

طیف‌سنجی پیشرفته

«شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌های 2D NMR»

نوشته‌ی

ای. ی. نیاد، اچ. ال. لی و ای. ام. ماگیل

دانشکده‌ی شیمی، نیو سوف ولز استرالیا

ترجمه از انگلیسی به پارسی

دکتر اسکندر علیپور

(عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال)

مهندس میلاد میرزاعلیخان

(کارشناس ارشد شیمی آلی)



انتشارات علوم پویا

سرشناسه	فیلد
عنوان و نام پدیدآور	Field, L.D
مشخصات نشر	طیف‌سنجی پیشرفته: شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌های 2D NMR / نوشته‌ی ال. دی. فیلد، ای. ای. ام. ماگیل؛ ترجمه اسکندر علیپور، میلاد میرزاعلیخان. تهران: علوم پویا، ۱۳۹۶.
مشخصات ظاهری	۳۳۶ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابک	978-600-97308-0-3
وضعیت فهرست‌نویسی	فیبا
یادداشت	Organic Structures from 2D NMR spectra.
یادداشت	واژه‌نامه
یادداشت	کتابنامه
یادداشت	نماینه
موضوع	تشدید پارامغناطیسی الکترون -- طیف‌سنجی
موضوع	Electron paramagnetic resonance spectroscopy
شناسه افزوده	لی، شیو ال.
شناسه افزوده	Li, H. L. (Hsiu L.)
شناسه افزوده	ماگیل، آلیسون ام.
شناسه افزوده	Magill, A. M. (Alison M.)
شناسه افزوده	علیپور، اسکندر، ۱۳۱۷-، مترجم
شناسه افزوده	میرزاعلیخان، میلاد، ۱۳۶۵-، مترجم
زده‌بندی کنگره	۱۳۸۵ ۹۹۹/۹۹ QP519/۹۹
زده‌بندی دیویی	۵۴۶/۶۶
شماره کتابشناسی ملی	۲۵۳۶۱

✉ nashr.olompuya@gmail.com

انتشارات علوم پویا

نام کتاب	طیف‌سنجی پیشرفته: شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌های 2D NMR
مترجمان	اسکندر علیپور، میلاد میرزاعلیخان
ناشر	علوم پویا
ناشر همکار	امیدانقلاب
حروفچینی	انتشارات علوم پویا
حروف‌نگار و صفحه‌آرا	سولماز مرادزاد
نوبت چاپ	اول ۱۳۹۶
تیراژ	۱۱۰۰
قیمت	۳۴۰۰۰۰ ریال
چاپ و صحافی	عطا - چاووش
لیتوگرافی	فرانکش
ناظر فنی چاپ	مهدی طورانیان
شابک	۹۷۸-۶۰۰-۹۷۳۰۸-۰-۳

مراکز فروش:

دفتر انتشارات و پخش کتاب علوم پویا: میدان انقلاب، خیابان اردیبهشت (منیری جاوید)، پلاک ۵۱ واحد ۱	تلفن: ۶۶۴۱۹۵۶۷ و ۶۶۹۶۰۷۷۳
تلفکس: ۶۶۹۶۰۷۷۲	
پخش کتاب دانشیران: خیابان انقلاب، خیابان اردیبهشت (منیری جاوید)، نبش خیابان وحید نظری - پلاک ۱۴۲	تلفن: ۶۶۴۰۰۲۲۰ - ۶۶۴۰۰۱۴۴
علم گستر سپاهان: ۹-۲۲۱۹۹۷۸-۳۱۱	

«کلیه حقوق و حق چاپ متن، طرح روی جلد و عنوان کتاب با توجه به قانون حمایت حقوق مؤلفان، مصنفان و هنرمندان، مصوب سال ۱۳۲۸ و اصلاحیه‌ی آن در سال ۱۳۹۵ برای انتشارات امیدانقلاب محفوظ است. هر کس تمام یا قسمتی از این اثر را بدون اجازه مؤلف (ناشر) نشر یا پخش یا عرضه کند مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت»

سخن ناشر

از سال ۱۳۷۵ تاکنون، انتشارات علوم پویا اقدام به نشر کتاب‌های دانشگاهی در زمینه علوم پایه، فنی و مهندسی نموده است. این انتشارات، برای ارتقای کیفی و کمی آثار منتشر شد، همواره از نظریات اساتید فن استفاده نموده است.

