40/A-11
Eng

No. of Printed Pages : 4+5

SARDAR PATEL UNIVERSITY
B.Sc. EXAMINATION NOVEMBER-2019 (VTH SEMESTER)
SUBJECT TITLE : ORGANIC CHEMISTRY
COURSE CODE: US05CCHE01

DATE: 11-11-2019 **TIME: 10:00 A.M. TO 01:00 P.M.**

DAY: MONDAY **TOTAL MARKS: 70**

Q-1 Choose the correct option for the following : [10]

(i) What is the hybridization of N – atom in pyridine.
(a) dsp^2 (b) sp
(c) sp^3 (d) sp^2

(ii) Which of the following compound have the properties of secondary aliphatic amine ?
(a) Pyrrole (b) Thiophene
(c) Pyrrolidine (d) Pyridine

(iii) How many NMR signals would you expect from m-Xylene ?
(a) 4 (b) 2
(c) 5 (d) 3

(iv) How many CMR signals would you expect from n-hexane ?
(a) 3 (b) 2
(c) 4 (d) 5

(v) Which one is a more stable diene ?
(a) 1,3 – Butadiene (b) 1,2 – Butadiene
(c) 1,2 – Pentadiene (d) None of these

(vi) Which of the following is the example of homopolymer ?
(a) Nylon - 6,6 (b) SBR
(c) Dacron (d) Saran .

(vii) In isotactic polypropylene, methyl groups are distributed on an extended chain is :
(a) Random (b) One side
(c) Alternating (d) None of these

(viii) __________ is the detergent of ampholytic class ?
(a) Igepon - T (b) SLR
(c) Miranol C_2M (d) None of these

(ix) Which of the following compound is the bicyclic halogenated hydrocarbon derivative ?
(a) Heptachlor (b) Linalool
(c) Baygon (d) Heliotropin

(x) Which of the following compound is used as diluent in detergent ?
(a) Sodium silicate (b) CMC
(c) Sodium tripolyphosphate (d) Sodium Carbonate

[P.T.O.]

Q-2 Answer the following : (Any Ten) [20]

(i) Describe the structure of furan.

(ii) Give the synthesis of 2-Aminopyridine by a well-known reaction ?

(iii) Give the synthesis of 1-Methyl isoquinoline from benzene by using Bischler-Napieralski synthesis.

(iv) Why TMS is use as a standard for reference point in NMR spectroscopy ?

(v) Give various aspects of CMR spectroscopy.

(vi) Differentiate between Enantiotopic proton and Diastereotopic proton.

(vii) Give synthesis of Vulcanized rubber.

(viii) Write the chemical structure of monomer and polymer for following:

(a) Plexiglass (b) Carbowax

(ix) Explain: Cis-1,4-polyisoprene is an elastomeric while trans-1,4-polyisoprene is non-elastic.

(x) Define: Perfume. Give the characteristics of good vehicle.

(xi) Give the applications of detergent used as scouring agent.

(xii) Give the disadvantages of soap and advantages of detergent.

Q-3 Answer the following :

(a) Give the synthesis of 2-methyl quinoline by Skraup synthetic route. [04]

(b) Answer the following : [06]

(i) Discuss why nucleophilic substitution reaction in pyridine is preffered at the 2- and 4 – position.

(ii) Give the detail step mechanism of 2-Acetyl pyrrole by Hauben-Hoesch reaction.

OR

Q-3 Answer the following :

(a) Arrange the increasing basicity order for the Pyridine, Methyl amine, Pyrrole and give detail explanation of your answer. [04]

(b) Answer the following : [06]

(i) Discuss why elctrophilic substitution reaction in five membered heterocycles exclusively occur on position-2 but not at the position-3.

(ii) Give the detail step synthesis of 3,5 - Dicarbethoxy-2,4-Dimethyl pyrrole from appropriate α-amino-β-keto ester and acetoacetate by Knorr-Pyrrole synthetic route.

Q-4 Answer the following :

(a) Discuss proton-coupled and proton-decoupled spectrum with suitable example. [03]

(b) Deduce the structure of compound having following spectral data. Label all kinds of protons/carbons and give appropriate explanation for the structure. [07]

(i) Molecular formula: $C_9H_{13}N$

IR (CM^{-1}) : 3400,3000,2900,1600,1500,1450,1375,1140,1030,690,730.

