

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

А.Ю.Аксиненко, И.П.Калашникова, В.Б.Соколов Карбамоилимины метилтрифторпировата в азареакции Дильса-Альдера с циклопентадиеном
Biomedical Chemistry: Research and Methods, 2018, 1(3), e00016

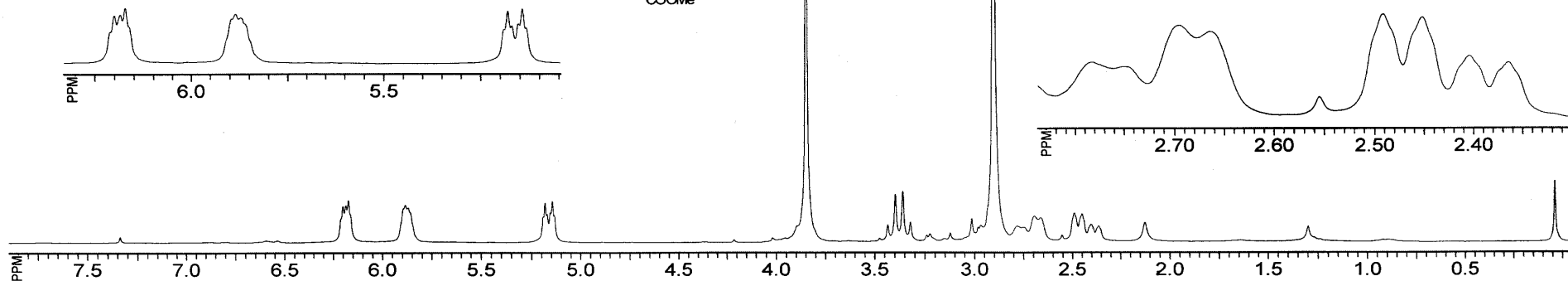
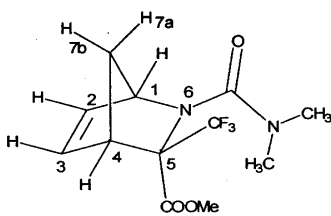
DOI:10.18097/BMCRM00016

Спектры ЯМР соединений **2a,b** и **3a,b**

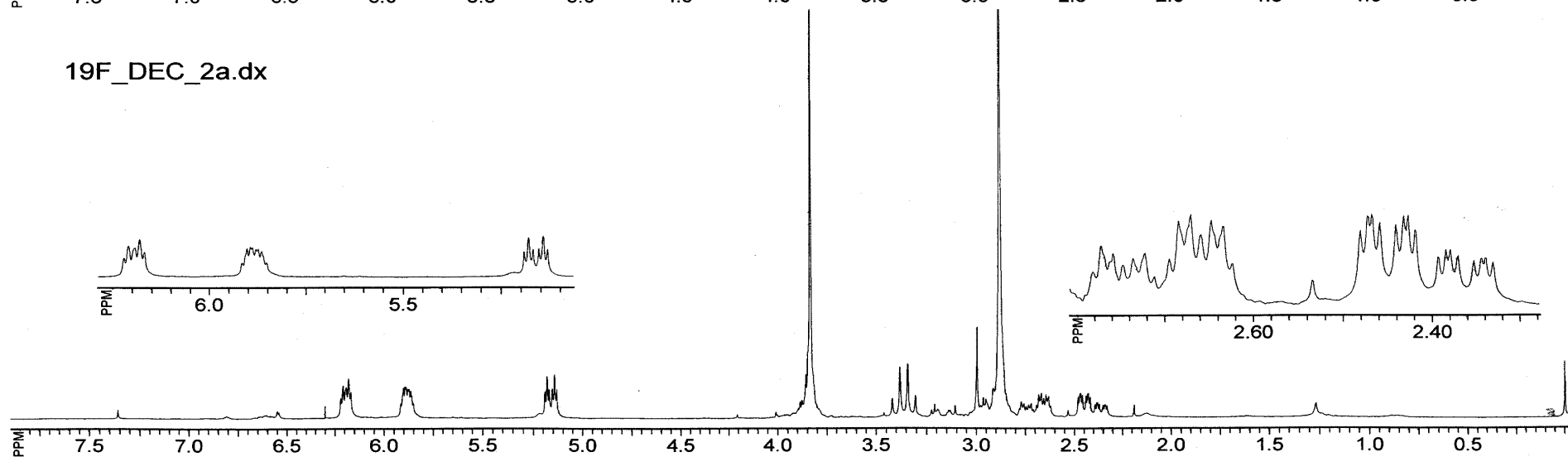
Спектры ЯМР ^1H , ^{13}C и ^{19}F записывали на спектрометре «Bruker DPX 200» при частоте 200.13, 50 и 188 МHz, соответственно, относительно SiMe_4

(внутренний эталон) и CFCl_3 (внутренний эталон).

