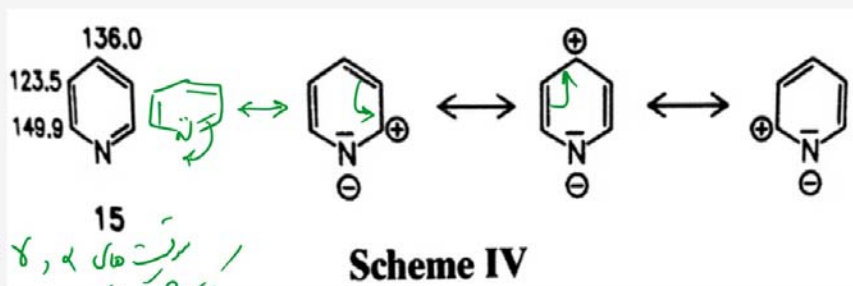


Heteroaromatic Compounds



15
برقیت های ۴، ۶ و ۲ است همزمان
مترشله شده اند

Scheme IV

تأثیر چگالی الکترون بر ساختارهای مزدوجی

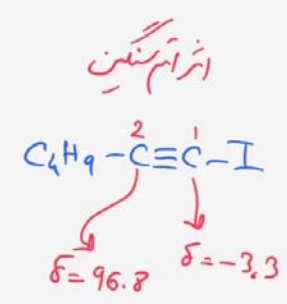
Alkynes

$\begin{matrix} H & & H \\ & \backslash & / \\ & C=C & \\ & / & \backslash \\ H & & H \end{matrix}$ $H-C \equiv C-H$
 $\delta = 123.5$ $\delta = 71.9$
 ایندکسهای مشابهی بر روی سگانه برای اکتین مشاهده می شود
 در استین در سگانه با استین مان
 است
 σ_{para} به خاطر بزرگتر بودن DE استین است به
 استین که چگالی از استین است
 σ_{para} عبارتت تصحیح سگانه است در نتیجه چگالی ^{13}C
 در استین بسیار بیشتر از استین است

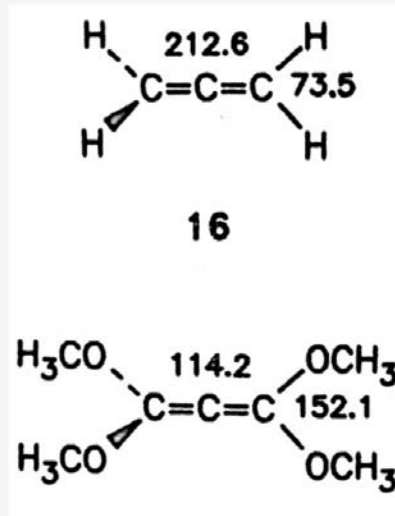
Table 2-11.
 ^{13}C chemical shifts δ [ppm] of monosubstituted acetylenes.

$$H - \overset{1}{C} = \overset{2}{C} - X$$

X	$\delta (C^1)$	$\delta (C^2)$
H-	71.9	
Alkyl-	68.6	84
H-C = C-	64.7	68.8
Phenyl-	77.2	83.6
CH ₃ CH ₂ O-	23.4	89.6



Allenes



Aldehydes and Ketones

اثر اسکریف بسیار کمتر از ستادیر
بر روابط آلکینهاست

مردن های بسیار سیال C¹³
آلدهیدها و کتونها در سیالین از برورد
همپوشانی دارند و تا نرسین آنها با
توسط

off-resonance decoupling

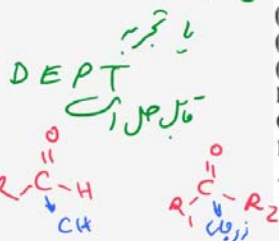
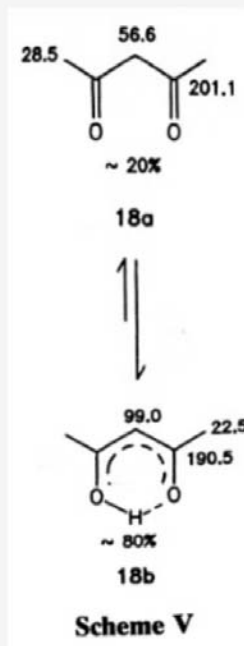


Table 2-12.
¹³C chemical shifts δ [ppm] of aldehydes and ketones.

