

... zu berücksichtigen. In ...

... Methin- ...

... 3.15 gibt ...

... liegt ge- ...

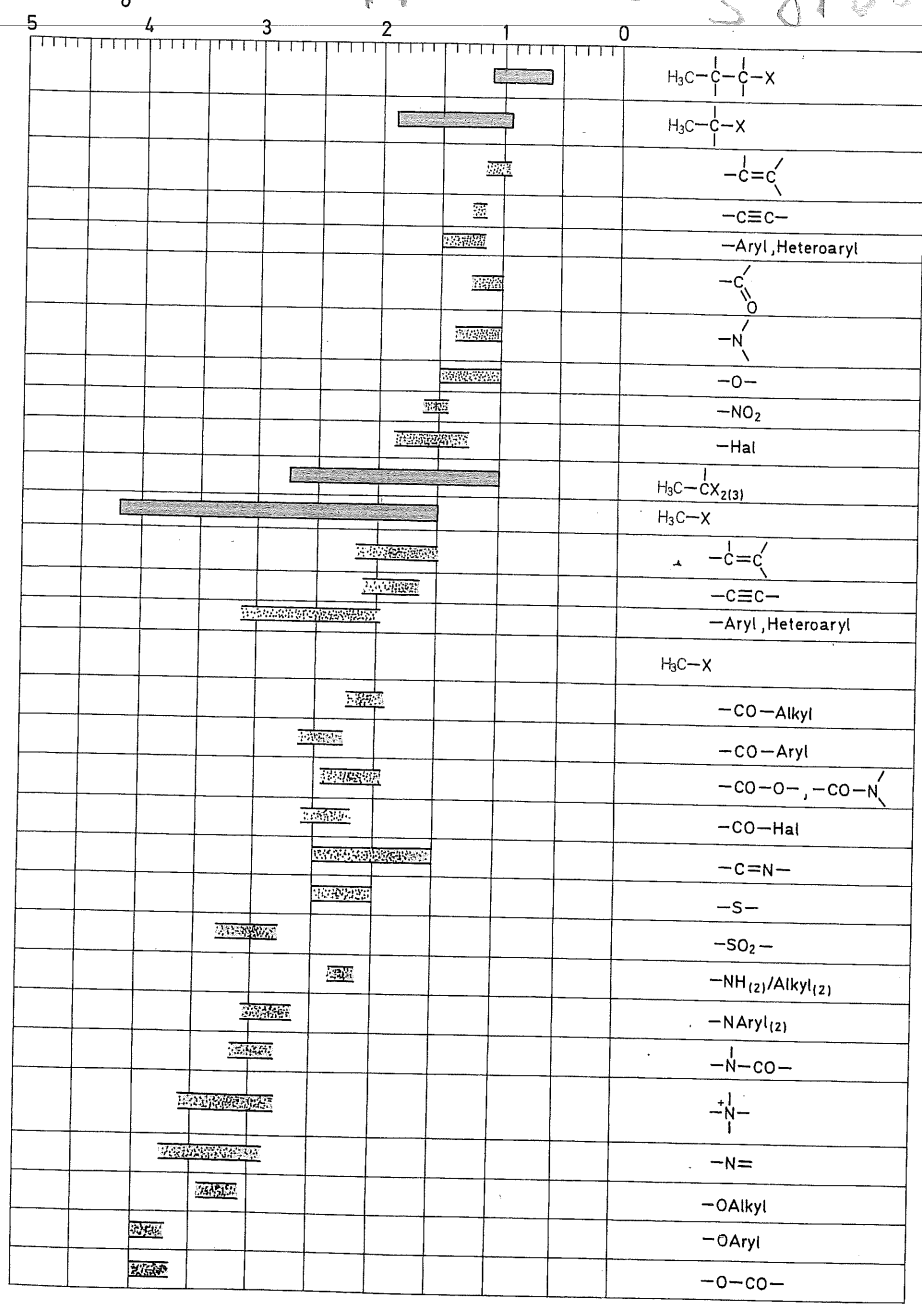
... von Al- ...