1H_2a.dx

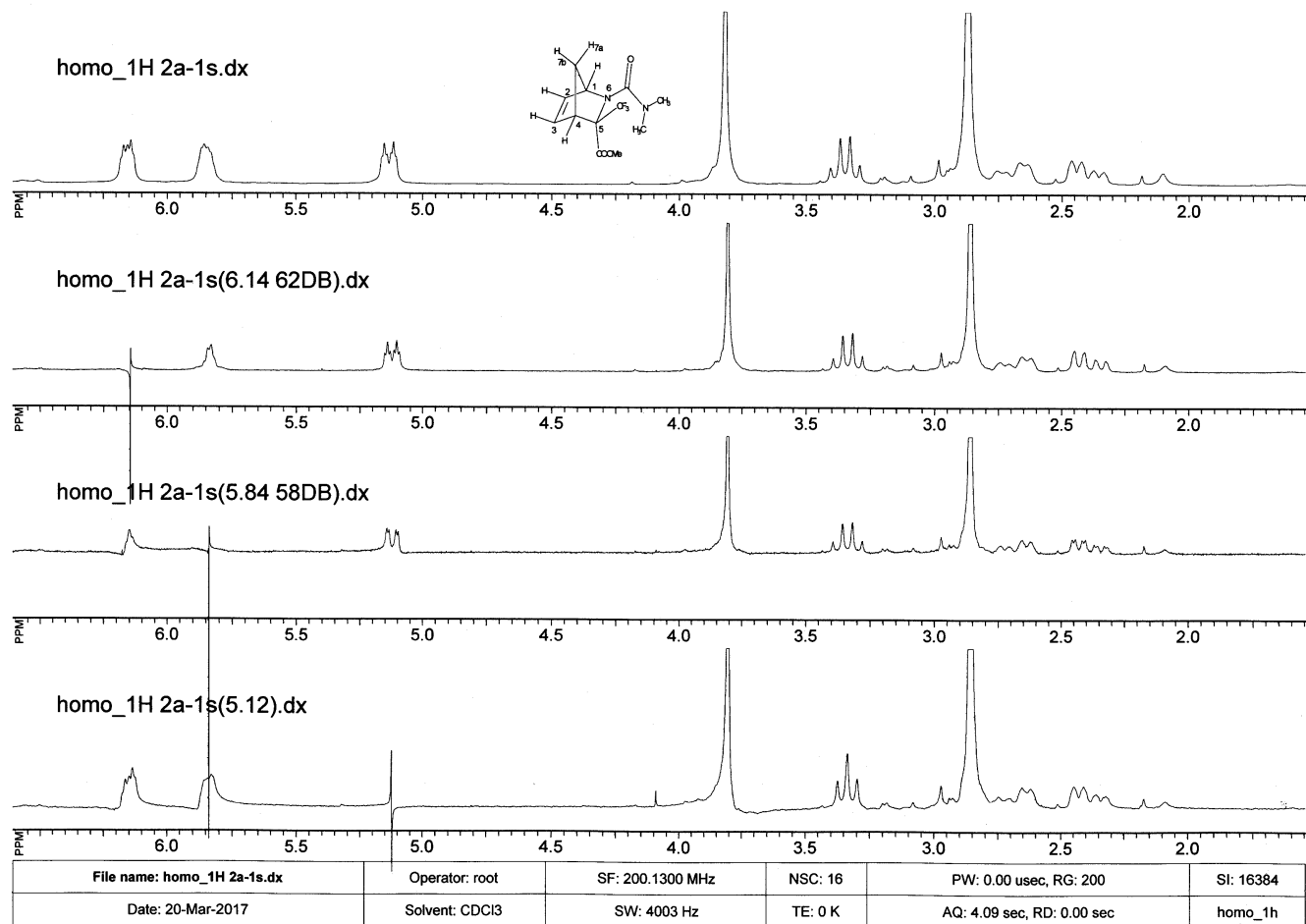


19F_DEC_2a.dx

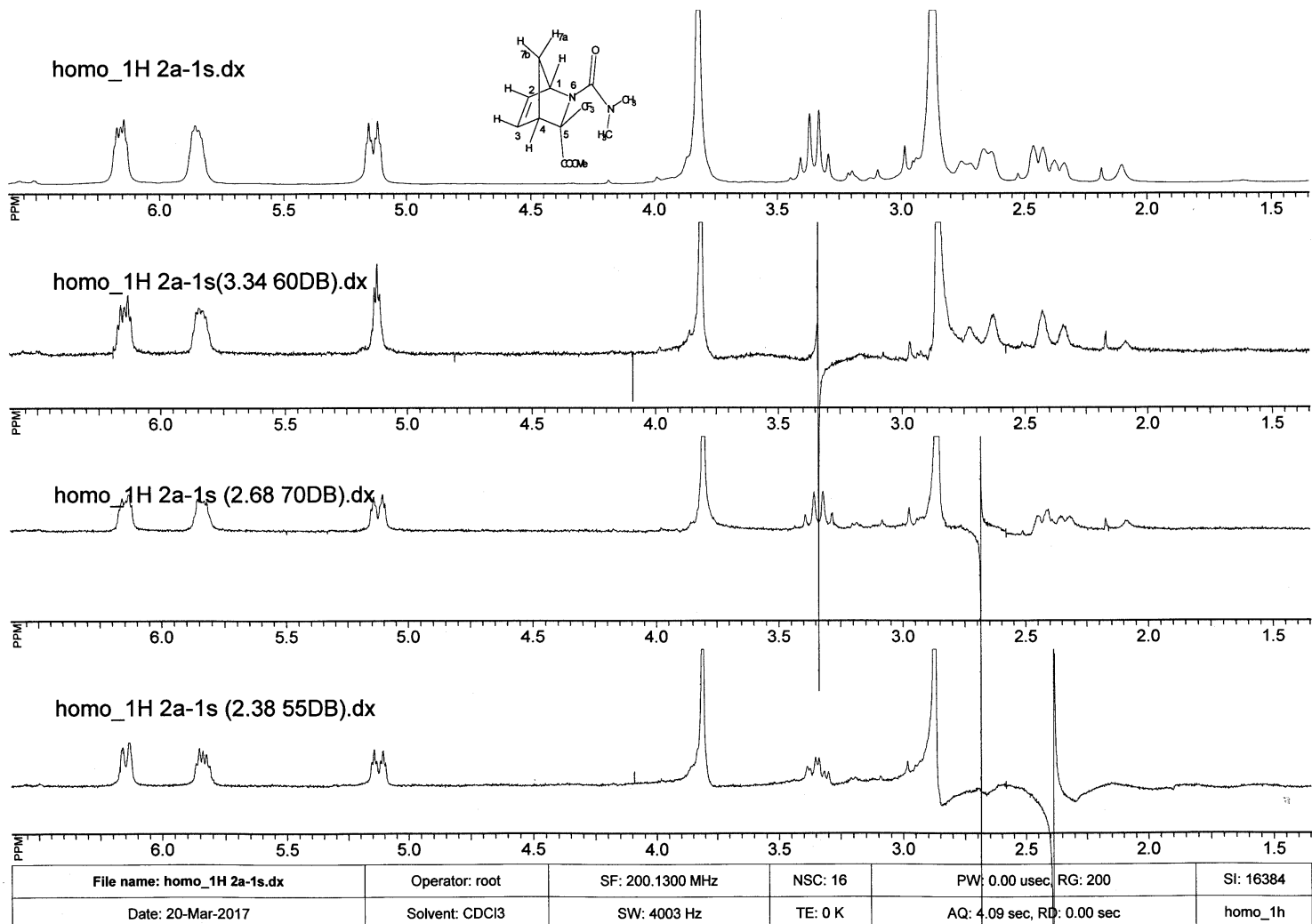


File name: 1H_2a.dx	Operator: root	SF: 200.1300 MHz	NSC: 8	PW: 0.00 usec, RG: 200	SI: 32768
Date: 18-Mar-2017	Solvent: CDCl ₃	SW: 4139 Hz	TE: 0 K	AQ: 1.98 sec, RD: 0.00 sec	H1

