

# Tabelle per il calcolo empirico dei chemical shift del $^{13}\text{C}$

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

Atomi $^{13}\text{C}$	Spostamento (ppm) (A)
$\alpha$	9.1
$\beta$	9.4
$\gamma$	-2.5
$\delta$	0.3
$\varepsilon$	0.1
$1^\circ(3^\circ)^a$	-1.1
$1^\circ(4^\circ)^a$	-3.4
$2^\circ(3^\circ)^a$	-2.5
$2^\circ(4^\circ)$	-7.2
$3^\circ(2^\circ)$	-3.7
$3^\circ(3^\circ)$	-9.5
$4^\circ(1^\circ)$	-1.5
$4^\circ(2^\circ)$	-8.4

<sup>a</sup> Le notazioni  $1^\circ(3^\circ)$  e  $1^\circ(4^\circ)$  si riferiscono a un gruppo  $\text{CH}_3$  legato rispettivamente a un gruppo  $\text{R}_2\text{CH}$  e a un gruppo  $\text{R}_3\text{C}$ . La notazione  $2^\circ(3^\circ)$  si riferisce a un gruppo  $\text{RCH}_2$  legato a un gruppo  $\text{R}_2\text{CH}$ , e così via.

**TABELLA 4.5** Spostamenti chimici  $^{13}\text{C}$  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 <sub>3</sub> )	
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 <sub>3</sub> )	

**TABELLA 4.6** Effetti incrementali del sostituente Y (ppm) negli alcani dovuti alla sostituzione di H con Y. Y può essere terminale o interno.<sup>a</sup>

Y	$\alpha$		$\beta$		$\gamma$
	Terminale	Interno	Terminale	Interno	
CH <sub>3</sub>	9	6	10	8	-2
CH=CH <sub>2</sub>	20		6		-0.5
C≡CH	4.5		5.5		-3.5
COOH	21	16	3	2	-2
COO <sup>-</sup>	25	20	5	3	-2
COOR	20	17	3	2	-2
COCl	33	28		2	
CONH <sub>2</sub>	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 <sub>2</sub>	29	24	11	10	
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	26	31	8	6	-5
NHR	37		8	6	-4
NR <sub>2</sub>	42		6		-3
NR <sub>3</sub> <sup>+</sup>	31		5		-7
NO <sub>2</sub>	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

<sup>a</sup> 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  $^{13}\text{C}$  dei cicloalcani (ppm riferiti a TMS).

---

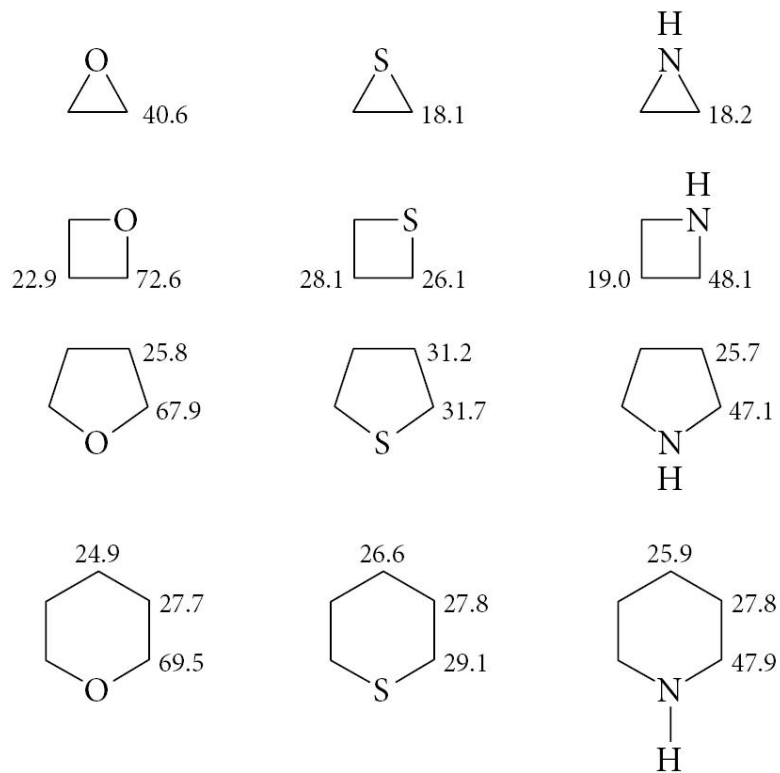
$\text{C}_3\text{H}_6$	-2.9	$\text{C}_7\text{H}_{14}$	28.4
$\text{C}_4\text{H}_8$	22.4	$\text{C}_8\text{H}_{16}$	26.9
$\text{C}_5\text{H}_{10}$	25.6	$\text{C}_9\text{H}_{18}$	26.1
$\text{C}_6\text{H}_{12}$	26.9	$\text{C}_{10}\text{H}_{20}$	25.3

