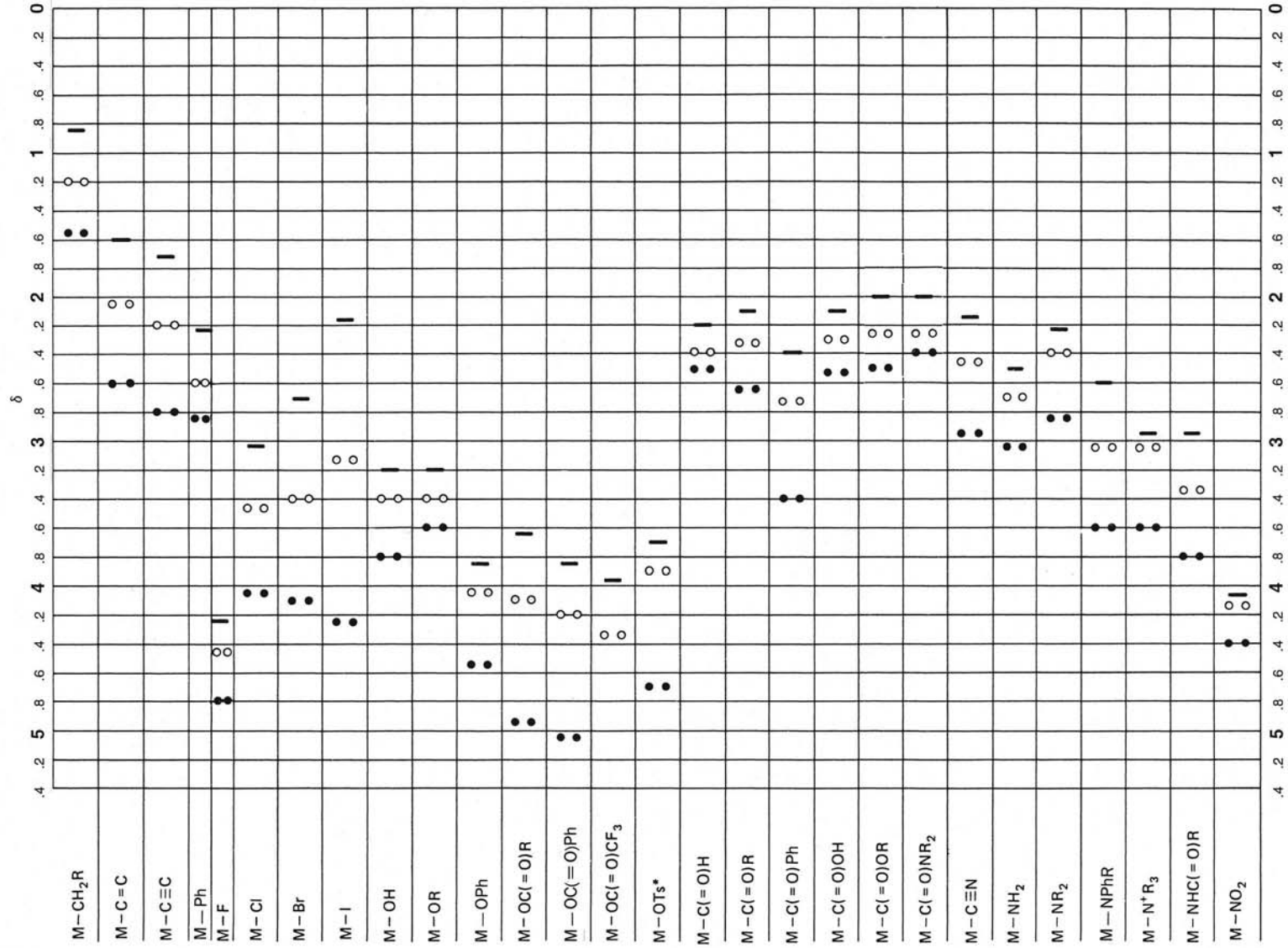


Chemische Verschiebung: ^1H

CHART A.1 CHEMICAL SHIFTS OF PROTONS ON A CARBON ATOM ADJACENT (α POSITION) TO A FUNCTIONAL GROUP APPENDIX A IN ALIPHATIC COMPOUNDS (M—Y)

