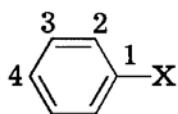


Влияние заместителей на химические сдвиги ядер  $^{13}\text{C}$  в монозамещенных бензолах (в м. д. относительно ТМС)



$$\delta_{\text{C}_i} = 128,5 + Z_i$$

Заместитель X	$Z_1$	$Z_2$	$Z_3$	$Z_4$
-H	0,0	0,0	0,0	0,0
C -CH <sub>3</sub>	9,2	0,7	-0,1	-3,0
-CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	11,7	-0,6	-0,1	-2,8
-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	10,3	-0,2	0,1	-2,7
-CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20,2	-2,2	-0,3	-2,8
-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	10,9	-0,2	-0,2	-2,8
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	18,6	-3,3	-0,4	-3,1
-циклопропил	15,1	-3,3	-0,6	-3,6
-циклопентил	17,8	-1,5	-0,4	-2,9
-циклогексил	16,3	-1,8	-0,3	-2,8
-1-адамантил	22,2	-2,9	-0,5	-3,1
-CH <sub>2</sub> F	8,5	-0,7	0,4	0,5
-CF <sub>3</sub>	2,5	-3,2	0,3	3,3
-CH <sub>2</sub> Cl	9,3	0,3	0,2	0,0
-CHCl <sub>2</sub>	11,9	-2,4	0,1	1,2
-CCl <sub>3</sub>	16,3	-1,7	-0,1	1,8
-CH <sub>2</sub> Br	9,5	0,7	0,3	0,2
-CH <sub>2</sub> I	10,5	0,0	0,0	-0,9
-CH <sub>2</sub> OH	12,4	-1,2	0,2	-1,1
-CH <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub>	8,7	-0,9	-0,1	-0,9
-CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	14,9	-1,4	-0,2	-2,0
-CH <sub>2</sub> NHCH <sub>3</sub>	12,6	-0,3	-0,3	-1,8
-CH <sub>2</sub> N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	7,8	0,5	-0,3	-1,5
-CH <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	2,2	2,2	2,2	1,2
-CH <sub>2</sub> CN	1,6	0,5	-0,8	-0,7
-CH <sub>2</sub> SH	12,5	-0,6	0,0	-1,6
-CH <sub>2</sub> SCH <sub>3</sub>	9,8	0,4	-0,1	-1,6
-CH <sub>2</sub> S(O)CH <sub>3</sub>	0,8	1,5	0,4	-0,2
-CH <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-0,1	2,1	0,6	0,6
-CH <sub>2</sub> CHO	7,4	1,3	0,5	-1,1
-CH <sub>2</sub> COCH <sub>3</sub>	5,8	0,8	0,1	-1,6
-CH <sub>2</sub> COOH	6,5	1,4	0,4	-1,2
-CH <sub>2</sub> Li	32,2	-22,0	-0,4	-24,3
-CH=CH <sub>2</sub>	8,9	-2,3	-0,1	-0,8
-C(CH <sub>3</sub> )=CH <sub>2</sub>	12,6	-3,1	-0,4	-1,2
-C≡CH	-6,2	3,6	-0,4	-0,3
-фенил	8,1	-1,1	0,5	-1,1

Заместитель X	Z <sub>1</sub>	Z <sub>2</sub>	Z <sub>3</sub>	Z <sub>4</sub>
-2-пиридил	11,2	-1,4	0,5	-1,4
-4-пиридил	9,6	-1,6	0,5	0,5
<b>H</b> -F	33,6	-13,0	1,6	-4,4
<b>a</b> -Cl	5,3	0,4	1,4	-1,9
<b>l</b> -Br	-5,4	3,3	2,2	-1,0
-I	-31,2	8,9	1,6	-1,1
<b>O</b> -OH	28,8	-12,8	1,4	-7,4
-ONa	39,6	-8,2	1,9	-13,6
-OCH <sub>3</sub>	33,5	-14,4	1,0	-7,7
-OCH=CH <sub>2</sub>	28,2	-11,5	0,7	-5,8
-O-фенил	27,6	-11,2	-0,3	-6,9
-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
-OPO(O-фенил) <sub>2</sub>	21,9	-8,4	1,2	-3,0
-OCN	25,0	-12,7	2,6	-1,0
<b>N</b> -NH <sub>2</sub>	18,2	-13,4	0,8	-10,0
-NHCH <sub>3</sub>	15,0	-16,2	0,8	-11,6
-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	16,0	-15,4	0,9	-10,5
-NH-фенил	14,7	-10,6	0,9	-10,5
-N(фенил) <sub>2</sub>	13,1	-7,0	0,9	-5,6
-NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0,1	-5,8	2,2	2,2
-NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	5,5	-4,1	1,1	0,7
-N <sup>+</sup> (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	19,5	-7,3	2,5	2,4
-N(O)(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	26,2	-8,4	0,8	0,6
-NHCOCH <sub>3</sub>	9,7	-8,1	0,2	-4,4
-NHOH	21,5	-13,1	-2,2	-5,3
-NHNH <sub>2</sub>	22,8	-16,5	0,5	-9,6
-N(NO)CH <sub>3</sub>	13,7	-9,4	0,9	-1,3
-N=CH-фенил	24,7	-6,5	1,3	-1,5
-N=NCH <sub>3</sub>	22,2	-6,2	0,5	-3,0
-NO	37,4	-7,6	0,8	7,1
-NO <sub>2</sub>	19,9	-4,9	0,9	6,1
-CN	-16,0	3,5	0,7	4,3
-NC	-1,8	-2,2	1,4	0,9
-NCO	5,1	-3,7	1,1	-2,8
-NCS	3,0	-2,7	1,3	-1,0
-N <sup>+</sup> ≡N	-12,7	6,0	5,7	16,0
<b>S</b> -SH	4,0	0,7	0,3	-3,2
-SCH <sub>3</sub>	10,0	-1,9	0,2	-3,6
-SC(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	4,5	9,0	-0,3	0,0
-S(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	-1,0	3,1	2,2	6,3
-SCH=CH <sub>2</sub>	5,8	2,0	0,2	-1,8
-S-фенил	7,3	2,5	0,6	-1,5
-S-S-фенил	7,5	-1,3	0,8	-1,1

