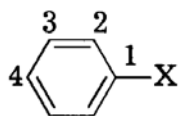


Влияние заместителей на химические сдвиги ядер ^1H в монозамещенных бензолах (δ в м. д. относительно ТМС)

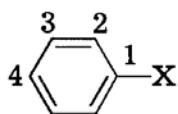


$$\delta_{\text{H}_i} = 7,26 + Z_i$$

Заместитель X	Z_2	Z_3	Z_4
-H	0,00	0,00	0,00
C -CH ₃	-0,20	-0,12	-0,21
-CH ₂ CH ₃	-0,14	-0,05	-0,18
-CH(CH ₃) ₂	-0,13	-0,08	-0,18
-C(CH ₃) ₃	0,03	-0,08	-0,20
-CF ₃	0,19	-0,07	0,00
-CCl ₃	0,55	-0,07	-0,09
-CH ₂ OH	-0,07	-0,07	-0,07
-CH=CH ₂	0,04	-0,05	-0,12
-CH=CH-фенил (<i>транс</i>)	0,16	0,00	-0,15
-C≡CH	0,16	-0,03	-0,02
-C≡C-фенил	0,20	-0,04	-0,07
-фенил	0,22	0,06	-0,04
-2-пиридил	0,73	0,09	0,02
H -F	-0,29	-0,02	-0,23
a -Cl	0,01	-0,06	-0,12
l -Br	0,17	-0,11	-0,06
-I	0,38	-0,23	-0,01
O -OH	-0,53	-0,17	-0,44
-OCH ₃	-0,49	-0,11	-0,44
-OCH ₂ CH=CH ₂	-0,45	-0,13	-0,43
-O-фенил	-0,34	-0,04	-0,28
-OCOCH ₃	-0,19	-0,03	-0,19
-OCO-фенил	-0,11	0,07	-0,10
-OSO ₂ CH ₃	-0,05	0,07	-0,01
N -NH ₂	-0,80	-0,25	-0,64
-NHCH ₃	-0,83	-0,22	-0,68
-N(CH ₃) ₂	-0,67	-0,18	-0,66
-N ⁺ (CH ₃) ₃ I ⁻	0,72	0,40	0,34
-NHCOCH ₃	0,38	-0,02	-0,26
-NHNH ₂	-0,60	-0,08	-0,55
-N=N-фенил	0,67	0,20	0,20
-NO	0,55	0,29	0,35
-NO ₂	0,93	0,26	0,39
-CN	0,25	0,18	0,30
-NCS	-0,11	0,04	-0,02

Заместитель X	Z ₂	Z ₃	Z ₄
S -SH	-0,08	-0,16	-0,22
-SCH ₃	-0,08	-0,10	-0,24
-S-фенил	-0,06	-0,20	-0,26
-S-S-фенил	0,24	0,02	-0,06
-SO ₂ CH ₃	0,68	0,35	0,39
-SO ₂ OCH ₃	0,68	0,34	0,36
-SO ₂ Cl	0,68	0,23	0,34
-SO ₂ NH ₂	0,59	0,32	0,32
O -CHO	0,61	0,25	0,35
-COCH ₃	0,60	0,11	0,19
C -COCH ₂ CH ₃	0,63	0,08	0,18
∧ -CO-фенил	0,44	0,10	0,19
-CO-(2-пиридил)	0,86	0,11	0,20
-COOH	0,87	0,21	0,34
-COOCH(CH ₃) ₂	0,73	0,11	0,20
-COO-фенил	0,88	0,15	0,25
-CONH ₂	0,69	0,18	0,25
-COF	0,71	0,21	0,38
-COCl	0,81	0,21	0,37
-COBr	0,77	0,21	0,38
-CH=N-фенил	0,64	0,24	0,24
-Li	0,77	0,26	-0,29
-MgBr	0,40	-0,19	-0,26
-Mg-фенил	-0,49	0,18	0,25
-Si(CH ₃) ₃	0,19	0,00	0,00
-Si(фенил) ₂ Cl	0,32	0,07	0,12
-SiCl ₃	0,52	≈0,2	≈0,2
-Pb(фенил) ₂ Cl	0,68	0,28	0,11
P -P(фенил) ₂	-0,02	-0,33	-0,33
-PO(OCH ₃) ₂	0,46	0,14	0,22
-Zn-фенил	-0,36	0,02	0,05
-Hg-фенил	0,00	0,00	-0,20

