

Химический сдвиг (справочник) Hans J. Reich

Справочник представляет собой пакет из пяти частей, каждая из которых содержит значения химических сдвигов для одного типа ядер (^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , ^{77}Se).

Материал онлайн-справочника собран из печатных справочников по ЯМР-спектроскопии, а также из первоисточников — публикаций в научных журналах.

Структуру справочника рассмотрим на примере части, относящейся к протонному магнитному резонансу.

Справочник предназначен для работы только в режиме Browse.

Материал скомпонован в виде двух блоков:

- Shift Tables — здесь соотнесены значения δ и структурные фрагменты, дающие соответствующий сигнал;
- классы, группы соединений — здесь приведены значения химических сдвигов протонов индивидуальных веществ (учтите, что информация далеко не всегда сгруппирована в интуитивно понятной форме).

Вся справочная информация приведена только в графическом формате.

К другим разделам

Список сокращений

Соотнесение δ и структурного фрагмента

Химические сдвиги для индивидуальных веществ

Shifts: [C-13](#), [F-19](#), [P-31](#), [Se-77](#)
 Coupling: [J\(HH\)](#), [J\(CH\)](#)
[NMR IR Spectra database](#)

Proton NMR Chemical Shifts -

-Explanation
 -Reference Abbreviations
 -Shift Table 1: δ -10 to 2
 -Shift Table 2: δ 2 to 6
 -Shift Table 3: δ 6 to 10
 -Shift Table 4: δ 10 to 20

[Acetal](#)
[Acetylene](#)
[Acridine](#)
[Adamantane](#)
[Alcohol](#)
[Aldehyde](#)

Alcohol See: Ketone

3.40 Me-OH JA-79-5361	1.22 (t) OH V-14	1.57 2.3 0.92 3.58 V-43	1.20 (d) OH 4.00 (sep) V-44
0.87 3.20 3.82 OH S-1897M	1.35 1.28 OH V-423	1.13 3.54 OH 2.83 Reich (Cohen)	

Пример

Протоны группы CH_2
 $\delta = 3.20$

Протоны групп CH_3
 $\delta = 0.87$

Протон гидроксильной группы
 $\delta = 3.82$

Ссылка на источник данных (Sadler Spectra Collection)

Расшифровка — по ссылке Reference Abbreviations в оглавлении

Ядерный магнитный резонанс на ядрах H-1.

Тренировочное упражнение 1.

Найдите значения химического сдвига протонов уксусной кислоты (ищите в группе "Карбоксильные кислоты").

Ответ для самопроверки:

CH_3 : $\delta = 2,10$; OH : $\delta = 11,37$.

Контрольное задание 1.

Найдите значения химического сдвига протонов 2-хлорпропана (ищите в группе "Галиды").

Ядерный магнитный резонанс на ядрах C-13.

Тренировочное упражнение 2.

Найдите значения химического сдвига ядер C-13 в уксусной кислоте.

Ответ для самопроверки:

CH_3 : $\delta = 22,0$; COOH : $\delta = 178,1$.

Контрольное задание 2.

Найдите значения химического сдвига ядер C-13 в 2-хлорпропане.