

MASARYKOVA UNIVERZITA

Přírodovědecká fakulta

URČOVÁNÍ STRUKTUR ORGANICKÝCH
LÁTEK ZE SPEKTER

Jaromír LITERÁK

BRNO 2015

Obsah

Místo úvodu	3
Infračervená spektroskopie	4
Nukleární magnetická rezonance (NMR)	5
Stanovení sumárního vzorce z hmotnostního spektra	7
Základní pravidla fragmentačních reakcí při EI	8
Nukleární magnetická rezonance (NMR)	10
Příklady	11
Sloučenina A	11
Sloučenina B	13
Sloučenina C	15
Sloučenina D	17
Sloučenina E	19
Sloučenina F	21
Sloučenina G	23
Sloučenina H	25
Sloučenina I	27
Sloučenina J	29
Sloučenina K	31
Sloučenina L	33
Sloučenina M	35
Sloučenina N	37
Sloučenina O	39
Sloučenina P	41
Sloučenina Q	43
Sloučenina R	44
Sloučenina S	46
Sloučenina T	48
Sloučenina U	49
Sloučenina V	51
Sloučenina W	53
Sloučenina X	55
Sloučenina Y	57
Sloučenina Z	59
Řešení	61

Místo úvodu

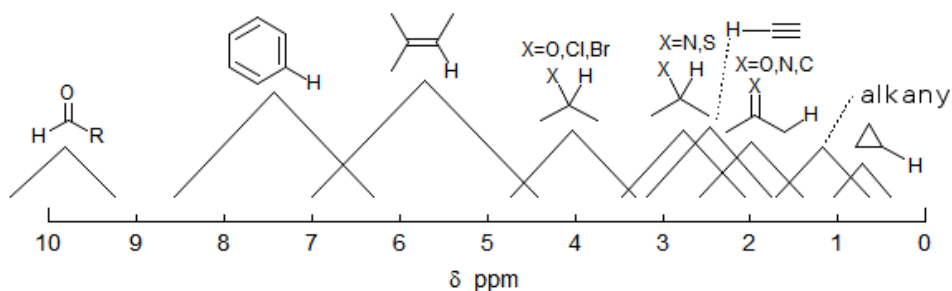
Indiáni učili své děti stopovat nejdříve na dobře rozeznatelných stopách. Podobně by se začínající chemik měl učit používat spektrální metody k identifikaci struktury látek na jednoduchých příkladech. K tomuto účelu by mohla posloužit tato sbírka spekter, která vznikla pro potřeby studentů prvního ročníku chemických oborů.

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

Nukleární magnetická rezonance (NMR)



Charakteristické chemické posuny atomu vodíku ^1H

Typ atomu vodíku		Chemický posun / ppm
Cyklopropan		0,2
Primární	RCH_3	0,9
Sekundární	R_2CH_2	1,3
Terciární	R_3CH	1,5
Vinylický	$\text{C}=\text{C}-\text{H}$	4,6–5,9
Acetylenický	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	2–3
Aromatický	$\text{Ar}-\text{H}$	6,0–8,5
Benzylický	$\text{Ar}-\text{C}-\text{H}$	2,2–3,0
Allylický	$\text{C}=\text{C}-\text{H}$	1,7
Fluorderiváty	$\text{HC}-\text{F}$	4,0–4,5
Chlorderiváty	$\text{HC}-\text{Cl}$	3–4
Bromderiváty	$\text{HC}-\text{Br}$	2,5–4,0
Jodderiváty	$\text{HC}-\text{I}$	2–4
Alkoholy	$\text{HC}-\text{OH}$	3,4–4,0
Etery	$\text{HC}-\text{OR}$	3,4–4,0
Estery	$\text{RCOOC}-\text{H}$	3,7–4,1
	$\text{HC}-\text{COOR}$	2,0–2,2
Kyseliny	$\text{HC}-\text{COOH}$	2,0–2,6
Karbonylové sloučeniny	$\text{HC}-\text{C}=\text{O}$	2,0–2,7
Aldehydy	RCHO	9–10
Hydroxylové skupiny	ROH	1,0–5,5
Fenolické skupiny	ArOH	4–12
Hydroxy skupina enolu	$\text{C}=\text{C}-\text{OH}$	15–17
Karboxylové kyseliny	RCOOH	10,5–12,0
Aminy	RNH_2	1–5

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

Stanovení sumárního vzorce z hmotnostního spektra

Pomocí hmotnostní spektroskopie lze stanovit sumární vzorec analyzované sloučeniny. Můžeme využít skutečnosti, že hmotností nuklidů nejsou přesně celými násobky hmotnostní jednotky. Kombinace prvků (sumární vzorec) se proto liší hmotností a přesně stanovená hmotnost zase zpětně ukáže sumární vzorec sloučeniny. Jako příklad mohou sloužit molekuly O_2 , N_2H_2 a CH_3OH , které mají velmi podobné molární hmotnosti.

$$\begin{array}{lll} O_2 & & 2 \times 15,9949 = 31,9898 \\ N_2H_2 & 2 \times 14,0031 + 4 \times 1,00783 = & 32,0375 \\ CH_3OH & 12,0000 + 4 \times 1,00783 + 15,9949 = & 32,0262 \end{array}$$

Pro rozlišení mezi těmito molekulami bychom museli stanovit m/z s přesností na nejméně tři desetinná místa. Toho lze dosáhnout pouze s užitím vysokorozlišujících hmotnostních spektrometrů.

Skutečnost, že naprostá většina prvků tvořících organické sloučeniny obsahuje vedle majoritního izotopu ještě další *těžší* izotopy, může být využita ke stanovení složení menších molekul. Následující tabulka zachycuje izotopické složení prvků podílejících se nejčastěji na stavbě organických sloučenin.

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	^{28}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				

Procentuální zastoupení izotopů je vztaženo na množství majoritního izotopu prvku. Přítomnost těžšího izotopu v molekule se projeví v hmotnostním spektru jako tzv. izotopický pík o vyšší hmotnosti. Izotopy vodíku, dusíku a uhlíku přispívají ke vzniku $M + 1$ izotopického iontu molekuly nebo jejího fragmentu. Díky nejvyššímu obsahu jsou nejvýznamnějšími příspěvateli k $M + 1$ izotopy ^{13}C (1,1 % množství ^{12}C) a ^{15}N (0,38 % množství ^{14}N). Pro určení počtu atomů uhlíku a dusíku v molekule musíme první vyjádřit intenzitu prvního izotopického píku molekulového iontu $M + 1$ v procentech intenzity M . Poté platí:

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

kde x je počet atomů uhlíku a y je počet atomů dusíku. Pro odhad počtu atomů dusíku v molekule můžeme použít *dusíkové pravidlo*, podle kterého sloučenina obsahující lichý počet atomů dusíku má lichou hmotnost a sudou hmotnost má molekula obsahující sudý počet atomů dusíku. Pravidlo platí pro všechny sloučeniny obsahující pouze některé z těchto prvků: C, H, N, O, S, F, Cl, Br, I, P, B, Si a As.

Přítomnost atomů Br, Cl, S a Si v molekule lze rozpoznat díky přítomnosti intenzivních píků $M + 2$. Například přítomnost jednoho atomu bromu v molekule se v hmotnostním spektru projeví přítomností charakteristické dvojice iontů M a $M + 2$ o přibližně stejné intenzitě.

Přítomnost jednoho atomu chloru lze také snadno odhadnout z přítomnosti iontu $M + 2$ s přibližně třetinovou intenzitou oproti M (^{37}Cl tvoří 32,5 % množství ^{35}Cl).

Přítomnost většího počtu atomů Br a Cl vede ke složitější distribuci hmot iontů, poměr intenzit lze získat získat binomickým rozvojem, například pro prvek s dvěma isotopy, které mají relativním zastoupením a a b , uijeme vztah $(a + b)^n$, kde n je počet atomů diisotopického prvku ve sloučenině. Pro sloučeninu obsahující dva atomy bromu v molekule (např. Br_2) získáme $a^2 + 2ab + b^2 = 10.000 + 19.600 + 9.604$, což po normalizaci poskytne pro poměr hmot $M:(M+1):(M+2)$ poměr intenzit 51:100:49.

Fuor, fosfor a jod jsou monoizotopické prvky, jejichž přítomnost je obtížné vystopovat metodou založenou na izotopických iontech.

Příklady: V hmotnostním spektru látky byl kromě iontu M^+ nalezen iont $M + 1$ s touto intenzitou:

150 (M^+)	100 %
151 ($M + 1$)	10,2 %

Sloučenina neobsahuje dusík nebo obsahuje sudý počet jeho atomů. Počet atomů uhlíku bude 9 (10,2/1,1), rozdíl hmotnosti devíti atomů uhlíku a hmotnosti molekulového iontu (42) nemůže být tvořen pouze atomy vodíku, rozdíl můžeme smysluplně doplnit atomy kyslíku a dusíku na $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_2$ a $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$. Analýza hmotnostního spektra (způsobu fragmentace) ukáže, že se jedná o 1-(2-methoxyfenyl)ethanon ($\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$).

V hmotnostním spektru jiné látky byl kromě iontu M^+ nalezen iont $M + 1$ s touto intenzitou:

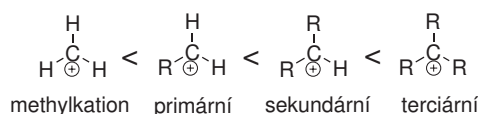
121 (M^+)	100 %
122 ($M + 1$)	9,2 %

Lichá hmotnost napovídá přítomnost lichého počtu atomů dusíku v molekule. Počet atomů uhlíku v molekule bude 8 (vypočítáme (9,2–0,38)/1,1). Rozdíl hmotnosti osmi atomů uhlíku a molekulového iontu (25) může být smysluplně doplněn pouze jedním atomem dusíku a 11 atomy vodíku ($\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N}_1$). Analýza hmotnostního spektra (způsobu fragmentace) ukáže, že látkou je *N,N*-dimethylanilin.

Základní pravidla fragmentačních reakcí při EI

Ionizace molekul pomocí urychlených elektronů tudíž zanechává ionty přebytkem vnitřní energie, který ve spojení s nestabilitou samotných kation-radikálů může následně vést k fragmentaci ionizovaných molekul.

1. Pravděpodobnost štěpení vazeb vycházejících z atomu uhlíku roste s počtem alkylových zbytků, které tento atom nese. Důvodem je stabilizace vzniklého karbokationtu alkylovými substituenty. Obecně platí, že se jako radikál ze substituovaného atomu uhlíku odštěpuje nejobjavnější skupina. Stabilita karbokationtů roste v následujícím pořadí:

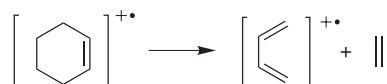


2. Násobné vazby, cyklické struktury a zvláště aromatické (heteroaromatické) cykly stabilizují ion M^+ , vedou k omezení fragmentace a tím ke zvýšení intenzity M^+ .

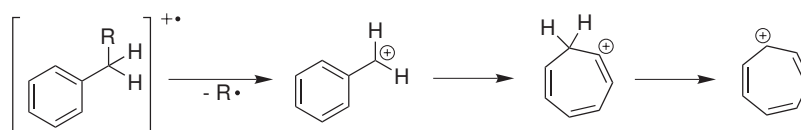
3. Přítomnost násobné vazby zvyšuje výrazně pravděpodobnost štěpení v allylické pozici, které poskytuje stabilizovaný kation. Je potřeba si však uvědomit, že u alkenů dochází po elektronové ionizaci ke snadné migraci násobných vazeb. Využit tohoto pravidla však lze ve strukturní analýze cykloalkenů.
4. Cykloalkany a jejich deriváty nesoucí na atomech cyklu alkylové substituenty, mají tendenci odštěpovat tyto skupiny jako radikály, přičemž kladný náboj zůstává lokalizován na příslušném atomu cyklu.



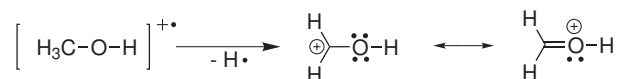
5. Nenasycené šestičlenné cykly mají tendenci podléhat retro-Dielsově-Alderově reakci. Při fragmentaci výchozího iontu s lichým počtem elektronů zůstává kladný náboj přednostně a nebo výhradně na fragmentu, který má nižší ionizační energii.



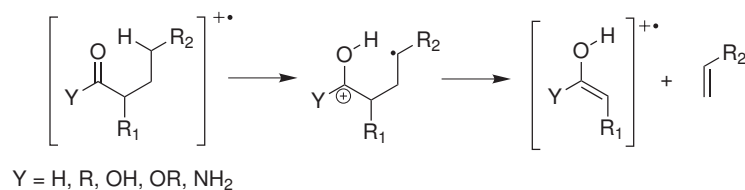
6. Alkyldaromáty podléhají štěpení β vazeb za vzniku rezonancí stabilizovaných kationtů benzylového typu, které jsou v rovnováze s aromatickým tropyliovým kationtem.

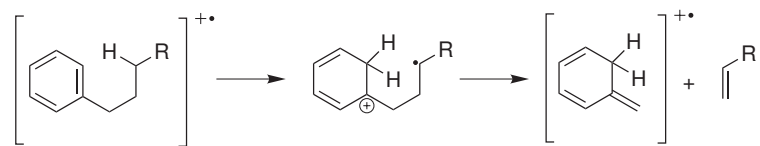


7. Po elektronové ionizaci relativně snadno praskají vazby C–C a C–H vycházející z atomu uhlíku, který sousedí s heteroatomem nesoucím volné elektronové páry. Kladný náboj zůstává přednostně lokalizován na fragmentu, který obsahuje heteroatom. Popsané štěpení je umožněno účinnou stabilizací vznikajícího karbokationtu konjugací s volnými elektronovými páry heteroatomu.



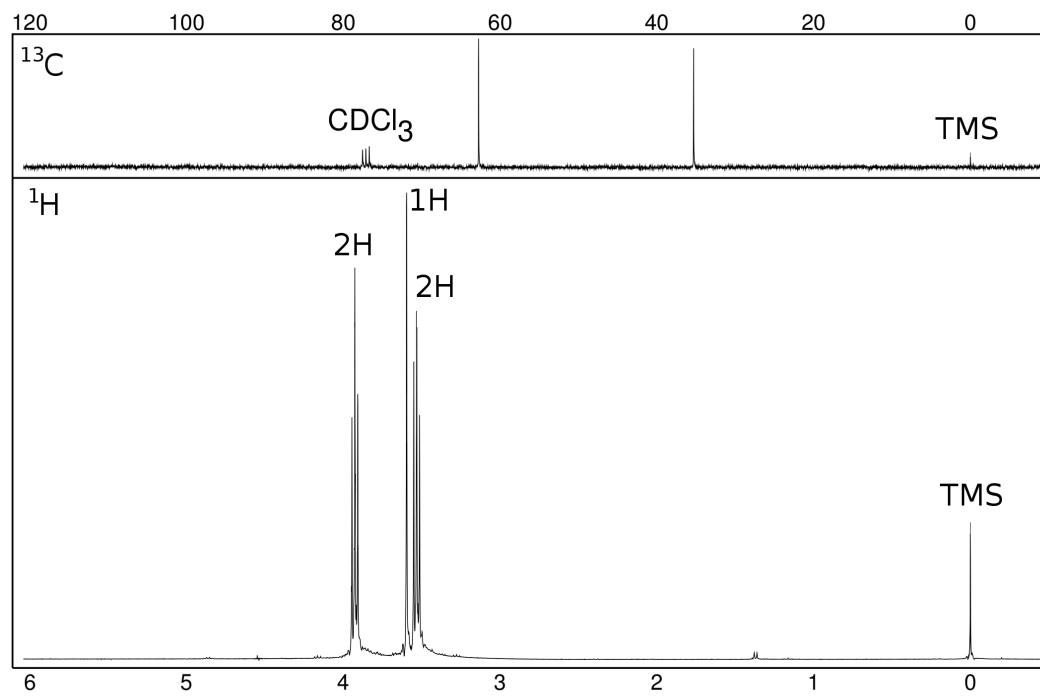
8. Štěpení ionizované molekuly je často doprovázeno eliminací malých stabilních molekul, např. CO, H₂O, H₂S, NH₃, HCN, R–OH, R–SH, CH₂=C=O, alkeny.
9. Molekuly obsahující dvojnou vazbu a relativně snadno odštěpitelný atom vodíku v γ -pozici vůči této dvojně vazbě, podléhají *McLaffertyho přesmyku* spojeného s eliminací.



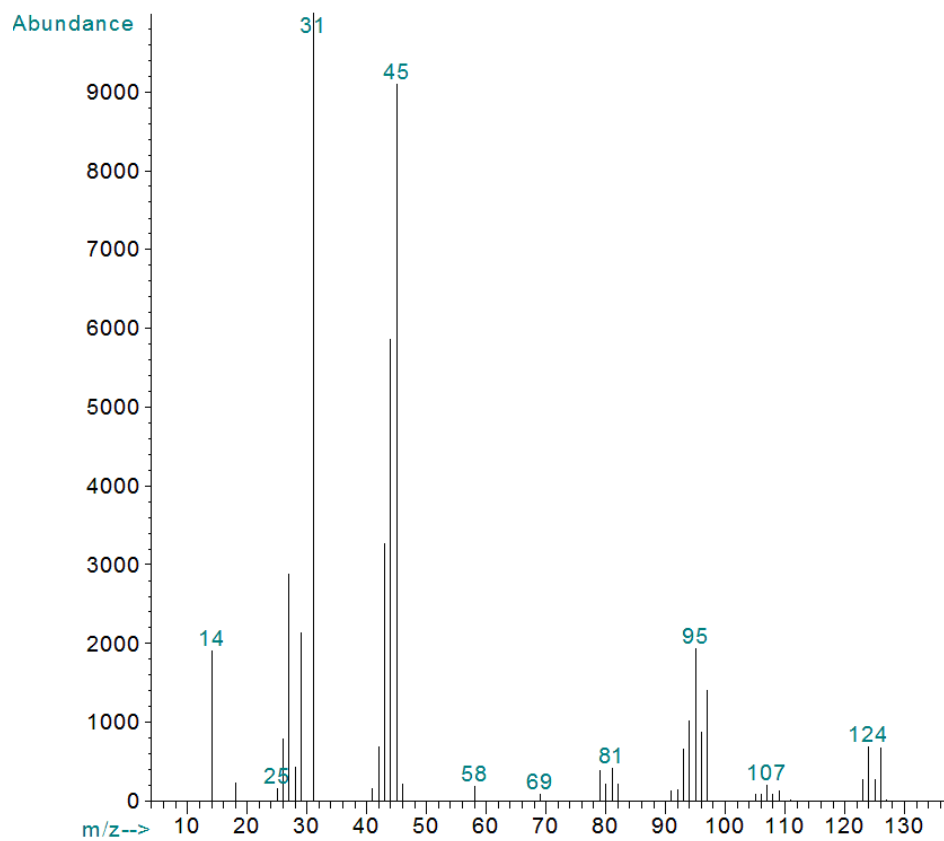


Sloučenina A

NMR spektra



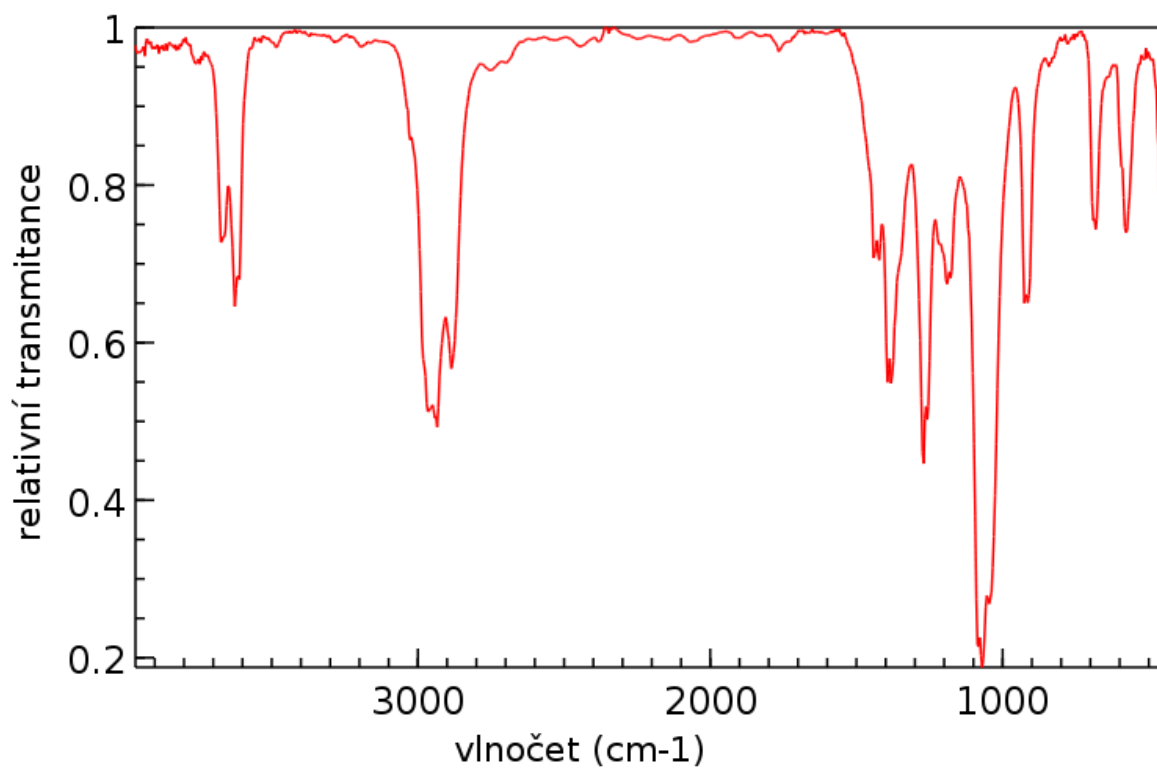
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
123	39,1 %
124	100,0 %
125	39,1 %
126	96,7 %
127	2,8 %

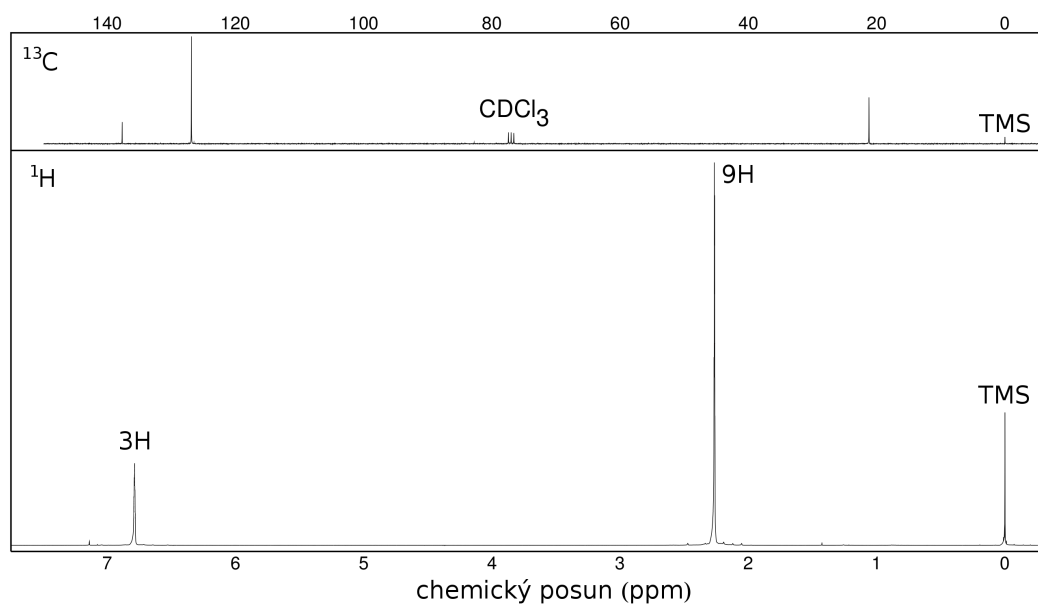
Infračervené spektrum



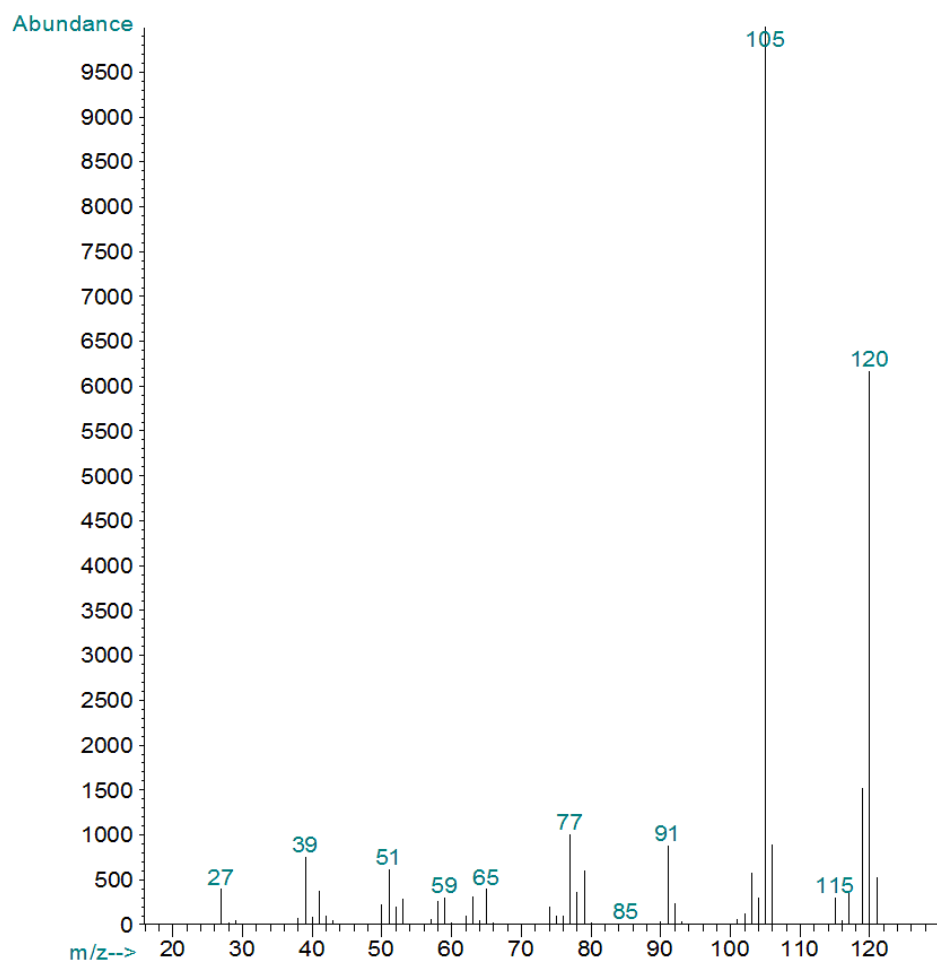
Řešení je na str. 61

Sloučenina B

NMR spektra



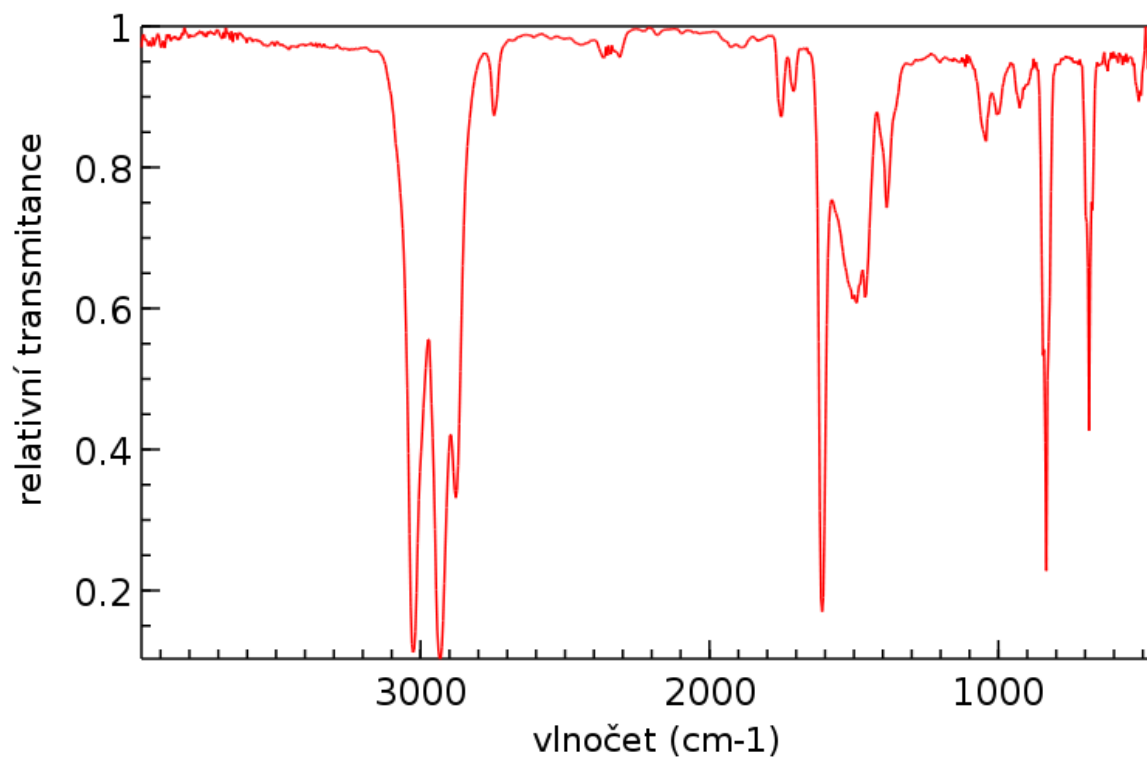
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
120	100,0 %
121	10,0 %
122	0,5 %