NMR (δ,ppm) : (a) 7.3, 5H, Singlet (b) 3.7,2H, Singlet

(c) 2.5, 2H, Quartet (d) 1.25,1H, Singlet

(e) 1.1, 3H, Triplet

(ii) Molecular formula: $C_{11}H_{16}$

NMR (δ,ppm) : (a) 0.70, 3H, Triplet (b) 1.30, 6H, Singlet

(c) 1.70, 2H, Quartet (d) 7.20,5H, Singlet

OR

Q-4 Answer the following:

(a) Write a note on phenomenon of the splitting of NMR signals indicating clearly how the multiplicity of splitting reflects the number of protons adjacent to the absorbing protons. [04]

(b) Deduce the structure of compound having following spectral data. Label all kinds of protons/carbons and give appropriate explanation for the structure. [06]

(i) Molecular formula: $C_6H_{13}N$

CMR (δ,ppm) : (a) 22.7, Quartet (b) 31.5, Doublet

(c) 35.8, Triplet (d) 46.9, Triplet

(ii) Molecular formula: $C_4H_{10}O_2$

CMR (δ,ppm) : (a) 15.0, Quartet (b) 61.6,Triplet

(c) 66.6, Triplet (d) 72.1, Triplet

(iii) Molecular formula: $C_{10}H_{12}O_3$

NMR (δ,ppm) : (a) 1.35, 3H, Triplet (b) 4.35,2H, Quartet

(c) 3.8,3H, Singlet (d) 7.5,4H, Quartet

[P.T.O.]

Q-5 Answer the following : [10]

Give detail account for the addition of HBr to 1,3-Butadiene at higher temperature yields 1-Bromo-2-butene as a major product but at lower temperature it becomes a minor product with potential energy diagram. What are plastics? Give their classification and discuss its properties. Also define hyperconjugation by taking suitable example.

OR

Q-5 Answer the following : [10]

What is Coordination polymerization? Explain the importance of Ziegler-Natta catalyst in coordination polymerization and discuss its advantages over free-radical polymerization in the preparation of polyethylene. Also give the mechanism for polymerization of styrene in presence of sodium metal and naphthalene. Also give distinguishing feature of addition and condensation polymerization.

Q-6 Answer the following:

(a) What is fixative? Give its various classes with at least two example of each class. [04]

(b) Give the synthesis and applications of following from cheapest raw materials: [06]

(i) Compound which occurs in the essential oils of bergamot.

(ii) Optical brightening agent of Stilbene class derivative.

OR

Q-6 Answer the following:

(a) Give the synthesis of DDT with its advantages. [04]

(b) Give the synthesis and applications of following from cheapest raw materials: [06]

(i) Compound mainly used to impart sweet hay like odour.

(ii) Compound use as insecticide of Organo phosphorus class.

No. of Printed Pages : 4+5

[40/A11]
4UJ

સરદાર પટેલ યુનિવર્સીટી

બી.એસ.સી (પાંચમુ સેમીસ્ટર પરીક્ષા)

સોમવાર, અગિયાર નવેમ્બર, ૨૦૧૯

સવારે: ૧૦:૦૦ થી ૦૧:૦૦

US05CCHE01- કાર્બનિક રસાયણશાસ્ત્ર

કુલ ગુણ: ૭૦

સૂચના: (1) દરેક પ્રશ્નના જવાબ આપો.

(2) પ્રશ્નની જમણી બાજુ દર્શાવેલ અંક પ્રશ્નના ગુણ દર્શાવે છે.

પ્ર. ૧ નીચેના માંથી સાચો વિકલ્પ પસંદ કરો: (૧૦)

(i) પીરીડીનમાં N-પરમાણુનું સંકરણ શું છે ?

(a) dsp^2 (b) sp (c) sp^3 (d) sp^2

(ii) નીચેના માંથી કયા સંયોજનમાં દ્વિતીયક એલીફેટીક એમાઈનના લક્ષણ જોવા મળે છે ?

(a) પાયરોલ (b) થાયોફીન (c) પાયરોલીડીન (d) પીરીડીન

(iii) m – ઝાયલીનમાં કેટલા NMR સંકેતની અપેક્ષા રાખી શકાય ?

(a) 4 (b) 2 (c) 5 (d) 3

(iv) n – હેકઝેનમાં કેટલા CMR સંકેતની અપેક્ષા રાખી શકાય ?

