

TỔNG HỢP VÀ NGHIÊN CỨU CẤU TẠO MỘT SỐ XETON α,β -KHÔNG NO CHỨA 5-NITROARYLFUFURAL

Đến Tòa soạn 13-7-2009

NGUYỄN THỊ HIỀN ANH, NGUYỄN ĐÌNH TRIỆU
Trường Đại học Khoa học tự nhiên, ĐHQG Hà Nội

ABSTRACT

Some derivatives of 5-nitro-2-furyl - arylvinyl ketones have been synthesized by condensed reaction of aryl methyl ketone with the heterocyclic aldehydes. Their structure was identified by IR, UV, $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ and mass spectra.

I - ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong các công trình trước chúng tôi đã thông báo về kết quả tổng hợp và xác định cấu trúc một số hợp chất 5-nitrophenylfuran-2-andehit, một số trong chúng có hoạt tính sinh học như kháng khuẩn, kháng nấm rõ rệt [2, 3]. Tiếp theo chúng tôi đã tổng hợp một số dẫn xuất xeton α,β -không no đi từ các hợp chất 5-nitrophenylfuran-2-andehit, Khi cho các andehit này phản ứng với metylarylxeton trong môi trường kiềm.

II - THỰC NGHIỆM

1. Tổng hợp 5-nitroarylfufural [6]

Cho vào bình phản ứng 0,1 mol arylamin, 95 ml HCl đặc và 30 ml H₂O, khuấy mạnh, thêm vào hỗn hợp 7,2 g NaNO₂ được hòa tan trong 44 ml nước, hỗn hợp phản ứng được giữ ở 0 — 5°C. Sau phản ứng lọc thu dung dịch đó chính là dung dịch muối diazoni. Thêm 8,4 ml furan—2—andehit trong 20 ml axeton vào dung dịch muối diazoni, đưa nhiệt độ phản ứng lên 25°C sau đó thêm 3,2 g CuCl₂.2H₂O trong 20 ml nước. Khuấy hỗn hợp trong 4 giờ ở nhiệt độ phòng, để qua đêm sản phẩm sẽ kết tinh. Lọc, sấy khô, rồi kết tinh lại trong dung môi thích hợp.

Sản phẩm là các chất rắn có màu vàng.

Nhiệt độ nóng chảy xác định.

Hiệu suất: 65 — 71%.

2. Tổng hợp xeton α,β -không no [5, 7, 8]

Dụng cụ thí nghiệm: Bình cầu 3 cổ dung tích 250 ml, nhiệt kế, sinh hàn, phễu nhỏ giọt, máy khuấy.

Tiến hành: Cho vào bình phản ứng 0,01 mol 5-nitroarylfufural, 100 ml etanol khan khuấy đều cho tan hết, nhỏ từ từ 0,011 mol metylaryl xeton, nhiệt độ phản ứng được giữ trong khoảng -5°C — 0°C, sau khi nhỏ xong, khuấy tiếp ở nhiệt độ này trong 2 giờ. Nhỏ từ từ 10 ml dung dịch NaOH 25% nhiệt độ phản ứng được giữ < 0°C trong khoảng thời gian 8 giờ. Hỗn hợp sau phản ứng được trung hòa bằng dung dịch H₂SO₄ 40% đến pH = 7, chất rắn lập tức được tạo thành, lọc rửa kết tủa, kết tinh lại trong dung môi thích hợp.

3. Các phương pháp phân tích

- Điểm chảy của các chất được đo bằng phương pháp mao quản trên máy STUART SMP3.

- Phổ hồng ngoại được đo trên máy IR GX của Mỹ theo phương pháp ép viên.

- Phổ tử ngoại được đo trên máy UV-2450 Shimadzu trong dung môi etanol.

