

原著
E.Pretsch [瑞士]
P.Bühlmann [瑞士]
M.Badertscher [美]
荣国斌 译
朱士正 校



波谱数据表

——有机化合物的结构解析

(原书第四版)

Structure Determination of Organic Compounds

Tables of Spectral Data



科学出版社

药明康德经典译丛

波谱数据表

——有机化合物的结构解析
(原书第四版)

Structure Determination of Organic Compounds

Tables of Spectral Data

原著/E. Pretsch〔瑞士〕 P. Bühlmann〔瑞士〕
M. Badertscher〔美〕

荣国斌 译
朱士正 校



科学出版社

图字: 01 - 2013 - 1882

内 容 简 介

本书是作者将各类有机化合物在 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、 ^{19}F NMR、 ^{31}P NMR、IR、MS、UV-Vis 及重要的 Raman 波谱中的图式数据分布予以归类注解而编纂成的一本手册类工具书。原著因其提供的各种波谱解析数据和图式翔实完整、编排合理及查阅方便而深受世界各国有有机化学工作者和大专院校师生的欢迎。

本中译本是根据 2009 年出版的英文版(第四版)翻译而成的,可供我国大专院校师生和有关科研工作者在解析有机化合物的结构问题时参考使用。

Translation from English language edition:
Structure Determination of Organic Compounds
by Ernö Pretsch, Philippe Bühlmann and Martion Badertscher
Copyright © 2009 Springer Berlin Heidelberg
Springer Berlin Heidelberg is a part of Springer Science + Business Media
All Rights Reserved.

图书在版编目(CIP)数据

波谱数据表: 有机化合物的结构解析: 原书第四版/(瑞士)普雷士(E. Pretsch)等著; 荣国斌译. —北京: 科学出版社, 2013

药明康德经典译丛

书名原文: Structure determination of organic compounds tables of spectral data

ISBN 978-7-03-037327-4

I. ①波… II. ①普… ②荣… III. ①有机化合物—结构分析 IV. ①O621.15

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 078474 号

责任编辑: 谭宏宇 丛洪杰

责任印制: 刘 学/封面设计: 殷 靛

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

江苏省句容市排印厂印刷

上海蓝鹰文化传播有限公司排版制作

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013 年 5 月第 一 版 开本: B5(720 × 1000)

2013 年 5 月第一次印刷 印张: 29 1/4

字数: 551 000

定价: 85.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

《药明康德经典译丛》丛书序

新药研发中,引入先进的知识和经验比单纯购买先进的仪器设备更有意义。经典仍需研读,《药明康德经典译丛》丛书是药明康德的高级管理人员凭借数十年的制药企业研发经验,精选了国外新药研发的优秀书籍,组织具有专业知识背景的团队,引进版权、翻译并出版的一系列学习教材和科研资料。

药明康德新药开发有限公司自2000年成立以来,一直以“变革新药研发、造福人类健康”为使命,专注于新药研发服务、逐步成长为一家能“提供一站式药物研发服务,以提高新药研究成功率、并缩短新药研发时间”的企业。公司目前拥有四千多名员工,相继荣获德勤“亚太地区高科技高成长500强”和亚洲地区“Red Herring 100强”等称号,已经发展成为亚洲规模最大、全球发展最快的新药研发服务企业,成为国际知名的新药研发服务公司。药明康德(NYSE: WX)于2007年8月9日成功地在纽约证券交易所上市。2008年初药明康德成功收购了美国AppTec实验室服务公司。2009年药明康德在苏州建成亚洲最大的药物安全评价中心。2011年4月,药明康德累计营业额突破10亿美元。

人才是药明康德最宝贵的财富。为了让公司保持强劲的国际竞争力,药明康德实施人才全球化战略。在不断从海外吸收高层次国际化人才的同时,也在全国范围内全力吸纳最优秀的科技精英,提供广阔的专业舞台和世界一流的科研环境。在推动人才团队为世界药物研发领域作出杰出贡献的同时,公司也培育扶持他们逐步成为顶尖的药物研发专家。在企业高速发展中,我们清楚地感觉到一份企业的社会责任感。公司意识到:企业不应该一味地向社会索取人才,更应该适时回报社会,为人才的培养和成长贡献力量。为企业本身和所处的社会营造一个“和谐—健康—稳定—可持续发展”的人才生态系统。这样才有利于避免短期行为,谋求长效发展,形成百年基业。

