[44/A13 GUJ]   SEAT No._______   **Total no of printed pages: 04 + 06**

SARDAR PATEL UNIVERSITY

B.Sc. (Vth semester) Examination October-2018

Subject : Organic chemistry (US05CCHE01)

Date : 22/10/2018 | **Time : 10.00 am to 1.00 pm**
Day : Monday | **Total Marks : 70**

Q.1 – નીચેના બહુવિકલ્પ પ્રશ્નોમાંથી સાચો વિકલ્પ સપંદ કરો 10

1. નીચેમાંથી કયું એરોમેટીક પદાર્થ નથી?

   a) પાયરોલ b) ફ્યુરાન c) પિરિડિન d) પાયપિરિડિન

2. પિરિડીનમાં નાઇટ્રોજનનું સંકરણ કયું હશે?

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

3. ઇથાઇલ બેઝીનમાં NMR ના કેટલા સિગ્નલ મળે છે?

   a) 01 b) 02 c) 03 d) 04

4. o- ઝાયલિનમાં CMR ના કેટલા સિગ્નલ મળે છે ?

   a) 02 b) 01 c) 04 d) 03

5. C_5H_{12} અણુના કેટલા સમઘટક મળે છે?

   a) 02 b) 03 c) 04 d) 05

6. નીચેનામાંથી કયું સંયોજિત ડાઇનું ઉદાહરણ છે?

   a) 1,2-બ્યુટાડાઇન b) 1,3-બ્યુટાડાઇન c) 1,4-પેન્ટાડાઇન d) 1,5-પેન્ટાડાઇન

7. નીચેનામાંથી કયું હોમેપોલિમરનું ઉદાહરણ છે?

   a) નાઇલોન-66 (Nylon-66) b) SBR c) ડેક્રોન (Dacron) c) સારન (Saran)

8. નીચેનામાંથી કયો ડિટર્ઝન્ટ ચમકાવવા માટે કામ લાગે છે?

   a) ટીનોપાલ (Tinopal RBX) b) મિરાનોલ (Miranol C_2M) c) IGEPON-T d) આમાંથી એક પણ નહિ.

9. નીચેનામાંથી કયુ પ્રફ્યુમ અન ગમતી દુર્ગંધ દુર કરવા માટે ડીયોડ્રન્ટ તરીકે વપરાય છે ?

   a) મસ્ક જાઇલીન(Musk xylene) b) લીનાલુલ(Linalool) c) વેનીલિન(Vanillin)d) ક્યુમમારીન(Coumarin)

10. પિરીડીનનું ઇલેક્ટોન અનુરાગી વિસ્થાપન પ્રક્રિયા કયા કાર્બન ક્રમે થાય છે?

    a) 3 b) 2 c) 2 & 4 d) 4

Q.2 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.(Any 10) 20

1. પાયરોલની સંરચના સમજાવો.

2. ચિચિબેબિન પ્રક્રિયા ધ્વારા ૨-એમિનો પિરિડિનુ સંષ્લેષણ કરો.

3. શાં માટે પાયરોલ પિરિડીન કરતા ઓછુ અલ્કાઇન છે.

4. શા માટે TMS ને પ્રમાણિત રેફરન્સ તરીકે ગણવામાં આવે છે?

5. CMR સ્પેક્ટ્રોસ્કોપી જુદાં જુદાં પાંસાઓ લખો.

6. નીચે દર્શાવેલ અણુંના (molecule)

   i) NMR સિગ્નલ જણાવો.: 1.1 ડાઇમિથાઇલ સાયક્લોપ્રોપેન

   ii) CMR સિગ્નલ જણાવો.: P-ઇથાઇન ટોલ્યુઇન

7. કો-પોલિમર એટલે શુ ? જુદા જુદા વર્ગના કો-પોલિમરના ફક્ત નામ લખો.

8. વ્યાખ્યા આપો. i) પ્લાસ્ટિક ii) ઇલાસ્ટોમર

9. વલ્કેનાઇજેશન એટલે શું ? રબરને વલ્કેનાઇજેશન કેમ કરવામાં આવે છે?

10. ઓર્ગેનોફોસ્ફરસ પદાર્થનો ફાયદા શુ છે?

11. પરફ્યુમની વ્યાખ્યા આપો. જેમાં સારા દ્રાવકનાં (વિહિકલના)ગુણધર્મો લખો.