... in Ringen. ...

... schiebung ...

... Protonen ...

¹H CH₃ groups



1H-CH2 groups

Tab. 3.13 Chemische Verschiebungen von Methylen-Protonen (δ -Werte gemessen in CCl_4 oder CDCl_3)

This chart displays the chemical shift ranges for various ^1H -NMR active CH_2 groups. The x-axis represents the chemical shift δ in ppm, ranging from 0 to 7. The y-axis lists different chemical environments. Horizontal bars indicate the typical shift ranges for each group.

Chemical Environment	Chemical Shift Range (δ , ppm)
$-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{X}$	2.2 - 2.8
$-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{X}$	2.2 - 2.8
$-\text{C}=\text{C}-$	1.6 - 2.2
$-\text{C}=\text{C}-$	1.6 - 2.2
Aryl, Heteroaryl	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{N}-$	2.3 - 2.9
$-\text{O}-$	3.3 - 4.1
$-\text{NO}_2$	3.3 - 4.1
-Hal	3.3 - 4.1
$-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}(\text{X})_2$	2.6 - 3.4
$\text{X}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{X}$	2.6 - 3.4
$-\text{C}-\text{CH}_2-\text{X}$	3.3 - 4.1
$-\text{C}-\text{CH}_2-\text{X}$	3.3 - 4.1
$-\text{C}-\text{C}-$	1.2 - 1.8
$-\text{C}=\text{C}-, -\text{C}=\text{N}$	1.2 - 1.8
Aryl, Heteroaryl	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-\text{Alkyl}$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-\text{Aryl}$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-\text{O}-, -\text{CO}-\text{N}-$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-\text{Hal}$	3.3 - 4.1
$-\text{C}=\text{N}-$	2.3 - 2.9
$-\text{S}-$	2.3 - 2.9
$-\text{SO}_2-$	2.3 - 2.9
$-\text{NH}_2, \text{Alkyl}, \text{Aryl}$	2.3 - 2.9
$-\text{N}(\text{Aryl})_2$	2.3 - 2.9
$-\text{N}-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{N}=\text{C}-$	2.3 - 2.9
$-\text{N}=\text{C}-$	2.3 - 2.9

