



**تعیین ساختار ترکیب‌های آلی با
طیف سنجی NMR دوبعدی**

تألیف

ال. دی. فیلد

اچ. ال. لی

ای. ام. مگیل

ترجمه

دکتر منوچهر مامقانی

استاد دانشکده علوم پایه دانشگاه گیلان

دکتر محمد نیک پسند

دانشیار دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت

دکتر عنایت‌الله مرادی وفچاهی

دانشیار دانشگاه آزاد اسلامی واحد لاهیجان

انتشارات دانشگاه گیلان

۱۳۹۸



شابک: ۹۷۸-۶۰۰-۱۵۳-۱۸۶-۶

سرشناسه	فیلد:
عنوان و نام پدیدآور	Field, L.D.
مشخصات نشر	رشت: دانشگاه گیلان، ۱۳۹۷.
مشخصات ظاهری	۳۰۱ ص.
شابک	978-600-153-186-6
وضعیت فهرست نویسی	فیبا
یادداشت	عنوان اصلی: Organic Structures form 2D NMR Spectra.
موضوع	تشدید پارامغناطیسی الکترون - طیف سنجی
موضوع	Electron paramagnetic resonance spectroscopy
شناسه افزوده	لی، شیو ال.
شناسه افزوده	Li, H. L. (Hsiu L)
شناسه افزوده	مگیل، آلیسون ام.
شناسه افزوده	Magill, A. M. (Alison M)
شناسه افزوده	مامقانی، منوچهر، ۱۳۳۱ - مترجم
شناسه افزوده	نیکپسند، محمد، ۱۳۵۹ - مترجم
شناسه افزوده	مرادی، عنایت‌اله، ۱۳۵۰ - مترجم
شناسه روده	دانشگاه گیلان
ردیف	۱۳۹۷ ط ۹/۹/۱۹ QP5۱۹
رده بندی دیو	۵۴۳/۶۶
شماره کتابشناسی	۵۴۳۳۳۴۰

اداره چاپ و انتشارات دانشگاه گیلان

نام کتاب	: تعیین ساختار ترکیب‌های آل با طیف سنجی NMR دوبعدی
مولفان	: ال. دی. فیلد، اچ. ال. لی، ای. ام. مگیل
مترجمان	: دکتر منوچهر مامقانی، دکتر محمد نیک‌پسند، دکتر عنایت‌اله مرادی روفچاهی
ویراستار علمی	: دکتر سید مرتضی مهرداد
ویراستار ادبی	: هوشنگ سپهری
نوبت چاپ	: اول، ۱۳۹۸
ناشر	: انتشارات دانشگاه گیلان
شمارگان	: ۱۰۰۰ جلد
قیمت	: ۵۴۰۰۰ ریال

* هر گونه چاپ و تکثیر فقط در اختیار انتشارات دانشگاه گیلان است.

www.ketab.ir

مطالب

عنوان

صفحه

پیشگفتار ۱

فصل اول: اصول طیف سنجی NMR

۱-۱- اسپین هسته ها از دیدگاه علم فیزیک ۶

۱-۲- آزمایش NMR و اصول دستگاهی آن ۷

فصل دوم: طیف NMR یک بعدی بر پایه تبدیل فوریه تپی

۱-۲- جابه جایی شیمیایی ۱۱

۲-۲- طیف سنجی ^1H NMR ۱۳

۱-۲-۲- جابه جایی شیمیایی در طیف سنجی ^1H NMR ۱۳

۲-۲-۲- جفت شدن اسپین-اسپین در طیف سنجی ^1H NMR ۱۳

۳-۲-۲- واجفت شدن در طیف سنجی ^1H NMR ۱۷

۴-۲- اثر هسته ای اورهاوز در طیف سنجی ^1H NMR ۱۹

۳-۲- طیف سنجی NMR در ^{13}C ۱۹

۱-۳-۲- واجفت شدن در طیف سنجی ^{13}C NMR ۲۰

۲-۳-۲- جابه جایی شیمیایی در طیف سنجی ^{13}C NMR ۲۱

۴-۲- طیف سنجی NMR فلئور-۱۹ ۲۱

۵-۲- طیف سنجی NMR فسفر-۳۱ ۲۳

۶-۲- طیف سنجی NMR نیتروژن-۱۵ ۲۴

فصل سوم: طیف سنجی رزونانس مغناطیس هسته ای د بعدی (2D NMR)

