D ₂] Nước, (D ₂ O)	4,65		-	-	0	100
[D ₅] Pyridin (C ₅ D ₅ N)	7,19		123,5	triplet, 25	- 42	115
	7,55		135,5	triplet, 24		
	8,71		149,5	triplet, 27		
[D ₂] Tetracloretoan 1,1,2,2- (C ₂ D ₂ Cl ₄)	6,00				- 44	146
[D ₄] Tetrahydrofuran (C ₄ D ₈ O)	1,73		25,5	quintet, 21	- 108	66
	3,58		67,7	quintet, 22		
[D ₈] Toluen (C ₆ D ₅ CD ₃)	2,30				- 95	111
	7,19					
[D ₁] Trifluoroaxetic axit, (CF ₃ COOD)	11,5		116,5 164,4	quartet, ¹ J(C, F) 283 quartet, ² J(C, F) 44	- 15	72
[D ₁₂] Xiclohexan (C ₆ D ₁₂)	1,42				7	81

* Giá trị lấy của dung môi chưa đơteri hoá

Bảng 6.7. Độ chuyển dịch hoá học của proton dính với C no, δ , ppm

	Proton nhóm metyl	δ_H	Proton nhóm metylen	δ_H	Proton nhóm metin	δ_H
C	CH ₃ -R	0,9	R-CH ₂ -R	1,4	>CH-R	1,5
	CH ₃ -C-C=C	1,1	R-CH ₂ -C-C=C	1,7		
	CH ₃ -C-O	1,3	R-CH ₂ -C-O	1,9	>CH-C-O	2,0
	CH ₃ -C-N	1,1	R-CH ₂ -C-N	1,4		
	CH ₃ -C-NO ₂	1,6	R-CH ₂ -C-NO ₂	2,1		
	CH ₃ -C=C	1,6	R-CH ₂ -C=C	2,3		
	CH ₃ -Ar	2,3	R-CH ₂ -Ar	2,7	>CH-Ar	3,0
	CH ₃ -C=C-C=O	2,0	R-CH ₂ -C=C-C=O	2,4	>CH-C=C	2,5
	C=C(CH ₃)-C=O	1,8	C=C(CH ₂ -R)-C=O	2,4		
	CH ₃ -C≡C	1,8	R-CH ₂ -C≡C	2,2	>CH-C≡C	2,6
	CH ₃ -CO-R	2,2	R-CH ₂ -CO-R	2,4	>CH-CO-R	2,7
	CH ₃ -CO-Ar	2,6	R-CH ₂ -CO-Ar	2,9	>CH-CO-Ar	3,3

	Proton nhóm metyl	δ_H	Proton nhóm metylen	δ_H	Proton nhóm metin	δ_H
	CH ₃ -CO-OR	2,0	R-CH ₂ -CO-OR	2,2	>CH-CO-OR	2,5
	CH ₃ -CO-OAr	2,4	R-CH ₂ -CO-Hal	2,5-3,0	>CH-CO-N	2,4
	CH ₃ -CO-N	2,0	R-CH ₂ -CO-N	2,2	>CH-C=N	2,6
	CH ₃ -CO-Hal	2,5	R-CH ₂ -C≡N	2,3	>CH-C≡N	2,7
	CH ₃ -C=N-	2,0	-C=C-CH ₂ -C=C	2,6		
N	CH ₃ -N	2,3	R-CH ₂ -N	2,5	>CH-N	2,8
	CH ₃ -N-Ar	3,0	R-CH ₂ -N=	3,0-3,4		
	CH ₃ -N-CO-R	2,9	R-CH ₂ -N-CO-R	3,2	>CH-N-CO-R	4,0
	CH ₃ -N ⁺	3,3	R-CH ₂ -N ⁺	3,3		
	CH ₃ -N=	3,4	R-CH ₂ -NO ₂	4,4	>CH-NO ₂	4,7
O			R-CH ₂ -OH	3,6	>CH-OH	3,9
	CH ₃ -OR	3,3	R-CH ₂ -OR	3,4	>CH-OR	3,7
	CH ₃ -O-C=C	3,8	R-CH ₂ -O-C=C	3,7		
	CH ₃ -OAr	3,8	R-CH ₂ -OAr	4,3	>CH-OAr	4,5
	CH ₃ -O-CO-R	3,7	R-CH ₂ -O-CO-R	4,1	>CH-O-CO-R	4,8
			RO-CH ₂ -OR	4,8		
			ArO-CH ₂ -CO-	4,5-4,7 ^(*)		
X	CH ₃ -Hal	1,5-4,2	R-CH ₂ -F	4,4		
			R-CH ₂ -Cl	3,6	>CH-Cl	4,2
			R-CH ₂ -Br	3,5	>CH-Br	4,3
			R-CH ₂ -I	3,2	>CH-I	4,3
	CH ₃ -Si	0,0	R-CH ₂ -Si	0,5	>CH-Si	1,2
	CH ₃ -S	2,1	R-CH ₂ -S	2,4	>CH-S	3,2
	CH ₃ -S(O)R	2,5	S-CH ₂ -CO-	4,0-4,2 ^(*)		
	CH ₃ S(O ₂)R	2,8	R-CH ₂ -S(O ₂)R	2,9		
			RS-CH ₂ -SR	4,2		