مانند گذشته، از مؤلفین و مترجمین تقاضا داریم با ارائه نظریات ارزشمند خود درباره کتاب‌های این انتشارات، همچنین پیشنهاد ترجمه و تألیفات جدید ما را یاری دهند. امیدواریم، با کمک شما عزیزان بتوانیم گامی هر چند کوچک برای میهن اسلامی عزیزمان برداریم.

مدیر مسئول انتشارات علوم پویا
مهدی طورانیان

فهرست

VII	پیشگفتار مترجمان
VIII	پیشگفتار نویسندگان
XII	جستاری در طیف‌سنجی دو-بُعدی
XIX	منابع طیف، جی یک-بُعدی و دو-بُعدی
XX	واژه‌نامه‌ی پارسی
XXII	راهنمای نشانه‌های نگارشی
XXIII	واژه‌شناسی
XXVII	راهنمای خلاصه‌نویسی
XXVIII	راهنمای نمادها
۱	فصل اول: مبانی طیف‌سنجی NMR
۱	۱-۱ فیزیک اسپین‌های هسته
۳	۲-۱ مبانی دستگاه‌وری NMR و تجربی NMR
۵	فصل دوم: فوریه تپشی یک-بُعدی، تبدیل طیف‌سنجی NMR
۷	۱-۲ جابه‌جایی شیمیایی
۹	۲-۲ طیف‌سنجی ^1H NMR
۹	۱-۲-۲ جابه‌جایی‌های شیمیایی در طیف‌سنجی ^1H NMR
۹	۲-۲-۲ جفت شدن اسپین - اسپین در طیف‌سنجی ^{11}B NMR
۱۴	۳-۲-۲ واجفت شدن در طیف‌سنجی ^1H NMR
۱۵	۴-۲-۲ اثر اُرهاوزر هسته در طیف‌سنجی ^1H NMR
۱۵	۳-۲ طیف‌سنجی NMR، کربن-۱۳
۱۶	۱-۳-۲ واجفت شدن در طیف‌سنجی ^{13}C - NMR
۱۷	۲-۳-۲ جابه‌جایی شیمیایی در طیف‌سنجی ^{13}C NMR
۱۸	۴-۲ طیف‌سنجی NMR فلونور-۱۹

۲۰	۵-۲ طیف‌سنجی NMR فسفر-۳۱
۲۱	۶-۲ طیف‌سنجی NMR نیتروژن-۱۵
۲۳	فصل سوم: طیف‌سنجی NMR دو-بعدی
۲۳	۱-۳ قواعد کلی
۲۶	۲-۳ برهم‌کنش‌های پروتون-پروتون
۲۶	۱-۲-۳ طیف‌سنجی پیوستگی - آزمایش‌های (COSY)
۲۸	۲-۲-۳ طیف‌سنجی پیوستگی مجموع - آزمایش TOCSY
۲۹	۳-۲-۳ طیف‌سنجی اورهاوزر هسته - آزمایش NOESY
۳۱	۳-۳ برهم‌کنش‌های کربن - کربن
۳۱	۱-۳-۳ INADEQUATE
۳۲	۴-۲ طیف‌سنجی پیوستگی ناهم هسته
۳۲	۱-۴-۳ پیوستگی تک پیوند ناهم هسته - آزمایش‌های HMQC, HSQC و me-HSQC
۳۳	۲-۴-۳ پیوستگی پیوند چندتایی ناهم هسته - HMBC
۴۱	فصل چهارم: سایر عناوین
۴۱	۱-۴ حلال‌های NMR
۴۳	۲-۴ ترکیبات مرجع و استانداردها
۴۴	۳-۴ فرآیندهای بویا = فرآیندهای دینامیک
۴۵	۱-۳-۴ پروتون‌ها روی ناچور اتم‌ها
۴۶	۲-۳-۴ چرخش پیرامون بخشی از پیوندهای دوگانه
۴۷	۴-۴ تأثیرات مرتبه - دوم
۴۷	۵-۴ اثر مرکز کایرال بر طیف‌های NMR
۵۱	فصل پنجم: نمونه‌های کار شده
۵۱	۱-۵ قواعد کلی
۵۳	۲-۵ نمونه‌ی پاسخ داده‌شده‌ی ۱
۵۸	۳-۵ نمونه‌ی پاسخ شده‌ی ۲
۶۵	پُرس‌مان
۳۰۵	واژه‌نامه‌ی انگلیسی - پارسی
۳۰۷	نمایه

