TABELLA 4.4 Parametri empirici di spostamento chimico ^{13}C per alcuni idrocarburi lineari e ramificati.

Atomi ^{13}C	Spostamento (ppm) (A)
α	9.1
β	9.4
γ	−2.5
δ	0.3
ε	0.1
1°(3°)[a]	−1.1
1°(4°)[a]	−3.4
2°(3°)[a]	−2.5
2°(4°)	−7.2
3°(2°)	−3.7
3°(3°)	−9.5
4°(1°)	−1.5
4°(2°)	−8.4

[a] Le notazioni 1°(3°) e 1°(4°) si riferiscono a un gruppo CH_3 legato rispettivamente a un gruppo R_2CH e a un gruppo R_3C. La notazione 2°(3°) si riferisce a un gruppo RCH_2 legato a un gruppo R_2CH, e così via.

$$\partial = -2.5 + \sum nA$$

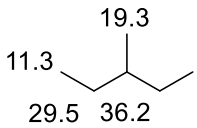
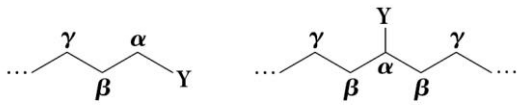


TABELLA 4.5 Spostamenti chimici ^{13}C per alcuni alcani lineari e ramificati (ppm relativi a TMS).

Composto	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
Metano	–2.5				
Etano	5.7				
Propano	15.8	16.3			
Butano	13.4	25.2			
Pentano	13.9	22.8	34.7		
Esano	14.1	23.1	32.2		
Eptano	14.1	23.2	32.6	29.7	
Ottano	14.2	23.2	32.6	29.9	
Nonano	14.2	23.3	32.6	30.0	30.3
Decano	14.2	23.2	32.6	31.1	30.5
Isobutano	24.5	25.4			
Isopentano	22.2	31.1	32.0	11.7	
Isoesano	22.7	28.0	42.0	20.9	14.3
Neopentano	31.7	28.1			
2,2-dimetilbutano	29.1	30.6	36.9	8.9	
3-metilpentano	11.5	29.5	36.9	(18.8, 3-CH_3)	
2,3-dimetilbutano	19.5	34.3			
2,2,3-trimetilbutano	27.4	33.1	38.3	16.1	
2,3-dimetilpentano	7.0	25.3	36.3	(14.6, 3-CH_3)	

TABELLA 4.6 Effetti incrementali del sostituente Y (ppm) negli alcani dovuti alla sostituzione di H con Y. Y può essere terminale o interno.[a]



Terminale Interno

	α		β		
Y	Terminale	Interno	Terminale	Interno	γ
CH_3	9	6	10	8	−2
$CH{=}CH_2$	20		6		−0.5
$C{\equiv}CH$	4.5		5.5		−3.5
COOH	21	16	3	2	−2
COO^-	25	20	5	3	−2
COOR	20	17	3	2	−2
COCl	33	28		2	
$CONH_2$	22		2.5		−0.5
COR	30	24	1	1	−2
CHO	31				−2
Fenile	23	17	9	7	−2
OH	48	41	10	8	−5
OR	58	51	8	5	−4
OCOR	51	24	6	5	−3
NH_2	29	24	11	10	
NH_3^+	26	31	8	6	−5
NHR	37		8	6	−4
NR_2	42		6		−3
NR_3^+	31		5		−7
NO_2	63	57	4	4	
CN	4	1	3	3	−3
SH	11	11	12	11	−4
SR	20		7		−3
F	68	63	9	6	−4
Cl	31	32	11	10	−4
Br	20	25	11	10	−3
I	−6	4	11	12	−1

