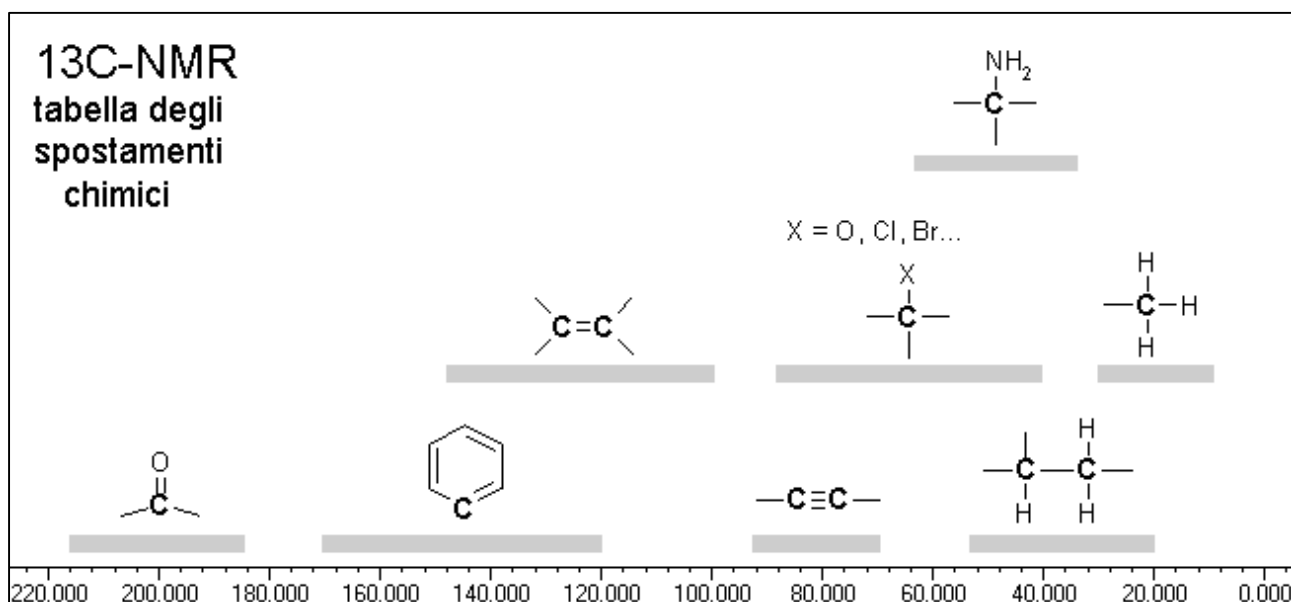
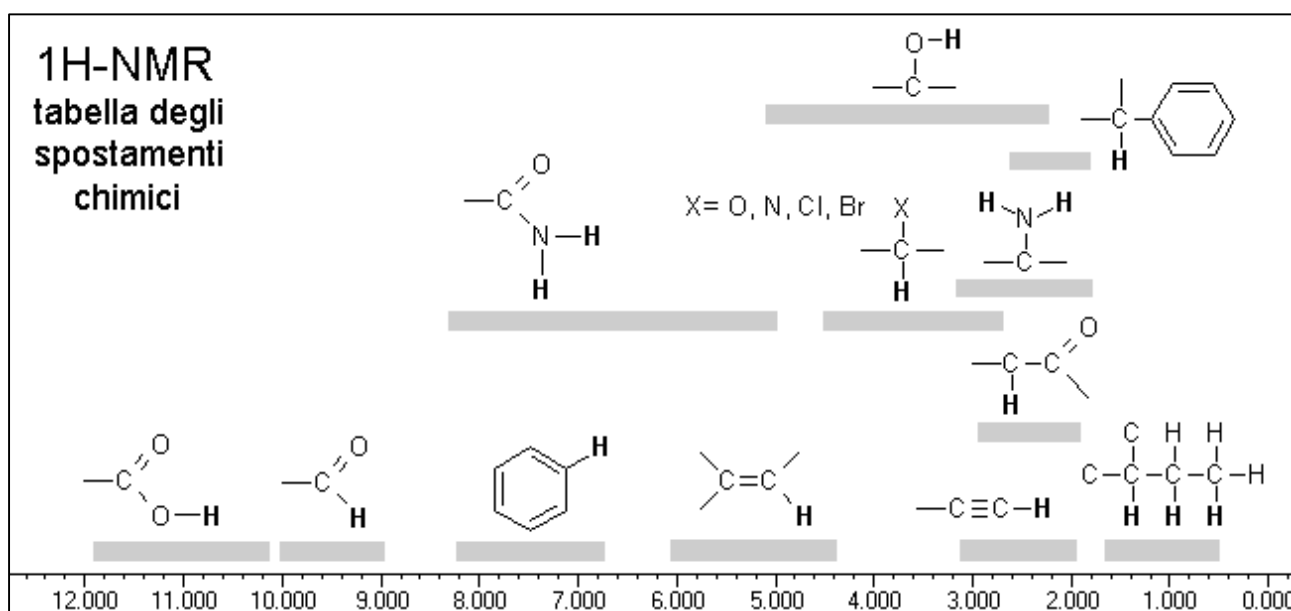


Tabella A



1. - Gli idrogeni legati ad atomi elettronegativi sono deschermati, quindi risentono di un più forte campo magnetico e hanno spostamenti chimici più alti.
2. - Gli elettroni π di alcheni, anelli aromatici e carbonili, portano ad un aumento del campo magnetico in corrispondenza degli idrogeni legati intorno. Quindi si osservano spostamenti chimici maggiori rispetto a quelli degli idrogeni legati ad atomi solo elettronegativi.
3. - Dalla molteplicità m di ogni segnale si può risalire al numero di idrogeni vicini applicando la regola $H_{\text{vicini}} = m - 1$. Gli idrogeni alcolici, amminici e tiolici possono non accoppiarsi con gli H vicini.
4. - Gli idrogeni legati direttamente a ossigeno, azoto e zolfo possono formare legami idrogeno e vengono scambiati tra le molecole. Questo scambio è influenzato dalla diluizione, dalla temperatura e dall'ingombro sterico. Questi idrogeni possono avere o non avere accoppiamento di spin con gli idrogeni vicini e il loro segnale NMR può essere allargato e variabile.

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.

	$\text{CH}_3-\overset{\overset{\text{O}}{\parallel}}{\text{C}}-\text{CH}_2-\overset{\overset{\text{O}}{\parallel}}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$		
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