

# NMR用 重水素化溶媒 Magnisolv<sup>®</sup> プライスリスト 2016

Deuterated Compounds for NMR



# NMR用 重水素化溶媒 Magnisolv<sup>®</sup>

ロット差の少ない重水素化率と不純物含有量

重水素化率も幅広く取り揃えています



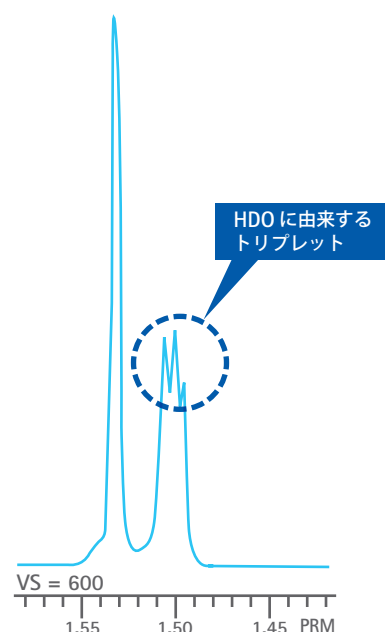
## 重クロロホルム

- 弊社では、早くより安定剤として銀を使用！
- 高品質を示すトリプレットが現れます！

## 高純度を示すトリプレットとは？

通常重クロロホルムのチャートには、微量の  $\text{CHCl}_3$  の存在を示す 7.24 ppm のシングルピークと、微量の  $\text{H}_2\text{O}$  を示す 1.50 ppm のシングルピークが見られますが、ごく稀に、このピークに加えて 1.50 ppm にトリプレットが見られることがあります。このトリプレットは HDO に由来するものですが、不純物である微量の酸が存在すると、酸が引き起こす HDO の高速な H-D 交換により、トリプレットは見えなくなってしまいます。

1.50 ppm のトリプレットがチャートに現れるのは、不純物である酸がほとんど含まれていない、極めて高純度の重クロロホルムなのです。



\* クロロホルムは UV 照射により分解し、塩化重水素を生成する傾向があります。高純度を維持する為に、長時間の照射は避けてください。

## A large, stylized archway with a blue-to-red gradient, set against a white background. The arch is composed of two thick, vertical pillars and a curved top. The left pillar is blue, the right pillar is red, and the top curve transitions from blue to red. The arch is set against a white background with a subtle shadow on the ground.

## 試験成績書の例

# Certificate of Analysis

1.03562.0000 Dimethyl sulfoxide-D6 deuteration degree min. 99.96%  
for NMR spectroscopy MagniSolv™

Batch S5555962

Deuteration degree  
Water (K. Fischer, H<sub>2</sub>O + D<sub>2</sub>O)  
Performance test (NMR-spectrum)  
Water (NMR, H<sub>2</sub>O)

Date of examination (DD.MM.YYYY):  
Minimum shelf life (DD.MM.YYYY):

11.01.2012  
31.01.2017

## Batch Values

99.97 %  
0.011 %  
passes test  
0.006 %

Dr. Oliver Schramel

responsible laboratory manager quality control

This document has been produced electronically and is valid without a signature

Merck KGaA, Frankfurter Straße 250, 64293 Darmstadt (Germany): +49 6151 72-0  
SA-7 2329681/103562000/000000 V. 985 Date: 01.02.2012

Page 1 of 1

表示値と実測値は同値もしくは、  
それ以上です。

NMR およびカルフィッシャーの  
2つの方法で水分含有量を測定！

# NMR 用重水素化合物 製品一覧

|   | 製品名                                                                                      | 重水素化率 [%] | カールフィッシャーと NMR で水分含量の品質試験を実施！              |                            | カタログ番号       | 容量           | 重量 (g) | 包装形態   | 希望販売価格  |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|--------------------------------------------|----------------------------|--------------|--------------|--------|--------|---------|
|   |                                                                                          |           | H <sub>2</sub> O+D <sub>2</sub> O (KF) [%] | H <sub>2</sub> O (NMR) [%] |              |              |        |        |         |
| A | Acetic acid-D1<br>[酢酸 -D1]                                                               | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15035.0025 | 25 mL        | 26.5   | ガラスボトル | ¥14,900 |
|   | Acetic acid-D4<br>[酢酸 -D4]                                                               | >99.5     | <0.1                                       | ---                        | 8.15036.0009 | 0.75 mL × 10 | 8.4    | アンプル   | ¥18,700 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 8.15036.0010 | 10 mL        | 11.2   | アンプル   | ¥20,600 |
|   | Acetone-D6<br>[アセトン -D6]                                                                 | >99.9     | <0.03                                      | <0.02                      | 1.00021.0005 | 0.5 mL × 10  | 4.35   | アンプル   | ¥4,200  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.00021.0009 | 0.75 mL × 10 | 6.53   | アンプル   | ¥6,300  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.00021.0025 | 25 mL        | 21.75  | ガラスボトル | ¥13,900 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.00021.0100 | 100 mL       | 87     | ガラスボトル | ¥50,900 |
|   | Acetone-D6<br>[アセトン -D6]                                                                 | >99.96    | <0.02                                      | <0.01                      | 1.11969.0009 | 0.75 mL × 10 | 6.53   | アンプル   | ¥20,900 |
|   | Acetonitrile-D3<br>[アセトニトリル -D3]                                                         | >99.96    | <0.02                                      | <0.01                      | 1.13753.0001 | 1 mL         | 0.84   | アンプル   | ¥3,800  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.13753.0009 | 0.75 mL × 10 | 6.3    | アンプル   | ¥22,800 |
|   | Ammonia-D3 26 % in D <sub>2</sub> O<br>[重アンモニア水 -D3 26%重水溶液]                             | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15008.0010 | 10 mL        | 10.6   | アンプル   | ¥18,000 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 8.15008.0025 | 25 mL        | 26.5   | ガラスボトル | ¥35,900 |
| B | Benzene-D6<br>[ベンゼン -D6]                                                                 | >99.6     | ---                                        | <0.02                      | 1.01789.0009 | 0.75 mL × 10 | 7.13   | アンプル   | ¥8,200  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.01789.0100 | 100 mL       | 95     | ガラスボトル | ¥55,200 |
|   | Benzene-D6<br>[ベンゼン -D6]                                                                 | >99.96    | ---                                        | 0.005                      | 1.01766.0009 | 0.75 mL × 10 | 7.13   | アンプル   | ¥17,000 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.01766.0010 | 10 mL        | 9.5    | アンプル   | ¥18,600 |
| C | Chloroform-D1<br>not stabilized<br>[クロロホルム -D1]                                          | >99.8     | ---                                        | <0.01                      | 1.02450.0025 | 25 mL        | 37.5   | ガラスボトル | ¥3,500  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.02450.0100 | 100 mL       | 150    | ガラスボトル | ¥8,700  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.02450.0500 | 500 mL       | 750    | ガラスボトル | ¥35,500 |
|   | Chloroform-D1<br>[クロロホルム -D1]                                                            | >99.96    | ---                                        | < 0.005                    | 1.02446.0009 | 0.75 mL × 10 | 11.25  | アンプル   | ¥8,200  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.02446.0010 | 10 mL        | 15     | アンプル   | ¥7,100  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.02446.0025 | 25 mL        | 37.5   | ガラスボトル | ¥13,000 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.02446.0100 | 100 mL       | 150    | ガラスボトル | ¥39,200 |
|   | Chloroform-D1<br>stabilized with silver<br>[クロロホルム -D1、銀箔入り]                             | >99.8     | ---                                        | <0.01                      | 1.03420.0025 | 25 mL        | 37.5   | ガラスボトル | ¥3,400  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.03420.0100 | 100 mL       | 150    | ガラスボトル | ¥8,700  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.03420.0500 | 500 mL       | 750    | ガラスボトル | ¥35,500 |
|   | Chloroform-D1; 0.03 vol% TMS<br>stabilized with silver<br>[クロロホルム -D1、0.03% TMS 添加、銀箔入り] | >99.8     | ---                                        | <0.01                      | 1.03296.0025 | 25 mL        | 37.5   | ガラスボトル | ¥3,400  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.03296.0100 | 100 mL       | 150    | ガラスボトル | ¥8,700  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.03296.0500 | 500 mL       | 750    | ガラスボトル | ¥35,500 |
|   | Chloroform-D1 ; 1vol% TMS<br>stabilized with silver<br>[クロロホルム -D1、1% TMS 添加、銀箔入り]       | >99.5     | ---                                        | <0.02                      | 1.13359.0025 | 25 mL        | 37.5   | ガラスボトル | ¥2,900  |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 1.13359.0100 | 100 mL       | 150    | ガラスボトル | ¥8,800  |
|   | Cumene-D12 (Isopropylbenzene)<br>[クメン -D12]                                              | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15023.0001 | 1 mL         | 0.87   | アンプル   | ¥23,800 |
|   | Cyclohexane-D12<br>[シクロヘキサン -D12]                                                        | >99.5     | <0.05                                      | <0.03                      | 8.15024.0005 | 0.5 mL × 10  | 4.45   | アンプル   | ¥27,400 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 8.15024.0009 | 0.75 mL × 10 | 6.68   | アンプル   | ¥34,300 |
|   |                                                                                          |           |                                            |                            | 8.15024.0006 | 5 mL         | 4.45   | アンプル   | ¥22,900 |