12. તફાવત આપો: સ્ટમક જંતુનાશક(stomach insecticide)અને કોન્ટેક્ટ જંતુનાશક(contact insecticide)

Q. 3- નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.

A) સ્કપ સંશ્લેષણ ધ્વારા 2-મિથાઇલ કયુનોલીનું સંશ્લેષણ દર્શાવો. 03

B) પિરિડીન કેન્દ્ર અનુરાગી વિસ્થાપન પ્રક્રિયા એ 2 અને 4 ક્રમે વધુ આવશ્યક છે. સમજાવો. 04

C) પાયરોલ, પાયપિરિડીન અને પિરિડીનને તેમની બેજિકતાના ચઢતા ક્રમમા ગોઠવો અને તમારા જવાબને યોગ્ય રીતે સમજાવો. 03

OR

Q. 3- નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.

A) પાયરોલનુ ઇલેક્ટ્રોન અનુરાગી વિસ્થાપન એ 3-ક્રમ કરતા 2-ક્રમે વધુ આવશ્યક છે. 04

B) 1- મિથાઇલ આઇસોક્યુનોલીનનું પરિવર્તન બેન્જિનમાંથી કેવી રીતે થાય છે દર્શાવો. 03

C) ફિશ-બેનરી સંશ્લેષણની મદદથી ઇથાઇલ એસિટો એસિટેટ અને 1-ક્લોરો એસિટોનમાંથી 03

3-કાર્બોથોક્સિ-2,4-ડાયમિથાઇલ ફ્યુરાન તબક્કાવાર ક્રિયાવિધિ સાથે સમજાવો.

Q.4 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.

A) નીચેના પુરાવાને આધારે પદાર્થનું બંધારણ નક્કી કરો. અને તેમાં દરેક પ્રકારના કાર્બન(પ્રોટોન) 07

ને નામ આપી જરૂરી વિગત સાથે સમજાવો.

i) આણ્વીય બંધારણ :- $C_8H_{10}O_2$

IR (cm^{-1}) : 3400 , 1620, 1250, 1050, 820.
^{1}HNMR (δ, ppm): a) 7.2, 4H , Singlet
b) 4.4, 2H , Singlet
c) 3.8, 3H , Singlet
d) 3.6, 1H , Singlet

ii) આણ્વીય બંધારણ :- $C_9H_{12}O$

IR (cm^{-1}) : 3050 , 2900, 1610, 1510, 1450, 1375, 1260, 1180, 1120, 1060, 830-850.
^{1}HNMR (δ, ppm): a) 1.3, 3H , Triplet
b) 2.2, 3H , Singlet
c) 3.9, 2H , Quartet
d) 6.8, 4H , Quartet

B) યુગ્મીત પ્રોટોન(proton coupled) અને અયુગ્મીત પ્રોટોન (proton decoupled) યોગ્ય ઉદાહરણ 03

સાથે સમજાવો.

OR

Q.4 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.

A) નીચેના પુરાવાને આધારે પદાર્થનું બંધારણ નક્કી કરો. અને તેમાં દરેક પ્રકારના કાર્બન (પ્રોટોન) 07
ને નામ આપી જરૂરી વિગત સાથે સમજાવો

i) આણ્વીય બંધારણ : $C_4H_{10}O_2$

CMR (δ, ppm): a)15.0, Quartet

b) 61.6, Triplet

c) 66.6, Triplet

d) 72.1, Triplet

ii) આણ્વીય બંધારણ : $C_9H_{10}O_2$

IR (cm^{-1}) : 3400, 3600, 3100, 1700, 1600, 1500, 1400, 1220, 920, 702-760.
^{1}H NMR (δ, ppm): a) 2.9, 2H , Triplet
b) 2.8, 2H , Tripet
c) 7.4, 5H , Singlet
d) 10.5, 1H , Singlet

(P.T.O.)

B) NMR માં સિગ્નલ વિભાજન ઉપર ટુંકનોંધ લખો.(splitting of NMR signals) 03

Q.5 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો. 10

ડાઇન એટલે શું? તેનું વર્ગીકરણ કરો. 1,3-બ્યુટાડાઇન HBr સાથેનું યોગ્યશીલ પ્રક્રિયા -80°C અને 40°C થાય ત્યારે અનુક્રિયાની ચર્ચા કરો. તથા યોગશીલ પ્રક્રિયા અને સંઘનન પ્રક્રિયા વચ્ચેના તફાવતના મુદ્દા લખો .

OR

Q. 5 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો. 10

સંકીર્ણ પોલિમર એટલે શું ? સ્ટાયરીન પોલિમરાઇઝેશન બનાવટની ક્રિયાવિધિ સોડિયમ અને નેફ્તેલીનની હાજરીમાં દર્શાવો. સંકિર્ણ પોલિમરના ઝિગ્લર નટ્ટા ઉદ્દીલકનું મહત્વ સમજાવો. તથા સંયોજિત ડાઇની ઇલેક્ટ્રોન અનુરાગી યોગશીલ પ્રક્રિયા 1,2 કરતા 1,4,વધારે ફાયદાકારક છે તે યોગ્ય ઉદાહરણ આપી સમજાવો.