Infračervené spektrum

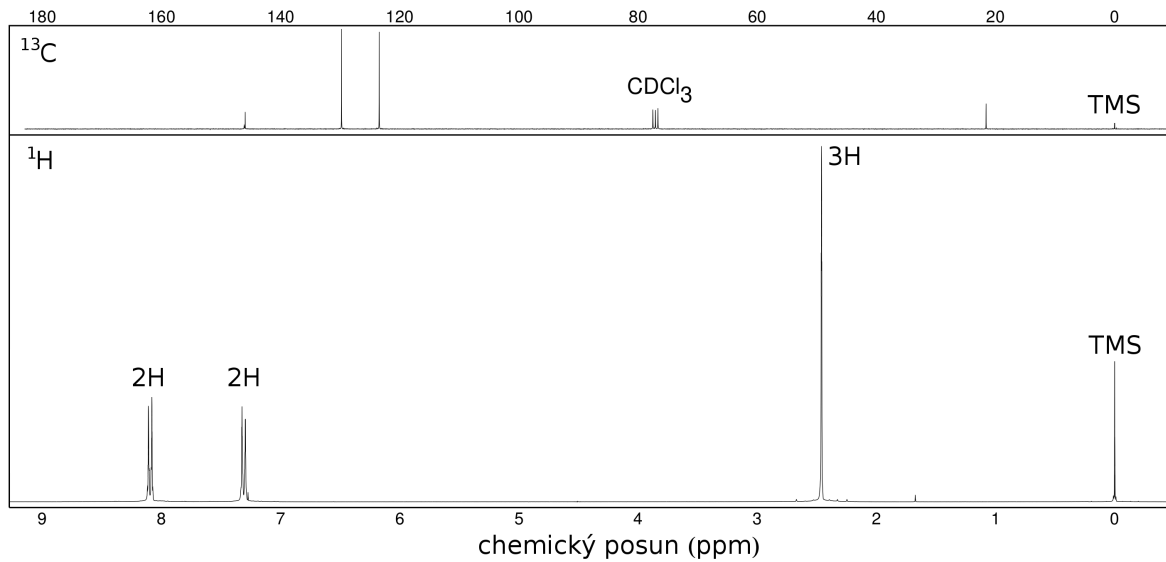


Řešení je na str. 62

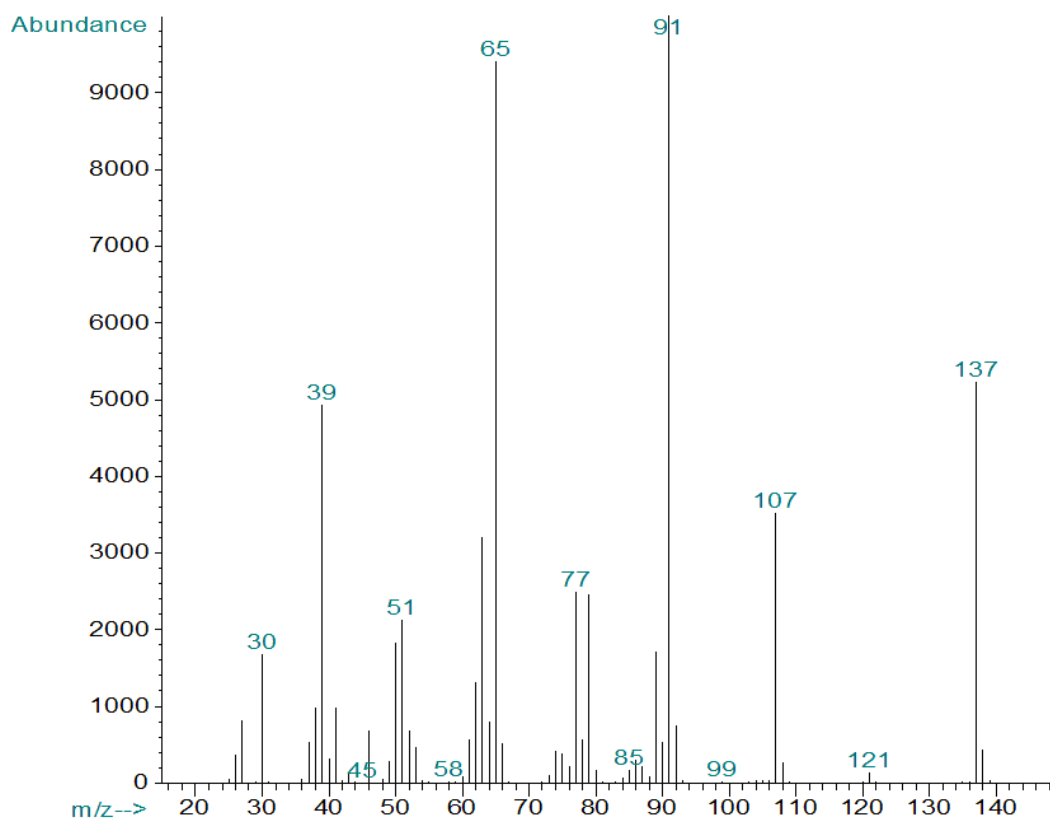
Sloučenina C

NMR spektra

V ^{13}C NMR spektru jsou dva píky v oblasti cca 145 ppm, z nichž jeden má nízkou intenzitu, je rozšířený a téměř se překrývá s druhým píkem.



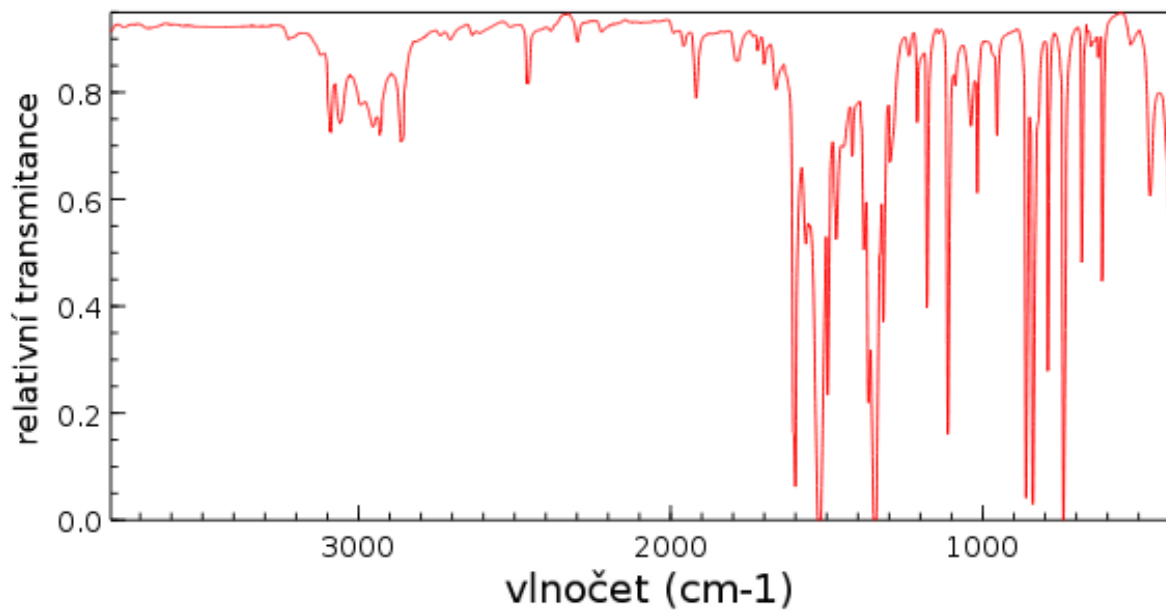
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

<i>m/z</i>	Intenzita
137	100,0 %
138	8,4 %
139	0,7 %

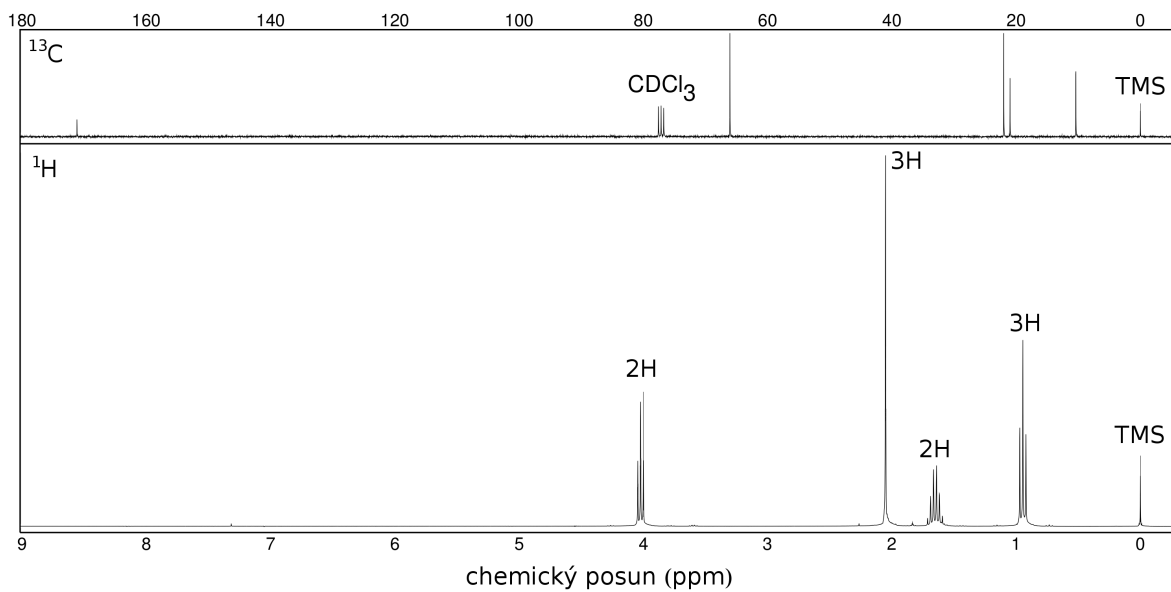
Infračervené spektrum



Řešení je na str. 63

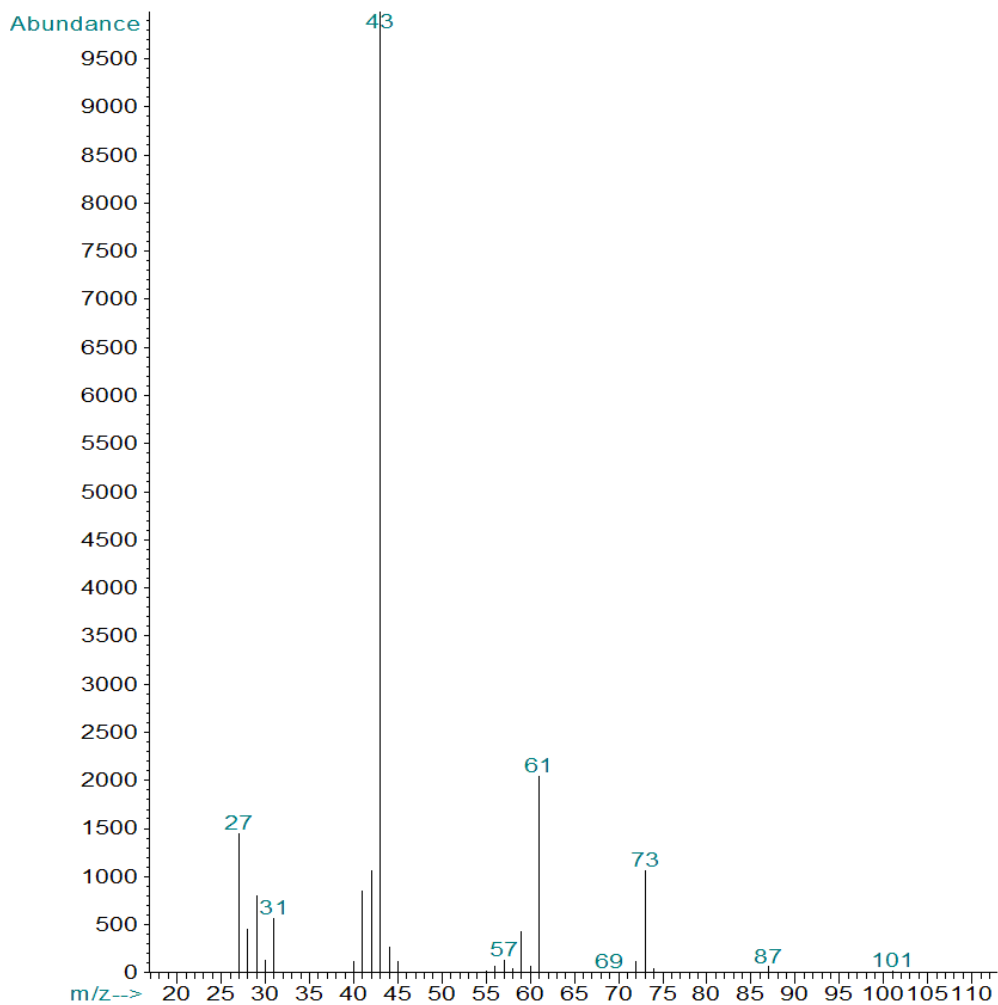
Sloučenina D

NMR spektra

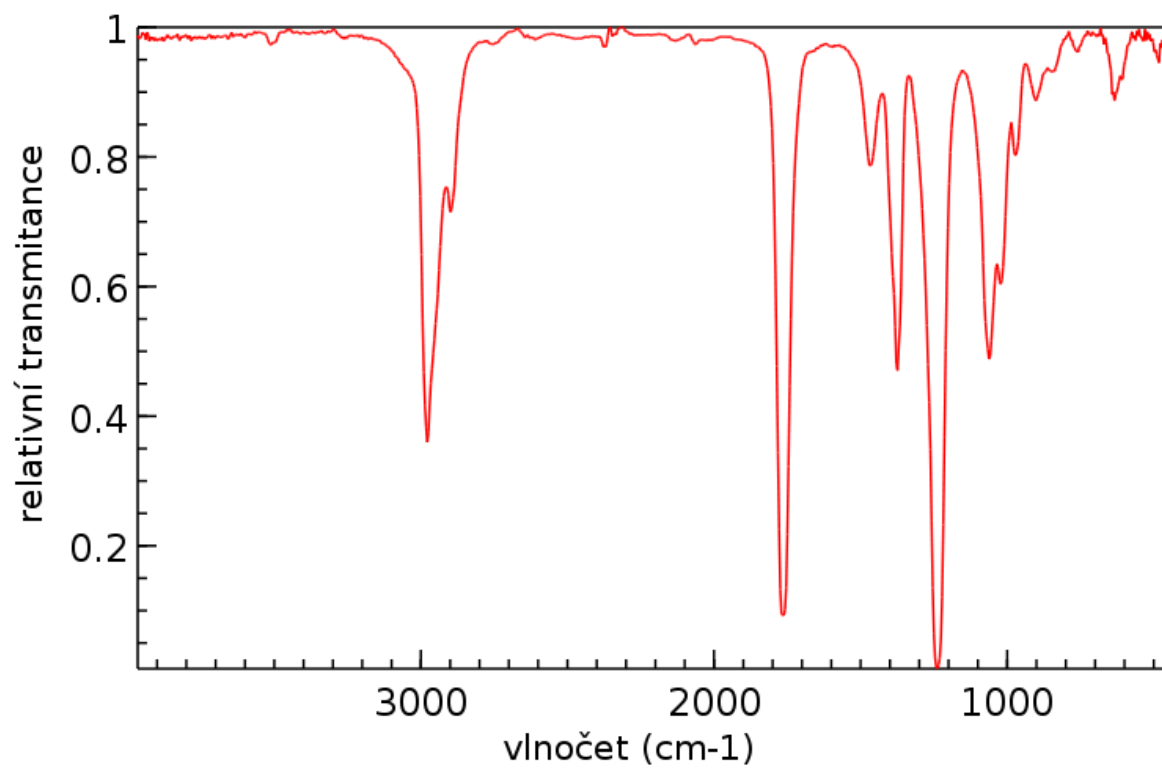


Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)

Ve hmotnostním spektru nevidíme molekulový ion, M^+ má $m/z = 102$.



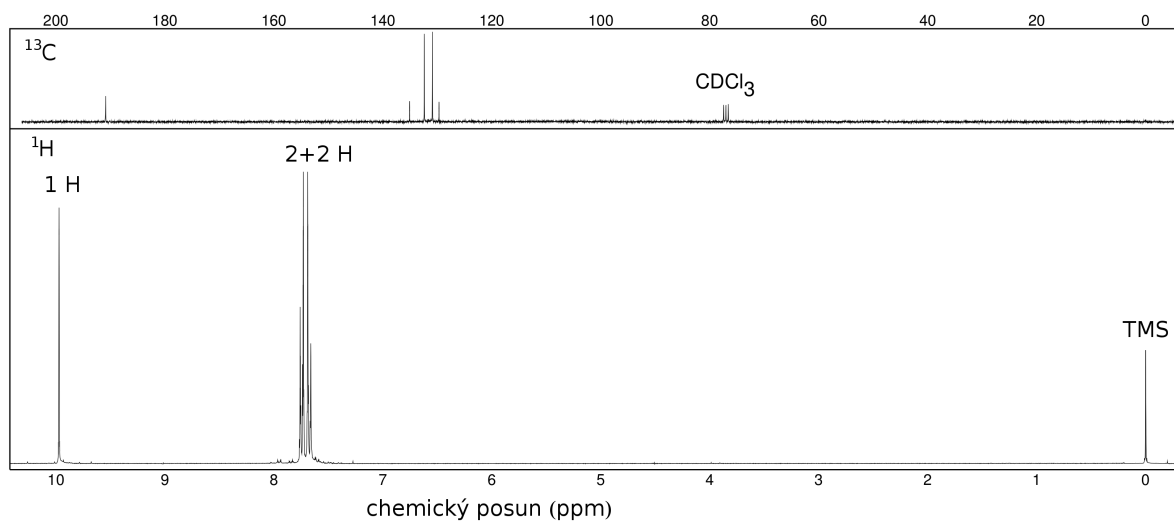
Infračervené spektrum



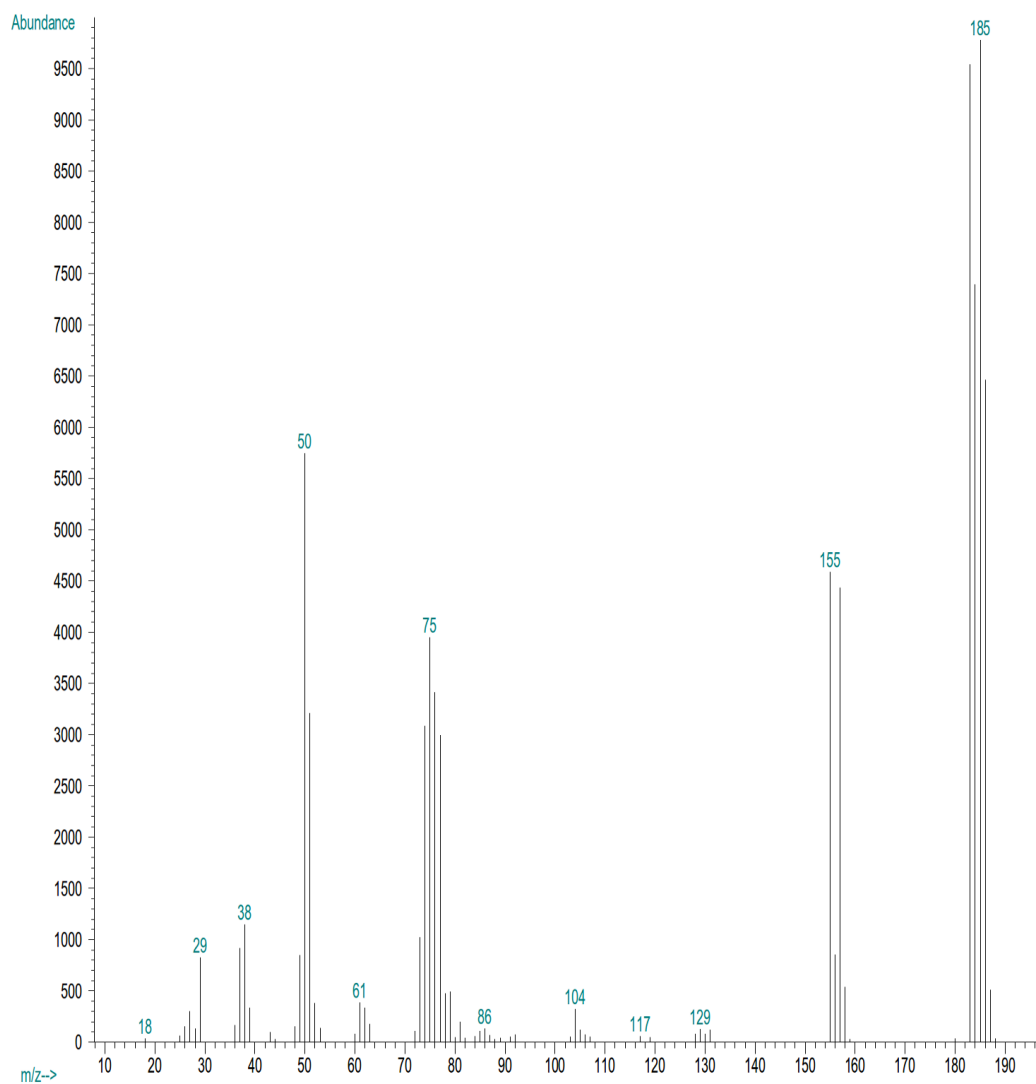
Řešení je na str. 64

Sloučenina E

NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)

