

Table 2 : Calcul des déplacements chimiques pour les méthylènes

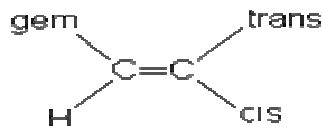
Règle de Shoolery



$\delta_{\text{CH}_2} = 0,23 + \sigma_{\text{X}} + \sigma_{\text{Y}}$	
Substituant	σ
-R	0,47
-C=C	1,32
-C $\equiv$ C	1,44
-C ₆ H ₅	1,85
-NR ₂	1,57
-NH-COR	2,27
-NO ₂	3,80
-SR	1,64
-COR	1,70
-CO-C ₆ H ₅	1,84
-OH	2,56
-OR	2,36
-O-COR	3,13
-OC ₆ H ₅	3,23
-F	4,00
-Cl	2,53
-Br	2,33
-I	1,82
-CO ₂ R	1,55
-CO-NR ₂	1,59
-CN	1,70

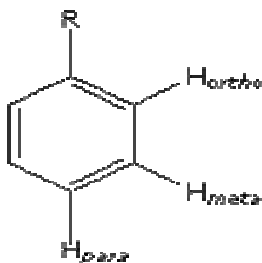
* Cette règle de calcul est aussi valable pour le méthyle et le méthyne mais de meilleurs résultats sont obtenus pour les protons du méthylène.

Table 3 : Calcul des déplacements chimiques pour les hydrogènes des alcènes substitués - Règle de Tobey, Pascual, Meyer & Simon



$\delta_H = 5,25 + \sigma_{gem} + \sigma_{cis} + \sigma_{trans}$			
Substituant	σ_{gem}	σ_{cis}	σ_{trans}
-alkyl	0,44	-0,26	-0,29
-alkyl (cyclique)	0,69	-0,25	-0,28
-CH ₂ OR	0,67	-0,02	-0,07
-CH ₂ NR ₂	0,58	-0,10	-0,08
-CH ₂ X	0,70	0,11	-0,04
-C=C	1,00	-0,09	-0,23
-C ₆ H ₅	1,35	0,37	-0,10
-CHO	1,02	0,95	1,17
-COR	1,10	1,13	0,81
-CO ₂ H	1,00	1,35	0,56
-CO ₂ R	0,84	1,15	0,56
-CN	0,23	0,78	0,58
-OR	1,18	-1,06	-1,28
-O-COR	2,09	-0,40	-0,67
-NR ₂	0,69	-1,19	-0,31
-NO ₂	1,87	1,30	0,62
-F	1,54	-0,40	-1,02
-Cl	1,00	0,19	0,03
-Br	1,04	0,40	0,55
-I	1,14	0,81	0,88
-SiR ₃	0,90	0,90	0,60
-SR	1,11	-0,29	-0,13
-SO ₂ R	1,55	1,16	0,93

Table 4 : Calcul des déplacements chimiques pour les hydrogènes des aromatiques substitués



$\delta_H = 7,27 + \sum \sigma_i$			
Substituant (R)	σ_{ortho}	$\sigma_{méta}$	σ_{para}
-alkyl	-0,14	-0,06	-0,17
-CH ₂ OH	-0,07	-0,07	-0,07
-CHO	0,56	0,22	0,29
-C(O)R	0,62	0,14	0,21
-CO ₂ H	0,85	0,18	0,27
-CO ₂ R	0,71	0,10	0,21
-CN	0,23	0,78	0,58
-OH	-0,56	-0,12	-0,45
-OCH ₃	-0,48	-0,09	-0,44
-OC(O)R	-0,25	0,03	-0,13
-NH ₂	-0,75	-0,25	-0,65
-NR ₂	-0,66	-0,18	-0,67
-NHC(O)R	0,12	-0,07	-0,28
-NO ₂	0,95	0,26	0,38
-F	-0,26	0,00	-0,04
-Cl	0,03	-0,02	-0,09
-Br	0,18	-0,08	-0,04
-I	0,39	-0,21	0,00