

^{19}F NMR

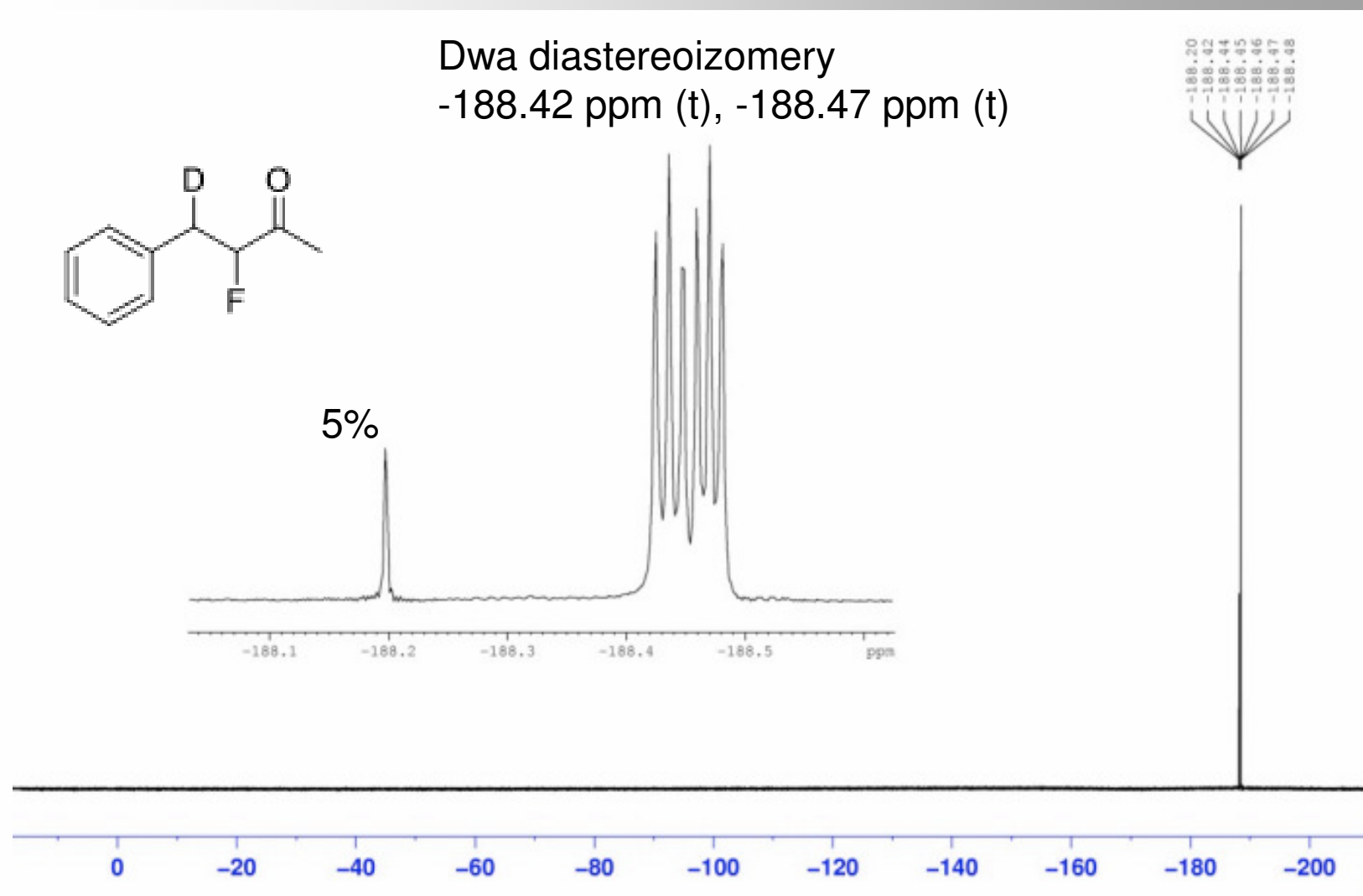
^{15}N NMR

^{31}P NMR

Literatura

- W. R. Dolbier, Guide to Fluorine NMR for Organic Chemists (2009) pp. 1-272.
- F. F. Mooney, P. H. Winson, Fluorine-19 Nuclear magnetic Resonance Spectroscopy, Mooney EF and Winson PH (1967) Annual Reports on NMR Spectroscopy 1: 243–311
- Spectroscopic Methods in Organic Chemistry; M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh (Translated by A. Linden and M. Murray); George Thieme Verlag, Stuttgart, New York, 1997

¹⁹F NMR



¹⁹F NMR (CDCl₃, 376.4 MHz): δ: -188.44 (t, J_{DF} = 4.4 Hz), -188, 47 (t, J_{DF} = 4.0 Hz); (5%) -188.2 (s)

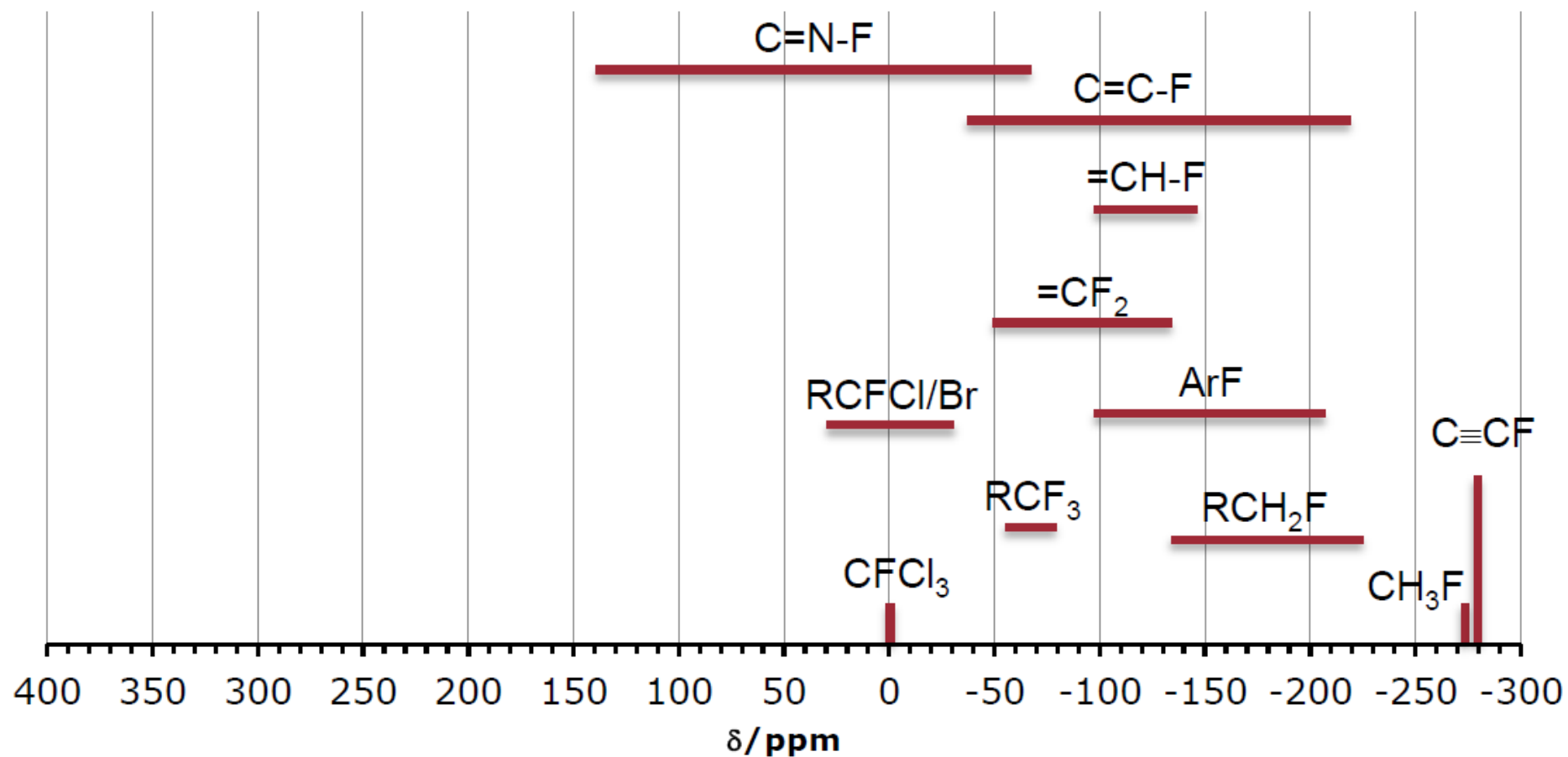
¹⁹F NMR

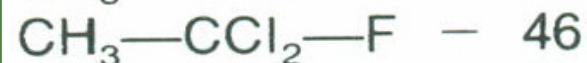
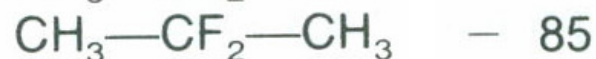
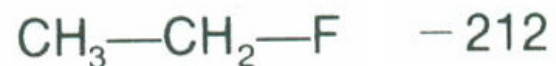
Jądro	Spin I	Zawartość naturalna [%]	Częstotliwość rezonansowa [MHz] (B ₀ =2,3488 T)	Współczynnik magnetogiryczny γ [10 ⁷ rad T ⁻¹ s ⁻¹]
¹ H	½	99,98	100,000	26,7519
¹⁹ F	½	100,00	94,077	25,181

Wzorzec przesunięcia chemicznego

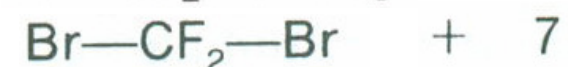
$\delta(\text{ppm})$ vs. CFCl_3	
CFCl_3	0
CF_3COOH	-76.55
C_6F_6	-164.9
$\text{C}_6\text{H}_5\text{F}$	-113.15
CF_3Cl	-28.6
CH_2FCN	-251
$\text{CFCl}_2\text{CFCl}_2$	-67.8
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CF}_3$	-63.72
SiF_4	-163.3
$(\text{CF}_3)_2\text{CO}$	-84.6
p- $\text{FC}_6\text{H}_4\text{F}$	-106
BF_3	-134
HF (aq)	-204
$\text{F}^- (\text{KF}) \text{ aq}$	-125.3

Typowe zakresy przesunięć chemicznych ^{19}F NMR

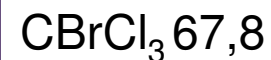




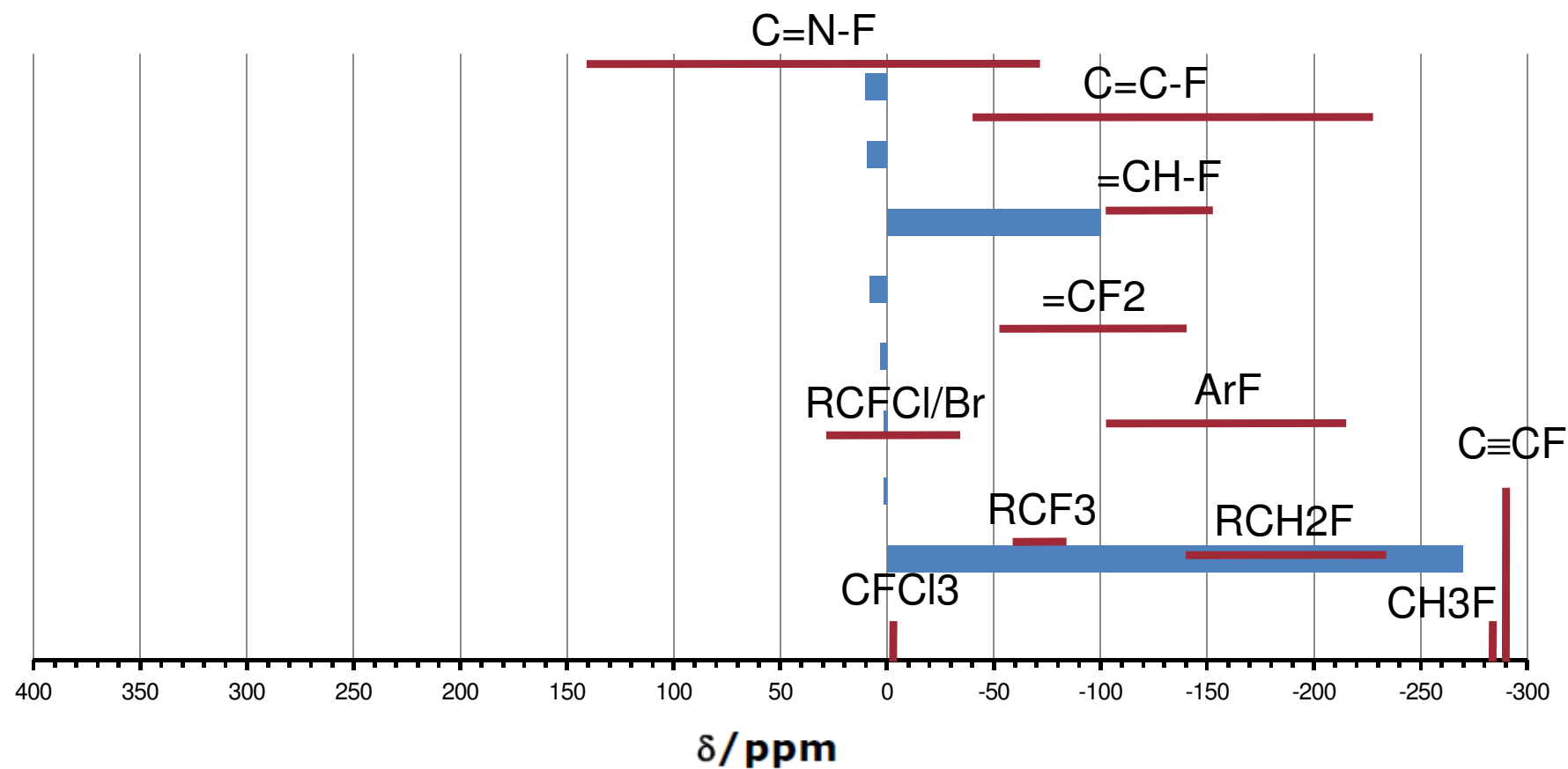
^{19}F NMR, δ/ppm

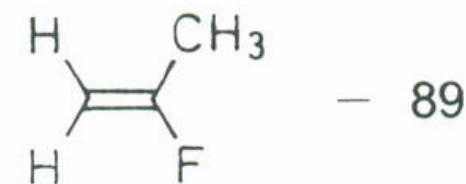
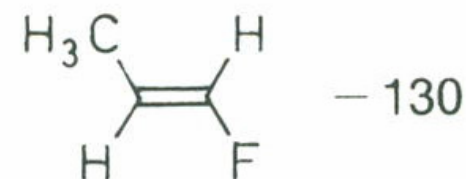
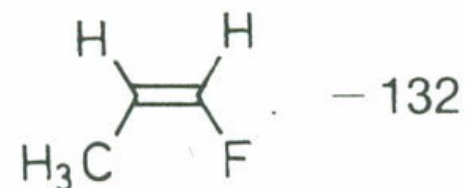
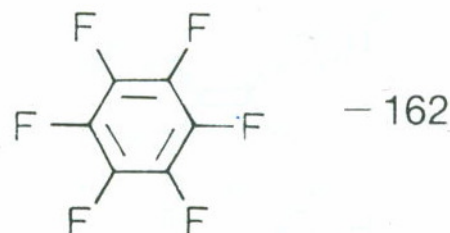
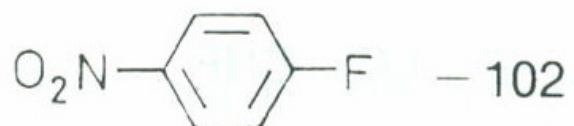
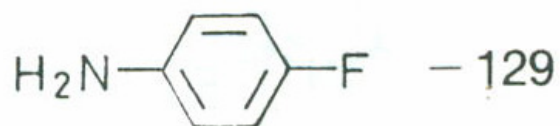


