

**Tabela 5** Kemijski premiki ( $\delta$ ) metilnih, metilenskih in metinskih protonov na ogljikovem atomu poleg funkcionalne skupine ( $\alpha$  položaj) v alifatskih spojinah<sup>a</sup>

Skupina	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub>	CH
-CH <sub>2</sub> R	0,8	1,3	1,6
-C=C	1,6	2,0	2,6
-C≡C	1,7	2,2	2,8
-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	2,3	2,6	2,9
-F	4,3	4,4	4,8
-Cl	3,0	3,4	4,0
-Br	2,7	3,4	4,1
-I	2,2	3,2	4,2
-OH	3,3	3,5	3,8
-OR	3,3	3,4	3,7
-OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	3,8	4,0	4,3
-OCOR	3,6	4,1	5,0
-OCOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	3,9	4,2	5,1
-OCOCF <sub>3</sub>	4,0	4,4	-
-CHO	2,2	2,4	2,5
-COR	2,1	2,2	2,6
-COOH	2,1	2,3	2,6
-COOR	2,0	2,3	2,5
-CONR <sub>2</sub>	2,0	2,1	2,4
-CN	2,1	2,5	3,0
-NH <sub>2</sub>	2,5	2,7	3,0
-NR <sub>2</sub>	2,2	2,4	2,8
-NRC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	2,6	3,0	3,6
-NR <sub>3</sub> <sup>+</sup>	3,0	3,1	3,6
-NHCOR	2,9	3,3	3,7
-NO <sub>2</sub>	4,1	4,2	4,4
-SR	2,1	2,5	3,1
-SOR	2,6	3,1	-
=O (alifatski aldehyd)			9,5
=O (aromatski aldehyd)			10

**Tabela 7** Prispevki skupin (Z) za izračun kemijskih premikov vinilnih protonov

Skupina (R)	Z <sub>gem</sub>	Z <sub>cis</sub>	Z <sub>trans</sub>
H	0	0	0
alkil	0,44	-0,26	-0,29
alkil - obroč	0,71	-0,33	-0,30
-CH <sub>2</sub> O, -CH <sub>2</sub> I	0,67	-0,02	-0,07
-CH <sub>2</sub> S	0,53	-0,15	-0,15
-CH <sub>2</sub> Cl, -CH <sub>2</sub> Br	0,72	0,12	0,07
-CH <sub>2</sub> N	0,66	-0,05	-0,23
-C=C	0,50	0,35	0,10
-C≡N	0,23	0,78	0,58
-C=C	0,98	-0,04	-0,21
-C=C (konj) <sup>a</sup>	1,26	0,08	-0,01
-C=O	1,10	1,13	0,81
-C=O (konj) <sup>a</sup>	1,06	1,01	0,95
-COOH	1,00	1,35	0,74
-COOH (konj) <sup>a</sup>	0,69	0,97	0,39
-COOR	0,84	1,15	0,56
-COOR (konj) <sup>a</sup>	0,68	1,02	0,33
-OR (alkil)	1,18	-1,06	-1,28
-OR (konj) <sup>a</sup>	1,14	-0,65	-1,05
-OCOR	2,09	-0,40	-0,67
-aril	1,35	0,37	-0,10
-Cl	1,00	0,19	0,03
-Br	1,04	0,40	0,55
-NR <sub>2</sub> (alkil)	0,69	-1,19	-1,31
-SR	1,00	-0,24	-0,04

**Tabela 6** Kemijski premiki metilenskih oziroma metinskih protonov v soseščini več funkcionalnih skupin

Skupina Y ali Z		Skupina Y ali Z	
-CH <sub>3</sub>	0,47	-COR	1,70
-C=C	1,32	-COC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	1,84
-C≡C	1,44	-COOR	1,55
-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	1,85	-CONR <sub>2</sub>	1,59
-CF <sub>2</sub>	1,21	-CN	1,70
-CF <sub>3</sub>	1,14	-NR <sub>2</sub>	1,57
-Cl	2,53	-NHCOR	2,27
-Br	2,33	-N <sub>3</sub>	1,97
-I	1,82	-SR	1,64
-OH	2,56	-OSO <sub>2</sub> R	3,13
-OR	2,36		
-OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	3,23		
-OCOR	3,13		