(a) 3 (b) 2 (c) 4 (d) 5

(v) નીચેના માંથી કયું વધારે સ્થિર ડાઈન છે ?

(a) 1,3 – બ્યુટાડાઈન (b) 1,2 – બ્યુટાડાઈન (c) 1,2 – પેન્ટાડાઈન (d) એક પણ નહી

(vi) નીચેના માંથી કયું હોમોપોલીમરનું ઉદાહરણ છે ?

(a) નાયલોન - 6,6 (b) SBR (c) ડેક્રોન (d) સરન

(vii) આઈસોટેકટીક પોલીપ્રોપીલીની વિસ્તારથી ચેઈનમાં મિથાઈલ સમુહનું વિતરણ:

(a) અસ્તવ્યસ્ત (b) એકબાજુ (c) અલ્ટરનેટીંગ (d) એક પણ નહી

(viii) ....એમ્ફોલીટીક વર્ગનો ડિટરજંન્ટ છે ?

(a) આઈજીપોન - T (b) SLR (c) મીરાનોલ C_2M (d) એક પણ નહી

(ix) નીચેનામાંથી કયું સંયોજન દ્વિચક્રીય હેલોજીનેટેડ હાંઈડ્રોકાર્બન વ્યુત્પન્ન છે ?

(a) હેપ્ટાક્લોર (b) લીનાલુલ (c) બેયગોન (d) હેલીયોટ્રોપીન

(x) નીચેનામાંથી કયું સંયોજન ડિટરજંન્ટમાં મંદન (ડાયલ્યુઅન્ટ) તરીકે વપરાય છે ?

(a) સોડીયમ સીલીકેટ (b) CMC (c) સોડીયમ ટ્રાયપોલીફોસ્ફેટ (d) સોડીયમ કાર્બોનેટ

[પાછળ જૂઓ]

પ્ર. ૨ નીચેનાના જવાબ આપો: (ગમે તે દશ) (૨૦)

(i) ફ્યુરાનની રચનાનું વર્ણન કરો.

(ii) જાણીતી પ્રક્રીયા દ્વારા 2-એમીનોપીરીડીનનું સંશ્લેષણ આપો.

(iii) 1-મીથાઈલ આઈસોક્વીનોલીનનું બેન્ઝીનમાંથી સંશ્લેષણ Bischler-Napieraski સંશ્લેષણ વડે આપો.

(iv) NMR સ્પેક્ટ્રોસ્કોપીમાં સંદર્ભ બિંદુ માટે TMS પ્રમાણીત તરીકે કેમ વપરાય છે ?

(v) CMR સ્પેક્ટ્રોસ્કોપીનાં વિવિધ પાસાઓ આપો.

(vi) એનેન્શીઓટોપીક પ્રોટોન અને ડાયાસ્ટીરીઓટોપીક પ્રોટોન વચ્ચે ભેદ સ્પષ્ટ કરો.

(vii) વલ્કેનાઈઝડ રબરનું સંશ્લેષણ આપો.

(viii) નીચેના માટે મોનોમર અને પોલીમરના રાસાયણીક બંધારણ આપો:

(a) પ્લેક્સીગ્લાસ (b) કાર્બોવેક્સ

(ix) સમજાવો : સીસ-1,4-પોલીઆઈસોપ્રીન ઈલાસ્ટોમર છે. જયારે ટ્રાન્સ 1,4- પોલીઆઈસોપ્રીન નોન ઈલાસ્ટીક છે.

(x) વ્યાખ્યા આપો : પર્ફ્યુમ. સારા વાહક (good vehicle) ના લક્ષણો આપો.

(xi) સ્કાઉરીંગ એજન્ટ (scouring agent) તરીકે વપરાતા ડિટરજંન્ટના ઉપયોગો આપો.

(xii) સાબુના ગેરફાયદા અને ડિટરજંન્ટના ફાયદા આપો.

પ્ર. 3 નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો:

(અ) સ્કોપ (Skraup) સંશ્લેષણ માર્ગ વડે 2-મીથાઈલ ક્વીનોલીનનું સંશ્લેષણ આપો. [૦૪]

(બ) નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો: [૦૬]

(i) સમજાવો કેમ પીરીડીનમાં કેન્દ્રાનુરાગી વિસ્થાપન પ્રક્રિયા 2- અને 4- સ્થાન પર જોવા મળે છે.