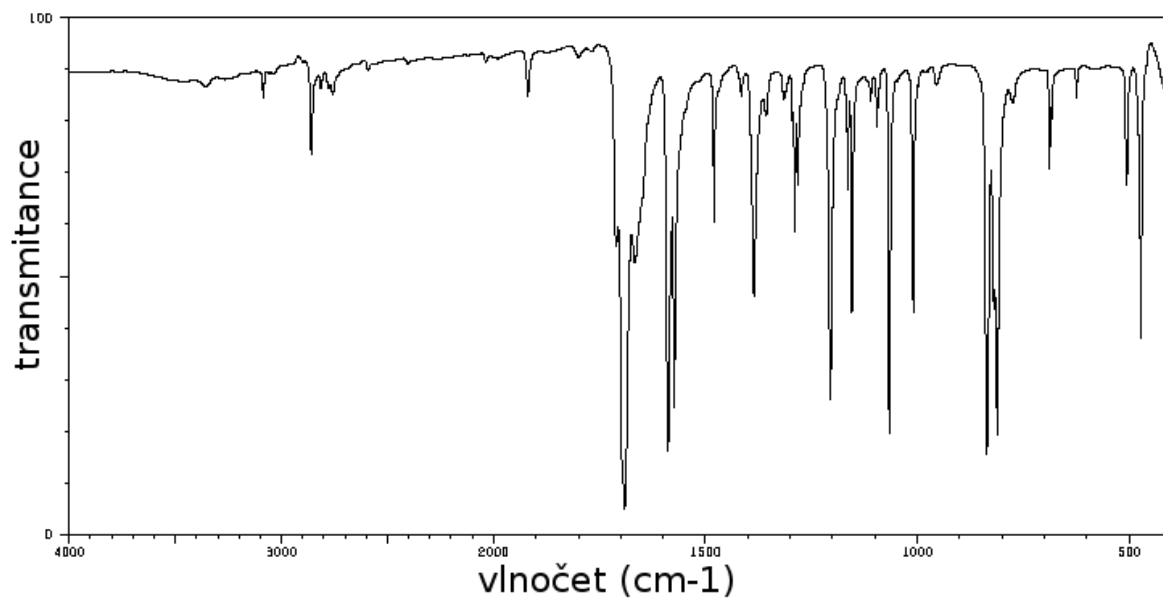


Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

<i>m/z</i>	Intenzita
183	129,1 %
184	100,0 %
185	135,3 %
186	87,4 %
187	6,9 %

Infračervené spektrum

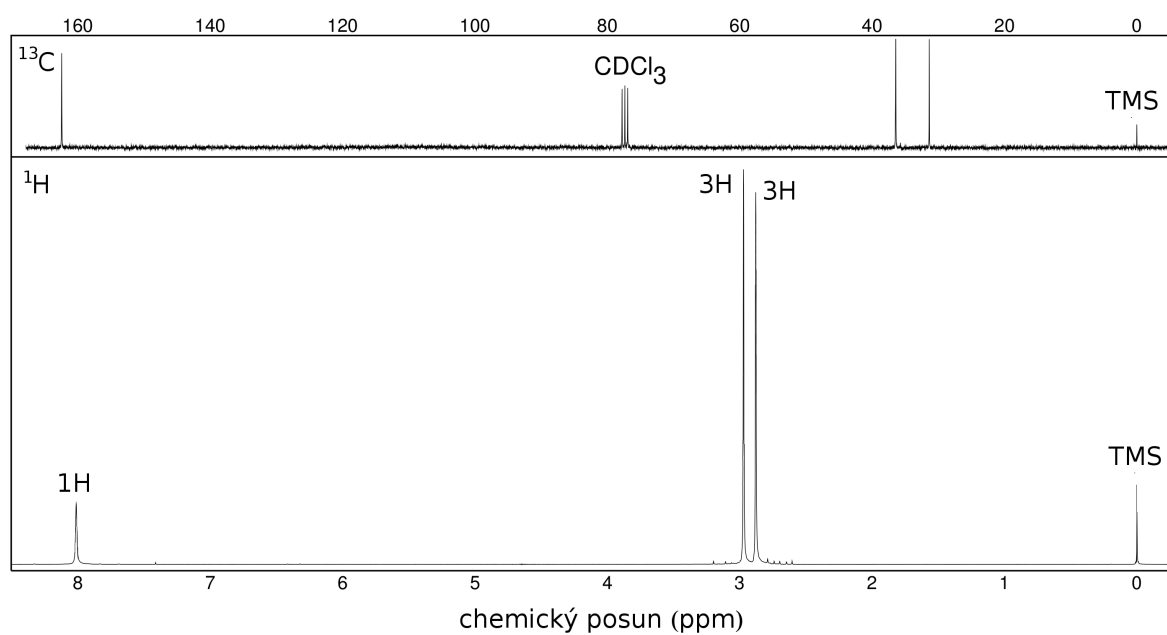
Tableta KBr



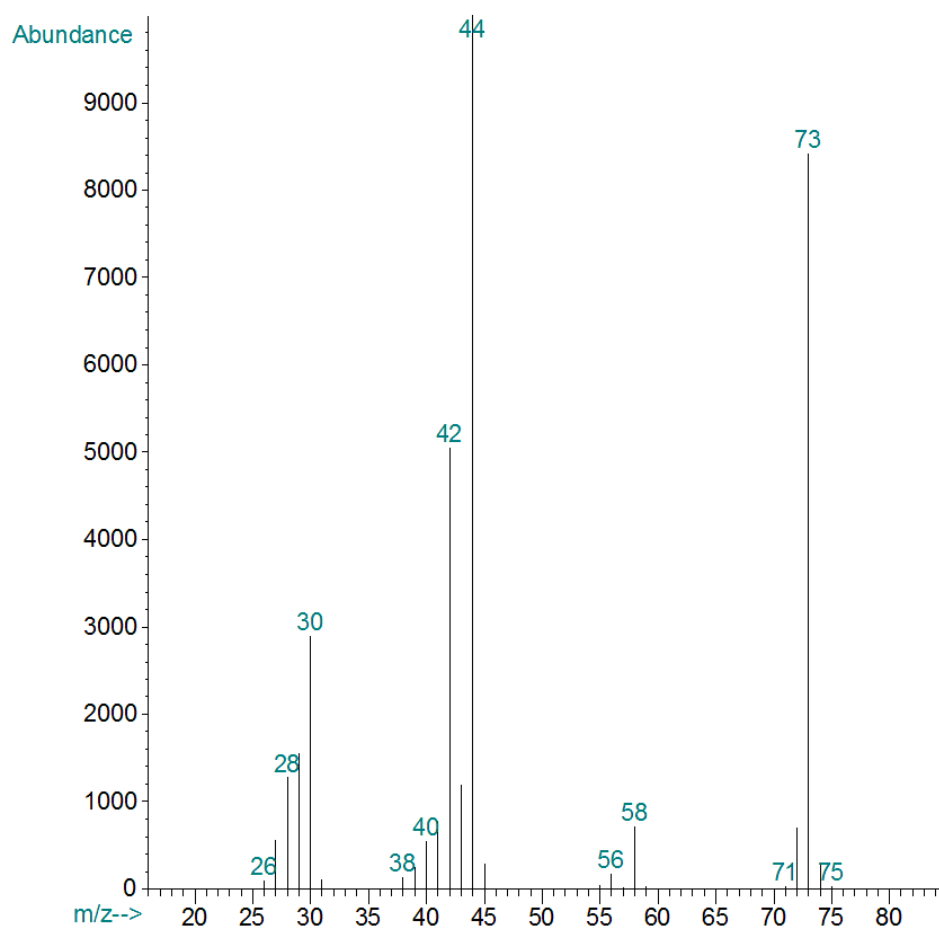
Řešení je na str. 65

Sloučenina F

NMR spektra



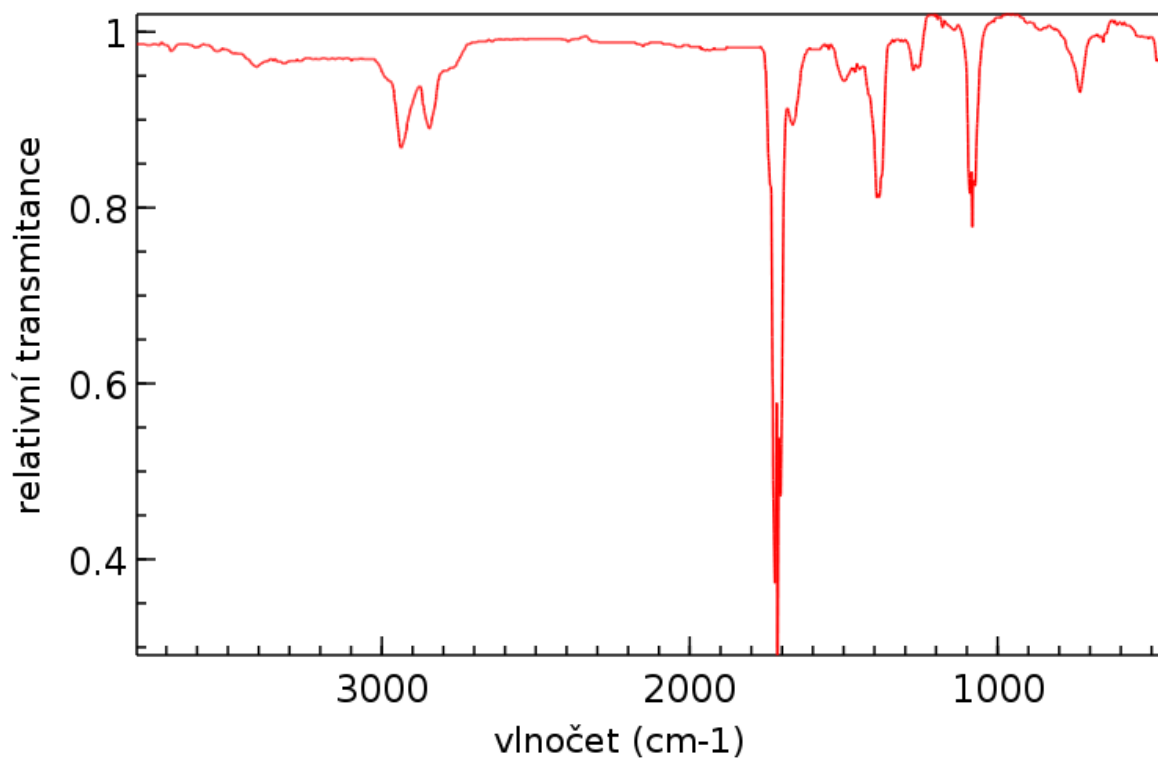
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
73	100,0 %
74	3,6 %
75	0,4 %

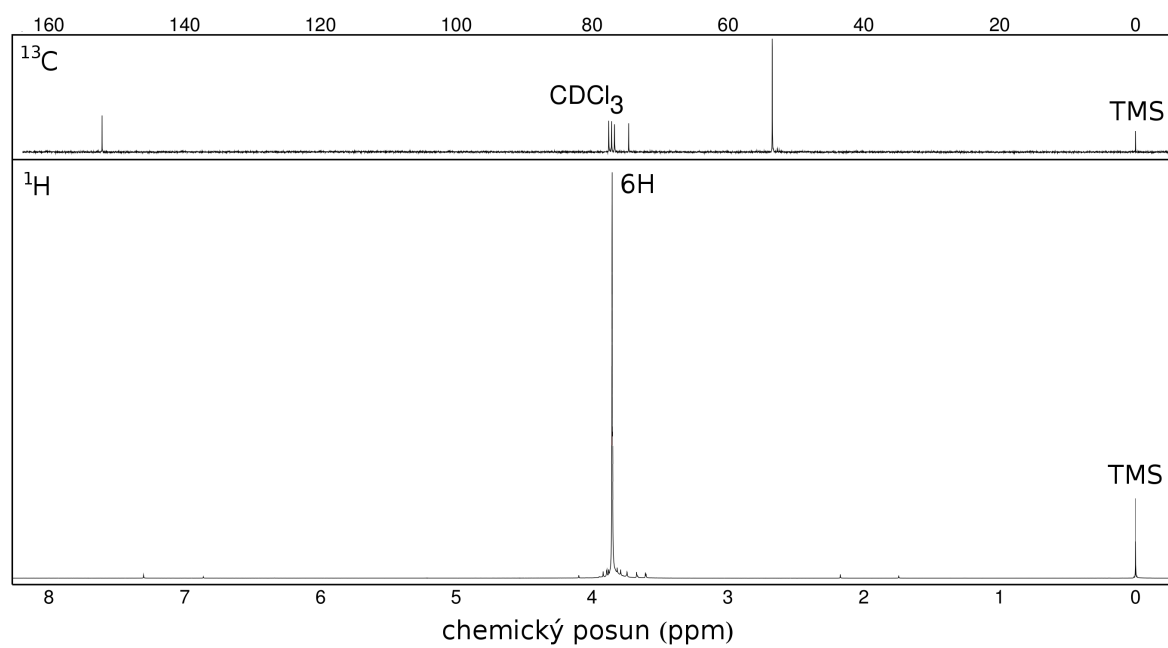
Infračervené spektrum



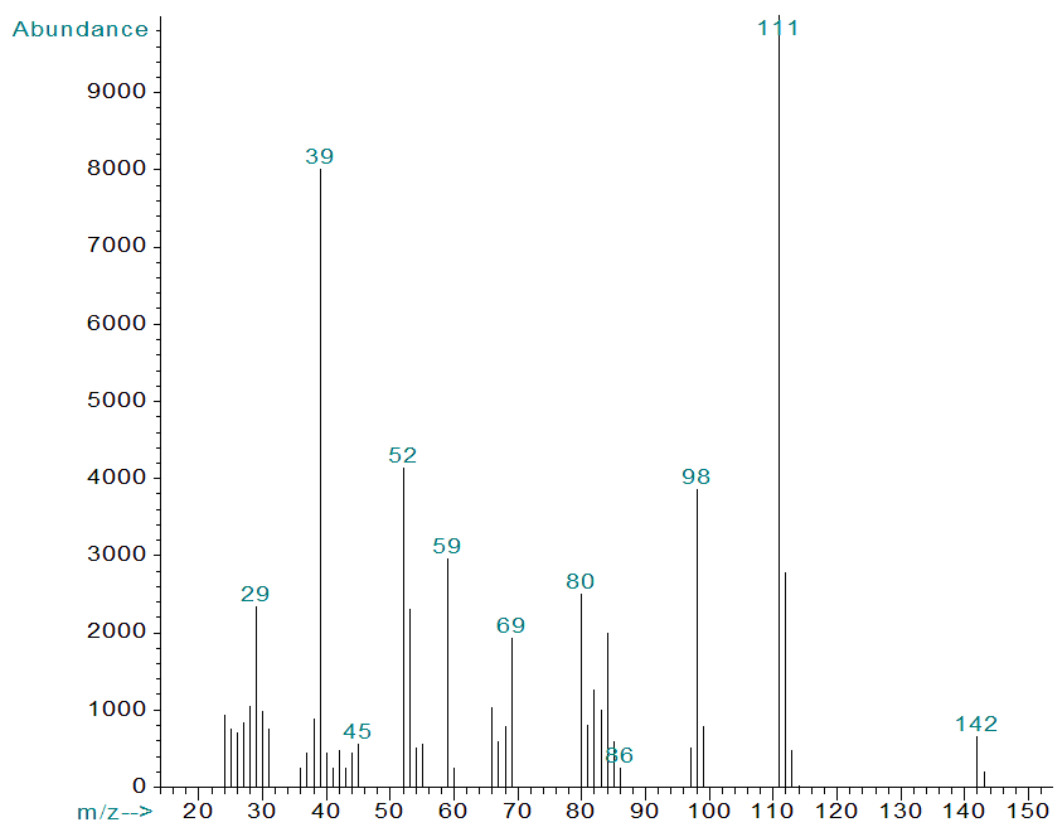
Řešení je na str. 66

Sloučenina G

NMR spektra



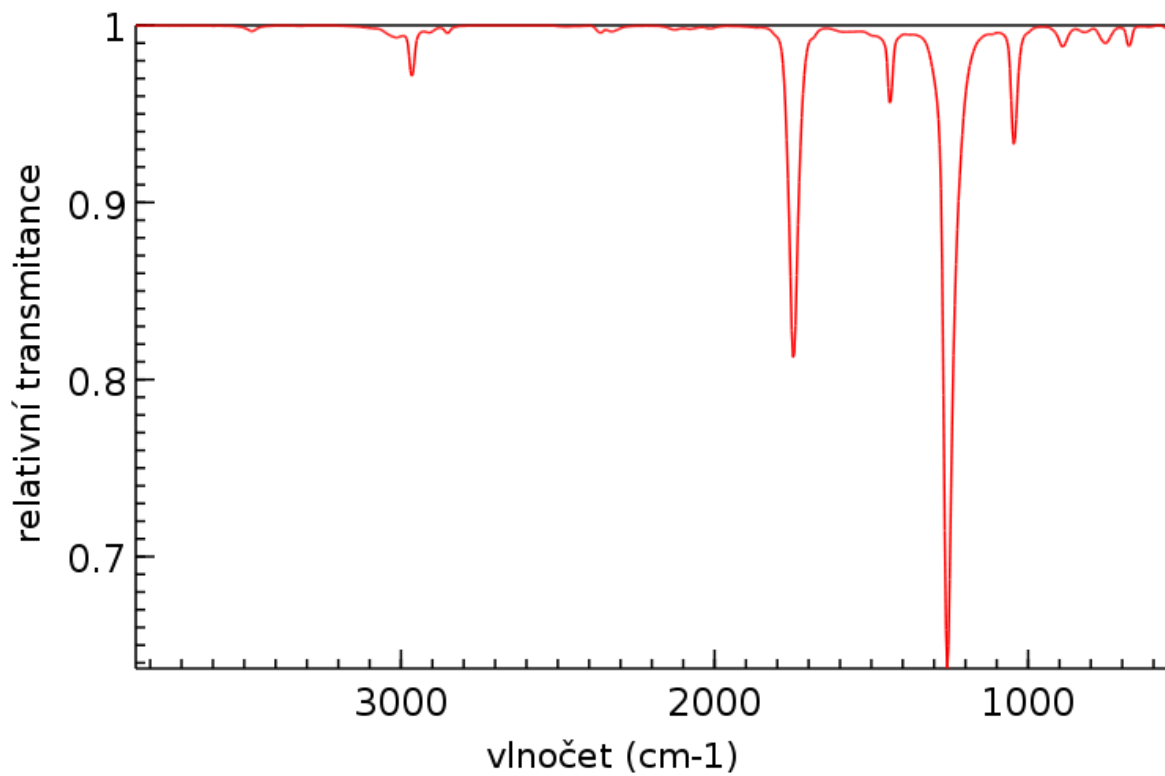
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
142	100,0 %
143	7,0 %
144	1,0 %

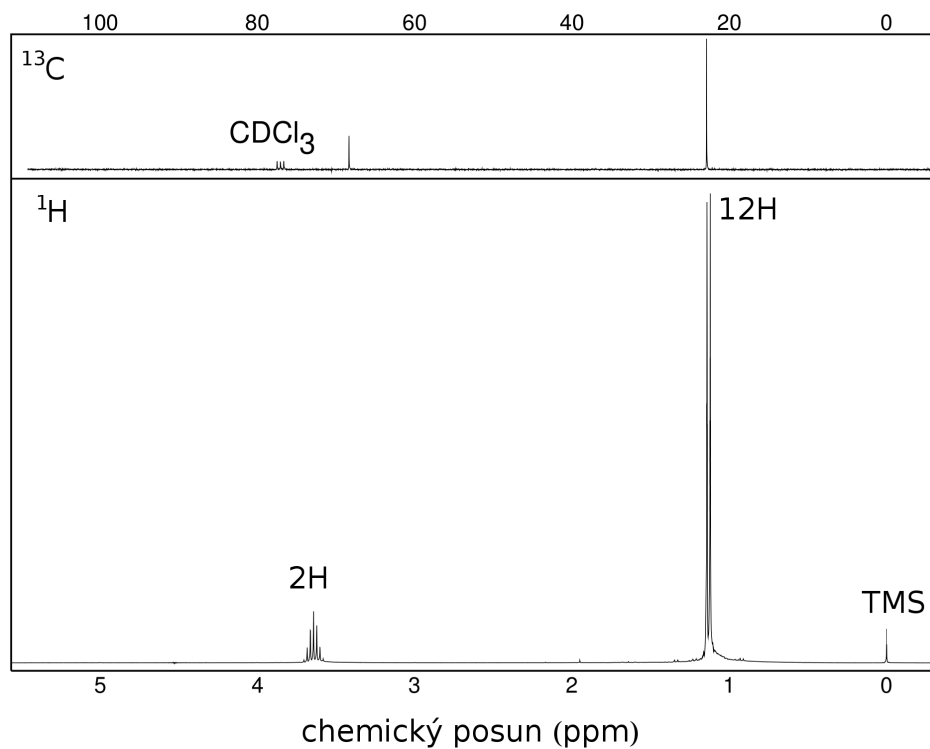
Infračervené spektrum



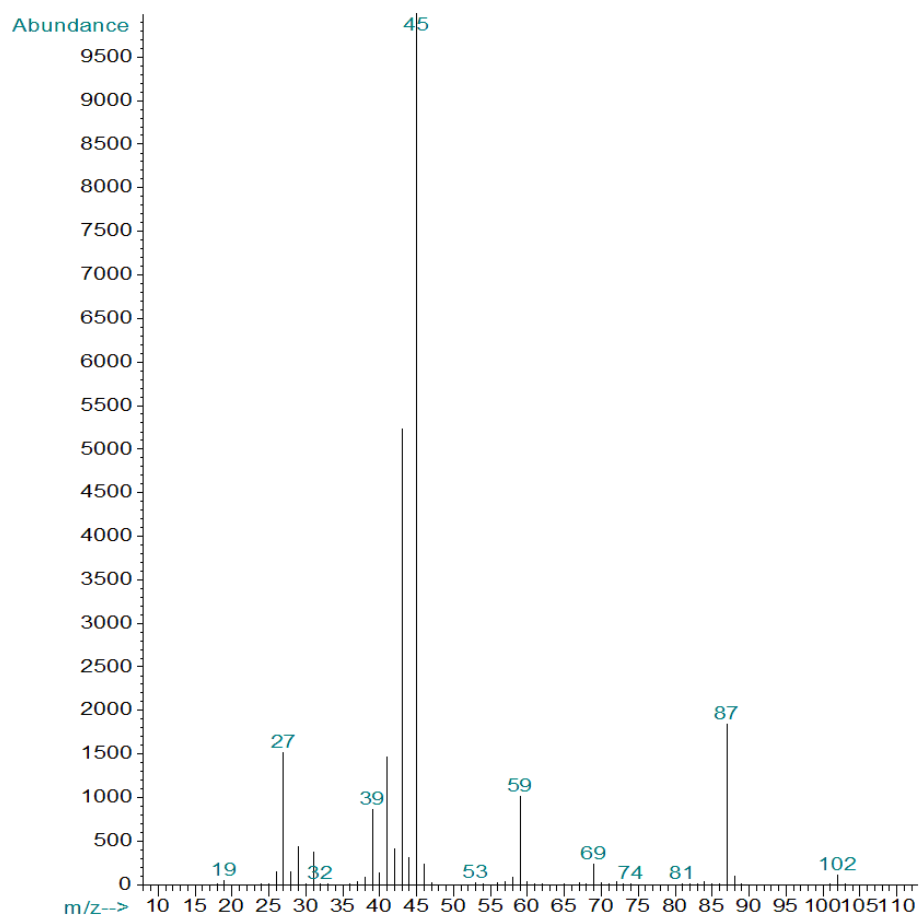
Řešení je na str. 67

Sloučenina H

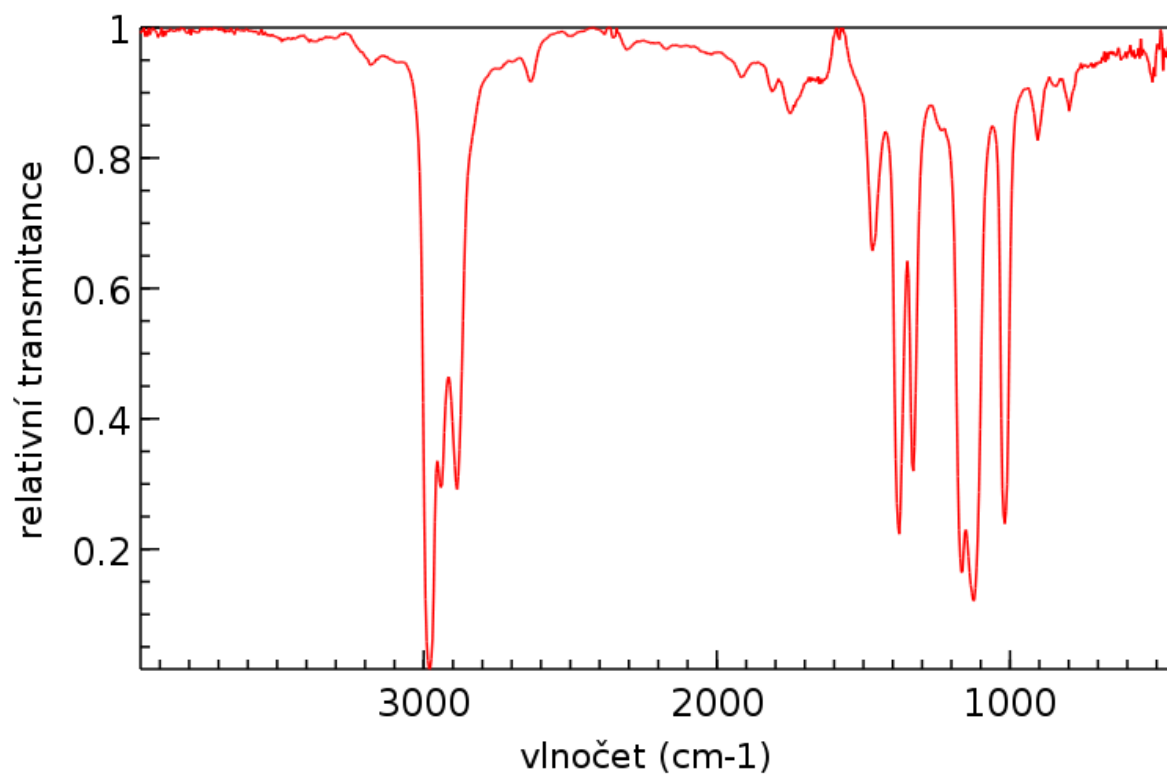
NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



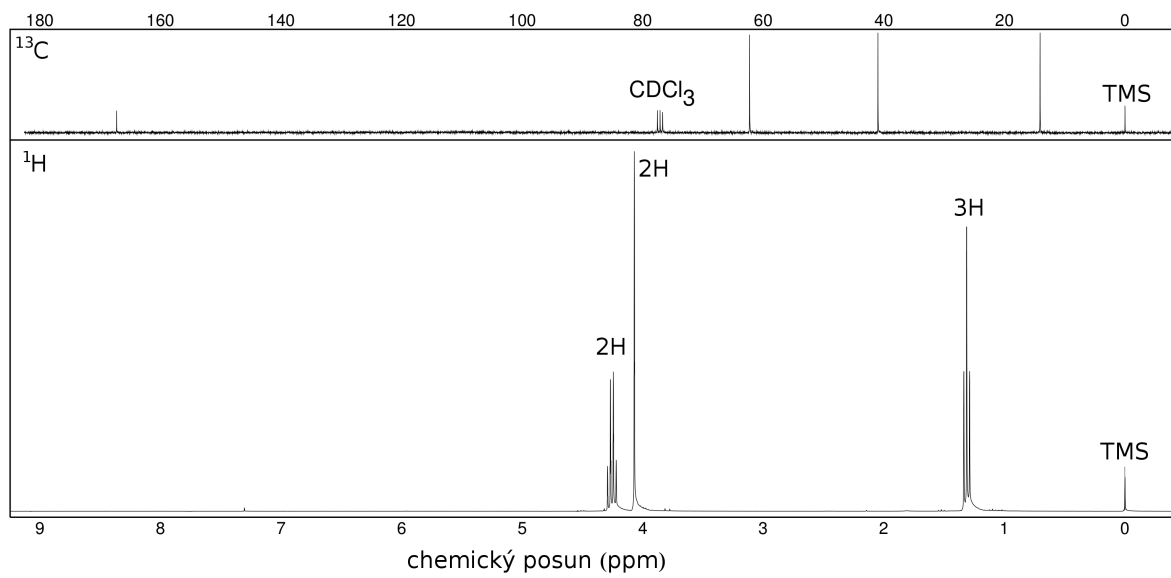
Infračervené spektrum



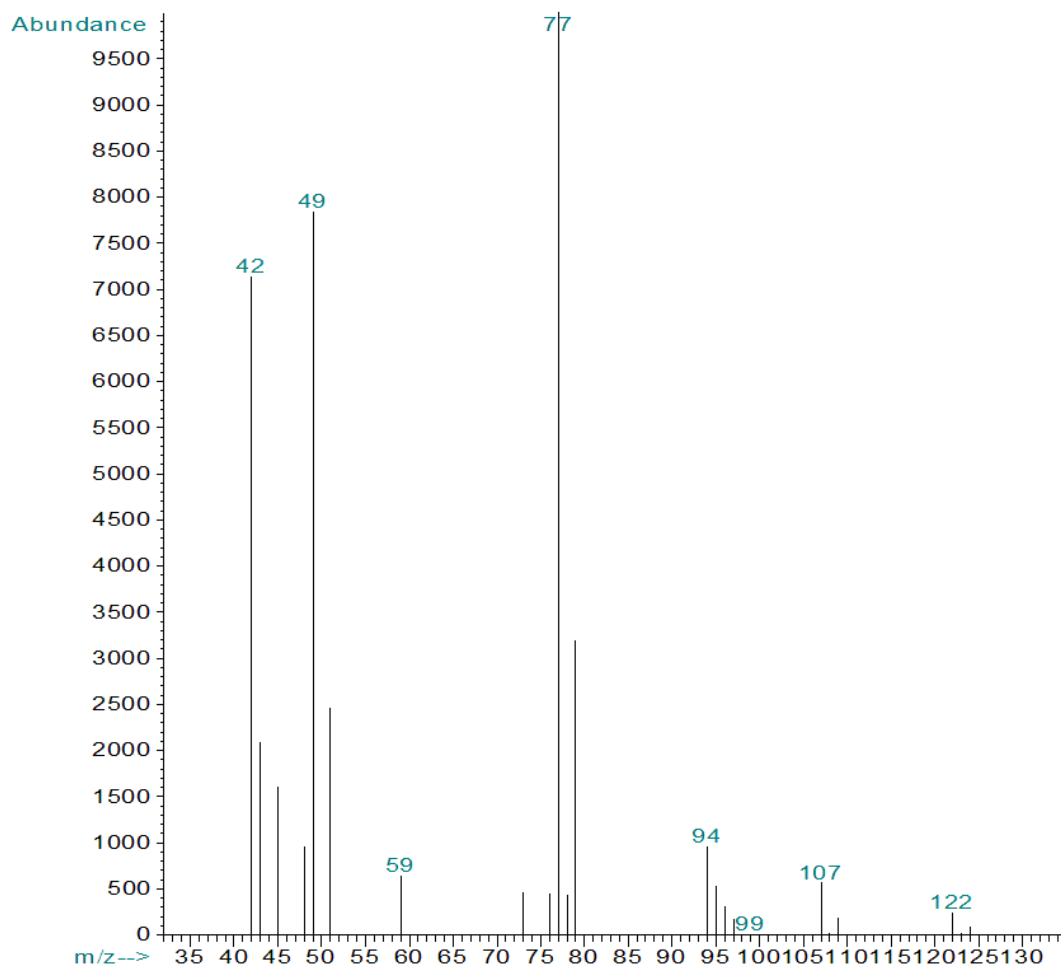
Řešení je na str. 68

Sloučenina I

NMR spektra



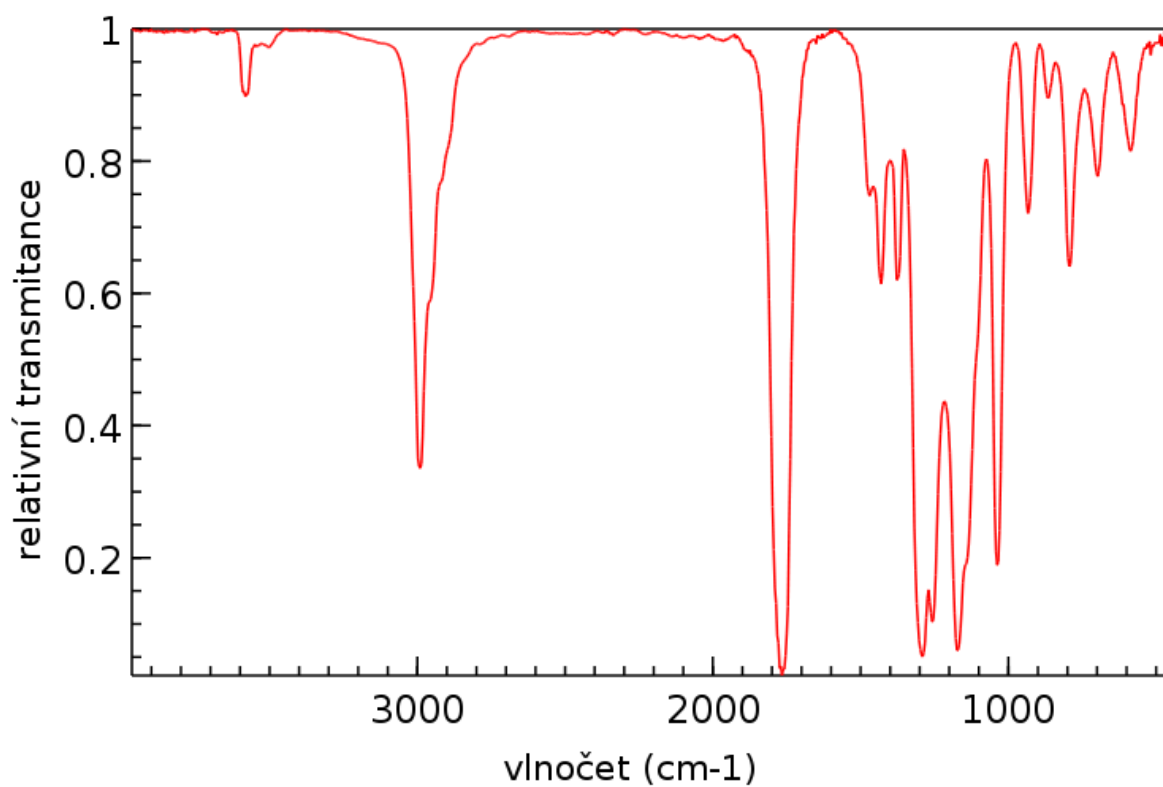
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
122	100,0 %
123	4,6 %
124	32,5 %
125	1,7 %