^{13}C NMR

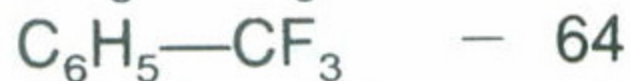
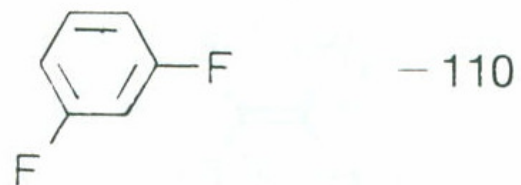
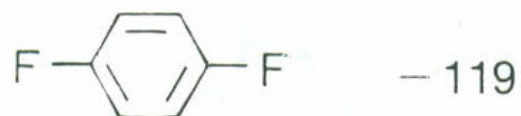


Typowe zakresy przesunięć chemicznych ^{19}F NMR





^{19}F NMR δ/ppm

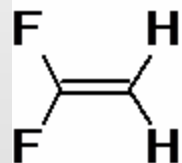


Stałe sprzężenia spinowo-spinowego, J_{FF}

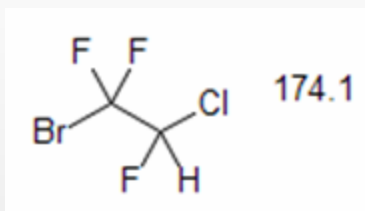
$^2J_{FF}$
geminalne



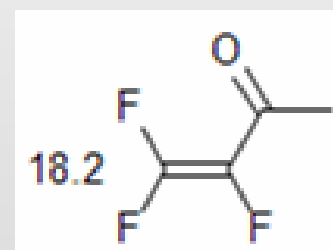
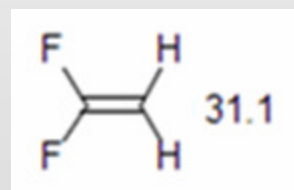
40-370 Hz



0-110 Hz

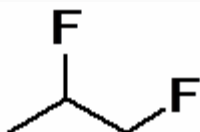


244

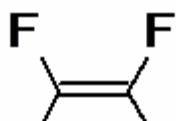


Stałe sprzężenia spinowo-spinowego, J_{FF}

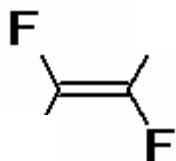
$^3J_{FF}$
wicynalne



0-45 Hz

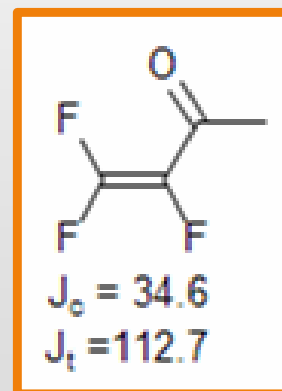
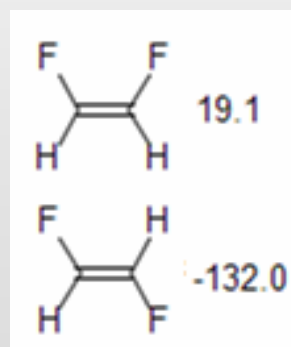
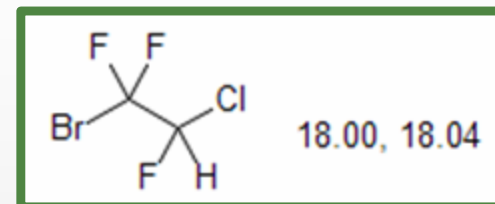


0-60 Hz

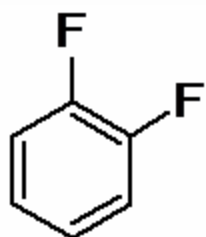


100-150 Hz

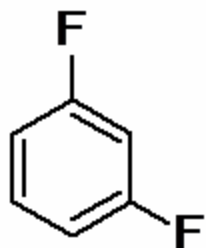
CF_3-CHF_2	15
$CHF_2-CHF-CHF_2$	13
$CHF_2-CF_2-CHF_2$	4



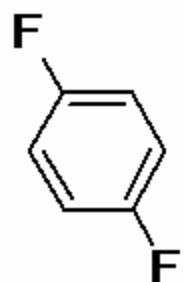
Stałe sprzężenia spinowo-spinowego, J_{FF}



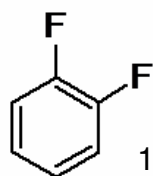
18-35 Hz



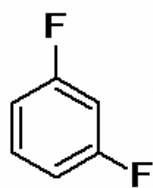
0-15 Hz



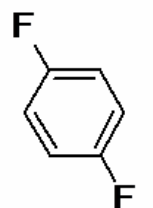
4-18 Hz



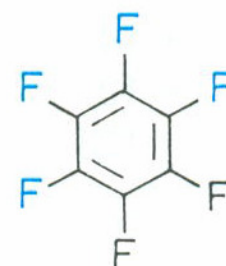
19 Hz



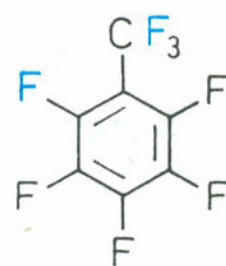
7 Hz



18 Hz



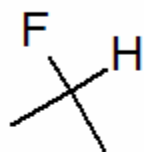
20
3
4



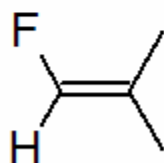
23

Stałe sprzężenia spinowo-spinowego, J_{HF}

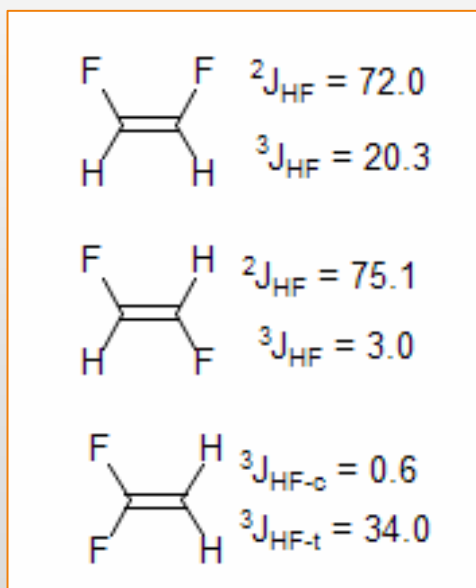
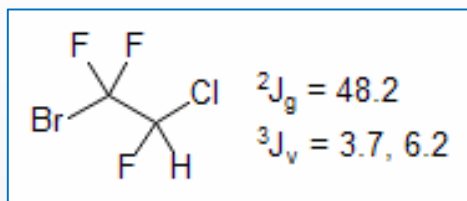
$^2J_{HF}$
geminalne



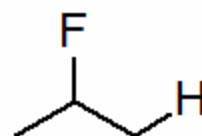
40-60 Hz



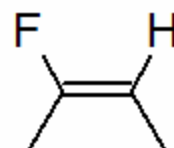
70-90 Hz



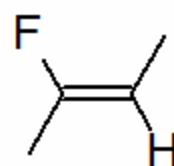
$^3J_{HF}$
wycynalne



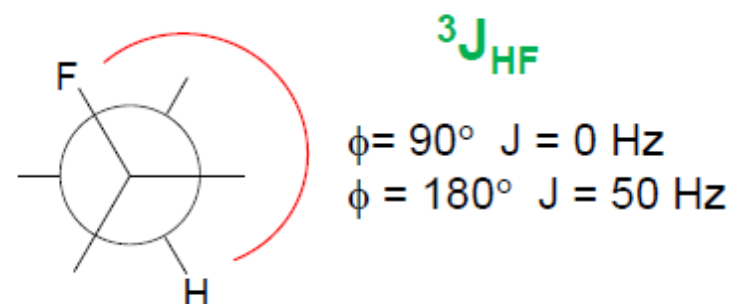
0-50 Hz



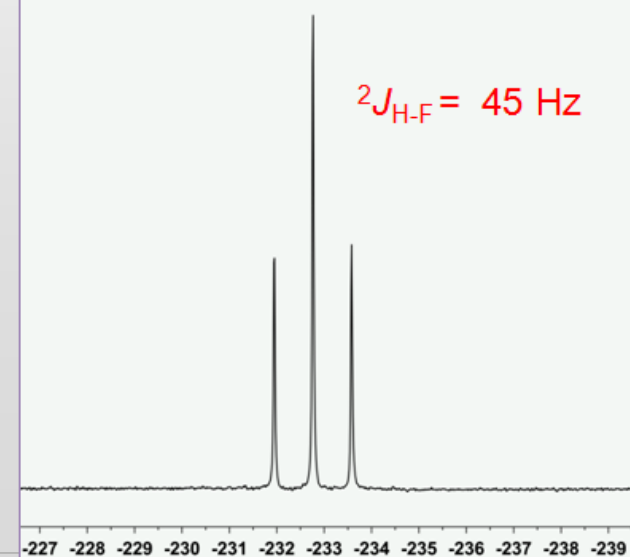
0-20 Hz



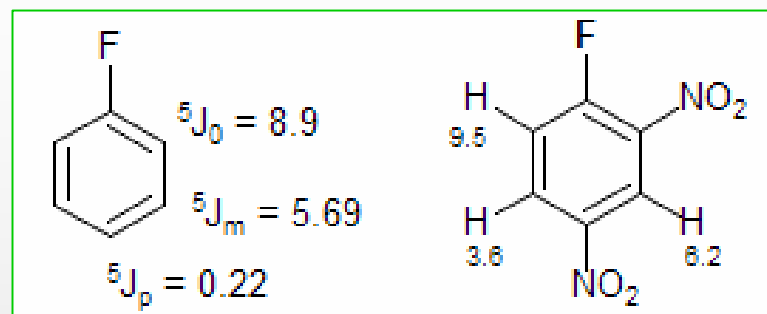
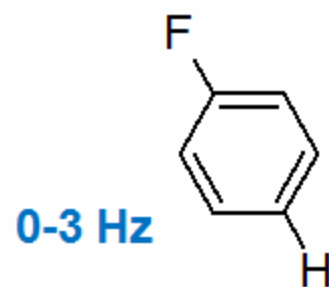
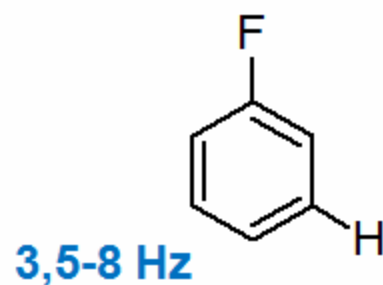
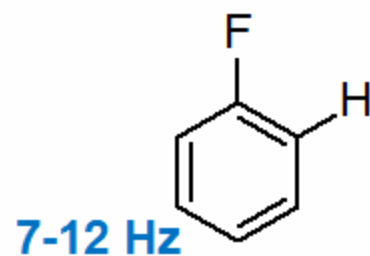
10-50 Hz



