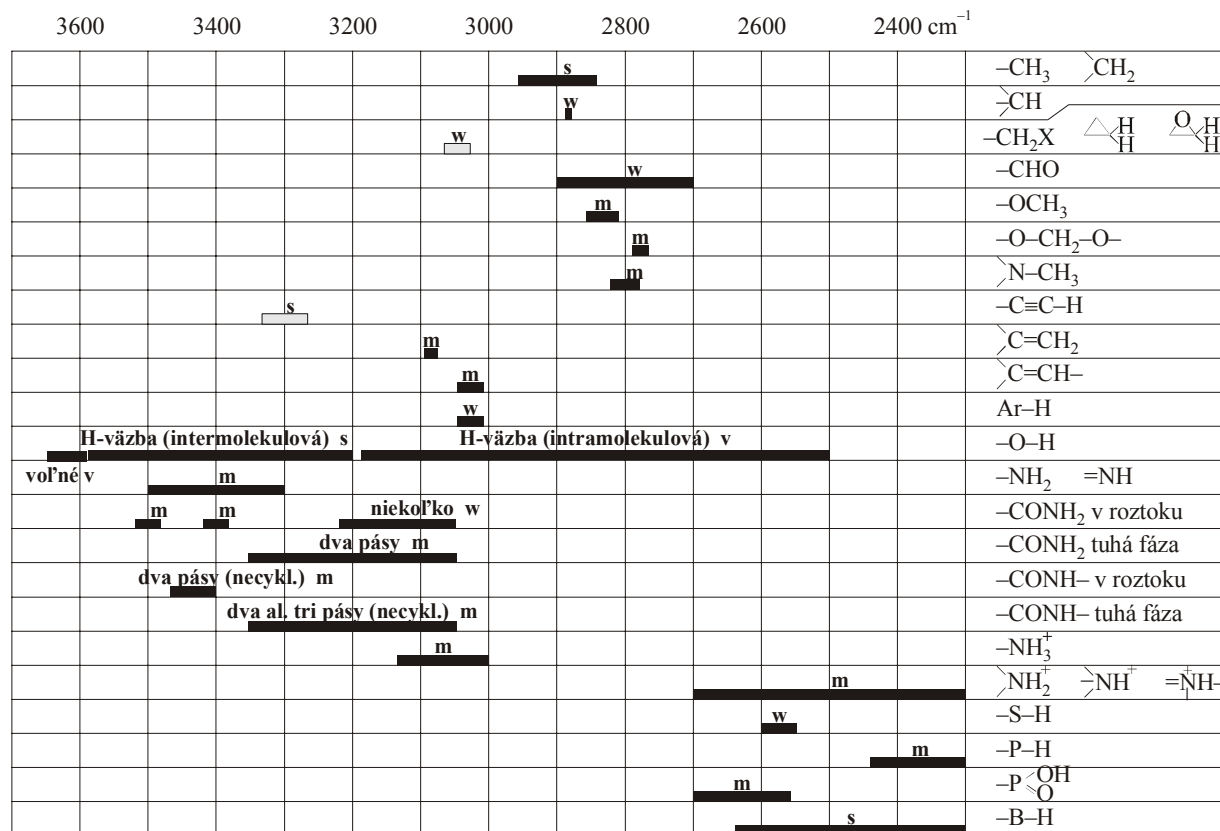
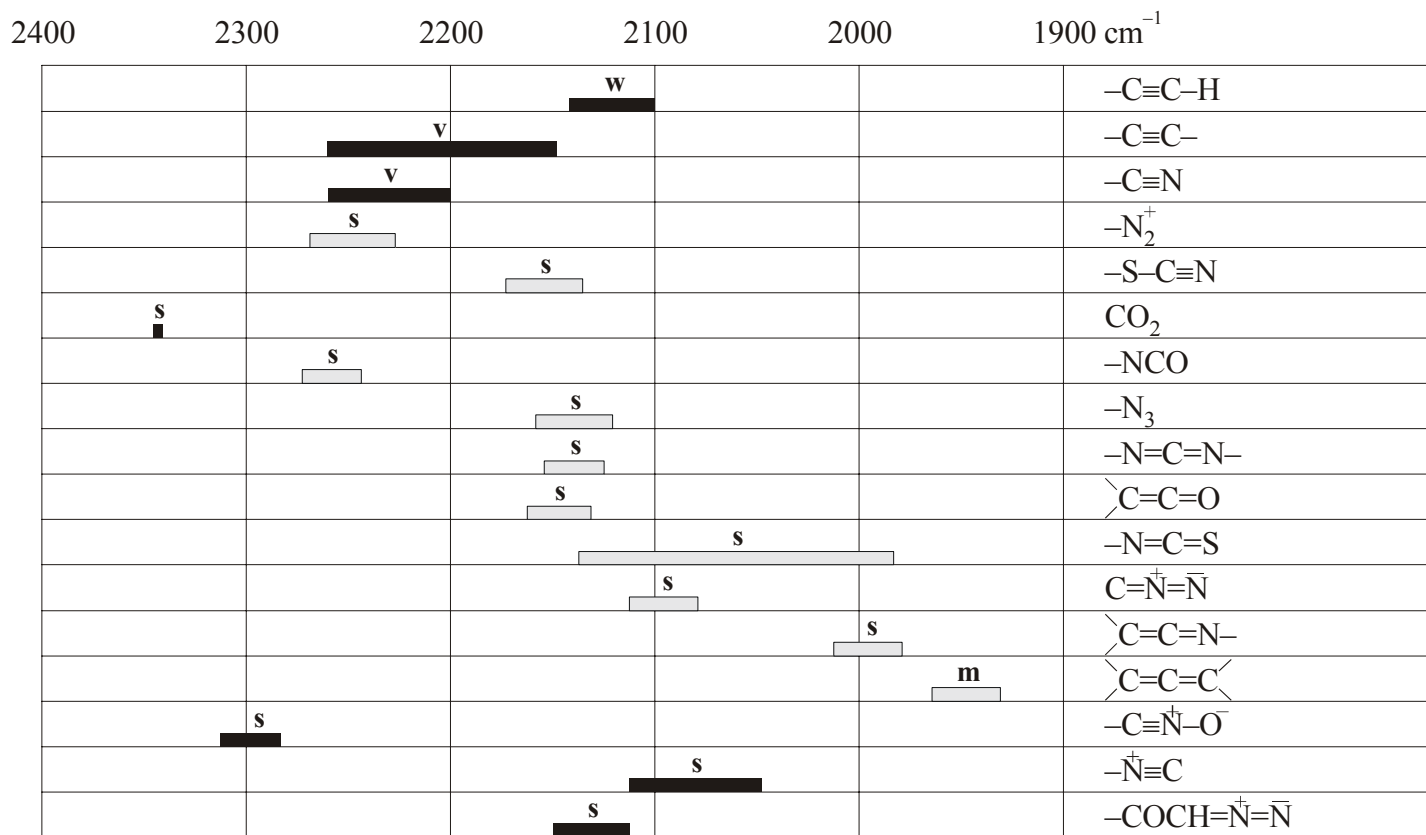


8 KORELAČNÉ DIAGRAMY A TABUĽKOVÉ PRÍLOHY

8.1 Korelačné diagramy a tabuľková príloha pre interpretáciu IČ spektier



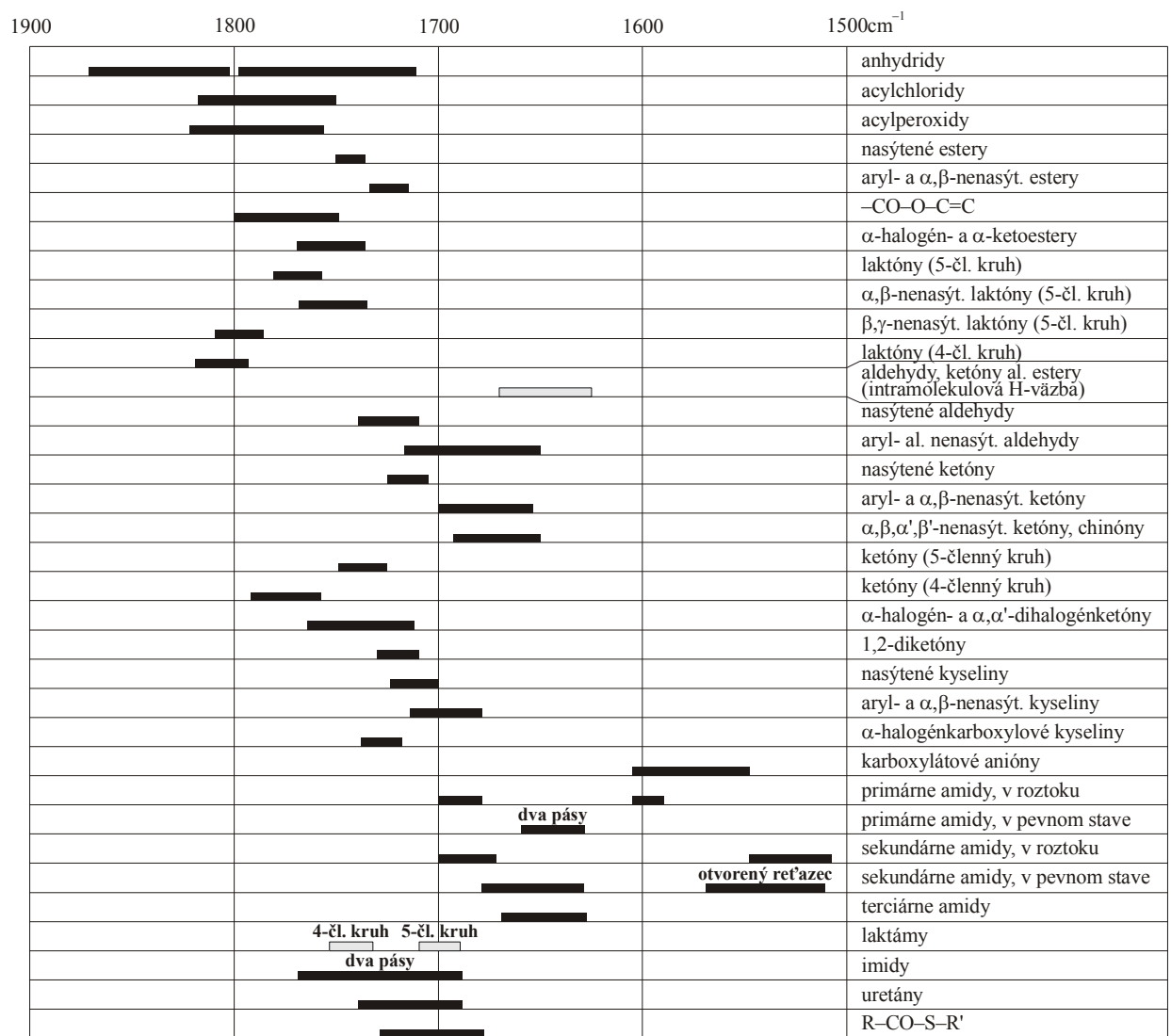
Obr. 8.1.1 Oblasti výskytu pásov priradených valenčným vibráciám skupín X-H
(Vyšrafované plochy vyjadrujú menej spoľahlivo určené oblasti)