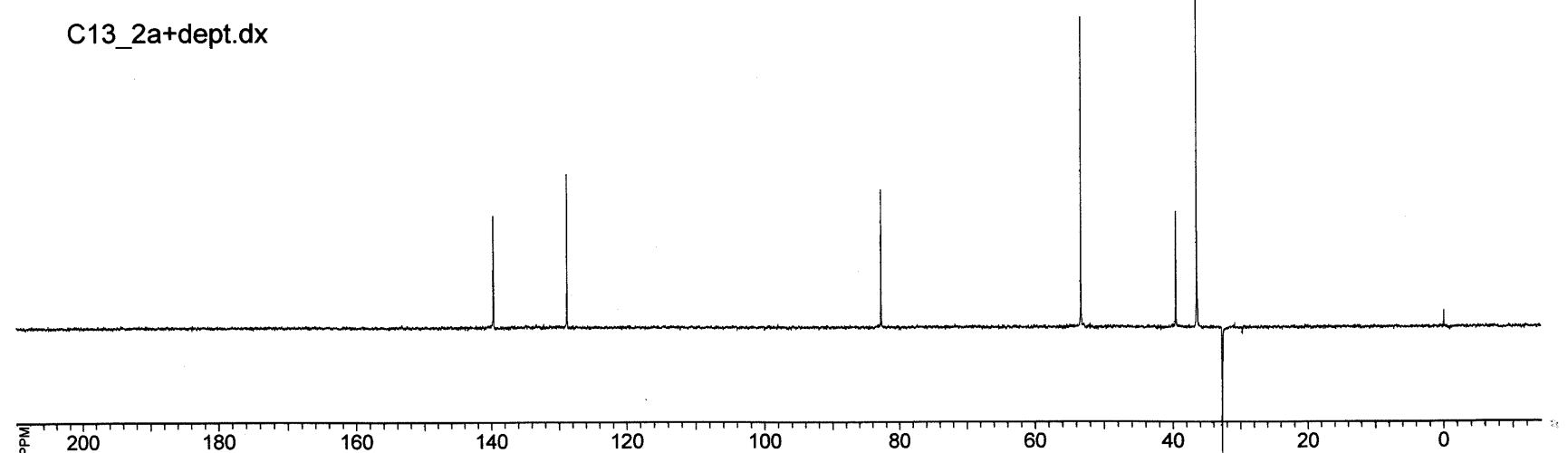
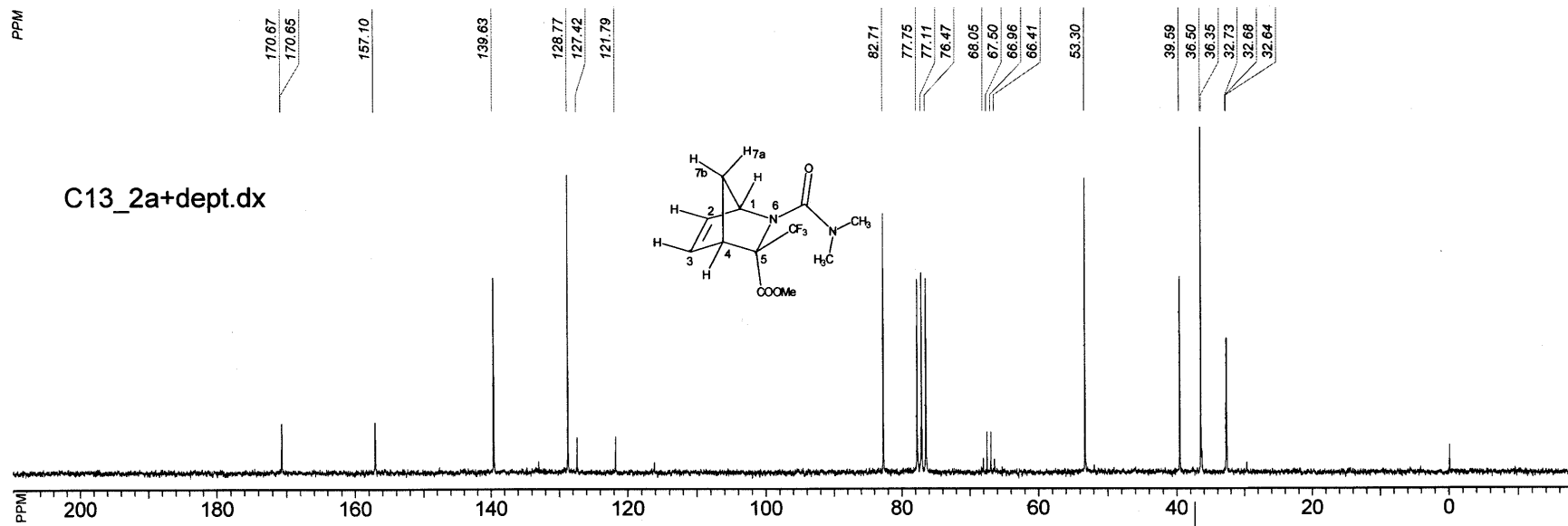
¹H ЯМР спектр соединения 2a и с гетероядерной развязкой от атомов ¹⁹F



^1H ЯМР спектры соединения **2a** с гомоядерной развязкой при разных частотах



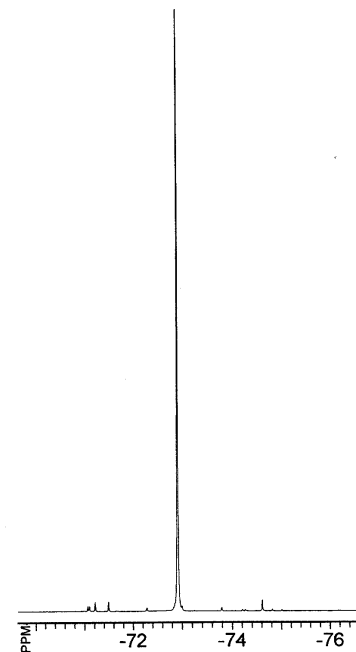
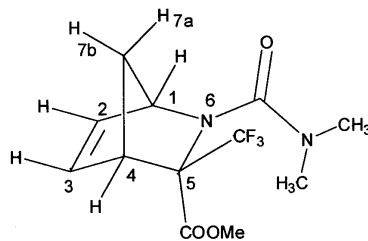
^1H ЯМР спектры соединения **2a** с гомоядерной развязкой при разных частотах



File name: C13_2a+dept.dx	Operator: root	SF: 50.3227 MHz	NSC: 759	PW: 0.00 usec, RG: 32768	SI: 32768
Date: 22-Mar-2017	Solvent: CDCl3	SW: 11990 Hz	TE: 0 K	AQ: 2.73 sec, RD: 0.00 sec	