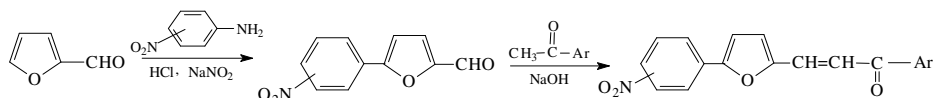
- Phổ cộng hưởng từ hạt nhân được đo trên máy Bruker Avance 500 MHz trong dung môi dimetylsunfoxit — d6(DMSO), hoặc C₂D₅OD, CDCl₃ tại Viện Hóa học — Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

- Phổ khối lượng được ghi trên máy MS-

Engine 5989- HP tại Viện Hóa học - Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

III - THẢO LUẬN VÀ KẾT QUẢ

Các xeton α,β -không no có chứa 5-nitro-arylfufural đã được tổng hợp theo sơ đồ sau:



Giai đoạn 1: tổng hợp 5—nitroarylfufural, phản ứng này theo tác giả Nguyễn Minh Thảo [1], xảy ra theo cơ chế thế gốc với việc sử dụng chất xúc tác CuCl_2 , trong phản ứng xảy ra hiện tượng thoát nitơ. Sản phẩm của phản ứng đã được chúng tôi nghiên cứu trong các công trình trước [2, 3].

Trong công trình này chúng tôi xin trình bày kết quả nghiên cứu của giai đoạn 2: Giai đoạn tổng hợp xeton α,β -không no.

Để tổng hợp các xeton α,β -không no chúng tôi đã dựa trên cơ chế của phản ứng Claisen — Smith trong môi trường bazơ. Kết quả tổng hợp các xeton α,β -không no, được trình bày trong bảng 1.

Cấu trúc của các sản phẩm đã được chúng tôi kiểm tra bằng các phương pháp hiện đại như đo điểm nóng chảy, phổ hồng ngoại (IR), phổ tử ngoại (UV), phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR), phổ khối lượng (MS) [4].

Trên phổ hồng ngoại thấy sự xuất hiện các pic đặc trưng cho dao động của liên kết $\text{CH}=\text{CH}$ nằm trong khoảng từ $1588 - 1606 \text{ cm}^{-1}$. Đỉnh hấp thụ tại $1650 - 1682 \text{ cm}^{-1}$, đặc trưng cho dao động của liên kết $\text{C}=\text{O}$, ngoài ra trên phổ hồng ngoại còn xuất hiện pic đặc trưng cho dao động của nhóm NO_2 trong vùng $1510 - 1539 \text{ cm}^{-1}$ và $1330 - 1358 \text{ cm}^{-1}$.

Trong phổ tử ngoại của các xeton α,β -không no xuất hiện cực đại hấp thụ ở $374 - 415 \text{ nm}$ tương ứng với bước nhảy electron $\pi - \pi^*$, ngoài ra trên phổ tử ngoại của một số chất còn xuất hiện cực đại hấp thụ ở $240 - 269 \text{ nm}$.

Trên phổ khối lượng của các xeton α,β -

không no xuất hiện pic ion phân tử (M^+) hoặc ion ($M+1$)⁺.

Các xeton α,β -không no tổng hợp được đã được phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân(NMR) kết quả được chỉ ra ở bảng 3 và 4.

IV - KẾT LUẬN

- Đã tổng hợp được 18 dẫn xuất xeton α,β -không no có chứa 5-nitroarylfulfural.

- Các sản phẩm thu được có điểm chảy xác định. Cấu trúc của các xeton α,β -không no đã được xác định thông qua phổ IR, UV, NMR, MS.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Minh Thảo. Hóa học các hợp chất dị vòng, Nxb. Giáo dục, Hà Nội (2001).
2. Nguyễn Đình Triệu, Nguyễn Thị Hiền Anh. Tạp chí Hóa học, T. 43(5A), 43 - 46 (2005).

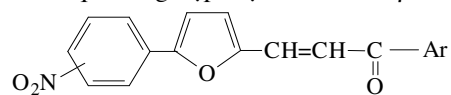
3. Nguyễn Đình Triệu, Nguyễn Thị Hiền Anh. Tạp chí Hóa học, T. 44(4), 480- 485 (2006).
4. Nguyễn Đình Triệu. Các phương pháp phân tích vật lý và hoá lý, tập 1, Nxb. Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội (2001).
5. Wolfgang Hoelderich. Preparation of alpha, beta unstaturated ketones, U.S, 4,885,395 (1989).
6. A. Φ. Oleinik, T. I. Vozlkova, K. IU. Noviskii. Khim. Pharm. Journal (tiếng Nga) No. 7, 19 (1971).
7. Hodkinson, Leslie Charles, Lesley Carol (2000), The treatment of pests using certain ethylenically unstaturated carbonyl compounds, EP 1051910.
8. Ryuji Ueno, Tornio Oda (1995), Method of producing α,β -unstaturated ketones, U.S 6,637,647.