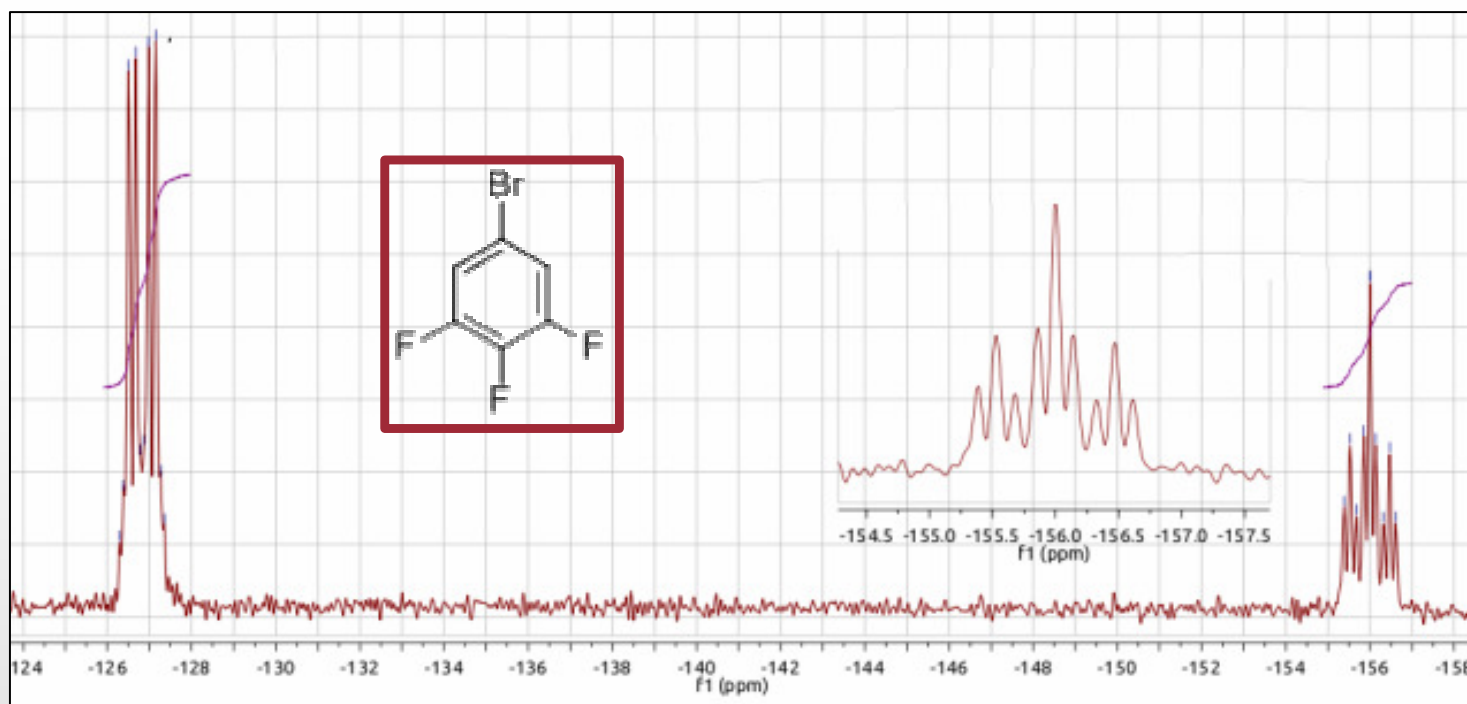
^{19}F NMR (CDCl_3) 56 MHz
Fluoroacetonitryl, FH_2CCN



Stałe sprzężenia spinowo-spinowego, J_{HF}



¹⁹F NMR



δ/ppm	Int.	multiplet	J/Hz
-156,0	1	tt	$^3J_{FF}=19,6$; $^4J_{HF}=6,0$
-126,8	2	dd	$^3J_{FF}=19,8$; $^3J_{HF}=6,2$

Stałe sprzężenia spinowo-spinowego, J_{CF}

$^1J_{CF}$ -CF₂-, -CF₂H 234-250 Hz
 $^1J_{CF}$ -CHF-, -CH₂F 160-170 Hz

Ar-F

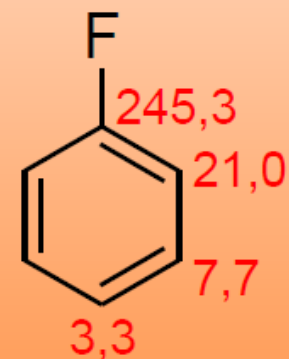
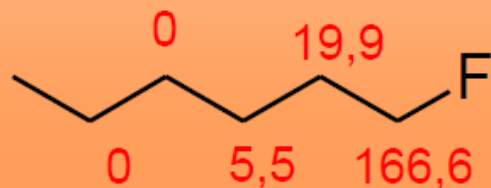
$^1J_{CF}$ 16-370 Hz

$^2J_{CF}$ 30-45 Hz

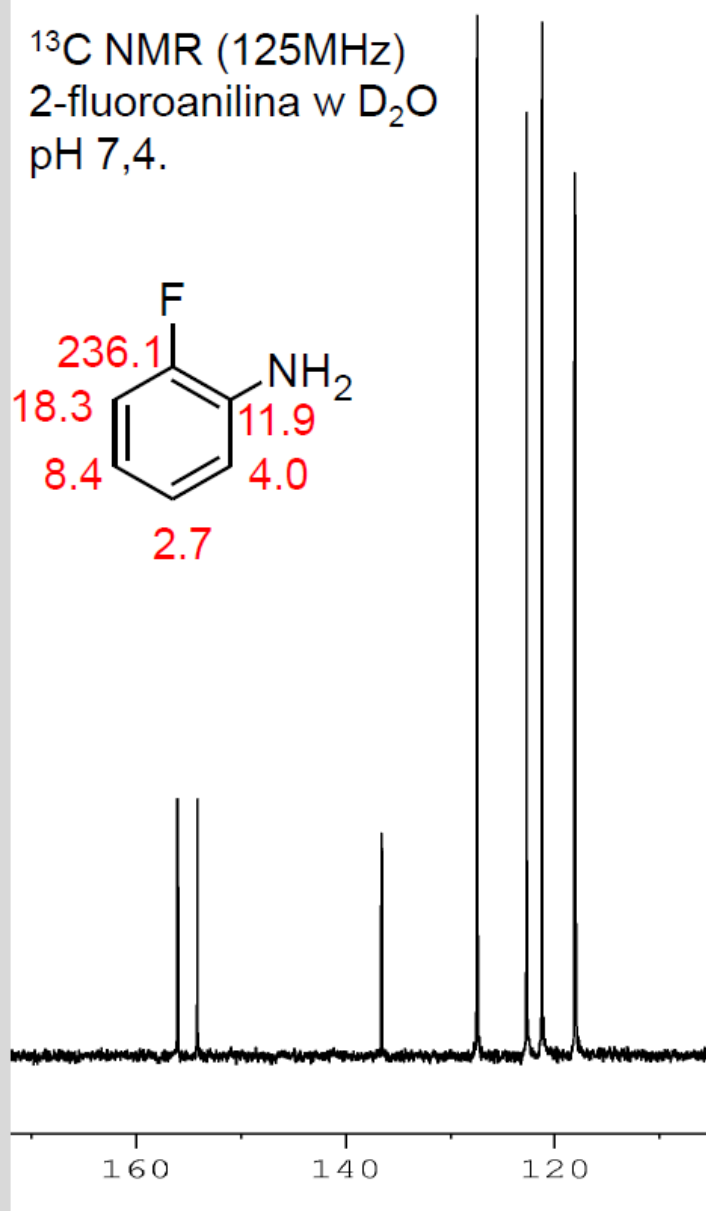
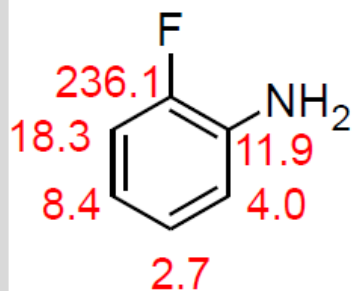
$^3J_{CF}$ 5-25 Hz

$^4J_{CF}$ 1-5 Hz

H₃C-F $^1J_{CF} = 158$ Hz



^{13}C NMR (125MHz)
2-fluoroanilina w D_2O
pH 7,4.



pik	δ/ppm	intensywność
1	156.018	20.575
2	154.129	23.905
3	136.608	18.818
4	136.513	22.446
5	127.462	90.796
6	127.430	88.099
7	122.738	93.711
8	122.671	69.685
9	121.240	72.450
10	121.218	86.468
11	118.158	100.874
12	118.012	97.334

$J(\text{CF})/\text{Hz}$

236.1

11.9

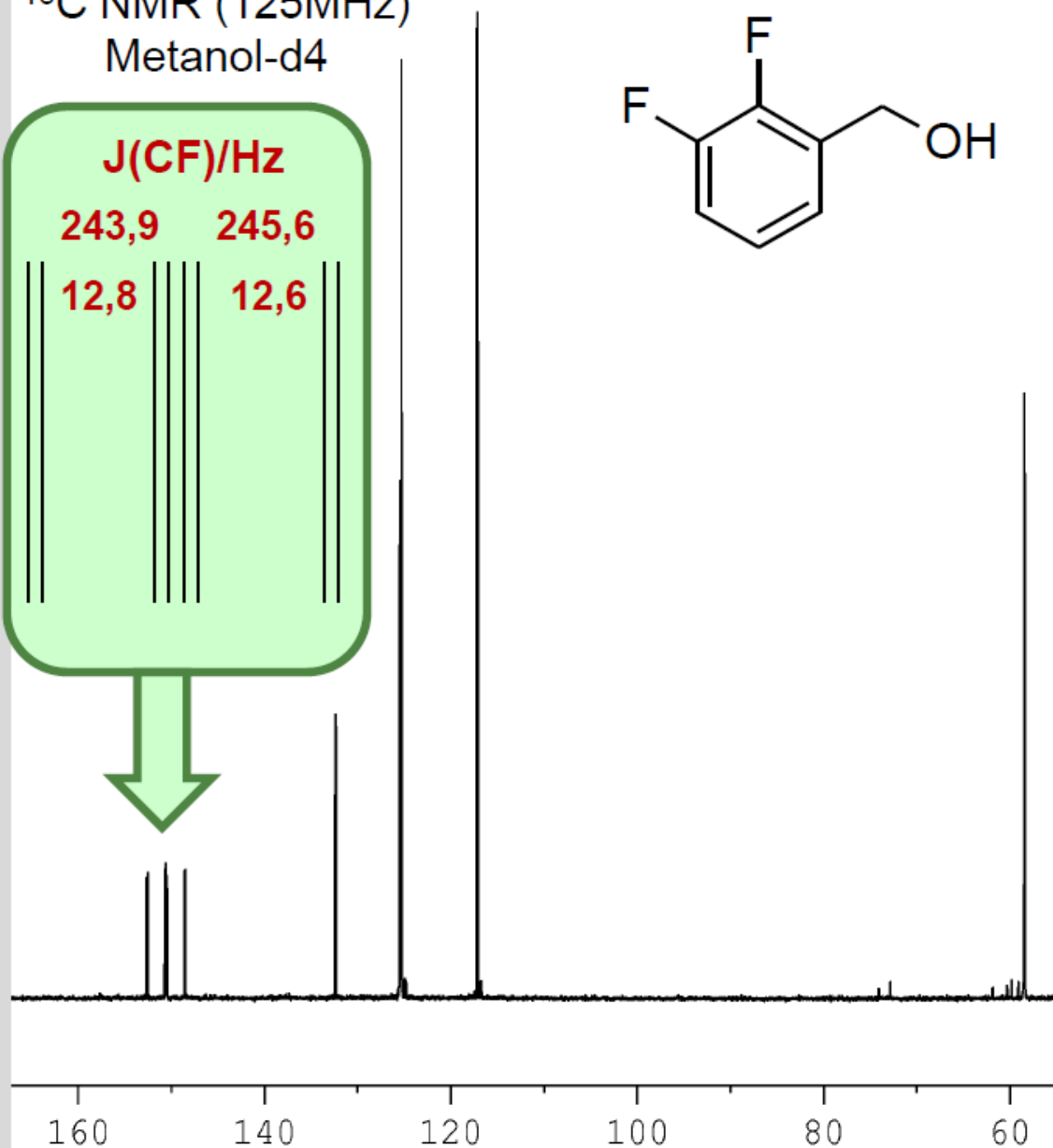
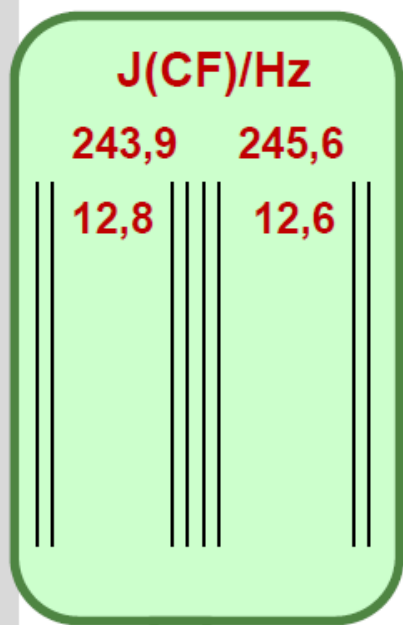
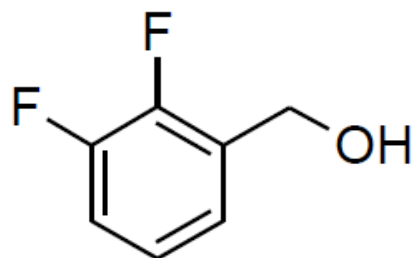
4.0

8.4

2.7

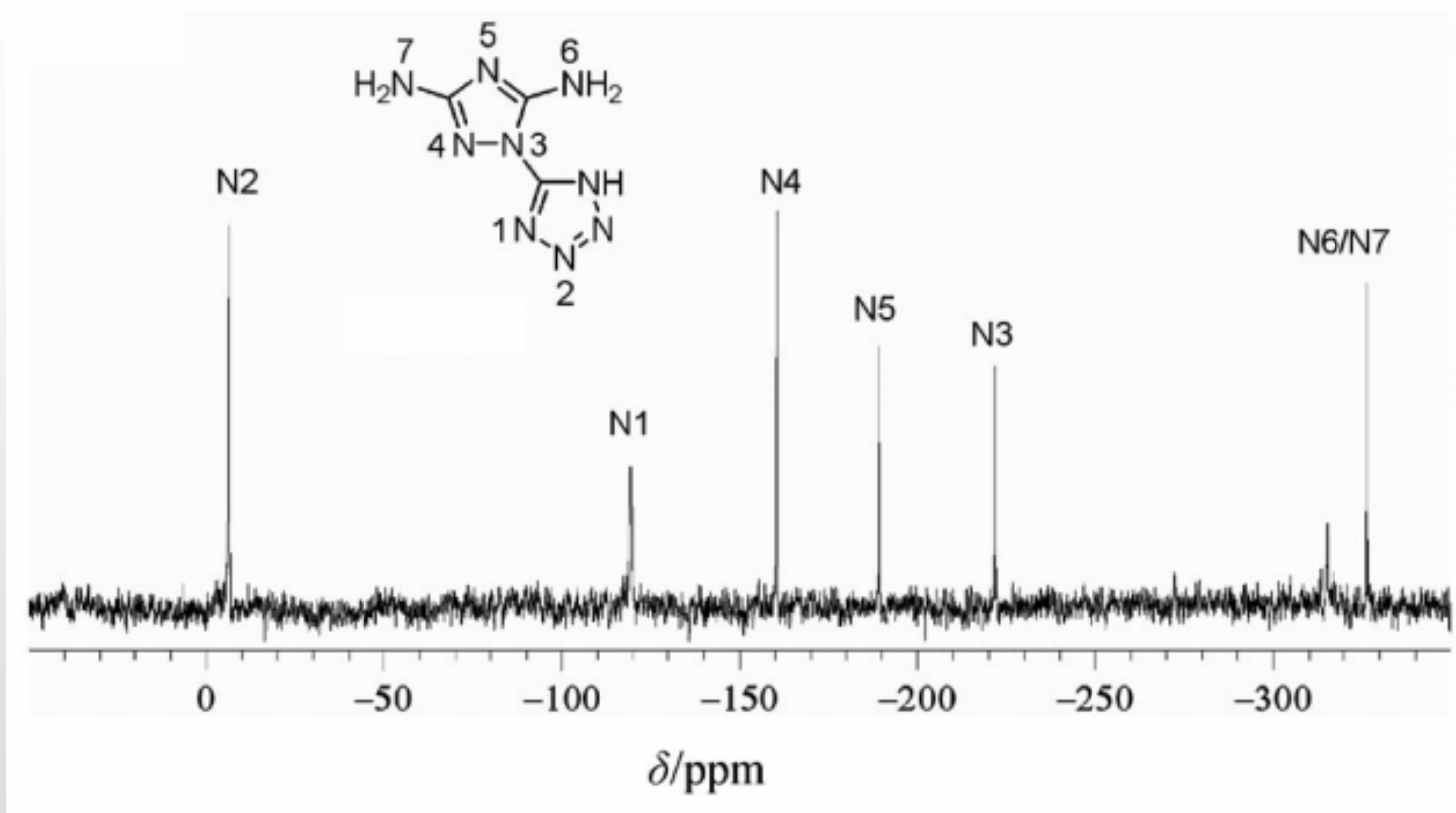
18.3

^{13}C NMR (125MHz)
Metanol-d₄



pik	δ/ppm	Int.
1	152.666	1.362
2	152.564	1.317
3	150.715	1.449
4	150.613	1.538
5	150.570	1.348
6	150.468	1.277
7	148.605	1.423
8	148.504	1.412
9	132.460	3.111
10	132.368	2.445
11	125.533	4.309
12	125.465	5.506
13	125.433	4.523
14	125.330	5.474
15	125.306	10.195
16	125.273	6.039
17	117.246	7.600
18	117.110	10.814
19	58.479	6.905
20	58.443	5.963