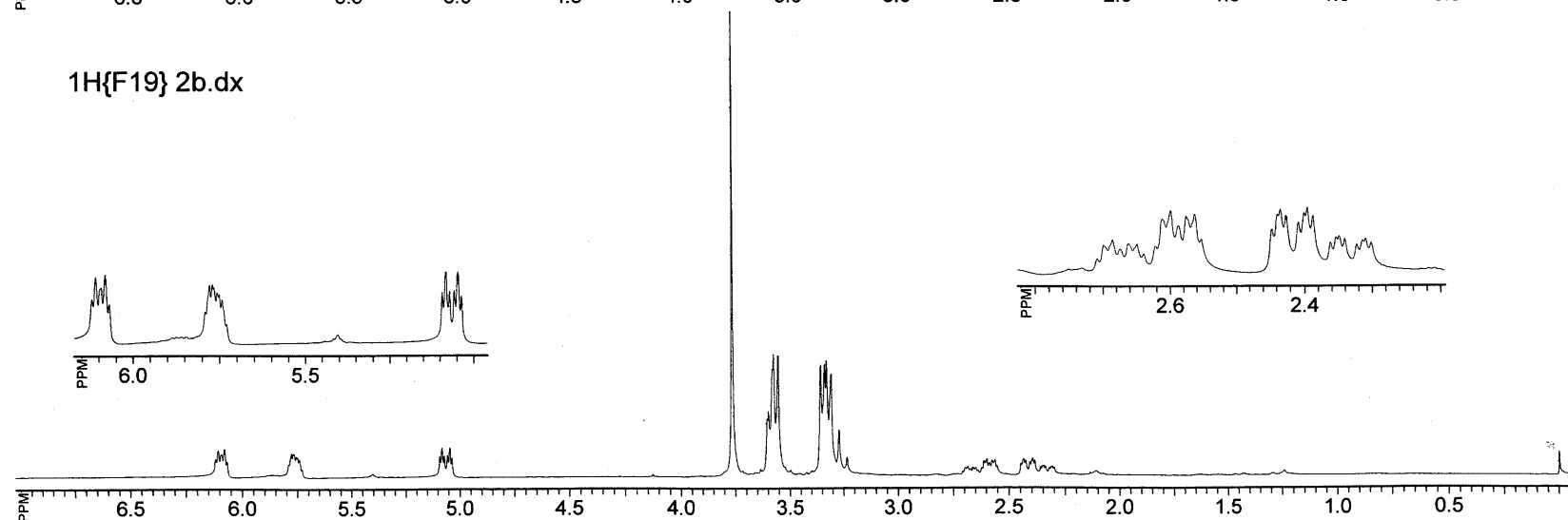
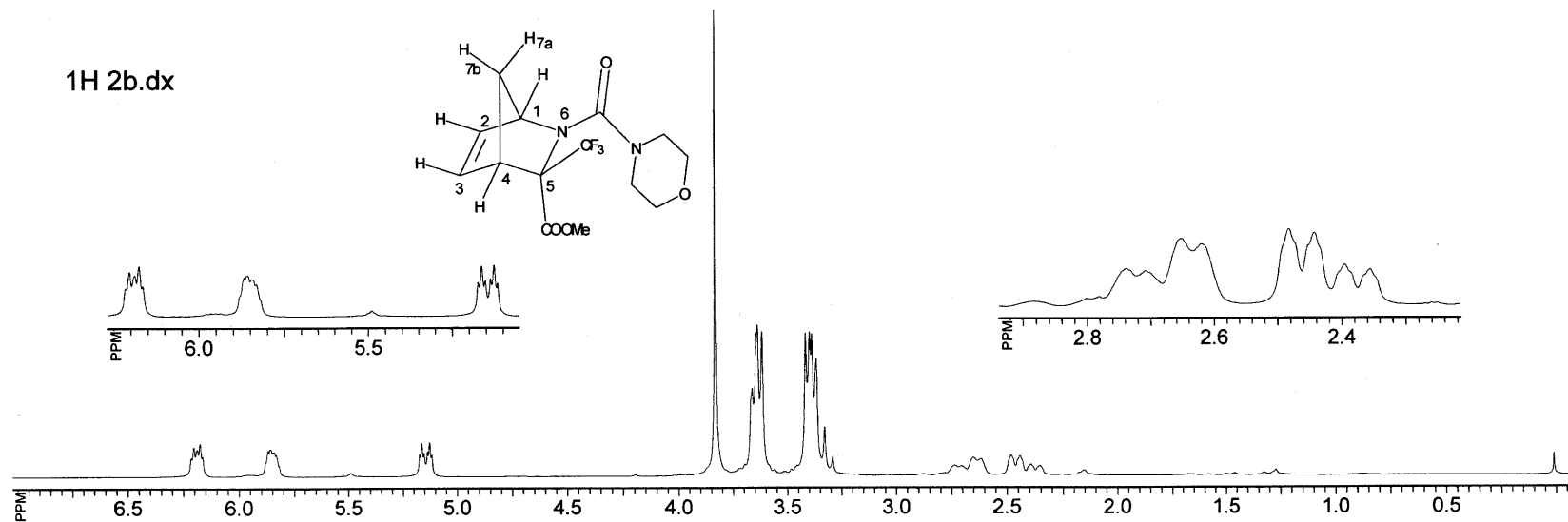
¹³C ЯМР спектр и ДЕПТ спектр соединения 2а

19F_2a.dx



File name: 19F_2a.dx	Operator: root	SF: 188.3103 MHz	NSC: 130	PW: 0.00 usec, RG: 100	SI: 131072
Date: 22-Mar-2017	Solvent: CDCl ₃	SW: 75188 Hz	TE: 0 K	AQ: 0.87 sec, RD: 0.00 sec	F19