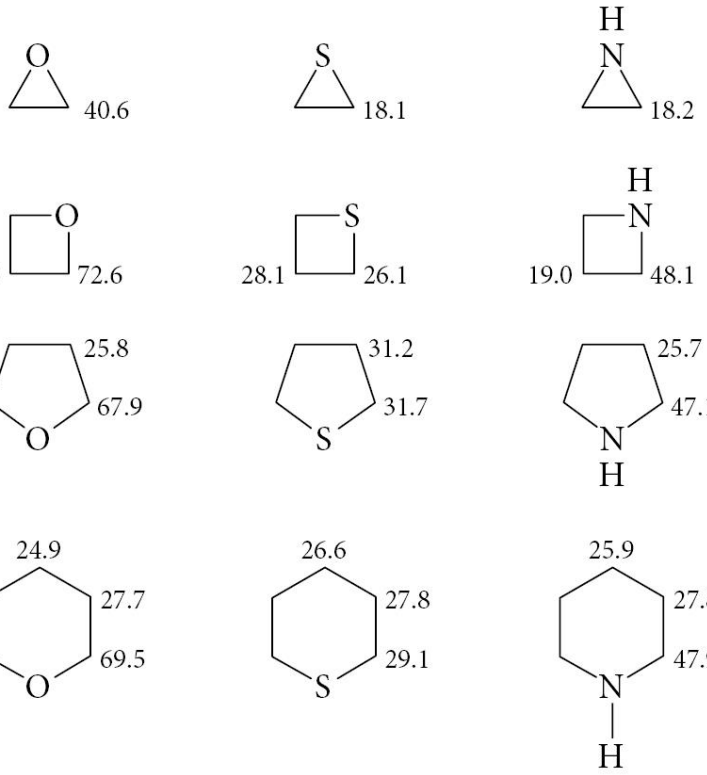
[a] Si addizionino questi incrementi ai valori di spostamento chimico dell'appropriato atomo di carbonio riportati in tabella 4.5 o ai valori di spostamento chimico calcolati in base alla tabella 4.4.
Fonte: Wehrli, F.W. *et al.* (1983).

TABELLA 4.7 Spostamenti chimici ^{13}C dei cicloalcani (ppm riferiti a TMS).

C_3H_6	−2.9	C_7H_{14}	28.4
C_4H_8	22.4	C_8H_{16}	26.9
C_5H_{10}	25.6	C_9H_{18}	26.1
C_6H_{12}	26.9	$C_{10}H_{20}$	25.3

TABELLA 4.8 Spostamenti chimici di eterocicli saturi (ppm riferiti a TMS, campione puro).

Non sostituiti



Sostituiti

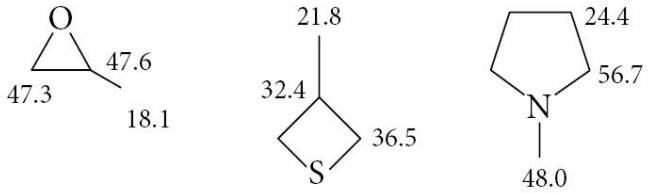


TABELLA 4.9 Spostamenti chimici ^{13}C di alcheni e cicloalcheni (ppm riferiti a TMS).