۱-۳- اصول کلی ۲۶

۲-۳- برهمکنش های پروتون-پروتون ۲۸

۱-۲-۳- طیف سنجی ارتباطی-آزمایش COSY ۲۸

۲-۲-۳- طیف سنجی ارتباطی کامل-آزمایش TOCSY ۳۰

۳-۲-۳- طیف سنجی هسته ای اورهاوزر-آزمایش NOESY ۳۱

۳-۳- برهمکنش های کربن-کربن ۳۴

۱-۳-۳- آزمایش INADEQUATE ۳۴

۴-۳- طیف سنجی ارتباطی ناهم هسته ای ۳۵

۱-۴-۳- ارتباط ناهم هسته ای یک پیوندی-آزمایش های HSQC, HMQC و me-HSQC ۳۵

۲-۴-۳- ارتباط ناهم هسته ای چند پیوندی-HMBC ۳۶

فصل چهارم: موضوعات متفرقه

۱-۴- حلال های NMR ۴۴

۲-۴- ترکیبات مرجع و استانداردها ۴۵

۳-۴- فرآیندهای پویا ۴۶

۱-۳-۴- پروتون ها و هترواتم ها ۴۷

۲-۳-۴- چرخش حول پیوندهای دوگانه جزئی ۴۸

۴-۴- اثرات مرتبه دوم ۴۸

۴-۵- اثر یک مرکز کایرال روی طیف NMR	۴۹
فصل پنجم: مثال‌های حل شده	
۵-۱- اصول کلی	۵۴
۵-۲- مثال حل شده ۱	۵۵
۵-۳- مثال حل شده ۲	۶۰
تمرینات	۶۷
نمایه واژگان فارسی- انگلیسی	۳۰۷
نمایه واژگان انگلیسی- فارسی	۳۱۳

پیشگفتار

www.ketab.ir

دستیابی به اطلاعات ساختاری از داده‌های طیف سنجی یکی از بخش‌های مهم دوره‌های شیمی آلی در همه دانشگاه‌ها است. امروزه، طیف سنجی NMR، قدرتمندترین فن طیف سنجی قابل بحث برای تعیین ساختار ترکیبات آلی ناشناخته است و روش‌های آن به طور پیوسته در حال پیشرفت است. کتاب تعیین ساختارهای آلی با طیف سنجی NMR دوبعدی بر اساس مجموعه‌های معمول تعیین ساختارهای آلی از روی طیف که اکنون ویرایش پنجم آن منتشر شده تدوین شده است. هدف کتاب تعیین ساختارهای آلی از روی طیف، آموزش موثر حل تمرین تعیین ساختارهای ساده به دانشجویان با استفاده از مجموعه روش‌های عمده طیف سنجی و فنون تجزیه ای (طیف سنجی‌های فرابنفش، زیرقرمز، NMR و جرمی) است. احتمالاً فنون NMR دوبعدی از مهم‌ترین پیشرفت‌های انجام شده در سالهای اخیر است. این کتاب به فنون پیشرفته NMR دوبعدی که امروزه در اغلب آزمایشگاه‌های NMR متداول شده اند، می‌پردازد.

در این کتاب، ما به یادگیری دانش پایه تعیین ساختارهای آلی از طریق داده‌های طیف سنجی، به وسیله حل تمرین، ادامه می‌دهیم. بهترین روش برای حل مسائل واقعی نیز مدنظر قرار می‌گیرد تا یک حس واقعی از موفقیت، درک و رضایت حاصل شود. حدود ۷۰٪ این کتاب، شامل مجموعه‌هایی از ۶۰ مثال شماره گذاری شده است که بسیاری از آنها، مسائلی ابتدایی هستند (طرح شده برای نشان دادن فنون مفید حل مساله). البته در انتهای مجموعه، مسائل با چالش زیاد مطرح شده اند.

در این کتاب توجه به نظریه گذرا بوده و تنها تلاش شده است تا به مفاهیم پایه‌ای مربوط به درک اصولی فنون به کار رفته در حل مسائل پرداخته شود و خوانندگان برای دستیابی، به جزئیات و توضیحات بیشتر، چه در زمینه نظری طیف سنجی NMR و چه اصول دربرگیرنده آزمون‌های NMR که به صورت مرسوم به کار می‌روند، به سایر منابع ارجاع داده می‌شوند.

کتاب‌های زیر منابع مفیدی را جهت بیشتر در نظریه و تمرین طیف سنجی NMR محسوب می‌شوند.

- i) T. D. W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, 2nd edition, Elsevier, Amsterdam, 2009. ISBN 978-0-08-04628-5.
- 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. Gunther, *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and applications in Chemistry*, 3rd edition, Wiley-VCH, Weinheim, 2013. ISBN 978-3-527-33000-3.

در این کتاب، نیاز به آموختن داده‌ها در حداقل ممکن نگهداشته شده است. آگاهی از فنون مهم طیف سنجی و ویژگی‌های عمومی ترکیبات آلی مهم‌تر از داشتن یک دانش دایره‌المعارفی از مجموعه وسیعی از داده‌ها است. این کتاب، شامل داده‌های کافی برای حل مسائل است و مجدداً لازم به ذکر است که منابع علمی دیگر حاوی داده‌های طیف سنجی NMR در دسترس هستند.

مجموعه‌های زیر اطلاعات مفیدی برای طیف سنجی ترکیبات آلی ارائه می‌کنند.