# NMR 用重水素化合物 製品一覧

|   | 製品名                                                                  | 重水素化率 [%] | カールフィッシャーと NMR で水分含量の品質試験を実施！              |                            | カタログ番号       | 容量           | 重量 (g) | 包装形態   | 希望販売価格   |
|---|----------------------------------------------------------------------|-----------|--------------------------------------------|----------------------------|--------------|--------------|--------|--------|----------|
|   |                                                                      |           | H <sub>2</sub> O+D <sub>2</sub> O (KF) [%] | H <sub>2</sub> O (NMR) [%] |              |              |        |        |          |
| D | n-Decane-D22<br>[n-デカン-D22]                                          | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15027.0001 | 1 mL         | 0.85   | アンプル   | ¥25,000  |
|   | Deuterium chloride 20 % in D <sub>2</sub> O<br>[塩化重水素 (20% 重水溶液)]    | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15016.0025 | 25 mL        | 29.75  | ガラスボトル | ¥25,300  |
|   | Deuterium chloride 20 % in D <sub>2</sub> O<br>[塩化重水素 (20% 重水溶液)]    | >99.95    | ---                                        | ---                        | 8.15017.0010 | 10 mL        | 11.9   | アンプル   | ¥22,400  |
|   | Deuterium chloride 38% in D <sub>2</sub> O<br>[塩化重水素 (38% 重水溶液)]     | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15018.0010 | 10 mL        | 12.6   | アンプル   | ¥18,100  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 8.15018.0050 | 50 mL        | 63     | ガラスボトル | ¥60,700  |
|   | Deutrium oxide<br>[重水]                                               | >99.9     | ---                                        | ---                        | 1.13366.0009 | 0.75 mL × 10 | 8.33   | アンプル   | ¥3,800   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.13366.0025 | 25 mL        | 27.75  | ガラスボトル | ¥7,400   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.13366.0100 | 100 mL       | 111    | ガラスボトル | ¥22,400  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.13366.0500 | 500 mL       | 555    | ガラスボトル | ¥100,800 |
|   | Deutrium oxide<br>[重水]                                               | >99.96    | ---                                        | ---                        | 1.03428.0005 | 0.5 mL × 10  | 5.55   | アンプル   | ¥5,900   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03428.0009 | 0.75 mL × 10 | 8.33   | アンプル   | ¥7,700   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03428.0100 | 100 mL       | 111    | ガラスボトル | ¥51,400  |
|   | 1,2-Dichlorobenzene-D4<br>[1,2-ジクロロベンゼン-D4]                          | >99       | ---                                        | <0.03                      | 8.15029.0005 | 5 mL         | 6.7    | アンプル   | ¥38,900  |
|   | Dichloromethane-D2<br>[ジクロロメタン-D2]                                   | >99.8     | ---                                        | <0.01                      | 1.13720.0009 | 0.75 mL × 10 | 10.2   | アンプル   | ¥23,800  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.13720.0010 | 10 mL        | 13.6   | アンプル   | ¥26,100  |
|   | Dichloromethane-D2<br>[ジクロロメタン-D2]                                   | >99.96    | ---                                        | < 0.005                    | 1.04200.0005 | 0.5 mL × 10  | 6.8    | アンプル   | ¥36,500  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.04200.0009 | 0.75 mL × 10 | 10.2   | アンプル   | ¥47,600  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.04200.0010 | 10 mL        | 13.6   | アンプル   | ¥52,800  |
|   | N,N-Dimethylacetamide-D9<br>[N,N-ジメチルアセトアミド-D9]                      | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15032.0001 | 1 mL         | 1.03   | アンプル   | ¥32,500  |
|   | Diethyl ether-D10<br>[ジエチルエーテル-D10]                                  | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15031.0001 | 1 mL         | 1      | アンプル   | ¥30,900  |
|   | Dimethylformamide-D7<br>[ジメチルホルムアミド-D7]                              | >99.5     | <0.05                                      | <0.03                      | 1.11656.0001 | 1 mL         | 1.05   | アンプル   | ¥9,400   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.11656.0009 | 0.75 mL × 10 | 7.88   | アンプル   | ¥56,100  |
|   | Dimethyl sulfate-D6<br>[硫酸ジメチル-D6]                                   | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15034.0005 | 5 mL         | 7      | アンプル   | ¥24,900  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6<br>[ジメチルスルホキシド-D6]                             | >99.8     | <0.03                                      | <0.02                      | 1.03424.0005 | 0.5 mL × 10  | 5.95   | アンプル   | ¥4,400   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03424.0009 | 0.75 mL × 10 | 8.93   | アンプル   | ¥5,900   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03424.0011 | 10 mL        | 11.9   | アンプル   | ¥6,400   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03424.0025 | 25 mL        | 29.75  | ガラスボトル | ¥12,900  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03424.0050 | 50 mL        | 59.5   | ガラスボトル | ¥21,400  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03424.0100 | 100 mL       | 119    | ガラスボトル | ¥38,900  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6<br>[ジメチルスルホキシド-D6]                             | >99.96    | <0.02                                      | <0.01                      | 1.03562.0005 | 0.5 mL × 10  | 5.95   | アンプル   | ¥9,800   |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03562.0009 | 0.75 mL × 10 | 8.93   | アンプル   | ¥14,600  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03562.0010 | 10 mL        | 11.9   | アンプル   | ¥16,100  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03562.0025 | 25 mL        | 29.75  | ガラスボトル | ¥32,100  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6; 0.03 vol% TMS<br>[ジメチルスルホキシド-D6、0.03% TMS 添加] | >99.8     | <0.03                                      | <0.02                      | 1.03591.0050 | 50 mL        | 59.5   | ガラスボトル | ¥23,400  |
|   |                                                                      |           |                                            |                            | 1.03591.0100 | 100 mL       | 119    | ガラスボトル | ¥42,500  |