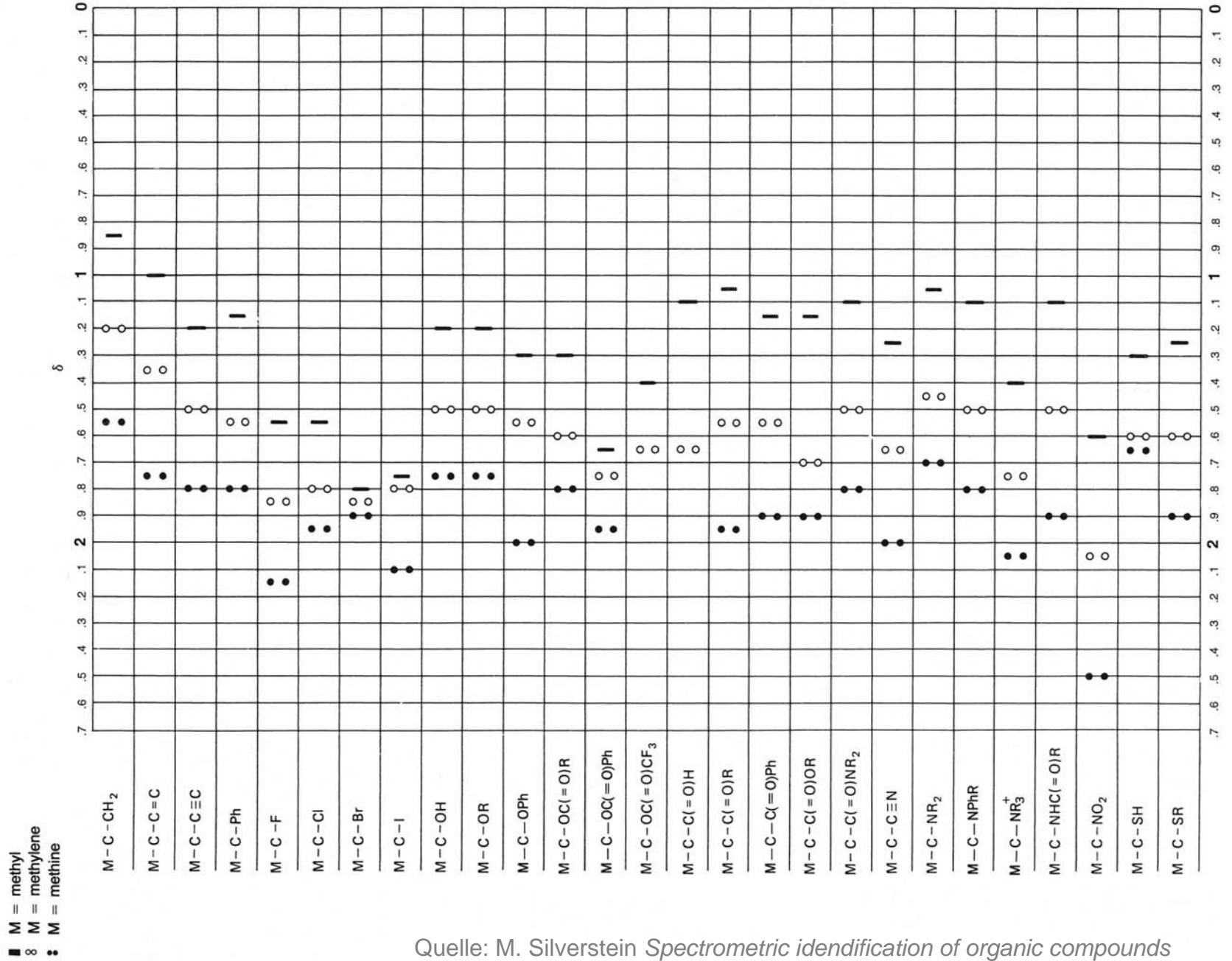
- | M = methyl
 8 M = methylene
 : M = methine