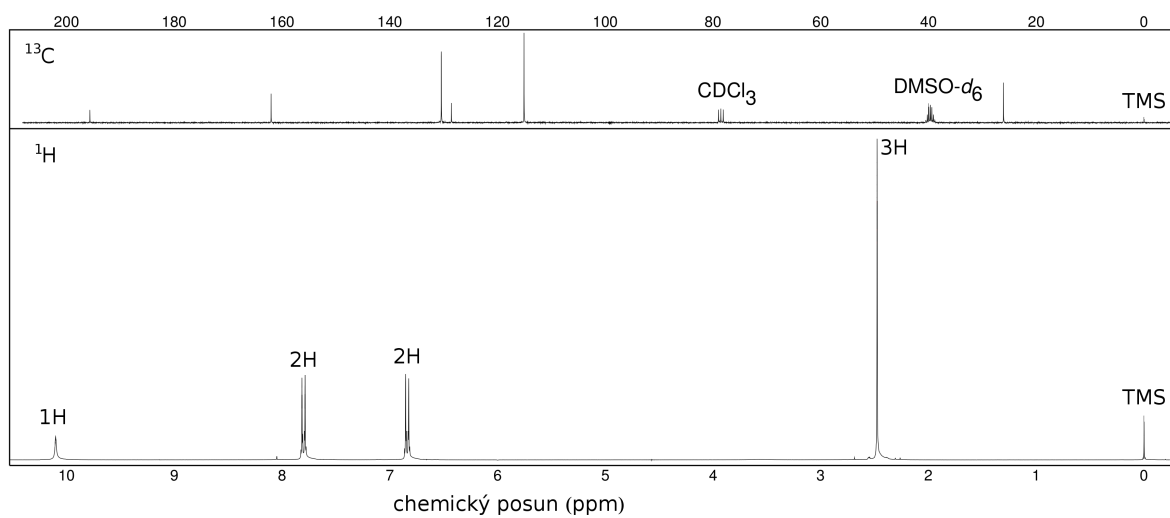
Infračervené spektrum



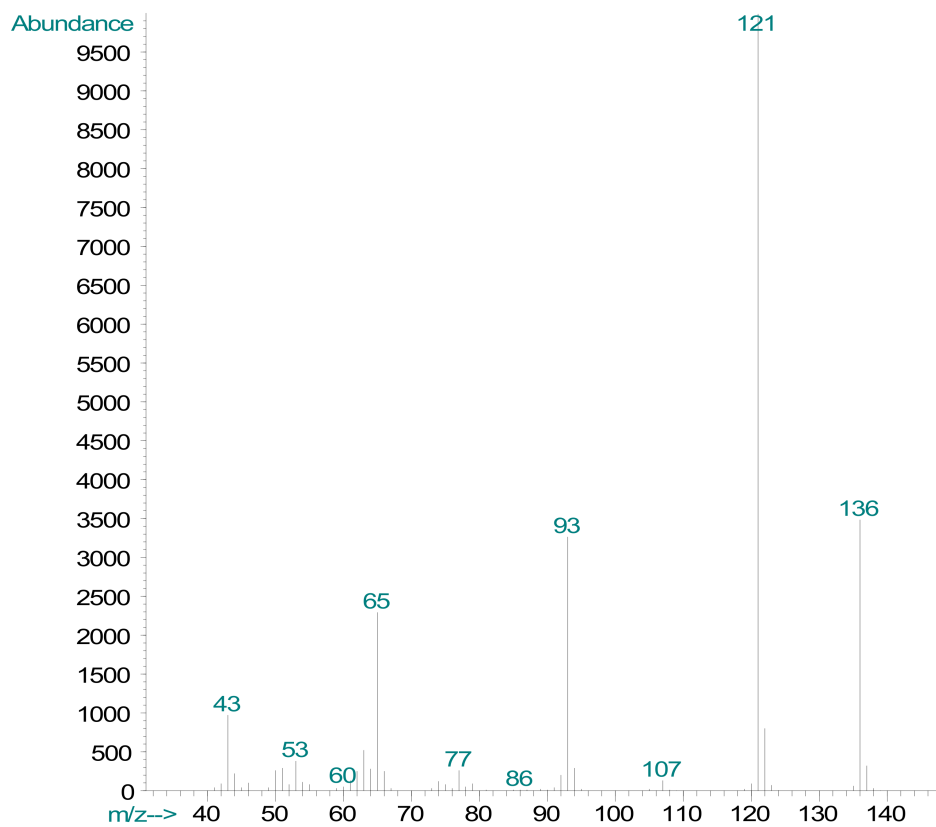
Řešení je na str. 69

Sloučenina J

NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)

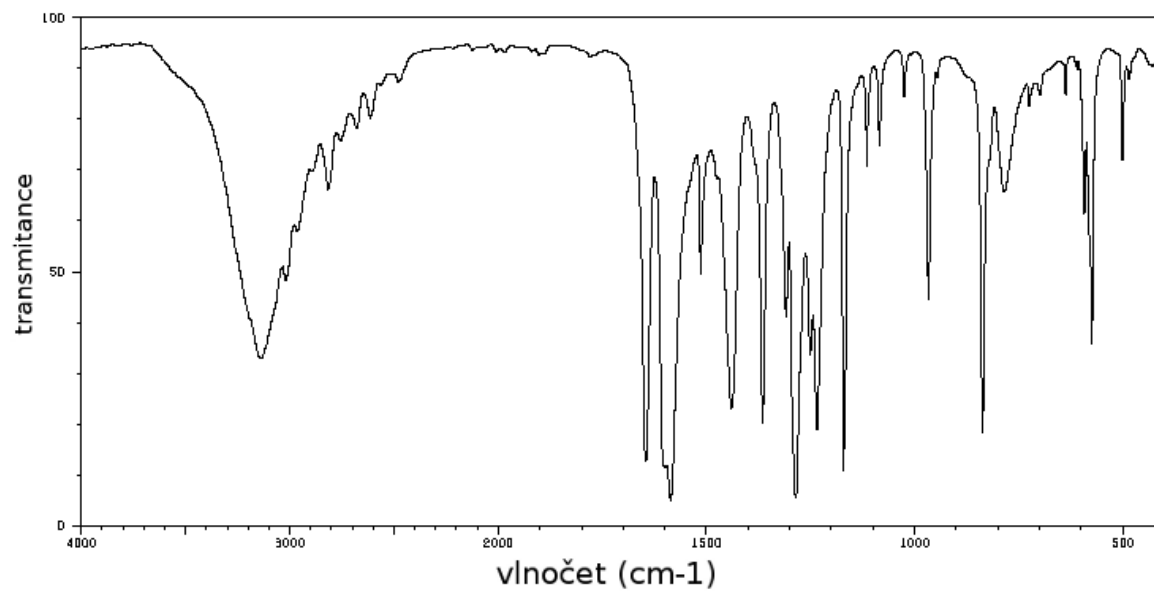


Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
136	100,0 %
137	8,8 %

Infračervené spektrum

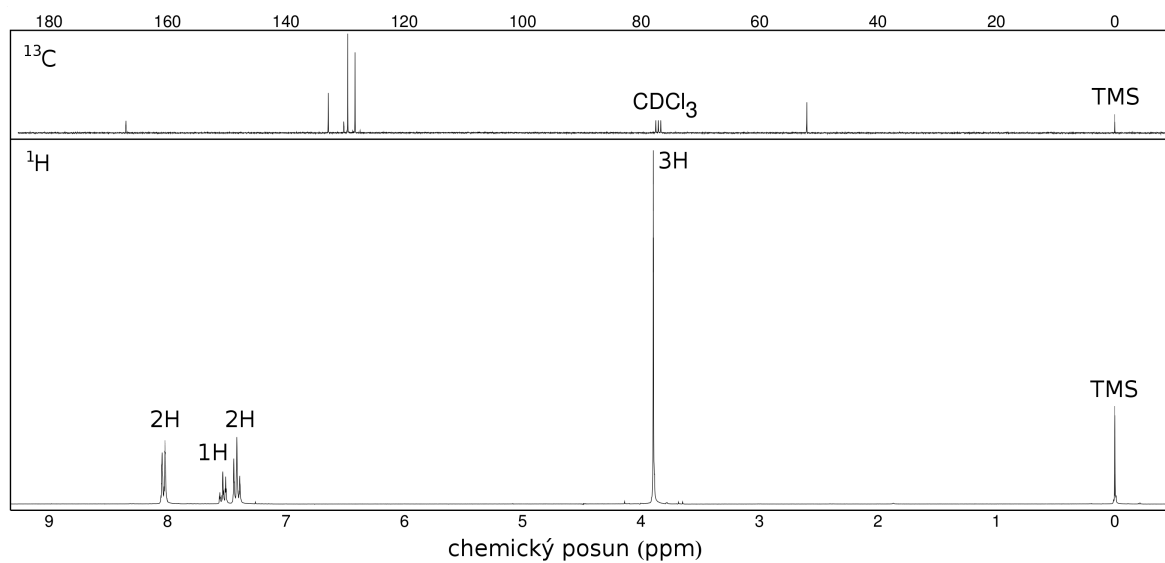
Měřeno v tabletě KBr.



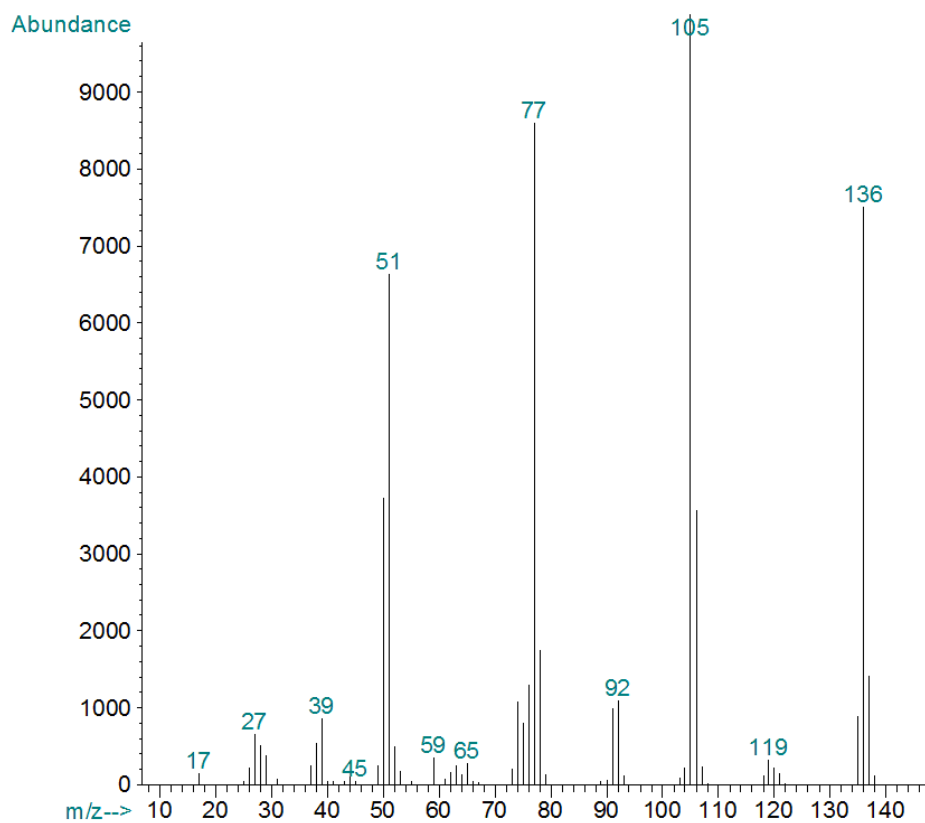
Řešení je na str. 70

Sloučenina K

NMR spektra



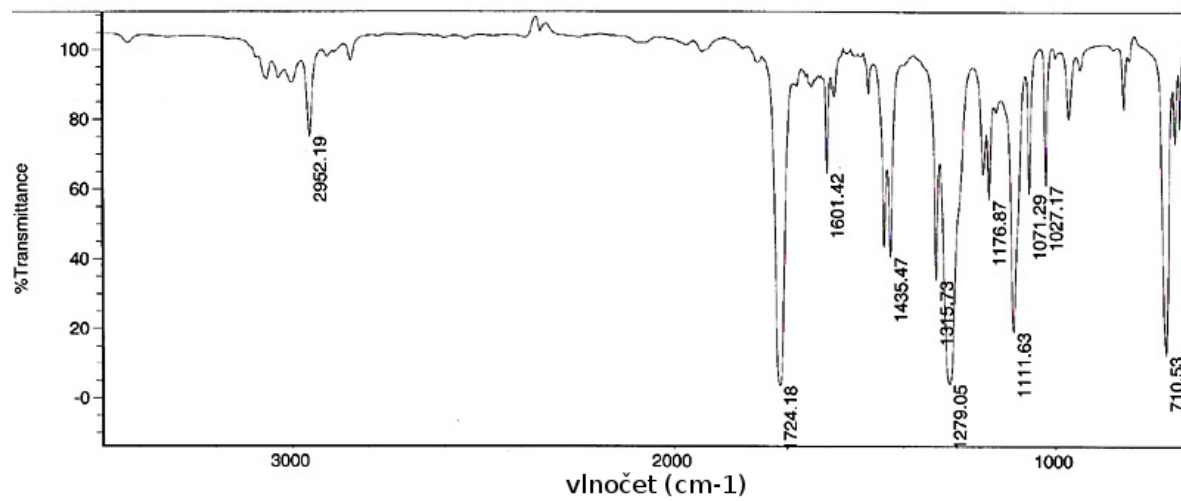
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

<i>m/z</i>	Intenzita
123	100,0 %
124	7,3 %
125	0,6 %

Infračervené spektrum

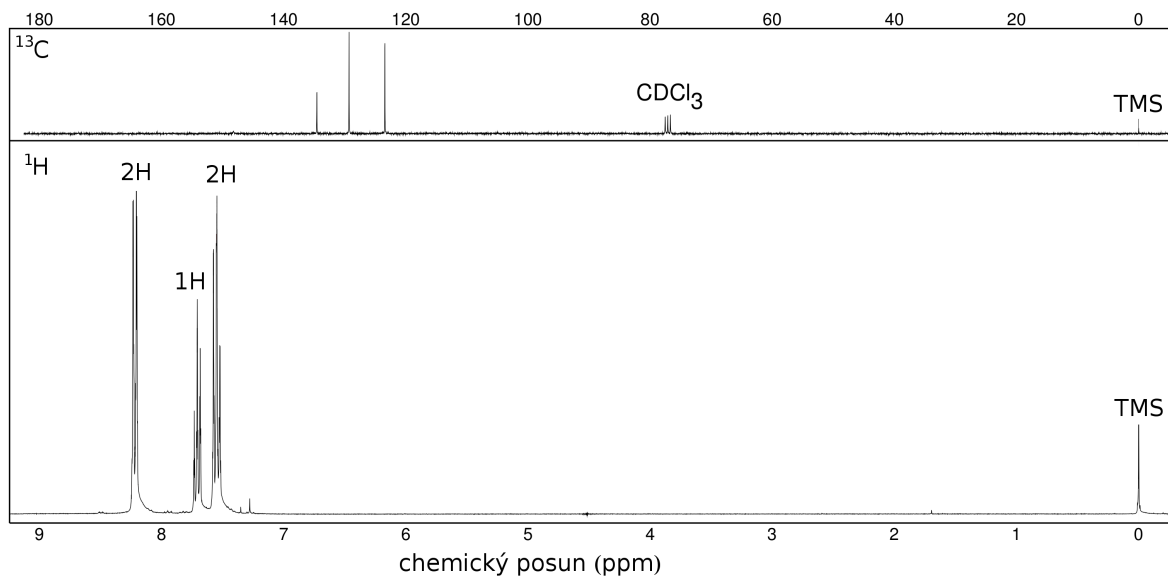


Řešení je na str. 71

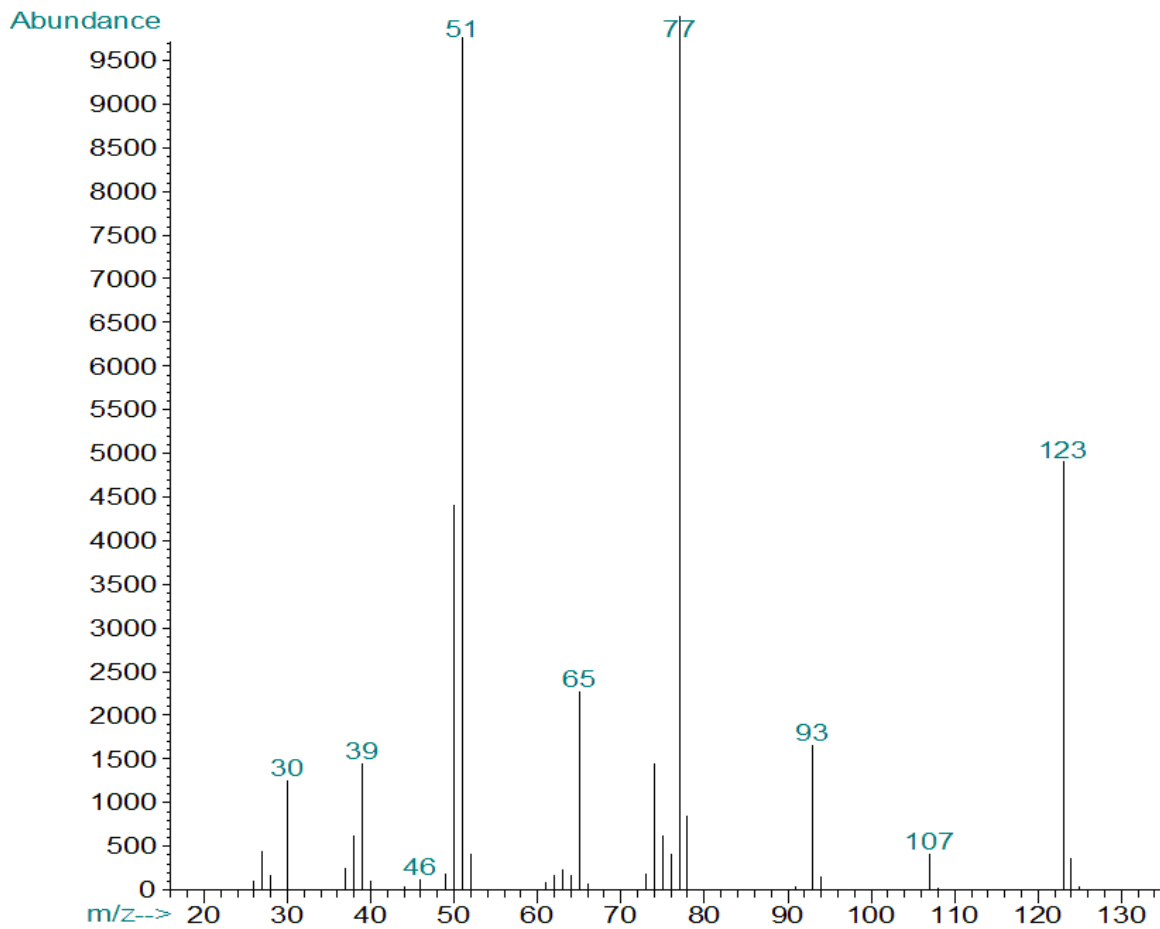
Sloučenina L

NMR spektra

V ^{13}C NMR spektru je v oblasti cca 148 ppm jeden široký pík s nízkou intenzitou.

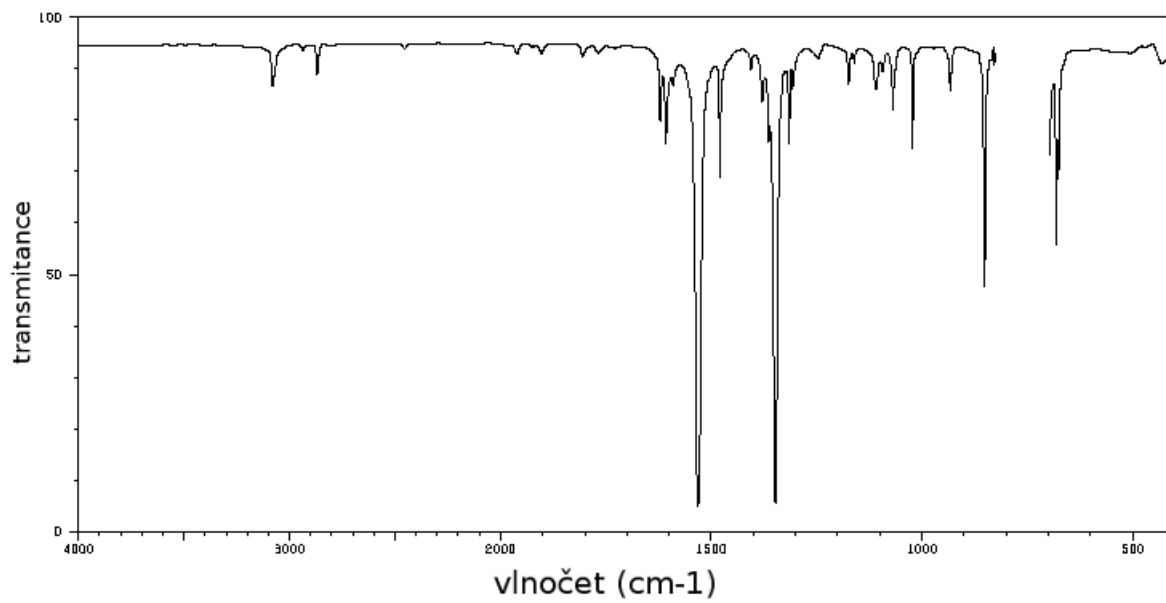


Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Infračervené spektrum

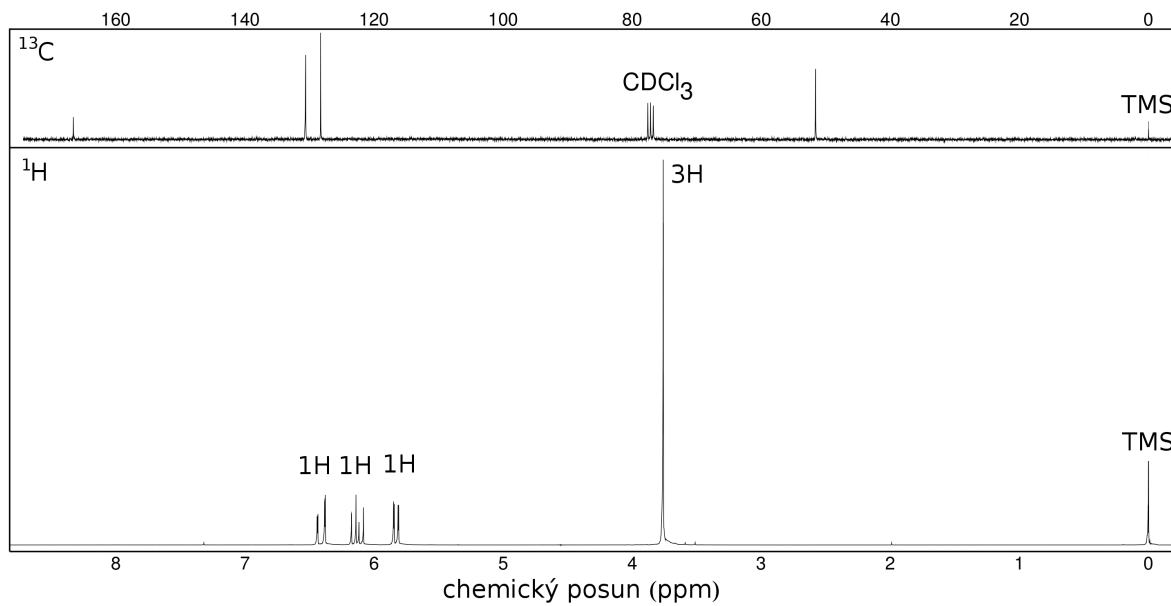
Měřeno v tetrachlormethanu.