Compound	δ (C ¹)	δ (C ²)	δ (C ³)	δ (C ⁴)
H ₃ C ² -C ¹ HO	200.5	31.2		
H ₃ C-CH ₂ -CHO	202.7	36.7	5.2	
(CH ₃) ₂ CH-CHO	204.6	41.1	15.5	
(CH ₃) ₃ C-CHO	205.6	42.4	23.4	
H ₂ C = CH-CHO	193.3	136.0	136.4	
C ₆ H ₅ -CHO	191.0			
CH ₃ C ² OC ¹ H ₃	30.7	206.7		
C ⁴ H ₃ C ³ H ₂ C ² OC ¹ H ₃	27.5	206.3	35.2	7.0
(CH ₃) ₂ CHCOCH ₃	27.5	212.5	41.6	18.2
(CH ₃) ₃ CCOCH ₃	24.5	212.8	44.3	26
(CH ₃) ₃ CC ³ OC ² (CH ₃) ₃	28.6	45.6	218.0	
Ph-CO-Ph	195.2			
Cl ₃ C ¹ C ² OCCl ₃	90.2	175.5		
H ₂ C ¹ = C ² H-C ³ OCH ₃	128.0	137.1	197.5	25.7



Keto

Enol

Carboxylic acids and their Derivatives

سندل آرد، کربنیل مرکز است که اسیدها
بیشتر از آن گروه کربنیل در کربن را اکسید می‌کند

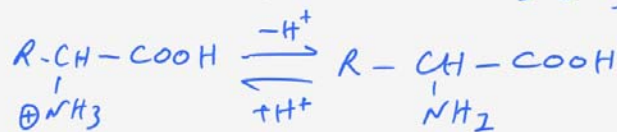
مردم :
 $\delta = 160 - 180$ ppm

Table 2-13.
¹³C chemical shifts δ [ppm] of acetic acid derivatives.

Compound	δ (C ¹)	δ (C ²)	
C ² H ₃ C ¹ OOH	176.9	20.8	(pD 1.5) ^{a)}
CH ₃ COO [⊖]	182.6	24.5	(pD 8) ^{a)}
CH ₃ CON(CH ₃) ₂	170.4	21.5	CH ₃ : 35 and 38.0
CH ₃ COCl	170.4	33.6	
CH ₃ COOCH ₃	171.3	20.6	OCH ₃ : 51.5
CH ₃ COOCH=CH ₂	167.9	20.5	=CH: 141.5 =CH ₂ : 97.5
(CH ₃ CO) ₂ O	167.4	21.8	
CH ₃ COSH	194.5	32.6	

^{a)} Solvent: D₂O.

جایگزینی آمینوگروه ها در pH ثابت



گروه کربوکسیک اسیدها در سید پیوند هیدروژنی (در شکل مرادند). در ما در منظرها بطور همزمان در مدل حضور دارند. تبادل به غلظت، در رقم تراژعه (شما) مدل بسجی دارد

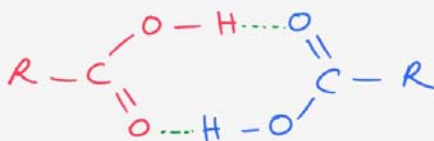
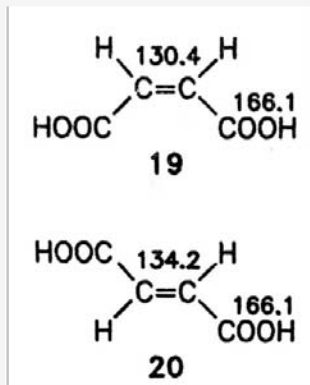


Table 2-14.

^{13}C chemical shifts δ [ppm] of α -substituted acetic acids.

Compound	δ (C ¹)	δ (C ²)	δ (C ³)
H-C ² H ₂ C ¹ OOH	175.7	20.3	
C ³ H ₂ -C ² H ₂ -C ¹ OOH	179.8	27.6	9.0
(CH ₃) ₂ CH-COOH	184.1	34.1	18.1
(CH ₃) ₃ C-COOH	185.9	38.7	27.1
H ₂ N-CH ₂ -COOH (D ₂ O)			
pD 0.45	171.2	41.5	
pD 12.05	182.7	46.0	
HO-CH ₂ -COOH (D ₂ O)	177.2	60.4	
ClCH ₂ -COOH	173.7	40.7	
Cl ₂ C-COOH	167.0	88.9	
H ₂ C ³ = C ² H-C ¹ OOH	168.9	129.2	130.8
C ₆ H ₅ -COOH	168.0		