药明康德一直在为不断地提高公司科学研究的水平而追踪世界新成果,同时也努力把国际先进知识和经验介绍给国内的同行,以共同提高中国小分子药物研发的整体水平。近年来,药明康德凭借众多优秀的青年科研人员和先进的科研设备,研发实力已在国际药物研发服务领域得到公认,也保证了《药明康德经典译丛》丛书的内在质量。

我们希望《药明康德经典译丛》丛书的出版能够为国内新药研究专业人才的培养,为国内药物化学的发展有所贡献。目前已经出版的译著:

2006年 《有机化合物的波谱解析》 华东理工大学出版社

2008年 《新药合成艺术》 华东理工大学出版社

- 2008年 《有机成名反应、试剂和缩略词》 华东理工大学出版社
2010年 《有机合成——切断法》 科学出版社
2011年 《有机人名反应——机理及应用》 科学出版社

译校者的话

随着仪器分析的发展和进步,现在有机化合物的结构解析工作主要是依靠红外光谱(IR)、核磁共振谱(NMR)、质谱(MS)和紫外-可见光谱(UV-Vis)四大波谱技术。每类波谱技术各自均能提供大量的图式和数据,做好结构解析工作也就是要将各种数据与分子的整体结构或片断结构准确无误地联系起来。

相对而言,学习并掌握各种波谱分析的基本原理和使用方法较容易做到,而能应用所得数据来分析、解决问题或根据结构式就能推出并确定其精细的波谱数据则要困难得多。波谱数据的归类分布虽有一定的规律,但是分子结构的细微差别也会导致各类数据和图式的细微改变。任何一个资深研究人员,既不可能也没必要记住所有这些定量数据。若手头拥有一本波谱数据手册,就像使用语言拥有一本词典一样,对研究工作和学习都是大有益处的。*Structure Determination of Organic Compounds Tables of Spectral Data*一书是Pretsch等根据自己在科研和教学工作中所积累的经验并结合文献,将各类有机化合物的四大波谱分析数据予以归纳、整理、编纂而成的。该书罗列的各种数据和图式翔实完整,编排合理且查阅方便并有简要的文字说明。作为一本工具类手册,该书能够满足各类有机化合物结构解析工作的需要。因此,自1976年首版发行以来,该书一直受到科研工作人员和大专院校师生的欢迎,先后出版了英、德、西班牙、俄、日等语种的版本。该书第3版的中文版曾由华东理工大学出版社于2002年出版并受到中国内地读者的好评而多次重印。现在读者看到的中译本是根据原作于2009年出版的第4版(英语版)翻译而成的。第4版被作者称为“改正和扩展版”,除扩充了原版中已有的数据外,另外新增了材料、药物和生命等领域已被经常应用的 ^{19}F NMR、 ^{31}P NMR及一些重要的Raman谱的数据。译校工作中我们尽量忠实于原著,但仍有少许校正,主要是:①改正了原著中某些文字或图式数据表达上的差错;②增加了一些缩写和符号条目;③化学位移本是无量纲单位,但传统上和实际工作中人们仍习惯用ppm来表示。为保持原著风格,译本也仍保留此用语;④个别词汇目前尚无合适的中文译名,我们也加了一些说明,原著中的人名、地名和单位名未翻译。

原书还附有一张光盘,帮助解析小分子的核磁共振谱,因版权问题,中译本未能列入。除特别注明外,本书中红外光谱的数据是以波数(cm^{-1})表示的;质谱是以 m/z 表示的; ^1H 和 ^{13}C 的化学位移都是以TMS为标准而测得的,偶合常数的单位都是Hz。我们相信,中译本的出版能很好地为中国读者快速正确地解析有机化合物的波谱工作提供方便,解决问题。

荣国斌(华东理工大学 ronggb@ecust.edu.cn)

朱士正(中国科学院上海有机化学研究所 zhusz@mail.sioc.ac.cn)

2012年5月于上海

前 言

本书前几版的成功出版发行促使我们再编辑一个新版。核磁共振谱和质谱的近代技术改变了获得数据的方法并大大扩展了它们的功能。一些基本特性,如化学位移、偶合常数和碎片裂解途径虽未改变,但由于数据的总量在过去几年间仍有明显增长,故编辑一个全新的版本是有必要的。新版的基本理念没有变化,即提供一套典型有限的参考数据以解析 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、IR、MS 和 UV-Vis 光谱。新版增加了一章与 ^{19}F NMR 和 ^{31}P NMR 相关的内容,并在 IR 章节中新增了重要的 Raman 谱数据。