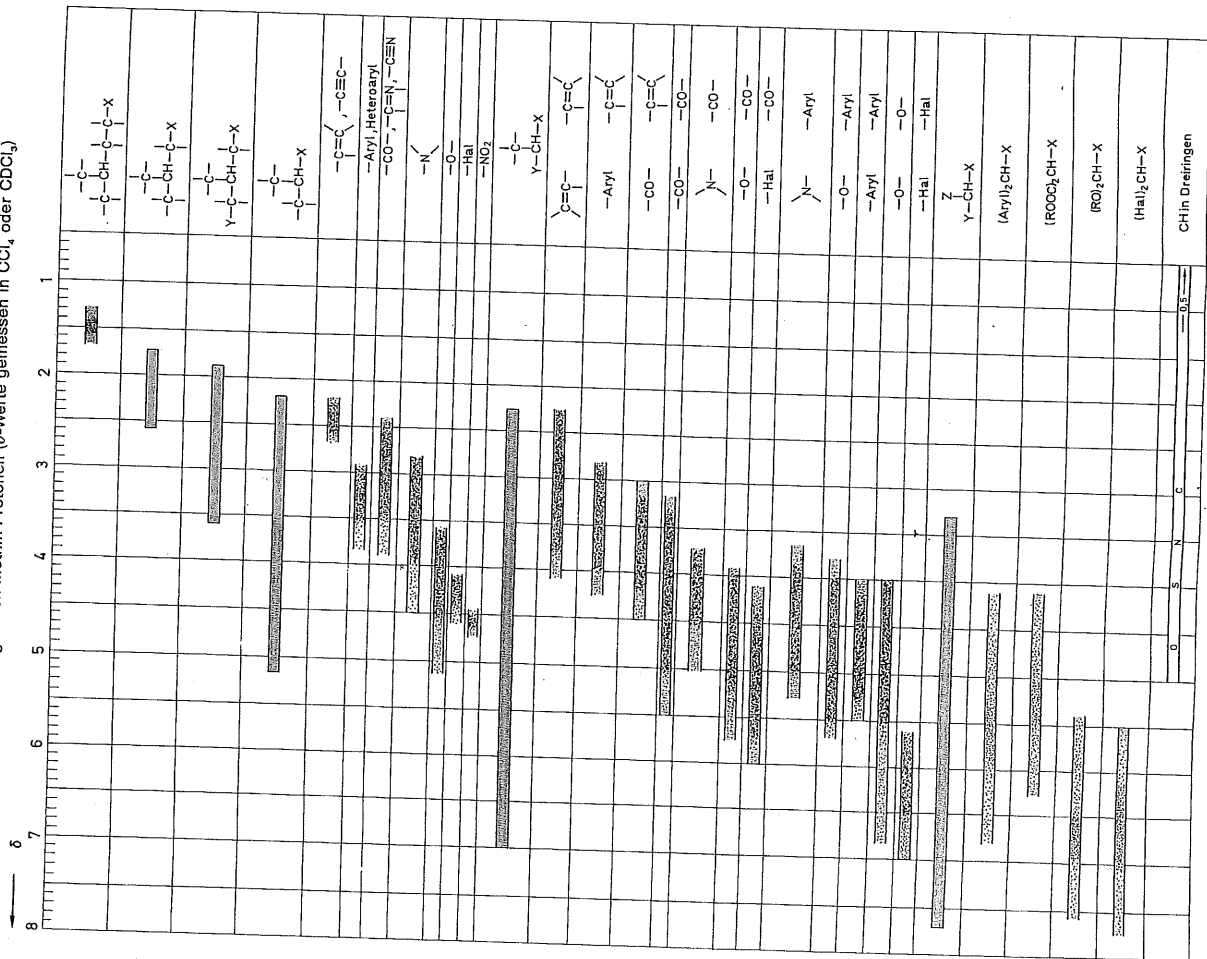
Tab. 3.13 Fortsetzung

This chart continues the list of ^1H -NMR active CH_2 groups from the previous table. The x-axis represents the chemical shift δ in ppm, ranging from 0 to 7. The y-axis lists different chemical environments. Horizontal bars indicate the typical shift ranges for each group.

Chemical Environment	Chemical Shift Range (δ , ppm)
$\text{Y}-\text{C}-\text{C}-\text{X}$	2.2 - 2.8
$\text{Y}-\text{C}-\text{C}-\text{X}$	2.2 - 2.8
$-\text{C}-\text{C}-$	1.2 - 1.8
$-\text{C}-\text{C}-$	1.2 - 1.8
$-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{N}-$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-\text{Aryl}$	2.3 - 2.9
$-\text{N}-$	2.3 - 2.9
$-\text{Aryl}$	2.3 - 2.9
$-\text{O}-$	3.3 - 4.1
$-\text{O}-$	3.3 - 4.1
CH_2 in Dreiringen	1.2 - 1.8
$-\text{C}-\text{CH}_2-\text{X}$	3.3 - 4.1
$-\text{NO}_2$	3.3 - 4.1
$-\text{O}-\text{Alkyl}$	3.3 - 4.1
$-\text{O}-\text{Aryl}$	3.3 - 4.1
$-\text{O}-\text{CO}-$	3.3 - 4.1
-Hal	3.3 - 4.1
$\text{Y}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{X}$	2.2 - 2.8
$-\text{C}=\text{C}-, -\text{C}=\text{C}-$	1.6 - 2.2
Aryl, Heteroaryl	2.3 - 2.9
$-\text{CO}-$	2.3 - 2.9
$-\text{N}-$	2.3 - 2.9
$-\text{O}-$	3.3 - 4.1
-Hal	3.3 - 4.1