## NMR 用重水素化合物 製品一覧

|   | 製品名                                                                                            | 重水素化率 [%] | カールフィッシャーと NMR で水分含量の品質試験を実施！              |                            | カタログ番号       | 容量           | 重量 (g) | 包装形態   | 希望販売価格   |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|--------------------------------------------|----------------------------|--------------|--------------|--------|--------|----------|
|   |                                                                                                |           | H <sub>2</sub> O+D <sub>2</sub> O (KF) [%] | H <sub>2</sub> O (NMR) [%] |              |              |        |        |          |
| D | Dimethyl sulfoxide-D <sub>6</sub> ; 0.03 vol% TMS<br>[ジメチルスルホキシド-D <sub>6</sub> 、0.03% TMS 添加] | >99.96    | <0.02                                      | <0.01                      | 1.03592.0005 | 5 mL         | 5.95   | アンプル   | ¥8,300   |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.03592.0025 | 25 mL        | 29.75  | ガラスボトル | ¥27,500  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D <sub>6</sub> ; 0.1 vol.% TMS<br>[ジメチルスルホキシド-D <sub>6</sub> 、0.1% TMS 添加]  | >99.9     | < 0.03                                     | <0.02                      | 1.03587.0006 | 6 mL         | 7.14   | アンプル   | ¥4,600   |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.03587.0025 | 25 mL        | 29.75  | ガラスボトル | ¥13,300  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.03587.0100 | 100 mL       | 119    | ガラスボトル | ¥40,400  |
| E | Ethanol-D <sub>6</sub><br>[エタノール-D <sub>6</sub> ]                                              | >99       | <3.0                                       | <0.05                      | 1.03450.0001 | 1 mL         | 0.9    | アンプル   | ¥11,200  |
|   | Ethanol-D <sub>1</sub> (ol-D)<br>[エタノール-D <sub>1</sub> (ol-D) ]                                | >99.5     | <0.5                                       | ---                        | 8.15037.0050 | 50 mL        | 50     | ガラスボトル | ¥19,300  |
| F | Formic acid-D <sub>2</sub> 99.5 %<br>[ 甲酸 -D <sub>2</sub> ]                                    | >99.5     | ---                                        | ---                        | 1.13365.0010 | 10 mL        | 12.7   | アンプル   | ¥78,300  |
| H | 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-propanol-D <sub>2</sub><br>[ヘキサフルオロ-2-プロパノール-D <sub>2</sub> ]         | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15041.0005 | 5 mL         | 8.25   | アンプル   | ¥121,300 |
|   | n-Hexane-D <sub>14</sub><br>n-ヘキササン-D <sub>14</sub>                                            | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15043.0001 | 1 mL         | 0.77   | アンプル   | ¥17,300  |
| M | Methanol-D <sub>1</sub> (ol-D)<br>[メタノール-D <sub>1</sub> (ol-D) ]                               | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15051.0050 | 50 mL        | 40.5   | ガラスボトル | ¥22,200  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 8.15051.0100 | 100 mL       | 81     | ガラスボトル | ¥40,200  |
|   | Methanol-D <sub>4</sub><br>[メタノール-D <sub>4</sub> ]                                             | >99.8     | <0.03                                      | ---                        | 1.06028.0001 | 1 mL         | 0.89   | アンプル   | ¥2,100   |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.06028.0005 | 0.5 mL × 10  | 4.45   | アンプル   | ¥8,000   |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.06028.0009 | 0.75 mL × 10 | 6.68   | アンプル   | ¥12,100  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.06028.0025 | 25 mL        | 22.25  | ガラスボトル | ¥26,600  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.06028.0100 | 100 mL       | 89     | ガラスボトル | ¥80,400  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 1.06025.0005 | 0.5 mL × 10  | 4.45   | アンプル   | ¥16,600  |
|   | Methanol-D <sub>4</sub><br>[メタノール-D <sub>4</sub> ]                                             | >99.95    | <0.02                                      | ---                        | 1.06025.0009 | 0.75 mL × 10 | 6.68   | アンプル   | ¥24,800  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 8.15052.0001 | 1 mL         | 0.87   | アンプル   | ¥9,600   |
|   | Methanol-D <sub>3</sub> (ol-H)<br>[メタノール-D <sub>3</sub> (ol-H) ]                               | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15052.0005 | 5 mL         | 4.35   | アンプル   | ¥38,500  |
|   |                                                                                                |           |                                            |                            | 8.15053.0005 | 5 mL         | 4.4    | アンプル   | ¥32,500  |
| N | Naphthalene-D <sub>8</sub><br>[ナフタレン-D <sub>8</sub> ]                                          | >98       | ---                                        | ---                        | 8.15000.0001 | 1 g          | 1      | アンプル   | ¥19,600  |
|   | Nitrobenzene-D <sub>5</sub><br>[ニトロベンゼン-D <sub>5</sub> ]                                       | >99.5     | ---                                        | <0.02                      | 8.15001.0010 | 10 mL        | 12.53  | アンプル   | ¥23,600  |
|   | Nitromethane-D <sub>3</sub><br>[ニトロメタン-D <sub>3</sub> ]                                        | >99       | ---                                        | <0.03                      | 1.02914.0002 | 2 × 0.75 mL  | 1.77   | アンプル   | ¥5,700   |
| O | n-Octane-D <sub>18</sub><br>[n-オクタン-D <sub>18</sub> ]                                          | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15002.0001 | 1 mL         | 0.82   | アンプル   | ¥15,200  |
| P | Phosphoric acid-D <sub>3</sub> 85% in D <sub>2</sub> O<br>[リン酸-D <sub>3</sub> 85%重水溶液]         | >99       | ---                                        | ---                        | 8.15058.0010 | 10 mL        | 17.4   | アンプル   | ¥16,600  |
|   | 2-Propanol-D <sub>1</sub> (ol-D)<br>[2-プロパノール-D <sub>1</sub> (ol-D) ]                          | >98       | ---                                        | ---                        | 8.15044.0025 | 25 mL        | 19.75  | ガラスボトル | ¥14,000  |
|   | 2-Propanol-D <sub>8</sub><br>[2-プロパノール-D <sub>8</sub> ]                                        | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15045.0005 | 5 mL         | 4.45   | アンプル   | ¥27,100  |
|   | Pyridine-D <sub>5</sub><br>[ピリジン-D <sub>5</sub> ]                                              | >99.8     | <0.03                                      | <0.02                      | 1.07475.0009 | 0.75 mL × 10 | 10.5   | アンプル   | ¥19,700  |

