

### C-13 Chemical shift increments (adoped from S. Berger, C-13 Spectroscopy)



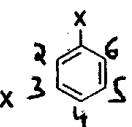
Alkanes:  $\delta = -2.3 + N\alpha S\alpha + N\beta S\beta + N\gamma S\gamma + N\delta S\delta + N\epsilon S\epsilon$

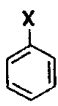
S	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\epsilon$
D	0.4	-0.12	-0.02	-	-
D <sub>2</sub>	0.7	0.24	-0.08	-	-
D <sub>3</sub>	0.9	0.36	-0.16	-	-
Li	1.9	6.8	6.3	0.6	-
Mg	6.6	6.1	5.5	-0.1	0.3
CH <sub>3</sub>	9.1	9.4	-2.5	0.3	-
H <sub>2</sub> C=CH-	22.3	6.9	-2.2	0.2	-
-HC=CH-cis	14.2	7.3	-1.5	-	-
-HC=CH-trans	19.7	7.2	-1.6	-	-
-C≡CH	4.5	5.5	-3.5	-	-
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	22.3	8.6	-2.3	0.2	-
CHO	31.9	0.7	-2.3	-	-
COCH <sub>3</sub>	30.9	2.3	-0.9	2.7	1.4
CO <sub>2</sub> H	20.8	2.7	-2.3	1.0	1.2
CO <sub>2</sub>	22.5	4.5	-1.7	1.2	-
CO <sub>2</sub> Me	20.4	2.3	-1.9	1.2	0.8
COCl	33.7	2.2	-3.3	-	-
CN	3.6	2.0	-3.1	-0.5	-
NH <sub>2</sub>	28.6	11.5	-4.9	0.3	0.4
NH	36.7	7.6	-4.2	0.5	0.3
N	40.8	5.2	-4.2	0.5	0.3
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	26.0	7.5	-4.6	-	-
NC	28.0	6.2	-5.4	-	-
NCO	29.6	8.5	-5.1	-	-
NCS	31.4	-	-	-	-
NO <sub>2</sub>	64.5	3.1	-4.7	-1.0	-
OH, 1 <sup>a</sup>	48.3	10.2	-5.8	0.3	0.1
OH, 2 <sup>b</sup>	44.5	9.7	-3.3	0.2	0.2
OH, 3 <sup>c</sup>	39.7	7.3	-1.8	0.3	0.3
OR	58.0	8.1	-4.7	1.4	-
OCOCH <sub>3</sub>	51.1	7.1	-4.8	1.1	0.8
SH	11.1	11.8	-2.9	0.7	-
S <sup>-</sup>	11.7	14.0	-2.3	0.4	-
SMe	21.1	6.4	-3.0	0.5	-
S <sup>+</sup> Me <sub>2</sub>	30.1	1.1	-3.0	0.7	-
SOMe	41.8	-0.3	-2.7	0.5	-
SO <sub>2</sub> Me	41.0	-0.2	-2.9	0.3	-
SCN	20.6	6.9	-3.8	0.2	-
F	70.1	7.8	-6.8	0.0	-
Cl	31.2	10.5	-4.6	0.1	0.5
Br	20.0	10.6	-3.1	0.1	0.5
I	-6.0	11.3	-1.0	0.2	1.0
Sn(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-1.7	4.1	0.9	0.1	-