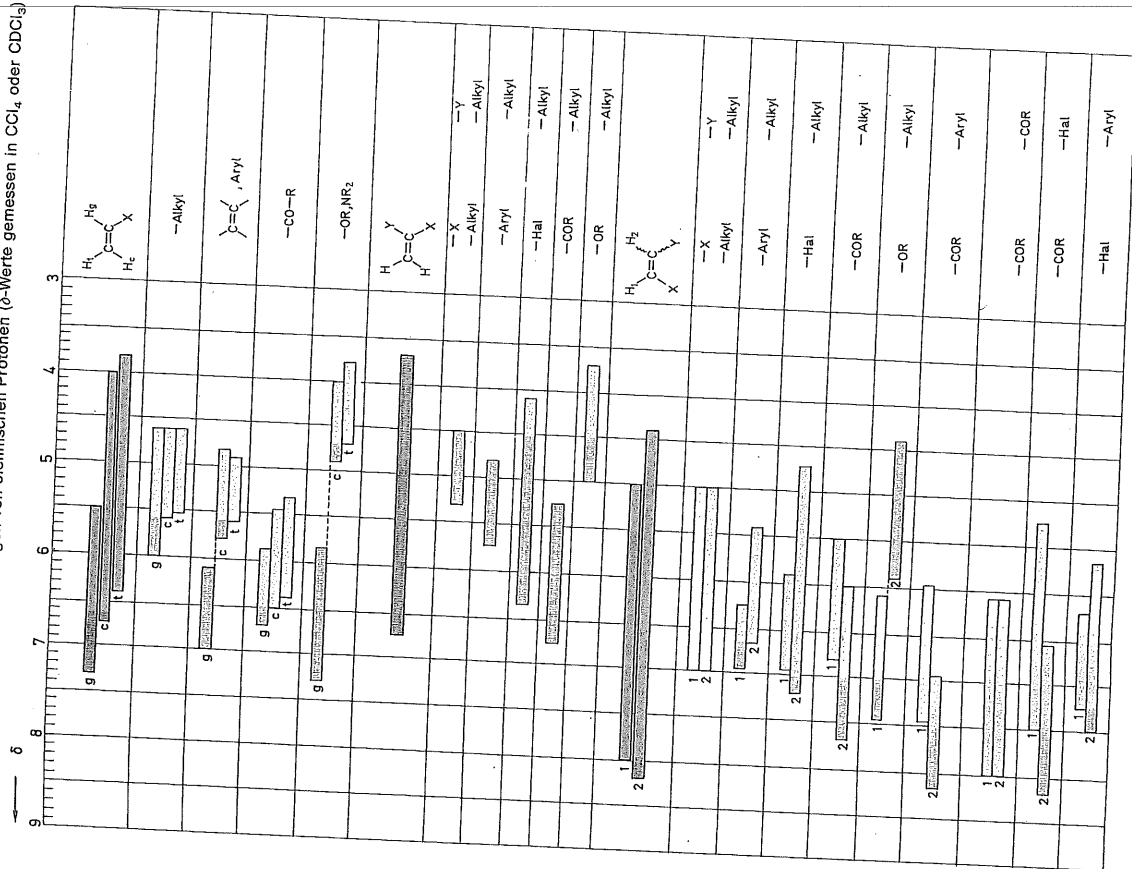
¹H CH-groups

Tab. 3.14 Chemische Verschiebungen von Methin-Protonen (δ-Werte gemessen in CCl₄ oder CDCl₃)

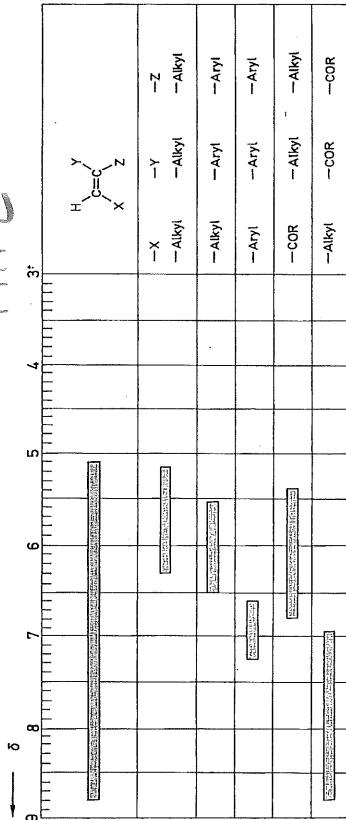


olefinic

Tab. 3.15 Chemische Verschiebungen von olefinischen Protonen (δ-Werte gemessen in CCl₄ oder CDCl₃)



