实验室常用数据表

— 快乐科研　品质之选 —

常用溶剂互溶表

沸点 (℃)		乙酸	丙酮	乙腈	苯	正丁醇	四氯化碳	氯仿	环己烷	环戊烷	二氯乙烷	二氯甲烷	二甲基甲酰胺	二甲基亚砜	二氧六环	乙酸乙酯	乙醇	乙醚	正庚烷	正己烷	甲醇	甲乙酮	异辛烷	戊烷	异丙醇	二丙醚	四氯乙烷	四氢呋喃	甲苯	三氯乙烷	水	二甲苯	密度 g/mL	
117.9	乙酸																																乙酸	1.05
56.1	丙酮																																丙酮	0.80
81.1	乙腈								■	■									■	■			■	■									乙腈	0.79
80.1	苯																														■		苯	0.88
117.3	正丁醇																														■		正丁醇	0.81
76.8	四氯化碳																														■		四氯化碳	1.60
61.3	氯仿																														■		氯仿	1.50
80.7	环己烷			■																	■										■		环己烷	0.78
49.3	环戊烷			■																	■										■		环戊烷	0.75
83.5	二氯乙烷																														■		二氯乙烷	1.26
39.8	二氯甲烷																														■		二氯甲烷	1.33
152.8	二甲基甲酰胺																		■	■			■	■		■						■	二甲基甲酰胺	0.94
189.0	二甲基亚砜																	■	■	■			■	■		■						■	二甲基亚砜	1.10
101.3	二氧六环																																二氧六环	1.04
77.1	乙酸乙酯																														■		乙酸乙酯	0.90
78.4	乙醇																																乙醇	0.79
34.6	乙醚													■																	■		乙醚	0.71
98.5	正庚烷			■									■	■							■										■		正庚烷	0.68
68.7	正己烷			■									■	■							■										■		正己烷	0.66
64.8	甲醇								■	■									■	■			■	■									甲醇	0.79
79.6	甲乙酮																														■		甲乙酮	0.81
99.3	异辛烷			■									■	■							■										■		异辛烷	0.69
36.1	戊烷			■									■	■							■										■		戊烷	0.63
82.4	异丙醇																																异丙醇	0.78
90.0	二丙醚												■	■																	■		二丙醚	0.74
146.2	四氯乙烷																														■		四氯乙烷	1.60
65.4	四氢呋喃																																四氢呋喃	0.89
110.6	甲苯																														■		甲苯	0.87
114.0	三氯乙烷																														■		三氯乙烷	1.35
100.0	水				■	■	■	■	■	■	■	■				■		■	■	■		■	■	■		■	■		■	■		■	水	1.00
141.0	二甲苯												■	■																	■		二甲苯	0.86

■ 不互溶　□ 互溶

常用化学溶剂残留 (^1H NMR Data)

