

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
solvent residual signals			1.72/3.58	5.32	7.26	2.08/6.97 /7.01/7.09	7.16	6.96/6.99 /7.14	2.05	2.5	1.94	5.02/3.88	3.31	4.79
water	OH	s	2.46	1.52	1.56	0.43	0.4	1.03	2.843	3.333	2.13	3.66	4.87	-
acetic acid	CH3	s	1.89	2.06	2.1	1.57	1.52	1.76	1.96	1.91	1.96	2.06	1.99	2.08
acetone	CH3	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	CH3	s	1.95	1.97	2.1	0.69	0.58	1.21	2.05	2.07	1.96	1.95	2.03	2.06
allylacetate	CHCH2	ddt	5.9	5.92	5.93	5.674	5.684	5.77	5.92	5.91	5.93	5.93	5.94	5.99
allylacetate	CHCH2(1)	ddt	5.27	5.31	5.32	5.05	5.06	5.15	5.29	5.29	5.29	5.32	5.3	5.37
allylacetate	CHCH2(2)	ddt	5.15	5.22	5.24	4.94	4.94	5.04	5.18	5.2	5.21	5.25	5.21	5.3
allylacetate	CH2	ddt	4.5	4.55	4.57	4.34	4.38	4.44	4.53	4.52	4.53	4.58	4.56	4.62
allylacetate	CH3	s	1.98	2.05	2.09	1.63	1.63	1.8	2.02	2.03	2.02	2.07	2.05	2.13
benzaldehyde	HCO	s	9.98	10.01	10.03	9.57	9.64	9.77	10.05	10.02	10.01	9.88	10	9.96
benzaldehyde	CH(2,6)	m	7.86-7.88	7.87-7.89	7.88-7.91	7.45-7.47	7.49-7.53	7.59-7.61	7.92-7.94	7.91-7.93	7.89-7.91	7.90-7.92	7.90-7.93	7.97-7.99
benzaldehyde	CH(3,5)	m	7.51-7.55	7.53-7.57	7.51-7.57	6.95-6.99	6.93-6.99	7.15-7.19	7.59-7.63	7.61-7.67	7.57-7.61	7.56-7.59	7.56-7.60	7.57-7.66
benzaldehyde	CH(4)	m	7.60-7.64	7.63-7.67	7.61-7.65	7.03-7.07	7.01-7.07	7.24-7.28	7.69-7.73	7.69-7.75	7.67-7.71	7.68-7.72	7.66-7.70	7.76-7.80
benzene	CH	s	7.31	7.35	7.36	7.12	7.15	7.2	7.36	7.37	7.37	7.36	7.33	-
tertbutylalcohol	CH3	s	1.15	1.24	1.28	1.03	1.05	1.12	1.18	1.11	1.16	1.28	1.4	1.24
tertbutylalcohol	OH	s ⁵	3.16	-	-	0.58	0.63	1.3	-	4.19	2.18	2.2	-	-