## NMR 用重水素化合物 製品一覧

|   | 製品名                                                                    | 重水素化率 [%] | カールフィッシャーと NMR で水分含量の品質試験を実施！              |                            | カタログ番号       | 容量           | 重量 (g) | 包装形態   | 希望販売価格   |
|---|------------------------------------------------------------------------|-----------|--------------------------------------------|----------------------------|--------------|--------------|--------|--------|----------|
|   |                                                                        |           | H <sub>2</sub> O+D <sub>2</sub> O (KF) [%] | H <sub>2</sub> O (NMR) [%] |              |              |        |        |          |
| S | Sodiumdeuterium oxide 30% in D <sub>2</sub> O<br>[ 重水酸化ナトリウム 30%重水溶液 ] | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15055.0025 | 25 mL        | 36.5   | ガラスボトル | ¥16,400  |
|   | Styrene-D8<br>[ スチレン -D8]                                              | >98       | ---                                        | ---                        | 8.15061.0001 | 1 mL         | 0.98   | アンプル   | ¥15,600  |
|   |                                                                        |           |                                            |                            | 8.15061.0010 | 10 mL        | 9.8    | アンプル   | ¥101,700 |
|   | Sulfuric acid-D2 96-98% in D <sub>2</sub> O<br>[ 硫酸 -D2 96%重水溶液 ]      | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15060.0025 | 25 mL        | 47     | ガラスボトル | ¥19,800  |
|   |                                                                        |           |                                            |                            | 8.15060.0050 | 50 mL        | 92     | ガラスボトル | ¥33,000  |
| T | 1,1,2,2-Tetrachloroethane-D2<br>[ テトラクロロエタン -D2]                       | >99.5     | ---                                        | <0.02                      | 1.03495.0009 | 0.75 mL × 10 | 12.15  | アンプル   | ¥27,400  |
|   |                                                                        |           |                                            |                            | 1.03495.0025 | 25 mL        | 40.5   | ガラスボトル | ¥60,200  |
|   | Tetrahydrofuran-D8<br>[ テトラヒドロフラン -D8]                                 | >99.5     | <0.05                                      | <0.03                      | 1.13364.0001 | 1 mL         | 0.99   | アンプル   | ¥7,600   |
|   |                                                                        |           |                                            |                            | 1.13364.0009 | 0.75 mL × 10 | 7.43   | アンプル   | ¥46,000  |
|   | Trifluoroacetic acid-D1<br>[ トリフルオロ酢酸 -D1]                             | >99.5     | <0.05                                      | ---                        | 1.13363.0010 | 10 mL        | 15     | アンプル   | ¥11,700  |
| X | p-Xylene-D10<br>[p- キシレン -D10]                                         | >99.5     | ---                                        | ---                        | 8.15005.0010 | 10 mL        | 9.5    | アンプル   | ¥32,200  |

## NMR 用 内部標準

| 製品名                                                                           | 重水素化率 [%]  | カールフィッシャーと NMR で水分含量の品質試験を実施！              |                            | カタログ番号       | 容量     | 重量 (g) | 包装形態   | 希望販売価格  |
|-------------------------------------------------------------------------------|------------|--------------------------------------------|----------------------------|--------------|--------|--------|--------|---------|
|                                                                               |            | H <sub>2</sub> O+D <sub>2</sub> O (KF) [%] | H <sub>2</sub> O (NMR) [%] |              |        |        |        |         |
| Tetramethylsilane<br>[ テトラメチルシラン ]                                            | >99.7 (純度) | ---                                        | ---                        | 1.08183.0100 | 100 mL | 64     | ガラスボトル | ¥26,200 |
| 3- (Trimethylsilyl) propionic acid-D4 Na<br>[3- (トリメチルシリル) プロピオン酸 -D4 ナトリウム塩] | >98        | ---                                        | ---                        | 1.08652.0001 | 1 g    | 1      | 金属カン   | ¥15,200 |