^{15}N NMR



Widmo ^{15}N NMR (DMSO-d_6) pochodnej tetrazolu.

Eur. J. Org. Chem. 2009, 3573–3578

¹⁵N NMR

Jądro	Spin I	Zawartość naturalna [%]	Częstotliwość rezonansowa [MHz] (Bo=2,3488 T)	Współczynnik magnetogiryczny γ [$10^7 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$]
¹ H	½	99,98	100,000	26,7519
¹³ C	½	1,108	24,144	6,7283
¹⁴ N	1	99,63	7,224	1,9338
¹⁵ N	½	0,37	10,133	-2,712

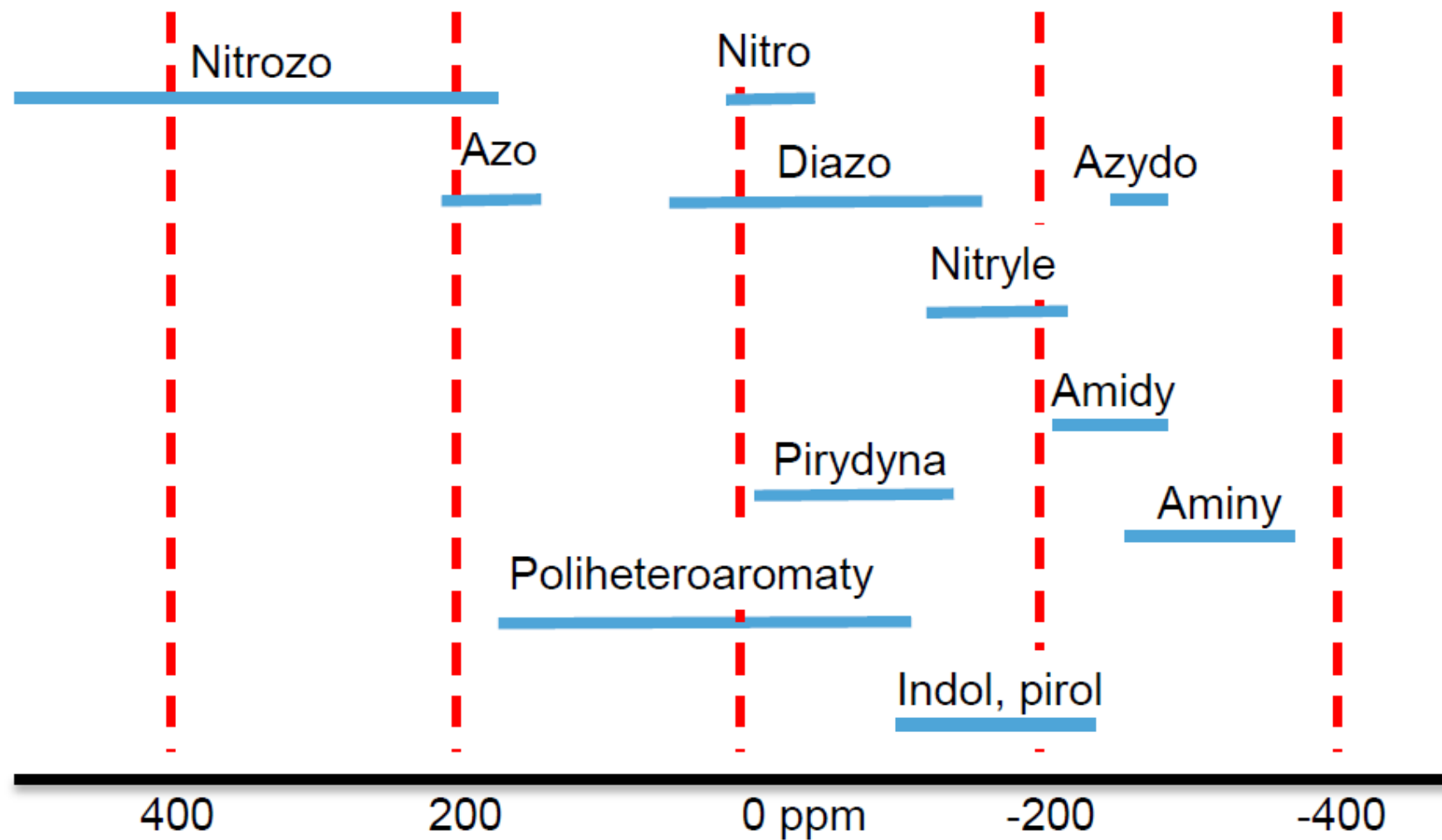
Bardzo szerokie sygnały

- ❖ Wzbogacanie próbki
- ❖ Detekcja odwrotna

Ujemny efekt NOE

Wzorzec przesunięcia chemicznego

związek	IUPAC	vs. NH ₃
CH ₃ NO ₂	0.000	376.86
NH ₃	-381.9	0
mocznik w DMSO	-302.6	73.4
NH ₄ Cl	-352.9	
formamid	-267.8 b	108.2



Widma ^{15}N NMR – charakterystyczne cechy ułatwiające określanie struktury

- Oba występujące w przyrodzie izotopy azotu ^{14}N i ^{15}N są magnetyczne i można je obserwować metodą NMR ;
- Jądra izotopu ^{14}N , dominujące w populacji naturalnej (~99,6%), niezerowa wartość elektrycznego momentu kwadrupolowego powodująca drastyczne poszerzenie sygnałów;
- Jądro ^{14}N ma kwantową liczbę spinową równą 1. Duża szerokość linii spektralnych — szerokość połówkowa może dochodzić do kilku kHz. Powodem tego jest szybka relaksacja kwadrupolowa, skracająca czas przebywania jąder w poszczególnych stanach energetycznych.
- Jądra izotopu ^{15}N - mała czułość detekcji spowodowana niewielką wartością momentu magnetycznego, mała zawartość tego izotopu w populacji naturalnej (~0,4%) oraz długie czasy relaksacji (kilkadziesiąt i więcej sekund);
- Jądra azotu ^{15}N mają kwantową liczbę spinową równą 1/2 oraz zerowy elektryczny moment kwadrupolowy. Szerokość sygnału jest rzędu 1Hz, zakres przesunięć chemicznych dla związków organicznych praktycznie ok. 600 ppm,(dla kompleksów z metalami ta wartość może wzrosnąć do 1400 ppm). Widma są rejestrowane wyłącznie metodami impulsowymi(INEPT, DEPT) oraz dwuwymiarowymi np. gsHSQC, TROSY ;
- Podstawowym problemem jest mała czułość detekcji. Rejestracja widm ^{15}N NMR, wymaga często zastosowania odsprzęgania oddziaływań spinowo-spinowych z protonami w celu polepszenia stosunku sygnału do szumów. Ze względu na ujemną wartość współczynnika Overhausera.

Widma ^{15}N NMR – charakterystyczne cechy ułatwiające określanie struktury

• Czasy relaksacji jąder ^{15}N nie związanych z protonami są długie, wynoszą kilkadziesiąt i więcej sekund. Obserwacja innych centrów azotowych wymaga wyeliminowania efektów Overhausera (np. przez zastosowanie metody bramkowanego odsprzęgania) oraz skrócenia czasów relaksacji (poprzez dodanie reagenta relaksacyjnego, jakim jest słabo paramagnetyczny kompleks *tris*-acetyloacetonian Cr(III));

• Na przesunięcie chemiczne atomów azotu mają wpływ:

• a) czynniki wewnątrzcząsteczkowe: hybrydyzacja atomu azotu, jego stopień utlenienia, obecność bądź nieobecność wolnej pary elektronowej, stopień jej delokalizacji w systemie wiązań sprzężonych oraz ładunek zlokalizowany na atomie azotu;

b) czynniki międzycząsteczkowych: polarność środowiska, oddziaływanie z centrami paramagnetycznymi, udział w procesach kompleksowania lub protonowania oraz udział w asocjacji poprzez tworzenie wiązań wodorowych;

• Nitrometan jest rekomendowany jako wzorzec (reference substance). Wartości przesunięcia są również cytowane w odniesieniu do nasyconego wodnego roztworu chlorku amonu i azotanu amonu: CH_3NO_2 $\delta=0.0$ ppm; NH_4Cl $\delta=-352.5$ ppm; NH_4Cl $\delta=-3.9$ ppm.

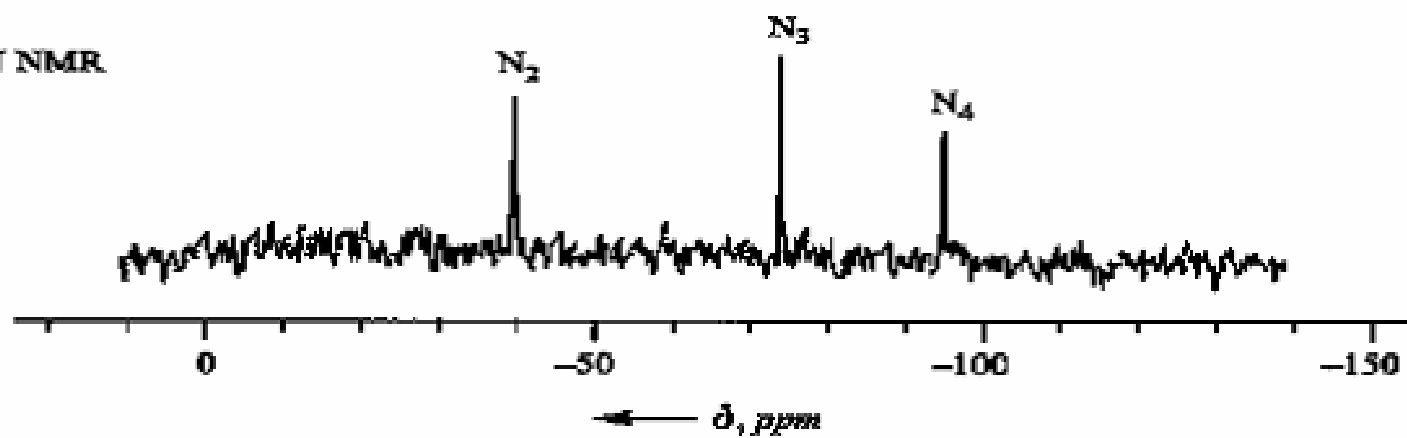
Widma ^{15}N NMR – charakterystyczne cechy ułatwiające określanie struktury



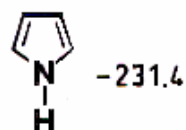
^{14}N NMR



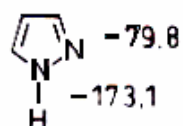
^{15}N NMR



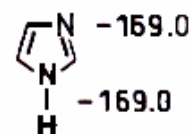
Widma ^{15}N NMR – charakterystyczne cechy ułatwiające określanie struktury