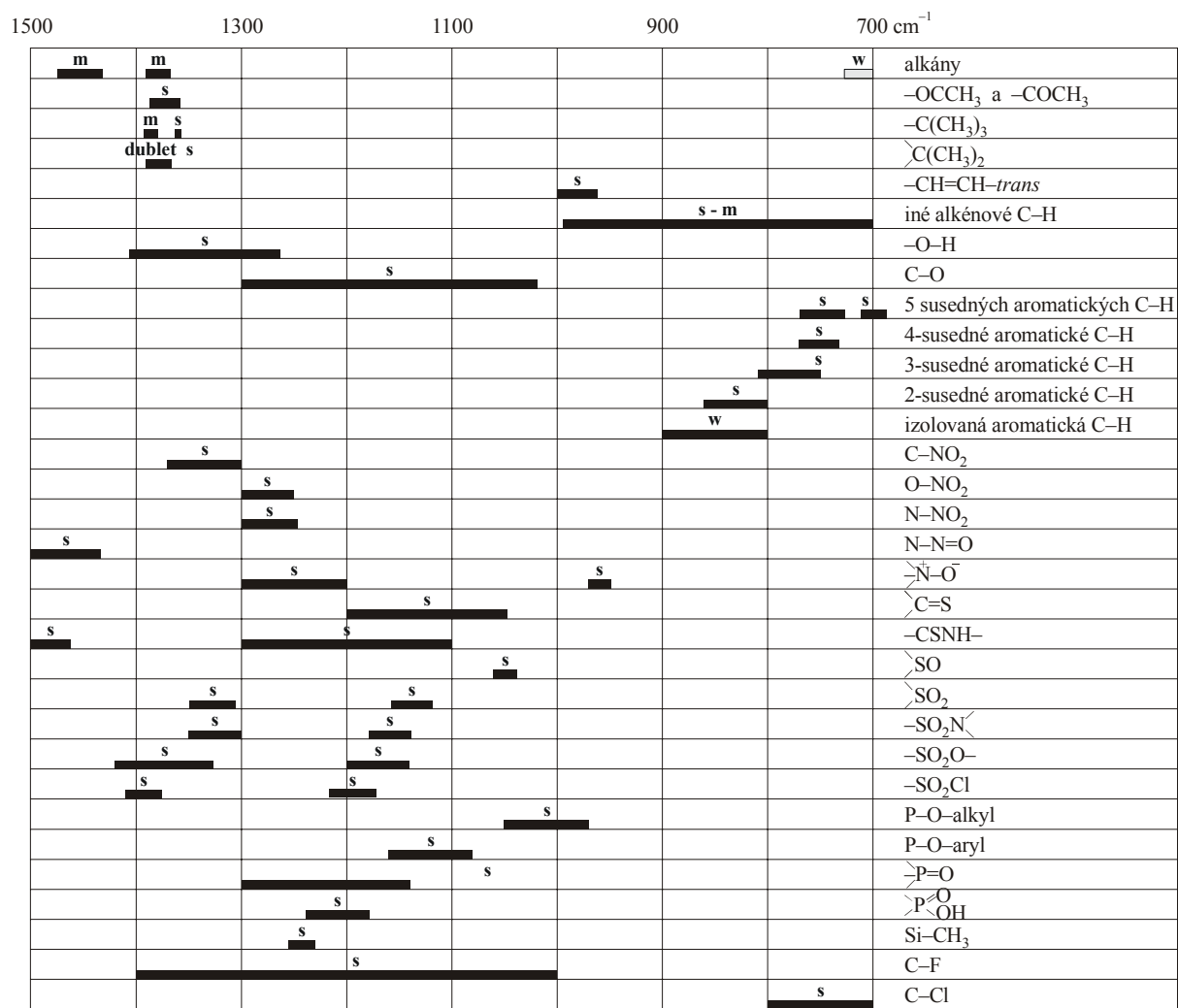
Obr. 8. 1.2 Oblasti výskytu pásov priradených valenčným vibráciám trojitých väzieb $X\equiv Y$ systému kumulovaných väzieb $X=Y=Z$ (Vyšrafované plochy vyjadrujú menej spoľahlivo určené oblasti)

1700	1600	1500	1400 cm^{-1}
	m		$-\text{NH}_2$
		w	$\diagup\text{NH}$
	s	s	$-\text{NH}_3^+$
v			$\diagup\text{C}=\text{N}-$
v			$\alpha\beta$ nenasýt. $\diagup\text{C}=\text{N}-$
	v		konj. cykl. $\diagup\text{C}=\text{N}-$
	v		$-\text{N}=\text{N}-$
			$-\text{N}(\text{O}^-)=\text{N}-$
m-w			izolovaná $\diagup\text{C}=\text{C}\diagdown$
	m		$\diagup\text{C}=\text{C}\diagdown$ konj. s arylom
	s	s	diény, triény, atď.
	s		$\diagup\text{C}=\text{C}\diagdown$ konj. s $\diagup\text{C}=\text{O}$
s			$\diagup\text{C}=\text{C}\diagdown\text{N}-$ $\diagup\text{C}=\text{C}\diagdown\text{O}-$
	jeden al. dva pásy m	m	benzény, pyridíny, atď.
		s	$\text{C}-\text{NO}_2$
	s		$-\text{O}-\text{NO}_2$
	s		$\diagup\text{N}-\text{NO}_2$
	s		$\text{C}-\text{N}=\text{O}$
dva pásy s			$-\text{O}-\text{N}=\text{O}$
		s	$\diagup\text{N}-\text{N}=\text{O}$
		s	$-\text{CS}-\text{NH}-$

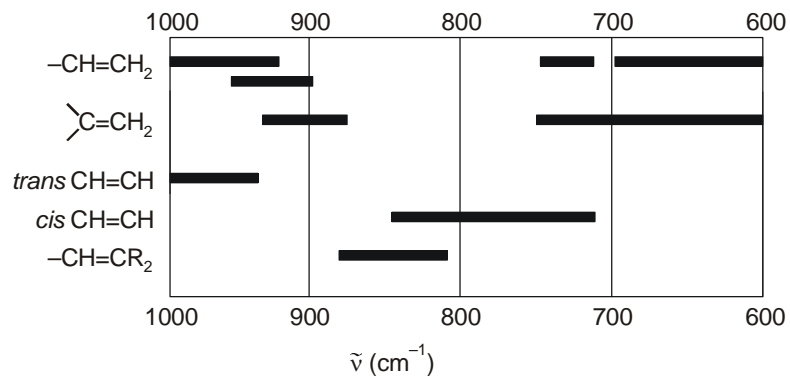
Obr. 8.1.3 Oblasti výskytu pásov priradených valenčným vibráciám dvojitéch väzieb $X=Y$ a deformačným vibráciám NH .
 Pre karbonylové zlúčeniny pozri obrázok 3. 21 (Vyšrafované plochy vyjadrujú menej spoľahlivo určené oblasti)



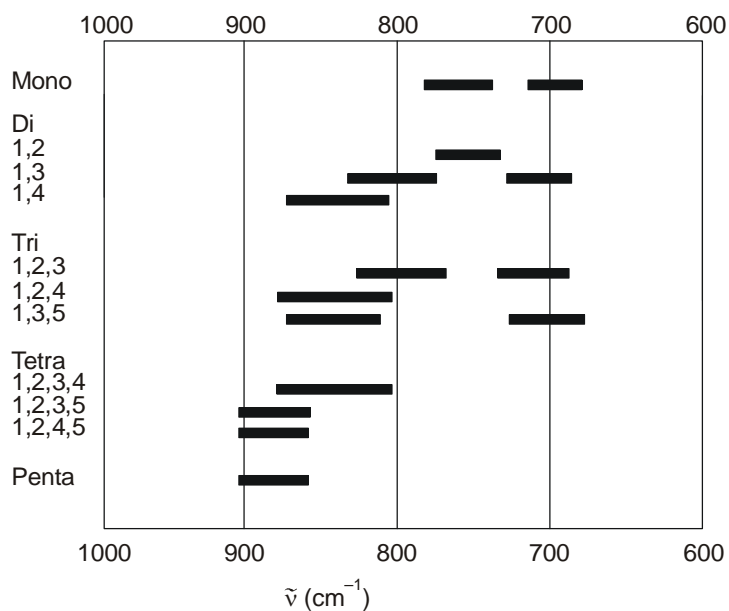
Obr. 8.1.4 Oblasti výskytu pásov priradených valenčným vibráciám karbonylových skupín. Všetky pásy sú silné (s) (Vyšrafované plochy vyjadrujú menej spoľahlivo určené oblasti)



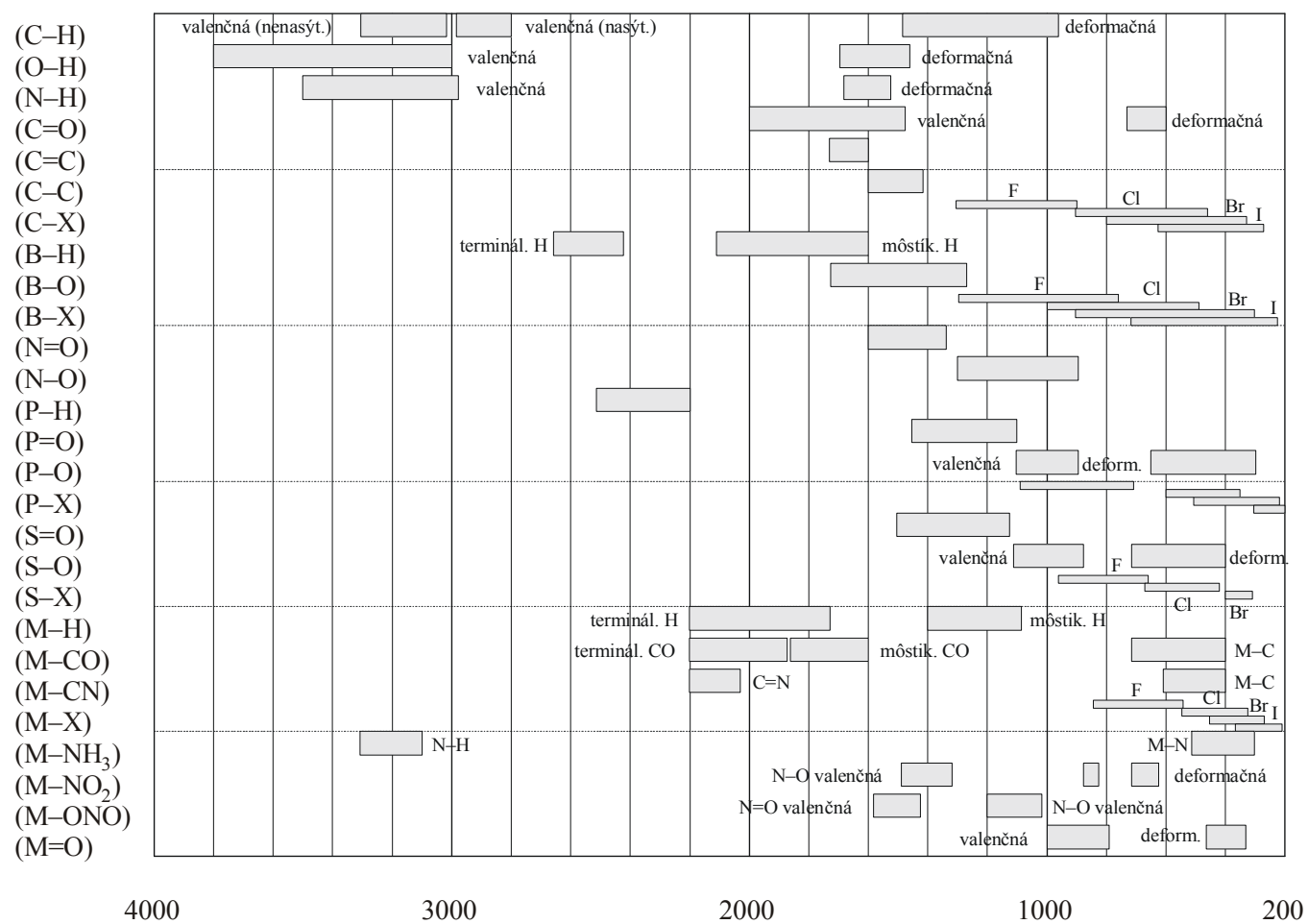
Obr. 8.1.5 Výskyt charakteristických pásov v oblasti “odtlačku prsta”
(Vyšrafované plochy vyjadrujú menej spoľahlivo určené oblasti)