مالیک اسید

فوماریک اسید

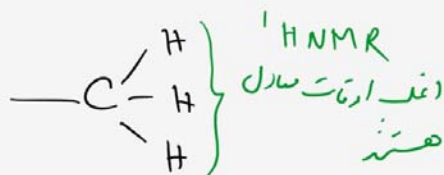
اثر کم‌اندراگون
 گروه کربوکسیل
 بر رزونانس ^{13}C
 کربن کربن از
 تاثیر رزونانس کربن
 اولی است

ارتباط بین طیف رسانای مغناطیسی

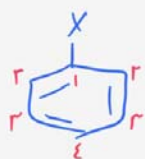
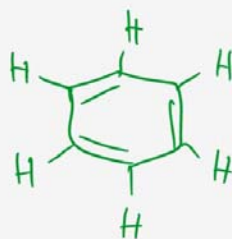
- هسته های سادل در این زمان رزونانس یکدیگر هستند
 - کرپلینگ بین هسته های سادل در طیف first-order شاهد ندارد
 هر چه تعداد هسته های سادل در یک جبهه باشد طیف سادل در فرایند شاهد خلطه با وجود در آن

- اثرات سادل بدون رتوان لجر درجه به رتوان در طیف ^{13}C NMR دیده می شود
 - هر نوع آم کربن شاهد از نظرسازی در سادل یک سینتک نشان می دهد
 - تعداد سینتکها متناسب با اثرات سادل بدون هسته های ^{13}C کاهش می یابند

