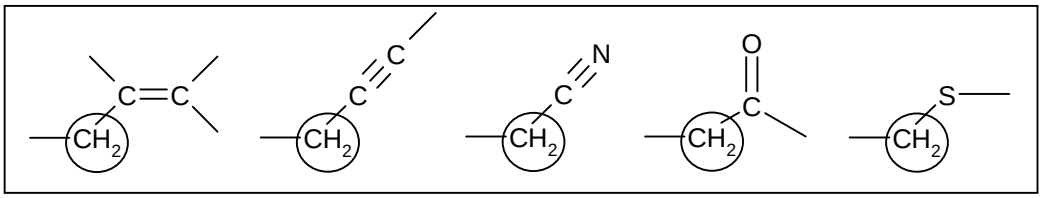
Tabella B

Calcolo degli spostamenti chimici

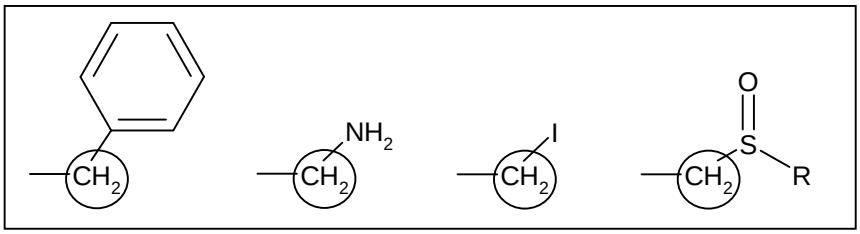
Gli spostamenti chimici di CH_3, CH_2, e CH in un **alcano** sono **0,9** (CH_3), **1,3** (CH_2) e **1,7 ppm** (CH).
Nelle altre molecole, a questi valori vanno **sommati** gli ulteriori **spostamenti dovuti all'intorno chimico**.

spostamento di **1 ppm**



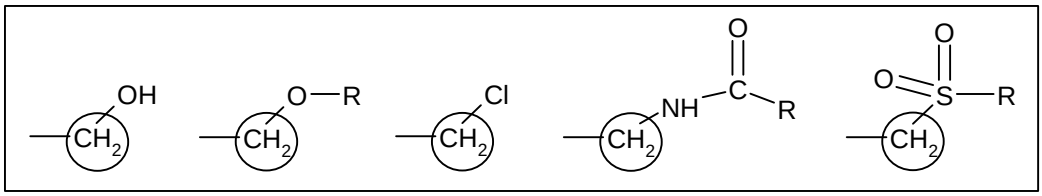
achene | alchino | nitrile | carbonile (aldeidi e chetoni, acidi e derivati) | solfuro o tiolo

spostamento di **1,5 ppm**



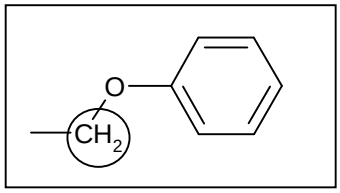
anello aromatico | ammina | alogenuro (ioduro) | solfossido

spostamento di **2 ppm**



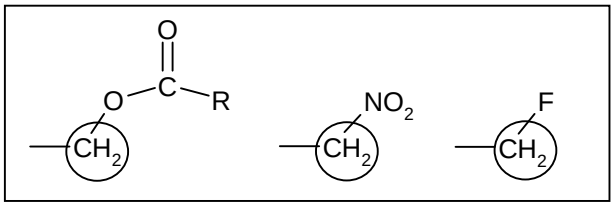
alcol | etere | alogenuro Cl, Br | ammide | solfone

spostamento di **2,5 ppm**



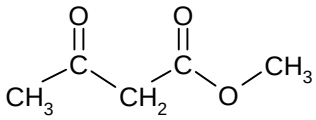
etere aromatico

spostamento di **3 ppm**



estere | nitro | fluoruro

Gli assorbimenti calcolati sulla base di questo semplice schema non possono essere molto precisi, ma sono comunque una **buona stima del valore sperimentale**. Si ricordi inoltre che gli assorbimenti **sono additivi**. Il seguente esempio, con l'estere acetacetico, mostra come si applica il metodo.



δ calcolato	1,9 (0,9+1)	3,3 (1,3+1+1)	3,9 (0,9+3)
δ sperimentale	2,1	3,3	3,6