



C,H Coupling Constants and Chemical Structure

C,H Coupling through One Bond

وابستگی به مقدار خصوصیت S

$${}^1J(\text{C,H})=500 s$$

Table 3-11.

Coupling constants ${}^1J(\text{C,H})$ in ethane, ethylene, benzene and acetylene with hybridization and fraction of s-character in the hybrid orbitals.

	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	C_6H_6	$\text{HC}\equiv\text{CH}$
${}^1J(\text{C,H})$ [Hz]	124.9	156.4	158.4	249.0
Hybridization	sp^3	sp^2	sp^2	sp
s-fraction	0.25	0.33	0.33	0.5

Table 3-13.Coupling constants $^1J(\text{C,H})$ in cycloalkenes.

Compound	$^1J(=\text{C,H})$ [Hz]
Cyclopropene	228.2
Cyclobutene	168.6
Cyclopentene	161.6
Cyclohexene	158.4
$\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$ ($n > 6$)	≈ 156

Table 3-12.Coupling constants $^1J(\text{C,H})$ in cycloalkanes [4].

Compound	$^1J(\text{C,H})$ [Hz]
Cyclopropane	160.3
Cyclobutane	133.6
Cyclopentane	128.5
Cyclohexane	125.1
Cyclodecane	124.3

در حلقه هایی که بیشتر تحت فشار هستند انحراف بیشتری از مقادیر محاسبه شده مشاهده می شود

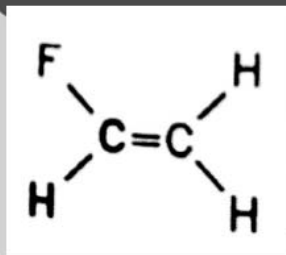
اثرات استخلاف

Table 3-14.Coupling constants $^1J(\text{C,H})$ in monosubstituted methanes.

$^{13}\text{CH}_3\text{-X}$	$^1J(\text{C,H})$ [Hz]
F	149.1
Cl	150.0
OH	141.0
H	125.0
CH_3	124.9
Li	98.0

استخلافهای الکترونگاتیو $^1J(\text{C,H})$ را افزایش می دهند

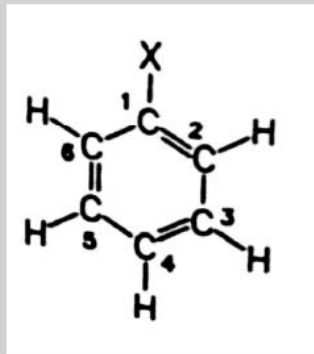
اثرات بیشتر القایی است



$${}^1J(\text{C,H})=200.2 \text{ Hz}$$

For ethylene:

$${}^1J(\text{C,H})=156.4 \text{ Hz}$$



$$\text{For benzene: } {}^1J(\text{C,H})=158.4 \text{ Hz}$$

اثر استخلاف با افزایش فاصله کاهش می یابد

$${}^1J(\text{C-3,H-3}) \quad {}^1J(\text{C-2,H-2})$$

$${}^1J(\text{C-4,H-4})$$

**C,H Coupling through Two
or
More Bonds**

Geminal Coupling

Table 3-15.
Geminal C,H coupling constants ($^2J(C,H)$) in ethane, ethylene, benzene and acetylene.

Compound	$^2J(C,H)$ [Hz]
Ethane	- 4.5
Ethylene	- 2.4
Benzene	+ 1.1
Acetylene	+49.6

$^2J(C,H)$

H-C- ^{13}C

Vicinal Coupling

$^3J(C,H)$

H-C-C- ^{13}C

ارتباط بین ثابتهای جفت شدن ویسینال با زاویه دو وجهی همانند ارتباط مربوط به جفت شدن پروتون-پروتون است