Bảng 2: Phổ hồng ngoại, phổ tử ngoại, phổ khối lượng của một số xeton α,β -không no


| Kí hiệu | CTPT | IR, cm ⁻¹ | | | UV λ_{max} (nm) | MS M ⁺ /M ⁺ +1 |
|-----------------|---|----------------------|----------------|-----------------|----------------------------|---|
| | | $\delta_{CH=CH}$ | $\delta_{C=O}$ | δ_{NO_2} | | |
| H ₆ | C ₁₉ H ₁₃ O ₄ N | 1592 | 1682 | 1512; 1334 | 399, 267 | 319 |
| H ₇ | C ₁₉ H ₁₂ O ₄ NBr | 1593 | 1661 | 1512; 1330 | 404, 240 | 398 |
| H ₈ | C ₂₀ H ₁₅ O ₄ N | 1588 | 1650 | 1510; 1334 | 401, 266 | --- |
| H ₉ | C ₁₉ H ₁₃ O ₄ N | 1601 | 1661 | 1528; 1357 | 370, 267 | 319 |
| H ₁₀ | C ₁₉ H ₁₂ O ₄ NBr | 1598 | 1655 | 1518; 1334 | 374, 269 | --- |
| H ₁₁ | C ₂₀ H ₁₅ O ₄ N | 1606 | 1663 | 1526; 1358 | 368, 266 | --- |
| H ₁₂ | C ₁₉ H ₁₃ O ₄ N | 1594 | 1662 | 1523; 1349 | 383, 269 | 319 |
| H ₁₃ | C ₁₉ H ₁₂ O ₄ NBr | 1593 | 1661 | 1529; 1353 | 388, 269 | /399 |
| H ₁₄ | C ₂₀ H ₁₅ O ₄ N | 1593 | 1653 | 1526; 1343 | 375, 268 | --- |
| H ₁₅ | C ₁₉ H ₁₂ O ₆ N ₂ | 1588 | 1664 | 1527; 1334 | 399, 265 | --- |
| H ₁₆ | C ₁₇ H ₁₁ O ₄ NS | 1592 | 1663 | 1524; 1337 | 390, 265 | 325 |
| H ₁₇ | C ₁₉ H ₁₂ O ₆ N ₂ | 1589 | 1662 | 1515; 1333 | 415, 265 | 364 |
| H ₁₈ | C ₁₇ H ₁₁ O ₄ NS | 1591 | 1649 | 1509; 1330 | 406, 265 | 325 |
| H ₁₉ | C ₁₉ H ₁₂ O ₆ N ₂ | 1589 | 1661 | 1539; 1345 | 390, 265 | --- |
| H ₂₀ | C ₁₇ H ₁₁ O ₄ NS | 1594 | 1650 | 1527; 1357 | 379, 265 | 325 |
| H ₂₁ | C ₁₇ H ₁₁ O ₅ N | 1592 | 1648 | 1513; 1353 | 407, 265 | 309 |
| H ₂₂ | C ₁₇ H ₁₁ O ₅ N | 1598 | 1660 | 1522; 1335 | 374,265 | 309 |

| Kí hiệu | CTPT | IR, cm ⁻¹ | | | UV λ_{\max} (nm) | MS M ⁺ /M ⁺ +1 |
|-----------------|--|-------------------------|-----------------------|------------------------|-----------------------------|---|
| | | $\delta_{\text{CH=CH}}$ | $\delta_{\text{C=O}}$ | δ_{NO_2} | | |
| H ₂₃ | C ₁₇ H ₁₁ O ₅ N | 1596 | 1659 | 1517; 1331 | 388, 265 | 309 |

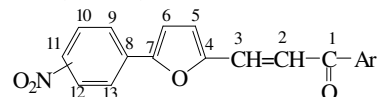
Bảng 1: Kết quả tổng hợp một số xeton α,β -không no