Obr. 8.1.6 Oblasti výskytu charakteristických pásov mimorovinných deformačných vibrácií $\gamma(\text{CCH})$ alkénov



Obr. 8.1.7 Oblasti výskytu charakteristických pásov mimorovinných deformačných vibrácií $\gamma(\text{CCH})$ substituovaných benzénov



Obr. 8.1.8 Oblasti výskytu charakteristických pásov nejbežnejších skupinových vibrácií v organických, anorganických, koordinačných a organokovových zlúčeninách

Tabuľka 8.1.1 Alkány

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámka
Valenčná vibrácia CH		
$\nu(\text{CH}_3)$	2960(s) 2870(m)	ν_{as} ν_{s} (2815–2830 ν –OCH ₃ , chyba ν –OC ₂ H ₅), 2730–2820 ν –NCH ₃ , chyba ν –NC ₂ H ₅)
$\nu(\text{CH}_2)$	2925(s) 2850(s)	ν_{as} ν_{s}
$\nu(\text{CH})$	2890–2880(w)	
Deformačná vibrácia CH		
$\delta(\text{CH}_3)$	1460(m) 1370–1380(s)	δ_{as} δ_{s}
$\delta(\text{CH}_2)$	1470(m)	nožničková
$\delta(\text{CH}_2\text{--CH}(\text{CH}_3)_2)$	1460(m) 1365 a 1385	dublet
$\delta(\text{CH})$	1340(w)	
Deformačná vibrácia CH ₂		
$\rho(\text{CH}_2)_n$	720–790(s)	720–725 cm ⁻¹ ak je $n \geq 4$, posun k vyšším vlnočtom ak je $n < 4$
Skeletové vibrácie		
(CH ₃) ₃ –C	1255(s) 1210(s)	poloha pásov menej stála
(CH ₃) ₂ –CH	1170(s) 1140(s)	rameno pásu pri 1170 cm ⁻¹
(CH ₃) ₂ –C	1195(s) 1215(s)	rameno pásu pri 1195 cm ⁻¹
Cyklopropán	1000–1020(m)	$\nu(\text{CH})$ nad 3000 cm ⁻¹

Tabuľka 8.1.2 Alkény

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia =CH		
$\nu(=CH_2)$	3075–3095(m)	občas prekrytá pásmi alifatických C–H skupín
$\nu(=CH-)$	3010–3040(m)	
Valenčná vibrácia C=C		$\nu(C=C)$
izolovaná C=C	1620–1680(v)	
konjugácia C=C		intenzívnejší ako v prípade izolovanej dvojitej väzby
s aromatickým kruhom	~1625(m)	
konjugácia s ďalšou C=C	1650(s)	
(diény, triény atď.)	1600(s)	intenzívnejší ako pás pri 1650 cm ⁻¹
konjugácia s C=O	1590–1640(s)	obyčajne menej intenzívny ako pás C=O
Deformačná vibrácia CH		$\gamma(CCH)$, pozri obrázok 3.26
RCH=CH ₂	985–995(s)	1. overtón pri 1820(w-m)
	900–940(s)	
RR' C=CH ₂	885–895(s)	
RCH=CHR' (<i>trans</i>)	960–970(s)	ak je dvojitá väzba v konjugácii s nenásýtenou skupinou posun k 990 cm ⁻¹
RCH=CHR' (<i>cis</i>)	675–730(m)	
RR' C=CHR''	790–840(s)	
Deformačná vibrácia CH		$\delta(CCH)$
RCH=CH ₂	1290–1310(m)	
RCH=CHR' (<i>trans</i>)		
RR' C=CH ₂	1410–1420(m)	
RCH=CHR' (<i>cis</i>)		

Tabuľka 8.1.3 Alkíny

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia $\equiv\text{CH}$ –C \equiv C–H	asi 3300(s)	$\nu(\equiv\text{CH})$ ostrý pás
Valenčná vibrácia C \equiv C R–C \equiv CH	2100–2140(w)	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$
R ₁ C \equiv CR ₂	2150–2260(v)	nepozoruje sa pre R ₁ = R ₂
Deformačná vibrácia $\equiv\text{CH}$ –C \equiv C–H	600–700(s)	$\gamma(\text{CCH})$ niekedy sa pozoruje 1. overtón (1200–1300 cm ⁻¹)

Tabuľka 8.1.4 Alény (1,2-diény) a ich heteroanalógy

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia X=Y=Z O=C=O	2349(s)	$\nu(\text{X}=\text{Y}=\text{Z})$ atmosférický CO ₂
C=C=C (1,2-diény)	1930–1950(m)	ďalší pás pri 850 cm ⁻¹ pre koncovú skupinu C=C=CH ₂
C=C=O (ketény)	2130–2155(s)	pozoruje sa pás pri 1120 cm ⁻¹
C=C=N (keténiminy)	okolo 2000(s)	
–N=C=N– (karbodiimidy)	2130–2155(s)	
–N=C=O (izokyanatany)	2240–2275(s)	poloha neovplyvnená konjugáciou
–N=C=S (izotiokyanatany)	1990–2140(s)	široký a veľmi intenzívny
–N=N=N (azidy)	2120–2160(s)	

Tabuľka 8.1.5 Aromatické zlúčeniny

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia CH		(ν (CH))
Aryl-H	3000–3100(w)	niekoľko pásov často prekrytých
Valenčná vibrácia CC		ν (C=C), skeletové vibrácie aromatického kruhu
Aryl	~1600(m) ~1580(m) ~1500(m)	silnejší v prípade konjugácie najsilnejší pás z 3 uvedených
Deformačné vibrácie C-H		γ (CCH) – pozri aj obr. 3.27
5 susedných C-H väzieb	730–770(s) 680–720(s)	monosubstituovaný
4 susedné C-H väzby	735–770(s)	1,2-disubstituovaný
3 susedné C-H väzby	750–810(s)	1,3- di- a 1,2,3-trisubstituovaný
2 susedné C-H väzby	800–860(s)	1,4-di- a 1,2,4-tri- a 1,2,3,4-tetrasubst.
izolovaná C-H väzba	800–900(w)	1,3,5-tri-, 1,2,3,5-tetra-, 1,2,4,5- a penta-substituované
Vyššie harmonické a kombinačné vibrácie		
Aryl-H	1650–2000(w)	charakteristická spektrálna oblasť, často prekryvané pásmi ν (C=C) a ν (C=O)
Deformačné vibrácie CH		δ (CCH)
1,2-, 1,4-, 1,2,4-subst.	1175–1275 1125–1175 1000–1070	len pre 1,2,4- 2 pásy
1-, 1,3-, 1,2,3-, 1,3,5-subst.	1125–1175 1070–1110 1000–1070	chýba pre 1,3,5-
1,2- 1,2,3-, 1,2,4-	960–1000	

Tabuľka 8.1.6 Alkoholy a fenoly

Typ vibrácia/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia OH		($\nu(\text{O-H})$)
voľné OH	3590–3650(v)	ostrý pás (intenzita pásu sa znižuje zriedením)
Intermolekulové H-väzby		
a) diméry	3450–3550(s)	pomerne ostrý pás
b) polyméry	3200–3400(s)	široký difúzny pás
Intramolekulové H-väzby		
a) jednoduché H-väzby (viacsýtne alkoholy)	3450–3570(v)	pomerne ostré pásy (výskyt pri 1,2-diolochoch a pod.)
b) so skupinami CO, NO ₂ atď.	2500–3200(v)	široký difúzny pás (väzby C=O...OH, NO ₂ ...OH a pod.)
Deformačná vibrácia C–OH		($\delta(\text{COH})$)
primárne alkoholy	1260–1350(s)	pre H-väzby posun k 1300–1500
sekundárne alkoholy	1260–1350(s)	cm ⁻¹ (často 2 pásy). Nemá
terciárne alkoholy	1310–1410(s)	praktické využitie.
fenoly	1310–1410(s)	
Valenčná vibrácia C–O		$\nu(\text{C-O})$
primárne alkoholy	1050(s)	
sekundárne alkoholy	1100(s)	
terciárne alkoholy	1150(s)	
fenoly	1200(s)	

Tabuľka 8.1.7 Étery a peroxidy

	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia C–O–C		($\nu(\text{COC})$)
–CH ₂ –O–CH ₂ –	1060–1150(s)	$\nu_{\text{as}}(\text{C–O–C})$
=C–O–C a aromatické	1200–1275(s)	$\nu_{\text{as}}(\text{C–O–C})$
	1020–1075(s)	$\nu_{\text{s}}(\text{C–O–C})$
cyklické étery	~1250(s)	
epoxidy	~900(m)	<i>trans</i> -konfigurácia
	~800(m)	<i>cis</i> -konfigurácia
väčšie kruhy	1070–1140(s)	
alkylperoxidy	820–890(w)	

Tabuľka 8.1.8 Amíny a soli amínov

Typ vibrácie/skupina	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie NH, resp. NH ₂		$\nu(\text{NH}_2)$, resp. $\nu(\text{NH})$
primárne amíny	3300–3500(m)	2 pásy, asociované H–väzby, v pevnom stave pri nižšom vlnočte
sekundárne amíny	3300–3500(m)	1 pás
Valenčné vibrácie NH ₃ ⁺ , NH ₂ ⁺ a NH ⁺		$\nu(\text{NH}_3^+)$, $\nu(\text{NH}_2^+)$, resp. $\nu(\text{NH}^+)$
soli amínov (NH ₃ ⁺)	~3000(m)	pre tuhé látky, pozorujú sa aj pásy (nie vždy) okolo 2500 a 2000 cm ⁻¹
soli amínov (NH ₂ ⁺ , NH ⁺)	2250–2700(m)	pre tuhé látky, široké pásy
Deformačné vibrácie NH resp. NH ₂		$\delta(\text{NH}_2)$, resp. $\delta(\text{NH})$
primárne amíny	1560–1650(m)	
sekundárne amíny	1490–1580(w)	
Valenčné vibrácie CN		($\nu(\text{C–N})$)
alifatické amíny	1030–1230(m)	
Ar–NH ₂	1250–1340(s)	
Ar–NH(R)	1280–1350(s)	($\nu(\text{Ar–N})$)
Ar–N(R)(R')	1310–1360(s)	($\nu(\text{R–N})$)

Tabuľka 8.1.9 Ketóny, chinóny, tropolóny (všetky pásy sú silné)

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia C=O		$\nu(\text{C}=\text{O})$
ketóny		
necyklické –CH ₂ –CO–CH ₂	1705–1725	
–CH=CH–CO–	1665–1685	
–C=C–CO–C=C–	1663–1670	
Ar–CO–(arylketóny)	1680–1700	
Ar–CO–Ar' (diarylketóny)	1660–1670	
–CX–CO–	1725–1745	(X–Cl a Br)
(halogensubstituované)	1745–1765	(X–Cl a Br)
–CX ₂ –CO–CX ₂ –	1710–1730	
–CO–CO– (α-diketóny)	1540–1640	2 pásy $\nu(\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O})$, sym., asym.)
–CO–CH ₂ –CO– (β-diketóny, enol forma)	1705–1725	rovnako aj –CO–C=C(NH ₂)–
–CO–CH ₂ –CH ₂ –CO–	1725–1745	niekedy dva pásy
–CO–CH ₂ –OCO–		
cyklické	1705–1725	
6- a 7-členné	1740–1750	
5-členné	~1780	
4-členné		
chinóny:	1660–1690	2 CO skupiny v jednom kruhu
	1635–1655	2 CO skupiny v rôznych kruhoch
tropolóny (deriváty 2-hydroxy- 2,4,6-cykloheptatrienónu):	1600–1630	C=O a C=C väzby
	1535–1570	
Iné vibrácie	1100–1230	
alkylketóny	1075–1225	
arylketóny		