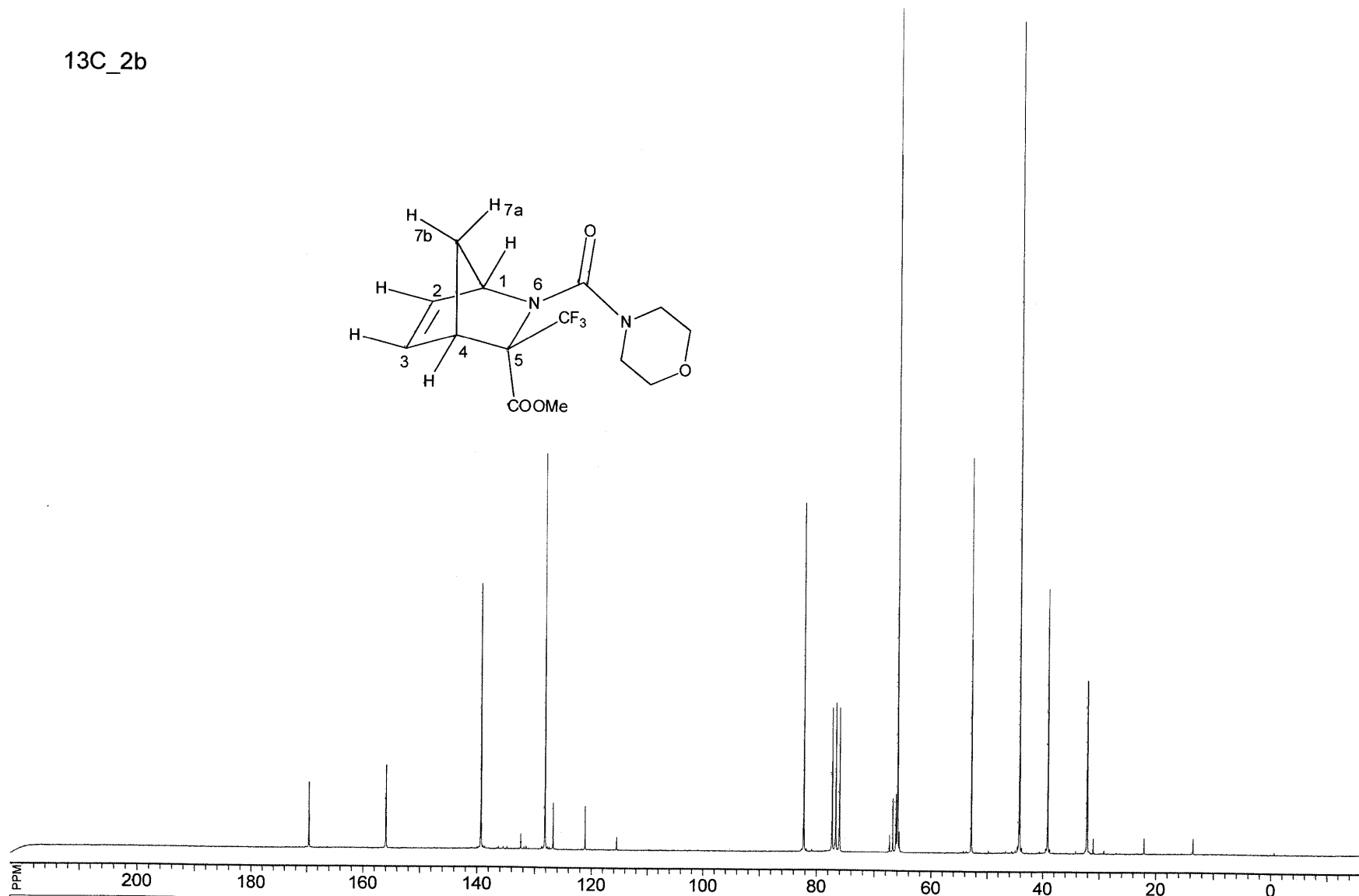
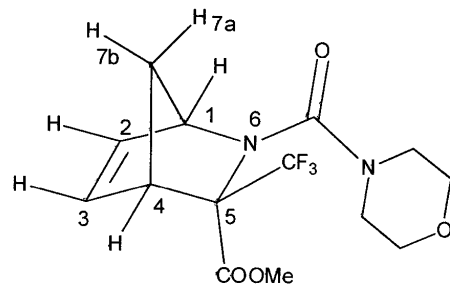
¹⁹F ЯМР спектр соединения 2a



File name: 1H 2b.dx	Operator: root	SF: 200.1298 MHz	NSC: 8	PW: 0.00 usec, RG: 100	SI: 32768
Date: 11-Apr-2017	Solvent: CDCl ₃	SW: 4139 Hz	TE: 0 K	AQ: 1.98 sec, RD: 0.00 sec	H1

