

Charakteristické chemické posuny atomu vodíku ^{13}C

Typ atomu vodíku	Chemický posun / ppm
RCH_3	0–35
R_2CH_2	15–40
R_3CH	25–50
R_4C	30–40
$\text{RC}\equiv\text{CR}$	65–90
$\text{R}_2\text{C}=\text{CR}_2$	100–150
Aromatický CR	110–175
RCH_2Br	20–40
RCH_2Cl	25–50
RCH_2NH_2	35–50
RCH_2OH	50–65
RCH_2OR	50–65
$\text{RC}\equiv\text{N}$	110–125
RCOOH	160–185
RCOOR	160–185
$\text{R}_2\text{C}=\text{O}$ a $\text{RCH}=\text{O}$	190–220

Hmotnostní spektroskopie (MS)

Dusíkové pravidlo – sloučenina obsahující lichý počet atomů dusíku má lichou hmotnost a sudou hmotnost má molekula obsahující sudý počet atomů dusíku.

Stanovení sumárního vzorce z izotopických píků z $M + 1$:

$$\%(M + 1) \approx (1,1 \times x) + (0,38 \times y)$$

Charakteristické píky $M + 2$ pro 1 atom: $^{79}\text{Br}/^{81}\text{Br}$ (100:98), $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ (100:32,5), $^{32}\text{S}/^{34}\text{S}$ (100:4,4).

Prvek	Izotop	Relativní zastoupení	Izotop	Relativní zastoupení	Izotop	Relativní zastoupení
Uhlík	^{12}C	100	^{13}C	1,11		
Vodík	^1H	100	^2H	0,016		
Dusík	^{14}N	100	^{15}N	0,38		
Kyslík	^{16}O	100	^{17}O	0,04	^{18}O	0,2
Fluor	^{19}F	100				
Křemík	^{28}Si	100	^{29}Si	5,1	^{30}Si	3,35
Fosfor	^{31}P	100				
Síra	^{32}S	100	^{33}S	0,78	^{34}S	4,4
Chlor	^{35}Cl	100			^{37}Cl	32,5
Brom	^{79}Br	100			^{81}Br	98
Jod	^{127}I	100				

Infračervená spektroskopie (IR)

Pozice pásů charakteristických skupin

Vazba	Typ sloučenin	Rozsah vlnočtů (<i>poznámka</i>)/ cm ⁻¹
C–H	Alkany	2850–2960
		1350–1470
C–H	Alkeny	3020–3080
		675–1000
C–H	Aromatické jádro	3000–3100 (<i>slabší intenzita</i>)
		675–870
C–H	Alkyny	3300
C=C	Alkeny	1640–1680 (<i>proměnlivá intenzita</i>)
C≡C	Alkyny	2100–2260 (<i>proměnlivá intenzita</i>)
C–C	Aromatické jádro	1500, 1600 (<i>proměnlivá intenzita</i>)
C–O	Alkoholy, ethery, karboxylové kyseliny, estery	1080–1300
C=O	Aldehydy, ketony, karboxylové kyseliny, estery	1690–1760
O–H	Alkoholy a fenoly	3610–3640 (<i>proměnlivá intenzita</i>)
	Alkoholy s vodíkovou vazbou	3200–3600 (<i>široký pás</i>)
	Karboxylové kyseliny	2500–3600 (<i>široký pás</i>)
N–H	Aminy	3300–3500
C–N	Aminy	1180–1360
C≡N	Nitrily	2210–2260 (<i>proměnlivá intenzita</i>)
-NO ₂	Nitro- sloučeniny	1515–1560
		1345–1385