Tabuľka 8.1.10 Aldehydy

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie C=O		$\nu(\text{C=O})$
nasýtené	1720–1740(s)	
–C=C–CH=O	1680–1705(s)	správnejšie asymetrická vibrácia celej skupiny
–C=C–C=C–CH=O	1660–1680(s)	– “ –
Ar–CH=O	1695–1715(s)	hydroxo alebo amino skupina v orto polohe spôsobuje posun na 1625–1655 cm ⁻¹ (intramolekulová H-väzba)
–C(OH)=C–CH=O	1645–1670(s)	
α -chloro- alebo bromo-	1730–1765(s)	
Valenčné vibrácie C–H v –CH=O ^a		$\nu(\text{CH})$
	2700–2900(w)	obyčajne 2 pásy, jeden pri 2720 cm ⁻¹
Deformačná vibrácia C–H		($\gamma(\text{CH})$)
–CH=O	780–975(m)	

^aAk sa okolo 2720 cm⁻¹ objaví pás, možno to pokladať za dôkaz aldehydovej skupiny

Tabuľka 8.1.11 Karboxylové kyseliny

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie O–H		(ν (OH))
voľné	3500–3560(m)	
viazané H-väzbami (dimér)	2500–3200(w)	veľmi široký difúzný pás (niekoľko 100 cm ⁻¹) v tuhom stave a nie príliš zriedených roztokoch dimér
Valenčná vibrácia C=O		ν (C=O)
nasýtené kyseliny	1700–1725(s)	hodnoty platia pre dimérnu formu
α -halogénalifatické kyseliny	1720–1740(s)	pre monoméry posun o 40–50 cm ⁻¹
–C=C–COOH	1690–1715(s)	k vyšším vlnočtom
Ar–COOH	1680–1700(s)	
kyseliny s intermolekulovými H-väzbami	1650–1670(s)	
Spriahnuté valenčné vibrácie C–O s deformačnými vibráciami O–H		ν (C–O) + δ (OH)
	1395–1440(w)	pre dimér (spriahnuté vibrácie)
	1210–1320(s)	
Deformačná vibrácia OH		(γ (OH))
	900–950(m)	široký charakteristický pás
karboxylátový anión (COO ⁻)	1550–1610(s)	ν_{as} (COO)
	1300–1420(s)	ν_s (COO)

Tabuľka 8.1.12 Estery a laktóny (všetky pásy sú silné (s))

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie C=O		$\nu(\text{C=O})$
nasýtené estery	1735–1750	
Ar–COOR a –C=C–COOR	1715–1730	
R–COO–C=C (aryl- a vinylestery)	1750–1800	vlnočť $\nu(\text{C=C})$ sa posúva k vyšším hodnotám
estery s elektroneg. substituentami v α -polohe (napr. C(Cl)CO–O–)	1745–1770	
–CO–COOR (α -ketoestery)	1740–1755	
–C(OH)=C–COOR (β -ketoestery, enol forma)	okolo 1650	
salicyláty	1670–1690	
γ -laktóny nasýtené	1760–1790	
γ -laktóny (α , β -nenasýtené)	1740–1760	
γ -laktóny (β , γ -nenasýtené)	~1800	
δ - laktóny nasýtené	1735–1750	
- nenasýtené	≈1720	
Valenčné vibrácie C–O		$\nu(\text{C–O})$
mravčany	1180–1200	$\nu_{\text{as}}(\text{CO}_2)$, $\nu_{\text{s}}(\text{CO}_2)$ nachádzame
octany	1230–1250	pri nižších vlnočtoch
fenyloctany	okolo 1205	(1050–1200 cm ⁻¹ (s), nižšia
propionáty a vyššie	1150–1200	intenzita.
akryláty, fumaráty a maleinány	1200–1300	
	1130–1180	
benzoáty a ftaláty	1250–1310	
	1100–1150	
laktóny	1100–1250	

Tabuľka 8.1.13 Anhydridy a halogenidy karboxylových kyselín, peroxidy (všetky pásy sú silné (s))

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie C=O		$\nu(\text{C=O})$
nasýtené anhydridy (necyklické)	1800–1850 1740–1790	pozorujú sa dva pásy vo vzdialenosti okolo 60 cm ⁻¹ . Pás pri vyššom vlnočte je intenzívnejší v prípade necyklických
nasýtené anhydridy (cyklické 5-členné)	1820–1870 1750–1800	anhydridov a opačne v prípade cyklických je intenzívnejší pás pri nižšom vlnočte
Aryl a α , β -nenasýtené anhydridy	1780–1830 1710–1770	
Acylchloridy) (–COCl)		
nasýtené	1790–1815	acylfluoridy pri vyššom a acylbromidy, resp. acyljodidy pri nižšom vlnočte
Aryl a α , β -nenasýtené	1750–1790	
peroxidy (–CO–O–O–CO–)		
nasýtené	1800–1820 1780–1800	
Aryl a α , β -nenasýtené	1780–1805 1755–1785	aj pás pri 1250 cm ⁻¹
Valenčné vibrácie C–O		$\nu(\text{C–O})$
anhydridy necyklické	1050–1170	
cyklické	1200–1300	

Tabuľka 8.1.14 Amidy a laktámy

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie N–H		($\nu(\text{NH}_2)$, ($\nu(\text{NH})$))
primárne amidy: voľné H-väzby	asi 3400(m) a 3500(m) asi 3180(m) a 3350(m)	2 pásy – $\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$ a $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$ často niekoľko pásov v oblasti 3200 až 3050 cm ⁻¹
sekundárne amidy: voľné	3400–3460(m) 3070–3100(w)	2 pásy: pri nižšom vlnočte v tuhom stave a v prípade H-väzieb slabý pás v prípade látok v tuhom stave
I. pás amidov		$\nu(\text{C=O} + \delta(\text{NH}))$
primárne amidy	~1650(s) ~1690(s)	v tuhej fáze (asociované NH ₂) v zriedených roztokoch (voľné NH ₂)
sekundárne amidy	1630–1680(s) 1670–1700(s)	v tuhej fáze v roztoku
terciárne amidy	1630–1670(s)	nie je H-väzba – spektrá v tuhom stave a v roztoku sú podobné
laktámy		
6-členné a väčšie kruhy	asi 1670(s)	
5-členné	asi 1700(s)	
4-členné	asi 1745(s)	
II. pás amidov		$\delta(\text{NH}_2)$, resp. $\delta(\text{NH}) + \nu(\text{CN})$
primárne amidy	1620–1650(s) 1590–1620(s)	v tuhej fáze v roztoku
sekundárne amidy	1515–1570(s) 1510–1550(s)	v tuhej fáze roztok

Tabuľka 8.1.15 Imíny a nitrily, azolátky

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia C≡N		v(C≡N)
nasýtené nitrily	2240–2260(v)	
Ar–C≡N	2220–2240(s)	intenzívnejší pás ako pre
–C=C–C≡N	2215–2235(s)	nasýtené nitrily
Izonitrily (R–N≡C)	2040–2120(s)	v(N≡C)
Valenčná vibrácia C=N		v(C=N)
necyklické iminoderiváty	1640–1690(v)	
–C=C–C=N– iminoderiváty	1630–1660(v)	
cyklické –C=C–C=N–	1480–1660(v)	
Valenčné vibrácie N=N		v(N=N)
Azozlúčeniny	1575–1630(v)	

Tabuľka 8.1.16 Nitro- a nitrozozlúčeniny, nitráty a nitrity

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčná vibrácia NO ₂		aj vibrácie v oblasti 500–800
–C–NO ₂	1500–1570(s)	v _{as} (NO ₂)
	1300–1370(s)	v _s (NO ₂)
–O–NO ₂	1600–1650(s)	v _{as} (NO ₂)
	1250–1300(s)	v _s (NO ₂)
–N–NO ₂	1550–1630(s)	v _{as} (NO ₂)
	1250–1300(s)	v _s (NO ₂)
Valenčné vibrácie NO		N(NO)
–O–N=O	1610–1680(s)	dva pásy
–C–N=O	1500–1600(s)	
–N–N=O	1430–1500(s)	
Valenčná vibrácia NO ₃ ⁻	1340–1410	
	800–860	

Tabuľka 8.1.17 Heterocyklické aromatické zlúčeniny

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Furánové, tiofénové a pyrolové deriváty		
Valenčná vibrácia C–H	3050–3165(m)	v(C–H)
Valenčná vibrácia N–H (pyrol a jeho deriváty)	3400–3440(s)	v(N–H)
Valenčná vibrácia C=C a vibrácie skeletu	1520–1610(s) 1470–1510(s) 1350–1410(s)	
Deformačná vibrácia CH a vibrácie skeletu	1130–1255(s) 1000–1030(s) 700–800(s)	tiofén furán tiofén a furán
Pyridínové deriváty		
Valenčná vibrácia CH	asi 3020(s)	
Valenčná vibrácia CC resp. CN	1580–1650(m) asi 1480 asi 1430	2 pásy
Deformačné vibrácie CH a skeletálne vibrácie kruhu	asi 1200(s) 1000–1100(s) 700–900(s)	v uvedených oblastiach sa nachádza viacero pásov

Tabuľka 8.1.18 Halogenderiváty

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Valenčné vibrácie		
C–F	1000–1400(s)	
C–Cl	600–800(s)	
C–Br	500–600(s)	
C–I	asi 500(s)	

Tabuľka 8.1.19 Organické zlúčeniny síry

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Tioly		
-S-H	2550–2600(w)	$\nu(\text{SH})$, slabšia ako $\nu(\text{OH})$ – menej ovplyvnená H-väzbou. Intenzívna v Ramanovom spektre
Sulfoxidy		
-S=O	1030–1070(s)	$\nu(\text{S=O})$
	700–900(s)	$\nu(\text{S-O})$
Sulfóny, sulfónamidy, sulfochloridy		
-SO ₂	1120–1160(s)	$\nu_s(\text{SO}_2)$
	1300–1350(s)	$\nu_{as}(\text{SO}_2)$
-SO ₂ -N-	1140–1180(s)	$\nu_s(\text{SO}_2)$
	1300–1370(s)	$\nu_{as}(\text{SO}_2)$
-SO ₂ -O-	1145–1200(s)	$\nu_s(\text{SO}_2)$
	1330–1420(s)	$\nu_{as}(\text{SO}_2)$
-SO ₂ -Cl	1170–1205(s)	$\nu_s(\text{SO}_2)$
	1375–1410(s)	$\nu_s(\text{SO}_2)$
Iné vibrácie		
-S-S-	400–500(w)	
-S-F	820–980(s)	

Tabuľka 8.1.20 Zlúčeniny bóru

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Oxokyseliny bóru		
Valenčná vibrácia B–O–H	3200–3300	v(OH)
Bórany		
Valenčná vibrácia B–H (koncová)	2200–2640(s)	
Valenčná vibrácia B...H...B (mostík)	1540–2220	
Deformačné vibrácie B–H	1140–1205	δ(HBH)
	920–975	ω(HBH)
Borazán, borazín, amínderiváty bóranov		
Valenčná vibrácia B–N	1330–1550(s)	
Oxozlúčeniny bóru		
Valenčná vibrácia B–O	1300–1700(s)	
Halogénderiváty bóru		
Valenčná vibrácia B–X		v(B–X)
B–F	750–1300	
B–Cl	450–1000	
B–Br	300–850	
B–I	200–750	