¹H ЯМР спектр соединения **2b** и с гетероядерной развязкой от атомов ¹⁹F

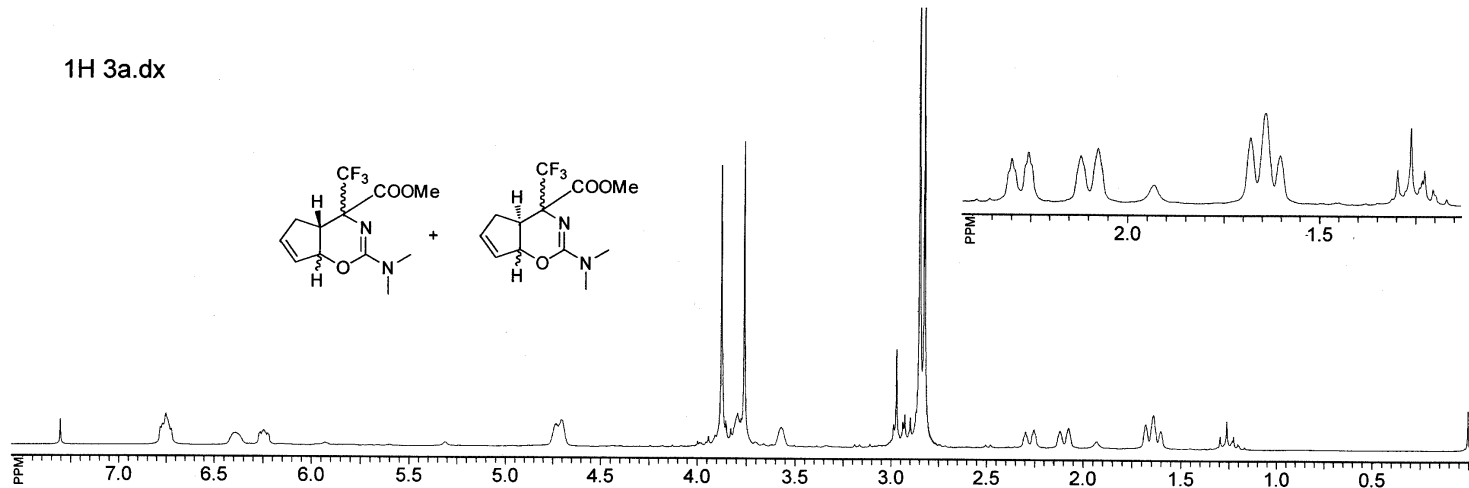
13C_2b



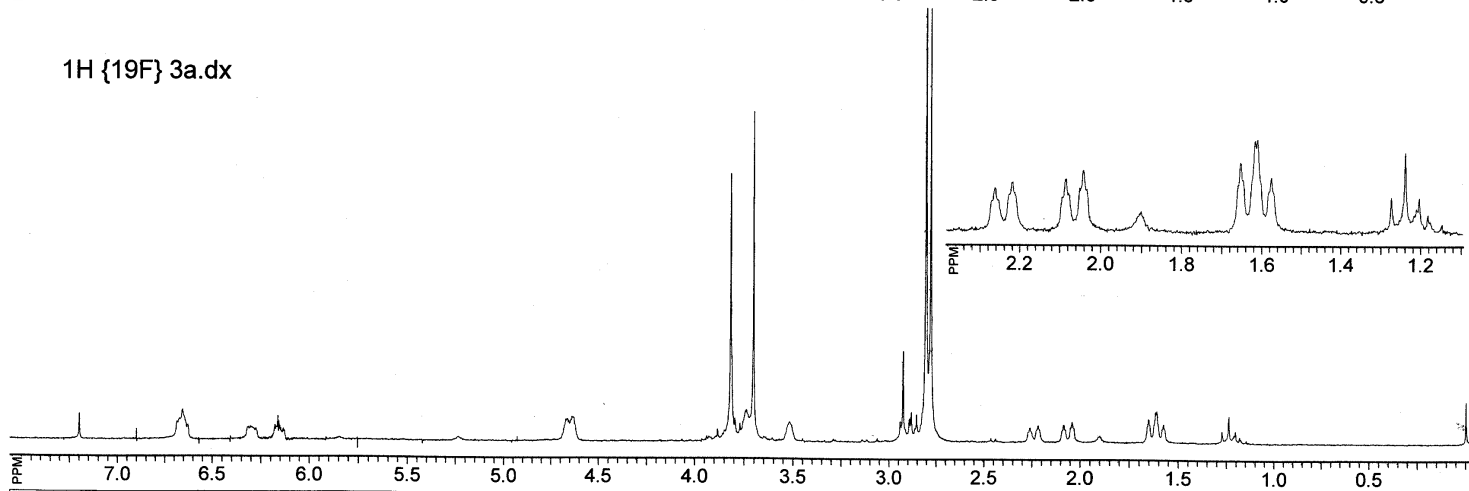
File name: 13C_2b	Operator: root	SF: 50.3228 MHz	NSC: 25800	PW: 0.00 usec, RG: 6000	SI: 32768
Date: 29-Sep-2016	Solvent: CDCl ₃	SW: 12077 Hz	TE: 0 K	AQ: 1.36 sec, RD: 0.00 sec	

¹³C ЯМР спектр соединения 2b

1H 3a.dx

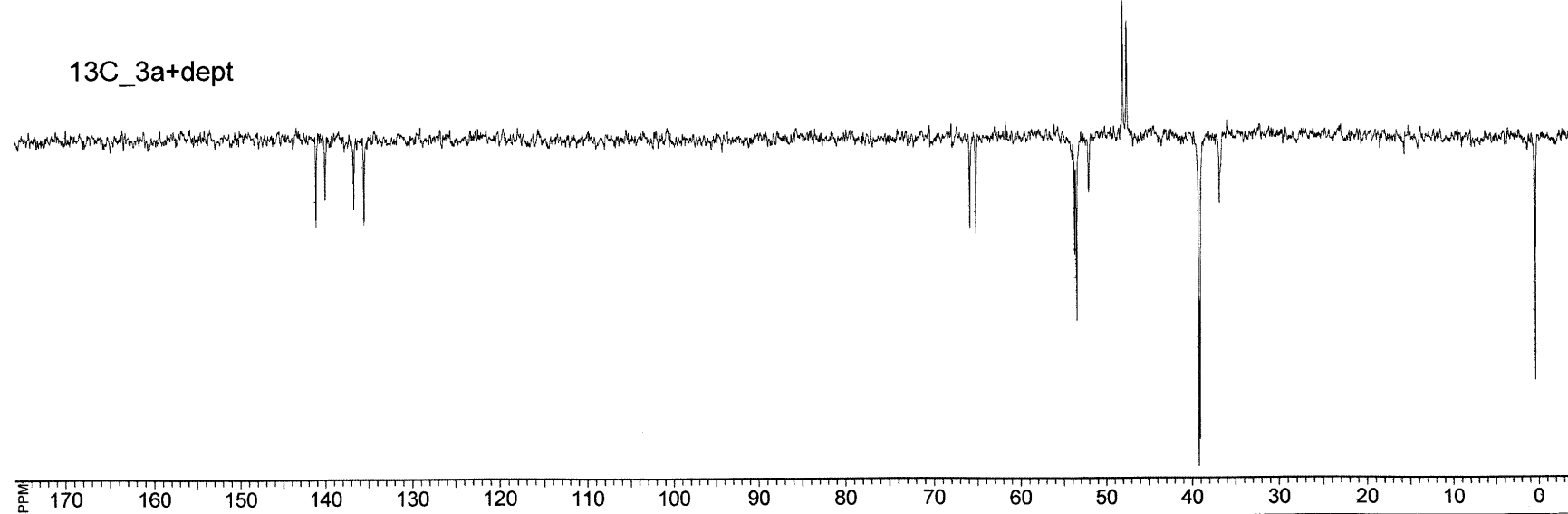
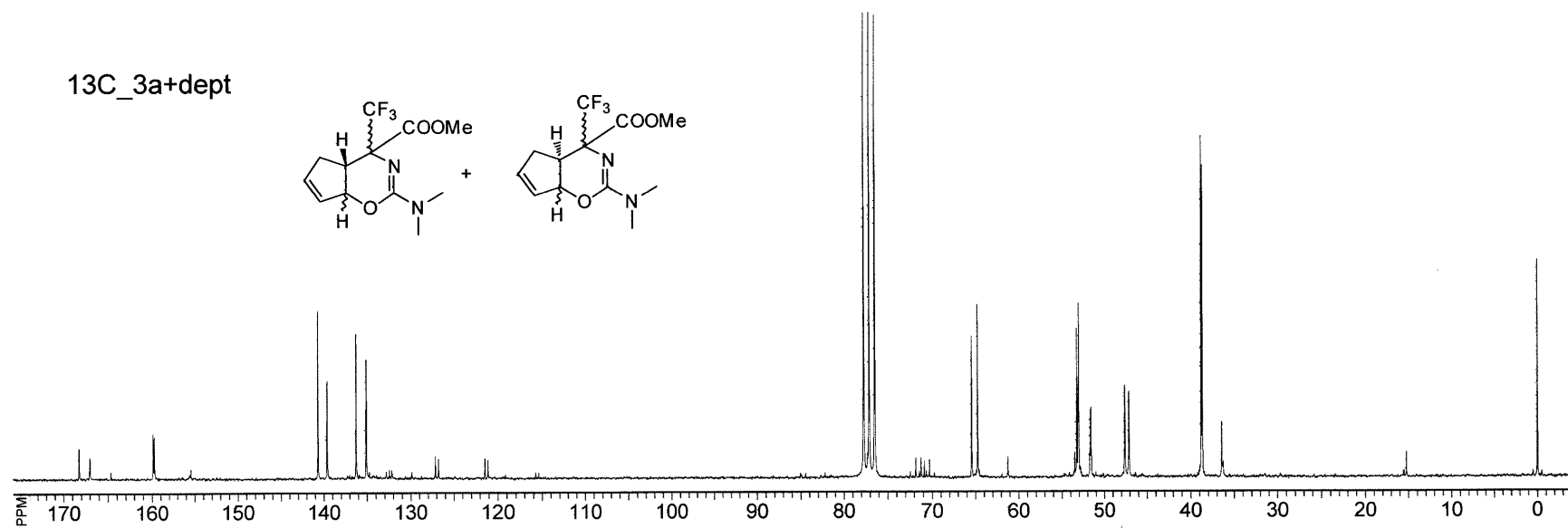


