

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 (°C)	乙醇	丙酮	乙腈	苯	正丁醇	四氢化碳	氯仿	环己烷	环戊烷	二氯乙烷	二甲苯	二氯甲烷	二氯乙烷	二氯乙烷	正庚烷	正己烷	甲醚	异丙烷	异丙醇	二丙酮	四氢呋喃	四氢呋喃	三氯乙烷	水	二甲苯	密度 g/mL
117.9	乙醇																								乙醇	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	二甲苯																								二甲苯	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	二氯六环																								二氯六环	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	二丙酮																								二丙酮	0.74
146.2	四氢乙烷																								四氢乙烷	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

NMR 内标物标准谱图

Compound	MW	Solvents				
		CDCl ₃	DMSO	CD ₃ OD	D ₂ O	
2,2-Diphenylacetone	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) 6.42(d)			
Hydroquinone	110.04	7.46(s) 6.64(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(l) 7.55(l) 7.49(dd) 7.42(l) 7.37(l) 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)	

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	Glutamine	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

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、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Cbz-Cl/Na ₂ CO ₃ /CHCl ₃ /H ₂ O	H ₂ /Pd-C, 供氢体/Pd-C, 8Br ₂ /CH ₂ Cl ₂ or TFA, HBr/HOAc等
	Boc	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Boc ₂ O/NaOH/diox/H ₂ O, Boc ₂ O/MeOH, Boc ₂ O/Me ₂ NOH/CH ₃ CN	3M HCl/EtOAc, HCl/MeOH or diox, TsOH/THF-CH ₂ Cl ₂ , Me ₂ Si/CHCl ₃ or CH ₃ CN
	Fmoc	伯胺、仲胺	Fmoc-Cl/NaHCO ₃ /diox/H ₂ O	20%哌啶/DMF, 50%哌啶/CH ₂ Cl ₂ 等
	Alloc	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Alloc-Cl/Py	NiCl ₂ (DME)/H ₂ O, Pd(PPh ₃) ₄ /Bu ₄ SnH
	Teoc	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Teoc-Cl/碱/diox/H ₂ O	TBAF, TEAF
	Bn	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	ROCOCl/NaHCO ₃ /diox/H ₂ O	HBr/HOAc, Me ₂ Si, KOH/H ₂ O/乙二醇
	Tos	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Tos-Cl/Et ₃ N	HBr/HOAc, 48% HBr/苯酚 (cat)
	Tfa	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	TFAA/Py, 苯二甲酰氯-NCO ₂ CF ₃ /CH ₂ Cl ₂	K ₂ CO ₃ /MeOH/H ₂ O, NH ₃ /MeOH, HCl/MeOH
	Trt	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Trt-Cl/Et ₃ N	HCl/MeOH, H ₂ /Pd/EtOH, TFA/CH ₂ Cl ₂
	Dmb	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	ArCHO/NaBH ₄ CN/MeOH	TFA/CH ₂ Cl ₂ , HCl/THF
	PMB	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	PMB-Br/K ₂ CO ₃ /CH ₃ CN, PhCHO/NaBH ₄ CN/MeOH	HCO ₂ H/Pd-C/MeOH, H ₂ /Pd(OH) ₂ /EtOH, TFA, CAN/CH ₃ CN
	Bn	伯胺、仲胺、咪唑、吡咯、吡啶等	Bn-Br/Et ₃ N or K ₂ CO ₃ /CH ₃ CN, PhCHO/NaBH ₄ CN/MeOH	H ₂ /Pd(OH) ₂ /EtOH, CCl ₄ /COCCl/CH ₃ CN

冷却剂最低制冷温度

冷却剂 (mm)	温度 (°C)	冷却剂	温度 (°C)
Ice	0	Chloroform/N ₂	-63
Ethylene Glycol/CO ₂	-15	Chloroform/CO ₂	-61
Ice/NH ₄ Cl (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 ₂ O (100:150)	-55	N ₂	-180

常用化学溶剂残留 (¹H NMR Data)

	proton	mult	THF-d ₆	CD ₂ Cl ₂	CDCl ₃	toluene-d ₆	C ₆ D ₆	C ₆ D ₅ Cl	(CD ₃) ₂ CO	(CD ₃) ₂ SO	CD ₃ CN	TFE-d ₃	CD ₃ OD	D ₂ O
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		7.14				3.88		
						7.09								
						7.01		7.14						
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 ^a	3.16			0.58	0.63	1.30		4.19	2.18	2.20		
tert-butyl methyl ether	OCCH 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 ^a	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 ₃ CO	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 ₃	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 ₂	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 ^a	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	3.30	1.33	1.32	0.83	0.50	1.39	3.39	4.63	2.47			
ethyl acetate	CH ₃ CO	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 ₂ CH 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 ₃ CH ₂	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 ₃ CO	s			2.14		1.58		2.07	2.07	2.06		2.12	2.19
	CH ₂ CH ₃	q,7			2.46		1.81		2.45	2.43	2.43		2.50	3.18
	CH ₃ CH ₂	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 ^a	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	7.67	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 ^c	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	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(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)	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 ^d	CH(2,5)	m	2.75	2.82	2.87	2.56	2.54	2.64		2.67	2.75	3.11	2.80	3.07
	CH(3,4)	m	1.59	1.67	1.68	1.34	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(2,5)	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(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(2,6)	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	s	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