(ii) હૌબેન-હોશેક (Hauben-Hoesch reaction) પ્રતિક્રિયા દ્વારા 2-એસીટાઈલ પાયરોલનું મિકેનીઝમ વિગતવાર આપો.

અથવા

પ્ર. 3 નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો:

(અ) પીરીડીન, મીથાઈલ એમાઈન, પાઈરોલને બેઝીકતાના વધતા ક્રમમાં ગોઠવો અને આપનો ઉત્તર સમજવો. [૦૪]

(બ) નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો: [૦૬]

(i) પાંચ સભ્યોવાળા વિષમચક્રી સંયોજનમાં ઈલેક્ટ્રોન અનુરાગી વિસ્થાપન ક્રિયા માત્ર સ્થાન 2- પર જ જોવા મળે છે, જયારે સ્થાન 3- પર નહી. એવુ કેમ થાય છે તેની ચર્ચા કરો.

(ii) નોર-પાયરોલ (Knorr-Pyrrole) સંશ્લેષણ મદદ દ્વારા યોગ્ય α-એમીનો-β-કીટોએસ્ટર અને એસીટોએસીટેટ માંથી 3,5 -ડાયકાર્બેથોક્સી-2, 4-ડાયમીથાઈલ પાયરોલનું વિગતવાર સંશ્લેષણ આપો.

પ્ર. ૪ નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો:

(અ) યોગ્ય ઉદાહરણ સાથે પ્રોટોન કપલ્ડ(proton-coupled) અને પ્રોટોન ડીકપલ્ડ (proton-decoupled) સ્પેક્ટ્રા ચર્ચો. [૦૩]

(બ) નીચે પ્રમાણેની સ્પેકટ્રલ માહીતીને આધારે સંયોજનનું બંધારણ ઉપજાવો. પ્રત્યેક પ્રોટ્રોન/કાર્બનને લેબલ કરો. અને બંધારણ માટે યોગ્ય સમજણ આપો. [૦૭]

(i) મોલેક્યુલર ફોર્મ્યુલા : $C_9H_{13}N$

IR (CM^{-1}) : 3400,3000,2900,1600,1500,1450,1375,1140,1030,690, 730.

NMR (δ,ppm) : (a) 7.3, 5H, Singlet (b) 3.7, 2H, Singlet (c) 2.5, 2H, Quartet (d) 1.25,1H, Singlet (e) 1.1, 3H, Triplet

(ii) મોલેક્યુલર ફોર્મ્યુલા: $C_{11}H_{16}$

NMR (δ,ppm) : (a) 0.70, 3H, Triplet (b) 1.30, 6H, Singlet (c) 1.70, 2H, Quartet (d) 7.20,5H, Singlet

અથવા

પ્ર. ૪ નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો: [૦૪]

(અ) NMR સંકેતોના વિભાજનની ઘટના પર એક નોંધ લખો.

પ્રોટોન કેવી રીતે વિભાજનની ગુણાકાર શોષણની બાજુમાં આવેલા પ્રોટોનની સંખ્યાને પ્રતિબિંબિત કરે છે, તે સ્પષ્ટ કરો.

(બ) નીચે પ્રમાણેની સ્પેકટ્રલ માહીતીને આધારે સંયોજનનું બંધારણ ઉપજાવો. પ્રત્યેક પ્રોટ્રોન/કાર્બનને લેબલ કરો. અને બંધારણ માટે યોગ્ય સમજણ આપો. [૦૬]

(i) મોલેક્યુલર ફોર્મ્યુલા: $C_6H_{13}N$

CMR (δ,ppm) : (a) 22.7, Quartet (b) 31.5, Doublet (c) 35.8, Triplet (d) 46.9, Triplet

(ii) મોલેક્યુલર ફોર્મ્યુલા: $C_4H_{10}O_2$

CMR (δ,ppm) : (a) 15.0, Quartet (b) 61.6,Triplet (c) 66.6, Triplet (d) 72.1, Triplet

(iii) મોલેક્યુલર ફોર્મ્યુલા: $C_{10}H_{12}O_3$

NMR (δ,ppm) : (a) 1.35, 3H, Triplet (b) 4.35,2H, Quartet (c) 3.8,3H, Singlet (d) 7.5,4H, Quartet

[પાછળ જૂઓ]

પ્ર. ૫ નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો: (૧૦)

