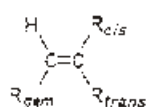


Substituted Methanes $\delta = 0.23 + \sum S(\delta)$

Substituent	S(δ) (ppm)	Substituent	S(δ) (ppm)
Cl	2.53	C \equiv CH	1.44
Br	2.33	C \equiv N	1.70
I	1.82	CH ₃	0.47
NRR ¹	1.57	Phenyl	1.85
OR	2.36	OH	2.56
SR	1.64	OCOR	3.13
CR=O	1.70	COOR	1.56
CR=CR ¹ R ¹	1.32	CF ₃	1.14

Substituted Olefins



$$\delta = 5.25 + I_{gem} + I_{cis} + I_{trans}$$

Substituent	Inkrementa		
	<i>I_{gem}</i>	<i>I_{cis}</i>	<i>I_{trans}</i>
-H	0	0	0
-Alkyl	0.45	-0.22	-0.28
-Alkyl-Ring	0.69	-0.25	-0.26
-CH ₂ -Aryl	1.05	-0.29	-0.32
-CH ₂ OR	0.64	-0.01	-0.02
-CH ₂ NR ₂	0.58	-0.10	-0.08
-CH ₂ -Hal	0.70	0.11	-0.04
-CH ₂ -CO-R	0.69	-0.08	-0.06
-C(R)=CR ₂ (Dien)	1.00	-0.09	-0.23
longer conjugation	1.24	0.02	-0.05
-C \equiv C-	0.47	0.38	0.12
-Aryl	1.38	0.38	-0.07
-CHO	1.02	0.95	1.17
-CO-R (Enon)	1.10	1.12	0.87
longer conjugation	1.08	0.91	0.74
-CO-OH	0.97	1.41	0.71
longer conjugation	0.80	0.98	0.32
-CO-OR	0.80	1.18	0.55
longer conjugation	0.78	1.01	0.46
-CO-NR ₂	1.37	0.88	0.46
-CO-Cl	1.11	1.46	1.01
-C \equiv N	0.27	0.75	0.55
-OR (saturated)	1.22	-1.07	-1.21
-OR (other)	1.21	-0.60	-1.00
-O-CO-R	2.11	-0.35	-0.84
-S-R	1.11	-0.29	-0.13
-SO ₂ -R	1.55	1.16	0.93
-NR ₂ (saturated)	0.80	-1.26	-1.21
-NR ₂ (other)	1.17	-0.53	-0.99
-N-CO-R	2.08	-0.57	-0.72
-NO ₂	1.87	1.32	0.62
-F	1.54	-0.40	-1.02
-Cl	1.08	0.18	0.13
-Br	1.07	0.45	0.55
-I	1.74	0.81	0.88

Tab. 3.22

Substituted Benzenes

$$\delta = 7.26 - \sum I$$



Substituent	<i>I_{ortho}</i>	<i>I_{meta}</i>	<i>I_{para}</i>
-H	0	0	0
-CH ₃	-0.18	-0.10	-0.20
-CH ₂ CH ₃	-0.15	-0.06	-0.18
-CH(CH ₃) ₂	-0.13	-0.08	-0.18
-C(CH ₃) ₃	0.02	-0.09	-0.22
-CH ₂ Cl	0.00	0.01	0.00
-CH ₂ OH	-0.07	-0.07	-0.07
-CH ₂ NH ₂	0.01	0.01	0.01
-CH=CH ₂	0.08	-0.03	-0.10
-C \equiv CH	0.15	-0.02	-0.01
-C ₆ H ₅	0.30	0.12	0.10
-CHO	0.56	0.22	0.29
-CO-CH ₃	0.62	0.14	0.21
-CO-CH ₂ -CH ₃	0.63	0.13	0.20
-CO-C ₆ H ₅	0.47	0.13	0.22
-COOH	0.85	0.18	0.25
-COOCH ₃	0.71	0.11	0.21
-CO-O-C ₆ H ₅	0.90	0.17	0.27
-CO-NH ₂	0.61	0.10	0.17
-COCl	0.84	0.20	0.36
-CN	0.36	0.18	0.28
-NH ₂	-0.75	-0.25	-0.65
-NH-CH ₃	-0.80	-0.22	-0.66
-N(CH ₃) ₂	-0.66	-0.18	-0.67
-N ⁺ (CH ₃) ₃ I ⁻	0.69	0.36	0.31
-NH-COCH ₃	0.12	-0.07	-0.28
-NO	0.58	0.31	0.37
-NO ₂	0.95	0.28	0.38
-SH	-0.08	-0.16	-0.22
-SCH ₃	-0.08	-0.10	-0.24
-S-C ₆ H ₅	0.06	-0.09	-0.15
-SO ₂ -OH	0.64	0.26	0.36
-SO ₂ -NH ₂	0.66	0.26	0.36
-OH	-0.56	-0.12	-0.45
-OCH ₃	-0.48	-0.09	-0.44
-OCH ₂ -CH ₃	-0.46	-0.10	-0.43
-O-C ₆ H ₅	-0.29	-0.05	-0.23
-O-CO-CH ₃	-0.25	0.03	-0.13
-O-CO-C ₆ H ₅	-0.09	0.09	-0.08
-F	-0.26	0.00	-0.20
-Cl	0.03	-0.02	-0.09
-Br	0.18	-0.08	-0.04
-I	0.39	-0.21	-0.03