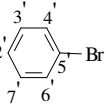
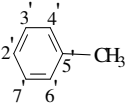
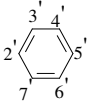
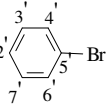
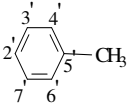
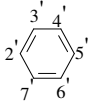
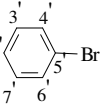


| STT | Hợp chất | Kí hiệu | Vị trí nhóm NO ₂ | Ar | Hiệu suất | t ^o _{n/c} |
|-----|--|-----------------|-----------------------------|----|-----------|-------------------------------|
| 1 | <i>Trans</i> -1-phenyl—3-[5-(4—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₆ | 4 | | 67 | 128-129 |
| 2 | <i>Trans</i> -1-(4—bromphenyl)—3-[5-(4—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₇ | 4 | | 70 | 191-192 |
| 3 | <i>Trans</i> -1-(4-metylphenyl)—3-[5-(4—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₈ | 4 | | 65 | 155-156 |
| 4 | <i>Trans</i> -1-phenyl—3-[5-(2—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₉ | 2 | | 68 | 94 - 95 |
| 5 | <i>Trans</i> -1-(4—bromphenyl)—3-[5-(2—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₀ | 2 | | 71 | 118-119 |
| 6 | <i>Trans</i> -1-(4-metylphenyl)—3-[5-(2—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₁ | 2 | | 65 | 144-145 |
| 7 | <i>Trans</i> -1-phenyl—3-[5-(3—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₂ | 3 | | 64 | 130-131 |
| 8 | <i>Trans</i> -1-(4—bromphenyl)—3-[5-(3—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₃ | 3 | | 69 | 168-169 |
| 9 | <i>Trans</i> -1-(4-metylphenyl)—3-[5-(3—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₄ | 3 | | 62 | 140-141 |
| 10 | <i>Trans</i> -1-(4-nitrophenyl)—3-[5-(3—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₅ | 3 | | 69 | 165-166 |
| 11 | <i>Trans</i> -1-thienyl—3-[5-(3—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₆ | 3 | | 62 | 116-117 |
| 12 | <i>Trans</i> -1-(4-nitrophenyl)—3-[5-(4—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₇ | 4 | | 73 | 235-236 |
| 13 | <i>Trans</i> -1-thienyl—3-[5-(4—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₈ | 4 | | 62 | 205-206 |
| 14 | <i>Trans</i> -1-(4-nitrophenyl)—3-[5-(2—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₁₉ | 2 | | 71 | 151-152 |
| 15 | <i>Trans</i> -1-thienyl—3-[5-(2—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₂₀ | 2 | | 66 | 97-98 |
| 16 | <i>Trans</i> -1-furyl—3-[5-(4—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₂₁ | 4 | | 67 | 205-206 |
| 17 | <i>Trans</i> -1-furyl—3-[5-(2—nitrophenyl)furan—2-yl] propenon | H ₂₂ | 2 | | 65 | 95-96 |

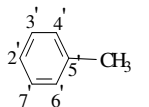
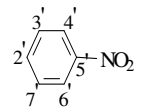
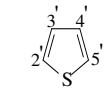
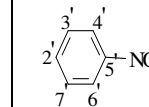
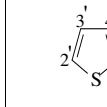
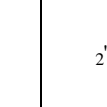
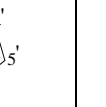
| STT | Hợp chất | Kí hiệu | Vị trí nhóm NO ₂ | Ar | Hiệu suất | t _{n/c} |
|-----|--|-----------------|-----------------------------|---|-----------|------------------|
| 18 | <i>Trans</i> -1-furyl—3-[5-(3—nitrophenyl)furyl—2-yl] propenon | H ₂₃ | 3 |  | 67 | 169-170 |