ઉંચા તાપમાને 1,3-બ્યુટાડાઈનની HBr સાથેની યોગશીલ પ્રક્રીયામાં 1-બ્રોમો-2-બ્યુટીન મુખ્ય નીપજ છે. તે સવિસ્તાર સમજાવો. જ્યારે નીચા તાપમાને તે મુખ્ય નીપજ નથી. તે શક્તિના આલેખ વડે સમજાવો. પ્લાસ્ટીક એટલે શું ? તેનું વર્ગીકરણ આપી તેના ગુણધર્મો ચર્ચો. યોગ્ય ઉદાહરણ આપીને હાઇપરકોંજેશનની વ્યાખ્યા પણ આપો.

અથવા

પ્ર. ૫ નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો: (૧૦)

કો-ઓર્ડીનેશન પોલીમરાઈઝેશન એટલે શું ? ઝીગલર નાટા (Ziegler-Natta) ઉદ્દીપકનું કો-ઓર્ડીનેશન પોલીમરાઈઝેશનમાં મહત્વ સમજાવો. અને મુક્ત મુલક પોલીમરાઈઝેશન વડે પોલીઈથીલીનની બનાવટ કરતા તેના લાભ વર્ણવો. સોડીયમ ધાતુ અને નેપ્થેલીનની હાજરીમાં સ્ટાયરીનના પોલીમરાઈઝેશનની ક્રિયાવીધી આપો. એડીશન અને કંડેન્શેશન (addition and condensation) પોલીમરાઈઝેશનને અલગ કરતા લક્ષણો આપો.

પ્ર. ૬ નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો:

(અ) ફીકસેટીવ એટલે શું ? પ્રત્યેક વર્ગના ઓછામાં ઓછા બે ઉદાહરણ આપી સમજાવો. [૦૪]

(બ) સૌથી સસ્તા ખનીજ કયા માંથી નીચેના માટે સંશ્લેષણ અને ઉપયોગીતા આપો: [૦૬]

(i) બર્ગામોટ (bergamot)ના એસેન્શીયલ ઓઈલમાં જોવા મળતું સંયોજન

(ii) સ્ટીલબીન વર્ગના વ્યુત્પન્નના ઓપ્ટીકલ બ્રાઈટનર એજન્ટ

અથવા

પ્ર. ૬ નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો:

(અ) DDT નું સંશ્લેષણ અને તેનાથી થતા લાભ આપો. [૦૪]

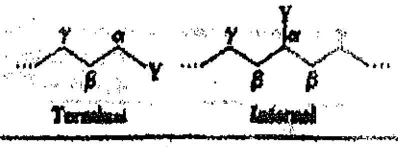
(બ) સૌથી સસ્તા ખનીજ કયા માંથી નીચેના માટે સંશ્લેષણ અને ઉપયોગીતા આપો: [૦૬]

(i) સ્વીટ હે (sweet hay) જેવી ગંધ માટે મુખ્યત્વે વપરાતું સંયોજન

(ii) ઓર્ગેનોફોસ્ફરસ વર્ગનું કીટનાશક સંયોજન

— X —

^{13}C shifts for terminal and internal systems



	α		β		γ
Y	Terminal	Internal	Terminal	Internal	
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		0		−2
Phenyl	+23	+17	+ 9	+ 7	−2
OH	+48	+41	+10	+ 8	−5
OR	+58	+51	+ 8	+ 5	−4
OCOR	+51	+45	+ 6	+ 5	−3
NH_2	+29	+24	+11	+10	−5
NH_3^+	+26	+24	+ 8	+ 6	−5
NHR	+37	+31	+ 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

^{13}C Shifts for some linear and branched chain alkanes

Compound	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
Methane	−2.3				
Ethane	5.7				
Propane	15.8	16.3	15.8		
Butane	13.4	25.2	25.2		
Pentane	13.9	22.8	34.7	22.8	13.9
Hexane	14.1	23.1	32.2	32.2	23.1
Heptane	14.1	23.2	32.6	29.7	32.6
Octane	14.2	23.2	32.6	29.9	29.9
Nonane	14.2	23.3	32.6	30.0	30.3
Decane	14.2	23.2	32.6	31.1	30.5
Isobutane	24.5	25.4			
Isopentane	22.2	31.1	32.0	11.7	
Isohexane	22.7	28.0	42.0	20.9	14.3
Neopentane	31.7	28.1			
2,2-Dimethylbutane	29.1	30.6	36.9	8.9	
3-Methylpentane	11.5	29.5	36.9	(18.8, 3-CH_3)	
2,3-Dimethylbutane	19.5	34.3			
2,2,3-Trimethylbutane	27.4	33.1	38.3	16.1	
2,3-Dimethylpentane	7.0	25.3	36.3	(14.6, 3-CH_3)	

(P.T.O.)