1H {19F} 3a.dx



File name: 1H 3a.dx	Operator: root	SF: 200.1300 MHz	NSC: 8	PW: 0.00 usec, RG: 100	SI: 16384
Date: 19-Apr-2017	Solvent: CDCl3	SW: 4990 Hz	TE: 0 K	AQ: 1.64 sec, RD: 0.00 sec	1H

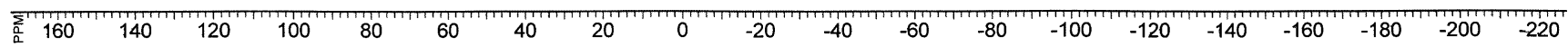
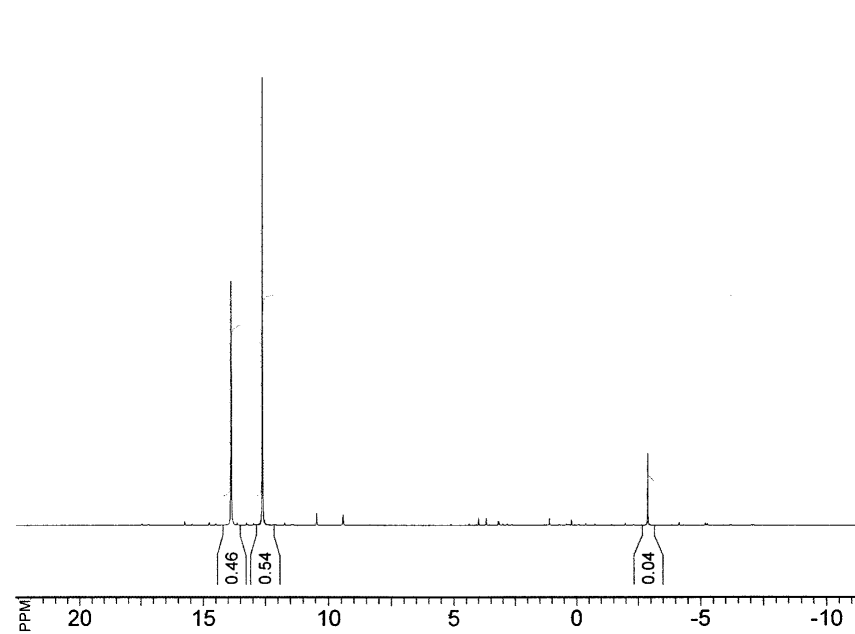
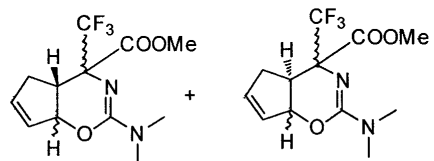
¹H ЯМР спектр соединения **3a** и с гетероядерной развязкой от атомов ¹⁹F



File name: 13C_3a+dept	Operator: root	SF: 50.3227 MHz	NSC: 21000	PW: 0.00 usec, RG: 6000	SI: 32768
Date: 08-Jun-2017	Solvent: CDCl3	SW: 12077 Hz	TE: 0 K	AQ: 1.36 sec, RD: 0.00 sec	

¹³C ЯМР спектр и DEPT спектр смеси соединений **3aA** и **3aB**

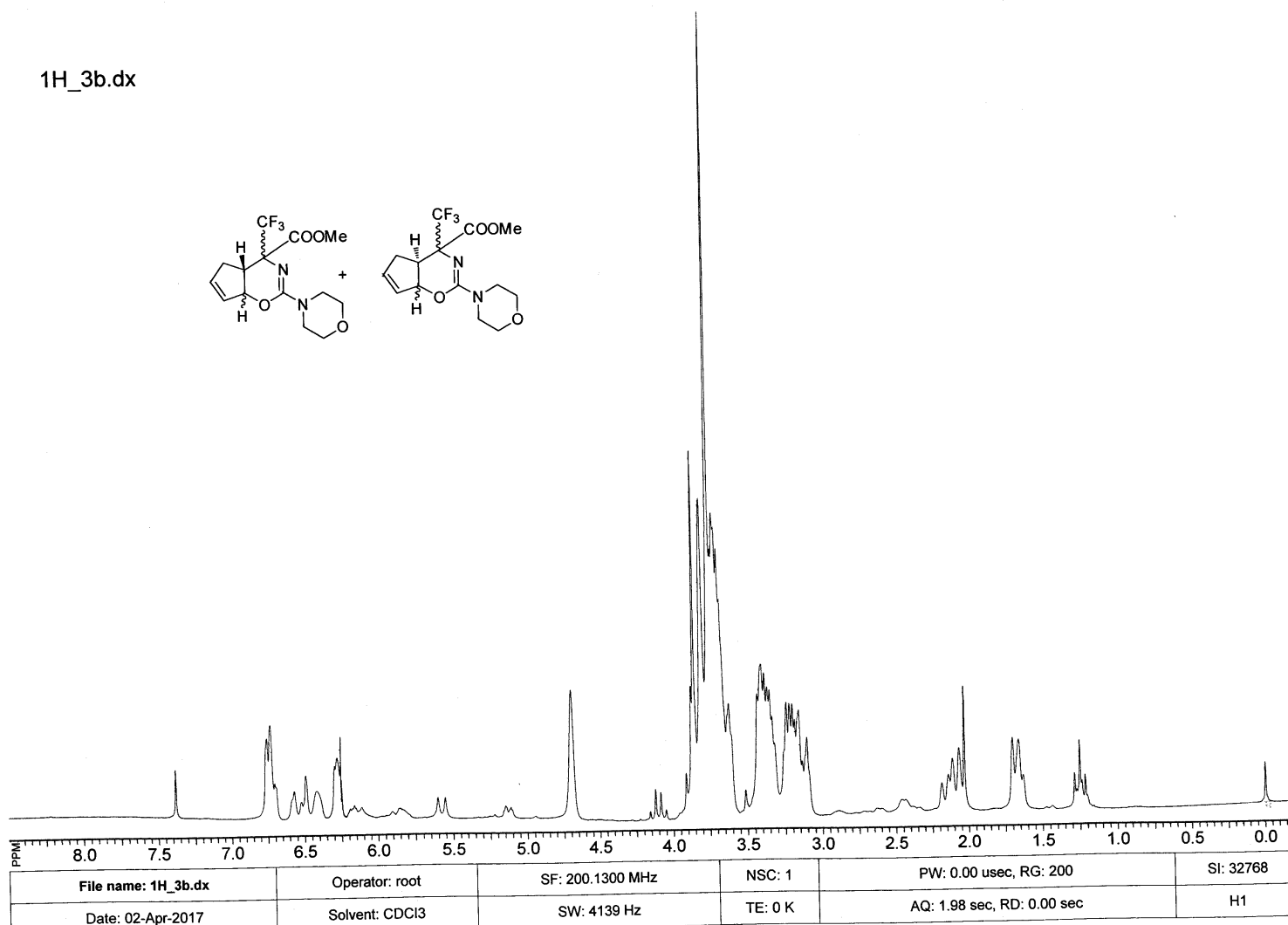
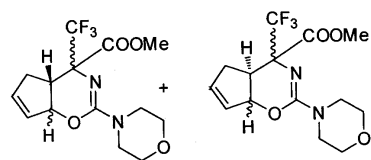
19F_3a