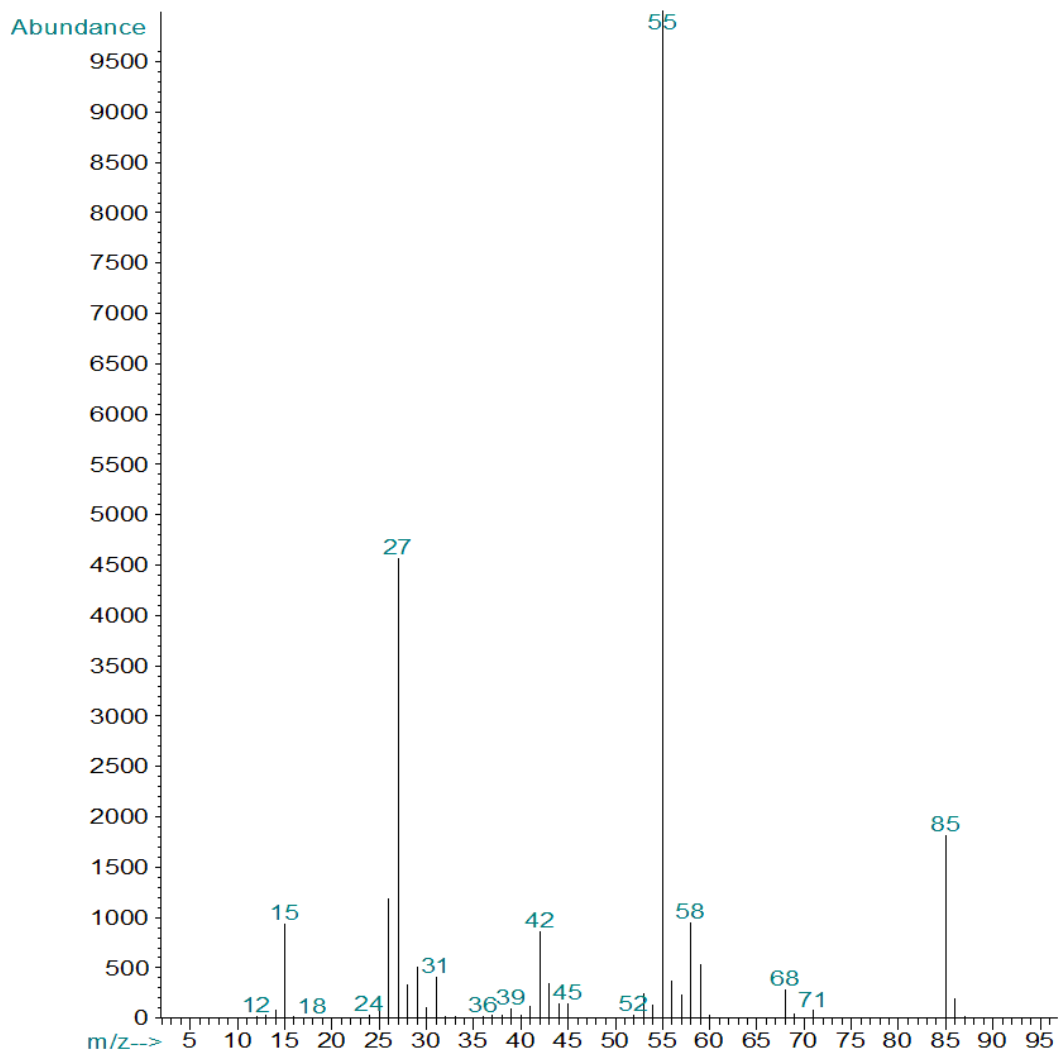
Řešení je na str. 72

Sloučenina M

NMR spektra

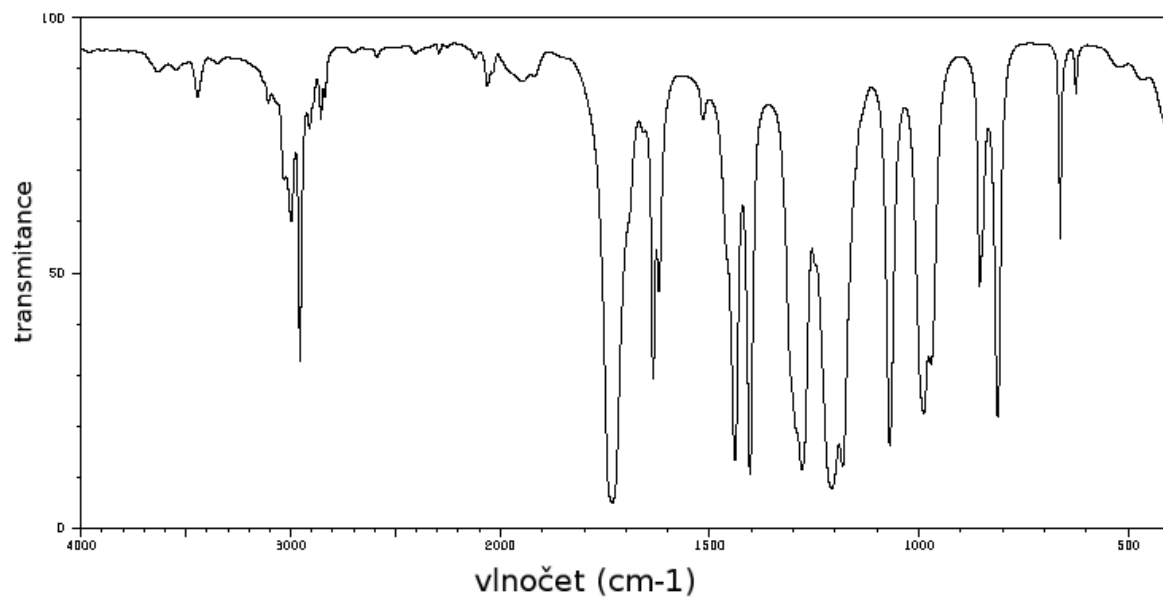


Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Infračervené spektrum

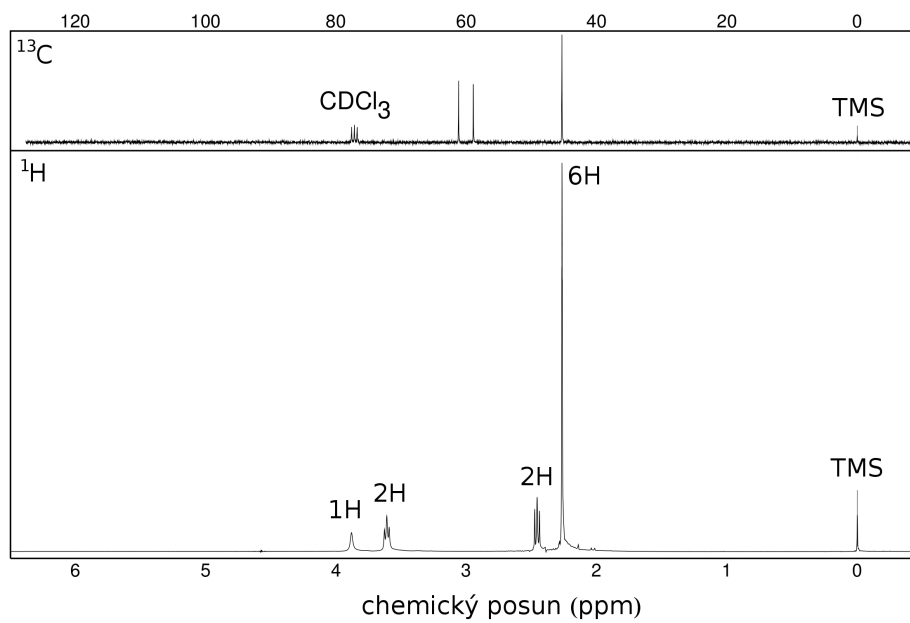
Měřeno v tabletě KBr.



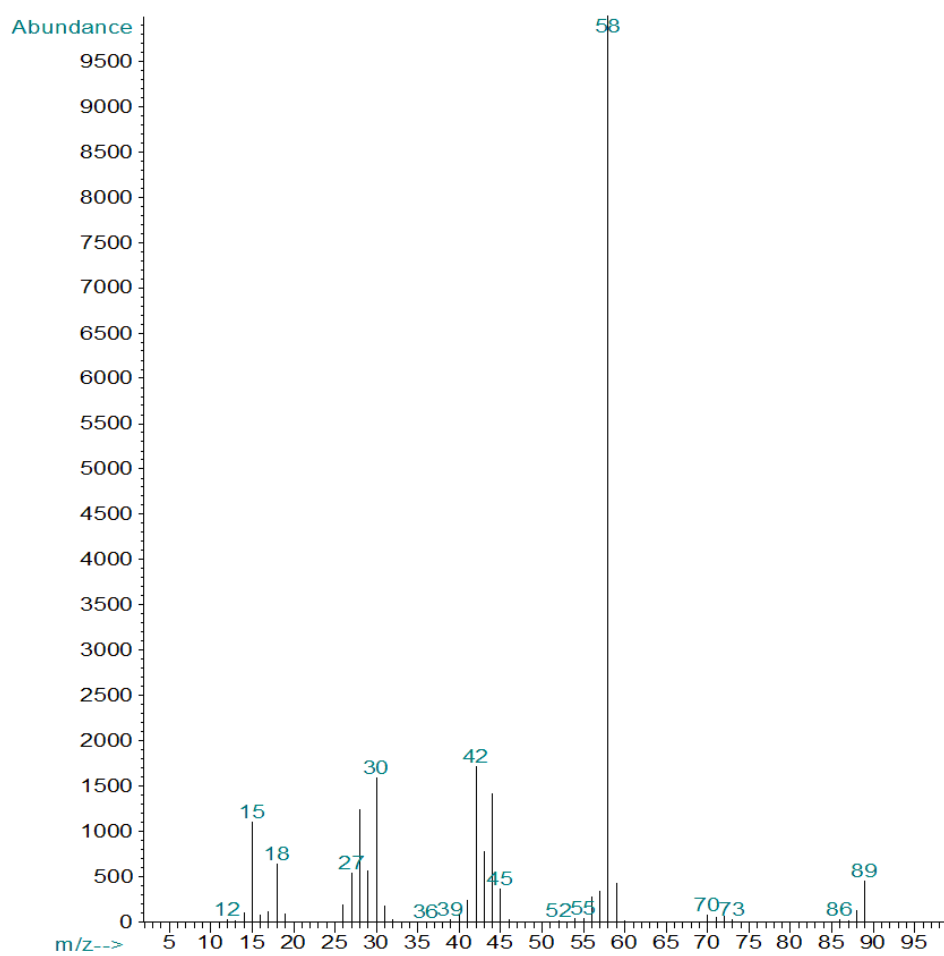
Řešení je na str. 73

Sloučenina N

NMR spektra



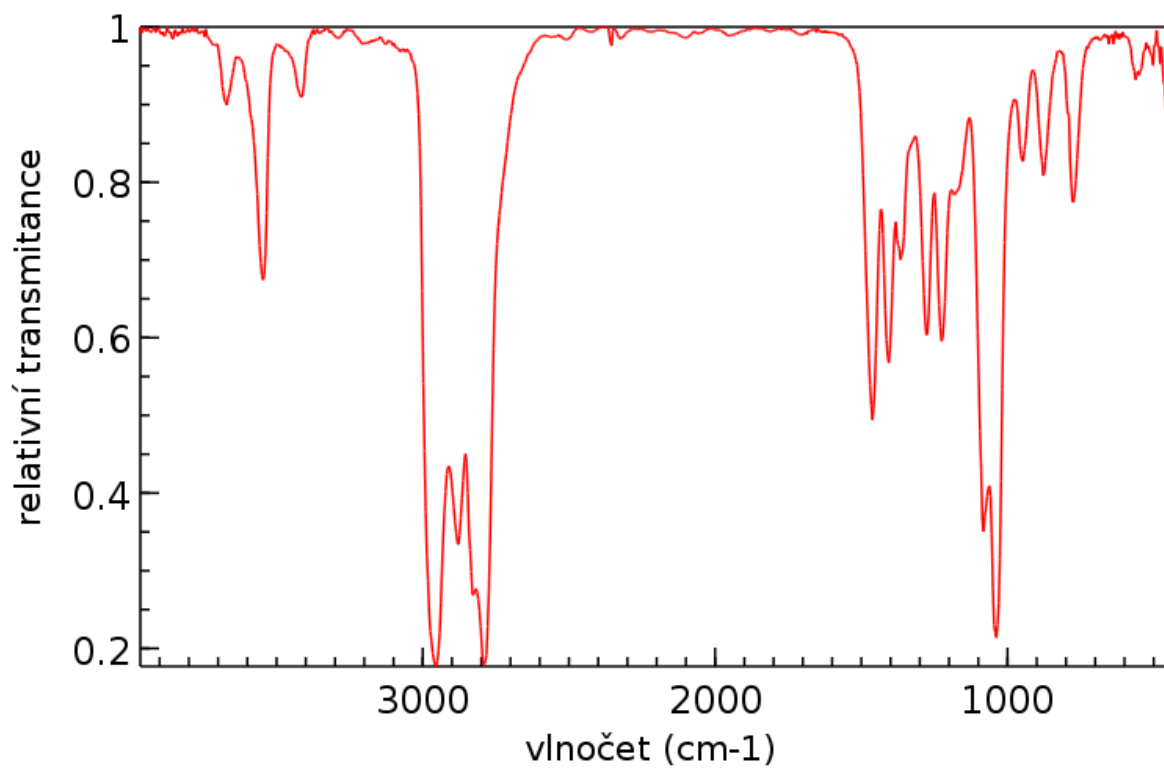
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
89	100,0 %
90	5,0 %

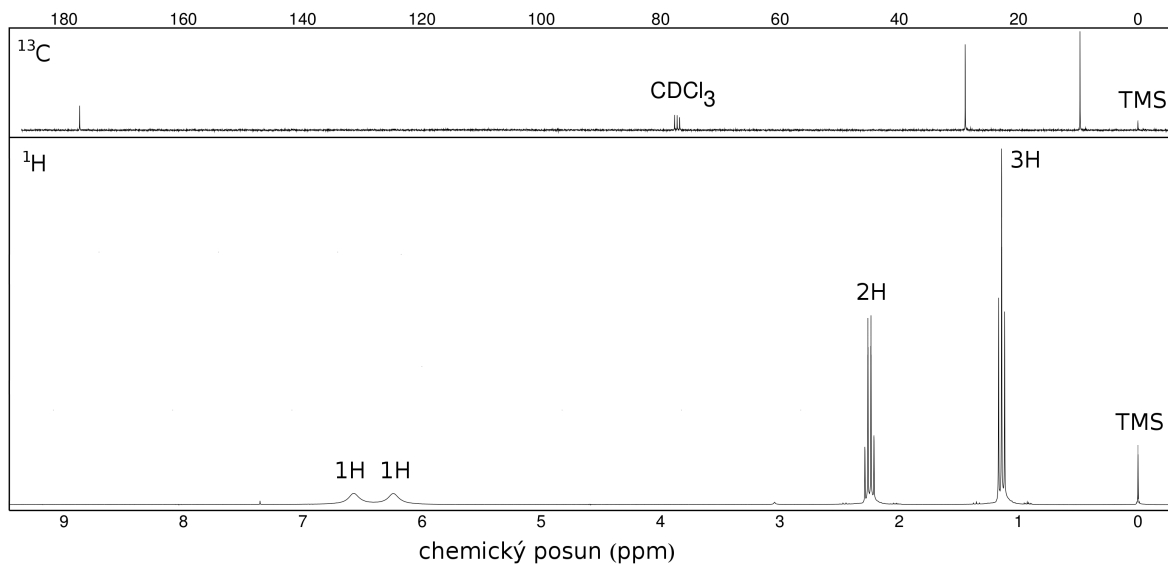
Infračervené spektrum



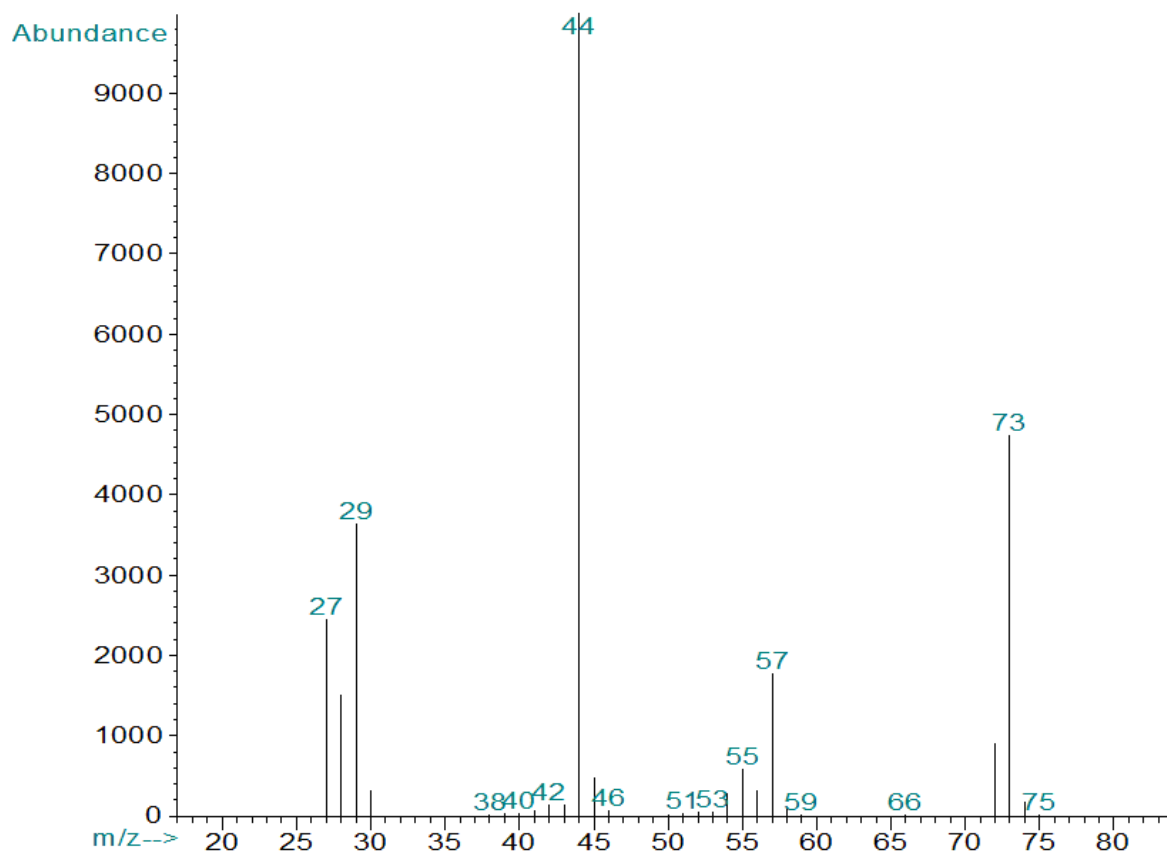
Řešení je na str. 74

Sloučenina O

NMR spektra



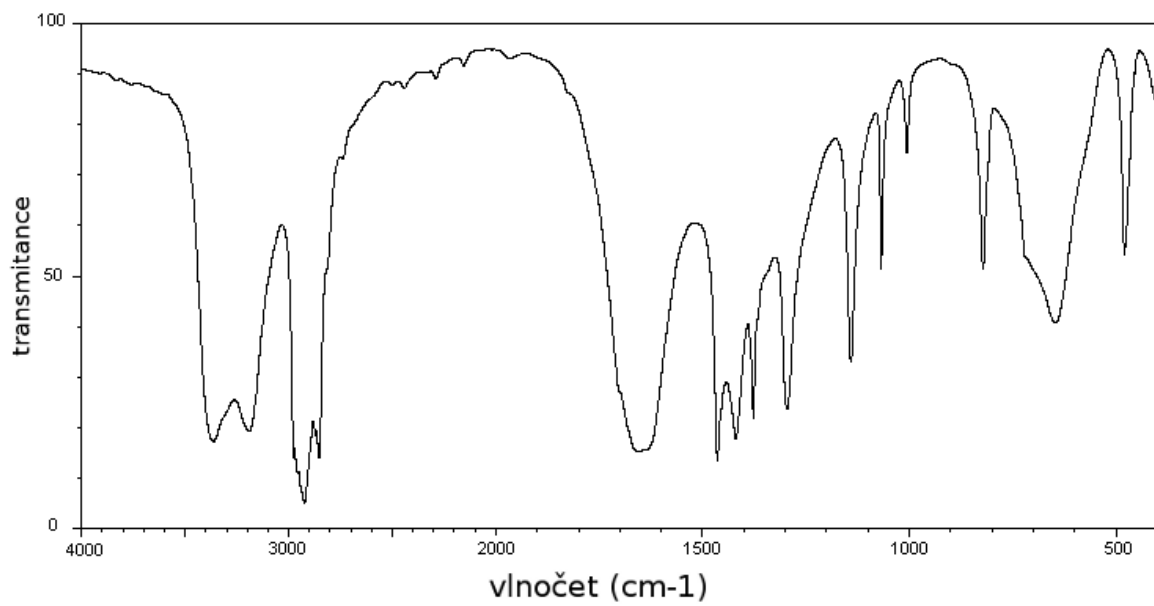
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
73	100,0 %
74	3,8 %

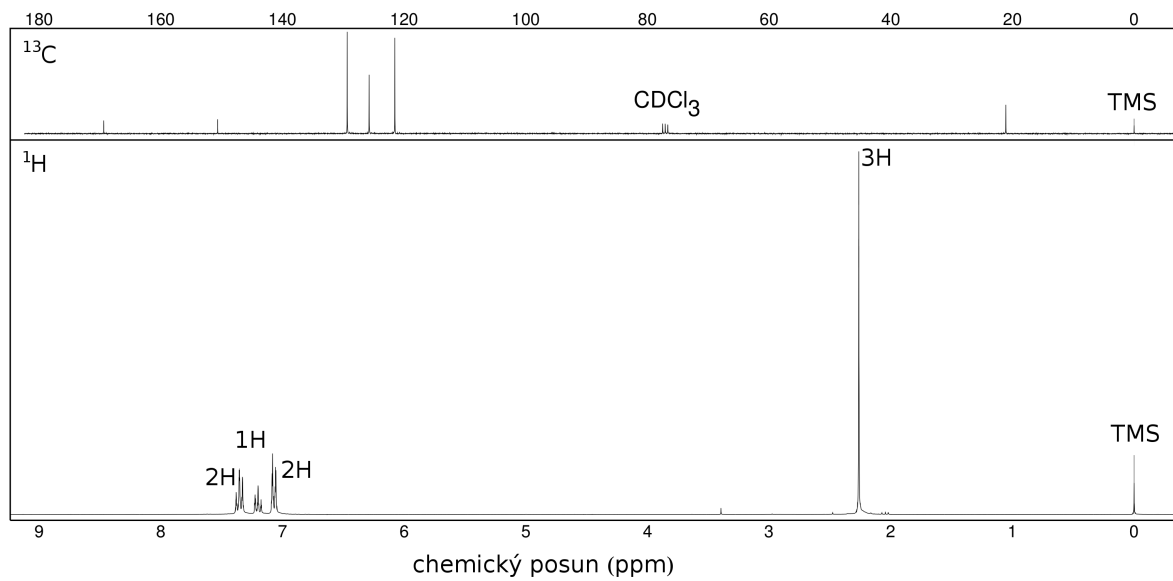
Infračervené spektrum



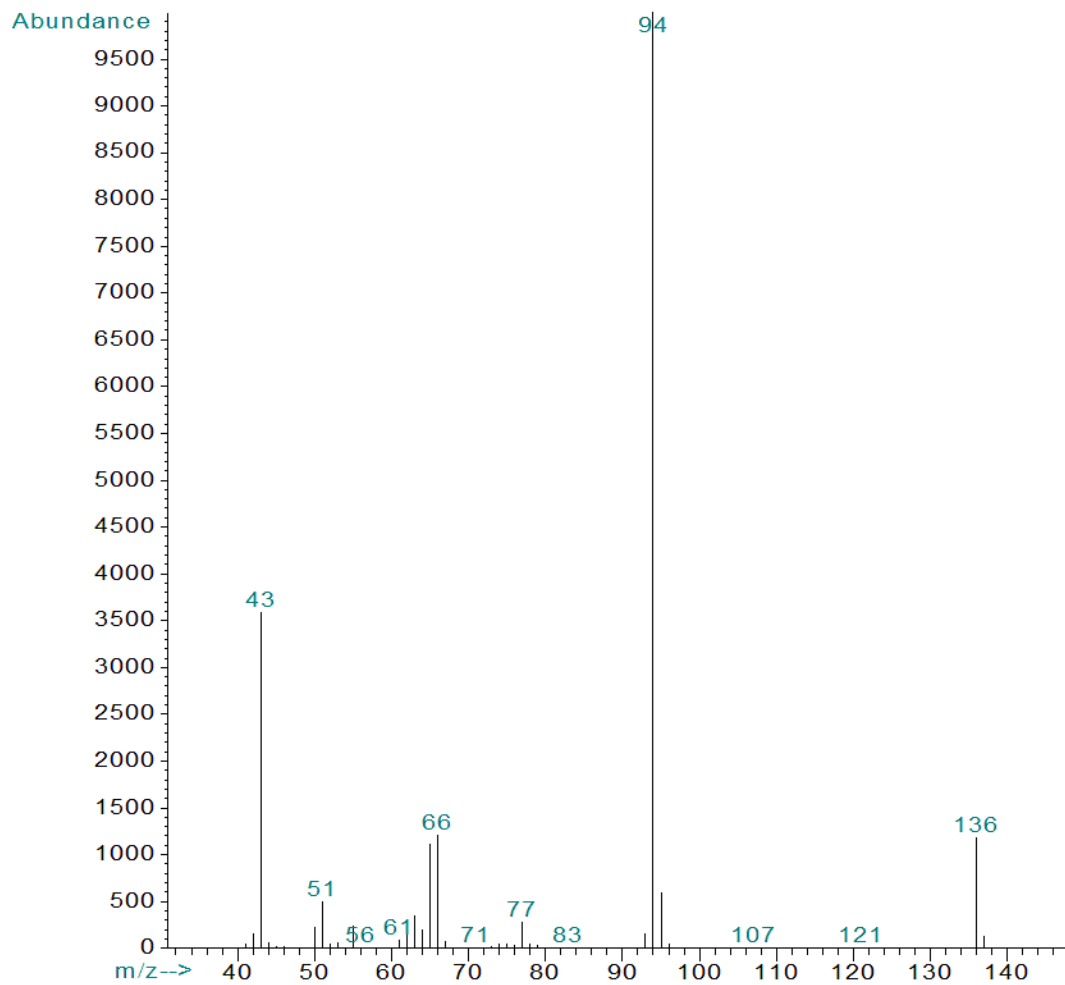
Řešení je na str. 75

Sloučenina P

NMR spektra



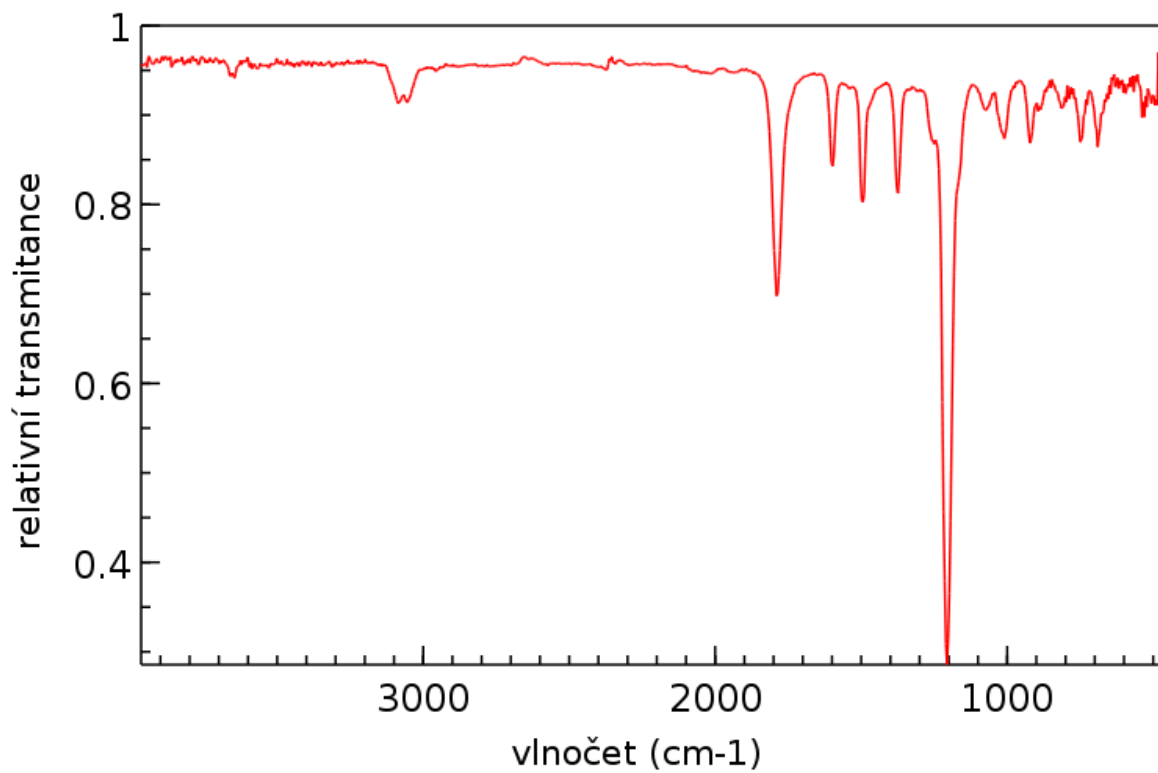
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
136	100,0 %
137	8,7 %
138	0,1 %