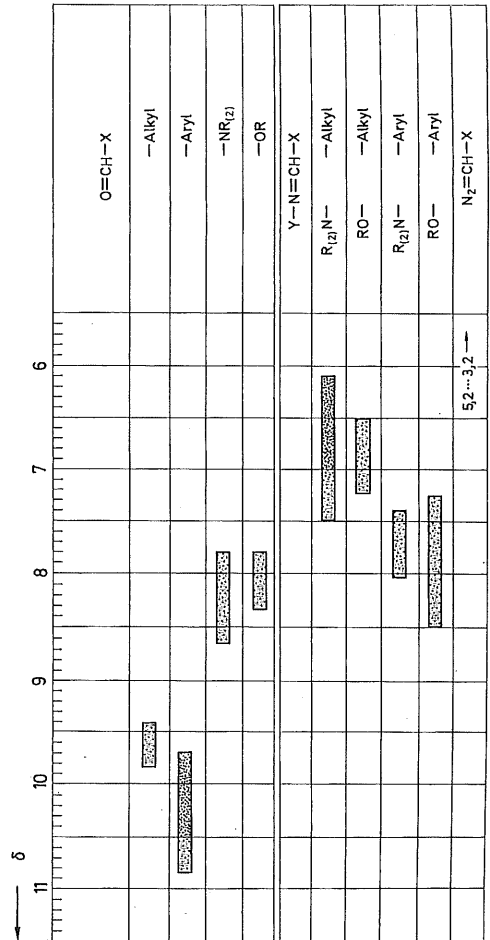
Tab. 3.15 Fortsetzung



olefinic

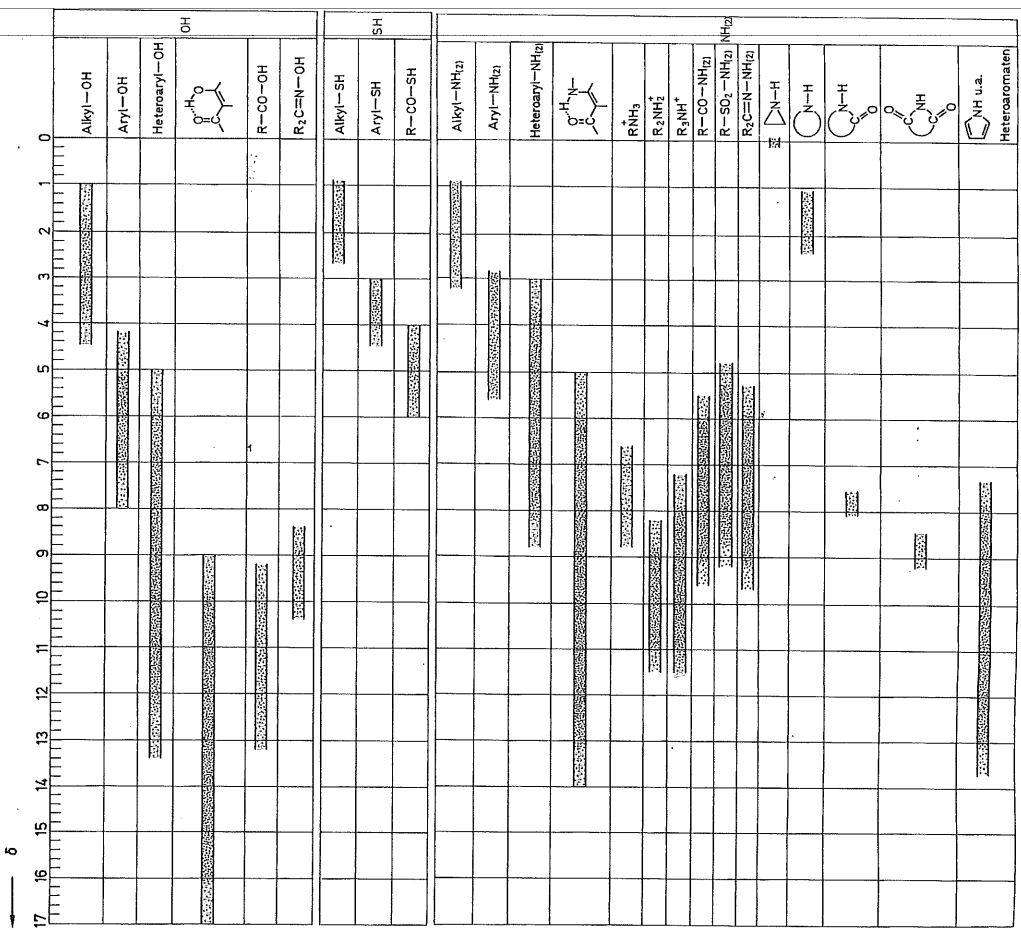
$C^{\delta}H$ and $N=C^{\delta}H$

Tab. 3.16 Chemische Verschiebungen von Aldehyd- und Aldimin-Protonen (δ -Werte gemessen in $CDCl_3$ oder CCl_4)

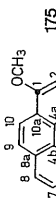


OH, NH, SH