Влияние заместителей на химические сдвиги ядер ^{13}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 ₃	9,2	0,7	-0,1	-3,0
-CH ₂ CH ₃	11,7	-0,6	-0,1	-2,8
-CH ₂ CH ₂ CH ₃	10,3	-0,2	0,1	-2,7
-CH(CH ₃) ₂	20,2	-2,2	-0,3	-2,8
-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	10,9	-0,2	-0,2	-2,8
-C(CH ₃) ₃	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 ₂ F	8,5	-0,7	0,4	0,5
-CF ₃	2,5	-3,2	0,3	3,3
-CH ₂ Cl	9,3	0,3	0,2	0,0
-CHCl ₂	11,9	-2,4	0,1	1,2
-CCl ₃	16,3	-1,7	-0,1	1,8
-CH ₂ Br	9,5	0,7	0,3	0,2
-CH ₂ I	10,5	0,0	0,0	-0,9
-CH ₂ OH	12,4	-1,2	0,2	-1,1
-CH ₂ OCH ₃	8,7	-0,9	-0,1	-0,9
-CH ₂ NH ₂	14,9	-1,4	-0,2	-2,0
-CH ₂ NHCH ₃	12,6	-0,3	-0,3	-1,8
-CH ₂ N(CH ₃) ₂	7,8	0,5	-0,3	-1,5
-CH ₂ NO ₂	2,2	2,2	2,2	1,2
-CH ₂ CN	1,6	0,5	-0,8	-0,7
-CH ₂ SH	12,5	-0,6	0,0	-1,6
-CH ₂ SCH ₃	9,8	0,4	-0,1	-1,6
-CH ₂ S(O)CH ₃	0,8	1,5	0,4	-0,2
-CH ₂ SO ₂ CH ₃	-0,1	2,1	0,6	0,6
-CH ₂ CHO	7,4	1,3	0,5	-1,1
-CH ₂ COCH ₃	5,8	0,8	0,1	-1,6
-CH ₂ COOH	6,5	1,4	0,4	-1,2
-CH ₂ Li	32,2	-22,0	-0,4	-24,3
-CH=CH ₂	8,9	-2,3	-0,1	-0,8
-C(CH ₃)=CH ₂	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 ₁	Z ₂	Z ₃	Z ₄
-2-пиридил	11,2	-1,4	0,5	-1,4
-4-пиридил	9,6	-1,6	0,5	0,5
H -F	33,6	-13,0	1,6	-4,4
a -Cl	5,3	0,4	1,4	-1,9
l -Br	-5,4	3,3	2,2	-1,0
-I	-31,2	8,9	1,6	-1,1
O -OH	28,8	-12,8	1,4	-7,4
-ONa	39,6	-8,2	1,9	-13,6
-OCH ₃	33,5	-14,4	1,0	-7,7
-OCH=CH ₂	28,2	-11,5	0,7	-5,8
-O-фенил	27,6	-11,2	-0,3	-6,9
-OCOCH ₃	22,4	-7,1	0,4	-3,2
-OSi(CH ₃) ₃	26,8	-8,4	0,9	-7,1
-OPO(O-фенил) ₂	21,9	-8,4	1,2	-3,0
-OCN	25,0	-12,7	2,6	-1,0
N -NH ₂	18,2	-13,4	0,8	-10,0
-NHCH ₃	15,0	-16,2	0,8	-11,6
-N(CH ₃) ₂	16,0	-15,4	0,9	-10,5
-NH-фенил	14,7	-10,6	0,9	-10,5
-N(фенил) ₂	13,1	-7,0	0,9	-5,6
-NH ₃ ⁺	0,1	-5,8	2,2	2,2
-NH ₂ ⁺ CH(CH ₃) ₂	5,5	-4,1	1,1	0,7
-N ⁺ (CH ₃) ₃	19,5	-7,3	2,5	2,4