	proton	mult	THF-d_8	CD_2Cl_2	$CDCl_3$	toluene-d_8	C_6D_6	C_6D_5Cl	$(CD_3)_2CO$	$(CD_3)_2SO$	CD_3CN	TFE-d_3	CD_3OD	D_2O
solvent residual signals			1.72	5.32	7.26	2.08	7.16	6.96	2.05	2.50	1.94	5.02	3.31	4.79
			3.58			6.97		6.99				3.88		
						7.01		7.14						
						7.09								
water	OH	s	2.46	1.52	1.56	0.43	0.40	1.03	2.84[a]	3.33[a]	2.13	3.66	4.87	
acetic acid	CH_3	s	1.89	2.06	2.10	1.57	1.52	1.76	1.96	1.91	1.96	2.06	1.99	2.08
acetone	CH_3	s	2.05	2.12	2.17	1.57	1.55	1.77	2.09	2.09	2.08	2.19	2.15	2.22
acetonitrile	CH_3	s	1.95	1.97	2.10	0.69	0.58	1.21	2.05	2.07	1.96	1.95	2.03	2.06
benzene	CH	s	7.31	7.35	7.36	7.12	7.15	7.20	7.36	7.37	7.37	7.36	7.33	
tert-butyl alcohol	CH_3	s	1.15	1.24	1.28	1.03	1.05	1.12	1.18	1.11	1.16	1.28	1.40	1.24
	OH	s[b]	3.16			0.58	0.63	1.30		4.19	2.18	2.20		
tert-butyl methyl ether	CCH_3	s			1.19		1.07		1.13	1.11	1.14		1.15	1.21
	OCH_3	s			3.22		3.04		3.13	3.08	3.13		3.20	3.22
BHT	ArH	s			6.98		7.05		6.96	6.87	6.97		6.92	
	OH[c]	s			5.01		4.79			6.65	5.20			
	$ArCH_3$	s			2.27		2.24		2.22	2.18	2.22		2.21	
	$ArC(CH_3)_3$	s			1.43		1.38		1.41	1.36	1.39		1.40	
chloroform	CH	s	7.89	7.32	7.26	6.10	6.15	6.74	8.02	8.32	7.58	7.33	7.90	
18-crown-6	CH_2	s	3.57	3.59	3.67	3.36	3.39	3.41	3.59	3.51	3.51	3.64	3.64	3.80
cyclohexane	CH_2	s	1.44	1.44	1.43	1.40	1.40	1.37	1.43	1.40	1.44	1.47	1.45	
1,2-dichloroethane	CH_2	s	3.77	3.76	3.73	2.91	2.90	3.26	3.87	3.90	3.81	3.71	3.78	
dimethylacetamide	CH_3CO	s			2.09		1.60		1.97	1.96	1.97		2.07	2.08
	NCH_3	s			3.02		2.57		3.00	2.94	2.96		3.31	3.06
	NCH_3	s			2.94		2.05		2.83	2.78	2.83		2.92	2.90
dichloromethane	CH_2	s	5.51	5.33	5.30	4.32	4.27	4.77	5.63	5.76	5.44	5.24	5.49	
diethyl ether	CH_3	t, 7	1.12	1.15	1.21	1.10	1.11	1.10	1.11	1.09	1.12	1.20	1.18	1.17
	CH_2	q, 7	3.38	3.43	3.48	3.25	3.26	3.31	3.41	3.38	3.42	3.58	3.49	3.56
diglyme	CH_2	m	3.43	3.57	3.65	3.43	3.46	3.49	3.56	3.51	3.53	3.67	3.61	3.67
	CH_2	m	3.53	3.50	3.57	3.31	3.34	3.37	3.47	3.38	3.45	3.62	3.58	3.61
	OCH_3	s	3.28	3.33	3.39	3.12	3.11	3.16	3.28	3.24	3.29	3.41	3.35	3.37
dimethylformamide	CH	s	7.91	7.96	8.02	7.57	7.63	7.73	7.96	7.95	7.92	7.86	7.97	7.92
	CH_3	s	2.88	2.91	2.96	2.37	2.36	2.51	2.94	2.89	2.89	2.98	2.99	3.01
	CH_3	s	2.76	2.82	2.88	1.96	1.86	2.30	2.78	2.73	2.77	2.88	2.86	2.85
dimethyl sulfoxide	CH_3	s			2.62		1.68		2.52	2.54	2.50		2.65	2.71
1,4-dioxane	CH_2	s	3.56	3.65	3.71	3.33	3.35	3.45	3.59	3.57	3.60	3.76	3.66	3.75
DME	CH_3	s	3.28	3.34	3.40	3.12	3.12	3.17	3.28	3.24	3.28	3.40	3.35	3.37
	CH_2	s	3.43	3.49	3.55	3.31	3.33	3.37	3.46	3.43	3.45	3.61	3.52	3.60
ethane	CH_3	s	0.85	0.85	0.87	0.81	0.80	0.79	0.83	0.82	0.85	0.85	0.85	0.82
ethanol	CH_3	t, 7	1.10	1.19	1.25	0.97	0.96	1.06	1.12	1.06	1.12	1.22	1.19	1.17
	CH_2	q, 7[c]	3.51	3.66	3.72	3.36	3.34	3.51	3.57	3.44	3.54	3.71	3.60	3.65
	OH	s[b,c]	3.30	1.33	1.32	0.83	0.50	1.39	3.39	4.63	2.47			
ethyl acetate	CH_3CO	s	1.94	2.00	2.05	1.69	1.65	1.78	1.97	1.99	1.97	2.03	2.01	2.07
	CH_2CH_3	q, 7	4.04	4.08	4.12	3.87	3.89	3.96	4.05	4.03	4.06	4.14	4.09	4.14
	CH_2CH_3	t, 7	1.19	1.23	1.26	0.94	0.92	1.04	1.20	1.17	1.20	1.26	1.24	1.24
ethyl methyl ketone	CH_3CO	s			2.14		1.58		2.07	2.07	2.06		2.12	2.19
	CH_2CH_3	q, 7			2.46		1.81		2.45	2.43	2.43		2.50	3.18
	CH_2CH_3	t, 7			1.06		0.85		0.96	0.91	0.96		1.01	1.26