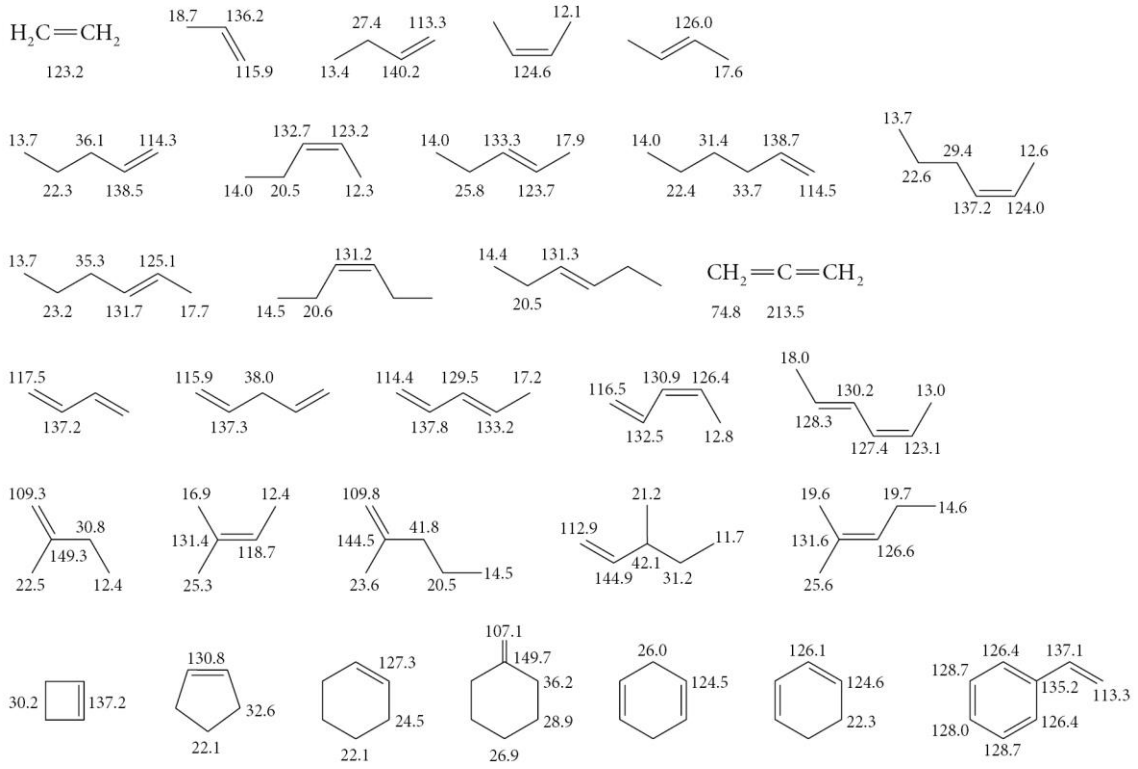


TABELLA 4.10 Spostamenti chimici ^{13}C di alcheni sostituiti (ppm riferiti a TMS).

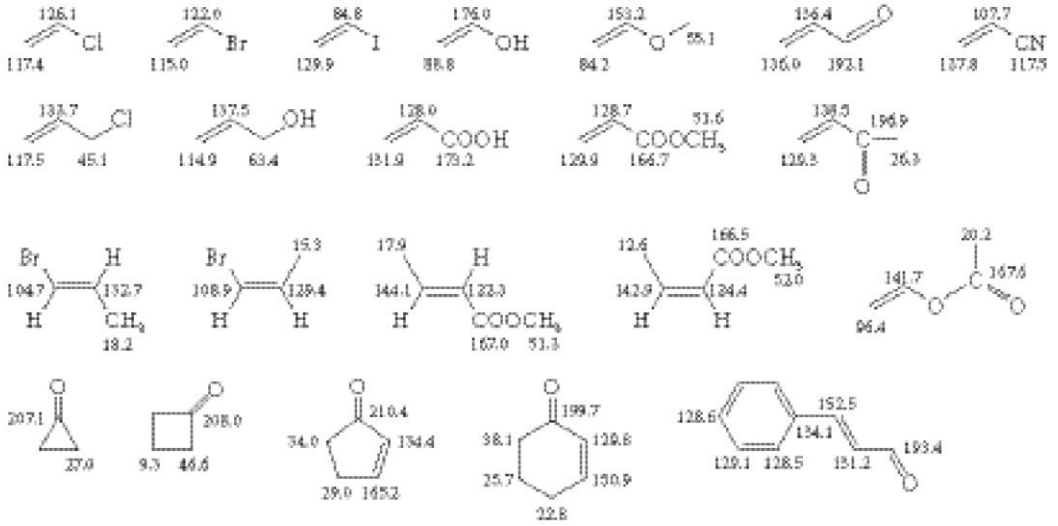


TABELLA 4.11 Spostamenti chimici ^{13}C di alchini (ppm riferiti a TMS).