Infračervené spektrum

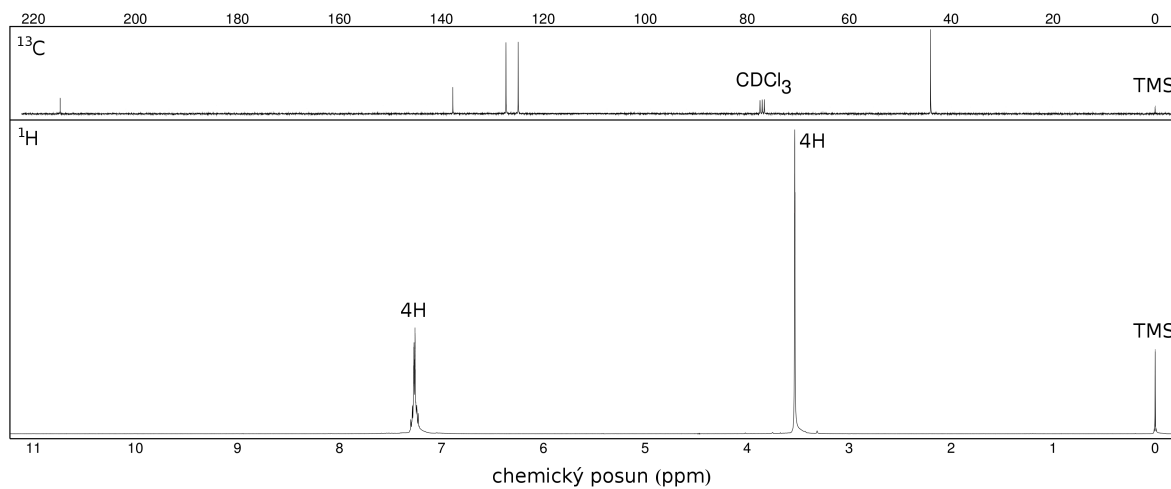


Řešení je na str. 76

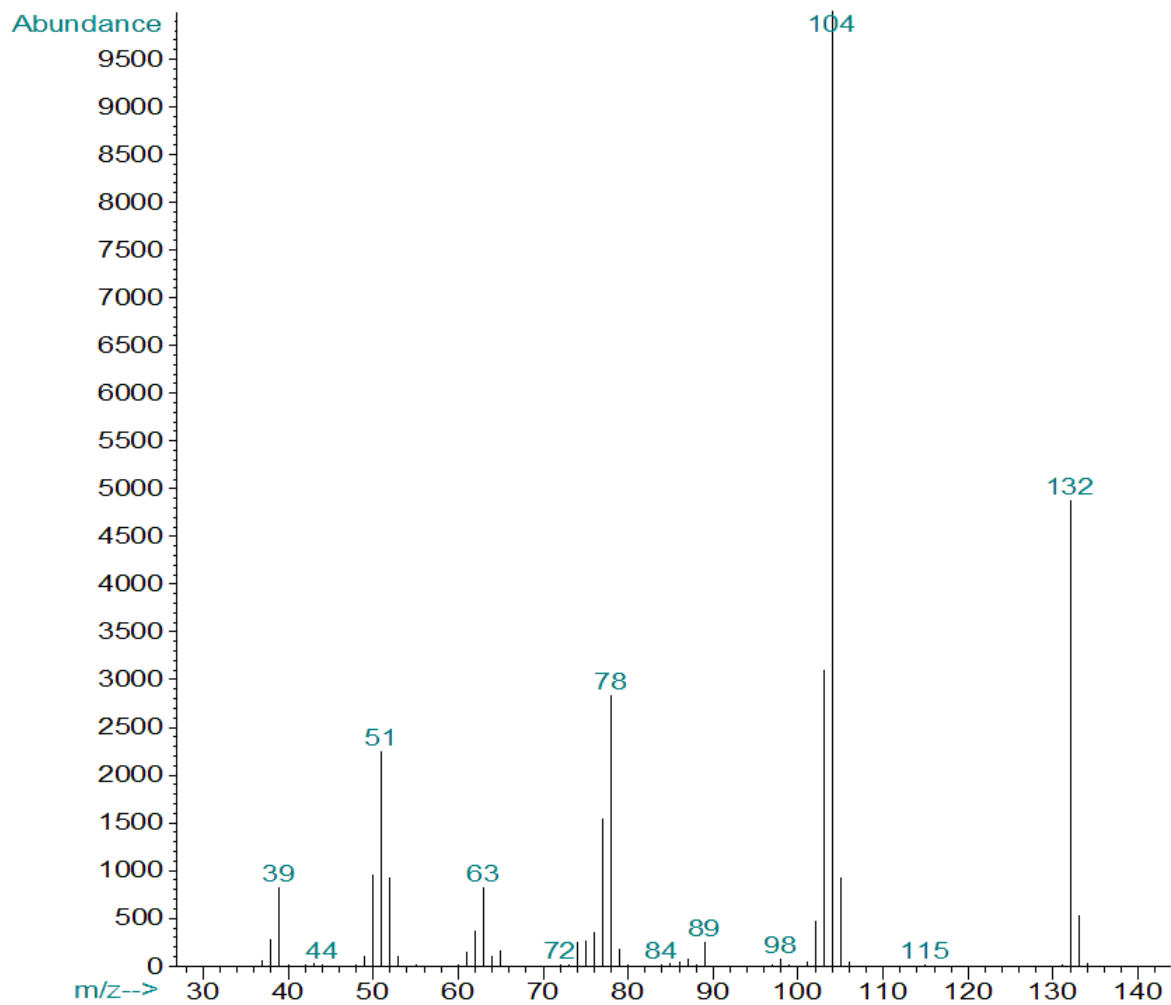
Sloučenina Q

Sloučeniny Q a R jsou konstitučními isomery.

NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)

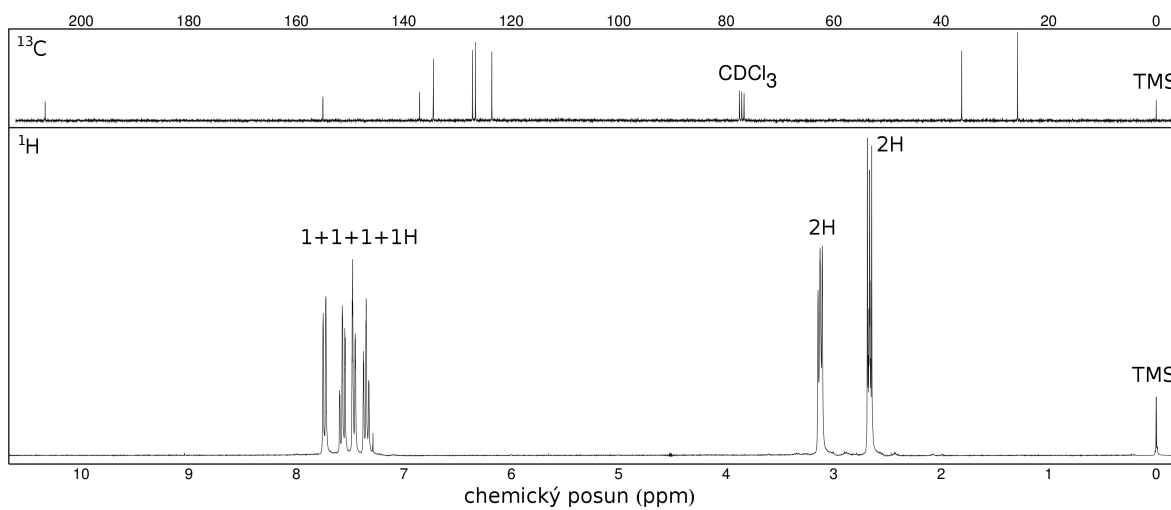


Řešení je na str. 77

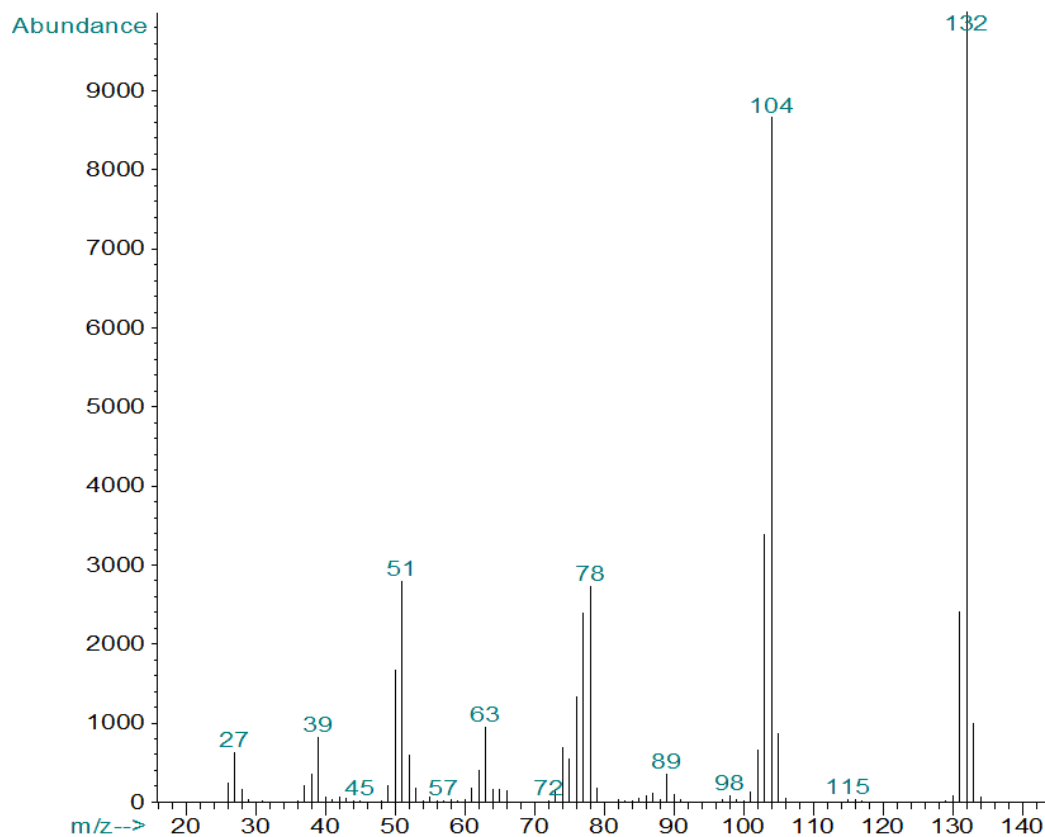
Sloučenina R

Sloučeniny **Q** a **R** jsou konstitučními isomery.

NMR spektra



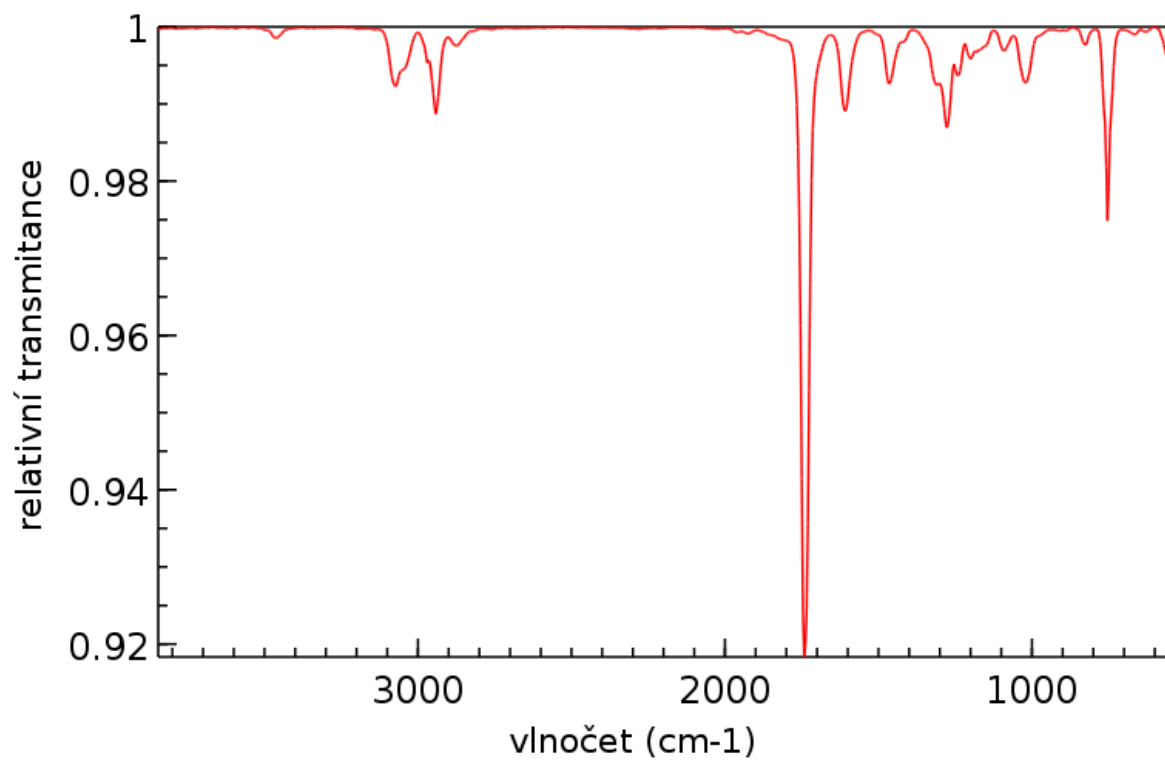
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
132	100,0 %
133	10,0 %
134	0,7 %

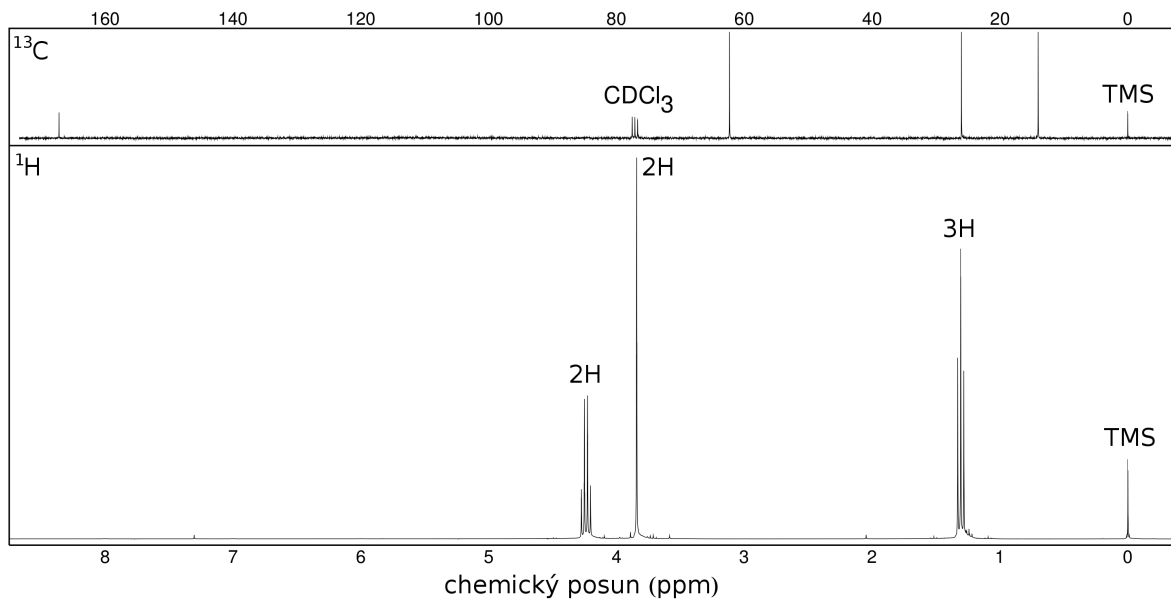
Infračervené spektrum



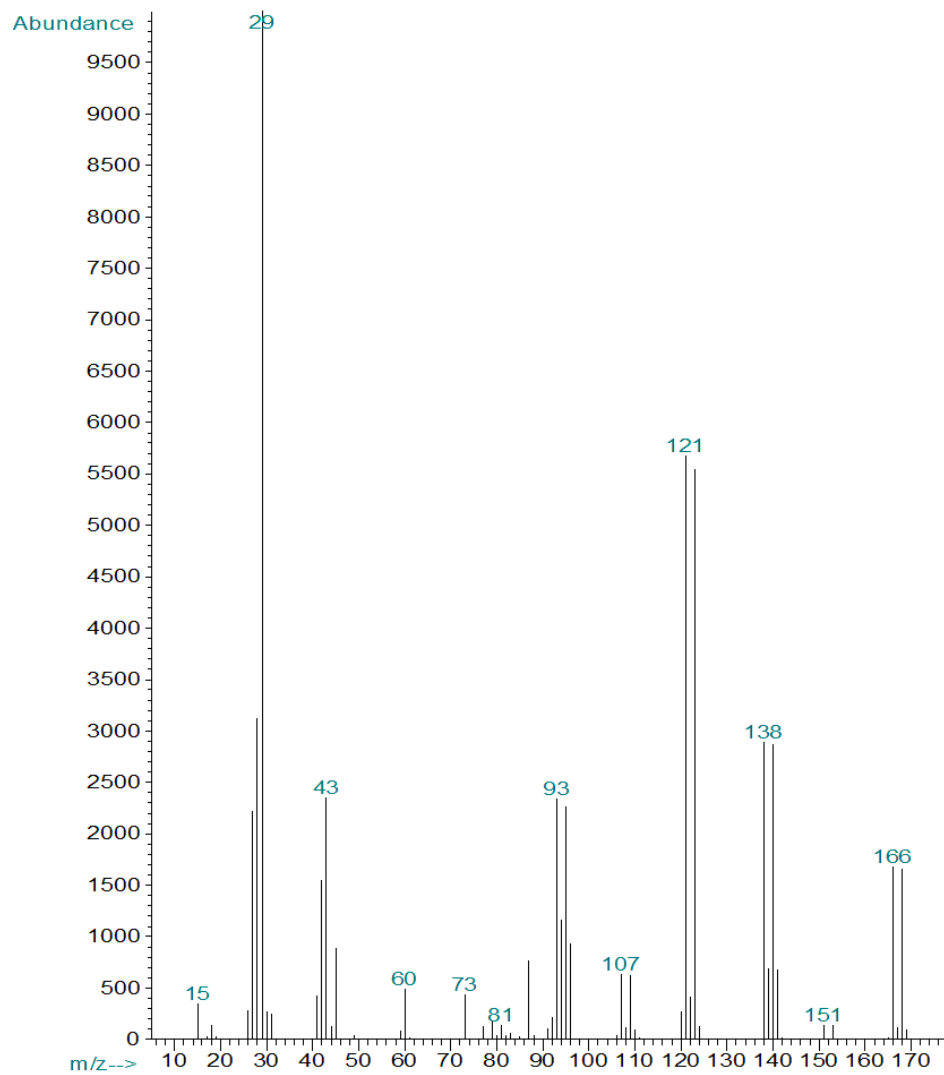
Řešení je na str. 78

Sloučenina S

NMR spektra



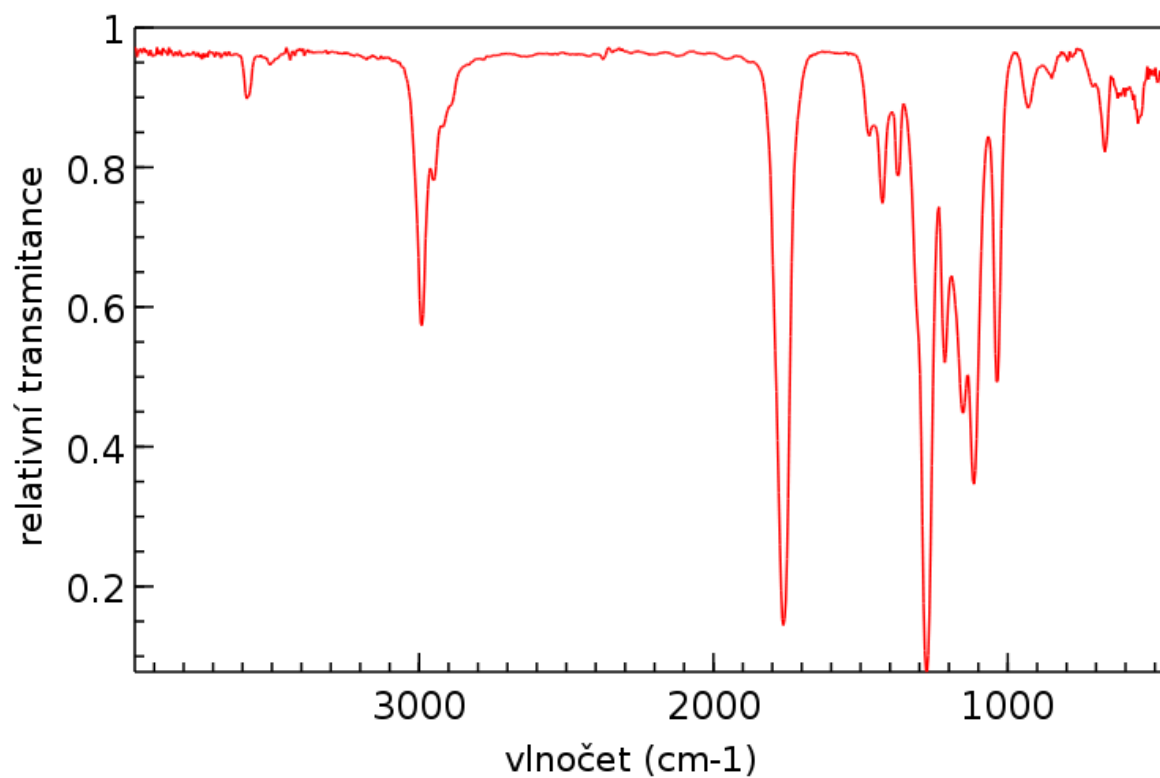
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
166	100,0 %
167	7,1 %
168	98,2 %
169	5,4 %

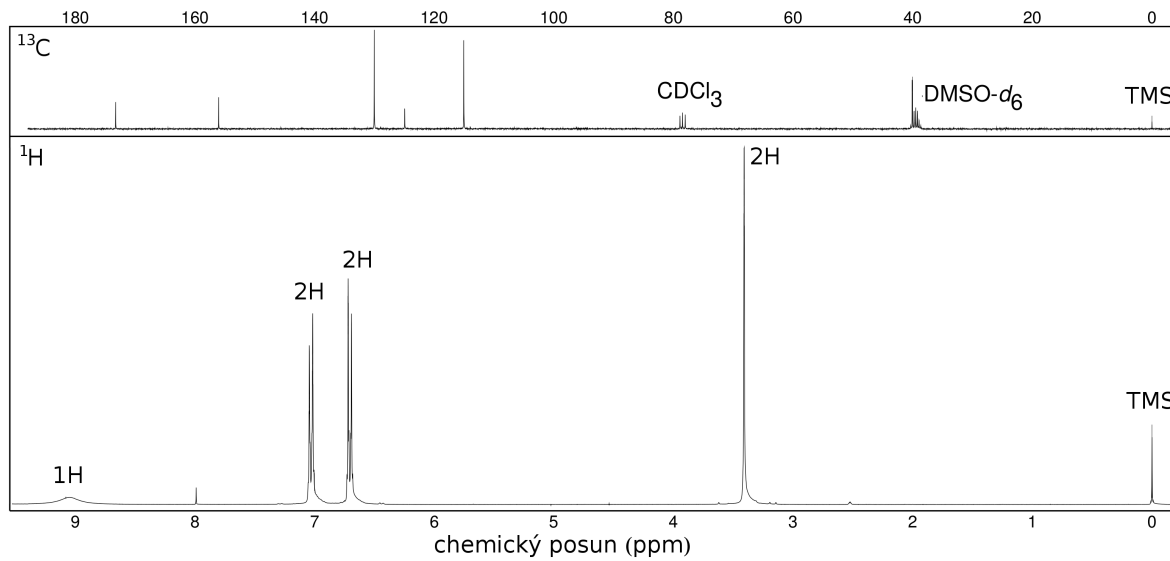
Infračervené spektrum



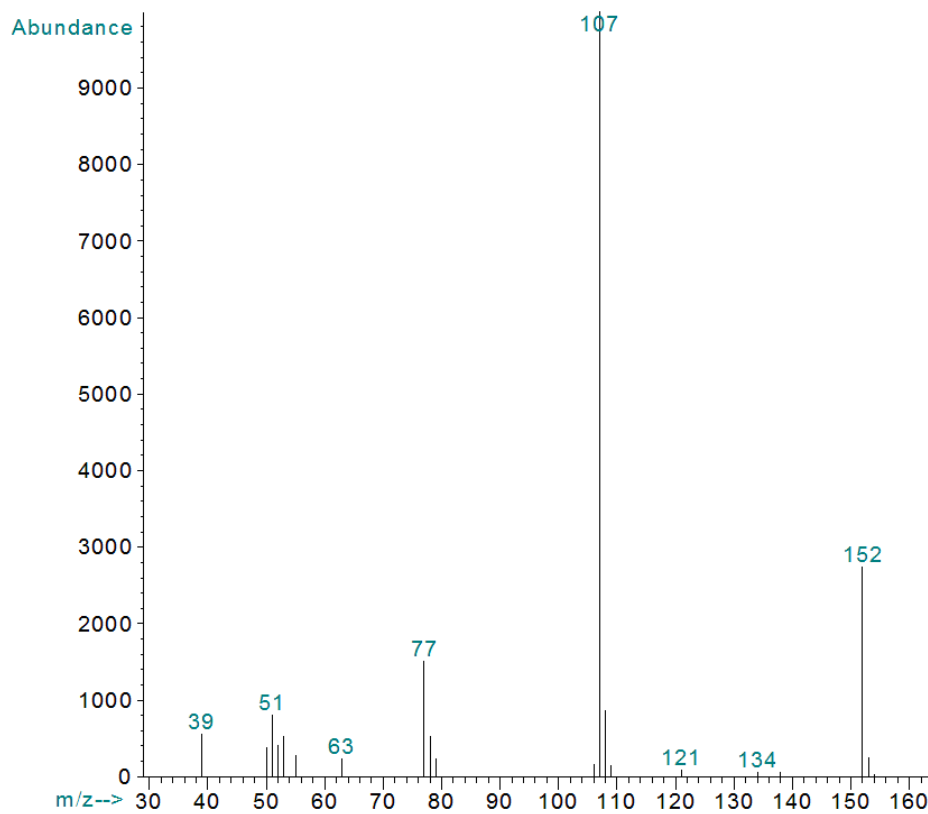
Řešení je na str. 79

Sloučenina T

NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)