File name: 19F_3a	Operator: pz	SF: 188.2961 MHz	NSC: 24	PW: 0.00 usec, RG: 500	SI: 65536
Date: 17-Apr-2017	Solvent: CDCl3	SW: 75188 Hz	TE: 0 K	AQ: 0.44 sec, RD: 0.00 sec	

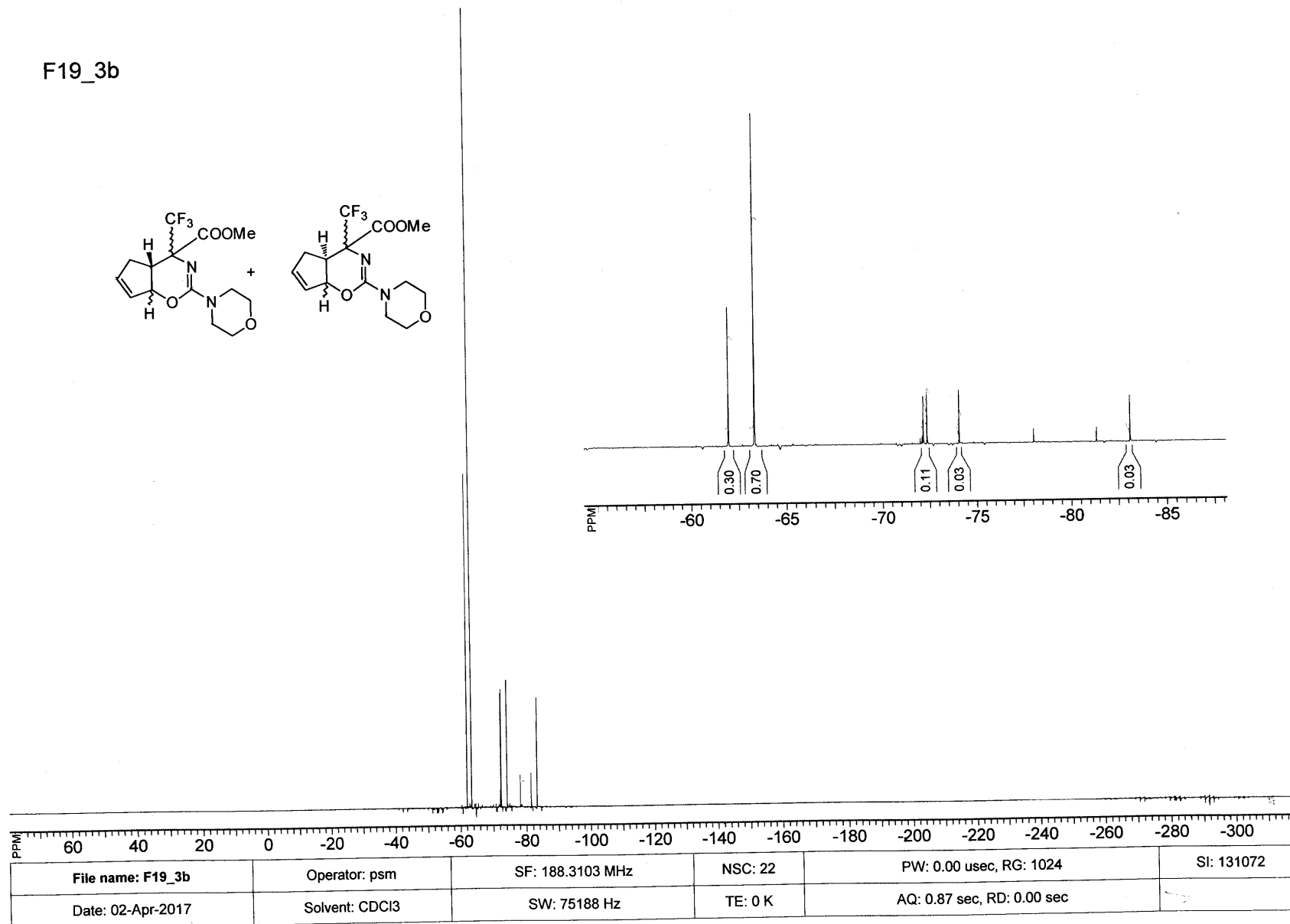
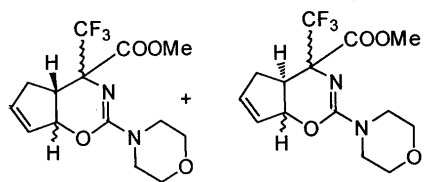
¹⁹F ЯМР спектр смеси соединений **3aA** и **3aB**

1H_3b.dx



¹H ЯМР спектр смеси соединений **3bA** и **3bB**

F19_3b



¹⁹F ЯМР спектр смеси соединений **3bA** и **3bB**