# NMR用重水素化合物 物性データ

メルク重水素化溶媒 68 製品の物性データです。

|   | 製品名                                            |                                  | 製品番号   | 重水素化率<br>[%] | 密度<br>[g/cm <sup>3</sup> ]<br>[20℃] | 融点<br>[℃] | 沸点<br>[℃]            | 分子量    |
|---|------------------------------------------------|----------------------------------|--------|--------------|-------------------------------------|-----------|----------------------|--------|
| A | Acetic acid-D1                                 | 酢酸 -D1                           | 815035 | >99.5        | 1.06                                | 17        | 116-118 (1013 hPa)   | 61.06  |
|   | Acetic acid-D4                                 | 酢酸 -D4                           | 815036 | >99.5        | 1.12                                | 17        | 116-118 (1013 hPa)   | 64.08  |
|   | Acetone-D6                                     | アセトン -D6                         | 100021 | >99.9        | 0.88                                | -95.4     | 56.2 (1013 hPa)      | 64.12  |
|   | Acetone-D6                                     | アセトン -D6                         | 111969 | >99.96       | 0.88                                | -95.4     | 56.2 (1013 hPa)      | 64.12  |
|   | Acetonitrile-D3                                | アセトニトリル -D3                      | 113753 | >99.96       | 0.84                                | -42       | 80                   | 44.07  |
|   | Ammonia-D3 26 % in D <sub>2</sub> O            | アンモニア -D3 26%重水溶液                | 815008 | >99.5        | 1.056                               |           | 36                   |        |
| B | Benzene-D6                                     | ベンゼン -D6                         | 101789 | >99.6        | 0.95                                | 6.7       | 79 (1013 hPa)        | 84.15  |
|   | Benzene-D6                                     | ベンゼン -D6                         | 101766 | >99.96       | 0.95                                | 6.7       | 79 (1013 hPa)        | 84.15  |
| C | Chloroform-D1                                  | クロロホルム -D1                       | 102450 | >99.8        | 1.5                                 | -64.1     | 60                   | 120.38 |
|   | Chloroform-D1                                  | クロロホルム -D1                       | 102446 | >99.96       | 1.5                                 | -64.1     | 60                   | 120.38 |
|   | Chloroform-D1                                  | クロロホルム -D1<br>銀箔入り               | 103420 | >99.8        | 1.5                                 | -64.1     | 60                   | 120.38 |
|   | Chloroform-D1; 0.03 vol% TMS                   | クロロホルム -D1<br>0.03% TMS 添加, 銀箔入り | 103296 | >99.8        | 1.5                                 | -64.1     | 60                   | 120.38 |
|   | Chloroform-D1 ; 1vol% TMS                      | クロロホルム -D1<br>1% TMS 添加, 銀箔入り    | 113359 | >99.5        | 1.5                                 | -64.1     | 60                   | 120.38 |
|   | Cumene-D12<br>(Isopropylbenzene)               | クメン -D12                         | 815023 | >99          | 0.86                                | -96       | 153 (1013hPa)        | 132.27 |
|   | Cyclohexane-D12                                | シクロヘキサン -D12                     | 815024 | >99.5        | 0.89                                | 6         | 82                   | 96.23  |
| D | n-Decane-D22                                   | n- デカン -D22                      | 815027 | >99          | 0.845                               | -30       | 174                  | 164.42 |
|   | Deuterium chloride 20 %<br>in D <sub>2</sub> O | 塩化重水素 20%重水溶液                    | 815016 | >99.5        | 1.189                               | ---       |                      |        |
|   | Deuterium chloride 20 %<br>in D <sub>2</sub> O | 塩化重水素 20%重水溶液                    | 815017 | >99.95       | 1.189                               | ---       |                      |        |
|   | Deuterium chloride 38%<br>in D <sub>2</sub> O  | 塩化重水素 38%重水溶液                    | 815018 | >99.5        | 1.257                               | -40       |                      |        |
|   | Deutrium oxide                                 | 重水                               | 113366 | >99.9        | 1.11                                | 3.8       | 101                  | 20.03  |
|   | Deutrium oxide                                 | 重水                               | 103428 | >99.96       | 1.11                                | 3.8       | 101                  | 20.03  |
|   | 1,2-Dichlorobenzene-D4                         | 1,2- ジクロロベンゼン -D4                | 815029 | >99          | 1.31                                | -17       | 180                  | 151.03 |
|   | Dichloromethane-D2                             | ジクロロメタン -D2                      | 113720 | >99.8        | 1.36                                | -97       | 39                   | 86.95  |
|   | Dichloromethane-D2                             | ジクロロメタン -D2                      | 104200 | >99.96       | 1.36                                | -97       | 39                   | 86.95  |
|   | N,N-Dimethylacetamide-D9                       | N,N- ジメチルアセトアミド -D9              | 815032 | >99          | 0.94                                | -20       | 165 - 166 (1013 hPa) | 96.18  |
|   | Diethyl ether-D10                              | ジエチルエーテル -D10                    | 815031 | >99          | 0.78                                | -116.3    | 34.6 (1013 hPa)      | 84.18  |
|   | Dimethylformamide-D7                           | ジメチルホルムアミド -D7                   | 111656 | >99.5        | 1.05                                | -60       | 152                  | 80.14  |
|   | Dimethyl sulfate-D6                            | ジメチル 硫酸 -D6                      | 815034 | >99.5        | 1.39                                | -32       | 188 (1013 hPa) (分解)  | 132.17 |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6                          | ジメチルスルホキシド -D6                   | 103424 | >99.8        | 1.19                                | 20.2      | 190                  | 84.17  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6                          | ジメチルスルホキシド -D6                   | 103562 | >99.96       | 1.19                                | 20.2      | 190                  | 84.17  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6;<br>0,03 vol% TMS        | ジメチルスルホキシド -D6<br>0.03% TMS 添加   | 103591 | >99.8        | 1.19                                | 20.2      | 190                  | 84.17  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6;<br>0,03 vol% TMS        | ジメチルスルホキシド -D6<br>0.03% TMS 添加   | 103592 | >99.96       | 1.19                                | 20.2      | 190                  | 84.17  |
|   | Dimethyl sulfoxide-D6; 0.1<br>vol.% TMS        | ジメチルスルホキシド -D6<br>0.1% TMS 添加    | 103587 | >99.9        | 1.19                                | 20.2      | 190                  | 84.17  |