Bảng 3: Dữ liệu phổ cộng hưởng từ ¹H-NMR của các xeton α,β-không no

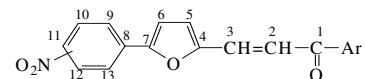


| Kí hiệu | H ₇ (dung môi DMSO- d ₆) | H ₈ (dung môi C ₂ D ₅ OD) | H ₉ (dung môi CDCl ₃) | H ₁₀ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₁₁ (dung môi C ₂ D ₅ OD) | H ₁₂ (dung môi CDCl ₃) | H ₁₃ (dung môi DMSO-d ₆) |
|---|---|---|--|---|---|---|---|
| Ar |  |  |  |  |  |  |  |
| Vị trí nhóm NO ₂ | 4 | 4 | 2 | 2 | 2 | 3 | 3 |
| Độ chuyển dịch hóa học (ppm)/hàng số tương tác J (Hz) | H ₂ | 7,65(d)/15,5 | 7,62(d)/15,5 | 7,58(d)/15,5 | 7,54(d)/15,5 | 7,56(d)/15,5 | 7,65(d)/15,5 |
| | H ₃ | 7,76 (d)/15,5 | 7,81(d)/15,5 | 7,59(d)/15,5 | 7,60(d)/15,5 | 7,61(d)/15,5 | 7,81 (d)/15,5 |
| | H ₅ | 7,35(d)/3,5 | 7,15(d)/3,5 | 7,04(d)/3,5 | 7,09(d)/3,5 | 7,10(d)/3,5 | 7,36(d)/3,5 |
| | H ₆ | 7,17 (d)/3,5 | 7,37(d)/3,5 | 7,12(d)/3,5 | 7,12(d)/3,5 | 7,03(d)/3,5 | 7,17(d)/3,5 |
| | H ₉ | 8,15(m) | 8,15 (d)/7,0 | 7,88(m) | 7,78(m) | 7,87(m) | 8,21(m) |
| | H ₁₀ | 8,32(m) | 8,32(d)/7,0 | 7,78(m) | 8,01(t) | 7,77(m) | 7,77(d)/8,0 |
| | H ₁₁ | --- | — | 7,65(m) | 7,66(m) | 7,66(m) | 8,33(m) |
| | H ₁₂ | 8,32(m) | 8,32(d)/7,0 | 8,02(m) | 7,88(m) | 8,01(m) | — |
| | H ₁₃ | 8,15(m) | 8,15(d)/7,0 | — | — | — | 8,66(m) |
| | H _{3'} | 8,05(m) | 8,03(d)/7,5 | 8,08(m) | 7,75(m) | 7,99(m) | 8,13(m) |
| | H _{4'} | 7,76(m) | 7,38(d)/7,5 | 7,58(t) | 7,99(d)/8,0 | 7,38(d)/8,0 | 7,59(m) |
| H _{5'} | --- | 2,44(s) | 7,68(m) | — | — | 7,66(m) | |

| | | | | | | | | |
|--|-----------------------------|---------|-------------|---------|-------------|---------|---------|---------|
| | H ₆ | 7,76(m) | 7,38(d)/7,5 | 7,58(t) | 7,99(d)/8,0 | | 7,59(m) | 7,77(m) |
| | H ₇ | 8,05(m) | 8,03(d)/7,5 | 8,08(m) | 7,75(m) | 7,99(m) | 8,13(m) | 8,06(m) |
| | H _{CH₃} | --- | 2,44(s) | – | – | 2,43(s) | – | – |