Quelle: M. Silverstein *Spectrometric identification of organic compounds*

Chemische Verschiebung: ^1H

APPENDIX A CHART A.2 CHEMICAL SHIFTS OF PROTONS ON A CARBON ATOM ONCE REMOVED (β POSITION) FROM A FUNCTIONAL GROUP IN ALIPHATIC COMPOUNDS (M—C—Y)



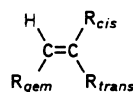
Quelle: M. Silverstein *Spectrometric identification of organic compounds*

Inkrementensystem : ¹H

Tab. 3.18 Inkrement-System zur Abschätzung der chemischen Verschiebungen von Methylen- und Methin-Protonen (modifizierte Shoolery-Regel)

$R^1-CH_2-R^2$	$R^1-\underset{\substack{ \\ R^3}}{CH}-R^2$
$\delta = 1,25 + I_1 + I_2$	$\delta = 1,50 + I_1 + I_2 + I_3$
Substituent	Inkrement I
-Alkyl	0,0
-C=C-	0,8
-C≡C-	0,9
-C ₆ H ₅	1,3
-CO-H, -CO-Alkyl	1,2
-CO-C ₆ H ₅	1,6
-COOH	0,8
-CO-O-Alkyl	0,7
-C≡N	1,2
-NH ₂ , NH-Alkyl, N(Alkyl) ₂	1,0
-NO ₂	3,0
-SH, -S-Alkyl	1,3
-OH	1,7
-O-Alkyl	1,5
-O-C ₆ H ₅	2,3
-O-CO-Alkyl	2,7
-O-CO-C ₆ H ₅	2,9
-Cl	2,0
-Br	1,9
-I	1,4

Tab. 3.20 Inkrement-System zur Abschätzung der chemischen Verschiebungen von olefinischen Protonen (nach Matter, U.E. et al.)



$$\delta = 5,25 + I_{gem} + I_{cis} + I_{trans}$$

Substituent	Inkremete		
	I_{gem}	I_{cis}	I_{trans}
-H	0	0	0
-Alkyl	0,45	-0,22	-0,28
-Alkyl-Ring*	0,69	-0,25	-0,28
-CH ₂ -Aryl	1,05	-0,29	-0,32
-CH ₂ OR	0,64	-0,01	-0,02
-CH ₂ NR ₂	0,58	-0,10	-0,08
-CH ₂ -Hal	0,70	0,11	-0,04
-CH ₂ -CO-R	0,69	-0,08	-0,06
-C(R)=CR ₂ (Dien)	1,00	-0,09	-0,23
(längere Konjugation)	1,24	0,02	-0,05
-C≡C-	0,47	0,38	0,12
-Aryl	1,38	0,36	-0,07

-CHO	1,02	0,95	1,17
-CO-R (Enon)	1,10	1,12	0,87
(längere Konjugation)	1,06	0,91	0,74
-CO-OH (Encarbonsäure)	0,97	1,41	0,71
(längere Konjugation)	0,80	0,98	0,32
-CO-OR (α,β-ungesättigter Ester)	0,80	1,18	0,55
(längere Konjugation)	0,78	1,01	0,46
-CO-NR ₂	1,37	0,98	0,46
-CO-Cl	1,11	1,46	1,01
-C≡N	0,27	0,75	0,55

-OR (gesättigt)	1,22	-1,07	-1,21
-OR (andere)	1,21	-0,60	-1,00
-O-CO-R	2,11	-0,35	-0,64

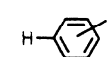
-S-R	1,11	-0,29	-0,13
-SO ₂ -R	1,55	1,16	0,93

-NR ₂ (gesättigt)	0,80	-1,26	-1,21
-NR ₂ (andere)	1,17	-0,53	-0,99
-N-CO-R	2,08	-0,57	-0,72
-NO ₂	1,87	1,32	0,62