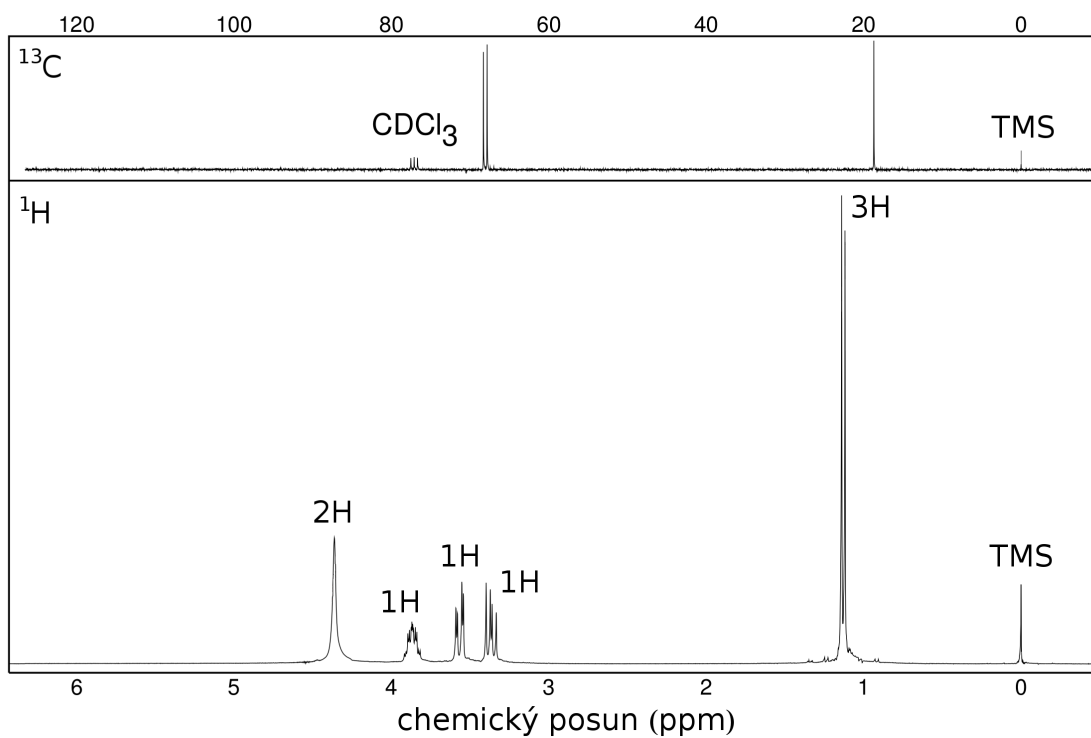


Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

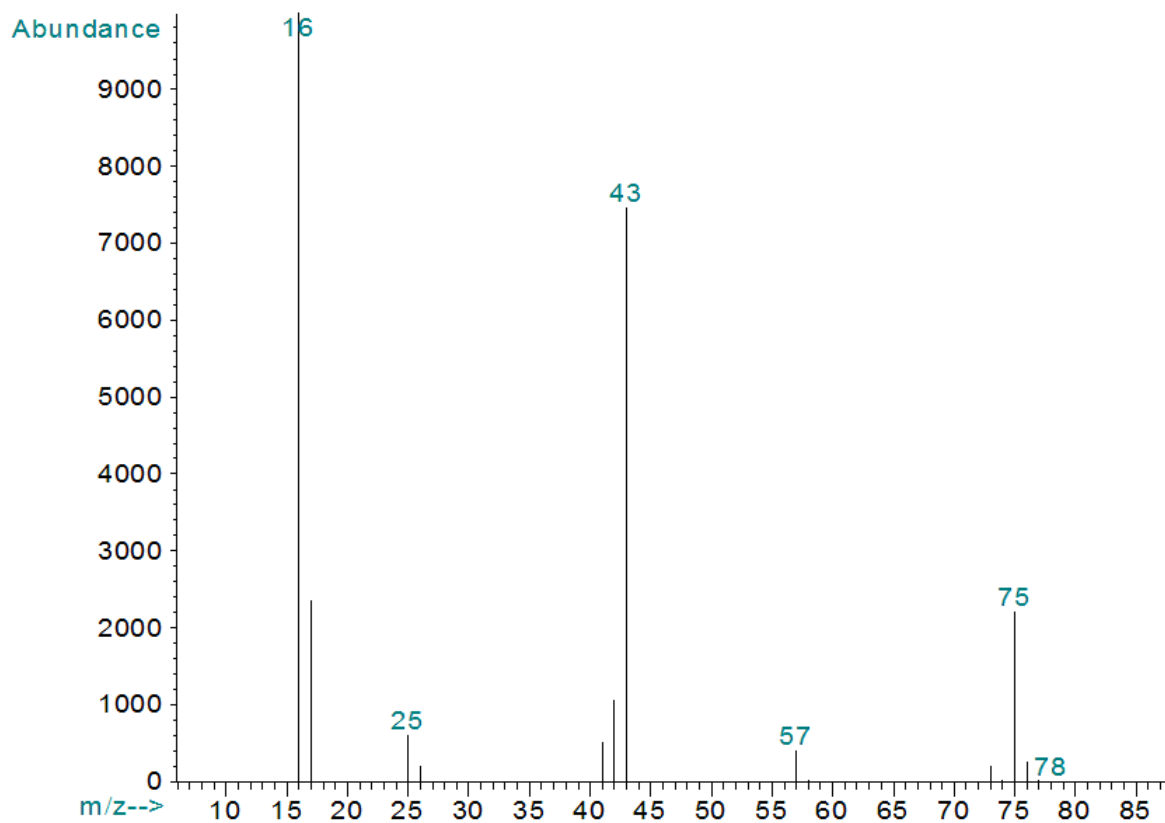
m/z	Intenzita
152	100,0 %
153	9,2 %

Řešení je na str. 80

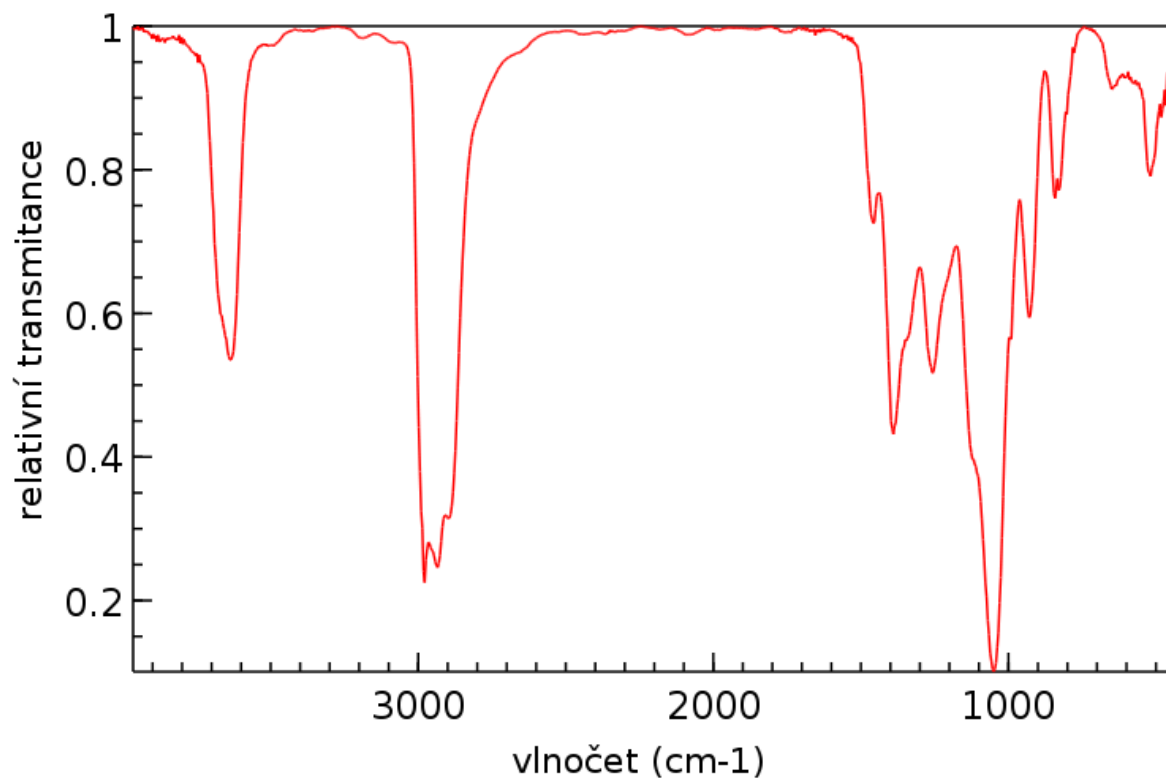
Sloučenina U
NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



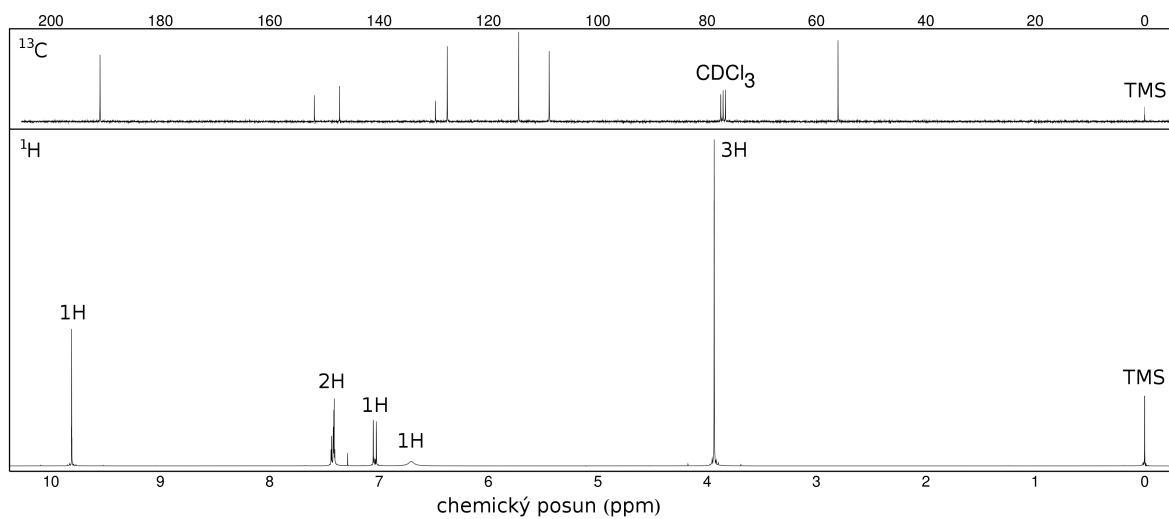
Infračervené spektrum



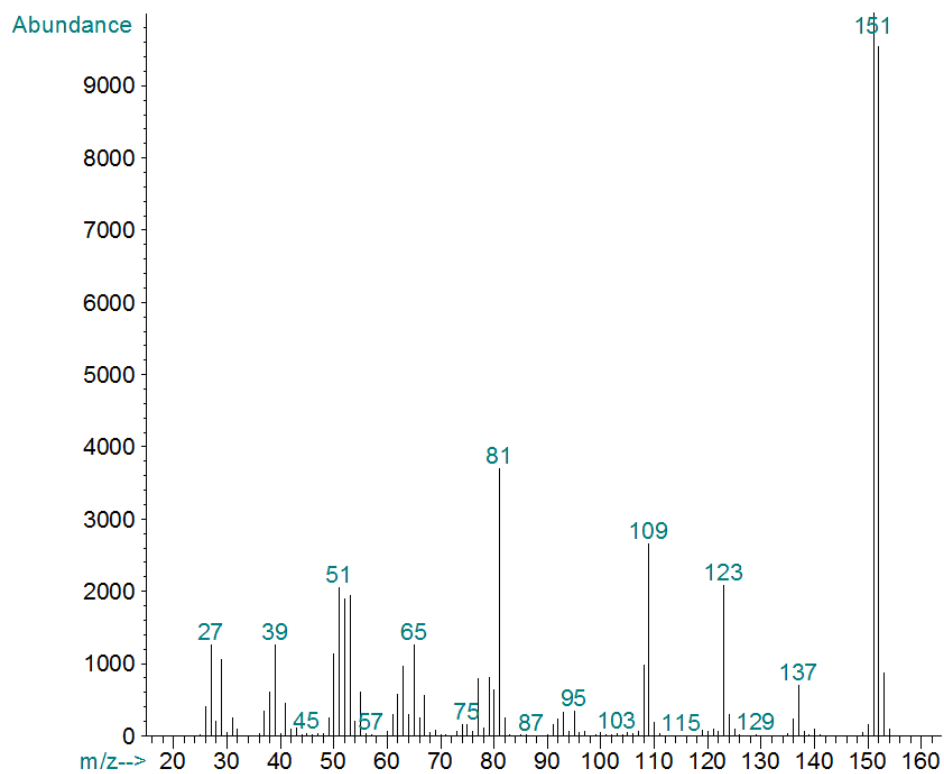
Řešení je na str. 81

Sloučenina V

NMR spektra



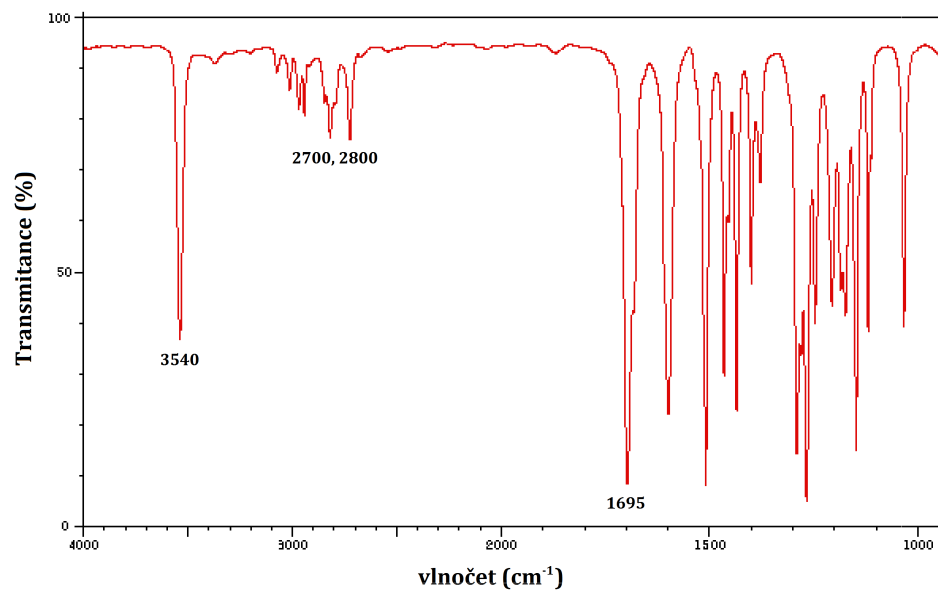
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
151	104,9 %
152	100,0 %
153	9,1 %
154	1,0 %

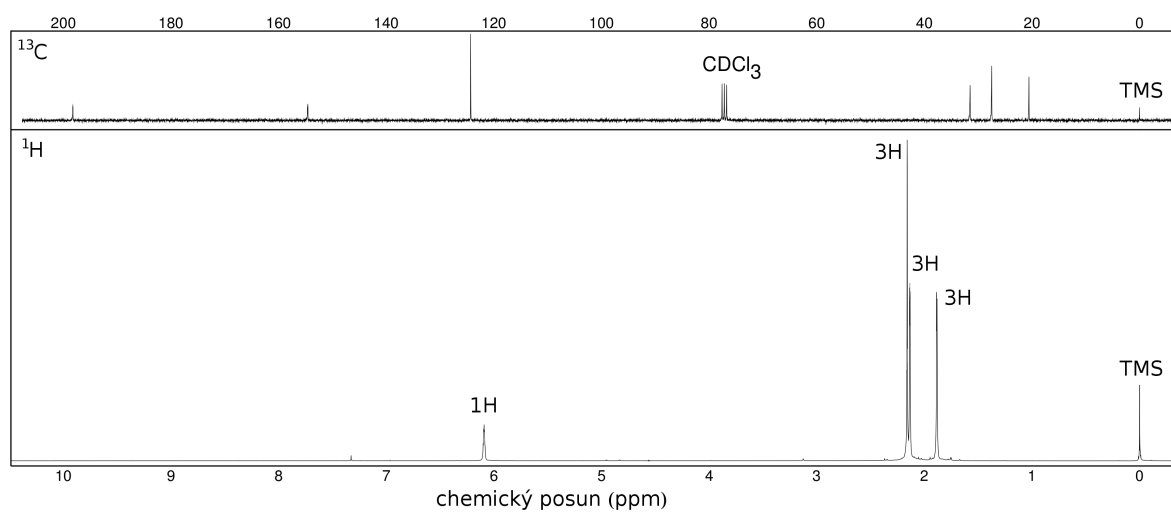
Infračervené spektrum



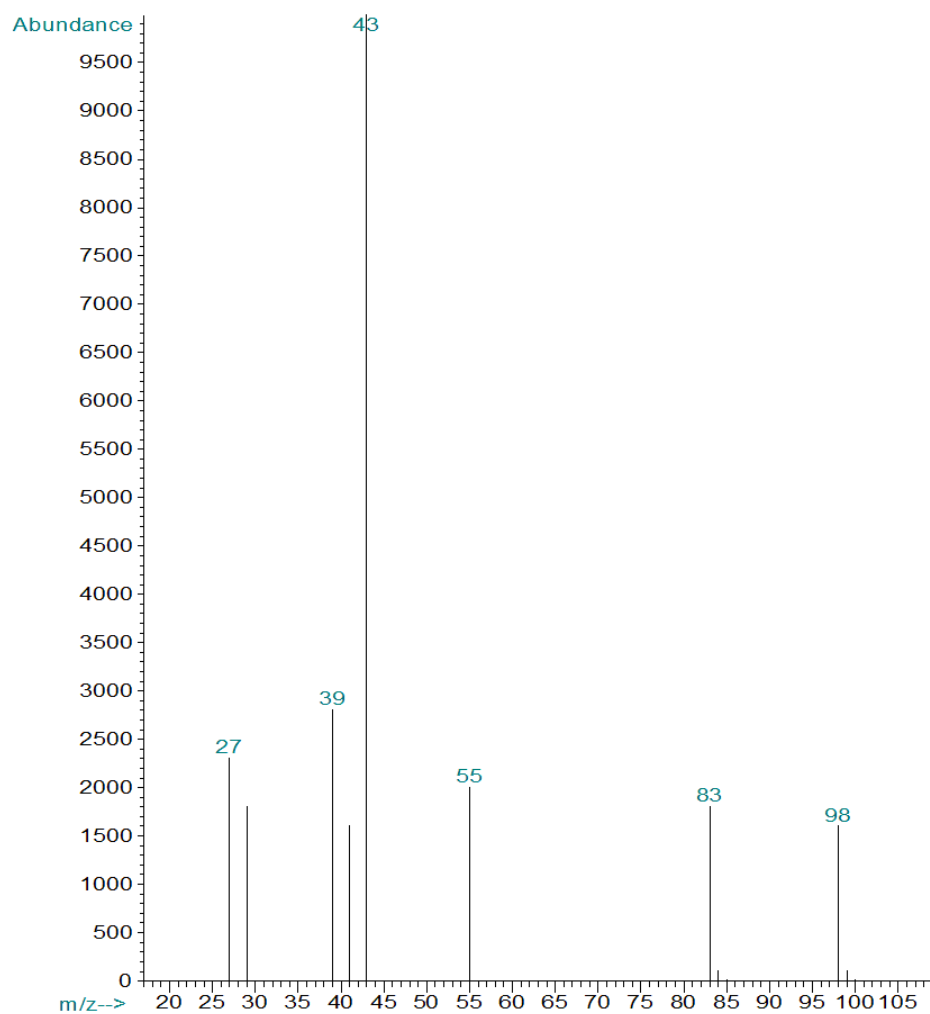
Řešení je na str. 82

Sloučenina W

NMR spektra



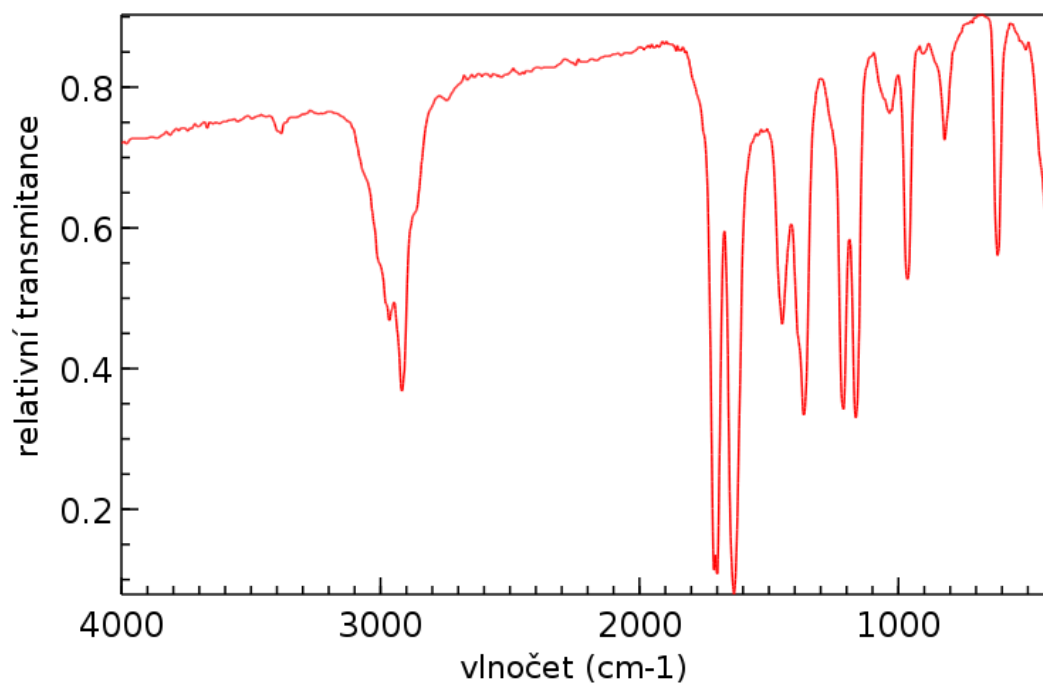
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
98	100,0 %
99	6,9 %

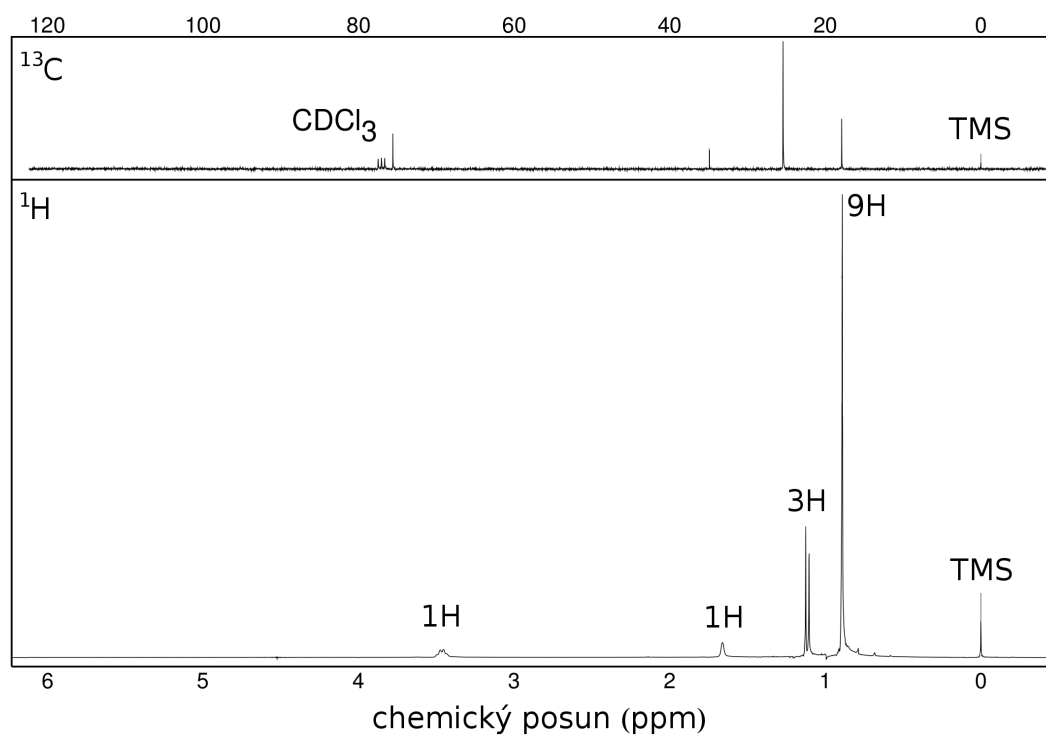
Infračervené spektrum



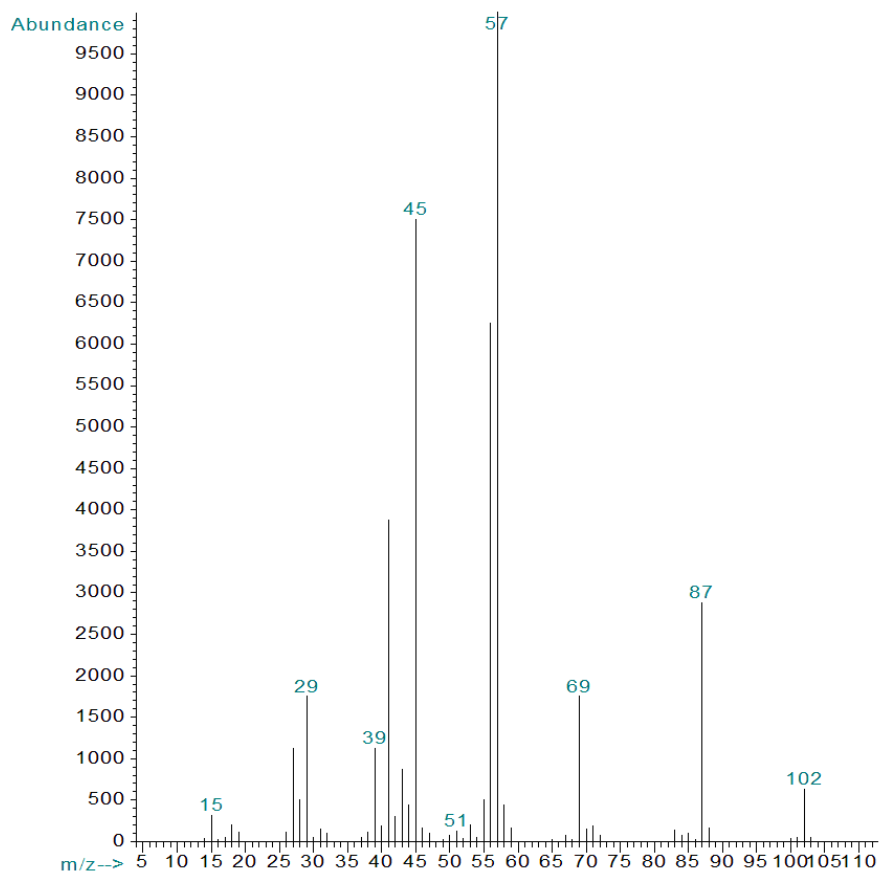
Řešení je na str. 83

Sloučenina X

NMR spektra



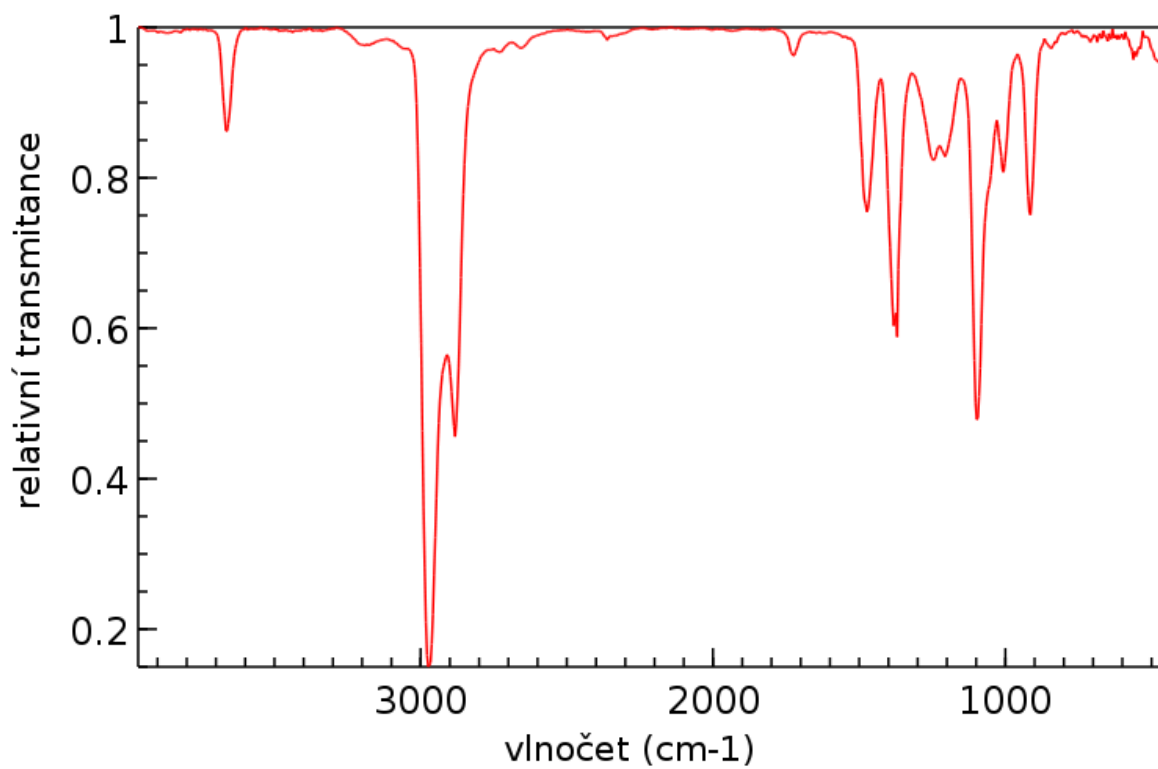
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
102	100,0 %
103	6,7 %