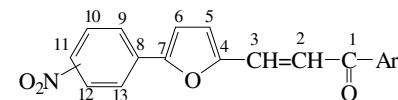
| Kí hiệu | H ₁₄ (dung môi C ₂ D ₅ OD ₁) | H ₁₇ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₁₈ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₁₉ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₂₀ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₂₁ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₂₂ (dung môi DMSO-d ₆) | |
|---|---|---|--|---|---|---|---|--------------|
| Ar |  |  |  |  |  |  |  | |
| Vị trí nhóm NO ₂ | 3 | 4 | 4 | 2 | 2 | 4 | 2 | |
| Độ chuyển dịch hóa học (ppm)/hàng số tương tác J (Hz) | H ₂ | 7,62(d)/15,5 | 7,63(d)/15,5 | 7,51 (d)/15,5 | 7,56(d)/15,5 | 7,50(d)/15,5 | 7,49(d)/15,5 | 7,40(d)/15,5 |
| | H ₃ | 7,79(d)/15,5 | 7,72(d)/15,5 | 7,60 (d)/15,5 | 7,64(d)/15,5 | 7,58(d)/15,5 | 7,54(d)/15,5 | 7,59(d)/15,5 |
| | H ₅ | 7,34(d)/3,5 | 7,45(d)/3,5 | 7,12 (d)/3,5 | 7,17(d)/3,5 | 7,11(d)/3,5 | 7,10(d)/3,5 | 7,10(d)/4,0 |
| | H ₆ | 7,14(d)/3,5 | 7,30(d)/3,5 | 7,04 (d)/3,5 | 7,04(d)/3,5 | 7,04(d)/3,5 | 7,02(d)/3,5 | 7,02(d)/4,0 |
| | H ₉ | 8,20(m) | 8,15(d)/9,0 | 8,01 (m) | 7,89(m) | 8,01(m) | 7,74(d)/7,5 | 7,90(m) |
| | H ₁₀ | 7,77(t) | 8,30(d)/9,0 | 8,25(m) | 7,79(m) | 7,78(m) | 8,25(d)/7,5 | 7,78(m) |
| | H ₁₁ | 8,31(m) | – | – | 7,68(m) | 7,67(m) | – | 7,67(m) |
| | H ₁₂ | – | 8,30(d)/9,0 | 8,25(m) | 8,00(m) | 8,03(m) | 8,25(d)/7,5 | 8,00(m) |
| | H ₁₃ | 8,64(m) | 8,15(d)/9,0 | 8,01(m) | – | – | 7,74(d)/7,5 | – |
| | H _{3'} | 8,03(d)/8,0 | 8,30(d)/9,0 | 7,89(m) | 8,28(m) | 7,88(m) | 7,25(m) | 7,88(m) |
| | H _{4'} | 7,38(d)/8,0 | 8,37(d)/9,0 | 7,41(m) | 8,40(m) | 7,30(m) | 6,67(m) | 6,73(m) |
| | H _{5'} | – | – | 7,97(m) | – | 7,95(m) | 7,74(m) | 7,45(m) |
| | H _{6'} | 7,38(d)/8,0 | 8,37(d)/9,0 | – | 8,40(m) | – | – | – |
| | H _{7'} | 8,03(d)/8,0 | 8,30(d)/9,0 | – | 8,28(m) | – | – | – |
| H _{CH₃} | 2,05(s) | – | – | – | – | – | – | |

Bảng 4: Dữ liệu Phổ cộng hưởng từ ^{13}C -NMR của các xeton α,β -không no



| Kí hiệu | H ₇ (dung môi DMSO- d ₆) | H ₈ (dung môi C ₂ D ₅ OD) | H ₉ (dung môi môi CDCl ₃) | H ₁₀ (dung môi DMSO- d ₆) | H ₁₁ (dung môi C ₂ D ₅ OD) | H ₁₂ (dung môi CDCl ₃) | H ₁₃ (dung môi DMSO-d ₆) | |
|-------------------------------|---|--|--|--|---|---|---|-------|
| Ar | | | | | | | | |
| Vị trí nhóm NO ₂ | 4 | 4 | 2 | 2 | 2 | 3 | 3 | |
| Độ chuyển dịch hóa học (ppm)/ | C ₁ | 188,7 | 188,7 | 189,2 | 188,3 | 188,6 | 189,4 | 188,4 |
| | C ₂ | 121,2 | 121,4 | 123,3 | 123,3 | 123,3 | 123,5 | 123,6 |
| | C ₃ | 130,9 | 130,0 | 130,3 | 130,7 | 129,9 | 131,3 | 131,4 |
| | C ₄ | 154,1 | 154,1 | 151,4 | 151,5 | 151,3 | 153,4 | 153,2 |
| | C ₅ | 113,2 | 113,1 | 113,2 | 113,3 | 113,2 | 111,7 | 111,8 |
| | C ₆ | 119,8 | 119,4 | 118,8 | 119,2 | 118,6 | 119,5 | 119,6 |
| | C ₇ | 154,8 | 154,4 | 153,5 | 153,4 | 153,6 | 154,4 | 154,6 |
| | C ₈ | 131,0 | 136,5 | 130,6 | 130,7 | 130,6 | 131,0 | 131,0 |
| | C ₉ | 126,0 | 125,8 | 124,7 | 124,7 | 124,7 | 132,4 | 132,3 |
| | C ₁₀ | 125,2 | 125,2 | 133,0 | 133,0 | 136,5 | 130,5 | 131,0 |
| | C ₁₁ | 138,2 | 148,0 | 129,8 | 129,8 | 129,7 | 119,6 | 120,0 |
| | C ₁₂ | 125,2 | 125,2 | 121,0 | 120,4 | 121,0 | 150,0 | 149,9 |
| | C ₁₃ | 126,0 | 125,8 | 139,0 | 148,7 | 148,7 | 121,0 | 120,4 |
| | C _{2'} | 136,5 | 136,4 | 133,8 | 137,9 | 133,0 | 139,0 | 138,0 |
| | C _{3'} | 131,2 | 130,2 | 129,6 | 131,0 | 130,2 | 129,6 | 131,1 |
| | C _{4'} | 132,9 | 129,4 | 129,1 | 132,8 | 129,2 | 129,2 | 132,8 |
| | C _{5'} | 128,2 | 144,6 | 130,7 | 128,1 | 144,6 | 133,7 | 128,1 |
| | C _{6'} | 132,9 | 129,4 | 129,1 | 132,8 | 129,2 | 129,2 | 132,8 |
| | C _{7'} | 131,2 | 130,2 | 129,6 | 131,0 | 130,2 | 129,6 | 131,1 |
| C _{CH3} | – | 21,6 | – | – | 21,5 | | | |

