Einige gängige und in unserer Abteilung vorrätige NMR-Lösungsmittel

Deltawerte beziehen sich auf TMS (TSP bei Wasser)
Multiplizitäten: br = breit; m = Feinstruktur
Wasserpeaks:
Je nach Konzentration und Polarität der gelösten Substanzen können sich die Wasserpeaks etwas verschieben. Bei Temperaturänderung (VT-Messungen) verschieben sich die Wasserpeaks ebenfalls. In allen 1H-Spektren ist um 3.5 ppm ein breiter Wasserpeak vorhanden. Er stammt aus der Luftfeuchtigkeit! Normalerweise stört er nicht und ist kaum zu beobachten. In verdünnten Proben beeinträchtigt dieser Peak unter Umständen die Integration.

Lösungsmittel	Summenformel	mp [°C]	kp [°C]	Delta-^{1}H [ppm] (Mult.)	Wasserpeak-^{1}H [ppm]	Delta-^{13}C [ppm] (Mult.)
Aceton-d_6	C_3D_6O	-94	57	2.04 (5)	2.84, 2.81 (HDO)	29.8 (7), 206.0 (13)
Acetonitril-d_3	C_2D_3N	-45	82	1.93 (5)	2.12	1.3 (7), 118.2 (br)
Benzol-d_6	C_6D_6	5	80	7.15 (br)	0.4	128.0 (3)
Chloroform-d_1	$CDCl_3$	-64	62	7.26 (1)	1.55	77.0 (3)
Wasser-d_1	D_2O	3.8	101.4	4.67 (1)	-	-
Dimethylformamid-d_7	C_3D_7NO	-61	153	2.74 (5), 2.91 (5), 8.01 (br)	3.45	30.1 (7), 35.2 (7), 162.7 (3)
Dimethylsulfoxid-d_6	C_2D_6OS	18	189	2.49 (5)	3.30	39.5 (7)
Essigsäure-d_4	$C_2D_4O_2$	17	118	2.03 (5), 11.53 (1)	-	20.1 (7), 178.4 (br)
Methanol-d_4	CD_4O	-98	65	3.30 (5), 4.78 (1)	4.85	49.0 (7)
Methylenchlorid-d_2	CD_2Cl_2	-95	40	5.32 (3)	1.52	53.8 (5)
Nitrobenzol-d_5	$C_6D_5NO_2$	6	211	7.50 (br), 7.61 (br), 8.11 (br)	2.42	123.5 (3), 129.5 (3), 134.8 (3), 148.6 (1)
Nitromethan-d_3	CD_3NO_2	-29	101	4.33 (5)	2.20	62.8 (7)
Pyridin-d_5	C_5D_5N	-42	116	7.19 (br), 7.55 (br), 8.71 (br)	4.95	123.5 (3), 135.5 (3), 149.9 (3)
Tetrachlorethan-d_2	$C_2D_2Cl_4$	-45	145	5.91 (s)	1.5	74.2 (3)
Tetrahydrofuran-d_8	C_4D_8O	-109	66	1.73 (br), 3.58 (br)	2.45	25.2 (5), 67.4 (5)
Toluol-d_8	C_7D_8	-95	111	2.09 (5), 6.98 (m), 7.00 (br), 7.09 (m)	0.5	20.4 (7), 125.2 (3), 128.0 (3), 128.9 (3), 137.5 (1)
Trifluoressigsäure-d_1	$C_2DF_3O_2$	-15	72	ca. 12 (s)	-	116.5 (4), 164.4 (4)

letzte Änderung: 28.06.2011