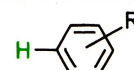


¹H Chemische Verschiebungen - Mittelwerte

C-CH ₂ -	Si	0.2
	-Alkyl	1.3
	-C=O	2.1
	-Ar	2.4
	-C=C	1.7
	-Br	2.7
	-Cl	3.1
	-F	4.3
	-OH	3.0
	-O-C=O	4.0
	-NH ₂	2.5
	-NR ₂	3.0
	-SR	2.3
C-CH		jeweils ca. + 0,3
C-CH ₃		jeweils ca. - 0,2
CH	≡CH	1.8-3
	=CH	5 - 7.5
	Benzol	6.5 - 8.5
	Pyridin	7.5 - 8.5
	CHO	9.5
OH	Aliphatisch	1-5
	Aromatisch	5-8
	COOH	11-13
NH ₂	Aliphatisch-NH ₂	1-4
	Amid	5-9.5
Benzol		7.26
Pyridin	Pos. 2, 3, 4	8.6 7.3 7.65
Furan	Pos. 2, 3	7.38 6.30
Pyrrrol	Pos. 2, 3	6.62 6.05
Thiophen	Pos. 2, 3	7.20 6.96

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

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



Substituent	<i>I</i> _{ortho}	<i>I</i> _{meta}	<i>I</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-COCH 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

¹³C-Chemische Verschiebungen

Gruppe Chem.Versch [ppm]			Gruppe Chem.Versch [ppm]		
Cyclopropyl		0 - 5	Alkine	C≡C	70 - 100
CH ₃	(primär)	0 - 30	Alken	C=C	110 - 150
CH ₂	(sekundär)	25 - 45	Aromate	C=C	110 - 135
CH	(tertiär)	30 - 60	Heteroarom.	X-C=	115 - 140
Cq	(quaternär)	35 - 70	Cyanate	-O-C≡N	105 - 120
			Isocyanate	-N=C=O	115 - 135
CH ₃	-F	75	Thiocyanate	-S-C≡N	110 - 120
CH ₂	-F	≈ 80	Isothiocyanate	-N=C=S	120 - 140
CH	-F	≈ 88			
Cq	-F	≈ 94	Nitrile	-C≡N	115 - 120
CH ₃	-Cl	25	Isonitrile	-N≡C	130 - 150
CH ₂	-Cl	≈ 40			
CH	-Cl	≈ 54	Azimehine	>C=N-	145 - 165
Cq	-Cl	≈ 67	Oxime	>C=N-OH	155 - 165
CH ₃	-Br	10	Carbonate	O=C(OR) ₂	150 - 160
CH ₂	-Br	≈ 27	Harnstoffe	O=C(NR ₂) ₂	150 - 170
CH	-Br	≈ 44	Thioharnstoffe	S=C(NR ₂) ₂	165 - 185
Cq	-Br	≈ 62	Säureanhydride	(-C=O) ₂ O	150 - 175
CH ₃	-S-	15 - 19	Carbonsäuren	-COOH	168-178
CH ₂	-S-	25 - 45	Ester	-COOR	155 - 175
CH	-S-	40 - 55			
Cq	-S-	55 - 70	Säureamide	-CO-NHR	160 - 170
CH ₃	-N<	20 - 40	Säureamide	(CO) ₂ NR	165 - 180
CH ₂	-N<	40 - 60	Säurechloride	-COCl	165 - 185
CH	-N<	50 - 70	Aldehyde	-CHO	175 - 205
Cq	-N<	65 - 75			
CH ₃	-O-	50 - 55	Ketone	>C=O	175 - 225
CH ₂	-O-	40 - 70	Thioketone	>C=S	190 - 205
CH	-O-	60 - 75			
Cq	-O-	70 - 85	Benzol		128
			Pyridin	2,3,4	150, 124, 136
			Pyrrol	2,3	118, 108
			Furan	2,3	143, 109

INFRA-RED GROUP ABSORPTION FREQUENCIES

		<u>TYPE OF VIBRATION</u>	<u>FREQUENCY (cm⁻¹)</u>	<u>WAVELENGTH (μ)</u>	<u>INTENSITY (1)</u>	
C-H	Alkanes	(stretch)	3000-2850	3.33-3.51	s	
		-CH ₃	(bend)	1450 and 1375	6.90 and 7.27	m
		-CH ₂ -	(bend)	1465	6.83	m
	Alkenes	(stretch)	3100-3000	3.23-3.33	m	
		(bend)	1700-1000	5.88-10.0	s	
	Aromatics	(stretch)	3150-3050	3.17-3.28	s	
		(out-of-plane bend)	1000-700	10.0-14.3	s	
	Alkyne	(stretch)	ca. 3300	ca.3.03	s	
	Aldehyde		2900-2800	3.45-3.57	w	
			2800-2700	3.57-3.70	w	
C-C	Alkane	not usually useful				
C=C	Alkene		1680-1600	5.95-6.25	m-w	
	Aromatic		1600-1400	6.25-7.14	m-w	
C≡C	Alkyne		2250-2100	4.44-4.76	m-w	
C=O	Aldehyde		1740-1720	5.75-5.81	s	
			1725-1705	5.80-5.87	s	
			1725-1700	5.80-5.88	s	
			1750-1730	5.71-5.78	s	
			1700-1640	5.88-6.10	s	
			ca. 1810	ca. 5.52	s	
			ca. 1760	ca. 5.68	s	
C-O	Alcohols, Ethers, Esters, Carboxylic acids		1300-1000	7.69-10.0	s	
O-H	Alcohols, Phenols	Free	3650-3600	2.74-2.78	m	
		H-Bonded	3400-3200	2.94-3.12	m	
		Carboxylic acids (2)	3300-2500	3.03-4.00	m	
N-H	Primary and secondary amines		ca. 3500	ca. 2.86	m	
C≡N	Nitriles		2260-2240	4.42-4.46	m	
N=O	Nitro (R-NO ₂)		1600-1500	6.25-6.67	s	
			1400-1300	7.14-7.69	s	
C-X	Fluoride Chloride Bromide, Iodide		1400-1000	7.14-10.0	s	
			800-600	12.5-16.7	s	
			<600	>16.7	s	

(1) s = strong, m = medium and w = weak

(2) note that the -OH absorption of solid carboxylic acids which run as a nujol mull can be difficult to see as they maybe very broad