由于电脑操作系统的更新远比纸质品快,估算 NMR 数据的细微变化的程序可从如下主页下载获取:www.upstream.ch/support/book_downloads.html。

我们要感谢许多以各种方式帮助我们完成书稿的同事。在此要特别提及 Dorothee Wegmann 博士,她在前几版的审读中纠正了不少差错和不统一的地方。还要特别感谢 Wolfgang Robien 教授,我们从他的 ^{13}C NMR 数据库——CSEARCH 中获取了相关数据,另一个信息来源是国立高等工业科学和技术研究所的数据库系统(<http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/>,日本筑波,茨城)。

尽管我们在消除差错上已经作了很大努力,但还会有某些错误和不一致的地方。我们真诚地希望读者能给出对本书的评论,提出建议或者任何问题,并按下列地址和我们联系:①Ernö Pretsch 教授, Institute of Biogeochemistry and Pollutant Dynamics, CH - 8092, Zürich, Switzerland, email: pretsch@ethz.ch. ②Philippe Bühlmann 教授, Department of Chemistry, University of Minnesota, 207 Pleasant St. SE, Minneapolis, MN 55455, USA, email: buhlmann@umn.edu. ③Martin Badertscher 博士, Laboratory of Organic Chemistry, ETH. CH - 8093, Zürich, Switzerland, email: badertscher@org.chem.ethz.ch.

Zürich 和 Minneapolis

2008 年 11 月

目 录

《药明康德经典译丛》丛书序

译校者的话

前言

1 引言	1
1.1 目标和编排	1
1.2 缩写和符号	3
2 概要表	5
2.1 一般表格群	5
2.1.1 从分子式计算双键相当数	5
2.1.2 某些原子核的性质	6
2.2 ^{13}C 核磁共振谱(^{13}C NMR)	7
2.3 ^1H 核磁共振谱(^1H NMR)	10
2.4 红外光谱(IR)	13
2.5 质谱(MS)	18
2.5.1 具有精确质量数的天然存在元素的平均质量和有代表性的同位素相对丰度	18
2.5.2 一些元素的天然同位素丰度范围	25
2.5.3 天然存在的同位素类型	26
2.5.4 同位素分布的计算	27
2.5.5 各种氯、溴、硫、硅组合的同位素丰度	29
2.5.6 氯和溴组合的同位素类型	31
2.5.7 识别杂原子的存在	32
2.5.8 相对分子质量(M_r)的测定规则	34
2.5.9 可用作结构类别标记的质量同系列	35
2.5.10 质量相关表	37
2.5.11 参考文献	45
2.6 紫外-可见光谱(UV-Vis)	46
3 组合表	49
3.1 烷烃、环烷烃	49
3.2 烯烃、环烯烃	50
3.3 炔烃	51

3.4	芳香烃	52
3.5	芳杂环化合物	53
3.6	卤代化合物	54
3.7	含氧化合物	56
3.7.1	醇和酚	56
3.7.2	醚	57
3.8	含氮化合物	59
3.8.1	胺	59
3.8.2	硝基化合物	60
3.9	硫醇和硫醚	61
3.10	羰基化合物	62
3.10.1	醛	62
3.10.2	酮	63
3.10.3	羧酸	64
3.10.4	羧酸酯和内酯	65
3.10.5	酰胺和内酰胺	67
4	^{13}C核磁共振谱(^{13}C NMR)	69
4.1	烷烃	69
4.1.1	化学位移	69
4.1.2	偶合常数	78
4.1.3	参考文献	79
4.2	烯烃	80
4.2.1	化学位移	80
4.2.2	偶合常数	84
4.2.3	参考文献	84
4.3	炔烃	85
4.3.1	化学位移	85
4.3.2	偶合常数	85
4.3.3	参考文献	86
4.4	脂环化合物	87
4.4.1	化学位移	87
4.4.2	偶合常数	92
4.5	芳香烃	93
4.5.1	化学位移	93
4.5.2	偶合常数	100
4.5.3	参考文献	100