ethylene	CH_2	s	5.36	5.40	5.40	5.25	5.25	5.29	5.38	5.41	5.41	5.40	5.39	5.44
ethylene glycol	CH_2	s[d]	3.48	3.66	3.76	3.36	3.41	3.58	3.28	3.34	3.51	3.72	3.59	3.65
H grease[e]	CH_3	m	0.85-0.91	0.84-0.90	0.84-0.87	0.89-0.96	0.90-0.98	0.86-0.92	0.90	0.82-0.88		0.88-0.94	0.86-0.93	
	CH_2	br s	1.29	1.27	1.25	1.33	1.32	1.30	1.29	1.24		1.33	1.29	
hexamethylbenzene	CH_3	s	2.18	2.20	2.24	2.10	2.13	2.10	2.17	2.14	2.19	2.24	2.19	
n-hexane	CH_3	t, 7	0.89	0.89	0.88	0.88	0.89	0.85	0.88	0.86	0.89	0.91	0.90	
	CH_2	m	1.29	1.27	1.26	1.22	1.24	1.19	1.28	1.25	1.28	1.31	1.29	
HMDSO	CH_3	s	0.07	0.07	0.07	0.10	0.12	0.10	0.07	0.06	0.07	0.08	0.07	0.28
HMPA	CH_3	d, 9.5	2.58	2.60	2.65	2.42	2.40	2.47	2.59	2.53	2.57	2.63	2.64	2.61
hydrogen	H_2	s	4.55	4.59	4.62	4.50	4.47	4.49	4.54	4.61	4.57	4.53	4.56	
imidazole	CH(2)	s	7.48	7.63	7.67	7.30	7.33	7.53	7.62	7.63	7.57	7.61	7.67	7.78
	CH(4,5)	s	6.94	7.07	7.10	6.86	6.90	7.01	7.04	7.01	7.01	7.03	7.05	7.14
methane	CH_4	s	0.19	0.21	0.22	0.17	0.16	0.15	0.17	0.20	0.20	0.18	0.20	0.18
methanol	CH_3	s[f]	3.27	3.42	3.49	3.03	3.07	3.25	3.31	3.16	3.28	3.44	3.34	3.34
	OH	s[b,f]	3.02	1.09	1.09			1.30	3.12	4.01	2.16			
nitromethane	CH_3	s	4.31	4.31	4.33	3.01	2.94	3.59	4.43	4.42	4.31	4.28	4.34	4.40
n-pentane	CH_3	t, 7	0.89	0.89	0.88	0.87	0.87	0.84	0.88	0.86	0.89	0.90	0.90	
	CH_2	m	1.31	1.30	1.27	1.25	1.23	1.23	1.27	1.27	1.29	1.33	1.29	
propane	CH_3	t, 7.3	0.90	0.90	0.90	0.89	0.86	0.84	0.88	0.87	0.90	0.90	0.91	0.88
	CH_2	sept, 7.3	1.33	1.32	1.32	1.32	1.26	1.26	1.31	1.29	1.33	1.33	1.34	1.30
2-propanol	CH_3	d, 6	1.08	1.17	1.22	0.95	0.95	1.04	1.10	1.04	1.09	1.20	1.50	1.17
	CH	sept, 6	3.82	3.97	4.04	3.65	3.67	3.82	3.90	3.78	3.87	4.05	3.92	4.02
propylene	CH_3	dt, 6.4, 1.5	1.69	1.71	1.73	1.55	1.55	1.58	1.68	1.68	1.70	1.70	1.70	1.70
	$CH_2(1)$	dm, 10	4.89	4.93	4.94	4.92	4.95	4.91	4.90	4.94	4.93	4.93	4.91	4.95
	$CH_2(2)$	dm, 17	4.99	5.03	5.03	4.98	5.01	4.98	5.00	5.03	5.04	5.03	5.01	5.06
	CH	m	5.79	5.84	5.83	5.70	5.72	5.72	5.81	5.80	5.85	5.87	5.82	5.90
pyridine	CH(2,6)	m	8.54	8.59	8.62	8.47	8.53	8.51	8.58	8.58	8.57	8.45	8.53	8.52
	CH(3,5)	m	7.25	7.28	7.29	6.67	6.66	6.90	7.35	7.39	7.33	7.40	7.44	7.45
	CH(4)	m	7.65	7.68	7.68	6.99	6.98	7.25	7.76	7.79	7.73	7.82	7.85	7.87
pyrrole	NH	br t	9.96	8.69	8.40	7.71	7.80	8.61	10.02	10.75	9.27			
	CH(2,5)	m	6.66	6.79	6.83	6.43	6.48	6.62	6.77	6.73	6.75	6.84	6.72	6.93
	CH(3,4)	m	6.02	6.19	6.26	6.27	6.37	6.27	6.07	6.01	6.10	6.24	6.08	6.26
pyrrolidine[g]	$CH_2(2,5)$	m	2.75	2.82	2.87	2.54	2.54	2.64		2.67	2.75	3.11	2.80	3.07
	$CH_2(3,4)$	m	1.59	1.67	1.68	1.36	1.33	1.43		1.55	1.61	1.93	1.71	1.87
silicone grease	CH_3	s	0.11	0.09	0.07	0.26	0.29	0.14	0.13	-0.06	0.08	0.16	0.10	
tetrahydrofuran	$CH_2(2,5)$	m	3.62	3.69	3.76	3.54	3.57	3.59	3.63	3.60	3.64	3.78	3.71	3.74
	$CH_2(3,4)$	m	1.79	1.82	1.85	1.43	1.40	1.55	1.79	1.76	1.80	1.91	1.87	1.88
toluene	CH_3	s	2.31	2.34	2.36	2.11	2.11	2.16	2.32	2.30	2.33	2.33	2.32	
	CH(2,4,6)	m	7.10	7.15	7.17	6.96-7.01	7.02	7.01-7.08	7.10-7.20	7.18	7.10-7.30	7.10-7.30	7.16	
	CH(3,5)	m	7.19	7.24	7.25	7.09	7.13	7.10-7.17	7.10-7.20	7.25	7.10-7.30	7.10-7.30	7.16	
triethylamine	CH_3	t, 7	0.97	0.99	1.03	0.95	0.96	0.93	0.96	0.93	0.96	1.31	1.05	0.99
	CH_2	q, 7	2.46	2.48	2.53	2.39	2.40	2.39	2.45	2.43	2.45	3.12	2.58	2.57