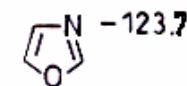
Pirol



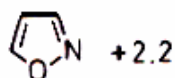
Pirazol



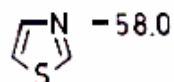
Imidazol



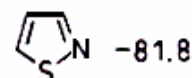
Oksazol



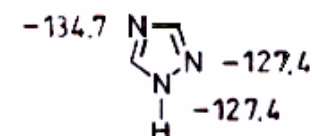
Izoksazol



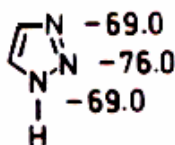
Tiazol



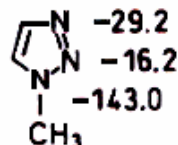
Izotiazol



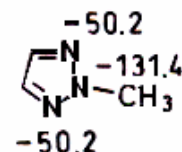
1,2,4-Triazol



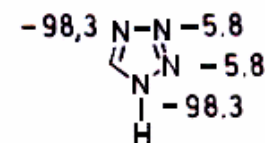
1,2,3-Triazol



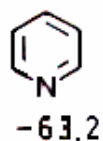
1-Metylo- 1,2,3-triazol



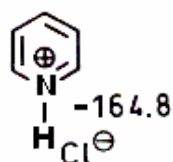
2-Metylo-1,2,3-triazol



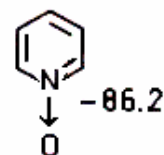
Tetrazol



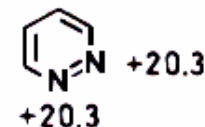
Pirydyna



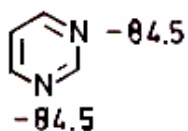
Chlorowodorek
pirydyny



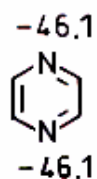
N-Tlenek
pirydyny



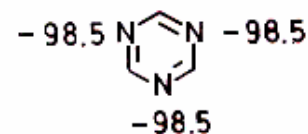
Pirydazyna



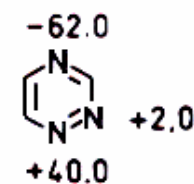
pirymidyna



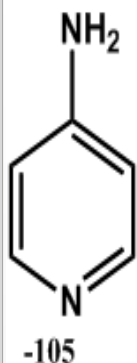
Pirazyna



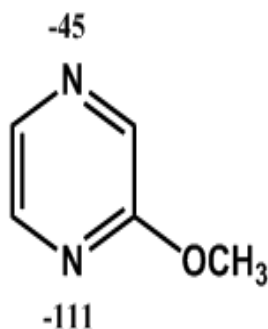
1,3,5-Triazyna



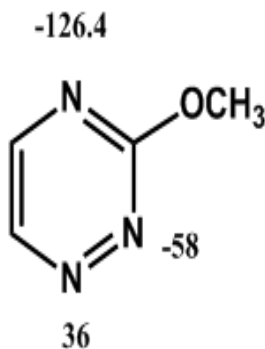
1,2,4-Triazyna



A



B



C

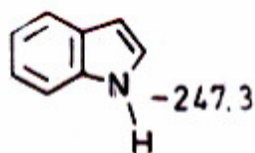
•Efekty podstawnika mają znaczny wpływ na przesunięcie atomu azotu, zwłaszcza jeśli w pozycjach *orto* i *para* są podstawniki silnie donorowe. Można zaobserwować przesunięcie powyżej 60 ppm. Taki efekt przesunięcia sygnału w kierunku wyższego pola obserwuje się w 4-aminopirydynie **A**(N1), 2 -metoksypirazynie **B**[N (1)] i 3-metoksy-1 ,2,4-triazynie **C** [N (2) i N (4)].

•Wiązania wodorowe utworzone z elektronami atomu azotu prowadzi do zmiany przesunięcia chemicznego azotu o około 20 ppm w kierunku wyższego pola (ekranowanie).

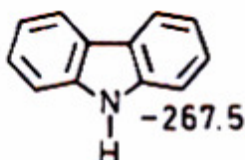
•Kiedy wolna para elektronów na azocie ulega protonowaniu następuje przesunięcie chemiczne azotu o około 100 ppm w kierunku wyższego pola (ekranowanie). Taki sam efekt obserwuje się gdy proton w formie tautomerycznej znajdzie się na atomie azotu.

•N-utlenianie azotu zwykle przesuwa sygnał o niewielką wartość (10-30 ppm) w kierunku wyższego pola (ekranowanie). Jednakże dla pierścieni pięcioczłonowych obserwuje się przesunięcie sygnału w kierunku niższego pola.

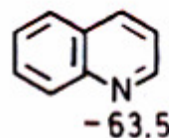
• Kolejne podstawienie azotu do pierścienia w pozycję *orto* i *para* ‘odslania azot’, efekt jest umiarkowany w przypadku podstawienia *para* (około 20 ppm), a duży w przypadku *orto* (powyżej 80 ppm).



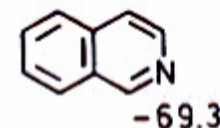
Indole



Carbazole



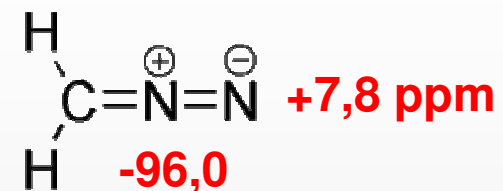
Quinoline



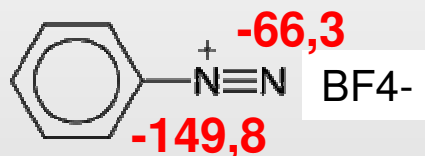
Isoquinoline

N-15 NMR, δ /ppm

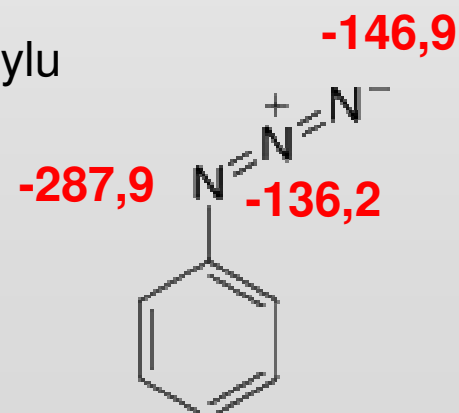
Związki diazowe, np. diazometan



Sole diazoniowe, np. tetrafluoroboran diazoniowy



Azydki, np. azydek fenylu



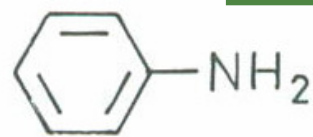
N-15 NMR, δ /ppm

Aminy

metanol

$\text{C}_2\text{H}_5\text{—NH}_2$	—355.4
$(\text{H}_3\text{C})_2\text{CH—NH}_2$	—338.1
$(\text{CH}_3)_3\text{C—NH}_2$	—324.3
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$	—333.7
$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N}$	—332.0

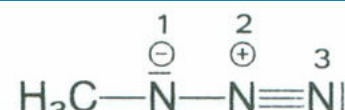
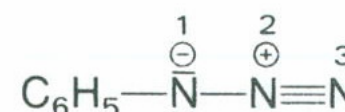
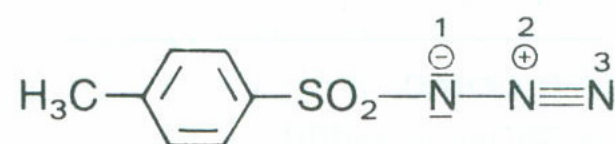
DMSO

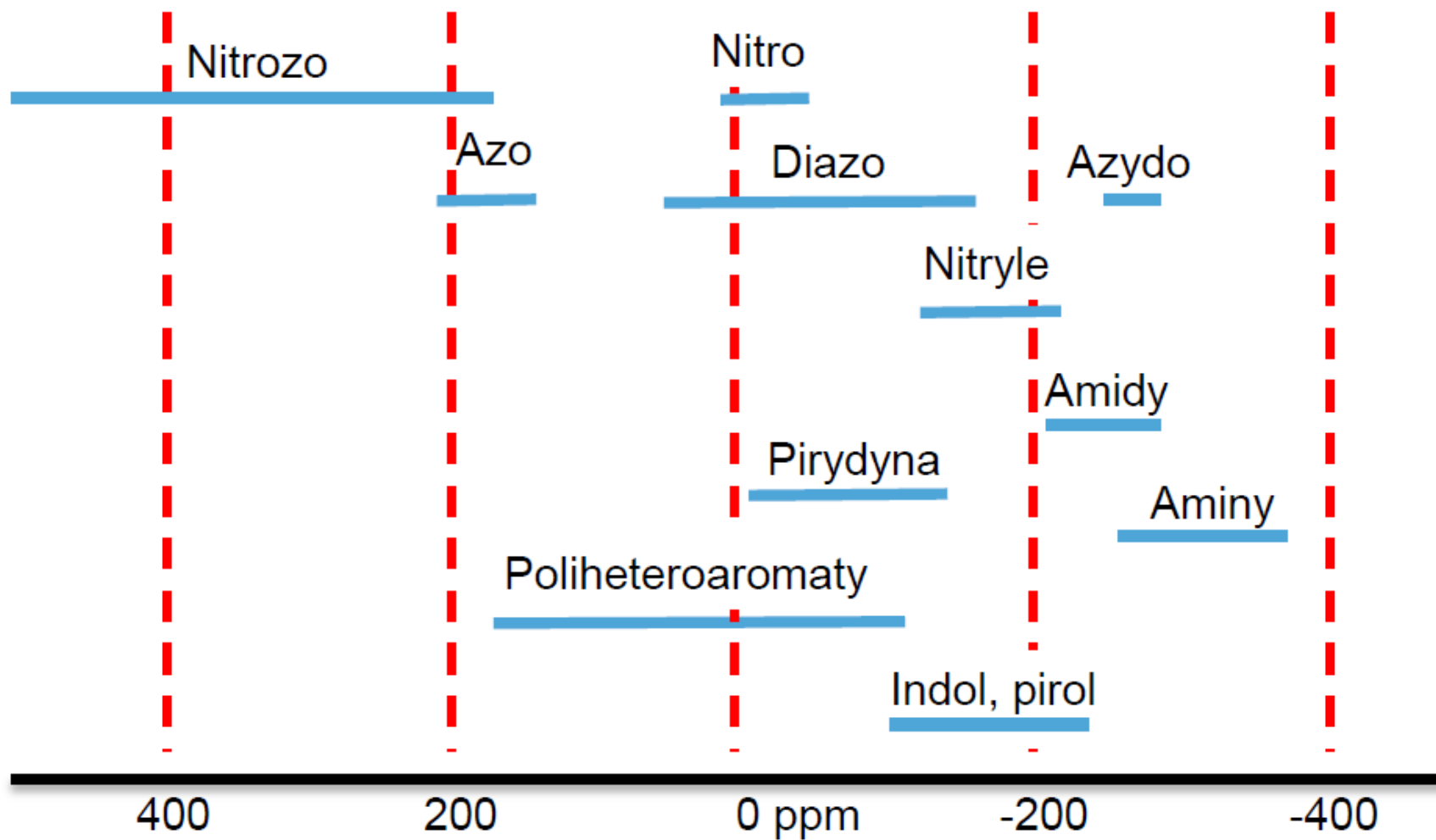
 —NH_2	—320.3
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{NH}$	—288.8

Amidy

Formamide	HCO—NH_2	—267.6
N-Methylformamide	HCO—NH—CH_3	—270.1
N,N-Dimethylformamide	$\text{HCO—N(CH}_3)_2$	—275.2

Azydki

	—321.2	Benzen
	—129.7	
	—171.0	
	—287.9	Aceton
	—136.2	
	—146.9	
	—240.4	DMSO
	—146.0	
	—138.3	



N-15 NMR, δ /ppm

DMSO

Nitryle

$\text{H}_3\text{C}-\text{CN}$	-137.1
$\text{C}_6\text{H}_5-\text{CN}$	-121.5

Sole diazoniowe

$\text{C}_6\text{H}_5-\text{N}^{\oplus}=\text{N}^{\ominus}$	-149.8
	-66.3

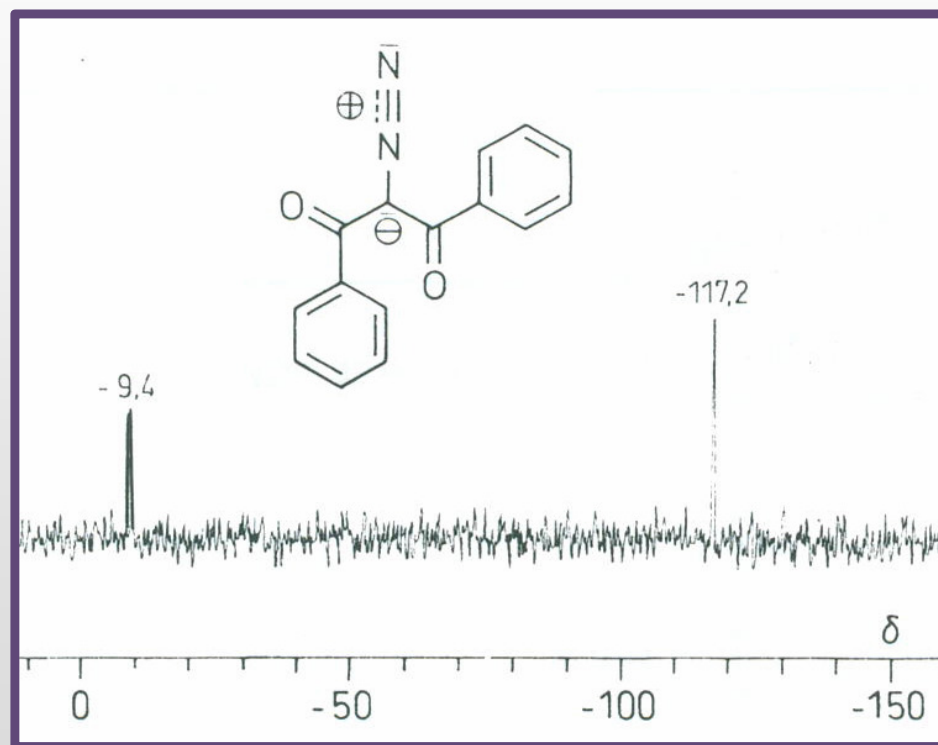


Acetonitryl

Nitrozwiązki

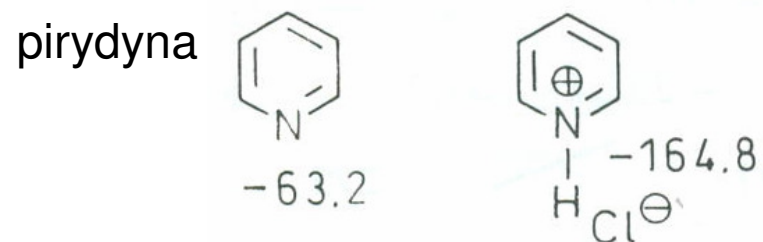
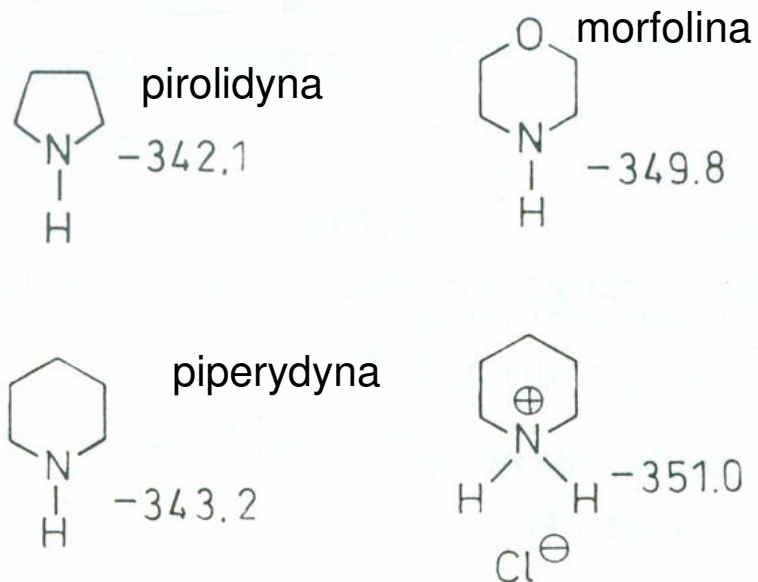
$\text{C}_2\text{H}_5-\text{NO}_2$	+ 10.1
$\text{C}_6\text{H}_5-\text{NO}_2$	- 9.8