4.6 芳杂环化合物	101
4.6.1 化学位移	101
4.6.2 偶合常数	108
4.7 卤代化合物	109
4.7.1 氟代物	109
4.7.2 氯代物	111
4.7.3 溴代物	112
4.7.4 碘代物	113
4.7.5 参考文献	113
4.8 醇、醚和相关化合物	114
4.8.1 醇	114
4.8.2 醚	115
4.9 含氮化合物	117
4.9.1 胺	117
4.9.2 硝基和亚硝基化合物	119
4.9.3 亚硝酸胺和硝酸胺	120
4.9.4 偶氮和氧化偶氮	120
4.9.5 亚胺和肟	120
4.9.6 脞和碳化二亚胺	121
4.9.7 脒和异脒	122
4.9.8 异氰酸酯、硫代氰酸酯和硫代异氰酸酯	122
4.10 硫化物	123
4.10.1 硫醇	123
4.10.2 硫醚	123
4.10.3 二硫醚和铈盐	124
4.10.4 亚砷和砷	125
4.10.5 磺酸、亚磺酸和它们的衍生物	126
4.10.6 亚硫酸、硫酸和它们的衍生物	126
4.10.7 硫羰基衍生物	127
4.11 羰基化合物	128
4.11.1 醛	128
4.11.2 酮	129
4.11.3 羧酸	131
4.11.4 羧酸酯和内酯	133
4.11.5 酰胺和内酰胺	135
4.11.6 其他羰基衍生物	137
4.12 其他化合物	139

4.12.1	IV族元素的衍生物	139
4.12.2	磷化物	140
4.12.3	其他有机金属化合物	142
4.13	天然产物	144
4.13.1	氨基酸	144
4.13.2	碳水化合物	148
4.13.3	核苷酸和核苷	150
4.13.4	甙体	152
4.14	溶剂和有关化合物的 ¹³ C NMR谱图	153
4.14.1	常见氘代溶剂的 ¹³ C NMR谱图	153
4.14.2	其他一些标准化合物的 ¹³ C NMR谱图	155
4.14.3	常见非氘代溶剂的混合 ¹³ C NMR谱图	156
5	¹H核磁共振谱(¹H NMR)	157
5.1	烷烃	157
5.1.1	化学位移	157
5.1.2	偶合常数	162
5.2	烯烃	164
5.2.1	取代乙烯	164
5.2.2	共轭二烯	170
5.2.3	丙二烯	171
5.3	炔烃	172
5.4	脂环化合物	173
5.5	芳香烃	177
5.6	芳杂环化合物	184
5.6.1	非稠合芳杂环化合物	184
5.6.2	稠合芳杂环化合物	191
5.7	卤代化合物	196
5.7.1	氟代物	196
5.7.2	氯代物	197
5.7.3	溴代物	198
5.7.4	碘代物	199
5.8	醇、醚和相关化合物	200
5.8.1	醇	200
5.8.2	醚	202
5.9	含氮化合物	205
5.9.1	胺	205

5.9.2	硝基和亚硝基化合物	207
5.9.3	亚硝酸盐和硝酸盐	208
5.9.4	硝胺、偶氮和氧化偶氮化合物	208
5.9.5	亚胺、肟、脞和连氮化合物	209
5.9.6	脞和异脞	210
5.9.7	氰酸酯、异氰酸酯、硫代氰酸酯和硫代异氰酸酯	211
5.10	硫化物	212
5.10.1	硫醇	212
5.10.2	硫醚	213
5.10.3	二硫醚和铈盐	214
5.10.4	亚砷和砷	214
5.10.5	磺酸、亚磺酸和亚硫酸、硫酸及衍生物	215
5.10.6	硫代羧酸酯衍生物	215
5.11	羰基化合物	216
5.11.1	醛	216
5.11.2	酮	217
5.11.3	羧酸和羧酸盐	218
5.11.4	酯和内酯	219
5.11.5	酰胺和内酰胺	220
5.11.6	其他羰基衍生物	224
5.12	其他各类化合物	226
5.12.1	IV族元素的衍生	226
5.12.2	磷化物	227
5.12.3	其他化合物	230
5.12.4	参考文献	231
5.13	天然产物	232
5.13.1	氨基酸	232
5.13.2	碳水化合物	235
5.13.3	核苷和核苷酸	237
5.14	溶剂和标准化化合物的谱图	239
5.14.1	常见氘代溶剂的 ¹ H NMR 谱图	239
5.14.2	其他一些参照标准化化合物的 ¹ H NMR 谱图	241
5.14.3	常见非氘代溶剂混合物的 ¹ H NMR 谱图	242
6	异核核磁共振	243
6.1	¹⁹ F NMR 谱	243