Composto	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5	C-6
1-butino	71.9	86.0	12.3	13.8		
2-butino	3.3	73.6				
1-esino	68.1	84.5	18.1	30.7	21.9	13.5
2-esino	2.7	73.7	76.9	19.6	21.6	12.1
3-esino	15.4	13.0	80.9			

TABELLA 4.12 Variazioni incrementali di spostamento chimico per atomi di carbonio aromatici in benzeni monosostituiti (ppm rispetto al benzene a 128.5 ppm). Spostamenti chimici dell'atomo di carbonio dei sostituenti (ppm rispetto a TMS)[a].

Sostituente	C-1 (sito di legame)	C-2	C-3	C-4	C del sostituente (ppm riferiti a TMS)
H	0.0	0.0	0.0	0.0	
CH_3	9.3	0.7	−0.1	−2.9	2.3
CH_2CH_3	15.6	−0.5	0.0	−2.6	29.2 (CH_2), 15.8 (CH_3)
$CH(CH_3)_2$	20.1	−2.0	0.0	−2.5	34.4 (CH), 24.1 (CH_3)
$C(CH_3)_3$	22.2	−3.4	−0.4	−3.1	34.5 (C), 31.4 (CH_3)
$CH{=}CH_2$	9.1	−2.4	0.2	−0.5	137.1 (CH), 113.3 (CH_2)
$C{\equiv}CH$	−5.8	6.9	0.1	0.4	84.0 (C), 77.8 (CH)
C_6H_6	12.1	−1.8	−0.1	−1.6	
CH_2OH	13.3	−0.8	−0.6	−0.4	64.5
$CH_2O(C{=}O)CH_3$	7.7	~0.0	~0.0	~0.0	20.7 (CH_3), 169.7 (C=O)
OH	26.6	−12.7	1.6	−7.3	
OCH_3	31.4	−14.4	1.0	−7.7	54.1
OC_6H_5	29.0	−9.4	1.6	−5.3	
$O(C{=}O)CH_3$	22.4	−7.1	−0.4	−3.2	23.9 (CH_3), 169.7 (C=O)
$(C{=}O)H$	8.2	1.2	0.6	5.8	192
$(C{=}O)CH_3$	7.8	−0.4	−0.4	2.8	24.6 (CH_3), 195.7 (C=O)
$(C{=}O)C_6H_5$	9.1	1.5	−0.2	3.8	196.4 (C=O)
$(C{=}O)CF_3$	−5.6	1.8	0.7	6.7	
(C=O)OH	2.9	1.3	0.4	4.3	168
$(C{=}O)OCH_3$	2.0	1.2	−0.1	4.8	51.0 (CH_3), 166.8 (C=O)
(C=O)Cl	4.6	2.9	0.6	7.0	168.5
$(C{=}O)NH_2$	5.0	−1.2	0.0	3.4	
$C{\equiv}N$	−16	3.6	0.6	4.3	119.5
NH_2	19.2	−12.4	1.3	−9.5	
$N(CH_3)_2$	22.4	−15.7	0.8	−11.8	40.3
$NH(C{=}O)CH_3$	11.1	−9.9	0.2	−5.6	
NO_2	19.6	−5.3	0.9	6.0	
$N{=}C{=}O$	5.7	−3.6	1.2	−2.8	129.5
F	35.1	−14.3	0.9	−4.5	
Cl	6.4	0.2	1.0	−2.0	
Br	−5.4	3.4	2.2	−1.0	
I	−32.2	9.9	2.6	−7.3	
CF_3	2.6	−3.1	0.4	3.4	
SH	2.3	0.6	0.2	−3.3	
SCH_3	10.2	−1.8	0.4	−3.6	15.9
SO_2NH_2	15.3	−2.9	0.4	3.3	
$Si(CH_3)_3$	13.4	4.4	−1.1	−1.1	

[a] *Vedi* Ewing, D.E. (1979), *Org. Magn. Reson.*, **12**, p. 499. Sono riportati 709 valori di spostamento chimico di benzeni monosostituiti.