---

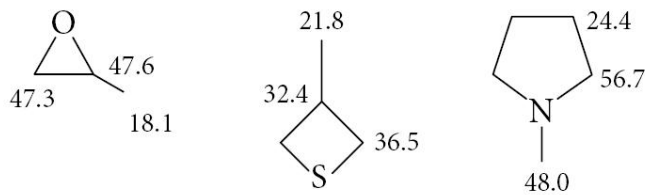
**TABELLA 4.8** Spostamenti chimici di eterocicli saturi (ppm riferiti a TMS, campione puro).

---

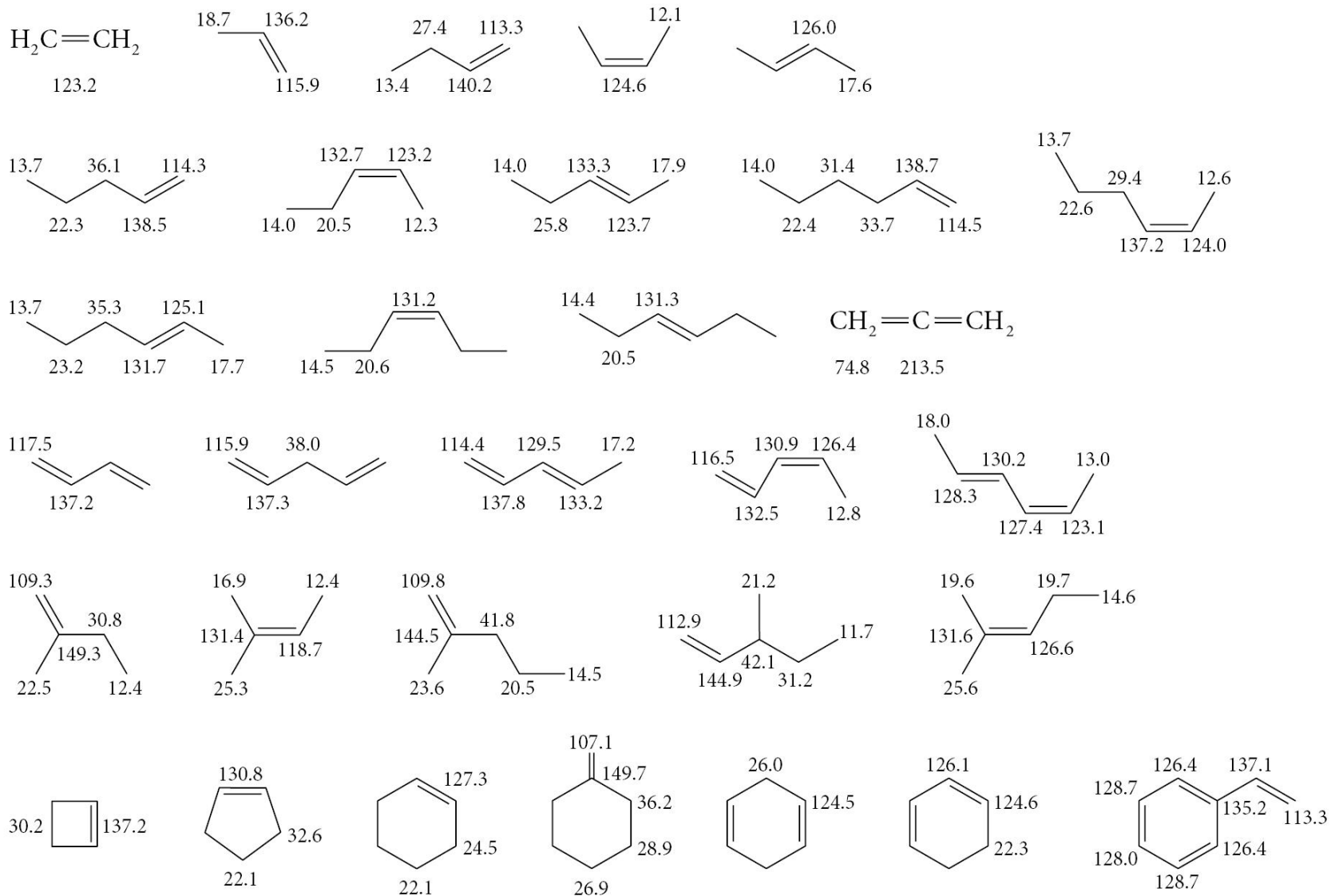
Non sostituiti



Sostituiti



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



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

<b>Composto</b>	<b>C-1</b>	<b>C-2</b>	<b>C-3</b>	<b>C-4</b>	<b>C-5</b>	<b>C-6</b>
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)<sup>a</sup>.