^{13}C shifts for substituted benzenes
Base value for benzene is 128.5 ppm

Substituent	C-1 (Attachment)	C-2	C-3	C-4	C of Substituent (ppm from TMS)
H	0.0	0.0	0.0	0.0	
CH_3	+9.3	+0.7	−0.1	−2.9	21.3
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_5	+12.1	−1.8	−0.1	−1.6	
CH_2OH	+13.3	−0.8	−0.6	−0.4	64.5
$CH_2OC(=O)CH_3$	+7.7	~0.0	~0.0	~0.0	20.7 (CH_3), 66.1 (CH_2), 170.5 (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	
$OC(=O)CH_3$	+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	192.0
$C(=O)CH_3$	+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	168.0
$C(=O)OCH_3$	+2.0	+1.2	−0.1	+4.8	51.0 (CH_3), 166.8 (C=O) 168.5
C(=O)Cl	+4.6	+2.9	+0.6	+7.0	
$C(=O)NH_2$	+5.0	−1.2	0.0	+3.4	
$C{\equiv}N$	−16.0	+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
$NHC(=O)CH_3$	+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	

Influence of functional group X on the chemical shift position (δ) of nearby carbons in alkane chains'

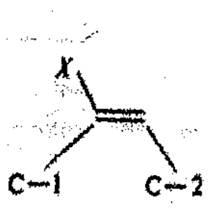
$X—C—C—C—C$ (α, β, γ)

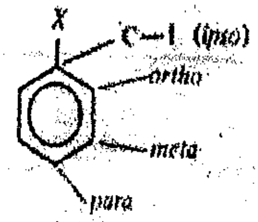
X	α-shift $X—CH_2—$ 1°	or $X—CH(R)—$ 2°	or $X—C(R)(R)—$ 3°	β-shift	γ-shift
$—CH_3$	9	6	3	9	−3
—R: see table 3.11					
axial $—CH_3$ (in cyclohexanes)	1	–	–	5	−6
equatorial $—CH_3$ (in cyclohexanes)	6	–	–	9	0
$—CH{=}CH_2$	22	16	12	7	−2
$—C{\equiv}CH$	4	–	–	3	−3
$—C_6H_5$, —Ar	23	17	11	10	−3
—F	70	–	–	8	−7
—Cl	31	35	42	10	−5
—Br	19	28	37	11	−4
—I	−7 to 20	–	–	11	−2
$—NH_2$, —NHR, $—NR_2$	29	24	18	11	−4
$—NO_2$	62	–	–	3	−5
—NHCOR, —NRCOR	10	–	–	0	0
$—NH_3^+$	25	–	–	7	−3
—CN	3	4	–	2	−3
—SH	?	–	–	2	−2
—OH	50	45	40	9	−3
—OR	50	24	17	10	−6
—OCOR	52	50	45	7	−6
—COOH, —COOR, —CON<	20	16	13	2	−3
—COR, —CHO	30	24	17	2	−3
$—SO_3H$, $—SO_2N$<	50	.	–	3	0

C.P.T.O.

Influence of functional group X on the chemical shift positions (δ) of nearby carbons in alkene groups and benzene rings

Base values: ethylene (δ 123) and benzene (δ 128)