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
BHA	ArH	s	6.68	6.73	6.76	6.83	6.93	6.83	6.72	6.62	6.73	6.87	6.71	-
BHA	OH	s ⁵	5.64	4.76	4.76	4.45	4.53	4.62	5.65	6.52	4.98	-	4.85	-
BHA	ArOCH3	s	3.68	3.73	3.77	3.48	3.48	3.61	3.72	3.66	3.72	3.79	3.72	-
BHA	ArC(CH3) ₃	s	1.4	1.42	1.44	1.34	1.41	1.37	1.41	1.36	1.4	1.44	1.41	-
BHT	ArH	s	6.92	6.97	6.98	6.99	7.05	6.97	6.96	6.87	6.97	7.06	6.92	-
BHT	OH	s ⁵	5.81	5	5.01	4.72	4.79	5.5	-	6.65	5.2	-	-	-
BHT	ArCH3	s	2.21	2.25	2.27	2.23	2.24	2.2	2.22	2.18	2.22	2.24	2.21	-
BHT	ArC(CH3) ₃	s	1.4	1.42	1.43	1.36	1.38	1.37	1.41	1.36	1.39	1.43	1.4	-
chloroform	CH	s	7.89	7.32	7.26	6.1	6.15	6.74	8.02	8.32	7.58	7.33	7.9	-
18-crown-6	CH2	s	3.57	3.59	3.67	3.36	3.39	3.41	3.59	3.51	3.51	3.64	3.64	3.8
cyclohexane	CH2	s	1.44	1.44	1.43	1.4	1.4	1.37	1.43	1.4	1.44	1.47	1.45	-
cyclohexane	CH2(2,6)	t	2.24	2.29	2.33	1.95	1.98	2.08	2.27	2.25	2.27	2.38	2.34	2.4
cyclohexane	CH2(3,5)	m	1.77-1.82	1.81-1.87	1.84-1.86	1.33-1.39	1.28-1.37	1.48-1.53	1.79-1.83	1.74-1.78	1.79-1.84	1.87-1.92	1.85-1.87	1.85-1.90
cyclohexane	CH2(4)	m	1.68-1.71	1.69-1.72	1.71-1.73	1.16-1.20	1.08-1.16	1.33-1.37	1.70-1.74	1.64-1.66	1.67-1.72	1.75-1.78	1.74-1.76	1.70-1.75
diallylcarbonate	CHCH2	ddt	5.92	5.95	5.94	5.63	5.65	5.75	5.96	5.93	5.96	5.92	5.94	5.99
diallylcarbonate	CHCH2(1)	ddt	5.31	5.35	5.37	5.09	5.09	5.17	5.35	5.33	5.34	5.35	5.34	5.4
diallylcarbonate	CHCH2(2)	ddt	5.19	5.26	5.27	4.92	4.92	5.03	5.23	5.25	5.25	5.28	5.25	5.32

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
diallylcarbonate	CH2	ddd	4.58	4.61	4.64	4.34	4.38	4.46	4.62	4.61	4.61	4.62	4.61	4.69
1,2-dichloroethane	CH2	s	3.77	3.76	3.73	2.91	2.9	3.26	3.87	3.9	3.81	3.71	3.78	-
dichloromethane	CH2	s	5.51	5.33	5.3	4.32	4.27	4.77	5.63	5.76	5.44	5.24	5.49	-
diethylether	CH3	t,7	1.12	1.15	1.21	1.1	1.11	1.1	1.11	1.09	1.12	1.2	1.18	1.17
diethylether	CH2	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	CH2	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
diglyme	CH2	m	3.53	3.5	3.57	3.31	3.34	3.37	3.47	3.38	3.45	3.62	3.58	3.61
diglyme	OCH3	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
1,2-dimethoxyethane	CH3	s	3.28	3.34	3.4	3.12	3.12	3.17	3.28	3.24	3.28	3.4	3.35	3.37
1,3-dimethoxyethane	CH2	s	3.43	3.49	3.55	3.31	3.33	3.37	3.46	3.43	3.45	3.61	3.52	3.6
dimethylacetamide	CH3CO	s	1.94	2.02	2.09	1.59	1.6	1.74	1.97	1.96	1.97	2.09	2.07	2.08
dimethylacetamide	NCH3	s	2.95	2.97	3.02	2.56	2.57	2.65	3	2.94	2.96	3.05	3.31	3.06
dimethylacetamide	NCH3	s	2.82	2.87	2.94	2.11	2.05	2.42	2.83	2.78	2.83	2.94	2.92	2.9
dimethylcarbonate	CH3	s	3.69	3.75	3.79	3.31	3.3	3.48	3.72	3.69	3.72	3.77	3.74	3.69
dimethylmalonate	CH3	s	3.65	3.72	3.75	3.24	3.23	3.41	3.68	3.65	3.68	3.76	3.72	3.78
dimethylmalonate	CH2	s	3.35	3.37	3.4	2.92	2.97	3.15	3.42	3.53	3.38	3.41	3.44	3.6
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