Tabuľka 8.1.21 Zlúčeniny kremíka

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Oxokyseliny kremíka		
Valenčná vibrácia Si–O–H	3200–3700(s)	$\nu(\text{OH})$
Silány		
Valenčná vibrácia Si–H	2090–2250(m)	
Deformačná vibrácia Si–H	800–950(s)	$\delta(\text{HSiH})$, široká
Metylsilány SiH _x Me _y		
Deformačné vibrácie CH ₃	1255–1280(s)	$\delta_s(\text{CH}_3)$
	~765	y = 1
	~855	y = 2
	~840	y = 3
Alkyl- a arylsilány		
Deformačné vibrácie C–H		$\delta(\text{CCH})$
Si–CH ₂ –R	1200–1250	
Si–C ₆ H ₅	okolo 1150	
Valenčná vibrácia Si–C	760–860	
Siloxány		$\nu_{\text{as}}(\text{Si–O–C})$ a $\nu_{\text{as}}(\text{Si–O–Si})$
Valenčná vibrácia Si–O–R	1000–1110	
Valenčná vibrácia Si–O–C ₆ H ₅	920–970	
Valenčná vibrácia Si–O–Si	1000–1130	
Halogénderiváty kremíka		
Valenčná vibrácia Si–X		$\nu(\text{Si–X})$
Si–F	600–1100	
Si–Cl	400–800	
Si–Br	250–600	
Si–I	150–400	

Tabuľka 8.1.22 Zlúčeniny fosforu

Typ vibrácie/skupiny	$\tilde{\nu}$ (cm ⁻¹)	Poznámky
Oxokyseliny fosforu		
Valenčné vibrácie P(O)OH	2550–2700(s)	v(OH)
	2100–2300(s)	
	910–1040	v(P–O)
Hydridy fosforu		
Valenčná vibrácia P–H	2275–2440(m)	ostrý
Deformačné vibrácie PH ₂		
δ (PH ₂)	1080–1090(m)	široký
ω (CH ₂)	810–840(m)	
Oxozlúčeniny fosforu		
Valenčná vibrácia P=O	1140–1300(s)	v(P=O)
Valenčná vibrácia P–O–P	870–1000	v _{as} (P–O–P)
Organické zlúčeniny fosforu		
Alkyl- a arylzlúčeniny fosforu		
so skupinou P–CH ₃	1280–1310	
	860–960	
so skupinou P–C ₆ H ₅	1425–1450	
	1090–1130	
	900–1010	
Valenčná vibrácia P–O–alkyl	970–1050(s)	v _{as} (P–O–alkyl)
Valenčná vibrácia P–O–aryl	1160–1240(s)	v _{as} (P–O–aryl)
Zlúčeniny fosforu s väzbou P–N		
Valenčná vibrácia P–N	930–1110	
Halogenidy fosforu		
Valenčná vibrácia P–X		v(P–X)
P–F	720–1090	
P–Cl	350–600	
P–Br	220–500	
P–I	200–300	

8.2 Tabuľková príloha pre interpretáciu elektrónových spektier

Tabuľka 8.2.1 Absorpčné maximá niektorých pásov v spektrách polyénov a polyínov

n	CH ₃ (CH=CH) _n CH ₃		C ₆ H ₅ (CH=CH) _n C ₆ H ₅		CH ₃ (C≡C) _n CH ₃	
	λ _{max} , nm	ε, m ² mol ⁻¹	λ _{max} , nm	ε, m ² mol ⁻¹	λ _{max} , nm	ε, m ² mol ⁻¹
3	274	3000	358	7500	207	13500
4	310	7650	384	8650	234	28100
5	342	12200	403	9400	260	35200
6	380	14650	420	11300	284	44500
7	401		435	13500		

Tabuľka 8.2.2 Absorpčné maximá pásov v spektrách substituovaných benzénov typu C₆H₅X

(rozpúšťadlo voda alebo CH₃OH)

X	λ _{max} , nm	ε, m ² mol ⁻¹	λ _{max} , nm	ε, m ² mol ⁻¹	λ _{max} , nm	ε, m ² mol ⁻¹
H	203	740	254	20		
NH ₃ ⁺	203	750	254	16		
CH ₃	206	700	261	23		
I	207	700	257	70		
Cl	210	740	264	19		
Br	210	790	261	19		
OH	210	620	270	145		
OCH ₃	217	640	269	148		
SO ₂ NH ₂	218	970	265	74		
CN	224	1300	271	100		
COO ⁻	224	870	268	56		
COOH	230	1160	273	97		
NH ₂	230	860	280	143		
O ⁻	235	940	287	260		
NHAc	238	1050				
COCH ₃	246	980				
CH=CH ₂	248	1400	282	75	291	50
CHO	250	1140				
C ₆ H ₅	252	1830				
OC ₆ H ₅	255	1100	272	200	278	180
NO ₂	268	780				
CH=CHCOOH	273	2100				
CH=CHC ₆ H ₅	296	2900				

Tabuľka 8.2.3 Absorpčné maximá pásov v spektrách disubstituovaných benzénov

R	R'	poloha	λ_{\max} , nm	ϵ , m ² mol ⁻¹	λ_{\max} , nm	ϵ , m ² mol ⁻¹	λ_{\max} , nm	ϵ , m ² mol ⁻¹
OH	OH	<i>o</i> -	214	600	278	263		
OCH ₃	CHO	<i>o</i> -	253	1100	319	400		
NH ₂	NO ₂	<i>o</i> -	229	16 00	275	500	405	600
OH	OH	<i>m</i> -	277	220				
OCH ₃	CHO	<i>m</i> -	252	830	314	280		
NH ₂	NO ₂	<i>m</i> -	235	1600	375	150		
C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	<i>m</i> -	251	4400				
OH	OH	<i>p</i> -	225	510	293	270		
OCH ₃	CHO	<i>p</i> -	277	1480				
NH ₂	NO ₂	<i>p</i> -	229	500	375	1600		
C ₆ H ₅	C ₆ H ₅	<i>p</i> -	280	2500				

Tabuľka 8.2.4 Absorpčné maximá pásov v spektrách niektorých heteroaromatických chromoforov

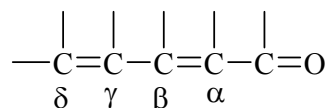
Zlúčenina	λ_{\max} , nm	ϵ , m ² mol ⁻¹	λ_{\max} , nm	ϵ , m ² mol ⁻¹	λ_{\max} , nm	ϵ , m ² mol ⁻¹
naftalén	220	11200	275	560	312	25
furán	200	10000	238	3400		
pyrol	210	15000	350	300		
pyridín	256	1800	270	400		
chinolín	275	4500	311	6300	389	400
purín	220	300	263	800		

Tabuľka 8.2.5 Woodwardove pravidlá pre UV absorpčné maximá diénov

Zlúčenina, resp. skupina	λ_{\max} , nm
Základný acyklický dién	217
Základný heteroanulárny dién	214
Základný homoanulárny dién	253
Pre každý substituent treba pripočítať:	
dvojitú väzbu predlžujúcu konjugáciu	30
exocyklickú dvojitú väzbu	5
alkylsubstituent, zvyšok kruhu, chlór, bróm	5
alkoxy (OR)	6
acyloxy (OCOR)	0
alkyltio (SR)	30
dialkylamino (NR ₂)	60

Tabuľka 8.2.6 Woodwardove pravidlá pre UV absorpčné maximá

α,β -nenasýtených ketónov

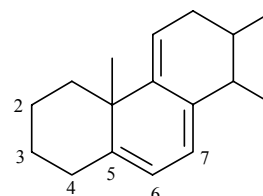


Zlúčenina, resp. skupina	λ_{\max} , nm
Základný α,β -nenasýtený ketón	215
Šesťčlenný cyklický α,β -nenasýtený ketón	215
Päťčlenný cyklický α,β -nenasýtený ketón	202
Príspevky k základnej hodnote pre dvojité väzby:	
dvojité väzba predlžujúca konjugáciu	30
exocyklická dvojité väzba	5
Príspevky k základnej hodnote pre α -substituenty	
alkyl	10
zvyšok kruhu	10
hydroxy (OH)	35
alkoxy (OR)	35
acyloxy (OCOR)	6
chlór	15
bróm	25
Príspevky k základnej hodnote pre β -substituenty	
alkyl	12
zvyšok kruhu	12
halogén (Cl, Br)	12 a 30
alkoxy (OR) a hydroxy (OH)	30
acyloxy (OCOR)	6
alkyltio (SR)	85
dialkylamino (NR ₂)	95

Príklady použitia Woodwardových pravidiel

Príklad 1

Základný dién (homoanulárny)	253 nm
Substituenty	
väzba 4-5 (zvyšok kruhu)	5 nm
väzba 5-14 (zvyšok kruhu)	5 nm
väzba 8-9 (zvyšok kruhu)	5 nm
väzba 11-12 (zvyšok kruhu)	5 nm
väzba 13-14 (zvyšok kruhu)	5 nm
exocyklická dvojité väzba	5 nm
C=C predĺženie konjugácie	30 nm
vypočítané	313 nm
namerané	320 nm



1

Príklad 2

Základný dién (heteroanulárny) 217 nm

Substituenty

väzba 2-3 (zvyšok kruhu) 5 nm

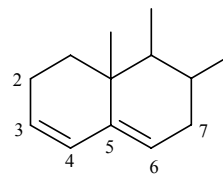
väzba 5-10 (zvyšok kruhu) 5 nm

väzba 6-7 (zvyšok kruhu) 5 nm

exocyklická dvojité väzba 5 nm

vypočítané 237 nm

namerané 234 nm



2

Príklad 3

Základný (5 členný cyklický) ketón 202 nm

α -Substituenty

alkyl 10 nm

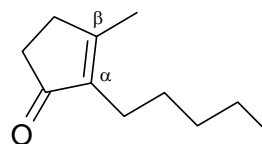
β -Substituenty

alkyl 12 nm

zvyšok kruhu 12 nm

vypočítané 236 nm

namerané 237 nm



3

8.3 Tabuľková príloha pre interpretáciu hmotnostných spektier

Tabuľka 8.3.1 Fragmentové ióny bežné v hmotnostných spektrách organických zlúčenín

m/z	Zloženie iónu	Pravdepodobný typ zlúčeniny
15	CH ₃ ⁺	metyl z rozvetvenia CH ₃ -C-
17	HO ⁺	alkoholy, voda (pozri m/z 18)
18	H ₂ O ⁺	pomer m/z 17/18 asi 1/5 zodpovedá H ₂ O, ináč alkoholy
	NH ₄ ⁺	amíny, často pri sekundárnych a terciárnych amínoch
19	F ⁺	fluorované zlúčeniny
	H ₃ O ⁺	acetály, polyhydroxozlúčeniny
26	C ₂ H ₂ ⁺	Acetylény
27	C ₂ H ₃ ⁺	nenasýtené zlúčeniny, estery dikarboxylových kyselín, tioétery
28	C ₂ H ₄ ⁺	nenasýtené alifatické uhľovodíky
	CO ⁺	fenoly, cyklické polyétery
29	C ₂ H ₅ ⁺	etyl (rozvetvený C ₂ H ₅ -C-), alebo skupina C ₂ H ₅ CH ₂ X
	CHO ⁺	aldehydy, cyklické polyétery, acetály
30	CH ₂ =NH ₂ ⁺	amíny, prevážne primárne a sekundárne (prešmyk)
	NO ⁺	nitrozlúčeniny, nitrosoamíny
31	CH ₂ OH ⁺	primárne a sekundárne alkoholy, dialkylétery, cyklické polyétery
	CH ₃ O ⁺	mrvčany, metylestery alifatických karboxylových kyselín
33	CH ₃ OH ₂ ⁺	hydroxylzlúčeniny, acetály (analógia s H ₃ O ⁺)
	CH ₂ F ⁺	alifatické fluorderiváty
34	H ₂ S ⁺	merkaptány, sulfidy, aromatické tioamidy
35	H ₃ S ⁺	tioétery, merkaptány (izotopové iónové druhy)
	Cl ⁺	chlórderiváty, pomer iónov m/z 35/37 je 1/3
36	HCl ⁺	chlórderiváty, izotopy pozri m/z 35
39	C ₃ H ₃ ⁺	nenasýtené uhľovodíky, aromáty a heteroaromáty
40	CH ₂ CN ⁺	alifatické nitrily a dinitrily
41	C ₃ H ₅ ⁺	alkylderiváty, alkény, estery dikarboxylových kyselín, tioétery
	CH ₂ =CNH ⁺	alifatické nitrily a dinitrily, izotiokyanatany
42	C ₃ H ₆ ⁺	cykloalkány, nenasýtené uhľovodíky
	C ₂ H ₄ N ⁺	cyklické a terciárne amíny (ióny CH ₂ =N=CH ₂ , CH ₃ CH=NH)
43	C ₃ H ₇ ⁺	alkylderiváty, zlúčeniny typu R-CH ₂ -X-CH ₂ -C ₃ H ₇