[a] A signal for HDO is also observed in $(CD_3)_2SO$ (3.30 ppm) and $(CD_3)_2CO$ (2.81 ppm), often seen as a 1:1:1 triplet ($^2J_{H,D}$ = 1 Hz). [b] Not all OH signals were observable. [c] In some solvents, the coupling interaction between the CH_2 and the OH protons may be observed (J=5 Hz). [d] In CD_3CN, the OH proton was seen as a multiplet at 2.69 ppm, as well as extra coupling to the CH_2 resonance. [e] Apiezon brand H grease. [f] In some solvents, a coupling interaction between the CH_3 and the OH protons may be observed (J = 5.5 Hz). [g] Pyrrolidine was observed to react with $(CD_3)_2CO$.

常用化学溶剂残留 (^{13}C NMR Data)

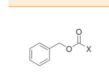
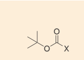
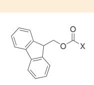
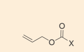
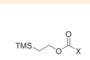
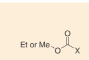
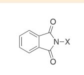
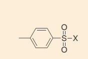
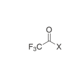
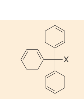
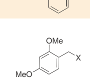
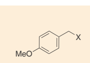
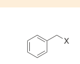
	carbon	THF-d_8	CD_2Cl_2	$CDCl_3$	toluene-d_8	C_6D_6	C_6D_5Cl	$(CD_3)_2CO$	$(CD_3)_2SO$	CD_3CN	TFE-d_3	CD_3OD	D_2O
solvent signals		67.21	53.84	77.16	137.48	128.06	134.19	29.84	39.52	1.32	61.50	49.00	
		25.31			128.87		129.26	206.26		118.26	126.28		
					127.96		128.25						
					125.13		125.96						
					20.43								
acetic acid	CO	171.69	175.85	175.99	175.30	175.82	175.67	172.31	171.93	173.21	177.96	175.11	177.21
	CH_3	20.13	20.91	20.81	20.27	20.37	20.40	20.51	20.95	20.73	20.91	20.56	21.03
acetone	CO	204.19	206.78	207.07	204.00	204.43	204.83	205.87	206.31	207.43	32.35	209.67	215.94
	CH_3	30.17	31.00	30.92	30.03	30.14	30.12	30.60	30.56	30.91	214.98	30.67	30.89
acetonitrile	CN	116.79	116.92	116.43	115.76	116.02	115.93	117.60	117.91	118.26	118.95	118.06	119.68
	CH_3	0.45	2.03	1.89	0.03	0.20	0.63	1.12	1.03	1.79	1.00	0.85	1.47
benzene	CH	128.84	128.68	128.37	128.57	128.62	128.38	129.15	128.30	129.32	129.84	129.34	
tert-butyl alcohol	$(CH_3)_3C$	67.50	69.11	69.15	68.12	68.19	68.19	68.13	66.88	68.74	72.35	69.40	70.36
	$(CH_3)_3C$	30.57	31.46	31.25	30.49	30.47	31.13	30.72	30.38	30.68	31.07	30.91	30.29
tert-butyl methyl ether	OCH_3			49.45		49.19		49.35	48.70	49.52		49.66	49.37
	C			72.87		72.40		72.81	72.04	73.17		74.32	75.62
	CCH_3			26.99		27.09		27.24	26.79	27.28		27.22	26.60
BHT	C(1)			151.55		152.05		152.51	151.47	152.42		152.85	
	C(2)			135.87		136.08		138.19	139.12	138.13		139.09	
	CH(3)			125.55		128.52		129.05	127.97	129.61		129.49	
	C(4)			128.27		125.83		126.03	124.85	126.38		126.11	
	CH_3Ar			21.20		21.40		21.31	20.97	21.23		21.38	
	CH_3C			30.33		31.34		31.61	31.25	31.50		31.15	
	C			34.25		34.35		35.00	34.33	35.05		35.36	
carbon dioxide	CO_2	125.69	125.26	124.99	124.86	124.76	126.08	125.81	124.21	125.89	126.92	126.31	