**Tabela 8** Kemijski premiki ( $\delta$ /ppm) protonov v monosubstituiranih benzenih

Skupina	8,2	8,0	7,8	7,6	7,4	7,2	7,0	6,8	6,6
H						x			
Me, Et, <i>i</i> -Pr						x			
<i>t</i> -Bu						o	m	p	
C=CH <sub>2</sub>						x			
C≡C					o	x			
fenil					o	m	p		
CF <sub>3</sub>				x					
CH <sub>2</sub> Cl						x			
CCl <sub>3</sub>			o		x				
CH <sub>2</sub> OH						x			
CH <sub>2</sub> OR, CH <sub>2</sub> OCOR						x			
F						m	p	o	
Cl						x			
Br				o		x			
I			o			p	m		
OH							m	p	o
OR						m	x		
OCOR						x	o		
CHO		o		p	m				
COR		o		x					
COOH		o		p	m				
COOR	o			p	m				
NH <sub>2</sub>							m	p	o
NHCOR				x					
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>		o		x					
NO <sub>2</sub>	o			p	m				
SR						x			

Znaki v tabeli pomenijo: o - orto, m - meta, p - para, x - preostala dva ali trije tipi protonov

Tabela 10 Sklopitvene konstante proton - proton

Strukturni element	$J(a-b)$ / Hz	$J(a-b)$ tipična / Hz
	0-30	12-15
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	prosta rotacija	6-8
CH <sub>2</sub> -C-CH <sub>2</sub>		0-1
	a-a	6-14
	a-e	0-5
	e-e	0-5
	cis	5-10
	trans	5-10
	cis	4-12
	trans	2-10
	cis	7-13
	trans	4-9
CH <sub>2</sub> -COH <sub>2</sub>	alkohol, kadar ni izmenjave	4-10
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> O	aldehid	1-3
C=CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> O		5-8
	12-18	17
	6-12	10
	0-3	1,5
	4-10	7
	3 členski	0,5-2
	4 členski	2,5-4
	5 členski	5-7
	6 členski	9-11
	7 členski	8-13
C=CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> =C	9-13	10
CH <sub>2</sub> -C≡CH <sub>2</sub>	2-3	