DMSO

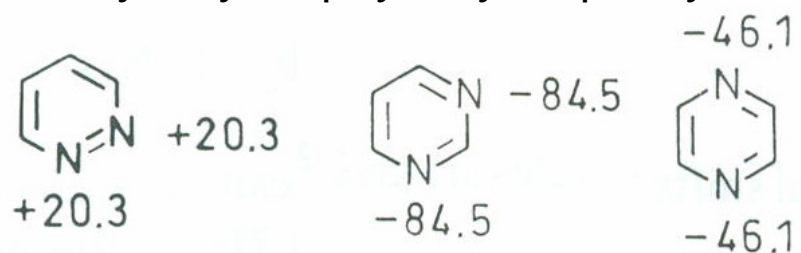


^{15}N NMR (40,5 MHz; benzen- d_6)

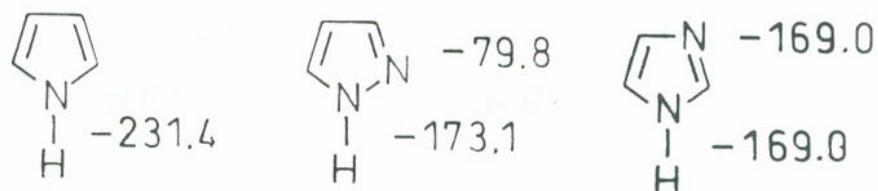
N-15 NMR (DMSO), δ /ppm; związki heterocykliczne



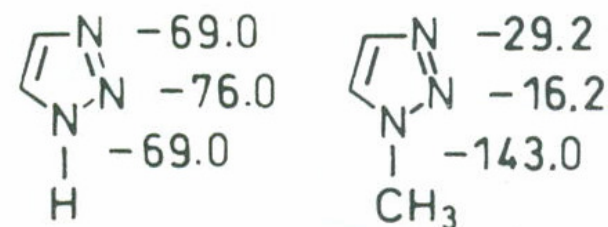
Pirydazyna, pirymidyna, pirazyna



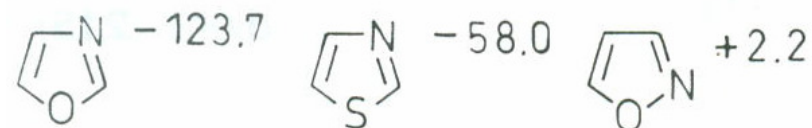
Pirol, pirazol, imidazol

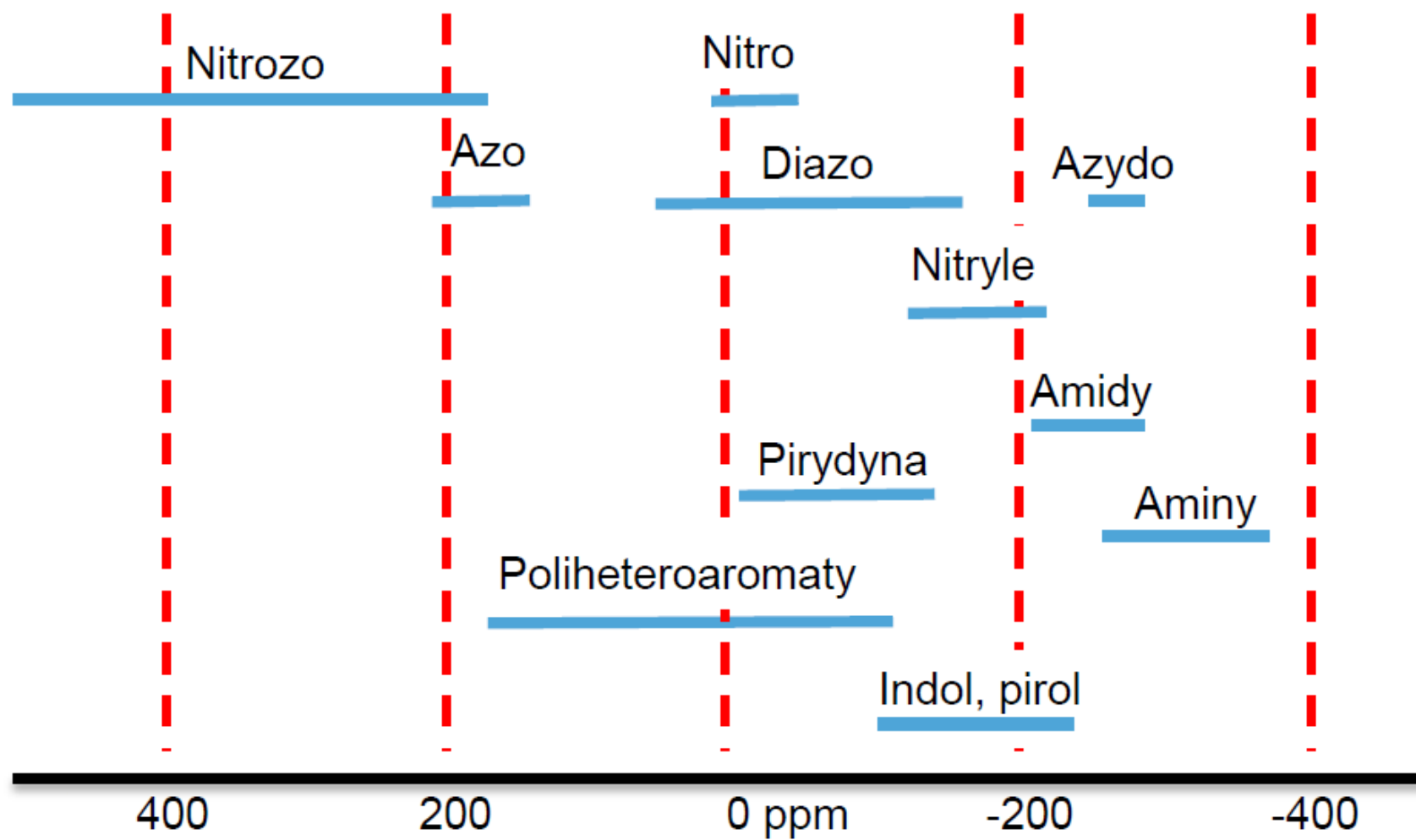


Triazol, 1-metylotriazol

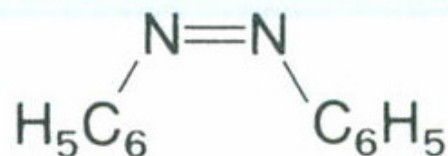


Oksazol, tiazol, izooksazol





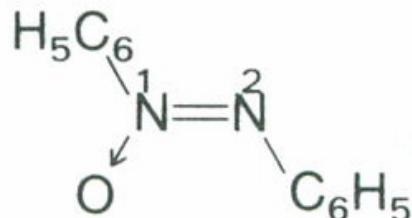
(Z)-Azobenzen Chloroform



+ 146.5

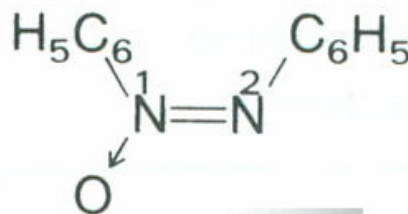
N-15 NMR
δ/ppm

(Z)-Azoxybenzen (E)-Azoxybenzen



— 57.1
— 46.7

Chloroform

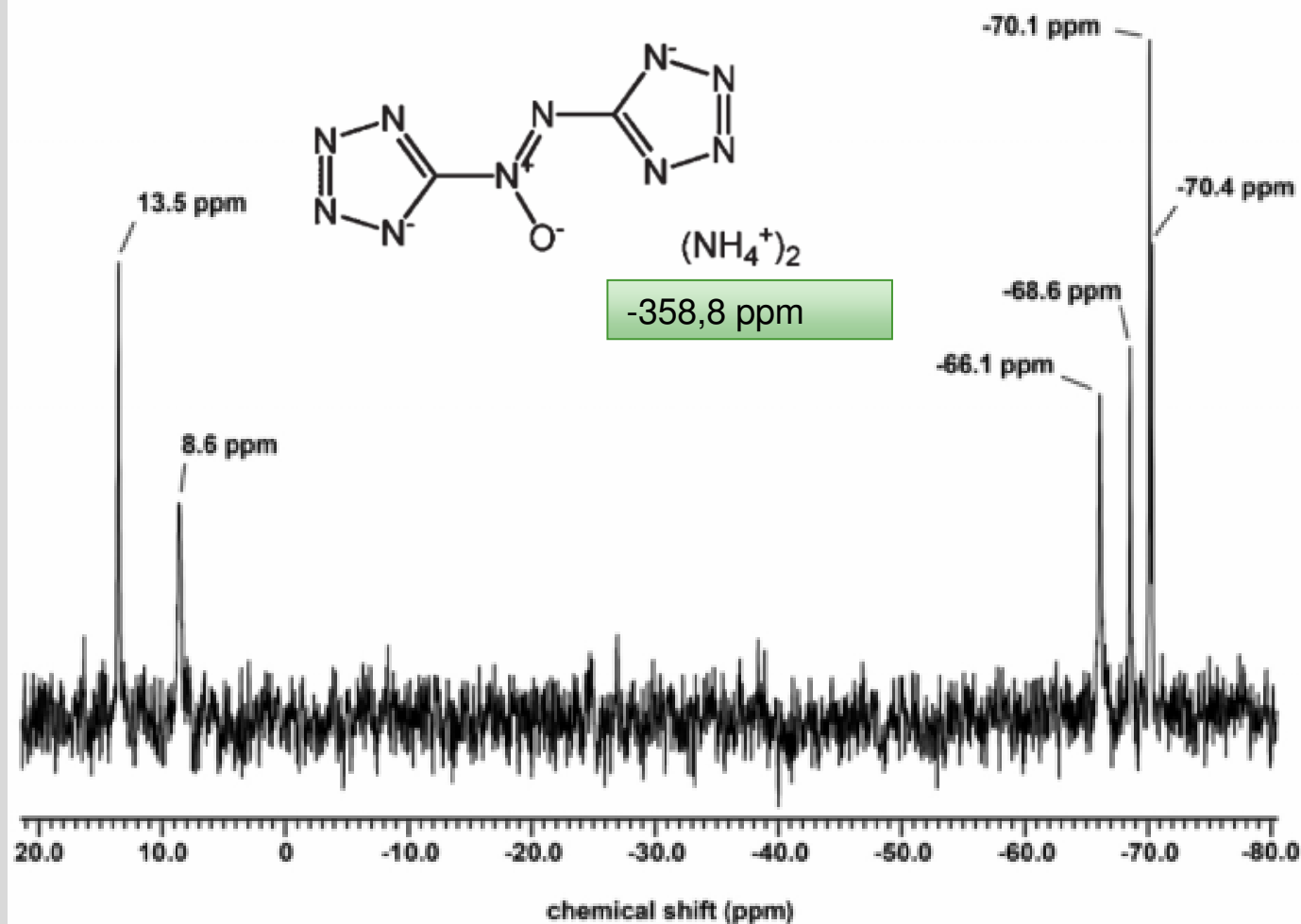


— 36.0
— 19.8

2-metylo-2-nitrozopropan, nitrozobenzen

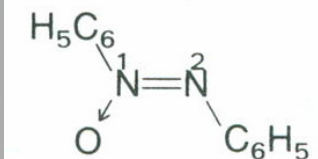
$(\text{H}_3\text{C})_3\text{C}-\text{NO}$ + 578

$\text{C}_6\text{H}_5-\text{NO}$ + 532

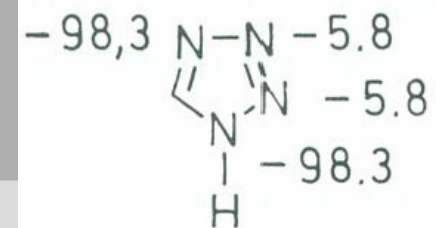


$^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ NMR (DMSO; nitrometan)

(Z)-Azoxybenzen



— 57.1
— 46.7

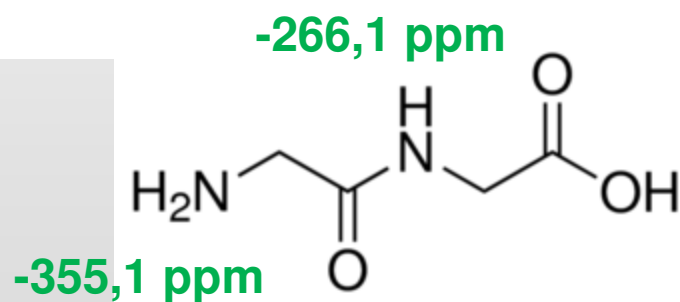
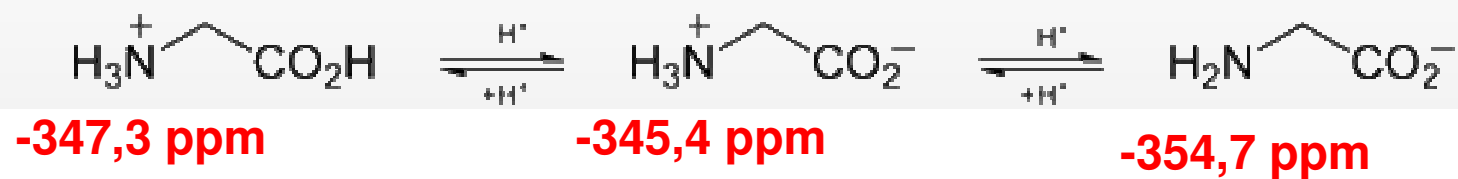