Tab. 3.17 Chemische Verschiebungen von OH-, SH- und NH-Protonen (gemessen in CCl_4 oder $CDCl_3$)



C-13 shifts



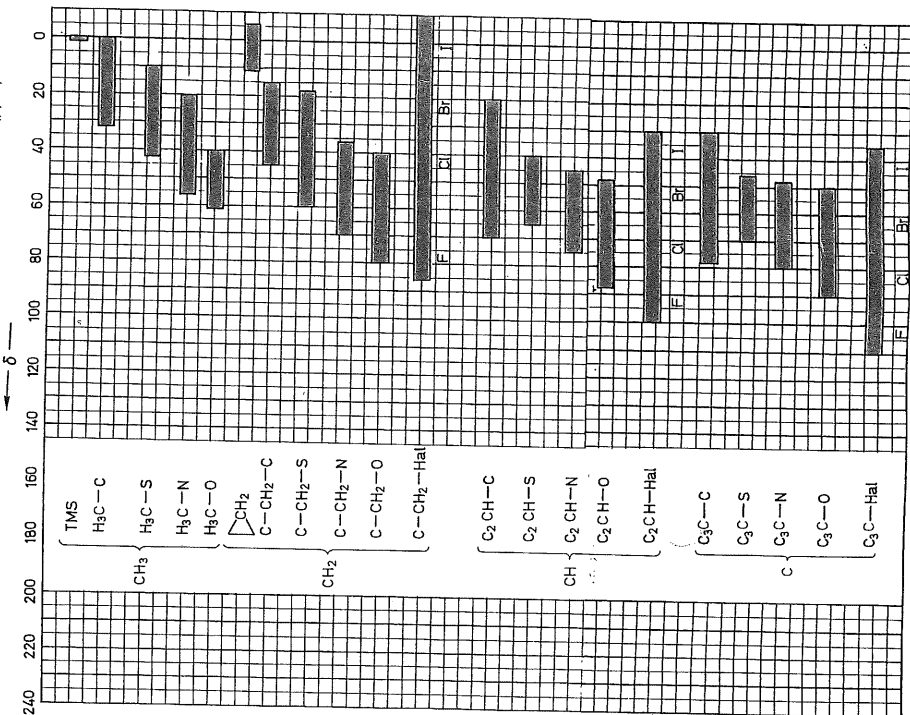
175

- $^1J(C-1, C-2) = 70,0$
- $^1J(C-1, C-10a) = 67,2$
- $^2J(C-1, C-3) = 0,6$
- $^2J(C-1, C-4a) = 2,1$
- $^2J(C-1, C-10) = 0,7$
- $^3J(C-1, C-4) = 7,7$
- $^3J(C-1, C-7) = 0,4$
- $^3J(C-1, C-4b) = 3,8$