پیشگفتار مترجمان

شناخت ماهیت و ساختار گسترده‌ی ترکیبات آلی، همواره هدف و ایده اساسی دانشجویان و استادان شیمی آلی، شیمی دارویی، بیوشیمی و داروسازی بوده است. با ورود روش‌های طیف‌نگاری از جمله NMR، غنجه‌ی امید دست اندرکاران این رشته‌ها به گُل نشست و ماهیت و ساختار گسترده‌ی بسیاری از ترکیبات آلی شناسایی گردید. اما برای ترکیبات پیچیده و کمپلکس‌های حاوی هترواتم‌ها روش‌های پایه طیف‌سنجی از جمله ID NMR چندان کارگزار نبوده است. پیشرفت شگفت‌انگیز و جهش‌دار تکنولوژی به ویژه در سال‌های اخیر، روش‌های گوناگون طیف‌سنجی 2D NMR را جهت شناسایی این دسته از ترکیبات به پروهشتان داده نموده است.

دو کتابی را که در پیشبرد دارید ترجمه‌ی پارسی جلد اول و دوم طیف‌سنجی 2D NMR می‌باشد، که بنده این اثر با ورنام [=عنوان] اصلی شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌های 2D NMR و جلد دوم راه‌های استاد و پاستخامه‌ی شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌های 2D NMR بوده که سال ۲۰۱۵ توسط پُنگاه چاپ و پخش Wiley منتشر شده است؛ که به سبب طولانی‌ردن ورنام‌های [=عنوان‌های] اصلی با دو ورنام فرعی طیف‌سنجی پیشرفته و پاستخامه و بررسی نکات طیف‌سنجی پیشرفته در اختیار خوانندگان قرار گرفته است. این کتاب طیف‌سنجی پایه‌ی آموزش در رشته‌های شیمی آلی، شیمی دارویی، فیتوشیمی، شیمی تجزیه، بیوشیمی، دارو و زمینه‌ی شیمی کاربردی در مقاطع کارشناسی ارشد و دکترا و همچنین دانشجویان علاقه‌مند به شناسایی دو-بعدی در مقطع کارشناسی رشته‌های شیمی محض و کاربردی مناسب می‌باشد. در پایان امید است تا مطالب مطرح شده مورد توجه دانشجویان علاقه‌مند و استادان صاحب‌نظر قرار گیرد و مترجمین در انتظار دریافت راهنمایی‌های ارزشمند شما عزیزان در اصلاح نکته‌های ناراست در چاپ‌های بعدی می‌باشند.

اسکندر علیپور - میلاد میرزاعلیخان

پیشگفتار نویسندگان

کسب آگاهی ساختاری از داده‌های طیف‌سنجی بخشی ناوابسته [= مستقل] در دوره‌های درسی شیمی آلی در همه‌ی دانشگاه‌ها می‌باشد. بی‌گمان در زمان حال، طیف‌سنجی NMR قوی‌ترین روش نسبت به سایر روش‌های طیف‌سنجی است که برای آشکارسازی ساختار ترکیبات آلی ناشناخته به کار گرفته می‌شود و تکامل این روش در طی زمان ادامه می‌یابد.

این کتاب شتابی ساختارهای آلی از طیف‌های 2D NMR بر اساس کتاب شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌ها، بدل گرفته است که هم اکنون ویراست پنجم آن در دسترس می‌باشد. هدف شناسایی ساختارهای آلی از طیف‌ها، ارزش به دانشجویان جهت پاسخ دهی به پرسش‌های ساده‌ی ساختاری به گونه‌ای موثر با بهره‌گیری از روش‌های آنالوئیک [= تجزیه‌ای] و طیف‌سنجی مهم می‌باشد (IR, UV) و طیف‌سنجی جرمی. بالا بیشتر پیشرفت‌های قابل توجه در سال‌های اخیر، دسترسی به روش‌های رایج و کاملاً پیشرفته، NMR به است. متن کتاب حاضر به طور مشخص در رابطه با به کارگیری روش‌های 2D NMR پیشرفته‌تر، با استفاده که هم اکنون و تقریباً به صورت کاملاً خودکار در بیشتر آزمایشگاه‌های NMR به صورت متداول به کار گرفته می‌شود.