Bảng 4: Dữ liệu Phổ cộng hưởng từ ^{13}C -NMR của các xeton α,β -không no



| Kí hiệu | H ₁₄ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₁₇ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₁₈ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₁₉ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₂₀ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₂₁ (dung môi DMSO-d ₆) | H ₂₂ (dung môi DMSO-d ₆) | |
|------------------------------|---|---|---|---|---|---|---|-------|
| Ar | | | | | | | | |
| Vị trí nhóm NO ₂ | 3 | 4 | 4 | 2 | 2 | 4 | 2 | |
| Độ chuyển dịch hóa học (ppm) | C ₁ | 188,8 | 187,7 | 181,5 | 188,4 | 181,5 | 177,8 | 177,2 |
| | C ₂ | 123,5 | 120,0 | 123,3 | 123,3 | 123,3 | 123,4 | 123,4 |
| | C ₃ | 131,3 | 130,6 | 130,8 | 130,9 | 130,7 | 131,1 | 130,7 |
| | C ₄ | 153,4 | 149,6 | 150,9 | 148,8 | 151,4 | 151,7 | 151,5 |
| | C ₅ | 111,6 | 112,6 | 113,3 | 113,4 | 113,2 | 113,3 | 113,2 |
| | C ₆ | 119,2 | 119,7 | 118,9 | 119,9 | 118,9 | 118,6 | 118,4 |
| | C ₇ | 154,3 | 153,4 | 153,3 | 153,2 | 153,4 | 153,5 | 154,6 |
| | C ₈ | 130,9 | 134,6 | 135,7 | 131,6 | 129,8 | 129,9 | 129,9 |
| | C ₉ | 132,4 | 124,9 | 124,7 | 124,8 | 124,7 | 128,2 | 124,8 |
| | C ₁₀ | 130,1 | 123,4 | 121,6 | 133,1 | 133,0 | 133,0 | 133,0 |
| | C ₁₁ | 119,5 | 146,6 | 148,4 | 129,9 | 129,5 | 148,2 | 129,3 |
| | C ₁₂ | 149,9 | 123,4 | 121,6 | 120,4 | 120,9 | 133,0 | 120,8 |
| | C ₁₃ | 120,9 | 124,9 | 124,7 | 148,8 | 146,6 | 128,2 | 148,2 |
| | C _{2'} | 136,5 | 142,2 | 145,3 | 143,7 | 145,3 | 152,7 | 153,4 |
| | C _{3'} | 130,2 | 129,3 | 135,6 | 130,3 | 135,4 | 118,7 | 118,9 |
| | C _{4'} | 129,4 | 123,9 | 128,9 | 124,7 | 129,4 | 113,2 | 113,4 |
| | C _{5'} | 144,5 | 152,1 | 134,2 | 151,9 | 133,0 | 133,1 | 133,4 |
| C _{6'} | 129,4 | 123,9 | – | 124,7 | – | – | – | |
| C _{7'} | 130,2 | 129,3 | – | 130,3 | – | – | – | |
| C _{CH3} | 21,6 | – | – | – | – | – | – | |