Equivalence

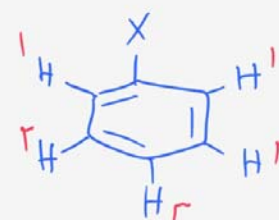


به خاطر تناوب بالای مرکز تمام هسته ها ^1H
 در هسته ها ^{13}C مساوی هسته



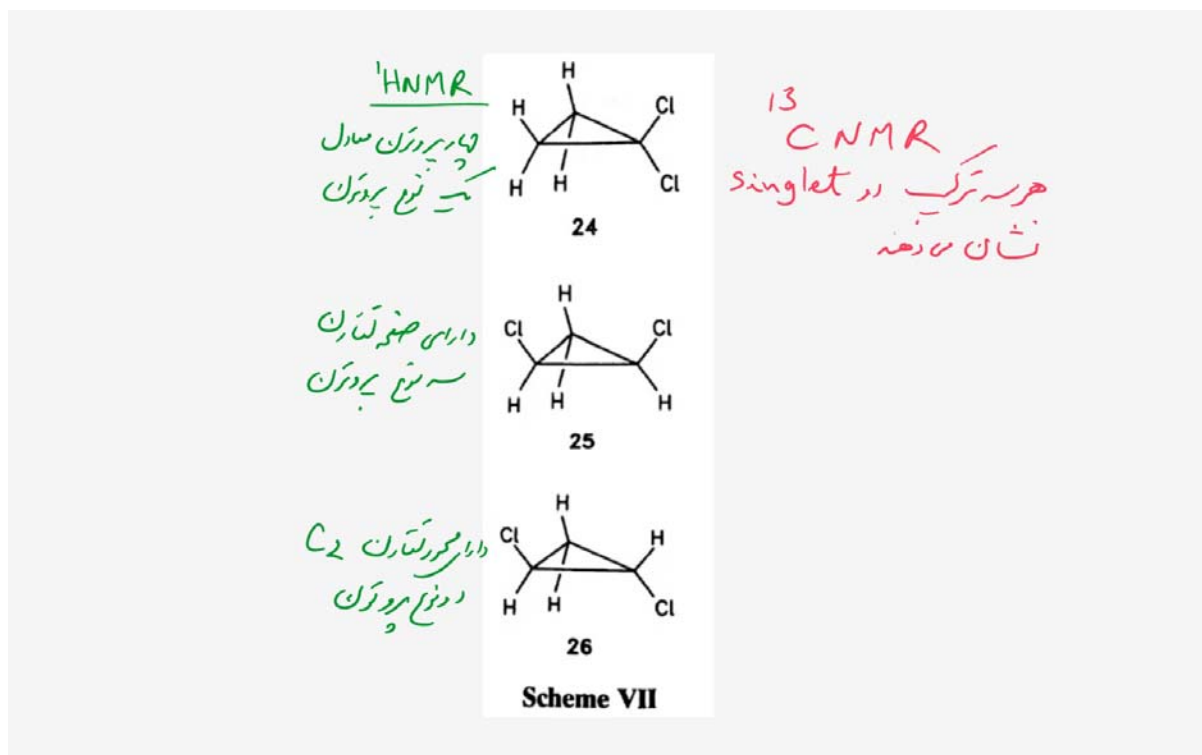
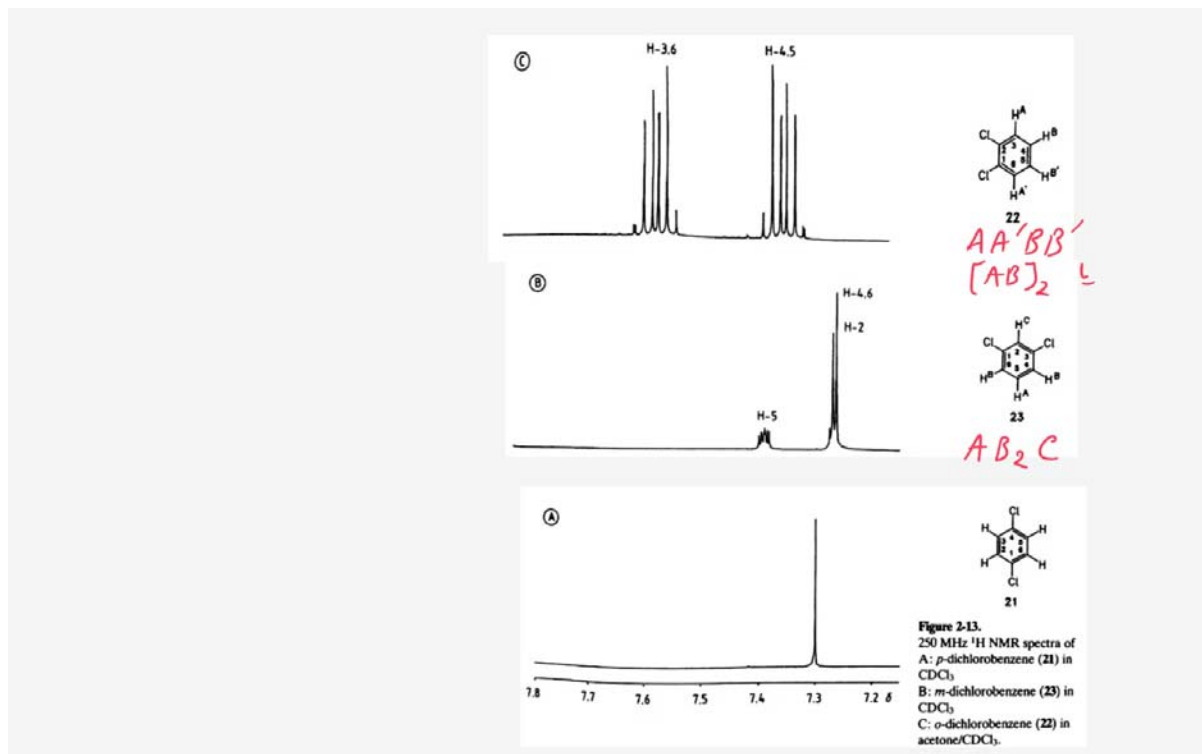
$^{13}\text{C NMR}$ در