- 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 Web Book, NIST Standard Reference Database Number 69, June 2005, Eds P.J. Linstrom and W.G. Mallard.
- iii) E. Pretch, P. Bühlmann and M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds, Tables of Spectral Data*, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2009. ISBN 978-3-540-93810-1.

دانش مورد انتظار از خواننده:

این کتاب برای دانشجویانی نوشته شده است که دوره‌های شیمی آلی مقدماتی را به پایان رسانده و با شیمی آلی ساختاری، گروه‌های عاملی، ترکیبات آروماتیک یا غیر آروماتیک، شیمی فضایی و غیره آشنا باشند. همچنین فرض شده است

که دانشجویان دارای مهارت کافی درباره چگونگی استفاده از فنون طیف سنجی (فرابنفش، زیر قرمز، NMR و طیف سنجی جرمی) برای تعیین ساختارهای ترکیبات آلی هستند.

کتاب های زیر اطلاعات مفیدی را در ارتباط با تعیین ساختار ترکیبات آلی از طریق روش های طیف سنجی دربر می گیرند.

- 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 یک شامل مفاهیم فیزیکی پایه ای مورد نیاز برای آزمایش NMR و همچنین سخت افزارهای مورد نیاز برای به دست آوردن طیف NMR است.

فصل دوم به ویژگیهای عمومی طیف سنجی NMR برای هسته هایی که به طور معمولی در NMR دیده می شوند می پردازد. در حالی که بیشتر NMR با ^1H یا ^{13}C سروکار دارد، در این فصل NMR ^{19}F ، ^{31}P و ^{15}N نیز آورده شده اند.

فصل سوم شامل طیف سنجی NMR دوبعدی است. در ابتدا اصول و سپس توضیح پایه ای آزمایش های NMR دوبعدی مانند TOCSY, NOESY, COSY, HMBC, HSQC, HMQC, INADEQUATE آورده شده اند.

فصل چهارم به دسته ای از موضوعات ویژه که در تفسیر طیف NMR مهم است، می پردازد. این موضوعات شامل الف) حلال های مرسوم در NMR ب) مواد مرجع است. ندارد بای مشاهده طیف هسته های متنوع پ) اثرات تبادل مولکولی و جنبش مولکولی در طیف NMR ت) اثرات دستارگی در طیف NMR.

فصل پنجم شامل دو مثال حل شده است که به عنوان نمونه برای نشان دادن نحوه حل مسائل آمده است. به هر حال با توجه به استثناء هایی که وجود دارند، تأکید می شود دانشجویان در ابتدا تمام طیف ها و اطلاعات داده شده را مورد بررسی قرار دهند. نمی توان یک نگرش بدون انعطاف را برای روند حل مسائل پیشنهاد کرد، بلکه در دستیابی به ساختارها شرم حل تمرین و مهارت جایگاه مهمی دارد.

دستگاهوری

طیف های NMR داده شده در مسائل این کتاب در شرایط ذکر شده در هر مسئله اندازه گیری شده اند. از دستگاه های زیر برای ثبت طیف ها استفاده شده اند:

- i) 300 MHz ^1H NMR spectra, 75 MHz ^{13}C NMR spectra and 283 MHz ^{19}F NMR Spectra on a Bruker DPX-300 spectrometer;
- ii) 400MHz ^1H NMR spectra, 100 MHz ^{13}C NMR spectra and 376 MHz ^{19}F NMR spectra on Bruker Avance III 400 spectrometers;
- iii) 500 MHz ^1H NMR and 125 MHz ^{13}C NMR spectra on a Bruker Avance III 500 spectrometers;
- iv) 600 MHz ^1H NMR and 150 MHz ^{13}C NMR spectra were obtained on Avance III 600 or Avance III HD 600 Cryoprobe spectrometers.

یک کتاب راهنما حاوی حل گام به گام هر یک از مسائل به همراه این کتاب در دسترس علاقه مندان است.

به منظور ادای احترام به مربیان، یک مجموعه حل مسائل از طریق ارسال ایمیل به نویسندگان (L.Field@unsw.edu.au) یا فاکس (+61293858008) بدون نیاز به پرداخت هزینه قابل دریافت است.

از دکتر دونالد توماس و دکتر جیمز هوک از مرکز تجزیه مارک واین رایت دانشگاه نیوساوت ولز و دکتر جوانا کاسگریف و دکتر روگر مالدر از مؤسسه علوم و مهندسی مواد CSIRO که به جمع آوری طیف‌ها و نمونه‌های تکمیلی به کار رفته در این کتاب کمک کردند، مراتب تشکر و قدردانی خود را اعلام می‌داریم. همچنین از دکتر سامانتا فورفاری و دکتر مانوهارای ایبیسین که برخی ترکیبات به کار رفته در مسائل را سنتز کردند، تشکر می‌کنیم.

ژانویه ۲۰۱۵

آ. م. میگل

ه. ل. لی

ل. د. فیلد

www.ketab.ir