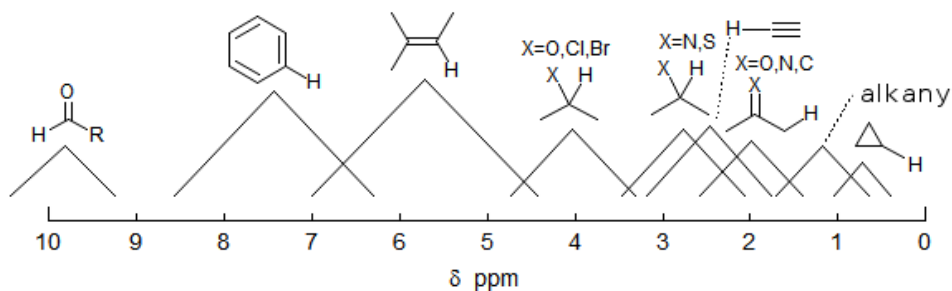


## Nukleární magnetická rezonance (NMR)



### Charakteristické chemické posuny atomu vodíku $^1\text{H}$

Typ atomu vodíku	Chemický posun / ppm
Cyklopropan	0,2
Primární	$\text{RCH}_3$ 0,9
Sekundární	$\text{R}_2\text{CH}_2$ 1,3
Terciární	$\text{R}_3\text{CH}$ 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	$\text{RCHO}$ 9–10
Hydroxylové skupiny	$\text{ROH}$ 1,0–5,5
Fenolické skupiny	$\text{ArOH}$ 4–12
Hydroxy skupina enolu	$\text{C}=\text{C}-\text{OH}$ 15–17
Karboxylové kyseliny	$\text{RCOOH}$ 10,5–12,0
Aminy	$\text{RNH}_2$ 1–5

## Charakteristické chemické posuny atomu vodíku $^{13}\text{C}$

Typ atomu vodíku	Chemický posun / ppm
$\text{RCH}_3$	0–35
$\text{R}_2\text{CH}_2$	15–40
$\text{R}_3\text{CH}$	25–50
$\text{R}_4\text{C}$	30–40
$\text{RC}\equiv\text{CR}$	65–90
$\text{R}_2\text{C}=\text{CR}_2$	100–150
Aromatický CR	110–175
$\text{RCH}_2\text{Br}$	20–40
$\text{RCH}_2\text{Cl}$	25–50
$\text{RCH}_2\text{NH}_2$	35–50
$\text{RCH}_2\text{OH}$	50–65
$\text{RCH}_2\text{OR}$	50–65
$\text{RC}\equiv\text{N}$	110–125
$\text{RCOOH}$	160–185
$\text{RCOOR}$	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	$^{12}\text{C}$	100	$^{13}\text{C}$	1,11		
Vodík	$^1\text{H}$	100	$^2\text{H}$	0,016		
Dusík	$^{14}\text{N}$	100	$^{15}\text{N}$	0,38		
Kyslík	$^{16}\text{O}$	100	$^{17}\text{O}$	0,04	$^{18}\text{O}$	0,2
Fluor	$^{19}\text{F}$	100				
Křemík	$^{28}\text{Si}$	100	$^{29}\text{Si}$	5,1	$^{30}\text{Si}$	3,35
Fosfor	$^{31}\text{P}$	100				
Síra	$^{32}\text{S}$	100	$^{33}\text{S}$	0,78	$^{34}\text{S}$	4,4
Chlor	$^{35}\text{Cl}$	100			$^{37}\text{Cl}$	32,5
Brom	$^{79}\text{Br}$	100			$^{81}\text{Br}$	98
Jod	$^{127}\text{I}$	100				

## Infračervená spektroskopie (IR)

### Pozice pásů charakteristických skupin

Vazba	Typ sloučenin	Rozsah vlnočtů ( <i>poznámka</i> )/ cm <sup>-1</sup>
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 <sub>2</sub>	Nitro- sloučeniny	1515–1560
		1345–1385