	Alkenes		Benzenes			
	C—1	C—2	C—1 (*ipso*)	*ortho*	*meta*	*para*
—CH_3	10	−8	9	0	0	−2
R_1	16	−8	15	0	0	−2
R_1	23	−8	21	0	0	−2
—CH═CH_2	15	−6	9	0	0	−2
—CH≡CH	–	–	−6	4	0	0
—C_6H_5, —Ar	13	−11	13	−1	1	−1
—F	25	−34	35	−14	1	−5
—Cl	3	−6	6	0	1	−2
—Br	−8	−1	−5	3	2	−2
—I	−38	7	−32	10	3	−1
—NH_2	–	–	18	−13	1	−10
—NHR	–	–	20	−14	1	−10
—NR_2	–	–	22	−16	1	−10
—NO_2	22	−1	20	−5	1	6
—NHCOR, —NRCOR	–	–	10	−7	1	−4
—CN	−15	15	−16	4	1	6
—SH	–	–	4	1	1	−3
—OH	–	–	27	−13	1	−7
—OR	29	−39	30	−15	1	−8
—OCOR	18	−27	23	−6	1	−2
—COOH, —COOR, —CON<	4	9	2	2	0	5
—COR, —CHO	14	13	9	1	1	6
—SO_3H, —SO_2N<	–	–	16	0	0	4
—PMe_2	–	–	14	1.6	0	−1
—PAr_2	–	–	9	5	0	0

SPECTROSCOPIC DATA TABLES

N. M. R. Chemical Shifts

Type of proton		Chemical shift δ ppm	Type of Proton		Chemical shift δ ppm
Primary	RCH_3	0.9	Alcohols	HC–OH	3.4–4
Sec.	R_2CH_2	1.3	Ethers	HC–OR	3.3–4
Tert.	R_3CH	1.5	Esters	RCOO–CH	3.7–4.1
Vinylic	C=C–H	4.6–5.9	Esters	HC–COOR	2–2.2
Acetylenic C	C≡C–H	2–3	Acid(	HC–COOH	2–2.6
Aromatic	Ar–H	6–8.5	Carbonyl	HC–C=O	2–2.7
Benzylic	Ar–C–H	2.2–3	Aldehydic	RCHO	9–10
Allylic	$C=C–CH_3$	1.7	Hydroxylic	R–OH	1–5.5
Chloride	HC–Cl	3–4	Phenolic	Ar–OH	4–12
Bromides	HC–Br	2.5–4	Enolic	C=C–OH	15–17
Iodides	HC–I	2–4	Carboxylic	R–COOH	10.5–12
			Amino	$R–NH_2$	1–5

$CH_3–Cl$	δ 3.0
$R–CH_2–Cl$	δ 3.4
$R_2CH–Cl$	δ 4.0

$CH_3–C–Cl$	δ 1.5
$R–CH_2–C–Cl$	δ 1.7
$R_2CH–C–Cl$	δ 1.6

CHARACTERISTIC INFRARED ABSORPTION FREQUENCIES IR

Bond	Compound type	Frequency range, cm^{-1}
C–H	Alkanes	2850–2960 1350–1470
	tert-Butyl: unsymmetrical doublet:	1370 (*s*) 1395 (*m*)
	isopropyl "split"	1370 and 1385
	Methyl and methylene groups	1430–1470
	confirmed by a band	1170
C–H	Alkenes	3020–3080 (*m*) 675–1000
	$RCH=CH_2$ 910–920 cm^{-1}, 990–1000	*cis*-RCH=CHR 675–730 (*variable*)
	$R_2C=CH_2$ 880–900	*trans*-RCH=CHR 965–975
C–H	Aromatic rings	3000–3100 (*m*) 675–870
	monosubstituted 690–710 cm^{-1}, 730–770	*m*-disubstituted 690–710, 750–810
	o-disubstituted 735–770	*p*-disubstituted 810–840
C–H	Alkynes	3300
C=C	Alkenes	1640–1680 (*v*)
C≡C	Alkynes	2100–2260 (*v*)
C=C	Aromatic rings	1500, 1600 (*v*)
C–O	Alcohols, ethers, carboxylic acids, esters	1080–1300
	1° ROH about 1050 cm^{-1}	3° ROH about 1150 cm^{-1}
	2° ROH about 1100	ArOH about 1230
	Alkyl ethers	1060–1150 cm^{-1}
	Aryl and vinyl ethers	1200–1275 cm^{-1} (and, weaker, at 1200–1075 cm^{-1})
C=O	Aldehydes, ketones, carboxylic acids, esters	1690–1760
O–H	Monomeric alcohols, phenols	3610–3640 (*v*)
	Hydrogen-bonded alcohols, phenols	3200–3600 (*broad*)
	Carboxylic acids	2500–3000 (*broad*)
N–H	Amines	3300–3500 (*m*)
C–N	Amines	1180–1360
C≡N	Nitriles	2210–2260 (*v*)
$–NO_2$	Nitro compounds	1515–1560 1345–1385