در این کتاب ما اساس فلسفی را جهت یادگیری - شناسایی ساختارهای آلی از داده‌های طیف‌سنجی ادامه می‌دهیم که بهترین روش آن تمرین کردن از طریق نمونه‌ها می‌باشد. پاسخ‌دهی به پرسش‌های واقعی همچون پازل نیز اعتیادآور است - که احساس واقعی موفقیت، درک و خرسندی را ایجاد می‌کند. در حدود 70٪ از این کتاب در برگزیده‌ی بسیار ارزشمند، نمونه‌ی درجه‌بندی شده از پرسش‌های ساده (طراحی شده به منظور نشان دادن روش‌های مفید پاسخ‌دهی به پرسش‌ها) تا پرسش‌های بسیار چالش برانگیز در انتهای این مجموعه می‌باشد.

نگره‌ی [= تنوری] تأکید بر نکات و روش‌های ضروری و پرهیز از زیاده‌گویی در این کتاب پیاده‌سازی شده است. نگره‌ای که در این کتاب به کار رفته است، تنها بر درک اساسی روش‌هایی که به طور واقعی در پاسخ‌دهی به پرسش‌ها به کار گرفته می‌شوند، بستند می‌کند. ما خوانندگان را به سایر منابع برای توصیف جزئیات بیشتر هم برای نگره‌ی طیف‌سنجی NMR و هم برای اصول بنیادی آزمایش‌های NMR که هم اکنون به صورت رایج به کار می‌روند، ارجاع می‌دهیم.

کتاب‌های زیر منابعی مفید برای آگاهی بیشتر در مورد نگره و آروین [= تجربه] طیف‌سنجی NMR می‌باشند:

- (i) T. D. W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, 2nd edition, Amsterdam, Elsevier, 2009. ISBN 978-0-08-054628-5.

- (ii) J. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*, 2nd edition, John Wiley & Sons, UK, 2010. ISBN 978-0-470-74609-7.
- (iii) H. Friebolin, *Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy*, 5th edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2011. ISBN 978-3-527-32782-9.
- (iv) H. Günther, *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry*, 3rd edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2013. ISBN 978-3-527-33000-3.

در این کتاب جهت یادگیری کمترین داده‌های مورد نیاز ارائه شده‌اند. آشنایی با روش‌های مهم طیف‌سنجی و شناخت کلی انواع گوناگون ترکیبات آلی بیش از دانسته‌های دانشنامه‌ای برگرفته از مجموعه‌ی بسیار گسترده از داده‌ها اهمیت دارد. متن دارای داده‌های کافی جهت پاسخی دهی به پرسش‌ها می‌باشد و منابع برجسته‌ی دیگری نیز برای داده‌های طیف‌سنجی NMR موجودند.
در زیر مجموعه‌ی مفیدی از داده‌های طیف‌سنجی برای ترکیبات آلی ارائه شده است:

- (i) http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng maintained by the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tsukuba, Ibaraki, Japan.
- (ii) <http://webbook.nist.gov/chemistry/>, which is the NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69, June 2005, Eds. P. J. Linstrom and W. G. Mallard.
- (iii) E. Pretch, P. Bühlmann and M. Baertsch, *Structure Determination of Organic Compounds, Tables of Spectral Data*, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2009. ISBN 978-3-540-93810-1.

کسب آگاهی

این کتاب فرض می‌کند که دانشجویان دوره‌ی مقدماتی شیمی آلی را به بیان رسانده‌اند؛ بنابراین درک ابتدایی از ساختارهای آلی، گروه‌های عاملی، ترکیبات آروماتیک و غیره آلیاتیک، استریوشیمی و غیره وجود دارد. همچنین فرض شد که دانشجویان از چگونگی و عملکرد روش‌های گوناگون طیف‌سنجی (NMR, IR, UV) و طیف‌سنجی جرمی) به کار گرفته شده جهت شناسایی ساختارهای ترکیبات آلی آگاهی دارند.

کتاب‌های زیر متونی مفید در رابطه با شناسایی ساختارهای ترکیبات آلی به وسیله‌ی طیف‌سنجی می‌باشند:

- (i) L. D. Field, S. Sternhell and J. R. Kalman, *Organic Structures from Spectra*, 5th edition, John Wiley & Sons, UK, 2013. ISBN 978-1-118-32545-2.
- (ii) R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle and D. L. Bryce, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 8th edition, John Wiley & Sons, USA, 2014. ISBN 978-0-470-61637-6.