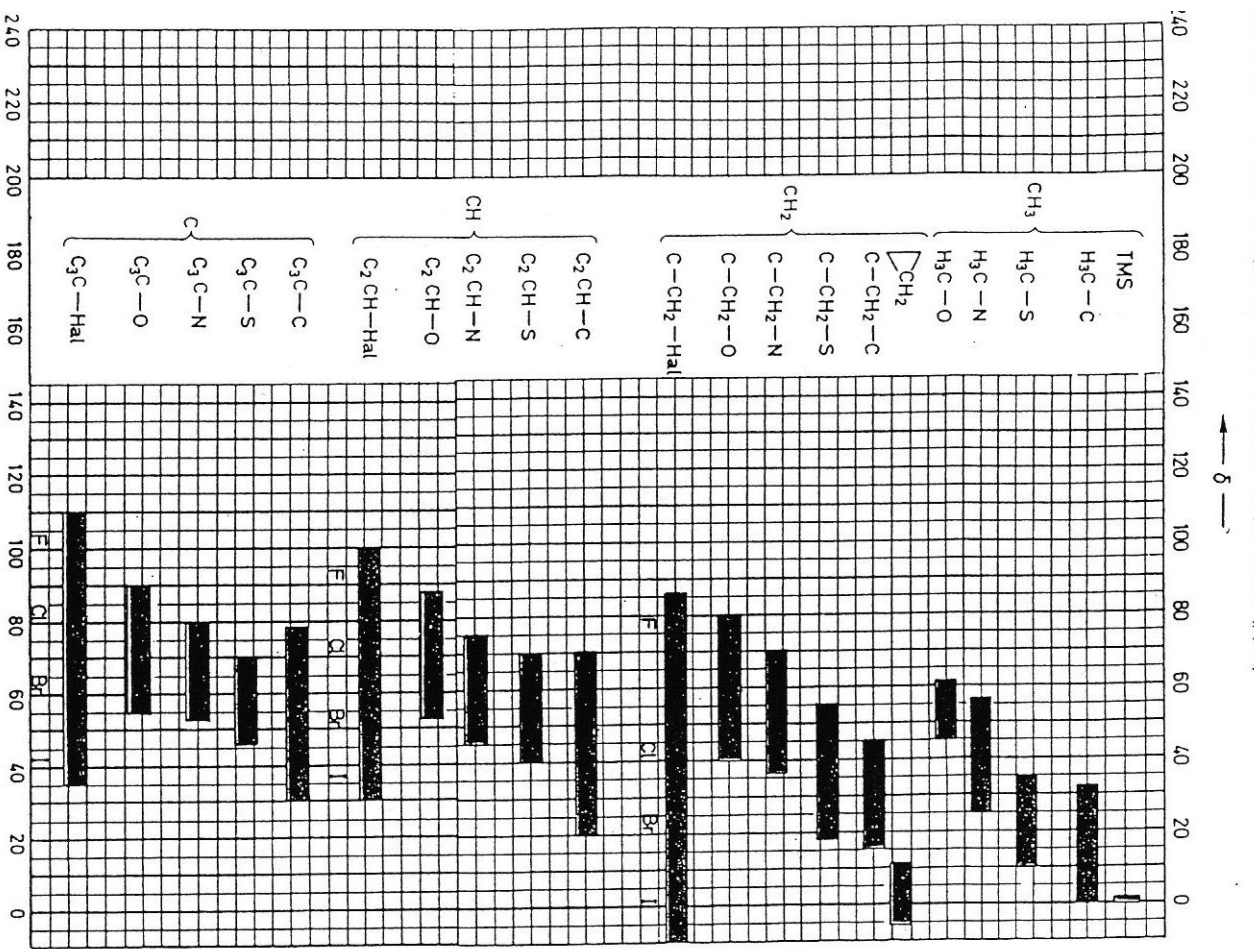
Tabela 10 Nadaljevanje

Strukturni element	$J(a-b)$ / Hz	$J(a-b)$ tipična / Hz
		6
		2
		4
	orto	6-10
	meta	1-3
	para	0-1
	$J(2-3)$	5-6
	$J(2-4)$	1-2
	$J(2-5)$	0-1
	$J(2-6)$	0-1
	$J(3-4)$	7-9
	$J(3-5)$	1-2
	$J(1-2)$	2-3
	$J(1-3)$	2-3
	$J(2-3)$	2-3
	$J(2-4)$	1-2
	$J(2-5)$	1,5-2,5
	$J(3-4)$	3-4
	$J(2-3)$	1,3-2
	$J(2-4)$	0-1
	$J(2-5)$	1-2
	$J(3-4)$	3,1-3,8
	$J(2-3)$	4,9-6,2
	$J(2-4)$	1,2-1,7
	$J(2-5)$	3,2-3,7
	$J(3-4)$	3,4-5,0
	$J(2-3)$	5,4
	$J(2-4)$	1,5
	$J(2-4)$	0-1
	$J(2-5)$	1-2
	$J(4-5)$	4-6
	$J(4-6)$	2-3
	$J(2-4)$	0
	$J(2-5)$	1-2
	$J(4-5)$	3-4

Tabela 11 Sklopitvene konstante med protoni in drugimi jedri

Strukturni element	$J(a-b)$ / Hz	
$^1\text{H} - ^{19}\text{F}$		
	44-81	
CH-CF	prosta rotacija	
CH-C-CF	3-25	
	0	
	1-8	
	12-40	
	orto	6-10
	meta	5-6
	para	2
$^1\text{H} - ^{31}\text{P}$		
	630-707	
(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> P	2,7	
(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> PO	13,4	

Tab. 3.33  $^{13}\text{C}$  shifts of important structural elements;  $\delta$  values (ppm)



Tab. 3.33 continued