pokračovanie tabuľky 8.3.1

	CH_3CO^+	metylketóny, acetály
44	$\text{C}_2\text{H}_6\text{N}^+$	sekundárne a terciárne amíny (pozri m/z 30), terciárne amidy
	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}^+$	aldehydy rozvetvené na α -uhlíku, vinylalkylétery
	CONH_2^+	primárne amidy, uretány
45	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{OH}^+$	sekundárne alifatické alkoholy, metylalkylétery
	$\text{CH}_3\text{O}=\text{CH}_2^+$	izopropyl- a sekundárne butylétery
	COOH^+	alifatické karboxylové kyseliny
46	NO_2^+	Nitrozlúčeniny
47	CH_3O_2^+	acetály so skupinou $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}^-$, ortoestery, formiáty
	CH_2SH^+	tioly, sulfidy typu RCH_2SR^1 (izotopy)
49	CH_2Cl^+	chlórderiváty typu RCH_2Cl (pomer m/z 49/51 je 3:1 – izotopy)
51	CHF_2^+	Fluóralkány
50-52	$\text{C}_4\text{H}_2 - \text{C}_4\text{H}_4^+$	aromáty a deriváty pyridínu
53	C_4H_5^+	acetylény, diény a deriváty furánu
54	C_4H_6^+	acetylény, cyklohexány, alifatické nitrily
55	C_4H_7^+	alkány a zlúčeniny s alkylovou skupinou, primárne alkoholy, estery dikarboxylových kyselín, sulfidy
	$\text{C}_3\text{H}_5\text{N}^+$	alifatické nitrily ($\text{CH}_3\text{CH}=\text{C}=\text{NH}^+$), imidazolíny
56	C_4H_8^+	alifatické nitrily, butylestery karboxylových kyselín
	$\text{C}_3\text{H}_6\text{N}^+$	cyklohexylamíny ($\text{CH}_2=\text{CH}=\text{NH}_2^+$)
57	C_4H_9^+	alkány najmä s terciárnou butylovou skupinou, alifatické nitrily
	$\text{C}_2\text{H}_5\text{CO}^+$	etylketóny, deriváty kyseliny propiónovej
58	$\text{CH}_3\text{COCH}_3^+$	oxozlúčeniny typu $\text{RCH}_2\text{COCH}_2\text{R}^1$ ($\text{R} = \text{C}_2\text{H}_5$) a alifatické metylaldehydy ($\text{RCH}(\text{CH}_3)\text{CHO}$)
	$\text{C}_3\text{H}_8\text{N}^+$	amíny typu $\text{RCH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{NH}_2$, $\text{R}(\text{R}^1)\text{N}-\text{CH}_3$ a pod.
59	$\text{C}_3\text{H}_7\text{O}^+$	sek. a terc. alkoholy, étery typu $\text{CH}_3\text{OCH}(\text{CH}_3)\text{R}$ a pod.
	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}^+$	primárne amidy, (ionový druh $\text{CH}_2=\text{C}(\text{OH})\text{NH}_2^+$) a oxímy
	COOCH_3^+	metylestery karboxylových kyselín (pozri m/z 31)
60	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2^+$	karboxylové kyseliny RCH_2COOH s výnimkou $\text{R} = \text{CH}_3$
	$\text{CH}_2=\text{CHSH}^+$	cyklické sulfidy v prítomnosti iónu m/z 61 (izotopové ióny)
61	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2^+$	acetáty typu CH_3COOR ($\text{R} = \text{C}_2\text{H}_5$), acetály
	$\text{C}_2\text{H}_5\text{S}^+$	tioly, sulfidy, izotiokyanátany (izotopy)

pokračovanie tabuľky 8.3.1

	$\text{CH}_3\text{SiOH}_2^+$	trimetylsilylétery (prítomné aj ióny pri m/z 45, 74, 75)
62	$\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}^+$	sulfidy typu RSC_2H_5 spoločne s iónom m/z 63 (izotopy)
65	C_5H_5^+	zlúčeniny s benzylovou skupinou, súčasne prítomný intenzívny m/z 91, aromatické nitrozlúčeniny a fenoly (m/z 66)
	H_2S_2^+	dialkyldisulfidy
67	C_5H_7^+	acetylény, diény, cykloalkány
68	C_5H_8^+	cykloalkány, najmä C_5 a C_6
	$\text{C}_4\text{H}_9\text{N}^+$	alifatické nitrily (ión $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$)
69	C_5H_9^+	alkány a cykloalkány, estery dikarboxylových kyselín
	CF_3^+	fluórankány
70	$\text{C}_5\text{H}_{10}^+$	amylestery alifatických karboxylových kyselín
71	$\text{C}_5\text{H}_{11}^+$	alkány a zlúčeniny s alkylovou skupinou
	$\text{C}_3\text{H}_7\text{CO}^+$	propylketóny RCOC_3H_7 a estery kyseliny maslovej, metyl- cyklohexanoly (iónový druh RCHC(R)CH=OH ; $\text{R} = \text{H}, \text{CH}_3$)
72	$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}^+$	aldehydy a ketóny (rozvetvenie na α -uhlíku, pozri m/z 58)
	$\text{C}_4\text{H}_{10}\text{N}^+$	sek. a terc. amíny a terc. amidy (pozri m/z 58, ión $\text{C}_3\text{H}_8\text{N}^+$)
	CH_2NCS^+	izotio- a tiokyanatany alifatické
73	$\text{C}_4\text{H}_9\text{O}^+$	alifatické alkoholy a étery
	$\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_2^+$	etylestery karboxylových kyselín, karboxylové kyseliny (pozri m/z 59) RCOOC_2H_5 a RCH_2COOH
	$\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}^+$	amidy (ióny $\text{CH}_3\text{CHCONH}_3^+$, $\text{CH}_2\text{CONHCH}_3+\text{H}$ a pod.)
	$(\text{CH}_3)_3\text{Si}^+$	trimetylsilyl deriváty $(\text{CH}_3)_3\text{Si XR}$ ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{N}$)
74	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_2^+$	niektoré metylestery ($\text{CH}_2=\text{C}(\text{OH})\text{OCH}_3$ a kyseliny)
	$\text{CH}_2\text{SC}_2\text{H}_5^+$	sulfidy
	CH_4S_2^+	cyklické disulfidy (pozri m/z 66 a izotopy)
75	C_6H_3^+	aromatické zlúčeniny
	$\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_2^+$	acetály, propionáty $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOR}$ ($\text{R} = \text{C}_2\text{H}_5$)
	$(\text{CH}_3)_2\text{SiOH}^+$	trimetylsilylétery ($(\text{CH}_3)_3\text{SiOR}$)
76	C_6H_4^+	aromatické zlúčeniny typu $\text{C}_6\text{H}_5\text{X}$, $\text{YC}_6\text{H}_4\text{X}$
	$\text{C}_3\text{H}_7\text{S}^+$	tioétery $\text{C}_3\text{H}_7\text{SR}$ ($\text{R} = \text{C}_3\text{H}_7$ sprevádzaný m/z 77)
	$\text{CH}_2\text{ONO}_2^+$	alifatické nitráty, vždy prítomný m/z 46

pokračovanie tabuľky 8.3.1

77	$C_6H_5^+$	aromatické zlúčeniny typu C_6H_5X ($X = OR, \text{halog. } COOR,$ a pod.), cykloalkény a cykloalkíny
78	$C_6H_6^+$	alkylbenzény ($C_6H_5CH_2R$), prítomný m/z 91, étery C_6H_5OR ($R =$ C_2H_5), alkylpyridíny
79	$C_6H_7^+$	alkylbenzény, polycykloalkány
	Br^+	brómderiváty (m/z 79/81 pomer 1/1)
80	HBr^+	brómderiváty (m/z 80/82 pomer 1/1)
	$C_5H_6N^+$	alkylpyroly, s alkylom vo všetkých polohách
	$C_2H_6S_2^+$	metyldisulfidy
81	$C_5H_5O^+$	alkylfurány, subst. v α -polohe
82	CCl_2^+	dichloralkány (izotopové ióny m/z 82, 84, 86 pomer 9:6:1)
83	$C_6H_{11}^+$	alkény a cyklohexány, alifatické nitrily
	$CHCl_2^+$	dihalogén a trihalogénderiváty (m/z 83, 85, 87 pomer 9:6:1)
84	$C_6H_{12}^+$	estery vyšších dikarboxylových kyselín (m/z 98, 112, ...)
	$C_5H_{10}N^+$	alkylpiperidíny a alkylpyrolidíny, amíny
	$C_4H_4S^+$	alkyltiofény (pozri aj m/z 85, 97)
85	$C_6H_{13}^+$	alkány a deriváty $C_6H_{13}X$
	$C_4H_9CO^+$	butylketóny, deriváty kyseliny maslovej a alkyltetrahydropyrány
	$C_4H_5O_2^+$	α -laktóny
	$C_4H_5S^+$	alkyltiofény (prítomnosť iónu m/z 97)
86	$C_5H_{11}N^+$	amíny a terciárne amidy
	$C_5H_{10}O^+$	propylketóny (ión $C_3H_7C(OH)CH_2$)
87	$C_4H_7O_2^+$	alifatické kyseliny a ich metylestery
91	$C_7H_7^+$	zlúčeniny $C_6H_5CH_2X$ ($X = R, \text{Hal, OH a pod.}$)
	$C_4H_8Cl^+$	alkylchloridy (C_6 až C_{18}), m/z 91/93 pomer 3/1
92	$C_7H_8^+$	zlúčeniny C_6H_5XR ($X = CH_2, O, S, \dots, R = C_2H_5$)
	$C_6H_4O^+$	estery kyseliny salicylovej (<i>o</i> -hydroxybenzoovej)
93	$C_6H_5O^+$	salicyláty spoločne s m/z 64, 65, 92, 120, 121), nitrofenoly
	CH_2Br^+	alkylbromidy (m/z 93/95 pomer 1/1)

pokračovanie tabuľky 8.3.1

94	$C_6H_6O^+$ $C_6H_8N^+$ $C_5H_4NO^+$	fenylalkylétery C_6H_5OR ($R = C_2H_5$), benzopyrány dialkylpyroly acylpyroly
95	$C_7H_{11}^+$ $C_6H_7O^+$ $C_5H_3O_2^+$	diény, cykloalkény metylalkylfurány acylfurány a furánkarboxylové kyseliny a deriváty
97	$C_5H_5S^+$	alkyltiofenoly
98	$C_6H_{12}N^+$ $C_5H_6S^+$	N-alkylpiperidíny (α -štiepenie postranného reťazca) alkyltiofenoly
99	$C_5H_7O_2^+$	α -laktóny, etylénketály cyklických ketónov
105	$C_8H_9^+$ $C_6H_5CO^+$	dialkylbenzény (pozri m/z 91) fenylketóny, deriváty kyseliny benzoovej, alkylfenoly a niektoré aromatické alkoholy
106	$C_7H_8N^+$	alkylpyridíny a N-alkylanilíny
107	$C_7H_7O^+$ $C_2H_4Br^+$	alkylfenoly (pozri m/z 93 fenoly) alkylbromidy (ióny m/z 107/109 pomer 1/1)
108	$C_7H_8O^+$	tolylétery, $R = C_2H_5$, pozri m/z 94)
111	$C_6H_7S^+$ $C_5H_5OS^+$	metylalkyltiofény (pozri m/z 97 a 98 a izotopy) acyltiofény, tiofénkarboxylové kyseliny a deriváty
120	$C_7H_4O_2^+$	salicyláty (pozri ióny m/z 64, 92, 121, 138)
121	$C_7H_5O_2^+$	salicyláty, alkylfenoly, metoxybenzylderiváty
122	$C_7H_6O_2^+$	alkylestery kyseliny benzoovej
123	$C_7H_7O_2^+$	alkylestery kyseliny benzoovej
127	I^+	jódderiváty (alifatické i aromatické)
128	HI^+	jódderiváty alifatické
135	$C_4H_8Br^+$	n-alkylbromidy (C_6 a vyššie, pozri m/z 135/137 pomer 1/1)
141	CH_2I^+	alkyljodidy