TABELLA 4.14 Spostamenti chimici di atomi di carbonio di alcoli (ppm riferiti a TMS).

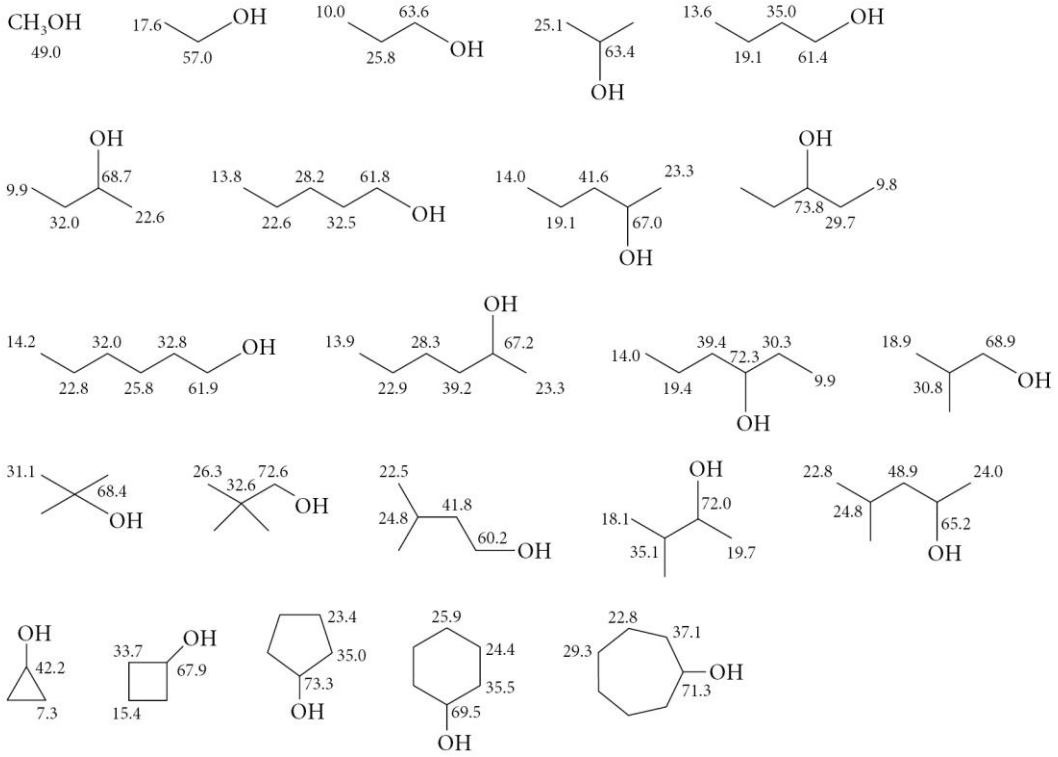


TABELLA 4.15 Spostamenti chimici di atomi di carbonio di eteri, acetali ed epossidi (ppm riferiti a TMS).

