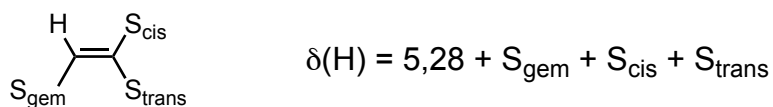


Inkrementen zur Abschätzung der Resonanz von Methylenprotonen
(Regel von Shoolery)

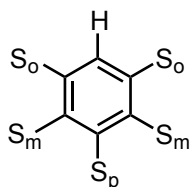
X-CH ₂ -Y	$\delta(\text{CH}_2) = 0,23 + S_x + S_y$		
Substituent	S	Substituent	S
CH ₃	0,47	NR'R''	1,57
CF ₃	1,14	SR	1,64
CR=CR'R''	1,32	I	1,82
C≡CH	1,44	Br	2,33
COOR	1,55	OR	2,36
CONH ₂	1,59	Cl	2,53
COR	1,70	OH	2,56
CN	1,70	OCOR	3,13
C ₆ H ₅	1,83	OC ₆ H ₅	3,23

Inkrementen zur Abschätzung der Resonanz von olefinischen Protonen
(Regel von Pascual, Meier und Simon)



Substituent	S _{gem}	S _{cis}	S _{trans}
H	0,00	0,00	0,00
CH ₃	0,44	-0,26	-0,29
Cl	1,00	0,19	0,03
NR ₂ (aliph.)	0,69	-1,19	-1,31
OAlkyl	1,18	-1,06	-1,28
OCOCH ₃	2,09	-0,40	-0,67
C ₆ H ₅	1,35	0,37	-0,10
CH=CH ₂ (konj.)	1,26	0,08	-0,01
COOH (konj.)	0,69	0,97	0,39
NO ₂	1,84	1,29	0,59

Inkrementen zur Abschätzung der Resonanz von aromatischen Protonen



$$\delta(\text{H}) = 7,27 + \Sigma(\text{S}_o, \text{S}_m, \text{S}_p)$$

Substituent	S _o	S _m	S _p
CH ₃	-0,17	-0,09	-0,18
Cl	0,02	-0,06	-0,04
OH	-0,50	-0,14	-0,40
OCH ₃	-0,43	-0,09	-0,37
OCOCH ₃	-0,21	-0,02	0,00
NH ₂	-0,75	-0,24	-0,63
C ₆ H ₅	0,18	0,00	0,08
CHO	0,58	0,21	0,27
COCH ₃	0,64	0,09	0,30
COOCH ₃	0,74	0,07	0,20
NO ₂	0,95	0,17	0,33