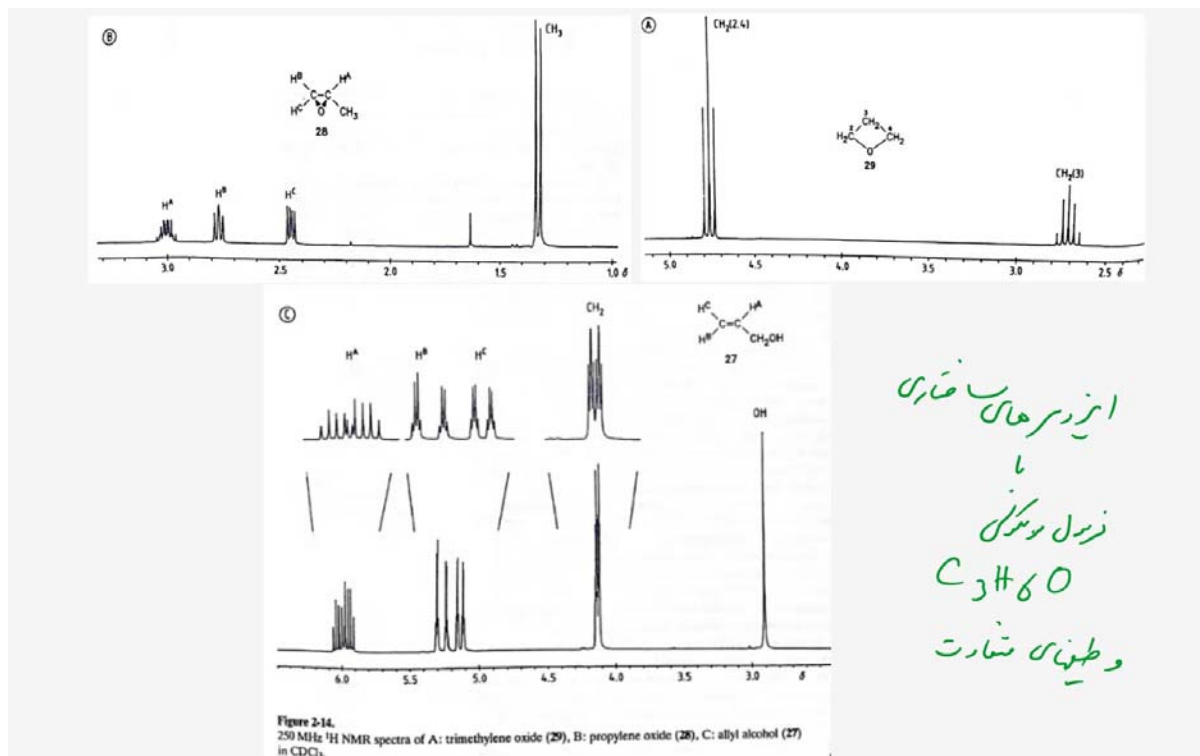
به خاطر تناوب مرکز
 چهار سینتال برای همه کربن دیده می‌گردد



سه نوع هیدروژن در $^1\text{H NMR}$

Multiplets
 در طبقه دیده می‌گردد

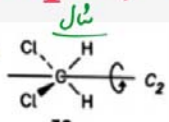




ایزومرهای ساختاری
با
فرمول مولکولی
C₃H₆O
و طبقه‌بندی شادرت

Homotopic, Enantiotopic and Diastereotopic

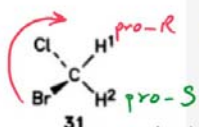
دارای محور تقارن C₂
شرط لازم دیگر
برای معادل بودن



Homotopic

بروزنهای هموزکت معادل
هستند و نسبت به محیط از نظر
فضایی

- نامگذاری با پیشوند
Mislow



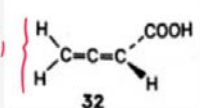
Enantiotopic

دارای صفحه تقارن

با بهترین کردن حرکت از تمام
درمانش تر نتف تشکیل می‌دهد

این ترکیب پروکینرال است
(prochiral)