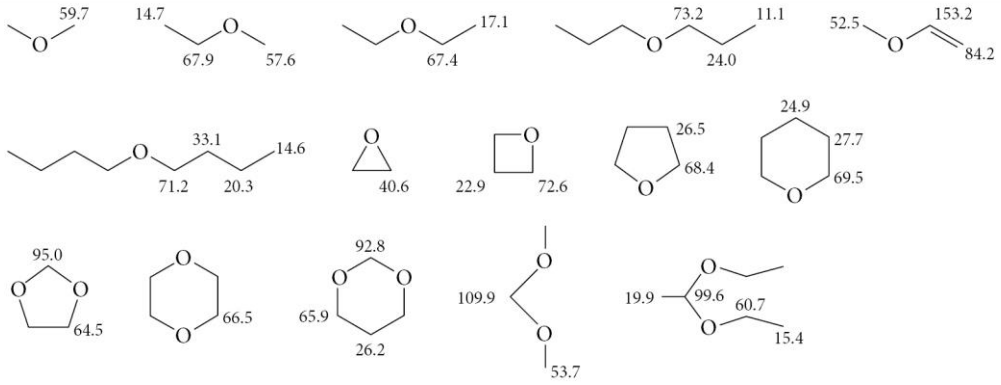


TABELLA 4.16 Spostamenti chimici di atomi di carbonio di alogenuri alchilici (composti puri, ppm riferiti a TMS).

Composto	C-1	C-2	C-3
CH_4	–2.5		
CH_3F	75.4		
CH_3Cl	24.9		
CH_2Cl_2	54.0		
$CHCl_3$	77.5		
CCl_4	96.5		
CH_3Br	10.0		
CH_2Br_2	21.4		
$CHBr_3$	12.31		
CBr_4	–28.5		
CH_3I	–20.7		
CH_2I_2	–54.0		
CHI_3	–139.9		
CI_4	–292.5		
CH_3CH_2F	79.3	14.6	
CH_3CH_2Cl	39.9	18.7	
CH_3CH_2Br	28.3	20.3	
CH_3CH_2I	–0.2	21.6	
$CH_3CH_2CH_2Cl$	46.7	26.5	11.5
$CH_3CH_2CH_2Br$	35.7	26.8	13.2
$CH_3CH_2CH_2I$	10.0	27.6	16.2

TABELLA 4.17 Spostamenti chimici ^{13}C di ammine acicliche e alicicliche (in $CDCl_3$, ppm riferiti a TMS).