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 <sub>3</sub>	9.3	0.7	-0.1	-2.9	2.3
CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	15.6	-0.5	0.0	-2.6	29.2 (CH <sub>2</sub> ), 15.8 (CH <sub>3</sub> )
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20.1	-2.0	0.0	-2.5	34.4 (CH), 24.1 (CH <sub>3</sub> )
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	22.2	-3.4	-0.4	-3.1	34.5 (C), 31.4 (CH <sub>3</sub> )
CH=CH <sub>2</sub>	9.1	-2.4	0.2	-0.5	137.1 (CH), 113.3 (CH <sub>2</sub> )
C≡CH	-5.8	6.9	0.1	0.4	84.0 (C), 77.8 (CH)
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	12.1	-1.8	-0.1	-1.6	
CH <sub>2</sub> OH	13.3	-0.8	-0.6	-0.4	64.5
CH <sub>2</sub> O(C=O)CH <sub>3</sub>	7.7	~0.0	~0.0	~0.0	20.7 (CH <sub>3</sub> ), 169.7 (C=O)
OH	26.6	-12.7	1.6	-7.3	
OCH <sub>3</sub>	31.4	-14.4	1.0	-7.7	54.1
OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	29.0	-9.4	1.6	-5.3	
O(C=O)CH <sub>3</sub>	22.4	-7.1	-0.4	-3.2	23.9 (CH <sub>3</sub> ), 169.7 (C=O)
(C=O)H	8.2	1.2	0.6	5.8	192
(C=O)CH <sub>3</sub>	7.8	-0.4	-0.4	2.8	24.6 (CH <sub>3</sub> ), 195.7 (C=O)
(C=O)C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	9.1	1.5	-0.2	3.8	196.4 (C=O)
(C=O)CF <sub>3</sub>	-5.6	1.8	0.7	6.7	
(C=O)OH	2.9	1.3	0.4	4.3	168
(C=O)OCH <sub>3</sub>	2.0	1.2	-0.1	4.8	51.0 (CH <sub>3</sub> ), 166.8 (C=O)
(C=O)Cl	4.6	2.9	0.6	7.0	168.5
(C=O)NH <sub>2</sub>	5.0	-1.2	0.0	3.4	
C≡N	-16	3.6	0.6	4.3	119.5
NH <sub>2</sub>	19.2	-12.4	1.3	-9.5	
N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	22.4	-15.7	0.8	-11.8	40.3
NH(C=O)CH <sub>3</sub>	11.1	-9.9	0.2	-5.6	
NO <sub>2</sub>	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 <sub>3</sub>	2.6	-3.1	0.4	3.4	
SH	2.3	0.6	0.2	-3.3	
SCH <sub>3</sub>	10.2	-1.8	0.4	-3.6	15.9
SO <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	15.3	-2.9	0.4	3.3	
Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	13.4	4.4	-1.1	-1.1	

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

**TABELLA 4.13** Spostamenti chimici di atomi di carbonio in composti eteroaromatici (ppm riferiti a TMS).

Composto	C-2	C-3	C-4	C-5	C-6	Sostituente
Furano	142.7	109.6				
2-Metilfurano	152.2	106.2	110.9	141.2		13.4
Furan-2-carbossaldeide	153.3	121.7	112.9	148.5		178.2
Metil 2-furoato	144.8	117.9	111.9	146.4		159.1 (C=O), 51.8 (CH <sub>3</sub> )
Pirrolo	118.4	108.0				
2-Metilpirrolo	127.2	105.9	108.1	116.7		12.4
Pirrolo-2-carbossaldeide	134.0	123.0	112.0	129.0		178.9
Tiofene	124.4	126.2				
2-Metiltiofene	139.0	124.7	126.4	122.6		14.8
Tiofene-2-carbossaldeide	143.3	136.4	128.1	134.6		182.8
Tiazolo	152.2		142.4	118.5		
Imidazolo	136.2		122.3	122.3		
Piridina	150.2	123.9	135.9			
Pirimidina	159.2		157.4	122.1	157.4	
Pirazina	145.6					
2-Metilpirazina	154.0	141.8 <sup>a</sup>	143.8 <sup>a</sup>	144.7 <sup>a</sup>		21.6

<sup>a</sup> Assegnamento incerto.