## NMR用重水素化合物 物性データ

メルク重水素化溶媒 68 製品の物性データです。

|          | 製品名                                           |                                  | 製品番号   | 重水素化率<br>[%] | 密度<br>[g/cm <sup>3</sup> ]<br>[20℃] | 融点<br>[℃]        | 沸点<br>[℃]        | 分子量    |
|----------|-----------------------------------------------|----------------------------------|--------|--------------|-------------------------------------|------------------|------------------|--------|
| <b>E</b> | Ethanol-D6                                    | エタノール -D6                        | 103450 | >99          | 0.9                                 | -114.5           | 78               | 52.11  |
|          | Ethanol-D1 (ol-D)                             | エタノール -D1                        | 815037 | >99.5        | 0.79                                | -114.5           | 78.3             | 47.08  |
| <b>F</b> | Formic acid-D2 99.5 %                         | ギ酸 -D2                           | 113365 | >99.5        | 1.27                                | 5.9              | 101              | 48.04  |
| <b>H</b> | 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-propanol-D2          | 1,1,1,3,3,3-ヘキサフルオロ-2-プロパノール -D2 | 815041 | >99.5        | 1.62                                | -3               | 58 (1013 hPa)    | 170.05 |
|          | n-Hexane-D14                                  | n-ヘキサン -D14                      | 815043 | >99          | 0.767                               | -94.3            | 69 (1013 hPa)    | 100.26 |
| <b>L</b> | Lithium aluminium deuteride                   | 重水素化リチウムアルミニウム                   | 815048 | >98          | 0.917                               | 125 (分解)         | ---              | 41.98  |
| <b>M</b> | Methylcyclohexane-D14                         | メチルシクロヘキサン -D14                  | 815053 | >99.5        | 0.77                                | -126             | 101              | 112.27 |
|          | Methanol-D1 (ol-D)                            | メタノール -D1                        | 815051 | >99.5        | 0.81                                | -98              | 64.5 (1013 hPa)  | 33.05  |
|          | Methanol-D4                                   | メタノール -D4                        | 106028 | >99.8        | 0.79                                | -98              | 64.5 (1013 hPa)  | 36.07  |
|          | Methanol-D4                                   | メタノール -D4                        | 106025 | >99.95       | 0.79                                | -98              | 64.5 (1013 hPa)  | 36.07  |
|          | Methanol-D3 (ol-H)                            | メタノール -D3                        | 815052 | >99.5        | 0.867                               | -98              | 64.5 (1013 hPa)  | 35.06  |
| <b>N</b> | Naphthalene-D8                                | ナフタレン -D8                        | 815000 | >98          |                                     | 81 - 83          |                  | 136.22 |
|          | Nitrobenzene-D5                               | ニトロベンゼン -D5                      | 815001 | >99.5        | 1.55                                | 6                | 88 (16 hPa)      | 128.14 |
|          | Nitromethane-D3                               | ニトロメタン -D3                       | 102914 | >99          | 1.19                                | -26              | 100              | 64.06  |
| <b>O</b> | n-Octane-D18                                  | n-オクタン -D18                      | 815002 | >99          | 0.815                               | -57              | 125 - 126        | 132.34 |
| <b>P</b> | Phosphoric acid-D3 85% in D <sub>2</sub> O    | リン酸 -D3 85%重水溶液                  | 815058 | >99          | 1.77<br>(無水物)                       | 41 - 44<br>(無水物) | 158 (1013 hPa)   |        |
|          | 2-Propanol-D1 (ol-D)                          | 2-プロパノール - (ol-D)                | 815044 | >98          | 0.786                               | -89.5            | 82.4 (1013 hPa)  | 61.1   |
|          | 2-Propanol-D8                                 | 2-プロパノール -D8                     | 815045 | >99.5        | 0.786                               | -89.5            | 82.4 (1013 hPa)  | 68.14  |
|          | Pyridine-D5                                   | ピリジン -D5                         | 107475 | >99.8        | 1.05                                | -41              | 114              | 84.13  |
| <b>S</b> | Sodiumdeuterium oxide 30% in D <sub>2</sub> O | 重水酸化ナトリウム 30%重水溶液                | 815055 | >99.5        | 1.33                                | ---              | ---              |        |
|          | Sulfuric acid-D2 96-98% in D <sub>2</sub> O   | 硫酸 -D2 96%重水溶液                   | 815060 | >99.5        | 1.84                                | ---              | 360              | 100.09 |
|          | Styrene-D8                                    | スチレン -D8                         | 815061 | >98          | 0.979                               | ---              | 50 - 51 (33 hPa) | 112.2  |
| <b>T</b> | 1,1,2,2-Tetrachloroethane-D2                  | 1,1,2,2-テトラクロロエタン -D2            | 103495 | >99.5        | 1.595                               | -36              | 146              | 169.86 |
|          | Tetrahydrofuran-D8                            | テトラヒドロフラン -D8                    | 113364 | >99.5        | 0.99                                | -108             | 64               | 80.16  |
|          | Trifluoroacetic acid-D1                       | トリフルオロ酢酸 -D1                     | 113363 | >99.5        | 1.49                                | -15              | 71 (1013 hPa)    | 115.03 |
| <b>X</b> | p-Xylene-D10                                  | p-キシレン -D10                      | 815005 | >99.5        | 0.948                               | 13.3             | 138.4 (1013 hPa) | 116.23 |

## NMR 用 内部標準

| 製品名                                      |                                 | 製品番号   | 重水素化率<br>[%]  | 密度<br>[g/cm <sup>3</sup> ]<br>[20℃] | 融点<br>[℃] | 沸点<br>[℃]        | 分子量    |
|------------------------------------------|---------------------------------|--------|---------------|-------------------------------------|-----------|------------------|--------|
| Tetramethylsilane                        | テトラメチルシラン                       | 108183 | >99.7<br>(純度) | 0.65                                | -95       | 26 °C (1013 hPa) | 88.23  |
| 3- (Trimethylsilyl) propionic acid-D4 Na | 3- (トリメチルシリル) プロピオン酸 -D4 ナトリウム塩 | 108652 | >98           | ---                                 | >300      | ---              | 172.27 |

## 代表的な微量不純物の NMR 化学シフト

合成または単離した目的物質中に、合成時に用いた溶媒、もしくは実験器具由来の不純物が含まれていることがあります。この表では、もっとも良く使われている 7 つの重水素溶媒を用い、有機合成時に頻繁に用いられる溶媒と、混入し得る不純物の NMR 化学シフトを示しています。