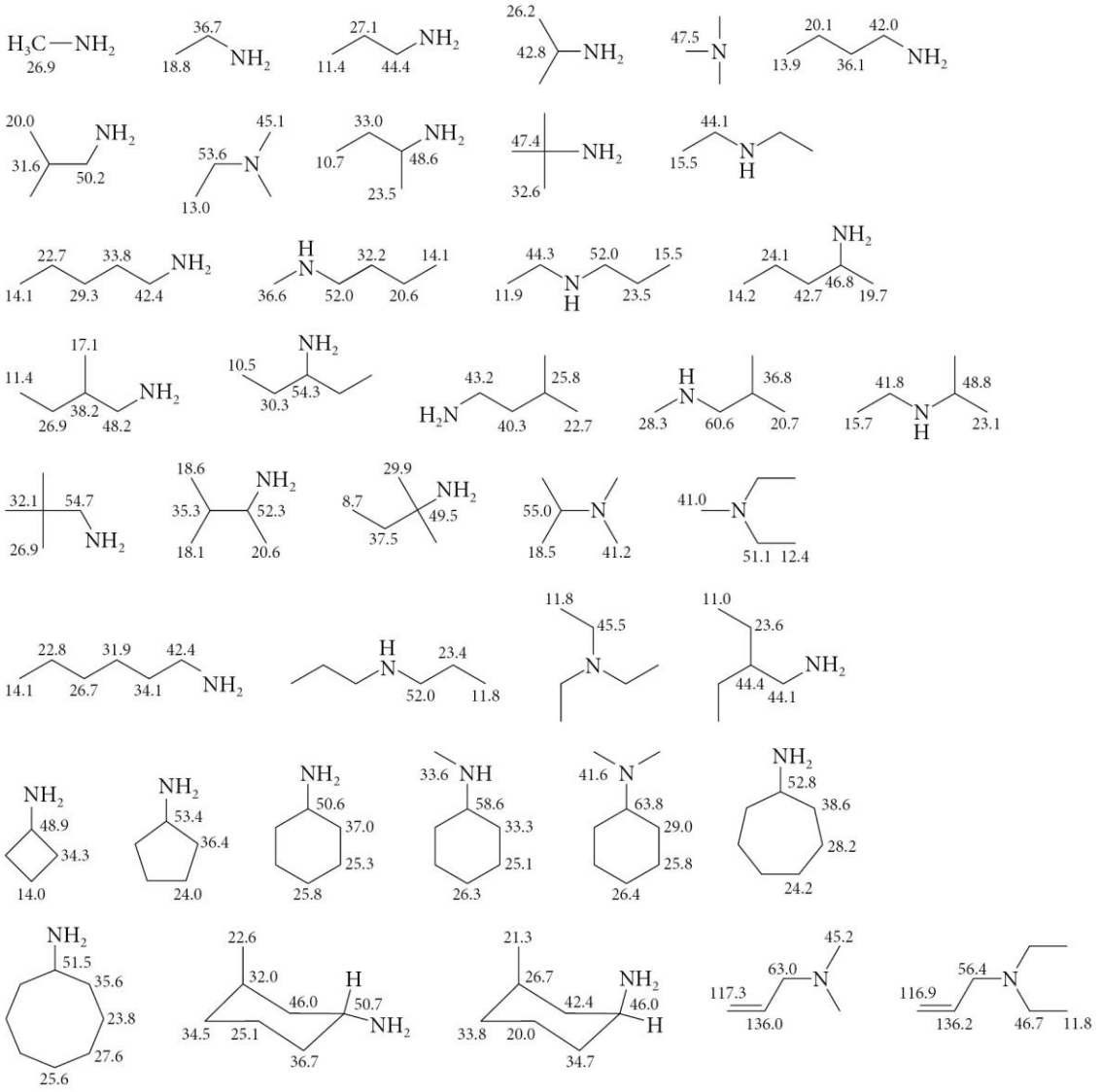


TABELLA 4.19 Spostamenti chimici ^{13}C del gruppo C=O e di altri atomi di carbonio di chetoni e aldeidi (ppm riferiti a TMS).

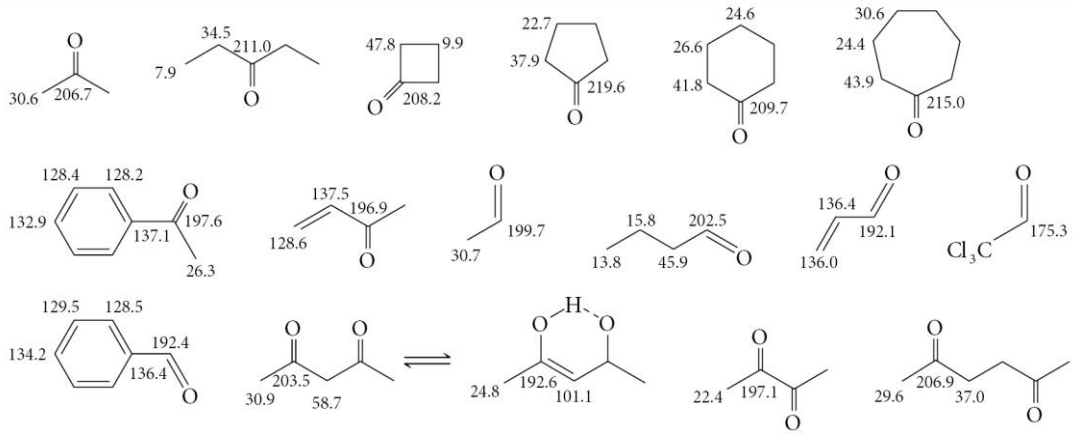


TABELLA 4.20 Spostamenti chimici ^{13}C del gruppo C=O e di altri atomi di carbonio di acidi carbossilici, esteri, lattoni, cloruri, anidridi, carbammati e nitrili (ppm riferiti a TMS).