Q. 6 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.

(a) જંતુનાશક એટલે શું ? જંતુનાશકોનું વર્ગીકરણ કરો અને તેમાંથી કોઇપણ એક સમ્પુર્ણ રીતે સમજાવો 04

(b) સસ્તાપ્રક્રિયકનો ઉપયોગ કરી નીચેના પદાર્થની ક્રિયાવિધિ અને અગત્યતા આપો. 06

i) પદાર્થ હે (Haylike) પ્રકારની સુગંધ આપવા માટે જાણીતો છે.

ii) પદાર્થ વધારે પડતો જંતુનાશક બિયારણમાં થાય છે.(insecticidal additive to seed desinfectants)

OR

Q.-6 : નીચેના પ્રશ્નોના જવાબ આપો.

(a) ફીઝ્ઝેટીવ(Fixative) શું છે ? ફીઝ્ઝેટીવનું મુખ્ય કાર્ય શું છે ? પ્રાણીઓના ફીઝ્ઝેટીવ વિષે મુદ્દાસર વર્ણન કરો. 04

(b) સસ્તાપ્રક્રિયકનો ઉપયોગ કરી નીચેના પદાર્થની ક્રિયાવિધિ અને અગત્યતા આપો. 06

i)પદાર્થ ધાતુના વિદ્યુત રસાયણ (electroplating of metal) માટે ઉપયોગી છે.

ii) ડીટર્ઝન્ટ ઇમીડાઝોલ્ ડેરીવેટીવ (imidazoline derivative).

—X—

Sc

[44/A23]
Eng

SEAT No.________

Total no of printed pages: 04 + 06

SARDAR PATEL UNIVERSITY

B.Sc. (Vth semester) Examination October-2018

Subject : Organic chemistry (US05CCHE01)

Date : 22/10/2018 **Time : 10.00 am to 1.00 pm**

Day : Monday **Total Marks : 70**

Q. 1 : Choose the correct option for the following. **10**

1) Which of the following heterocyclic compound is not aromatic?

a) Pyrrole b) Furan c) Pyridine d) Piperidine

2) What is the hybridization of N-atom in pyridine.

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

3) How many NMR signals would you expect from ethyl benzene?

a) 01 b) 02 c)03 d)04

4) How many CMR signals would you expect from o-xylene?

a) 02 b) 01 c) 04 d) 03

5) How many isomers are possible for C_5H_{12}.

a) 02 b) 03 c) 04 d) 05

6) Which of the following is an example of conjugated diene?

a) 1,2-butadiene b) 1,3-butadiene c) 1,4-petadiene d) 1,5-pentadiene

7) Which of the following is the example of homopolymer?

a) Nylon-66 b) SBR c) Dacron d) Saran

8) Which of the following detergent is used as optical brightner?

a) Tinopal RBX b)Miranol C_2M c) IGEPON-T d) None

9) Which of the following perfume is used as a deodorant for unpleasant odour of various goods.

a) Musk xylene b) Linalool c) Vanillin d) Coumarin

10) Electrophilic substitution reaction of pyridine occurs at ----.

a) 3-position b) 2-position c) 2 & 4-position d) 4-position

(P.T.O.)

Q. 2 : Answer the following short questions (Any ten) **20**

1) Explain the structure of pyrrole.

2) Give the synthesis of 2-amino pyridine by Chichibabin reaction.

3) Why pyrrole is less basic than pyridine?

4) Why TMS is used as a standard for reference point in ^{1}HNMR spectroscopy?

5) Discuss the various aspects of CMR spectroscopy.

6) Predict the number of i) NMR signals from 1,1-dimethyl cyclopropane and

ii) CMR signals from p-ethyl toluene.

7) What do you mean by co-polymer? Write only names of various class of co-polymer.

8) Define Plastic and elastomer.

9) What is vulcanization? Why rubber is vulcanised?

10) What are the advantantages of organophosphorous compounds?

11) Define: Perfume. Give the characteristics of good vehicle.

12) Differentiate between stomach insecticide and contact insecticide.

Q.3 : Answer the following.

A) Give the synthesis of 2-methyl quinoline by skrup method. **03**

B) Discuss why nucleophilic substitution reaction in pyridine is preffered at 2 and 4-positions. **04**

C) Arrange the increasing basicity order for pyrrole, piperidine and pyridine and give detail explaination of your answer. **03**

OR

Q.3 : Answer the following.