Заместитель X	Z <sub>1</sub>	Z <sub>2</sub>	Z <sub>3</sub>	Z <sub>4</sub>
-S(O)CH <sub>3</sub>	17,6	-5,0	1,1	2,4
-SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	12,3	-1,4	0,8	5,1
-SO <sub>2</sub> OH	15,0	-2,2	1,3	3,8
-SO <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub>	6,4	-0,6	1,5	5,9
-SO <sub>2</sub> F	4,6	0,0	1,5	7,5
-SO <sub>2</sub> Cl	15,6	-1,7	1,2	6,8
-SO <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	10,8	-3,0	0,3	3,2
-SCN	-3,7	2,5	2,2	2,2
<b>O</b> -CHO	8,2	1,2	0,5	5,8
<b>  </b> -COCH <sub>3</sub>	8,9	0,1	-0,1	4,4
<b>C</b> -COCF <sub>3</sub>	-5,6	1,8	0,7	6,7
<b>∧</b> -COC≡CH	7,4	1,0	0,0	5,9
-CO-фенил	9,3	1,6	-0,3	3,7
-COOH	2,1	1,6	-0,1	5,2
-COONa	9,7	4,6	2,2	4,6
-COOCH <sub>3</sub>	2,0	1,2	-0,1	4,3
-CONH <sub>2</sub>	5,0	-1,2	0,1	3,4
-CON(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	6,0	-1,5	-0,2	1,0
-COF	4,2	1,6	-0,7	5,3
-COCl	4,7	2,7	0,3	6,6
-COSH	6,2	-0,6	0,2	5,4
-CH=NCH <sub>3</sub>	8,8	0,5	0,1	2,3
-CS-фенил	18,7	1,0	-0,6	2,4
-CS-(1-пиперидил)	15,0	-3,1	-0,2	-0,2
-Li	-43,2	-12,7	2,4	3,1
-MgBr	-35,8	-11,4	2,7	4,0
<b>Si</b> -SiH <sub>3</sub>	-0,5	7,3	-0,4	1,3
-SiH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	4,8	6,3	-0,5	1,0
-Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	11,6	4,9	-0,7	0,4
-Si(фенил) <sub>3</sub>	5,8	7,9	-0,6	1,1
-SiCl <sub>3</sub>	3,0	4,6	0,1	4,2
-Ge(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	13,7	4,5	-0,5	-0,2
-Sn(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	13,2	7,2	-0,4	-0,4
-Pb(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	20,1	8,0	-0,1	-1,0
<b>P</b> -P(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	13,6	1,6	-0,6	-1,0
-P(фенил) <sub>2</sub>	8,9	5,2	0,0	0,1
-P <sup>+</sup> (фенил) <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-9,7	5,2	2,0	6,7
-PO(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2,5	1,1	0,1	3,0
-PO(фенил) <sub>2</sub>	5,8	3,9	-0,1	3,0
-PO(OH) <sub>2</sub>	-1,9	3,6	1,5	5,6
-PO(OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1,6	3,6	-0,2	3,4
-PS(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	6,7	2,0	0,2	2,9
-PS(OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	6,1	2,8	-0,4	3,4
-AsH <sub>2</sub>	1,7	7,9	0,8	0,0
-As(фенил) <sub>2</sub>	11,1	5,0	0,1	-0,1
-AsO(OH) <sub>2</sub>	3,8	1,6	0,8	4,5
-SeCH=CH <sub>2</sub>	0,7	4,7	0,4	-1,4
-SeCN	-5,3	5,1	2,9	2,1
-Sb(фенил) <sub>2</sub>	9,8	7,7	0,3	0,0
-Hg-фенил	41,6	9,3	-0,9	-1,6
-HgCl	22,5	8,0	-0,6	-0,9