6.1.1	全氟烷烃的 ^{19}F 化学位移	243
6.1.2	估算取代氟乙烯的 ^{19}F 化学位移	247
6.1.3	氟代烷烃和烯烃的偶合常数	248
6.1.4	连烯和炔烃的 ^{19}F 化学位移	249
6.1.5	氟代脂环化合物的 ^{19}F 化学位移和偶合常数	250
6.1.6	芳香烃和杂芳环的 ^{19}F 化学位移和偶合常数	251
6.1.7	醇和醚的 ^{19}F 化学位移	254
6.1.8	氟代胺、亚胺和羟胺衍生物的 ^{19}F 化学位移	255
6.1.9	硫化物的 ^{19}F 化学位移	256
6.1.10	羰基和硫羰基化合物的 ^{19}F 化学位移	257
6.1.11	氟代的硼化合物、磷和硅化物的 ^{19}F 化学位移	258
6.1.12	一些天然产物的 ^{19}F 化学位移	259
6.1.13	参考文献	260
6.2	^{31}P NMR 谱	261
6.2.1	三配位磷的 ^{31}P 化学位移	261
6.2.2	四配位磷的 ^{31}P 化学位移	262
6.2.3	带 $\text{P}=\text{C}$ 和 $\text{P}=\text{N}$ 键化合物的 ^{31}P 化学位移	263
6.2.4	四配位 $\text{P}(=\text{O})$ 和 $\text{P}(=\text{S})$ 的 ^{31}P 化学位移	264
6.2.5	五配位和六配位磷化物的 ^{31}P 化学位移	266
6.2.6	天然磷化物的 ^{31}P 化学位移	267
7	红外光谱(IR)	269
7.1	烷烃	269
7.2	烯烃	272
7.2.1	单烯烃	272
7.2.2	丙二烯烃	275
7.3	炔烃	276
7.4	脂环烃	277
7.5	芳香烃	279
7.6	芳杂环化合物	282
7.7	卤代化合物	284
7.7.1	氟代物	284
7.7.2	氯代物	285
7.7.3	溴代物	286
7.7.4	碘代物	286
7.8	醇、醚和相关化合物	287

7.8.1	醇和酚	287
7.8.2	醚、缩醛和缩酮	288
7.8.3	环氧化物	290
7.8.4	过氧化物和氢过氧化物	291
7.9	含氮化合物	292
7.9.1	胺和相关化合物	292
7.9.2	硝基和亚硝基化合物	294
7.9.3	亚胺和肟	296
7.9.4	偶氮、氧化偶氮和硫化偶氮化合物	298
7.9.5	脒和异脒	299
7.9.6	重氮化合物	300
7.9.7	氰酸酯和异氰酸酯	301
7.9.8	硫代氰酸酯和硫代异氰酸酯	302
7.10	硫化物	304
7.10.1	硫醇和硫醚	304
7.10.2	亚砷和砷	305
7.10.3	硫羰基衍生物	307
7.10.4	硫代碳酸衍生物	307
7.11	羰基化合物	310
7.11.1	醛	310
7.11.2	酮	311
7.11.3	羧酸	314
7.11.4	酯和内酯	316
7.11.5	酰胺和内酰胺	319
7.11.6	酸酐	322
7.11.7	酰卤	323
7.11.8	碳酸衍生物	324
7.12	其他化合物	327
7.12.1	硅化物	327
7.12.2	磷化物	328
7.12.3	硼化物	331
7.13	氨基酸	332
7.14	溶剂、悬浮剂和参考物	333
7.14.1	常见溶剂的红外光谱	333
7.14.2	悬浮介质的红外光谱	334
7.14.3	红外光谱中的干扰谱带	335

8 质谱 (MS)	337
8.1 烷烃	337
8.2 烯烃	339
8.3 炔烃	341
8.4 脂环烃	342
8.5 芳香烃	345
8.6 芳杂环化合物	347
8.7 卤代化合物	352
8.8 醇、醚和相关化合物	354
8.8.1 醇和酚	354
8.8.2 脂肪类过氧化氢	356
8.8.3 脂肪醚	356
8.8.4 脂肪族环氧化物	359
8.8.5 脂肪族过氧化物	360
8.8.6 参考文献	361
8.9 含氮化合物	362
8.9.1 胺	362
8.9.2 硝基化合物	364
8.9.3 重氮化合物和偶氮苯	364
8.9.4 叠氮化物	365
8.9.5 脒和异脒化合物	366
8.9.6 氰酸酯、异氰酸酯、硫氰酸酯和异硫氰酸酯	367
8.9.7 参考文献	370
8.10 硫化物	371
8.10.1 硫醇	371
8.10.2 硫醚和二硫醚	371
8.10.3 亚砷和砷	373
8.10.4 磺酸、磺酸酯和磺酰胺	376
8.10.5 硫代羧酸酯	378
8.10.6 参考文献	378
8.11 羰基化合物	379
8.11.1 醛	379
8.11.2 酮	380
8.11.3 羧酸	381
8.11.4 羧酸酐	382
8.11.5 酯和内酯	382