Tabuľka 8.3.2 Niektoré rozdiely hmotností medzi molekulovým iónom M^+ a fragmentovými iónmi $(M - X)^+$ (eliminované častice) v hmotnostných spektrách organických zlúčenín

$M^+ - X$ m/z	Eliminovaná častica X	Pravdepodobný typ zlúčeniny
1	H [•]	R-CHO, ROH a iné
15	CH ₃ [•]	zlúčeniny s (CH ₃) ₃ C-, (CH ₃) ₂ CH- skupinou, acetály, trimetylsilylétery a pod.
16	O	aromatické nitrozlúčeniny, N-oxidy
	NH ₂ [•]	Amidy a arylsulfónamidy
17	OH [•]	alkoholy, karboxylové kyseliny
18	H ₂ O	alkoholy, aldehydy, ketóny
19	F [•]	organické zlúčeniny fluóru
20	HF	organické zlúčeniny fluóru
27	HCN	aromatické amíny, alifatické nitrily
28	C ₂ H ₄	aromatické etylestery, etylestery karboxylových kyselín, propylketóny
	CO	fenoly, naftoly, chinóny, aldehydy
	H ₂ CN	alifatické nitrily
29	C ₂ H ₅ [•]	etylderiváty C ₂ H ₅ rozvetvené a v zlúčeninách typu C ₆ H ₅ CH ₂ C ₂ H ₅ a R-X-CH ₂ C ₂ H ₅ (X = O, S, NH, CO, ...)
	CHO	aldehydy aromatické, fenoly, naftoly
30	CH ₂ O	aromatické metoxyderiváty
	NO	aromatické nitroderiváty
31	CH ₃ O [•]	metylestery karboxylových kyselín
32	CH ₃ OH	<i>o</i> -substituované metoxybenzoáty (HX-C ₆ H ₄ COOCH ₃ , X = CH ₂ , O...)
33	CH ₃ [•] + H ₂ O	nerozvetvené alifatické alkoholy, cykloalkany
	HS [•]	sek. A terc. tioly, cyklické tioderiváty
34	H ₂ S	Tioly
35	Cl [•]	sek. A terc. alkylchloridy, arylchloridy
36	HCl	alkylchloridy (prevažne n-alkyl)
40	CH ₂ CN [•]	alifatické nitrily a dinitrily
42	CH ₂ CO	arylacetáty, arylacetamidy
	C ₃ H ₆	n- a izobutylketóny, zlúčeniny aryl-X-C ₃ H ₇ (X = O, NH,...)

pokračovanie tabuľky 8.3.2

43	$C_3H_7\cdot$ $CH_3CO\cdot$	zlúčeniny s C_3H_7- , najmä izopropyl metylketóny a acetáty
45	$C_2H_5O\cdot$ $COOH\cdot$	etoxyderiváty a etylestery karboxylových kyselín karboxylové kyseliny
46	C_2H_5OH $NO_2\cdot$	etylestery (pozri ión m/z 32) alkyl- a arylnitrozlúčeniny
47	$CH_3S\cdot$	CH_3-S-R
48	CH_3SH	CH_3-S-R
56	$CO + CO$	chinóny
58	$NO\cdot + CO$	arylnitrozlúčeniny
58	CH_3COCH_3	$CH_3-CO-CH_2-R$
59	$COOCH_3\cdot$	$R-COOCH_3$
59	H_2NCOCH_3	$R-NH-COCH_3$
60	CH_3COOH	$R-O-COCH_3$

8.4 Tabuľková príloha pre interpretáciu NMR spektier

Tabuľka 8.4.1. Používané (deuterované) rozpúšťadlá v ^1H a ^{13}C NMR spektroskopii

Rozpúšťadlo	Použitie
Tetrachlórmetán	uhl'ovodíky
Sírouhlík	uhl'ovodíky, polyméry
Tetrachlórétán	uhl'ovodíky, polyméry
Hexachlórbutadién	polyméry, pre vyššie teploty
Nitrometán	polyméry, PVAC
1,2-Dichlórbenzén	pre vyššie teploty
Kyselina trifluóroctová	dusíkové zlúčeniny
Chloroform	pre nízke teploty (- 64 °C)
Deutériumoxid (ťažká voda)	polárne zlúčeniny, sacharidy, biologický materiál
Acetón	pre nízke teploty (- 95 °C)
Acetonitril	polárne zlúčeniny
Kyselina octová	polárne zlúčeniny
Benzén	aromatické zlúčeniny
Metanol	pre nízke teploty (- 100 °C)
Dimetylsulfoxid	ťažko rozpustné zlúčeniny
Dichlórmetán	nízke teploty (- 97 °C)
Pyridín	ťažko rozpustné zlúčeniny, aromatické zlúčeniny
Dimetylformamid	polárne zlúčeniny , ťažko rozpustné zlúčeniny
Dioxán	polárne zlúčeniny
Tetrahydrofurán	polárne zlúčeniny
Freóny	veľmi nízke teploty

Tabuľka 8.4.2. Fyzikálno-chemické vlastnosti vybraných rozpúšťadiel v NMR spektroskopii

Názov	CAS	M.h.	ρ	T.t.	T.v.	δ_{H} (mult)	J_{HD}	δ_{C} (mult)	J_{CD} (J_{CF})
Acetón- d_6	666-52-4	64,13	0,872	-94	56	2,04(5)	2,2	206,0(13) 29,8(7)	0,9 20
Acetonitril- d_3	2206-26-0	44,08	0,844	-45	81	1,93(5)	2,5	118,2(bs) 1,3(7)	21
Benzén- d_6	1076-43-3	84,16	0,950	7	79	7,15(bs)		128,0(3)	24
Cyklohexán- d_{12}	1735-17-7	96,26	0,893	6	78	1,38(bs)		26,4(5)	19
1,2-Dichlóretán- d_4	17060-07-0	102,99	1,307	-35	83	3,72(bs)		43,6(5)	23,5
Dichlómetán- d_2	1655-00-5	86,95	1,362	-95	40	5,32(3)	1	53,8(5)	27
<i>N,N</i> -Dimetylformamid- d_7	4472-41-7	80,15	1,030	-61	153	8,01(bs) 2,91(5) 2,74(5)	2 2	162,7(3) 35,2(7) 30,1(7)	30 21 21
Dimetylsulfoxid- d_6	2206-27-1	84,18	1,190	18	189	2,49(5)	1,7	39,5(7)	21
1,4-Dioxán- d_8	17647-74-4	96,17	1,129	12	99	3,53(m)		66,5(5)	22
Etanol- d_6 bezv.	1516-08-1	52,12	0,888	<-130	79	5,19(1) 3,55(bs) 1,11(m)		56,8(5) 17,2(7)	22 19
Chloroform- d	865-49-6	120,39	1,500	-64	61	7,24(1)		77,0(3)	32
Kyselina octová- d_4	1186-52-3	64,08	1,119	16	116	11,53(1) 2,03(5)	2	178,4(bs) 20,0(7)	20
Metanol- d_4	811-98-3	36,07	0,888	-98	65	4,78(1) 3,30(5)	1,7	49,0(7)	21,5
Nitrobenzén- d_5	4165-60-0	128,15	1,253	6	211	8,11(bs) 7,67(bs) 7,50(bs)		148,6(1) 134,8(3) 129,5(3) 123,5(3)	24,5(p) 25 26
Nitrometán- d_3	13031-32-8	64,06	1,183	-29	100	4,33(5)	2	62,8(7)	22
2-Propanol- d_8	22739-76-0	68,16	0,890	-86	82	5,12(1) 3,89(bs) 1,10(bs)		62,9(3) 24,2(7)	21,5 19
Pyridín- d_5	7291-22-7	84,14	1,050	-42	114	8,71(bs) 7,55(bs) 7,19(bs)		149,9(3) 135,5(3) 123,3(3)	27,5 24,5(g) 25
Tetrahydrofurán- d_8	1693-74-9	80,17	0,985	-106	65	3,58(bs) 1,73(bs)		67,4(5) 25,3(bs)	22 20,5
Toluén- d_8	2037-26-5	100,21	0,943	-95	110	7,09(m) 7,00(bs) 6,98(m) 2,09(5)	2,3	137,5(1) 128,9(3) 128,0(3) 125,2(3) 20,4(7)	23 24 24(p) 19
Trifluóroctová kyselina- d	599-00-8	115,03	1,493	-15	75	11,50(1)		164,2(4) 116,6(4)	(44) (283)
2,2,2-Trifluoroetanol- d_3	77253-67-9	103,06	1,415	-44	77	5,02(1) 3,88(4x3)	2 (9)	126,3(4) 61,5(4x5)	(277) 22(36)
Voda- d_2	7789-20-0	20,03	1,107	3,8	101,4	4,63(DSS) 4,67(TSP)			