A) Why electrophilic substitution reaction of pyrrole occurs mainly at 2-position and not at 3-position? **04**

B) Give the synthesis of 1-methyl isoquinoline from benzene. **03**

C) Give the detail stepwise synthesis of 3-carbethoxy-2,4-dimethyl furan from ethyl aceto acetate and α-chloro acetone by Fiest-Benary synthesis. **03**

Q. 4 : Answer the following.

A) Deduce the structure of compound having following spectral data. Lable all kinds of carbons/protons and give appropriate explanation for the structure. **07**

i)Molecular Formula : $C_8H_{10}O_2$
IR (cm^{-1}) : 3400 , 1620, 1250, 1050, 820.
^{1}HNMR (δ, ppm): a) 7.2, 4H , Singlet
b) 4.4, 2H , Singlet
c) 3.8, 3H , Singlet
d) 3.6, 1H , Singlet

ii)Molecular Formula : $C_9H_{12}O$
IR (cm^{-1}) : 3050 , 2900, 1610, 1510, 1450, 1375, 1260, 1180, 1120, 1060, 830-850.
^{1}HNMR (δ, ppm): a) 1.3, 3H , Triplet
b) 2.2, 3H , Singlet
c) 3.9, 2H , Quartet
d) 6.8, 4H , Quartet

B) Discuss proton coupled and proton decoupled spectrum with suitable example. **03**

OR

Q. 4 : Answer the following.

A) Deduce the structure of compound having following spectral data. Label all kinds of carbons/ protons and give appropriate explanation for the structure. **07**

i)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

ii)Molecular Formula : $C_9H_{10}O_2$
IR (cm^{-1}) : 3400, 3600, 3100, 1700, 1600, 1500, 1400, 1220, 920, 702-760.
^{1}H NMR (δ, ppm): a) 2.9, 2H , Triplet
b) 2.8, 2H , Tripet
c) 7.4, 5H , Singlet
d) 10.5, 1H , Singlet

B) Write a note on phenomenon of the splitting of NMR signals. **03**

Q. 5 : Answer the following. **10**

What are dienes? Give the classification of diene. Discuss the addition of HBr to 1,3-butadiene at -80° and 40° temp. with potential energy diagram. Also give distinguishing features of addition and condensation polymerisation.

OR

(P.T.O)

Q. 5 : Answer the following. **10**

What is co-ordination polymerization? Give the mechanism for polymerization of styrene in presence of sodium metal and naphthalene. Explain the importance of Ziegler-Natta catalyst in co-ordination polymerization. Also justify with suitable example that conjugated dienes undergo 1,4-addition preferentially over 1,2-addition during electrophilic addition reaction.

Q. 6 : Answer the following.

A) What are insecticide? Give the classification of insecticide and discuss any one of them in detail. **04**

B) Give the synthesis and applications of the following from cheapest raw material. **06**

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

ii) Compound used as insecticidal additive to seed desinfectants.

OR

Q. 6 : Answer the following.

A) What is fixative? What is the main function of fixative? Discuss in detail about animal fixative. **04**

B) Give the synthesis and applications of the following from cheapest raw material. **06**

i) Compound used in electroplating of metal.

ii) Detergent of imidazoline derivative.

—— X ——

SEAT No.________

No. of Printed Pages : 06

Characteristic Proton Chemical Shifts

Type of proton		Chemical shift, ppm
		δ
Cyclopropane		0.2
Primary	RCH_3	0.9
Secondary	R_2CH_2	1.3
Tertiary	R_3CH	1.5
Vinylic	C=C—H	4.6–5.9
Acetylenic	C≡C—H	2–3
Aromatic	Ar—H	6–8.5
Benzylic	Ar—C—H	2.2–3
Allylic	C=C—CH_3	1.7
Fluorides	HC—F	4–4.5
Chlorides	HC—Cl	3–4
Bromides	HC—Br	2.5–4
Iodides	HC—I	2–4
Alcohols	HC—OH	3.4–4
Ethers	HC—OR	3.3–4
Esters	RCOO—CH	3.7–4.1
Esters	HC—COOR	2–2.2
Acids	HC—COOH	2–2.6
Carbonyl compounds	HC—C=O	2–2.7
Aldehydic	R-CHO	9–10
Hydroxylic	R-OH	1–5.5
Phenolic	Ar-OH	4–12
Enolic	C=C—OH	15–17
Carboxylic	RCOOH	10.5–12
Amino	RNH_2	1–5

Characteristic Infrared Absorption Frequencies

Bond	Compound type	Frequency range, cm^{-1}
C-H	Alkanes	2850-2960 1350-1470
C-H	Alkenes	3020-3080 (m) 675-1000
C-H	Aromatic rings	3000-3100 (m) 675-870
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
C=O	Aldehydes, ketones, carboxylic acids, esters	1690-1760
O-H	Monomeric alcohols ,phenols Hydrogen bonded alcohols, phenols Carboxylic acids	3610-3640 (v) 3200-3600 (broad) 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

(P.T.O.)