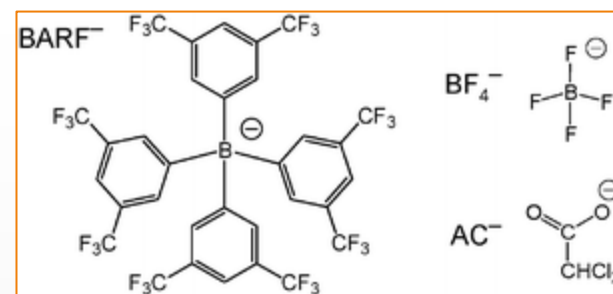
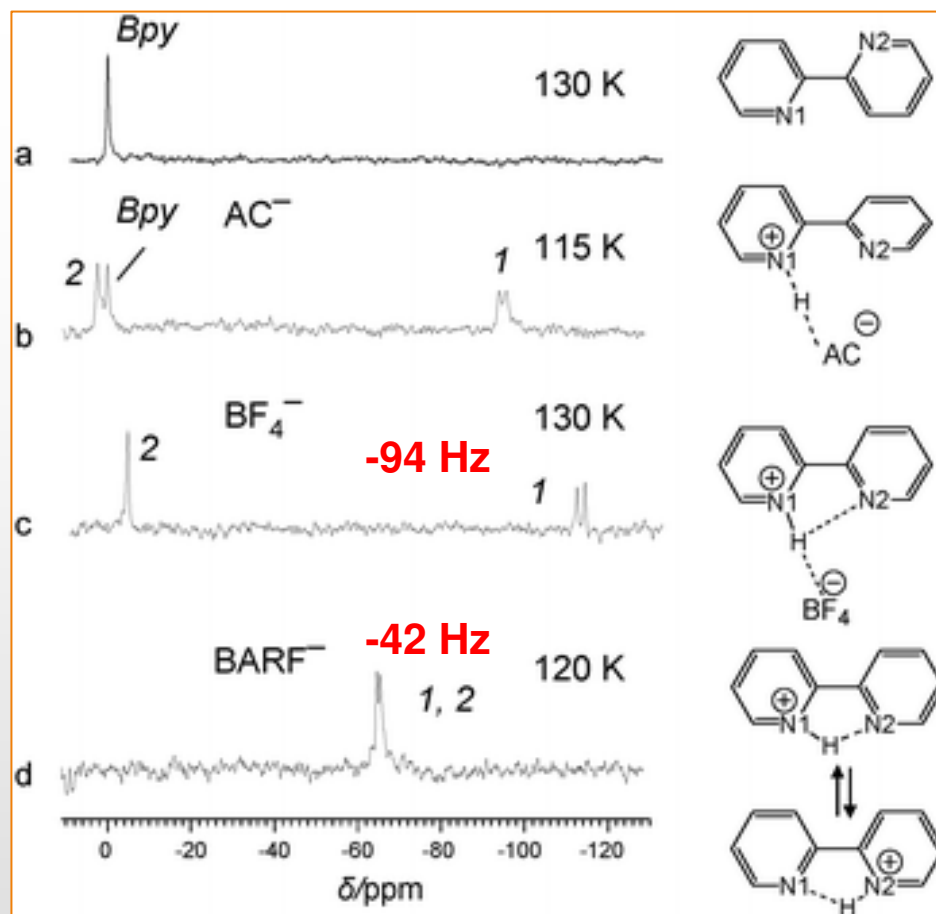
Tetrazol

N-15 NMR

δ/ppm

aminokwasy





$^1J(N,H)$ /Hz	$^2J(N,H)$ /Hz
Od -80 do +15	< 2

$J(^{15}N-^1H)$

Związek	$^1J(N,H)$ / Hz	$^2J(N,H)$ /Hz
metyloamina	-64,5	1,0
N,N-dimetyloamina	-67,0	0,9
glicyna	-74,7	0,5
formamid	-88,3 (CO) -90,7 (H)	14,6

$J(^{15}N-^{13}C)$

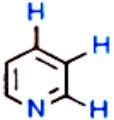
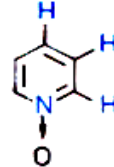
Związek	$^1J(C,N)$ / Hz	$^2J(C,N)$ /Hz	$^3J(C,N)$ /Hz
propyloamina	-3,9	1,2	1,5
glicyna	6,2		
acetamid	-14,4	-8,5	
anilina	-11,5	-2,7	-1,9
pirydyna	0,7	2,5	-3,9

- Efekty izotopowe wpływają na zmiany przesunięcia chemicznego ^{15}N i ^{14}N w sposób nieznaczny, natomiast stałe sprzężeń spinowo-spinowych ^{15}N i ^{14}N różnią się zarówno co do znaku jak i wielkości. Wartości te można wyliczyć z ogólnej zależności wynikającej ze stosunków magnetogirycznych :

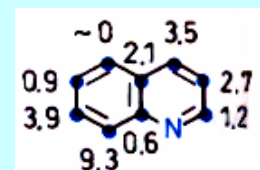
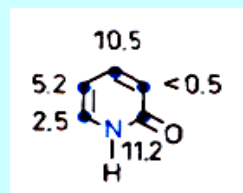
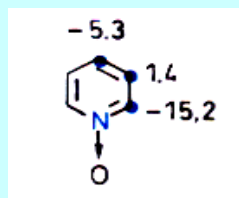
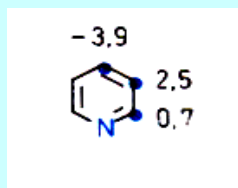
$$J(^{15}\text{N}, \text{X}) = -1.4027 J(^{14}\text{N}, \text{X}) \quad \text{gdzie } \text{X} = ^1\text{H}, ^{13}\text{C} \dots$$

- Typowe stałe sprzężenia $^1J(^{15}\text{N}, ^1\text{H})$ występują w zakresie od - 130 do 10 Hz;
- Stałe sprzężenia $^2J(^{15}\text{N}, ^1\text{H})$ występują w zakresie od 0 do 15 Hz (wartość bezwzględna);
- Stałe sprzężenia $^3J(^{15}\text{N}, ^1\text{H})$ występują w zakresie od 0 do 7 Hz (wartość bezwzględna), silnie zależą od konformacji układu wiązań;
- Stałe sprzężeń dalekiego zasięgu ($n > 3$) są zazwyczaj mniejsze od 1;
- Stałe sprzężeń z innymi jądrami przez jedno wiązanie mają stosunkowo duże wartości: $^1J(^{15}\text{N}, ^{13}\text{C})$ mieszczą się w zakresie od +9 do -78 Hz,
- $^1J(^{15}\text{N}, ^{31}\text{P})$ w zakresie od -80 do +100 Hz (dla atomów $^{31}\text{P(III)}$ od +100 do +35 Hz, dla $^{31}\text{P(V)}$ od +13 do -58 Hz), a $^1J(^{15}\text{N}, ^{19}\text{F})$ od +150 do +460 Hz.

$^nJ(^{15}\text{N}, ^1\text{H})$ stałe sprzężenia ($n=2,3,4$) wybranych związków [Hz]

		2J	3J	4J
	neat liquid	-10.8	-1.5	0.2
	Chloroform	0.5	-5.3	1.1

$^nJ(^{15}\text{N}, ^{13}\text{C})$ stałe sprzężenia ($n=1,2,3$) wybranych związków [Hz]



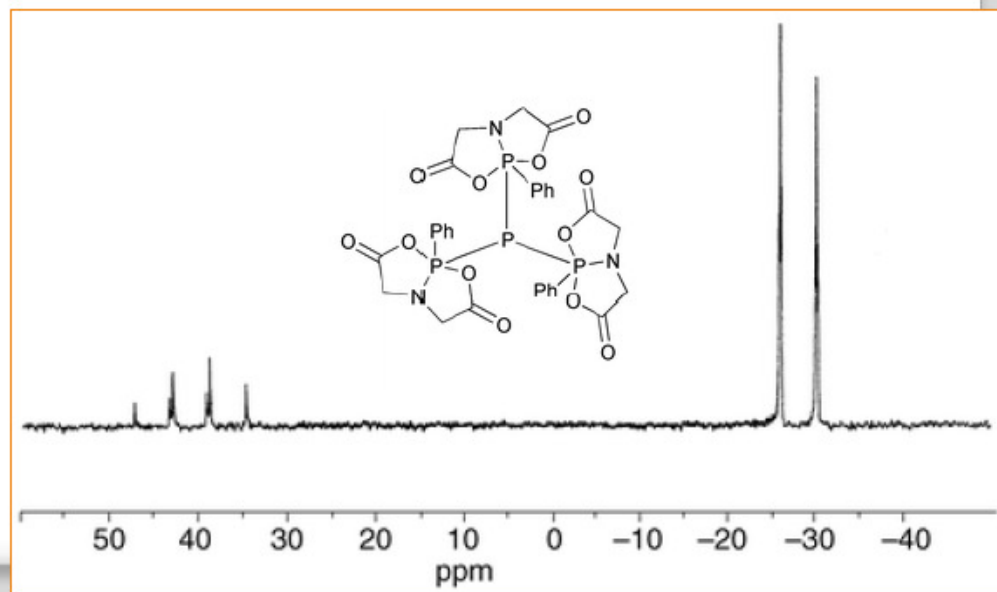
³¹P NMR

Jądro	Spin I	Zawartość naturalna [%]	Częstotliwość rezonansowa [MHz] (B ₀ =2,3488 T)	Współczynnik magnetogiryczny γ [10 ⁷ rad T ⁻¹ s ⁻¹]
¹ H	½	99,98	100,000	26,7519
¹⁵ N	½	0,37	10,133	-2,712
¹⁹ F	½	100,00	94,077	25,181
³¹ P	½	100,00	40,481	10,841

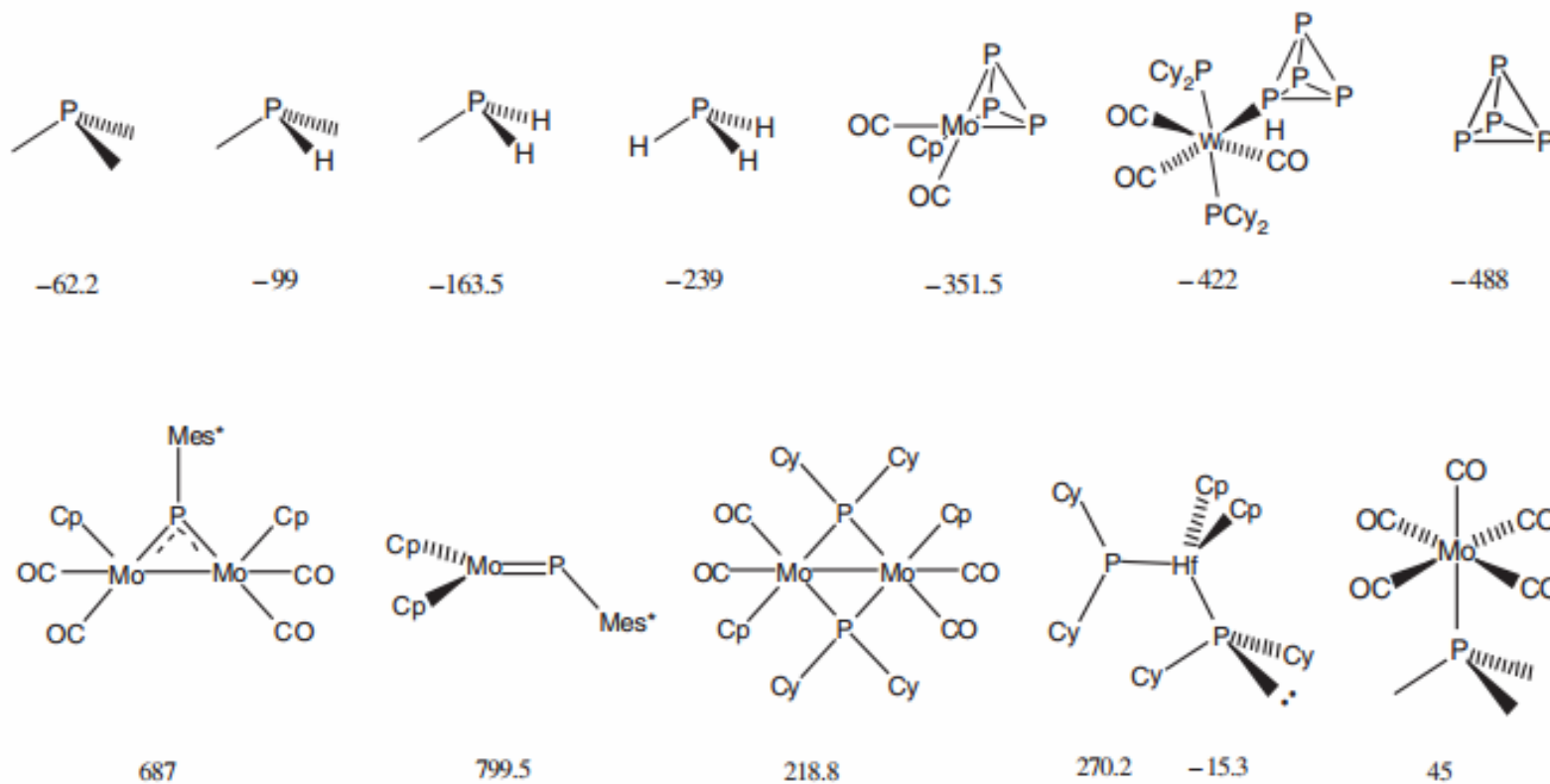
Czułość 6,6% względem ¹H

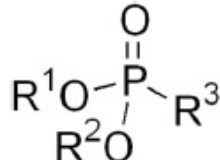
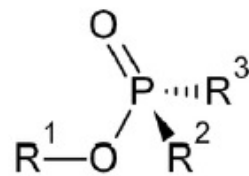
Wzorzec przesunięcia
chemicznego
(δ = 0,0 ppm)