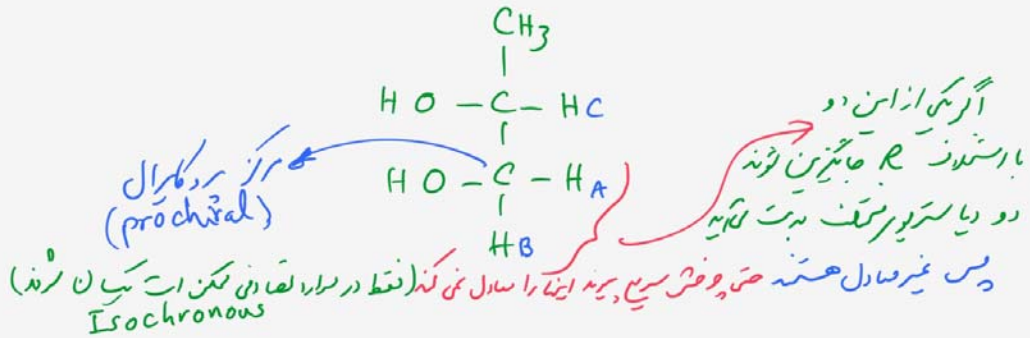
انایسوتوپیک



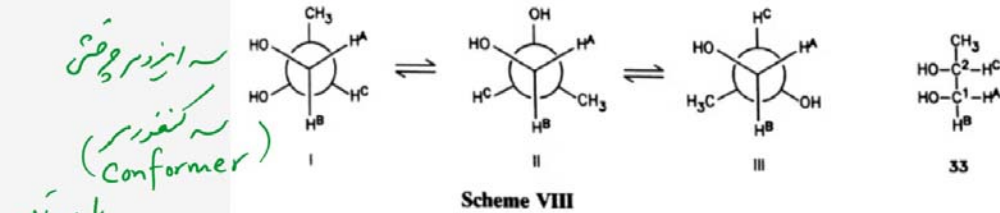
32

اگر دو اتم یک گروه سین نه با چرخش حول محورشان و نه با انعکاس در یک صفحه نشان
 سوقت هایشان پس از تغییر مکان یکسان نباشد، دیاسترومریک نامیده می شود.

شکل



Newman projection:



سه اینزدر چرخش
 سه کنفورمر
 (Conformer)
 یا روتامر
 rotamer

for H^A:
 OH,CH₃/H,H(δ_1) OH,OH/H,CH₃(δ_2) OH,H/H,OH(δ_3)
 for H^B:
 H,H/OH,OH(δ_4) H,CH₃/OH,H(δ_5) H,OH/OH,CH₃(δ_6)

اگر چرخش حول محور پیش C-C مرکزین ستوفا شود ۳ بی بی شیبان برای H^A و H^B را به ترتیب زیر می توانیم بنویسیم

$$\bar{\delta}_A = x_I \delta_1 + x_{II} \delta_2 + x_{III} \delta_3$$

$$\bar{\delta}_B = x_I \delta_4 + x_{II} \delta_5 + x_{III} \delta_6 \quad (2-6)$$

ضرایب وزنی (جزو برلی)

صی‌اگر

$$\text{باید } X_I = X_{II} = X_{III} = \frac{1}{3}$$

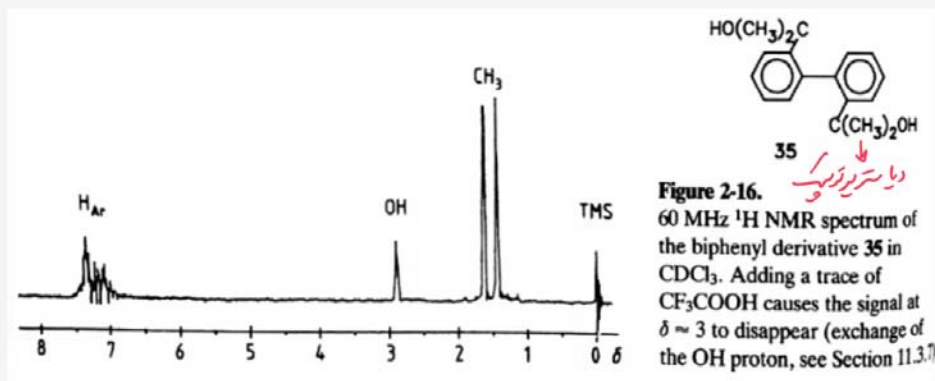
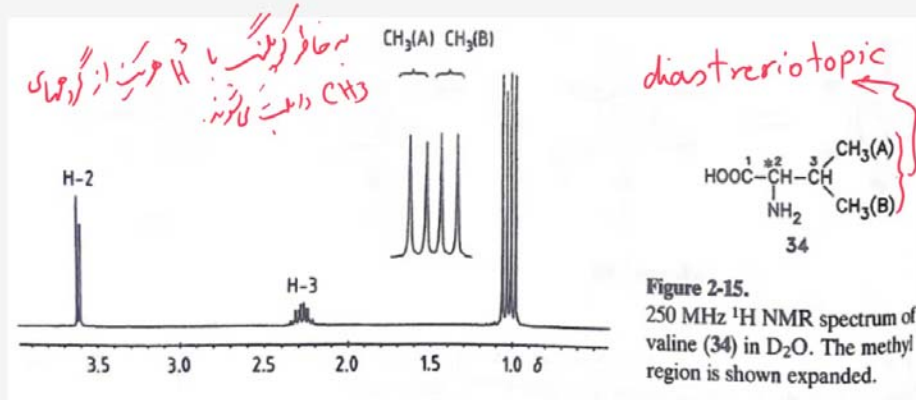
باز هم $\bar{\sigma}_A$ با $\bar{\sigma}_B$ سادسینه