-F	1,54	-0,40	-1,02
-Cl	1,08	0,18	0,13
-Br	1,07	0,45	0,55
-I	1,14	0,81	0,88

Tab. 3.22 Inkrement-System zur Abschätzung der chemischen Verschiebungen von Benzol-Protonen

$$\delta = 7,26 + \Sigma I$$



Substituent	I		
	I_{ortho}	I_{meta}	I_{para}
-H	0	0	0
-CH ₃	-0,18	-0,10	-0,20
-CH ₂ CH ₃	-0,15	-0,06	-0,18
-CH(CH ₃) ₂	-0,13	-0,08	-0,18
-C(CH ₃) ₃	0,02	-0,09	-0,22
-CH ₂ Cl	0,00	0,01	0,00
-CH ₂ OH	-0,07	-0,07	-0,07
-CH ₂ NH ₂	0,01	0,01	0,01
-CH=CH ₂	0,06	-0,03	-0,10
-C≡CH	0,15	-0,02	-0,01
-C ₆ H ₅	0,30	0,12	0,10

-CHO	0,56	0,22	0,29
-CO-CH ₃	0,62	0,14	0,21
-CO-CH ₂ -CH ₃	0,63	0,13	0,20
-CO-C ₆ H ₅	0,47	0,13	0,22
-COOH	0,85	0,18	0,25
-COOCH ₃	0,71	0,11	0,21
-CO-O-C ₆ H ₅	0,90	0,17	0,27
-CO-NH ₂	0,61	0,10	0,17
-COCl	0,84	0,20	0,36
-CN	0,36	0,18	0,28

-NH ₂	-0,75	-0,25	-0,65
-NH-CH ₃	-0,80	-0,22	-0,68
-N(CH ₃) ₂	-0,66	-0,18	-0,67
-N ⁺ (CH ₃) ₃ I ⁻	0,69	0,36	0,31
-NH-CO-CH ₃	0,12	-0,07	-0,28
-NO	0,58	0,31	0,37
-NO ₂	0,95	0,26	0,38

-SH	-0,08	-0,16	-0,22
-SCH ₃	-0,08	-0,10	-0,24
-S-C ₆ H ₅	0,06	-0,09	-0,15
-SO ₂ -OH	0,64	0,26	0,36
-SO ₂ -NH ₂	0,66	0,26	0,36

-OH	-0,56	-0,12	-0,45
-OCH ₃	-0,48	-0,09	-0,44
-OCH ₂ -CH ₃	-0,46	-0,10	-0,43
-O-C ₆ H ₅	-0,29	-0,05	-0,23
-O-CO-CH ₃	-0,25	0,03	-0,13
-O-CO-C ₆ H ₅	-0,09	0,09	-0,08

-F	-0,26	0,00	-0,20
-Cl	0,03	-0,02	-0,09
-Br	0,18	-0,08	-0,04
-I	0,39	-0,21	-0,03

Proton Spin-Spin Kopplungskonstanten

APPENDIX F PROTON SPIN-COUPPLING CONSTANTS

Type	J_{ab} (Hz)	J_{ab} Typical	Type	J_{ab} (Hz)	J_{ab} Typical
	0-30	12-15		6-12	10
CH_a-CH_b (free rotation)	6-8	7		0-3	1-2
	0-1	0		4-10	7
				0-3	1.5
ax-ax	6-14	8-10		0-3	2
ax-eq	0-5	2-3	$\text{C}=\text{CH}_a-\text{CH}_b=\text{C}$	9-13	10
eq-eq	0-5	2-3		3 member	0.5-2.0
	cis 5-10 trans 5-10			4 member	2.5-4.0
(cis or trans)				5 member	5.1-7.0
	cis 4-12 trans 2-10		$\text{CH}_a-\text{C}\equiv\text{CH}_b$ $-\text{CH}_a-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_b-$	6 member	8.8-11.0
(cis or trans)				7 member	9-13
	cis 7-13 trans 4-9			8 member	10-13
(cis or trans)				2-3	
CH_a-OH_b (no exchange)	4-10	5		2-3	
	1-3	2-3		6	
$\text{C}=\text{CH}_a-\text{CH}_b$	5-8	6		4	
	12-18	17		2.5	
	0-3	0-2		J (ortho)	9
				J (meta)	3
				J (para)	~0
				J (2-3)	5
				J (3-4)	8
				J (2-4)	1.5
				J (3-5)	1.5
				J (2-5)	1
				J (2-6)	~0
				J (2-3)	1.8
				J (3-4)	3.6
				J (2-4)	~0
				J (2-5)	1.5

Tabelle 1 zu NMR-Basiskurs