carbon disulfide	CS_2	193.37	192.95	192.83	192.71	192.69	192.49	193.58	192.63	193.60	196.26	193.82	197.25
carbon tetrachloride	CCl_4	96.89	96.52	96.34	96.57	96.44	96.38	96.65	95.44	96.68	97.74	97.21	96.73
chloroform	CH	79.24	77.99	77.36	77.89	77.79	77.67	79.19	79.16	79.17	78.83	79.44	
18-crown-6	CH_2	71.34	70.47	70.55	70.86	70.59	70.55	71.25	69.85	71.22	70.80	71.47	70.14
cyclohexane	CH_2	27.58	27.38	26.94	27.31	27.23	26.99	27.51	26.33	27.63	28.34	27.96	
1,2-dichloroethane	CH_2	44.64	44.35	43.50	43.40	43.59	43.60	45.25	45.02	45.54	45.28	45.11	
dichloromethane	CH_2	54.67	54.24	53.52	53.47	53.46	53.54	54.95	54.84	55.32	54.46	54.78	
diethyl ether	CH_3	15.49	15.44	15.20	15.47	15.46	15.35	15.78	15.12	15.63	15.33	15.46	14.77
	CH_2	66.14	66.11	65.91	65.94	65.94	65.79	66.12	62.05	66.32	67.55	66.88	66.42
diglyme	CH_3	58.72	58.95	59.01	58.62	58.66	58.42	58.77	57.98	58.90	59.40	59.06	58.67
	CH_2	71.17	70.70	70.51	70.92	70.87	70.56	71.03	69.54	70.99	73.05	71.33	70.05
	CH_2	72.72	72.25	71.90	72.39	72.35	72.07	72.63	71.25	72.63	71.33	72.92	71.63
dimethylformamide	CH	161.96	162.57	162.62	161.93	162.13	162.01	162.79	162.29	163.31	166.01	164.73	165.53
	CH_3	35.65	36.56	36.50	35.22	35.25	35.45	36.15	35.73	36.57	37.76	36.89	37.54
	CH_3	30.70	31.39	40.76	30.64	30.72	30.71	31.03	30.73	31.32	30.96	31.61	32.03
dimethyl sulfoxide	CH_3			31.45		40.03		41.23	40.45	41.31		40.45	39.39
1,4-dioxane	CH_2	67.65	67.47	67.14	67.17	67.16	66.95	67.60	66.36	67.72	68.52	68.11	67.19
DME	CH_3	58.72	59.02	59.08	58.63	58.68	58.31	58.45	58.03	58.89	59.52	59.06	58.67
	CH_2	72.58	72.24	71.84	72.25	72.21	71.81	72.47	71.17	72.47	72.87	72.72	71.49
ethane	CH_3	6.79	6.91	6.89	6.94	6.96	6.91	6.88	6.61	6.99	7.01	6.98	
ethanol	CH_3	18.90	18.69	18.41	18.78	18.72	18.55	18.89	18.51	18.80	18.11	18.40	17.47
	CH_2	57.60	58.57	58.28	57.81	57.86	57.63	57.72	56.07	57.96	59.68	58.26	58.05
ethyl acetate	CH_3CO	20.45	21.15	21.04	20.46	20.56	20.50	20.83	20.68	21.16	21.18	20.88	21.15
	CO	170.32	171.24	171.36	170.02	170.44	170.20	170.96	170.31	171.68	175.55	172.89	175.26
	CH_2	60.30	60.63	60.49	60.08	60.21	60.06	60.56	59.74	60.98	62.70	61.50	62.32
	CH_3	14.37	14.37	14.19	14.23	14.19	14.07	14.50	14.40	14.54	14.36	14.49	13.92
ethyl methyl ketone	CH_3CO			29.49		28.56		29.30	29.26	29.60		29.39	29.49
	CO			209.56		206.55		208.30	208.72	209.88		212.16	218.43
	CH_2CH_3			36.89		36.36		36.75	35.83	37.09		37.34	37.27
	CH_2CH_3			7.86		7.91		8.03	7.61	8.14		8.09	7.87
ethylene	CH_2	123.09	123.20	123.13	122.92	122.96	122.95	123.47	123.52	123.69	124.08	123.46	
ethylene glycol	CH_2	64.35	64.08	63.79	64.29	64.34	64.03	64.26	62.76	64.22	64.87	64.30	63.17
H grease[a]	CH_2	30.45	30.14	29.71	30.31	30.22	30.11						
hexamethylbenzene	C	131.88	132.09	132.21	131.72	131.79	131.54	132.22	131.10	132.61	134.04	132.53	
	CH_3	16.71	16.93	16.98	16.84	16.95	16.68	16.86	16.60	16.94	17.04	16.90	
n-hexane	CH_3	14.22	14.28	14.14	14.34	14.32	14.18	14.34	13.88	14.43	14.63	14.45	
	$CH_2(2,5)$	23.33	23.07	22.70	23.12	23.04	22.86	23.28	22.05	23.40	24.06	23.68	