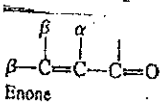
Characteristic absorption for dienes

Base value for heteroannular diene	214
Base value for homoannular diene	253
Increments for	
Double bond extending conjugation	+30
Alkyl substituent or ring residue	+5
Exocyclic double bond	+5
Polar groupings: OAc	+0
OAlk	+6
SAlk	+30
Cl, Br	+5
$N(Alk)_2$	+60
Solvent correction[a]	+0
	λ_{calc} = Total

Characteristic absorption for substituted benzene derivatives

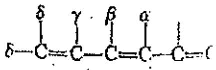
$ArCOR/ArCHO/ArCO_2H/ArCO_2R$		λ_{max}^{EtOH} (nm)
Parent chromophore: $Ar = C_6H_5$		
G = Alkyl or ring residue, (e.g., ArCOR)		246
G = H, (ArCHO)		250
G = OH, OAlk, ($ArCO_2H$ and $ArCO_2R$)		230
Increment for each substituent on Ar:		
—Alkyl or ring residue	o-, m-	+3
	p-	+10
—OH, —OCH_3, —OAlk	o-, m-	+7
	p-	+25
—O^- (oxyanion)	o-	+11
	m-	+20
	p-	+78[b]
—Cl	o-, m-	+0
	p-	+10
—Br	o-, m-	+2
	p-	+15
—NH_2	o-, m-	+13
	p-	+58
—$NHCOCH_3$	o-, m-	+20
	p-	+45
—$NHCH_3$	p-	+73
—$N(CH_3)_2$	o-, m-	+20
	p-	+85

Characteristic absorption for α, β-unsaturated carbonyl compounds



Enone

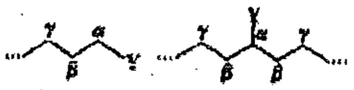
and



Dienone

		(nm)
Base values		
Acyclic α,β-unsaturated ketones		215
Six-membered cyclic α,β-unsaturated ketones		215
Five-membered cyclic α,β-unsaturated ketones		202
α,β-Unsaturated aldehydes		210
α,β-Unsaturated carboxylic acids and esters		195
Increments for		
Double bond extending conjugation		+30
Alkyl group, ring residue	α	+10
	β	+12
	γ and higher	+18
Polar groupings: —OH	α	+35
	β	+30
	δ	+50
—OAc	α,β,δ	+6
—OMe	α	+35
	β	+30
	γ	+17
	δ	+31
—SAlk	β	+85
—Cl	α	+15
	β	+12
—Br	α	+25
	β	+30
—NR_2	β	+95
Exocyclic double bond		+5
Homodiene component[a]		+39

^{13}C shifts for terminal and internal systems



Terminal   Internal

Y	α Terminal	α Internal	β Terminal	β Internal	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		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

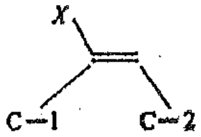
$$X{-}C{-}C{-}C{-}C$$
$$\quad\ \alpha\quad \beta\quad \gamma$$

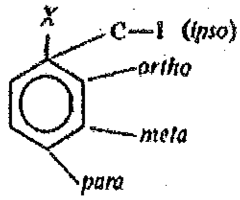
X	α-shift $X{-}CH_2{-}$ 1°	or $X{-}CH(R){-}$ 2°	or $X{-}CR_2{-}$ 3°	β-shift	γ-shift
$-CH_3$	9	6	3	9	−3
—R: see table 3.11					
axial $-CH_3$	1	–	–	5	−6
equatorial $-CH_3$	6	–	–	9	0
(in cyclohexanes)					
$-CH{=}CH_2$	22	16	12	7	−2
$-C{\equiv}CH$	4	–	–	3	−3
$-C_6H_5$, —Ar	23	17	11	10	−3
—F	70	–	–	8	−7
—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	−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

(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,	16	−8	15	0	0	−2
R,	23	−8	21	0	0	−2
—$CH=CH_2$	15	−6	9	0	0	−2
—$CH\equiv CH$	–	–	−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

—X—