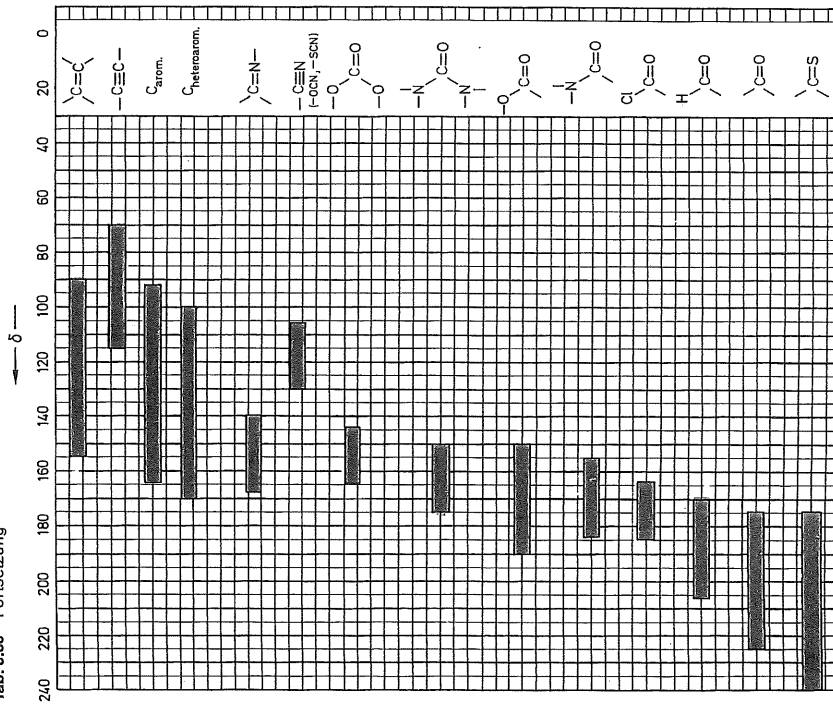
4.6 Korrelation von ¹³C-Verschiebungen mit Strukturelementen

In Tab. 3.33 sind die Bereiche der ¹³C-chemischen Verschiebungen für die wichtigsten Strukturelemente organischer Verbindungen zusammengefasst. Extreme Verschiebungswerte wurden dabei nicht berücksichtigt. Zur Interpretation von ¹³C-Spektren empfiehlt sich eine kombinierte Anwendung dieser Tabelle mit den nach Verbindungsklassen geordneten Daten des Abschn. 5 (s. S. 171) und den in Abschn. 4.7 (s. S. 150) beschriebenen Inkrement-Systemen.

Tab. 3.33 ¹³C-Verschiebungsbereiche wichtiger Strukturelemente; δ-Werte (ppm)



Tab. 3.33 Fortsetzung



Befinden sich mehrere funktionelle Gruppen an einem gesättigten C-Atom, dann kann man in erster Näherung eine Additivität der Verschiebungseffekte voraussetzen (s. auch Abschn. 4.7).

Zu dem Einfluß von funktionellen Gruppen an (C=O)-Bindungen oder aromatischen Ringen, Abschn. 4.2 (S. 135) und 4.7 (S. 150).

Bereits Tab. 3.33 bringt zum Ausdruck, daß die chemische Verschiebung von Carbonyl-Kohlenstoffen stark von der Substanzklasse abhängt. Ein expliziter Vergleich ist anhand der δ-Werte der Tab. 3.34 möglich.

Konjugation von Doppelbindungen bewirkt nur geringe Veränderungen – es sei dem Ladungsverschiebungswirkung. Zwei Beispiele mögen das belegen (s. Cyclohexen (99)/1,3-Cyclohexadien (66) und (99)/Cyclohexanon (173)/2-Cyclohexen-1-on (176):

