

## Vicinal Coupling $^3J(H,H)$ Substituent Effects

**Table 3-6.**  
Vicinal H,H coupling constants in  
monosubstituted ethanes.

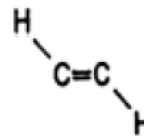
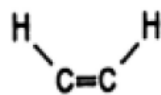
$X-CH_2-CH_3$		
X	$^3J(H,H)$ [Hz]	$E_X^{a)}$
Li	8.4	1.0
H	8.0	2.2
CH <sub>3</sub>	7.3	2.5
Cl	7.2	3.0
OR	7.0	3.5

<sup>a)</sup> Electronegativities according to Pauling.

در آلکانها استخلافهای الکترونگاتیو جفت شدن را کاهش می دهند اما اثر بسیار بزرگ نیست

ارتباط ثابتهای جفت شدن و اختلاف الکترونگاتیویتهی:

$$^3J(H,H) = 8.0 - 0.8(E_X - E_H)$$



$$^3J_{cis} = 6-14 \text{ Hz (usually 10)}$$

$$^3J_{trans} = 14-20 \text{ Hz (usually 16)}$$

**Scheme III**

**Table 3-7.**  
Vicinal H,H coupling constants in monosubstituted ethylenes.

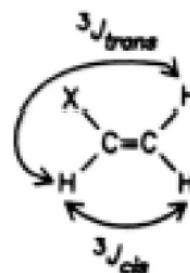
X	$^3J_{cis}$ [Hz] <sup>a)</sup>	$^3J_{trans}$ [Hz] <sup>a)</sup>	$E_X$ <sup>b)</sup>
Li	19.3	23.9	1.0
H	11.6	19.1	2.2
Cl	7.3	14.6	3.0
OCH <sub>3</sub>	7.1	15.2	3.5
F	4.7	12.8	4.0

<sup>a)</sup> Values from [1] p. 384.

<sup>b)</sup> Electronegativities according to Pauling.

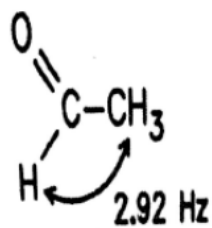
$$^3J_{cis} = 11.7 - 4.7 (E_X - E_H)$$

$$^3J_{trans} = 19.0 - 3.3 (E_X - E_H)$$

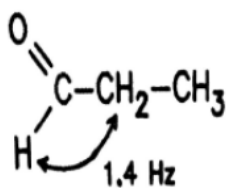


**Table 3-8.**  
Vicinal H,H *cis* coupling constants  
in cycloalkenes.

Compound	$^3J_{cis}$ [Hz]
Cyclopropene	1.3
Cyclobutene	3.0
Cyclopentene	5.0
Cyclohexene	9.0
Cycloheptene	10.0



10

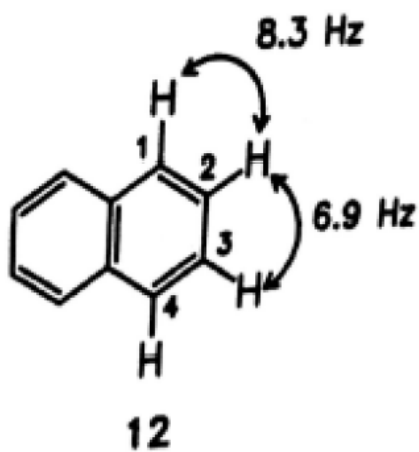


11

**Table 3-9.**

H,H coupling constants in benzene and benzene derivatives.

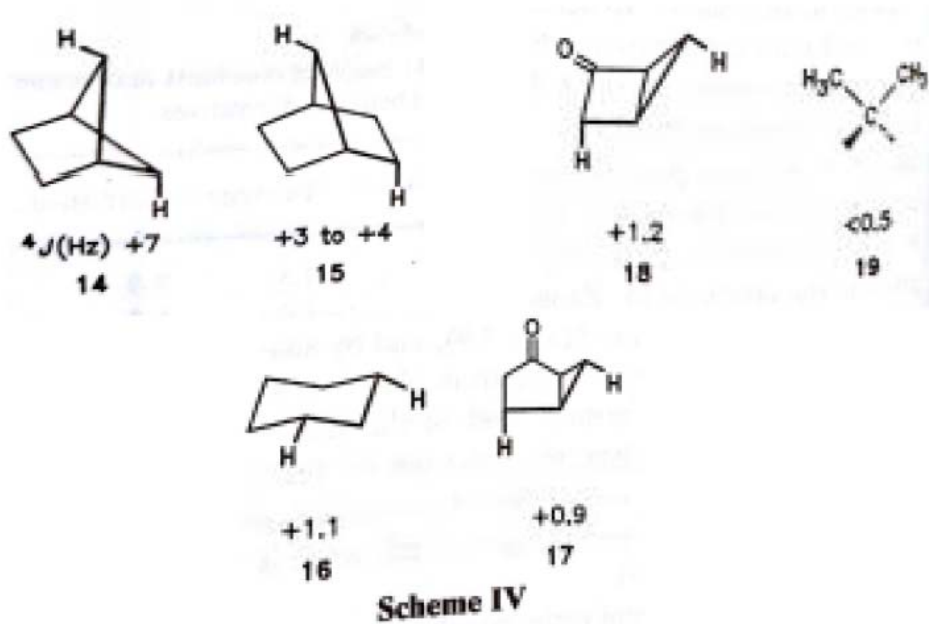
$J$ [Hz]	Benzene	Derivatives
$J_o$	7.5	7-9
$J_m$	1.4	1-3
$J_p$	0.7	< 1

**Table 3-10.**

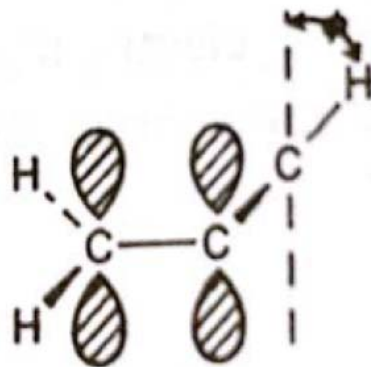
H,H coupling constants in pyridine and pyridine derivatives.

	$J(\text{H,H})$ [Hz]		
		Pyridine	Derivatives
<p style="text-align: center;">13</p>	<i>ortho</i>	2.3	4.9
		3.4	7.7
<i>meta</i>		2.4	1.2
		3.5	1.4
		2.6	-0.1
<i>para</i>	2.5	1.0	0-1

## Long-range Couplings



جفت شدن از طریق چهار پیوند در ترکیبات آلیلی به مقدار زیادی به زاویه بین محور پیوند کربن-پروتون و محور اربیتال پای در پیوند دوگانه بستگی دارد



$\phi = 0^\circ$  : maximum ( $-3$  Hz)

$\phi = 90^\circ$  : minimum ( $-0.5$  Hz)

جفت شدن از طریق پنج پیوند و بیشتر در موارد نادری مشاهده شده است