85% H₃PO₄



^{31}P NMR, δ/ppm



związek	wzór	zakres przes. chem. [ppm]
Fosfina pierwszorzędowa	PH_2R	$-170 < \delta < -110$
Fosfina drugorzędowa	PHR_2	$-100 < \delta < -10$
Fosfina trzeciorzędowa	PR_3	$-70 < \delta < +70$
Sole fosfoniowe	PR_4^+	$-20 < \delta < +40$
Estry kwasu fosforowego	$\text{O}=\text{P}(\text{OR})_3$	$-20 < \delta < 0$
Fosfoniany		$-30 < \delta < +60$
Fosfiniany		$0 < \delta < +70$
Tlenki fosfin	OPR_3	$+10 < \delta < +70$

^{31}P NMR, δ/ppm

Fosfiny

I rządowe

$\text{PH}_2(\text{CH}_3)$	− 164
$\text{PH}_2(\text{C}_2\text{H}_5)$	− 127
$\text{PH}_2(\text{C}_6\text{H}_5)$	− 122

II rządowe

$\text{PH}(\text{CH}_3)_2$	− 99
$\text{PH}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$	− 55
$\text{PH}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	− 41

III rządowe

$\text{P}(\text{CH}_3)_3$	− 62
$\text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$	− 20
$\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$	− 6
$\text{P}(\text{CH}_2\text{—C}_6\text{H}_5)_3$	+ 23
$\text{P}[\text{C}(\text{CH}_3)_3]_3$	+ 62

$\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{F}_2$	+ 208
$\text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{Cl}_2$	+ 196
$\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{Cl}_2$	+ 161
$\text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{Cl}$	+ 81
$\text{C}_6\text{H}_5\text{P}(\text{OCH}_3)_2$	+ 159
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{P}(\text{OCH}_3)$	+ 116

$^1J(P,H)/\text{Hz}$	$^2J(P,H)/\text{Hz}$	$^3J(P,H)/\text{Hz}$
600-700	20-30	5-10

$^1J(PH)$

PH_4^+ , PH_3 , $PH_2^- \longrightarrow ^1J(PH) = 547 \text{ Hz}, 189 \text{ Hz}, 139 \text{ Hz}$

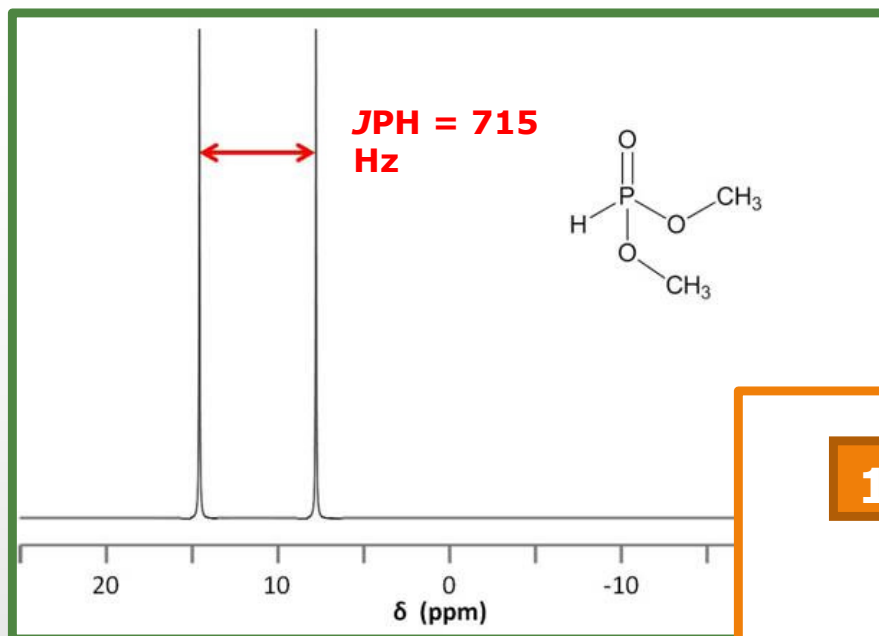
$^2J(PH), ^3J(PH)$

min. dla $\theta=90^\circ$, maks. dla $\theta=0^\circ$ i 180°

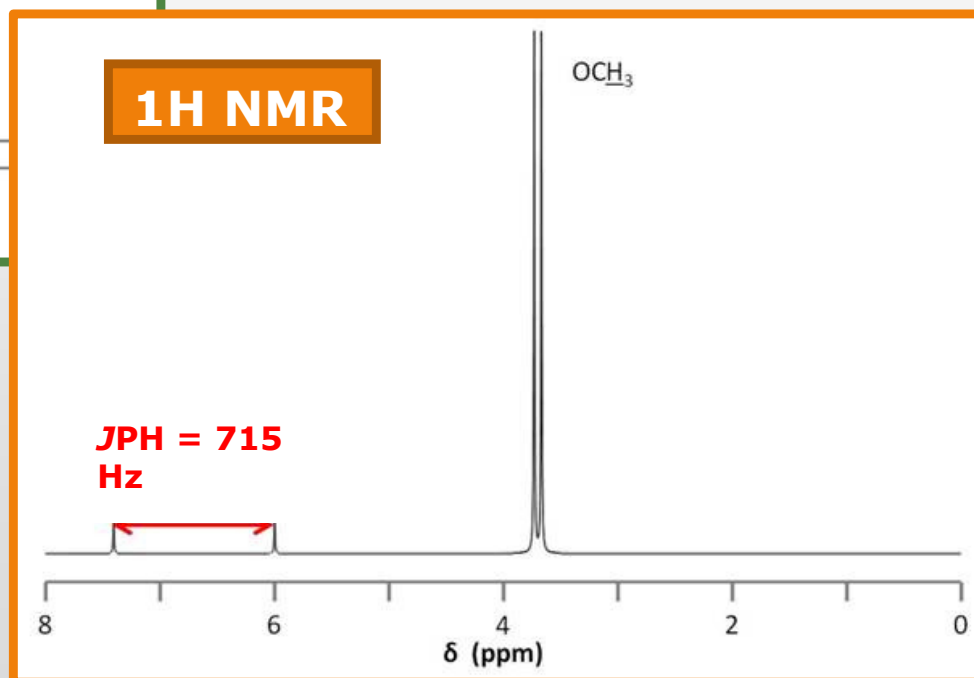
$^4J(PH)$

Efekt „W”

31P NMR



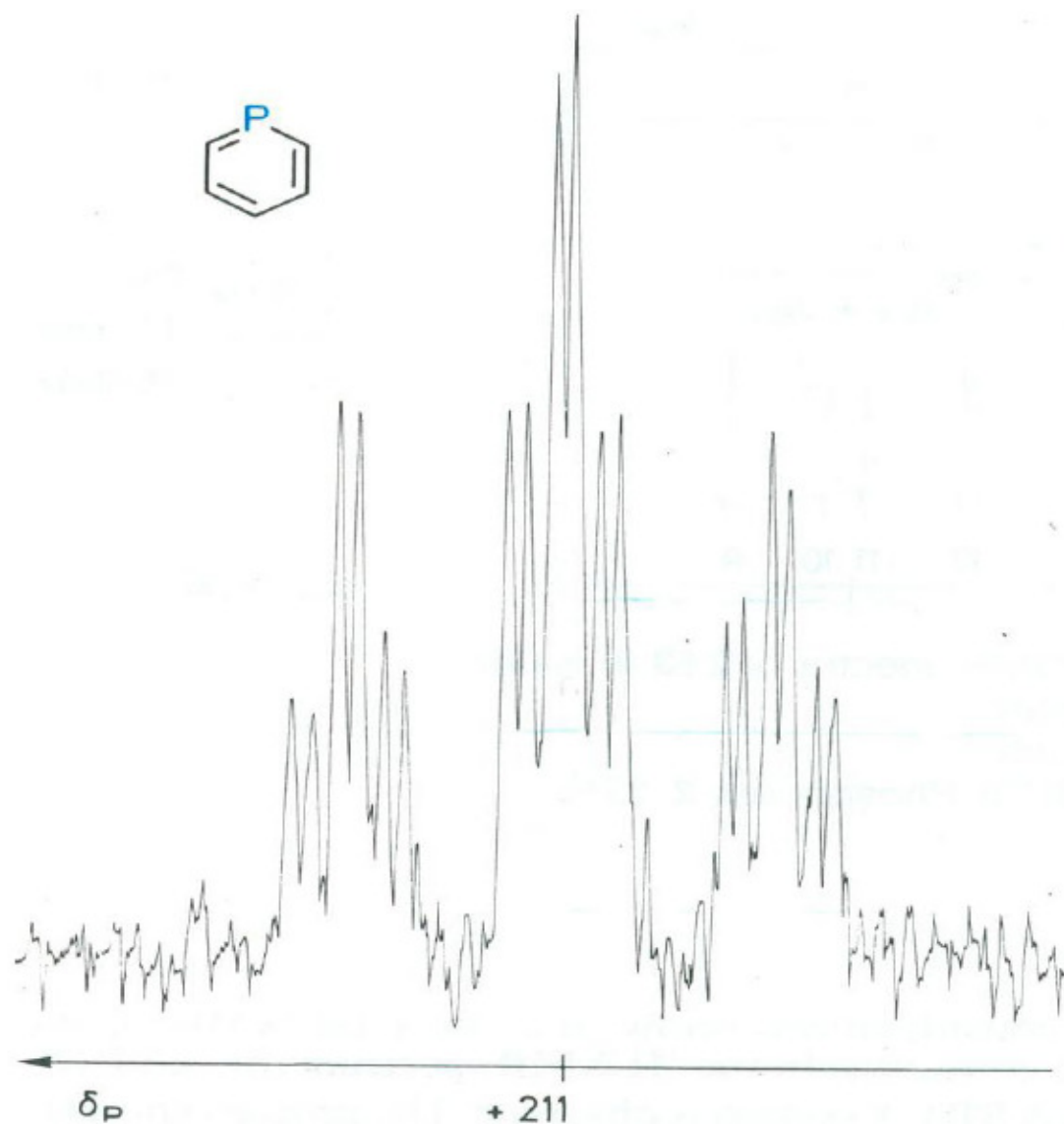
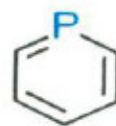
^1H NMR



K. Moedritzer, J. Inorg. Nucl. Chem., 1961, 22, 19

$J(P,H)$, $J(P,C)$

	$J(P-Y)/\text{Hz}$
H-2	38
H-3	8
H-4	3.5
C-2	53
C-3	14
C-4	22



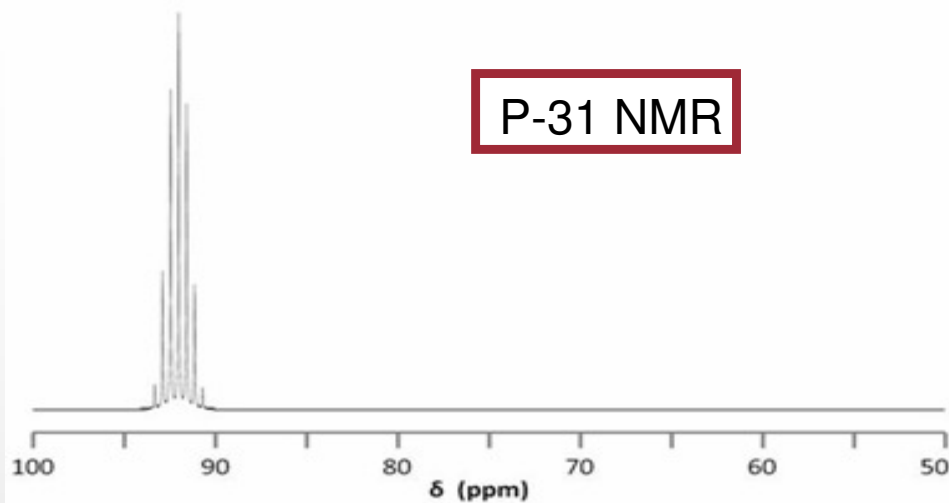
Widmo ^{31}P NMR fosfabenzenu

$^nJ(P,C)$

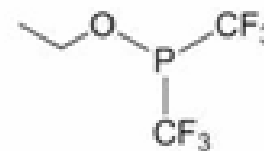
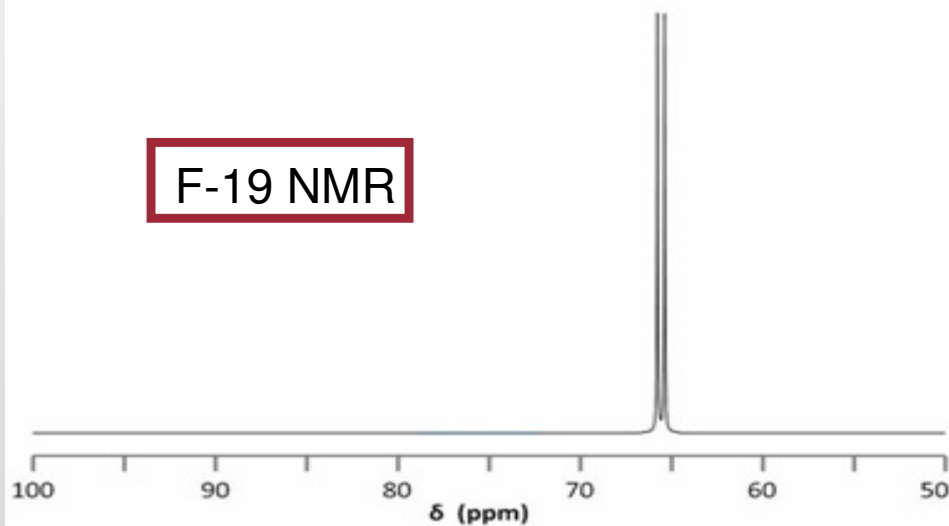
	$(PhCH_2)_2PPh$	$PhCH_2(Ph)_2P$	Ph_3P	Ph_4P^+	$Ph_3P=O$
$^1J_{PC}$ [Hz]	20.6	16.2	-12.5	88.4	104.4
$^2J_{PC}$ [Hz]	19.8	18.9	19.6	10.9	9.8
$^3J_{PC}$ [Hz]	7.0	6.4	6.8	12.8	12.1
$^4J_{PC}$ [Hz]	0.6	0.2	0.3	2.9	2.8

$^nJ(P,C)$ dla arylofosfin (fragment P-Ph)

P-31 NMR



F-19 NMR



$$^2J_{\text{P,F}} = 86.6 \text{ Hz}$$

K. J. Packer, J. Chem. Soc., 1963, 960