\* 但し、値は温度及び一部に濃度依存性がありますので、代表する平均的な値のみを示しています。

| 不純物                            | プロトン                                | 多重度  | CDCl <sub>3</sub> | (CD <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO | (CD <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> SO | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> | CD <sub>3</sub> CN | CD <sub>3</sub> OD | D <sub>2</sub> O |
|--------------------------------|-------------------------------------|------|-------------------|------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------|--------------------|--------------------|------------------|
| 溶媒ピーク                          |                                     |      | 7.26              | 2.05                               | 2.50                               | 7.16                          | 1.94               | 3.31               | 4.79             |
| 水                              |                                     | s    | 1.56              | 2.84                               | 3.33                               | 0.40                          | 2.13               | 4.87               |                  |
| 酢酸                             | CH <sub>3</sub>                     | s    | 2.10              | 1.96                               | 1.91                               | 1.55                          | 1.96               | 1.99               | 2.08             |
| アセトン                           | CH <sub>3</sub>                     | s    | 2.17              | 2.09                               | 2.09                               | 1.55                          | 2.08               | 2.15               | 2.22             |
| アセトニトリル                        | CH <sub>3</sub>                     | s    | 2.10              | 2.05                               | 2.07                               | 1.55                          | 1.96               | 2.03               | 2.06             |
| ベンゼン                           | CH                                  | s    | 7.36              | 7.36                               | 7.37                               | 7.15                          | 7.37               | 7.33               |                  |
| tert- ブチルアルコール                 | CH <sub>3</sub>                     | s    | 1.28              | 1.18                               | 1.11                               | 1.05                          | 1.16               | 1.40               | 1.24             |
|                                | OH                                  | s    |                   |                                    | 4.19                               | 1.55                          | 2.18               |                    |                  |
| tert- ブチル メチル エーテル             | CCH <sub>3</sub>                    | s    | 1.19              | 1.13                               | 1.11                               | 1.07                          | 1.14               | 1.15               | 1.21             |
|                                | CCH <sub>3</sub>                    | s    | 3.22              | 3.13                               | 3.08                               | 3.04                          | 3.13               | 3.20               | 3.22             |
| 2,6- ジメチル -4-tert-<br>ブチルフェノール | ArH                                 | s    | 6.98              | 6.96                               | 6.87                               | 7.05                          | 6.97               | 6.92               |                  |
| (BHT)                          | OH                                  | s    | 5.01              |                                    | 6.65                               | 4.79                          | 5.20               |                    |                  |
|                                | ArCH <sub>3</sub>                   | s    | 2.27              | 2.22                               | 2.18                               | 2.24                          | 2.22               | 2.21               |                  |
|                                | ArC (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> | s    | 1.43              | 1.41                               | 1.36                               | 1.38                          | 1.39               | 1.40               |                  |
| クロロホルム                         | CH                                  | s    | 7.26              | 8.02                               | 8.32                               | 6.15                          | 7.58               | 7.90               |                  |
| シクロヘキサン                        | CH <sub>2</sub>                     | s    | 1.43              | 1.43                               | 1.40                               | 1.40                          | 1.44               | 1.45               |                  |
| 1,2- ジクロロエタン                   | CH <sub>2</sub>                     | s    | 3.73              | 3.87                               | 3.90                               | 2.90                          | 3.81               | 3.78               |                  |
| ジクロロメタン                        | CH <sub>2</sub>                     | s    | 5.30              | 5.63                               | 5.76                               | 4.27                          | 5.44               | 5.49               |                  |
| ジエチルエーテル                       | CH <sub>3</sub>                     | t, 7 | 1.21              | 1.11                               | 1.09                               | 1.11                          | 1.12               | 1.18               | 1.17             |
|                                | CH <sub>2</sub>                     | q, 7 | 3.48              | 3.41                               | 3.38                               | 3.26                          | 3.42               | 3.49               | 3.56             |
| ジグライム                          | CH <sub>2</sub>                     | m    | 3.65              | 3.56                               | 3.51                               | 3.46                          | 3.53               | 3.61               | 3.67             |
|                                | CH <sub>2</sub>                     | m    | 3.57              | 3.47                               | 3.38                               | 3.34                          | 3.45               | 3.58               | 3.61             |
|                                | OCH <sub>3</sub>                    | s    | 3.39              | 3.28                               | 3.24                               | 3.11                          | 3.29               | 3.35               | 3.37             |
| 1,2- ジメトキシエタン                  | CH <sub>3</sub>                     | s    | 3.40              | 3.28                               | 3.24                               | 3.12                          | 3.28               | 3.35               | 3.37             |
|                                | CH <sub>2</sub>                     | s    | 3.55              | 3.46                               | 3.43                               | 3.33                          | 3.45               | 3.52               | 3.60             |
| ジメチルアセトアミド                     | CH <sub>3</sub> CO                  | s    | 2.09              | 1.97                               | 1.96                               | 1.60                          | 1.97               | 2.07               | 2.08             |
|                                | NCH <sub>3</sub>                    | s    | 3.02              | 3.00                               | 2.94                               | 2.57                          | 2.96               | 3.31               | 3.06             |
|                                | NCH <sub>3</sub>                    | s    | 2.94              | 2.83                               | 2.78                               | 2.05                          | 2.83               | 2.92               | 2.90             |
| ジメチルホルムアミド                     | CH                                  | s    | 8.02              | 7.96                               | 7.95                               | 7.63                          | 7.92               | 7.97               | 7.92             |
|                                | CH <sub>3</sub>                     | s    | 2.96              | 2.94                               | 2.89                               | 2.36                          | 2.89               | 2.99               | 3.01             |
|                                | CH <sub>3</sub>                     | s    | 2.88              | 2.78                               | 2.73                               | 1.86                          | 2.77               | 2.86               | 2.85             |
| ジメチル スルホキシド                    | CH <sub>3</sub>                     | s    | 2.62              | 2.52                               | 2.54                               | 1.68                          | 2.50               | 2.65               | 2.71             |
| ジオキサン                          | CH <sub>2</sub>                     | s    | 3.71              | 3.59                               | 3.57                               | 3.35                          | 3.60               | 3.66               | 3.75             |
| エタノール                          | CH <sub>3</sub>                     | t, 7 | 1.25              | 1.12                               | 1.06                               | 0.96                          | 1.12               | 1.19               | 1.17             |
|                                | CH <sub>2</sub>                     | q, 7 | 3.72              | 3.57                               | 3.44                               | 3.34                          | 3.54               | 3.60               | 3.65             |
|                                | OH                                  | s    | 1.32              | 3.39                               | 4.63                               |                               | 2.47               |                    |                  |