بتراند لطورتاتی برهم نطبق شوند

وقتی که مرکز حادیت اتم نامتوازن باشد (که ممکن است کربن، فلور، ظرفیت یا نیتروژن سه ظرفیتی) یا بطور عمومی تر وقتی که مرکز کایرال باشد،

گروههای CH_2

یا $\text{C}(\text{CH}_3)_2$ غیر سادسینه



Hindered rotation حول پیوند C-C باعث کارایی شدن پروتون‌های گروه دارد.

این ترکیب $\hat{=}$ atropisomerism

conformational enantiomers

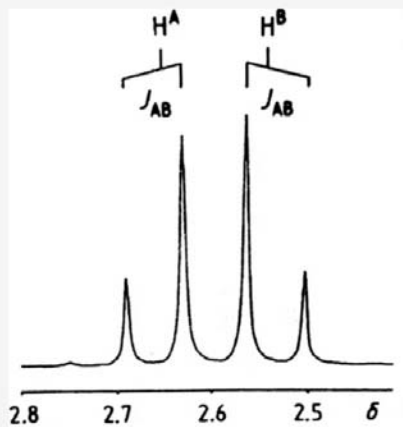
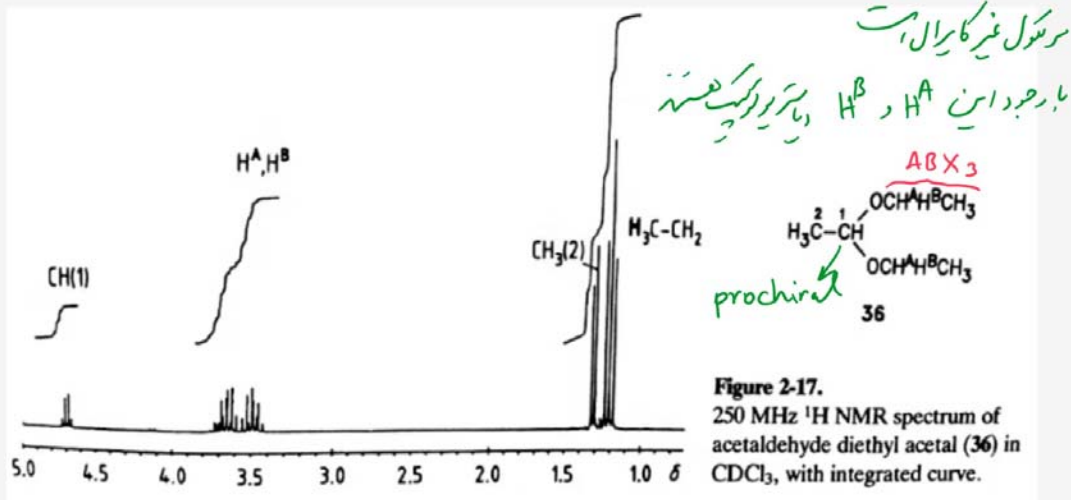
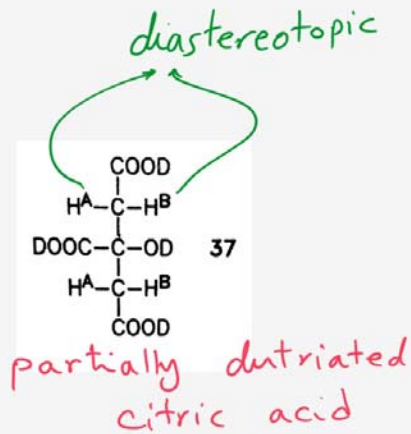


Figure 2-18.
250 MHz ^1H NMR spectrum of citric acid (**37**) in D_2O .



اگر پروتوزئین‌های مصلین یا دگرگردد مصل کبک گروه انزیم پروتسول غیر مصل باشد

مرکزول کاربرد است

اگر طیف نشان دهنده مصل لودین پروتوزئین‌های مذکور باشد نمی‌توان نتیجه گرفت که

مرکزول کاربرد نیست

زیرا ممکن است فرکانس‌های ارتدینامی لپتور تصادفی هم منطبق شده باشد