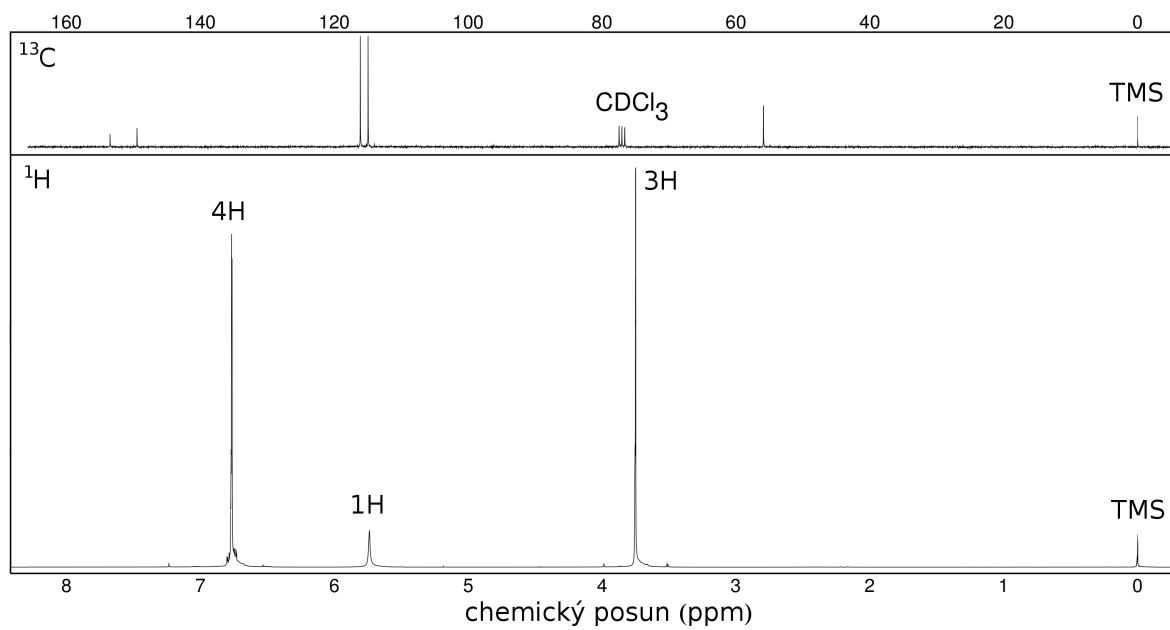
Infračervené spektrum



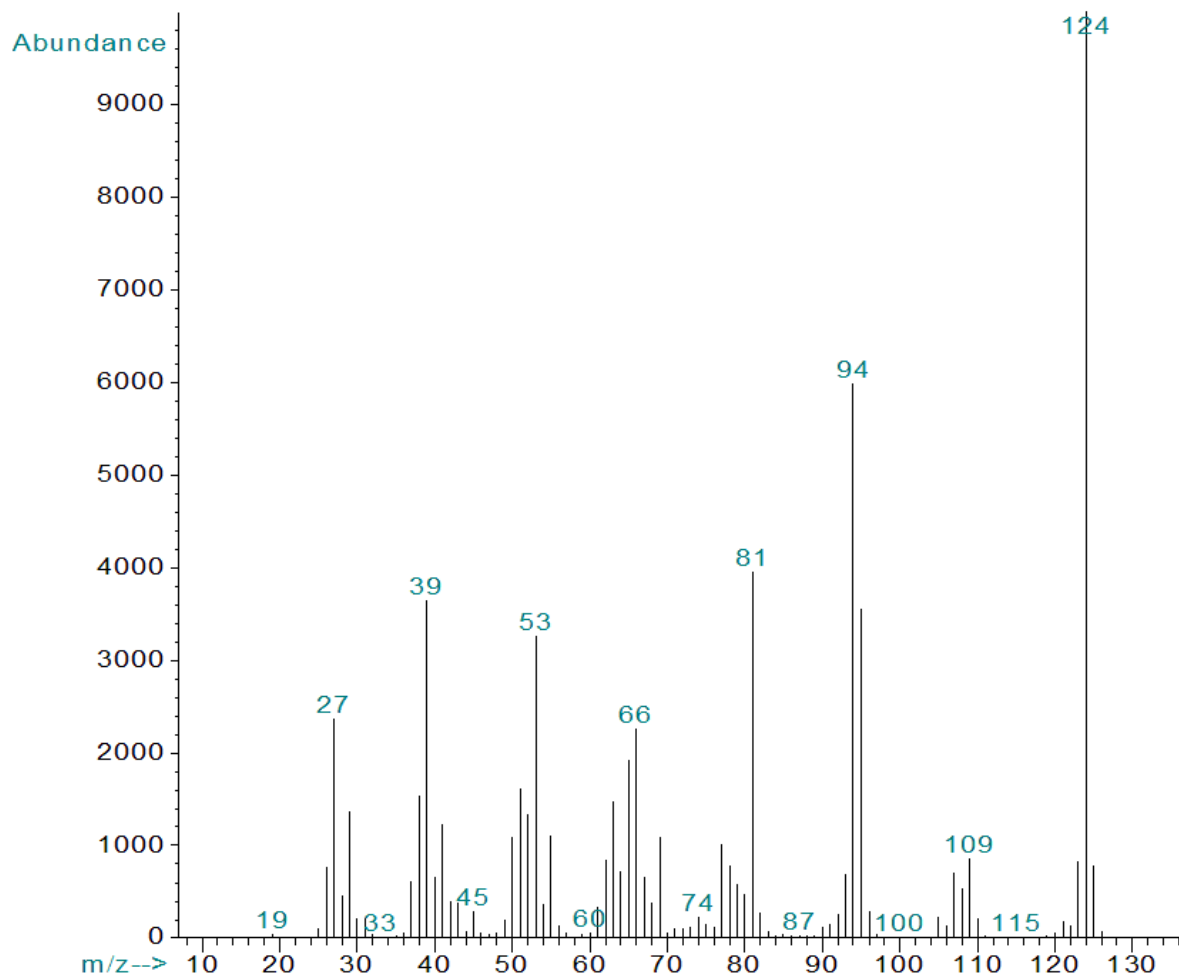
Řešení je na str. 84

Sloučenina Y

NMR spektra



Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)

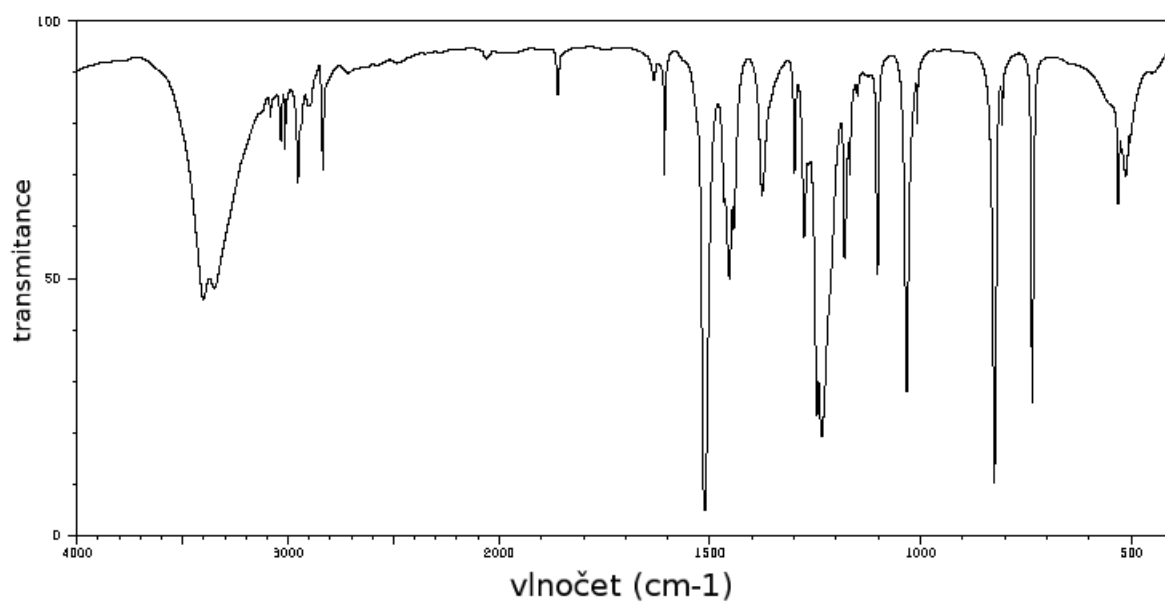


Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

<i>m/z</i>	Intenzita
124	100,0 %
125	7,7 %
126	0,7 %

Infračervené spektrum

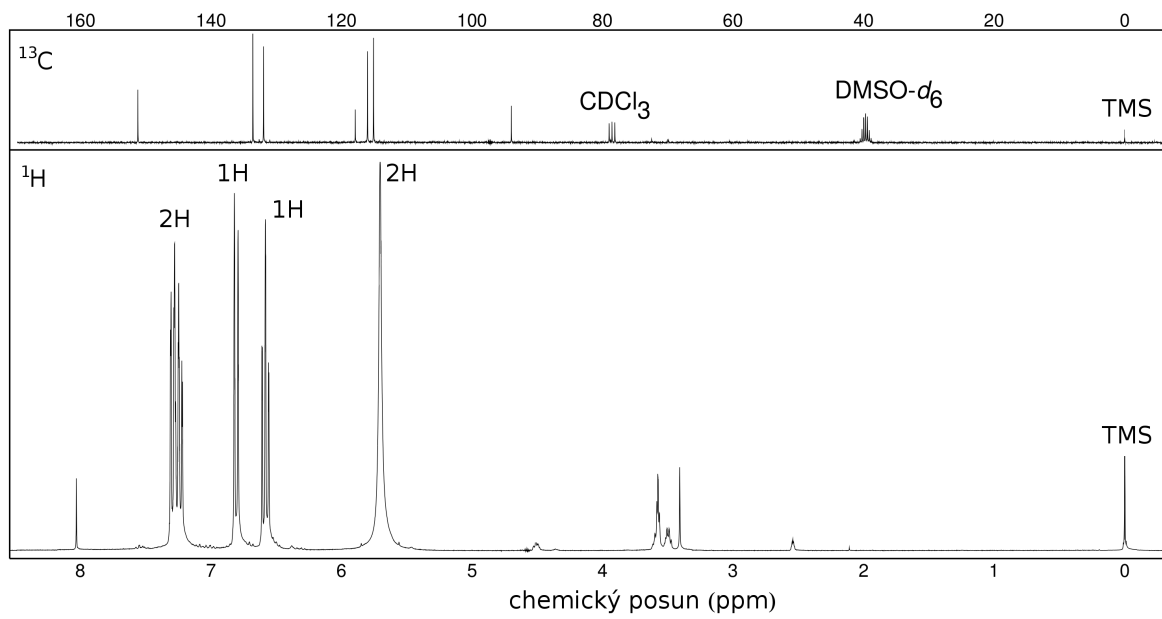
Měřeno v tabletě KBr.



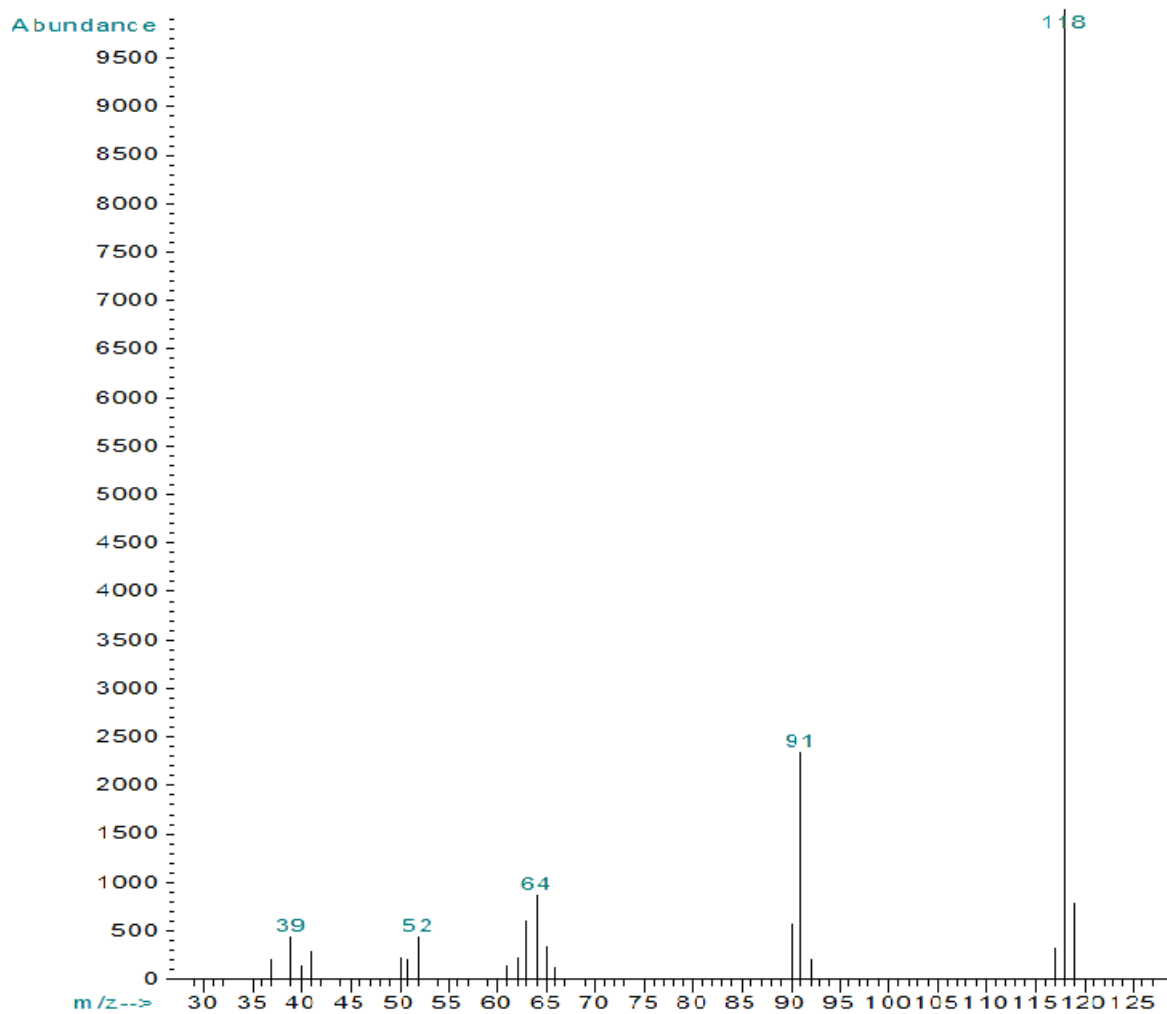
Řešení je na str. 85

Sloučenina Z

NMR spektra



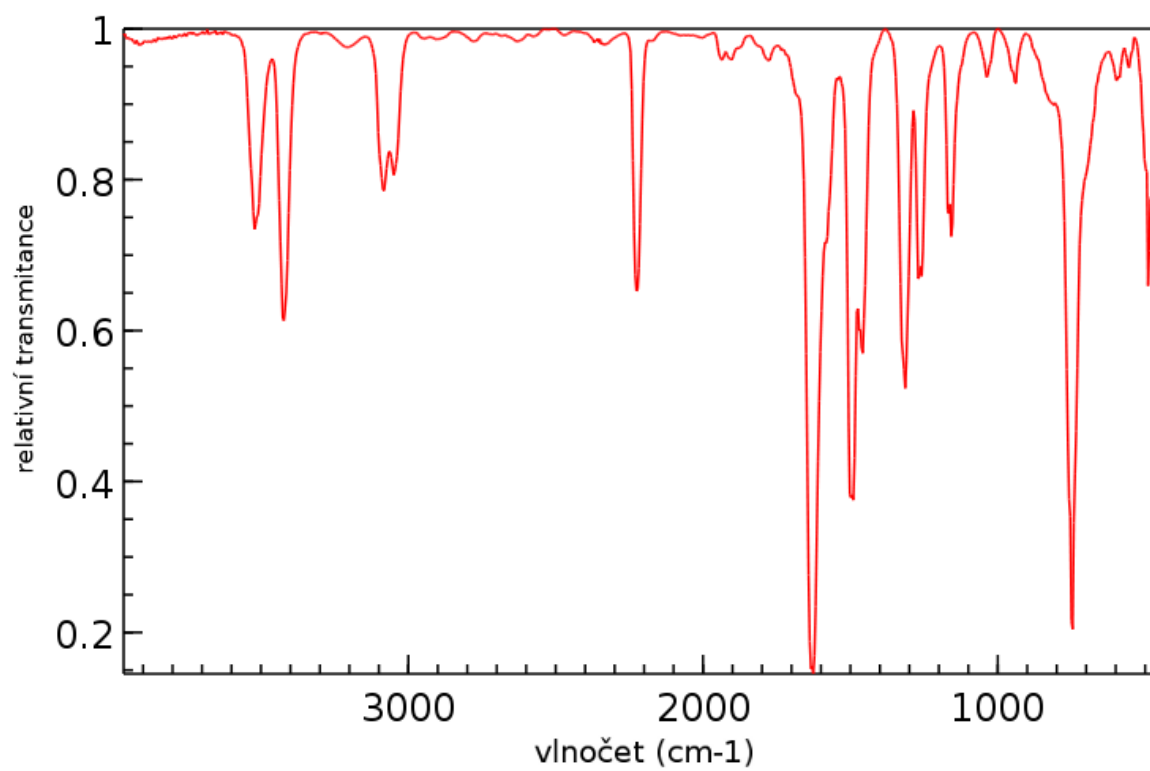
Hmotnostní spektrum (elektronová ionizace)



Intenzita iontů v oblasti molekulového iontu

m/z	Intenzita
118	100,0 %
119	9,0 %

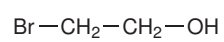
Infračervené spektrum



Řešení je na str. 86

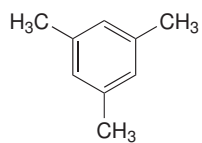
Řešení

1. Sloučenina A



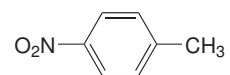
(Zpět na stranu 11)

2. Sloučenina B



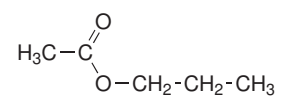
(Zpět na stranu 13)

3. Sloučenina C



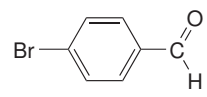
(Zpět na stranu 15)

4. Sloučenina D



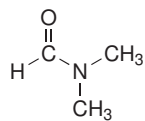
(Zpět na stranu 17)

5. Sloučenina E



(Zpět na stranu 19)

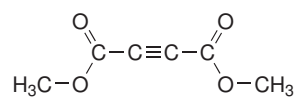
6. Sloučenina F



Rotace kolem vazby C–N v amidu je za laboratorní teploty značně omezená, proto jsou methylové skupiny v *N,N*-dimethylformamidu chemicky neekvivalentní.

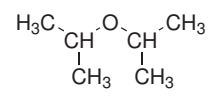
(Zpět na stranu 21)

7. Sloučenina G



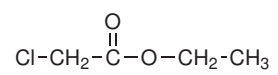
(Zpět na stranu 23)

8. Sloučenina H



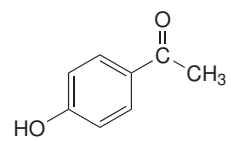
(Zpět na stranu 25)

9. Sloučenina I



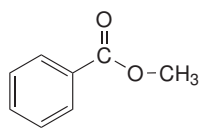
(Zpět na stranu 27)

10. Sloučenina J



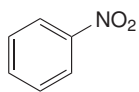
(Zpět na stranu 29)

11. Sloučenina K



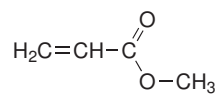
(Zpět na stranu 31)

12. Sloučenina L

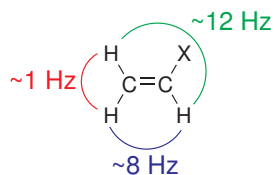


(Zpět na stranu 33)

13. Sloučenina M

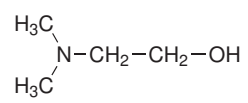


Atomy vodíku vázané k atomům uhlíku dvojně vazby jsou chemicky neekvivalentní. Velikost konstanty spin-spinové skalární interakce mezi vodíky závisí na jejich vzájemné orientaci. Typické hodnoty pro systém, který je rovněž obsažen v kyselině akrylové, jsou:



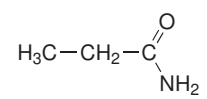
(Zpět na stranu 35)

14. Sloučenina N



(Zpět na stranu 37)

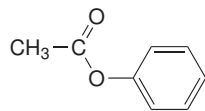
15. Sloučenina O



Vodíky -NH₂ skupiny jsou chemicky neekvivalentní (viz sloučenina F).

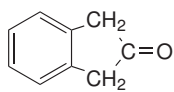
(Zpět na stranu 39)

16. Sloučenina P



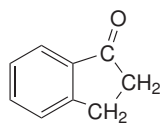
(Zpět na stranu 41)

17. Sloučenina Q



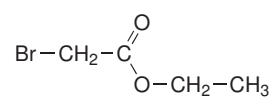
(Zpět na stranu 43)

18. Sloučenina R



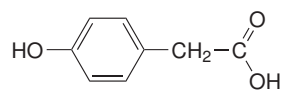
(Zpět na stranu 44)

19. Sloučenina S



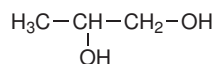
(Zpět na stranu 46)

20. Sloučenina T

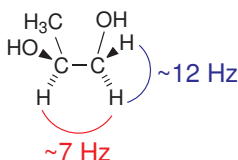


(Zpět na stranu 48)

21. Sloučenina U

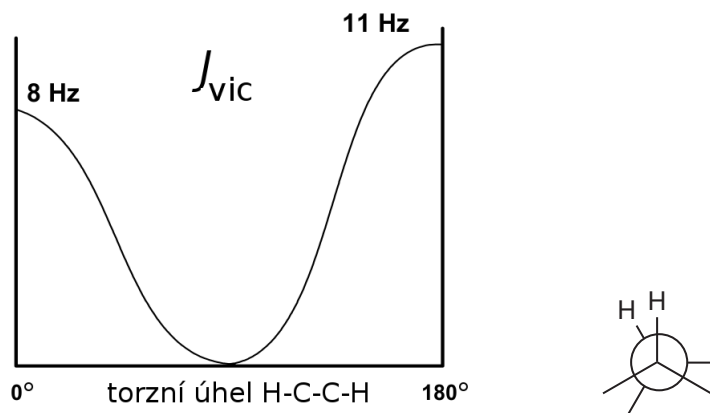


Propylenglykol je chirální sloučenina, proto také atomy vodíku v CH₂ skupině jsou chemicky neekvivalentní, přesněji řečeno, jde o dvojici diatereotopických vodíků (náhrada jednoho nebo druhého z nich vede ke vzniku dvojice diastereomerů).



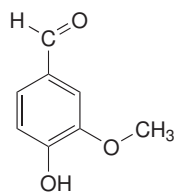
Tyto atomy vodíku vzájemně interagují spin-spinovou skalární interakcí (přenášenou přes dvě vazby), velikost interakční konstanty pro geminální atomu vodíku se pohybuje kolem 12 Hz. Velikost interakční konstanty pro atomy vodíku na sousedních atomech uhlíku (vicinální interakce) závisí na torzním úhlu (vzájemné orientaci atomů), v tomto případě se pohybuje kolem 7 Hz.

Závislost J na torzním úhlu popisuje tzv. Karplusova rovnice. Pro geminální interakci dvou atomů vodíku:



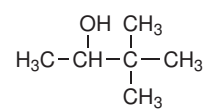
(Zpět na stranu 49)

22. Sloučenina V



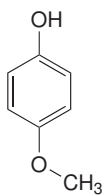
(Zpět na stranu 51)

24. Sloučenina X



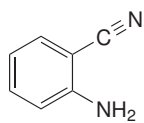
(Zpět na stranu 55)

25. Sloučenina Y



(Zpět na stranu 57)

26. Sloučenina Z



(Zpět na stranu 59)