	$CH_2(3,4)$	32.34	32.01	31.64	32.06	31.96	31.77	32.30	30.95	32.36	33.17	32.73	
HMDSO	CH_3	1.83	1.96	1.97	1.99	2.05	1.92	2.01	1.96	2.07	2.09	1.99	2.31
HMPA[b]	CH_3	36.89	36.99	36.87	36.80	36.88	36.64	37.04	36.42	37.10	37.21	37.00	36.46
imidazole	CH(2)	135.72	135.76	135.38	135.57	135.76	135.50	135.89	135.15	136.33	136.58	136.31	136.65
	CH(4,5)	122.20	122.16	122.00	122.13	122.16	121.96	122.31	121.55	122.78	122.93	122.60	122.43
methane	CH_4	-4.90	-4.33	-4.63	-4.34	-4.29	-4.33	-5.33	-4.01	-4.61	-5.88	-4.90	
methanol	CH_3	49.64	50.45	50.41	49.90	49.97	49.66	49.77	48.59	49.90	50.67	49.86	49.50
nitromethane	CH_3	62.49	63.03	62.50	61.14	61.16	61.68	63.21	63.28	63.66	63.17	63.08	63.22
n-pentane	CH_3	14.18	14.24	14.08	14.27	14.25	14.10	14.29	13.28	14.37	14.54	14.39	
	$CH_2(2,4)$	23.00	22.77	22.38	22.79	22.72	22.54	22.98	21.70	23.08	23.75	23.38	
	$CH_2(3)$	34.87	34.57	34.16	34.54	34.45	34.26	34.83	33.48	34.89	35.76	35.30	
propane	CH_3	16.60	16.63	16.63	16.65	16.66	16.56	16.68	16.34	16.73	16.93	16.80	
	CH_2	16.82	16.63	16.37	16.63	16.60	16.48	16.78	15.67	16.91	17.46	17.19	
2-propanol	CH_3	25.70	25.43	25.14	25.24	25.18	25.14	25.67	25.43	25.55	25.21	25.27	24.38
	CH	66.14	64.67	64.50	64.12	64.23	64.18	63.85	64.92	64.30	66.69	64.71	64.88
propylene	CH_3	19.27	19.47	19.50	19.32	19.38	19.32	19.42	19.20	19.48	19.63	19.50	
	CH_2	115.74	115.70	115.74	115.89	115.92	115.86	116.03	116.07	116.12	116.38	116.04	
	CH	134.02	134.21	133.91	133.61	133.69	133.57	134.34	133.55	134.78	136.00	134.61	
pyridine	CH(2,6)	150.57	150.27	149.90	150.25	150.27	149.93	150.67	149.58	150.76	149.76	150.07	149.18
	CH(3,5)	124.08	124.06	123.75	123.46	123.58	123.49	124.57	123.84	127.76	126.27	125.53	125.12
	CH(4)	135.99	136.16	135.96	135.17	135.28	135.32	136.56	136.05	136.89	139.62	138.35	138.27
pyrrole	CH(2,5)	118.03	117.93	117.77	117.61	117.78	117.65	117.98	117.32	118.47	119.61	118.28	119.06
	CH(3,4)	107.74	108.02	107.98	108.15	108.21	108.03	108.04	107.07	108.31	108.85	108.11	107.83
pyrrolidine[c]	$CH_2(2,5)$	45.82	47.02	46.93	47.12	46.86	46.75		46.51	47.57	47.43	47.23	46.83
	$CH_2(3,4)$	26.17	25.83	25.56	25.75	25.65	25.59		25.26	26.34	25.73	26.29	25.86
silicone grease	CH_3	1.20	1.22	1.19	1.37	1.38	1.09	1.40			2.87	2.10	
tetrahydrofuran	$CH_2(2,5)$	68.03	68.16	67.97	67.75	67.80	67.64	68.07	67.03	68.33	69.53	68.83	68.68
	$CH_2(3,4)$	26.19	25.98	25.62	25.79	25.72	25.68	26.15	25.14	26.27	26.69	26.48	25.67
toluene	CH_3	21.29	21.53	21.46	21.37	21.10	21.23	21.46	20.99	21.50	21.62	21.50	
	C(1)	138.24	138.36	137.89	137.84	137.91	137.65	138.48	137.35	138.90	139.92	138.85	
	CH(2,6)	129.47	129.35	129.07	129.33	129.33	129.12	129.79	128.88	129.94	130.58	129.91	
	CH(3,5)	128.71	128.54	128.26	128.51	128.56	128.31	129.03	128.18	129.23	129.79	129.20	
	CH(4)	125.84	125.62	125.33	125.66	125.68	125.43	126.12	125.29	126.28	126.82	126.29	
triethylamine	CH_3	12.51	12.12	11.61	12.39	12.35	11.87	12.49	11.74	12.38	9.51	11.09	9.07
	CH_2	47.18	46.75	46.25	46.82	46.77	46.36	47.07	45.74	47.10	48.45	46.96	47.19