<sup>a</sup> primary  
<sup>b</sup> secondary  
<sup>c</sup> tertiary

Olefins	$A_x$	$\delta_c = 123.5 + \frac{A_x}{A_\beta}$	$\beta$ CH <sub>2</sub> =CH-X
X			
F	24.9	-34.3	
Cl	2.6	-6.1	
Br	-7.9	-1.4	
I	-38.1	7.0	
OCH <sub>3</sub>	29.4	-38.9	
OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	28.5	-39.8	
OCOCH <sub>3</sub>	18.4	-26.7	
N <sup>+</sup> (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	19.8	-10.6	
NC <sub>4</sub> H <sub>4</sub> (Pyrrolidin)	6.5	-29.2	
NO <sub>2</sub>	22.3	-0.9	
NC	-3.9	-2.7	
CN	-15.1	14.2	
CH <sub>3</sub>	10.6	-7.9	
CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	15.5	-9.7	
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	14.0	-8.2	
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20.4	-11.5	
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	25.3	-13.3	
CH <sub>2</sub> Cl	10.2	-6.0	
CH <sub>2</sub> Br	10.9	-4.5	
CH <sub>2</sub> I	14.2	-4.0	
CH <sub>2</sub> OH	14.2	-8.4	
HC=CH <sub>2</sub>	13.6	-7.0	
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	12.5	-11.0	
Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	16.9	6.7	
SiCl <sub>3</sub>	8.7	16.1	
Sn(CH=CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	12.0	12.5	
Pb(CH=CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	22.1	11.8	
B(CH=CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	18.4	14.7	
CHO	13.1	12.7	
COCH <sub>3</sub>	15.0	5.8	
COOH	4.2	8.9	
COOCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	6.3	7.0	
SCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	18.5	-16.4	
SCH=CH <sub>2</sub>	6.4	-8.7	
SOCH=CH <sub>2</sub>	10.6	-0.5	
SO <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	13.7	6.2	

# Substituted Benzene Rings:

	$\delta_c = 128,5 \text{ ppm} + \Delta\delta_c$			
		$\Delta\delta$		
	C-1	C-2/6	C-3/5	C-4
N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	22,5	-15,4	0,9	-11,5
NHCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	20,0	-15,7	0,7	-11,4
N(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	19,3	-16,5	0,6	-13,0
NH(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )	14,7	-10,7	0,9	-10,5
NHCOCH <sub>3</sub>	9,7	-8,1	0,2	-4,4
NHNH <sub>2</sub>	22,8	-16,5	0,5	-9,6
N(CH <sub>3</sub> )NO	23,7	-9,5	0,8	-1,4
NCO	5,1	-3,7	1,1	-2,8
NCS	3,0	-2,7	1,3	-1,0
N=NC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	24,0	-5,8	0,3	2,2
N=N(O)C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	19,7	-6,3	0,0	2,8
N <sub>3</sub>		-9,4	1,4	-3,6
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0,1	-5,8	2,2	2,2
N(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	19,5	-7,3	2,5	2,4
N≡C	-1,8	-2,2	1,4	0,9
N≡N	-12,7	6,0	5,7	16,0
NO <sub>2</sub>	19,9	-4,9	0,9	6,1
P(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	13,6	1,6	-0,6	-1,0
AsH <sub>2</sub>	1,7	7,8	0,8	0,0
OH	26,9	-12,8	1,4	-7,4
ONa	39,6	-8,2	1,9	-13,6
OCH <sub>3</sub>	31,4	-14,4	1,0	-7,7
OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	27,6	11,2	-0,3	-6,9
OCN <sup>+</sup>	25,0	-12,7	2,6	-1,0
OCOCH <sub>3</sub>	22,4	-7,1	0,4	-3,2
OSi(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	26,8	-8,4	0,9	-7,1
OP(OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	23,0	-7,9	1,0	-4,4
OPO(OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	21,9	-8,4	1,2	-3,0
SH	2,1	0,7	0,3	-3,2
SCH <sub>3</sub>	10,0	-1,9	0,2	-3,6
SC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	7,3	2,5	0,6	-1,5
SCN <sup>+</sup>	-3,7	2,5	2,2	2,2
S-S(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sup>+</sup>	7,5	-1,3	0,8	-1,1
+S(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	-1,0	3,1	2,2	6,3
SOCH <sub>3</sub>	17,6	-5,9	1,1	2,4
SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	12,3	-1,4	0,8	5,1
SO <sub>3</sub> H <sup>+</sup>	14,5	-2,7	0,8	3,3
SO <sub>2</sub> Cl	15,6	-1,7	1,2	6,8
SeCN <sup>+</sup>	-5,3	5,1	2,9	2,1
Se-SeC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	1,6	2,3	0,8	-0,8
	34,8	-13,0	1,6	-4,4

	$\delta_c = 128,5 \text{ ppm} + \Delta\delta_c$			
		$\Delta\delta$		
	C-1	C-2/6	C-3/5	C-4
F	34,8	-13,0	1,6	-4,4
Cl	6,3	0,4	1,4	-1,9
Br	5,8	3,2	1,6	-1,6
I	-34,1	8,9	1,6	-1,1