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
dimethylformamide	CH3	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
dimethylformamide	CH3	s	2.76	2.82	2.88	1.96	1.86	2.3	2.78	2.73	2.77	2.88	2.86	2.85
dimethylsulfoxide	CH3	s	2.45	2.55	2.62	1.64	1.68	2.03	2.52	2.54	2.5	2.63	2.65	2.71
1,4-dioxane	CH2	s	3.56	3.65	3.71	3.33	3.35	3.45	3.59	3.57	3.6	3.76	3.66	3.75
ethane	CH3	s	0.85	0.85	0.87	0.81	0.8	0.79	0.83	0.82	0.85	0.85	0.85	0.82
ethanol	CH3	t,7	1.1	1.19	1.25	0.97	0.96	1.06	1.12	1.06	1.12	1.22	1.19	1.17
ethanol	CH2	q,7 ⁶	3.51	3.66	3.72	3.36	3.34	3.51	3.57	3.44	3.54	3.71	3.6	3.65
ethanol	OH	s ^{5,6}	3.3	1.33	1.32	0.83	0.5	1.39	3.39	4.63	2.47	-	-	-
ethylacetate	CH3CO	s	1.94	2	2.05	1.69	1.65	1.78	1.97	1.99	1.97	2.03	2.01	2.07
ethylacetate	CH2CH3	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
ethylacetate	CH2CH3	t,7	1.19	1.23	1.26	0.94	0.92	1.04	1.2	1.17	1.2	1.26	1.24	1.24
ethylmethylketone	CH3CO	s	2.03	2.09	2.14	1.59	1.58	1.78	2.07	2.07	2.06	2.16	2.12	2.19
ethylmethylketone	CH2CH3	q,7	2.39	2.43	2.46	1.82	1.81	2.06	2.45	2.43	2.43	2.49	2.5	3.18
ethylmethylketone	CH2CH3	t,7	0.96	1	1.06	0.84	0.85	0.89	0.96	0.91	0.96	1.05	1.01	1.26
ethylene	CH2	s	5.36	5.4	5.4	5.25	5.25	5.29	5.38	5.41	5.41	5.4	5.39	5.44
ethyleneglycol	CH2	s7	3.48	3.66	3.76	3.36	3.41	3.58	3.28	3.34	3.51	3.72	3.59	3.65
furan	CH(2,5)	dd	7.48	7.46	7.45	7.1	7.13	7.24	7.56	7.67	7.52	7.44	7.49	7.57

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
furan	CH(3,4)	dd	6.37	6.41	6.4	6.07	6.08	6.19	6.43	6.47	6.44	6.42	6.4	6.51
Hgrease8	CH3	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	0.9	0.82–0.88	-	0.88–0.94	0.86–0.93	-
Hgrease8	CH2	br s	1.29	1.27	1.25	1.33	1.32	1.3	1.29	1.24	-	1.33	1.29	-
hexamethylbenzene	CH3	s	2.18	2.2	2.24	2.1	2.13	2.1	2.17	2.14	2.19	2.24	2.19	-
hexamethyldisiloxane	CH3	s	0.07	0.07	0.07	0.1	0.12	0.1	0.07	0.06	0.07	0.08	0.07	0.28
n-hexane	CH3	t,7	0.89	0.89	0.88	0.88	0.89	0.85	0.88	0.86	0.89	0.91	0.9	-
n-hexane	CH2	m	1.29	1.27	1.26	1.22	1.24	1.19	1.28	1.25	1.28	1.31	1.29	-
HMPA	CH3	d,9.5	2.58	2.6	2.65	2.42	2.4	2.47	2.59	2.53	2.57	2.63	2.64	2.61
hydrogen	H2	s	4.55	4.59	4.62	4.5	4.47	4.49	4.54	4.61	4.57	4.53	4.56	-
imidazole	CH(2)	s	7.48	7.63	7.67	7.3	7.33	7.53	7.62	7.63	7.57	7.61	7.67	7.78
imidazole	CH(4,5)	s	6.94	7.07	7.1	6.86	6.9	7.01	7.04	7.01	7.01	7.03	7.05	7.14
methane	CH4	s	0.19	0.21	0.22	0.17	0.16	0.15	0.17	0.2	0.2	0.18	0.2	0.18
methanol	CH3	s ⁹	3.27	3.42	3.49	3.03	3.07	3.25	3.31	3.16	3.28	3.44	3.34	3.34
methanol	OH	s ^{5,9}	3.02	1.09	1.09	-	-	1.3	3.12	4.01	2.16	-	-	-
nitromethane	CH3	s	4.31	4.31	4.33	3.01	2.94	3.59	4.43	4.42	4.31	4.28	4.34	4.4
n-pentane	CH3	t,7	0.89	0.89	0.88	0.87	0.87	0.84	0.88	0.86	0.89	0.9	0.9	-
n-pentane	CH2	m	1.31	1.3	1.27	1.25	1.23	1.23	1.27	1.27	1.29	1.33	1.29	-