-N(O)(CH ₃) ₂	26,2	-8,4	0,8	0,6
-NHCOCH ₃	9,7	-8,1	0,2	-4,4
-NHOH	21,5	-13,1	-2,2	-5,3
-NHNH ₂	22,8	-16,5	0,5	-9,6
-N(NO)CH ₃	13,7	-9,4	0,9	-1,3
-N=CH-фенил	24,7	-6,5	1,3	-1,5
-N=NCH ₃	22,2	-6,2	0,5	-3,0
-NO	37,4	-7,6	0,8	7,1
-NO ₂	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 ⁺ ≡N	-12,7	6,0	5,7	16,0
S -SH	4,0	0,7	0,3	-3,2
-SCH ₃	10,0	-1,9	0,2	-3,6
-SC(CH ₃) ₃	4,5	9,0	-0,3	0,0
-S(CH ₃) ₂ ⁺	-1,0	3,1	2,2	6,3
-SCH=CH ₂	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 ₁	Z ₂	Z ₃	Z ₄
-S(O)CH ₃	17,6	-5,0	1,1	2,4
-SO ₂ CH ₃	12,3	-1,4	0,8	5,1
-SO ₂ OH	15,0	-2,2	1,3	3,8
-SO ₂ OCH ₃	6,4	-0,6	1,5	5,9
-SO ₂ F	4,6	0,0	1,5	7,5
-SO ₂ Cl	15,6	-1,7	1,2	6,8
-SO ₂ NH ₂	10,8	-3,0	0,3	3,2
-SCN	-3,7	2,5	2,2	2,2
O -CHO	8,2	1,2	0,5	5,8
 -COCH ₃	8,9	0,1	-0,1	4,4
C -COCF ₃	-5,6	1,8	0,7	6,7
∧ -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 ₃	2,0	1,2	-0,1	4,3
-CONH ₂	5,0	-1,2	0,1	3,4
-CON(CH ₃) ₂	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 ₃	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
Si -SiH ₃	-0,5	7,3	-0,4	1,3
-SiH ₂ CH ₃	4,8	6,3	-0,5	1,0
-Si(CH ₃) ₃	11,6	4,9	-0,7	0,4
-Si(фенил) ₃	5,8	7,9	-0,6	1,1
-SiCl ₃	3,0	4,6	0,1	4,2
-Ge(CH ₃) ₃	13,7	4,5	-0,5	-0,2
-Sn(CH ₃) ₃	13,2	7,2	-0,4	-0,4
-Pb(CH ₃) ₃	20,1	8,0	-0,1	-1,0
P -P(CH ₃) ₂	13,6	1,6	-0,6	-1,0
-P(фенил) ₂	8,9	5,2	0,0	0,1
-P ⁺ (фенил) ₂ CH ₃	-9,7	5,2	2,0	6,7
-PO(CH ₃) ₂	2,5	1,1	0,1	3,0
-PO(фенил) ₂	5,8	3,9	-0,1	3,0
-PO(OH) ₂	-1,9	3,6	1,5	5,6
-PO(OCH ₂ CH ₃) ₂	1,6	3,6	-0,2	3,4
-PS(CH ₃) ₂	6,7	2,0	0,2	2,9
-PS(OCH ₂ CH ₃) ₂	6,1	2,8	-0,4	3,4
-AsH ₂	1,7	7,9	0,8	0,0
-As(фенил) ₂	11,1	5,0	0,1	-0,1
-AsO(OH) ₂	3,8	1,6	0,8	4,5
-SeCH=CH ₂	0,7	4,7	0,4	-1,4
-SeCN	-5,3	5,1	2,9	2,1
-Sb(фенил) ₂	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