[a] Apiezon brand H grease. [b] Phosphorus coupling was observed ($^2J_{PC}$ = 3 Hz). [c] Pyrrolidine was observed to react with $(CD_3)_2CO$.

NMR 内标物标准谱图

		Solvents			
Compound	MW	$CDCl_3$	DMSO	CD_3OD	D_2O
2,2-Diphenylacetonitrile	193.09	7.33(m) 5.12(s)	7.28~7.40(m) 5.56(s)		
1,3,5-Trimethoxybenzene	168.08	6.08(s) 3.75(s)	6.09(s) 3.71(s)	6.08(s) 3.74(s)	
1,4-Bis(trimethylsilyl)benzene	222.13	7.54(s) 0.29(s)			
Dimethyl terephthalate	194.06	8.11(s) 3.96(s)	8.09(s) 3.89(s)	8.11(s) 3.94(s)	8.02(s) 3.85(s)
Maleic acid	116.01		12.45(br) 6.29(s)	6.26(s)	6.21(s)
1,3,5-Trioxane	90.03	5.17(s)	5.11(s)		
2H-Chromen-2-one	146.04	7.78(d) 7.53~7.50(m) 7.32~7.29(m) 6.42(d)	8.03(d) 7.58~7.55(m) 7.28~7.30(m) 6.47(d)		
Hydroquinone	110.04	7.4(s) 6.6(s)	8.59(s) 6.58(s)		
1,2,4,5-Tetrachlorobenzene	213.89	7.55(s)			
1,4-Dinitrobenzene	168.02	8.44(s)	8.46(s)	8.47(s)	8.36(s)
Benzyl benzoate	212.08	8.07(d) 7.55(m) 7.41(m) 7.46~7.26(m) 5.35(s)	8.02(d) 7.68(t) 7.55(t) 7.49(dd) 7.42(t) 7.37(t) 5.37(s)		
Sodium acetate	82.00		1.58(s)	1.89(s)	1.80(s)
3,4,5-Trichloropyridine	180.93	8.53(s)	8.77(s)	8.61(s)	8.44(s)
Fumaric acid	116.01		13.12(s)	6.76(s)	6.73(s)
2,3,5-Triiodobenzoic acid	499.73	8.37(s) 7.94(s)	8.31(s) 7.72(s)	8.35(s) 7.75(s)	8.19(s) 7.41(s)