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
propane	CH3	t,7.3	0.9	0.9	0.9	0.89	0.86	0.84	0.88	0.87	0.9	0.9	0.91	0.88
propane	CH2	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	1.3
2-propanol	CH3	d,6	1.08	1.17	1.22	0.95	0.95	1.04	1.1	1.04	1.09	1.2	1.15	1.17
3-propanol	CH	sept,6	3.82	3.97	4.04	3.65	3.67	3.82	3.9	3.78	3.87	4.05	3.92	4.02
propylene	CH3	dt,6.4,1.5	1.69	1.71	1.73	1.55	1.55	1.58	1.68	1.68	1.7	1.7	1.7	1.7
propylene	CH2(1)	dm,10	4.89	4.93	4.94	4.92	4.95	4.91	4.9	4.94	4.93	4.93	4.91	4.95
propylene	CH2(2)	dm,17	4.99	5.03	5.03	4.98	5.01	4.98	5	5.03	5.04	5.03	5.01	5.06
propylene	CH	m	5.79	5.84	5.83	5.7	5.72	5.72	5.81	5.8	5.85	5.87	5.82	5.9
pumpoil	CH3	m	0.86–0.90	0.84–0.89	0.83–0.89	0.88–0.96	0.91–0.97	0.88–0.91	0.87	0.74	0.85	0.99	0.86–0.91	-
pumpoil	CH2	br s	1.29	1.27	1.26	1.3	1.37	1.31	1.29	1.15	1.27	1.41	1.29	-
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
pyridine	CH(3,5)	m	7.25	7.28	7.29	6.67	6.66	6.9	7.35	7.39	7.33	7.4	7.44	7.45
pyridine	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	brt	9.96	8.69	8.4	7.71	7.8	8.61	10.02	10.75	9.27	-	-	-
pyrrole	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
pyrrole	CH(3,4)	m	6.02	6.19	6.26	6.27	6.37	6.27	6.07	6.01	6.1	6.24	6.08	6.26
pyrrolidine10	CH2(2,5)	m	2.75	2.82	2.87	2.54	2.54	2.64	-	2.67	2.75	3.11	2.8	3.07

氢谱化学位移表

常见杂质	proton	mult	THF-d8	CD2Cl2	CDCl3	Toluene-d8	C6D6	C6D5Cl	(CD3)2CO	(CD3)2SO	CD3CN	TFE-d3	CD3OD	D2O
pyrrolidine11	CH2(3,4)	m	1.59	1.67	1.68	1.36	1.33	1.43	-	1.55	1.61	1.93	1.72	1.87
siliconegrease	CH3	s	0.11	0.09	0.07	0.26	0.29	0.14	0.13	-0.06	0.08	0.16	0.1	-
tetrahydrofuran	CH2(2,5)	m	3.62	3.69	3.76	3.54	3.57	3.59	3.63	3.6	3.64	3.78	3.71	3.74
tetrahydrofuran	CH2(3,4)	m	1.79	1.82	1.85	1.43	1.4	1.55	1.79	1.76	1.8	1.91	1.87	1.88
toluene	CH3	s	2.31	2.34	2.36	2.11	2.11	2.16	2.32	2.3	2.33	2.33	2.32	-
toluene	CH(2,4,6)	m	7.1	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	-
toluene	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	CH3	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
triethylamine	CH2	q,7	2.46	2.48	2.53	2.39	2.4	2.39	2.45	2.43	2.45	3.12	2.58	2.57