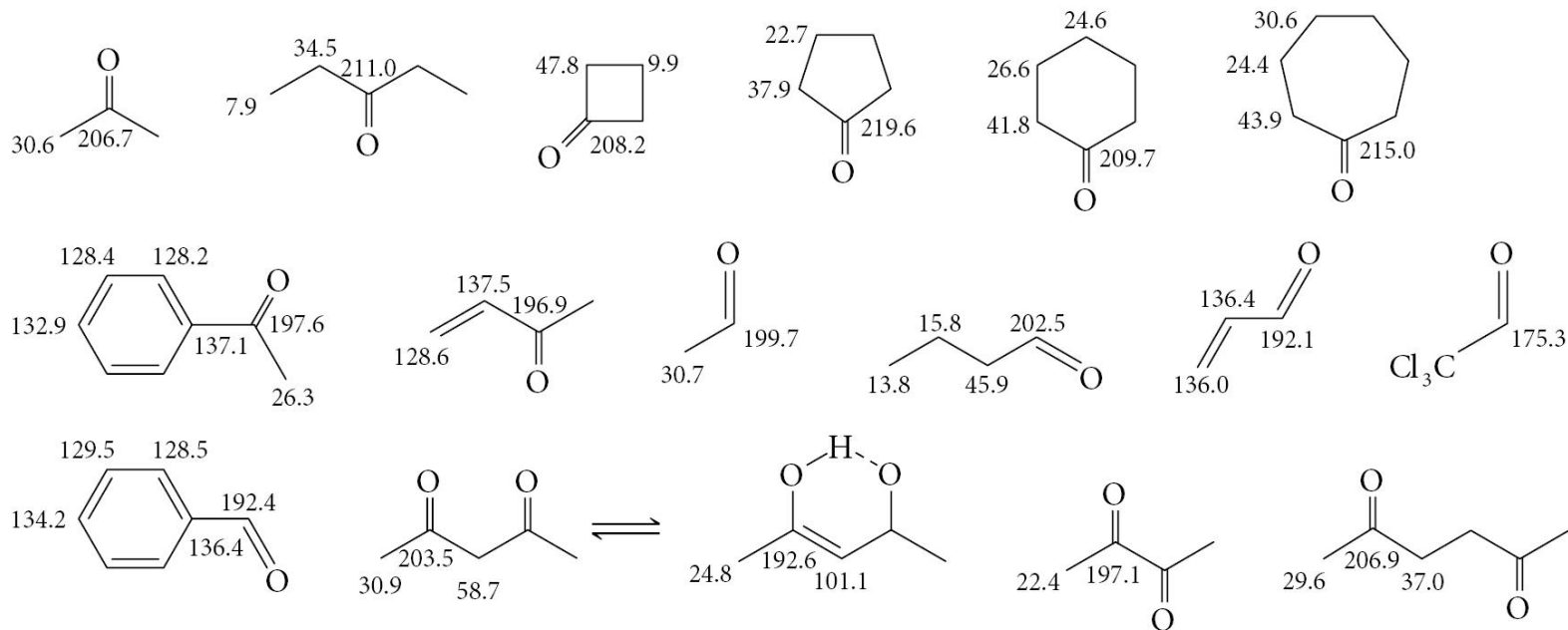
**TABELLA 4.16** Spostamenti chimici di atomi di carbonio di alogenuri alchilici (composti puri, ppm riferiti a TMS).

Composto	C-1	C-2	C-3
CH <sub>4</sub>	-2.5		
CH <sub>3</sub> F	75.4		
CH <sub>3</sub> Cl	24.9		
CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	54.0		
CHCl <sub>3</sub>	77.5		
CCl <sub>4</sub>	96.5		
CH <sub>3</sub> Br	10.0		
CH <sub>2</sub> Br <sub>2</sub>	21.4		
CHBr <sub>3</sub>	12.31		
CBr <sub>4</sub>	-28.5		
CH <sub>3</sub> I	-20.7		
CH <sub>2</sub> I <sub>2</sub>	-54.0		
CHI <sub>3</sub>	-139.9		
CI <sub>4</sub>	-292.5		
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F	79.3	14.6	
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Cl	39.9	18.7	
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Br	28.3	20.3	
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> I	-0.2	21.6	
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	46.7	26.5	11.5
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Br	35.7	26.8	13.2
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> I	10.0	27.6	16.2

**TABELLA 4.18** Spostamenti chimici  $^{13}\text{C}$  di tioli, solfuri e disolfuri (ppm riferiti a TMS).

Composto	C-1	C-2	C-3
$\text{CH}_3\text{SH}$	6.5		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$	19.8	17.3	
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SH}$	26.4	27.6	12.6
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SH}$	23.7	35.7	21.0
$(\text{CH}_3)_2\text{S}$	19.3		
$(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{S}$	25.5	14.8	
$(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{S}$	34.3	23.2	13.7
$(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{S}$	34.1	31.4	22.0
$\text{CH}_3\text{SSCH}_3$	22.0		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SSCH}_2\text{CH}_3$	32.8	14.5	

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



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