几种常用的氨基保护与脱保护方法

结构	缩写	应用	引入条件	脱去条件
	Cbz	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Cbz-Cl/Na_2CO_3/$CHCl_3$/H_2O	H_2/Pd-C, 供氢体/Pd-C, BBr_3/CH_2Cl_2 or TFA, HBr/HOAc等
	Boc	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Boc_2O/NaOH/diox/H_2O, Boc_2O/MeOH, Boc_2O/Me_4NOH/CH_3CN	3M HCl/EtOAc, HCl/MeOH or diox, TosOH/THF-CH_2Cl_2, Me_3SiI/$CHCl_3$ or CH_3CN
	Fmoc	伯胺、仲氨等	Fmoc-Cl/$NaHCO_3$/diox/H_2O	20%哌啶/DMF, 50%哌啶/CH_2Cl_2等
	Alloc	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Alloc-Cl/Py	$Ni(CO)_4$/DMF/H_2O, $Pd(PPh_3)_4$/Bu_3SnH
	Teoc	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Teoc-Cl/碱/diox/H_2O	TBAF, TEAF
	-	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	ROCOCl/$NaHCO_3$/diox/H_2O	HBr/HOAc, Me_3SiI, KOH/H_2O/乙二醇
	Pht	伯胺	邻苯二甲酸酐/$CHCl_3$/70℃, 邻苯二甲酰亚胺-NCO_2Et/aq. Na_2CO_3	H_2NNH_2/EtOH, $NaBH_4$/i-PrOH-H_2O (6:1)
	Tos	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Tos-Cl/Et_3N	HBr/HOAc, 48%HBr/苯酚 (cat)
	Tfa	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	TFAA/Py, 苯二甲酰亚胺-NCO_2CF_3/CH_2Cl_2	K_2CO_3/MeOH/H_2O, NH_3/MeOH, HCl/MeOH
	Trt	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Trt-Cl/Et_3N	HCl/MeOH, H_2/Pd/EtOH, TFA/CH_2Cl_2
	Dmb	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	ArCHO/$NaBH_3CN$/MeOH	TFA/CH_2Cl_2, HCl/THF
	PMB	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	PMB-Br/K_2CO_3/CH_3CN, PhCHO/$NaBH_3CN$/MeOH	HCO_2H/Pd-C/MeOH, H_2/$Pd(OH)_2$/EtOH, TFA, CAN/CH_3CN
	Bn	伯胺、仲氨、咪唑、吡咯、吲哚等	Bn-Br/Et_3N or K_2CO_3/CH_3CN, PhCHO/$NaBH_3CN$/MeOH	HCO_2H/Pd-C/MeOH, H_2/$Pd(OH)_2$/EtOH, CCl_3CH_2OCOCl/CH_3CN

20 种氨基酸缩写

中文名称	英文名称	三字母缩写	单字母符号	中文名称	英文名称	三字母缩写	单字母符号
甘氨酸	Glycine	Gly	G	苏氨酸	Threonine	Thr	T
丙氨酸	Alanine	Ala	A	半胱氨酸	Cystine	Cys	C
缬氨酸	Valine	Val	V	蛋氨酸	Methionine	Met	M
亮氨酸	Leucine	Leu	L	天冬酰胺	Asparagine	Asn	N
异亮氨酸	Isoleucine	Ile	I	谷氨酰胺	Glutarnine	Gln	Q
脯氨酸	Proline	Pro	P	天冬氨酸	Asparticacid	Asp	D
苯丙氨酸	Phenylalanine	Phe	F	谷氨酸	Glutamicacid	Glu	E
酪氨酸	Tyrosine	Tyr	Y	赖氨酸	Lysine	Lys	K
色氨酸	Tryptophan	Trp	W	精氨酸	Arginine	Arg	R
丝氨酸	Serine	Ser	S	组氨酸	Histidine	His	H

冷却剂最低制冷温度

冷却剂 (m:m)	温度 (℃)	冷却剂	温度 (℃)
Ice	0	Chloroform/N_2	-63
Ethylene Glycol/CO_2	-15	Chloroform/CO_2	-61
Ice/NH_4Cl (100:25)	-15	Ethanol/CO_2	-72
Ice/NaCl (100:33)	-21	Butyl acetate/CO_2	-77
Carbon Tetrachloride/N_2	-23	Acetone/CO_2	-78
Carbon Tetrachloride/CO_2	-23	Methanol/N_2	-98
Ice/EtOH (100:100)	-30	Diethyl ether/CO_2	-100
Acetonitrile/N_2	-41	*n*-Pentane/N_2	-131
Ice/$CaCl_2$•$6H_2O$ (100:150)	-55	N_2	-180

Hotline: 400-821-0725

Email: product@leyan.com.cn

www.leyan.com.cn

樂研 - leyan.com.cn -