Bảng 6.8. Độ chuyển dịch hoá học của proton đính với C liên kết đôi, hoặc ba

Proton	δ	Proton	δ	Proton	δ
$>C=CH-$	4,5 – 6,0	$-CH=C-N$	3,7 – 5,0	$H-CO-O-$	8,0 – 8,2
$>C=CH-CO-$	5,8 – 6,7	$>C=CH-N$	5,7 – 8,0	$H-CO-N-$	8,0 – 8,2
$-CH=C-CO-$	6,5 – 8,0	$-CH=N-N^{(*)}$	7,5 – 8,5	$-C\equiv C-H$	1,8 – 3,1
$-CH=C-O-$	4,0 – 5,0	$R-CH=O$	9,4 – 10,0	$>C=C=CH-$	4,0 – 5,0
$>C=CH-O-$	6 – 8,1	$Ar-CH=O$	9,7 – 10,5	$Ar-H$	6,0 – 9,0

(*) Ở nhiều dãy hidrazon $ArCH=N-N-$ chúng tôi đo được $\delta_{CH=N}$ là 8 + 10 ppm.

Độcdhhcủacác proton ở benzenlà 7,27 ppm. Độcdhhcủacác proton ở

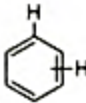
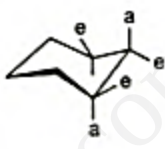
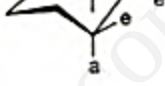
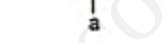
cácdẫnxuấtcủabenzencóthểtínhduyệnhờcôngthứccó dạng $\delta_{Hi} = 7,27 + \sum Z_i$.

TrongđóZ_ilàsốgiámâmđỉnhhómthếgâyradđốivớicácvịtríortho, meta vàpara so vớinó. Bảng 6.9 chobiếttZ_iđốivớicácnhómthườngthuộngặpp.