$$\Phi=0^\circ \quad J=7-9 \text{ Hz}$$

$$\Phi=180^\circ \quad J=7-9 \text{ Hz}$$

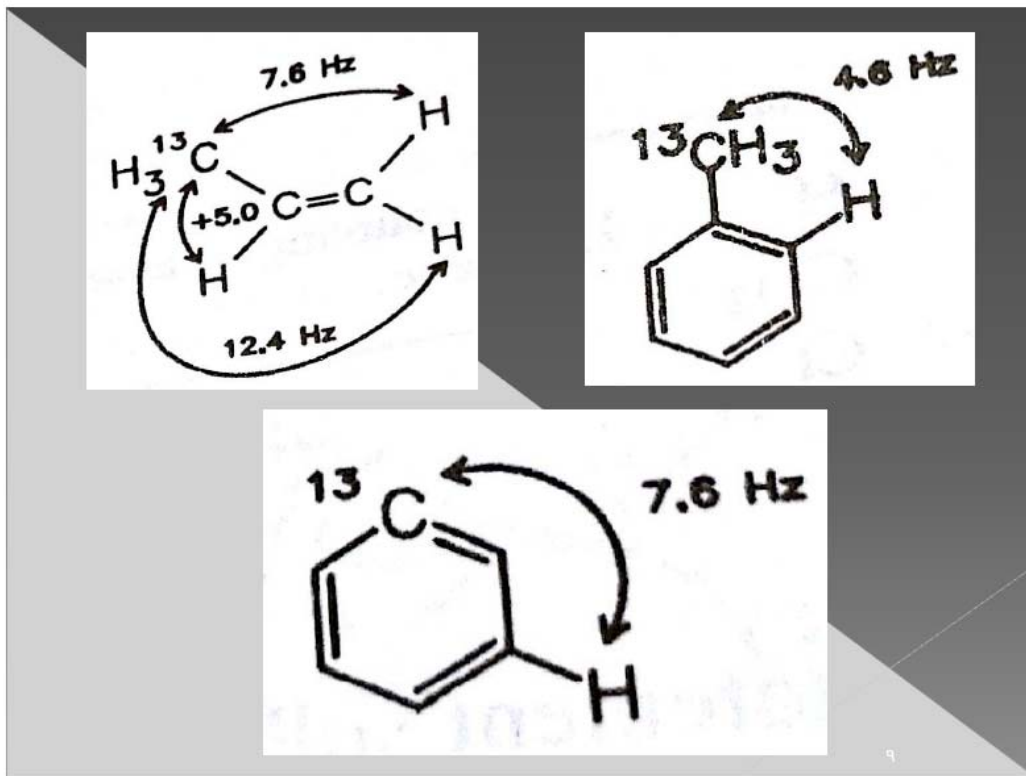
$$\Phi=90^\circ \quad J=0$$

عوامل مؤثر بر جفت شدن ویسینال :

- طول پیوند C-C

- زاویه پیوند

- الکترونگاتیویته استخلافها

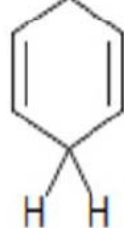
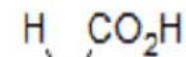


Long-Range Coupling

$${}^{3+n}J(\text{C,H})$$

معمولاً به جز در موارد استثنایی قابل مشاهده نیست

$${}^2J_{\text{CH}} = -11.0 \text{ Hz}$$



$${}^2J_{\text{HH}} = -22.0$$

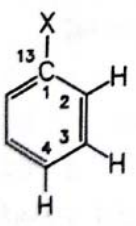
	cis	trans
${}^5J_{\text{HH}}$	9.19	7.57
${}^5J_{\text{CH}}$	5.75	4.65

JACS-1977-321

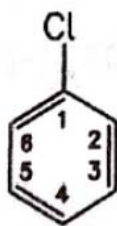
C,H Couplings in Benzene Derivatives

Table 3-16.

Some C,H coupling constants for benzene, toluene, chlorobenzene and fluorobenzene.

	X	$^1J(C^1,H^1)$	$^2J(C^1,H^2)$	$^3J(C^1,H^3)$	$^4J(C^1,H^4)$
		[Hz]			
H		158.4	+1.1	+ 7.6	-1.3
CH ₃			+0.5	+ 7.6	-1.4
Cl			-3.4	+10.9	-1.8
F			-4.9	+11.0	-1.7

$^1J(C,H)$: 161.4 to 164.9 Hz
 $^2J(C,H)$: -3.4 to +1.6 Hz
 $^3J(C,H)$: 5.0 to 11.1 Hz
 $^4J(C,H)$: -0.9 to -2.0 Hz



در مورد ترکیبات هتروآروماتیک مثل پیریدین چنین تفاوت روشنی بین محدوده های مقادیر یافت شده برای $^2J(C,H)$ و $^3J(C,H)$ وجود ندارد