8.11.6	酰胺和内酰胺	384
8.11.7	酰亚胺	386
8.11.8	参考文献	387
8.12	其他化合物	388
8.12.1	三烷基硅醚	388
8.12.2	烷基磷酸酯	388
8.12.3	参考文献	389
8.13	常见溶剂和基质化合物的质谱	390
8.13.1	常见溶剂的电子轰击离子质谱	390
8.13.2	常见 FAB MS 基质化合物和校准化合物的谱图	393
8.13.3	常见 MALDI 质谱基质化合物的谱图	398
8.13.4	参考文献	400
9	紫外-可见光谱 (UV-Vis)	401
9.1	吸收辐射波长和所见色彩的相关性	401
9.2	简单发色团	401
9.3	共轭烯烃	403
9.3.1	二烯和多烯烃	403
9.3.2	α, β -不饱和羰基化合物	404
9.4	芳香烃	406
9.4.1	单取代苯	406
9.4.2	多取代苯	407
9.4.3	芳香族羰基化合物	408
9.5	紫外-可见参考光谱	409
9.5.1	烯烃和炔烃	409
9.5.2	芳香族化合物	410
9.5.3	芳杂环化合物	415
9.5.4	其他化合物	417
9.5.5	核苷酸	419
9.6	常见溶剂	420
	主题索引 (按英文字序排中英文对照)	421
	封底词	449

1 引言

1.1 目标和编排

本数据的汇集是为了帮助在阐明和确认有机化合物结构时所用到的分子光谱的解析工作。它包括从 ^1H 、 ^{13}C 、 ^{19}F 和 ^{31}P 核磁共振谱(NMR)、红外(IR)、质谱(MS)和紫外-可见(UV-Vis)光谱中所得到的参考数据、谱图和相关经验式。它可被视为教材的补充和日常处理这些光谱技术的专用参考书目。使用本书解析谱图时只要求具备这些技术的基本原理知识,然而,本书内容是考虑到对专家来说也是一本有用的参考书而组织的。

第2章和第3章包括结构单元中最具相关光谱特征的概要表和组合表。第2章是根据不同的光谱技术而组织的,第3章则为每组结构单元提供由各种技术所得到的谱学信息。这两章将帮助对谱图解析不太熟练的读者识别他们感兴趣的样品中所存在的结构单元。接下来的四章涵盖了从 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、IR和MS中得到的数据并且根据化合物类型以同样的方式排列成文。它涉及各种骨架(烷、烯、炔、脂环、芳环和杂环),最重要的取代基(卤素、单键氧、氮、硫和羰基)及某些特殊的化合物族群(其他化合物和天然产物)。最后有常见溶剂、辅助剂(如基质材料和参照物)和在每个方法中经常会存在的杂质的光谱汇集。数据的排列严格有序,而且在每页的边上还有醒目的标志以帮助读者在各种光谱技术之间可以快速交叉参阅。由于数据收集不易完整, ^{19}F 和 ^{31}P 核磁共振谱及UV-Vis光谱章节的编排略有差异。虽然在近来,UV-Vis光谱对结构解析所起作用已经不大,但其重要性随着高通量分析的出现也在增加。同样,第9章中的参考数据对光学传感器和在色谱及电泳中广为应用的UV-Vis检测器来说也是很有用的。

由于表格化数据的大部分来自我们自己的测定结果或者是基于大量的文献数据,故完全的文献出处并未采用。只要有可能,数据基本上都采用较通用的测量模式和条件。例如,除非另外指出溶剂,NMR化学位移总是用氘氯仿或四氯化碳为溶剂测定的。同样,红外光谱总是使用低极性的溶剂,如氯仿或二硫化碳而测量的。质谱数据则是由70eV的电子轰击离子化产生的。