| 不純物                  | プロトン                            | 多重度    | CDCl <sub>3</sub> | (CD <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO | (CD <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> SO | C <sub>6</sub> D <sub>6</sub> | CD <sub>3</sub> CN | CD <sub>3</sub> OD | D <sub>2</sub> O |
|----------------------|---------------------------------|--------|-------------------|------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------|--------------------|--------------------|------------------|
| エチル アセタート            | CH <sub>3</sub> CO              | s      | 2.05              | 1.97                               | 1.99                               | 1.65                          | 1.97               | 2.01               | 2.07             |
|                      | CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> | q, 7   | 4.12              | 4.05                               | 4.03                               | 3.89                          | 4.06               | 4.09               | 4.14             |
|                      | CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> | t, 7   | 1.26              | 1.20                               | 1.17                               | 0.92                          | 1.20               | 1.24               | 1.24             |
| エチル メチル ケトン          | CH <sub>3</sub> CO              | s      | 2.14              | 2.07                               | 2.07                               | 1.58                          | 2.06               | 2.12               | 2.19             |
|                      | CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> | q, 7   | 2.46              | 2.45                               | 2.43                               | 1.81                          | 2.43               | 2.50               | 3.18             |
|                      | CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> | t, 7   | 1.06              | 0.96                               | 0.91                               | 0.85                          | 0.96               | 1.01               | 1.26             |
| エチレングリコール            | CH                              | s      | 3.76              | 3.28                               | 3.34                               | 3.41                          | 3.51               | 3.59               | 3.65             |
| グレアーゼ                | CH <sub>3</sub>                 | m      | 0.86              | 0.87                               |                                    | 0.92                          | 0.86               | 0.88               |                  |
|                      | CH <sub>2</sub>                 | br s   | 1.26              | 1.29                               |                                    | 1.36                          | 1.27               | 1.29               |                  |
| n- ヘキサン              | CH <sub>3</sub>                 | t      | 0.88              | 0.88                               | 0.86                               | 0.89                          | 0.89               | 0.90               |                  |
|                      | CH <sub>2</sub>                 | m      | 1.26              | 1.28                               | 1.25                               | 1.24                          | 1.28               | 1.29               |                  |
| ヘキサメチルホスホリアミド (HMPA) | CH <sub>3</sub>                 | d, 9.5 | 2.65              | 2.59                               | 2.53                               | 2.40                          | 2.57               | 2.64               | 2.61             |
| メタノール                | CH <sub>3</sub>                 | s      | 3.49              | 3.31                               | 3.16                               | 3.07                          | 3.28               | 3.34               | 3.34             |
|                      | OH                              | s      | 1.09              | 3.12                               | 4.01                               |                               | 2.16               |                    |                  |
| ニトロメタン               | CH <sub>3</sub>                 | s      | 4.33              | 4.43                               | 4.42                               | 2.94                          | 4.31               | 4.34               | 4.40             |
| n- ペンタン              | CH <sub>3</sub>                 | t, 7   | 0.88              | 0.88                               | 0.86                               | 0.87                          | 0.89               | 0.90               |                  |
|                      | CH <sub>2</sub>                 | m      | 1.27              | 1.27                               | 1.27                               | 1.23                          | 1.29               | 1.29               |                  |
| 2- プロパノール            | CH <sub>3</sub>                 | d, 6   | 1.22              | 1.10                               | 1.04                               | 0.95                          | 1.09               | 1.50               | 1.17             |
|                      | CH                              | sep, 6 | 4.04              | 3.90                               | 3.78                               | 3.67                          | 3.87               | 3.92               | 4.02             |
| ピリジン                 | CH (2)                          | m      | 8.62              | 8.58                               | 8.58                               | 8.53                          | 8.57               | 8.53               | 8.52             |
|                      | CH (3)                          | m      | 7.29              | 7.35                               | 7.39                               | 6.66                          | 7.33               | 7.44               | 7.45             |
|                      | CH (4)                          | m      | 7.68              | 7.76                               | 7.79                               | 6.98                          | 7.73               | 7.85               | 7.87             |
| シリコン グレアーゼ           | CH <sub>3</sub>                 | s      | 0.07              | 0.13                               |                                    | 0.29                          | 0.08               | 0.10               |                  |
| テトラヒドロフラン            | CH <sub>2</sub>                 | m      | 1.85              | 1.79                               | 1.76                               | 1.40                          | 1.80               | 1.87               | 1.88             |
|                      | CH <sub>2</sub> O               | m      | 3.76              | 3.63                               | 3.60                               | 3.57                          | 3.64               | 3.71               | 3.74             |
| トルエン                 | CH <sub>3</sub>                 | s      | 2.36              | 2.32                               | 2.30                               | 2.11                          | 2.33               | 2.32               |                  |
|                      | CH (o/p)                        | m      | 7.17              | 7.1-7.2                            | 7.18                               | 7.02                          | 7.1-7.3            | 7.16               |                  |
|                      | CH (m)                          | m      | 7.25              | 7.1-7.2                            | 7.25                               | 7.13                          | 7.1-7.3            | 7.16               |                  |
| トリエチルアミン             | CH <sub>3</sub>                 | t, 7   | 1.03              | 0.96                               | 0.93                               | 0.96                          | 0.96               | 1.05               | 0.99             |
|                      | CH <sub>2</sub>                 | q, 7   | 2.53              | 2.45                               | 2.43                               | 2.40                          | 2.45               | 2.58               | 2.57             |

H. E. Gottlieb, V. Kotlyar, A. Nudelman, J. Org. Chem. 1997, 62, 7512 より抜粋。

メルク製品の最新情報を配信

 メルク公式 Facebook ページ  
<https://www.facebook.com/merckmilliporej>

 メルク公式 Twitter アカウント  
<https://twitter.com/MerckMilliporeJ>

 メルク E- メールニュース  
<http://www.merckmillipore.jp/wm>

本紙記載の製品は試験・研究用です。ヒト、動物への治療、もしくは診断目的として使用しないようご注意ください。本紙記載の製品構成は諸般の事情により予告なく変更となる場合がありますのであらかじめご了承ください。記載価格に消費税は含まれておりません。本文中のすべてのブランド名または製品名は特記なき場合、Merck KGaA の登録商標もしくは商標です。Merck Millipore and the M mark are trademarks of Merck KGaA, Darmstadt, Germany.

## メルク株式会社

ライフサイエンス バイオサイエンス営業部  
アナリティクスセールスグループ

〒153-8927 東京都目黒区下目黒1-8-1 アルコタワー5F

製品の最新情報はこちら [www.merckmillipore.jp](http://www.merckmillipore.jp)

お問合せ▶[bioinfo@merckgroup.com](mailto:bioinfo@merckgroup.com) Tel: 0120-633-358 Fax: 03-5434-4859

[BIM216]1605-pdf/M