ساختار کتاب

- فصل اول در رابطه با مبانی فیزیک آزمایش NMR و سخت افزار مورد نیاز جهت کسب طیف‌های NMR می‌باشد.
- فصل دوم شناخت کلی طیف‌سنجی NMR برای هسته‌های مشاهده شده‌ی متداول را در بر می‌گیرد. حال آنکه طیف‌سنجی NMR بیشتر مربوط به ^1H یا ^{13}C است. همچنین این فصل مقدمه‌ای را برای طیف‌سنجی ^{31}P ، ^{19}F و ^{15}N ارائه می‌دهد.
- فصل سوم در رابطه با طیف‌سنجی 2D NMR است. در ابتدا قواعد کلی و سپس توضیح ابتدایی در مورد آزمایش‌های رایج 2D NMR به کار رفته - COSY، NOESY، TOCSY، JINADEQUATE، HSQC/HMBC و JHMQC.
- فصل چهارم گروهی از عناوین ویژه‌ای که در تفسیر طیف‌های NMR مهم هستند را پوشش می‌دهد. عناوین شامل: (i) حلال‌های رایج به کار رفته برای NMR؛ (ii) مواد مرجع استاندارد استفاده شده برای مشاهده طیف‌های مختلف؛ (iii) اثرهای تبادل مولکولی و جنبش مولکولی بر طیف‌های NMR؛ (iv) کاربرالیه بر طیف‌های NMR.
- فصل پنجم شامل دو نمونه پاسخ پاسخ داده شده است که به منظور روشن‌سازی روش لورژیکی [منطقی] پاسخ‌دهی به پرسش‌ها مطرح شده‌اند. هر چند به استثنای چند مورد خاص، ما اصرار بر آن داریم که دانشجویان باید همه‌ی سنجه‌ها را در ابتدا برای پرسش‌ها انجام دهند، ما نیازی به یک روش دستوری [مکانیکی] است. برای پاسخ‌گویی به پرسش‌ها نداریم - درک مستقیم [پیش] جایگاه مهمی را در شناسایی ساختار طیف‌ها دارد.

دستگاه‌وری

طیف‌های NMR مطرح شده در پرسش‌های این کتاب تحت شرایط ویژه در صفحه‌های تکی برای هر پرسش ارائه شده‌اند. طیف‌ها توسط دستگاه‌های زیر به دست آمده‌اند:

طیف‌های ^1H NMR (300 MHz)، ^{13}C NMR (75 MHz)، ^{19}F (200 MHz) توسط طیف‌سنج Bruker DPX-300.

طیف‌های ^1H NMR (400 MHz)، ^{13}C NMR (100 MHz)، ^{19}F (376 MHz) توسط طیف‌سنج Bruker Avance III 400.

طیف‌های ^1H NMR (500 MHz) و ^{13}C NMR (125 MHz) توسط طیف‌سنج Bruker Avance III 500. طیف‌های ^1H NMR (600 MHz) و ^{13}C NMR (150 MHz) توسط طیف‌سنج‌های Avance III 600 و Avance III IID 600 با پروب خنک شونده به دست آمده‌اند.

همزمان با این کتاب، راهنمای استاد که در برگرفته‌ی پاسخ‌های جامع گام به گام برای همه‌ی پرسش‌های این کتاب می‌باشد، ارائه گردیده است.

ما از دکتر دونالد توماس و دکتر جیمز هوک در مرکز آنالوئیک مارک وین و ریاست در دانشگاه نیو

سوف والس و دکتر یونا کاسگریف و دکتر راجر مولدر در CSIRO علوم مواد و مهندسی که به گردآوری نمونه‌های بیشتر و طیف‌های به کار رفته در این کتاب کمک کردند، سپاسگزاریم. همچنین از دکتر سامانتا فورفاری و دکتر مانوهارای آبی سینگ که به ما با سبزی برخی ترکیبات به کار رفته در پُرسمان‌های یاری رساندند، قدردانی می‌کنیم.

ال. دی. فیلد

اچ. ال. لی

ای. ام. ماگیل

ژانویه ۲۰۱۵

www.ketab.ir