Bảng 6.9. Số gia Z_i đối với các nhóm thế đính với nhân benzen

R	Z _{ortho}	Z _{meta}	Z _{para}	R	Z _{ortho}	Z _{meta}	Z _{para}
-H	0	0	0	-NH ₂	- 0,76	- 0,25	- 0,63
-CH ₃	- 0,16	- 0,09	- 0,17	-NHCH ₃	- 0,80	- 0,30	- 0,60
-CH ₂ -CH ₃	- 0,15	- 0,06	- 0,18	-N(CH ₃) ₂	- 0,60	- 0,10	- 0,62
-CH(CH ₃) ₂	- 0,14	- 0,09	- 0,18	-NH ₃ ⁺	0,40	0,20	0,20
-C(CH ₃) ₃	- 0,09	- 0,05	- 0,23	-N(CH ₃) ₃ ⁺	0,69	0,36	0,31
-CH ₂ Cl	0,00	0,01	0,00	-NHCOCH ₃	0,2	- 0,07	- 0,28
-CH ₂ OH	- 0,07	- 0,07	- 0,07	-NO	0,58	0,31	0,37
-CH ₂ NH ₂	0,01	0,01	0,01	-NO ₂	0,94	0,18	0,39
-CH=CH ₂	0,06	- 0,03	- 0,10	-SH	- 0,08	- 0,16	- 0,22
-C ₆ H ₅	0,30	0,12	0,10	-SCH ₃	- 0,08	- 0,10	- 0,24
-C≡CH	0,15	- 0,02	- 0,01	-SC ₆ H ₅	0,06	- 0,09	- 0,15
-CH=O	0,58	0,20	0,26	-SO ₂ -OH	0,64	0,26	0,36
-COCH ₃	0,62	0,10	0,25	-SO ₂ NH ₂	0,66	0,26	0,36
-COC ₆ H ₅	0,47	0,13	0,22	-OH	- 0,56	- 0,13	- 0,45
-COOH	0,85	0,16	0,25	-OCH ₃	- 0,46	- 0,10	- 0,41
-COOCH ₃	0,71	0,08	0,20	-OCOCH ₃	- 0,25	0,03	- 0,13
-COOC ₆ H ₅	0,90	0,17	0,27	-OCOC ₆ H ₅	- 0,09	0,09	- 0,08
-CONH ₂	0,65	0,20	0,22	-F	- 0,26	0,00	- 0,20
-COCl	0,82	0,21	0,35	-Cl	0,03	- 0,02	- 0,09
-CN	0,36	0,18	0,28	-Br	0,18	- 0,08	- 0,04
				-I	0,39	- 0,21	- 0,03

Bảng 6.10. Hằng số tách $J_{HH'}$ ở một số cấu trúc thường gặp (Hz)

CẤU TRÚC	$J_{HH'}$			$J_{HH'}$	
	Khoảng chung	Điển hình		Khoảng chung	Điển hình
$>C\begin{smallmatrix} H \\ \diagup \\ H' \end{smallmatrix}$	0 – 25	10 – 15	$=C\begin{smallmatrix} H \\ \diagup \\ H' \end{smallmatrix}$	0 – 3,5	2
$>CH' - CH<$	0 – 8	~ 7	$\begin{smallmatrix} H \\ \diagup \end{smallmatrix}C = C\begin{smallmatrix} \diagdown \\ H' \end{smallmatrix}$	0 – 12	7 – 12
$CH_3 - CH'_2 -$	6 – 8	~ 7	$\begin{smallmatrix} H \\ \diagup \end{smallmatrix}C = C\begin{smallmatrix} \diagdown \\ H' \end{smallmatrix}$	12 – 18	14 – 16
$\begin{smallmatrix} CH_3 \\ \diagup \end{smallmatrix}CH' -$	5 – 7	~ 6	$>C = CH - CH' = C<$	6 – 13	10 – 13
$>CH - \overset{ }{C} - CH'<$	0 – 1	0	 J_o	6 – 10	8
$>CH - CH' = C<$	4 – 10	5 – 7	 J_m	0 – 3	2
$>CH - \overset{ }{C} = CH' -$	0 – 3	0,5 – 2	 J_p	0 – 1	1
$>CH - \overset{ }{C} = \overset{ }{C} - CH'<$	0 – 2	1	 $^2J_{ae}$	0 – 25	13
$>CH - C \equiv CH'$	2 – 3	2,5	 $^3J_{aa}$	10 – 13	12 – 13
$>CH - CH' = O$	0 – 3	2	 $^3J_{oe}$	2 – 5	~ 3
$>CH - O - H'$	4 – 5	(*)	 $^3J_{ao}$	2 – 5	~ 3,5
$>CH - \underset{ }{N} - H'$	5 – 6	(*)	 $^4J_{ee}$	0 – 2	1 – 2

(*) Chỉ thấy được khi không xảy ra sự trao đổi proton (mục 6.2.4)