Tabuľka 8.4.3. Nečistoty v ^1H NMR spektrách v rôznych rozpúšťadlách

Nečistoty	Multiplícita									
		CDCl_3	DMSO	Pyridín	C_6D_6	D_2O	CF_3COOD	$(\text{CD}_3)_2\text{CO}$	CD_3CN	CD_3OD
Zvyškový signál rozpúšťadla		7,26	2,50	8,71 7,58 7,21	7,16	4,79		2,05	1,94	3,31
Acetón	s	2,17	2,12	2,00	1,62	2,22	2,41	2,09	2,08	2,15
Acetonitril	s	1,98	2,09	1,85	0,67	2,05	2,08	2,05	1,96	2,03
Anízalkohol (bez H_{arom})		4,61	4,44	4,92	4,36	4,57	reag.			
Benzén	s	7,37	7,40	7,33	7,30	7,44	7,33	7,36	7,37	7,33
Bromoform	s	6,85	7,75	7,86	5,89	ner.	6,87			
n-Butanol	m	3,67	3,41	3,80	3,38	3,60	3,91			
	m	0,94	0,83	0,89	0,83	0,89	1,01			
t-Butylalkohol	s	1,28	1,14	1,37	1,06	1,23	1,66	1,18	1,16	1,40
	s		4,19		1,55				2,18	
t-Butyl(metyl)éter	s	1,19	1,11		1,07	1,21		1,13	1,14	1,15
	s	3,22	3,08		3,04	3,22		3,13	3,13	3,20
Chlóroctová kyselina	s	4,14	4,28	4,44	3,31	4,25	4,24			
Chloroform	s	7,27	8,35	8,41	6,41	ner.	7,25	8,02	7,58	7,90
Cyclohexán	s	1,43	1,42	1,38	1,40	ner.	1,47	1,43	1,44	1,45
1,2-Dibrómetán	s	3,63	3,84	3,70	2,88	3,79	3,62			
Dichlóroctová kyselina	s	5,98	6,68	6,72	5,43	6,21	1,06			
1,2-Dichlóretán	s	3,73	3,93	3,78	2,99	3,92	3,72	3,87	3,81	3,78
Dichlómetán	s	5,30	5,79	5,62	4,46	ner.	5,26	5,63	5,44	5,49
Dietylenglykoldimetyléter	m	3,65	3,51	3,57	3,46	3,67	3,97	3,56	3,53	3,61
	m	3,57	3,38		3,34	3,61		3,47	3,45	3,58
	s	3,39	3,24	3,27	3,11	3,37	3,63	3,28	3,29	3,35
Dietyléter	q	3,48	3,42	3,38	3,27	3,56	3,83	3,41	3,42	3,49
	t	1,20	1,13	1,12	1,10	1,17	1,34	1,11	1,12	1,18
Diizopropyléter	s	1,12	1,04	1,09	0,50	1,12	1,34			
1,2-Dimetoxyetán	s	3,40	3,24	3,27	3,12	3,37		3,28	3,28	3,35
	s	3,55	3,43	3,57	3,33	3,60		3,46	3,45	3,52
Dimetylacetamid	s	3,01	2,99	2,82	2,59	3,05	3,39	3,00	2,96	3,31
	s	2,84	2,82	2,70	2,11	2,89		2,83	2,83	2,92
	s	2,08	1,99	1,96	1,64	2,08	2,60	1,97	1,97	2,07
2,6-Dimetyl-4-t-butylfenol	s	6,98	6,87		7,05			6,96	6,97	6,92
	s	5,01	6,65		4,79				5,20	
	s	2,27	2,18		2,24			2,22	2,22	2,21
	s	1,43	1,36		1,38			1,41	1,39	1,40
Dimetylformamid	s	8,01	7,98		7,63	7,91	8,40	7,96	7,92	7,97
	s	2,95	2,92	2,72	2,40	3,00	3,37	2,94	2,89	2,99
	s	2,88	2,76	2,66	1,98	2,86	3,26	2,78	2,77	2,86
Dimetylsulfoxid	s	2,62	2,52	2,49	1,91	2,70	2,98	2,52	2,50	2,65
Dioxán	s	3,70	3,61	3,61	3,38	3,75	4,09	3,59	3,60	3,66
Etándiol	s	3,76	3,42	4,01	4,21	3,66	4,08			
Etanol	s	3,72	3,49	3,68	3,39	3,64	4,01	3,39	2,47	3,60
	m							3,57	3,54	
	s	1,24	1,09	1,29	0,97	1,16	1,39	1,12	1,12	1,19
Etylenglykol	s	3,76	3,34	4,01	3,41	3,65		3,28	3,51	3,59
Etyl(metyl)ketón	s	2,14	2,07		1,58	2,19		2,07	2,06	2,12
	q	2,46	2,43		1,81	3,18		2,45	2,43	2,50
	t	1,06	0,91		0,85	1,26		0,96	0,96	1,01
2-Furaldehyd	s	9,68	9,69	9,78	9,36	9,52				
	m	7,71	8,14	7,87	6,89	7,94				

	m	7,25	7,59	7,31	6,57	7,59			
	m	6,60	6,82	6,56	5,82	6,78			
n-Hexán	t	0,88	0,86		0,89		0,88	0,89	0,90
	m	1,26	1,25		1,24		1,28	1,28	1,29
HMPA	d	2,65	2,53		2,40	2,61	2,59	2,57	2,64
Izobutylmetylketón	s	2,12	2,08	2,00	1,61	2,19	1,37		
	m	0,92	0,88	0,87	0,74	0,88	1,01		
Izopropanol	sep	4,03	3,78	4,16	3,71	4,02		3,90	3,87
	d	1,20	1,06	1,29	1,01	1,18	1,37	1,10	1,09
Mazací tuk	m	0,86			0,92			0,87	0,86
	m	1,26			1,36			1,29	1,27
Metanol	s	3,48	3,20	3,57	3,09	3,35	3,68	3,31	3,28
	s	1,09	4,01					3,12	2,16
Metyljodid	s	2,16	2,21	reag.	1,47	ner.	2,11		
Morfolín	d	3,69	3,25	3,67	3,50	3,70	4,24		
	d	2,85	2,68	2,81	2,49	2,79	3,58		
Mravčan etylový	s	8,04	8,23	8,21	7,60	8,16	8,25		
	q	4,22	4,17	4,14	3,83	4,28	4,45		
	t	1,30	1,24	1,10	0,85	1,29	1,41		
Mravčia kyselina	s	8,02	8,18	8,54	7,24	8,22			
Morfolín	m	3,69	3,52	2,67	3,50	3,70			
	m	2,85	2,68	2,81	2,49	2,79			
Nitrometán	s	4,32	4,44	4,39	4,09	4,41	4,40	4,43	4,31
Octan draselný	s	ner.	1,60	2,11	ner.	1,91	2,28		
Octan etylový	q	4,12	4,08	4,06	3,91	4,14	4,31	4,05	4,06
	s	2,04	2,02	1,94	1,68	2,08	2,22	1,97	1,97
	t	1,25	1,21	1,10	0,94	1,23	1,37	1,20	1,20
Octan izopropylový	s	2,02	2,00	1,95	1,69	ner.	2,19		
	m	1,22	1,21	1,13	1,02		1,34		
Octan metylový	s	3,67	3,61	3,55	3,28	3,68	3,86		
	s	2,05	2,02	1,92	1,63	2,09	2,21		
Octová kyselina	s	2,13	1,95	2,13	1,63	2,16	2,28	1,96	1,96
Pentán	m	1,27	1,27	1,20	1,23	ner.			1,99
	t	0,88	0,86	0,86	0,87				
Petroléter	m	1,28	1,28	1,20	1,22	ner.	1,32	0,88	0,89
(teplota varu 60 – 80 °C)	t	0,90	0,89	0,86	0,89		0,91	1,27	1,29
Propán-1,2-diol	d	1,17	1,04	1,36	1,10	1,13	-		
Propanol	t	3,60	0,87	3,75	3,76	3,61	3,88		
	m	1,60	1,45	1,70	1,40	1,57	1,76		
	t	0,93	0,87	0,97	0,80	0,89	1,02		
Propánová kyselina	q	2,42	2,26	2,46	2,02	2,47	2,57		
	t	1,18	1,03	1,20	0,89	1,10	1,28		
Pyridín	m	8,60	8,61	8,71	8,50	8,50	8,98	8,58	8,57
	m	7,69	7,83	7,58	2,05	7,90	8,79	7,76	7,73
	m	7,28	7,40	7,21	6,70	7,46	8,21	7,35	7,33
Silikónový mazací tuk	s	0,07	ner.		0,29	ner.		0,13	0,08
Imid kyseliny jantárovej	s	2,75	2,63	2,64	1,50	2,78	3,04		
1,1,2,2-Tetrachlóretán	s	5,96	6,92	6,90	4,96	ner.	5,91		
Tetrahydrofurán	m	3,74	3,63	3,67	3,01	3,75	4,04	3,63	3,64
	m	1,85	1,78	1,64	0,87	1,88	2,06	1,79	1,80
Toluén	m	7,19	7,22	7,22	7,10	ner.	7,22	7,15	7,20
	s	2,34	2,32	2,22	2,13		2,23	2,32	2,33
1,1,1-Trichlóretán	s	2,72	2,80	2,61	1,58	ner.	2,70		
Trietylamín	q	2,56	2,47	2,43	2,40	2,59	3,39	2,45	2,45
	t	1,03	0,99	0,96	0,95	1,02	1,44	0,96	0,96
Trimetylborát	s	3,48	3,46	3,58	3,13	reag.	4,09		
Trimetylfosfát	d	3,80	3,72	3,71	3,37	3,82	3,95		
Voda	s	1,56	3,33		0,40			2,84	2,13
									4,87

Tabuľka 8.4.4. Nečistoty v ^{13}C NMR spektrách v rôznych rozpúšťadlách

	Signál	CDCl_3	$(\text{CD}_3)_2\text{CO}$	$(\text{CD}_3)_2\text{SO}$	C_6D_6	CD_3CN	CD_3OD	D_2O
Signály rozpúšťadla		77,16	29,84	39,52	128,06	1,32	49,00	
			206,26			118,26		
Acetón	CO	207,07	205,87	206,31	204,43	207,43	209,67	215,94
	CH_3	30,92	30,60	30,56	30,14	30,91	30,67	30,89
Acetonitril	CN	116,43	117,60	117,91	116,02	118,26	118,06	119,68
	CH_3	1,89	1,12	1,03	0,20	1,79	0,85	1,47
Benzén	CH	128,37	129,15	128,30	128,62	129,32	129,34	
t-Butanol	C	69,15	68,13	66,88	68,19	68,74	69,40	70,36
	CH_3	31,25	30,72	30,38	30,47	30,68	30,91	30,29
t-Butyl(metyl)éter	OCH_3	49,45	49,35	48,70	49,19	49,52	49,66	49,37
	C	72,87	72,81	72,04	72,40	73,17	74,32	75,62
	CCH_3	26,99	27,24	26,79	27,09	27,28	27,22	26,60
Chloroform	CH	77,36	79,19	79,16	77,79	79,17	79,44	
Cyklohexán	CH_2	26,94	27,51	26,33	27,23	27,63	27,96	
1,2-Dichlóretán	CH_2	43,50	45,25	45,02	43,59	45,54	45,11	
Dichlóretán	CH_2	53,52	54,95	54,84	53,46	55,32	54,78	
Dietyléter	CH_3	15,20	15,78	15,12	15,46	15,63	15,46	14,77
	CH_2	65,91	66,12	62,05	65,94	66,32	66,88	66,42
Diglym	CH_3	59,01	58,77	57,98	58,66	58,90	59,06	58,67
	CH_2	70,51	71,03	69,54	70,87	70,99	71,33	70,05
	CH_2	71,90	72,63	71,25	72,35	72,63	72,92	71,63
1,2-Dimetoxyetán	CH_3	59,08	58,45	58,01	58,68	58,89	59,06	58,67
	CH_2	71,84	72,47	71,07	72,21	72,47	72,72	71,49
Dimetylacetamid	CH_3	21,53	21,51	21,29	21,16	21,76	21,32	21,09
	CO	171,07	170,61	169,54	169,95	171,31	173,32	174,57
	NCH_3	35,28	34,89	37,38	34,67	35,17	35,50	35,03
	NCH_3	38,13	37,92	34,42	37,03	38,26	38,43	38,76
2,6-Dimetyl-4- <i>t</i> -butylfenol	C(1)	151,55	152,51	151,47	152,05	152,42	152,85	
	C(2)	135,87	138,19	139,12	136,08	138,13	139,09	
	CH(3)	125,55	129,05	127,97	128,52	129,61	129,49	
	C(4)	128,27	126,03	124,85	125,83	126,38	126,11	
	CH_3Ar	21,20	21,31	20,97	21,40	21,23	21,38	
	CH_3C	30,33	31,61	31,25	31,34	31,50	31,15	
	C	34,25	35,00	34,33	34,35	35,05	35,36	
Dimetylformamid	CH	162,62	162,79	162,29	162,13	163,31	164,73	165,53
	CH_3	36,50	36,15	35,73	35,25	36,57	36,89	37,54
	CH_3	31,45	31,03	30,73	30,72	31,32	31,61	32,03
Dimetylsulfoxid	CH_3	40,76	41,23	40,45	40,03	41,31	40,45	39,39
Dioxán	CH_2	67,14	67,60	66,36	67,16	67,72	68,11	67,19
Etanol	CH_3	18,41	18,89	18,51	18,72	18,80	18,40	17,47
	CH_2	58,28	57,72	56,07	57,86	57,96	58,26	58,05
Etylénglykol	CH_2	63,79	64,26	62,76	64,34	64,22	64,30	63,17
Etyl(metyl)ketón	CH_3CO	29,49	29,30	29,26	28,56	29,60	29,39	29,49
	CO	209,56	208,30	208,72	206,55	209,88	212,16	218,43
	CH_2CH_3	36,89	36,75	35,83	36,36	37,09	37,34	37,27
	CH_2CH_3	7,86	8,03	7,61	7,91	8,14	8,09	7,87
n-Hexán	CH_3	14,14	14,34	13,88	14,32	14,43	14,45	
	$\text{CH}_2(2)$	22,70	23,28	22,05	23,04	23,40	23,68	
	$\text{CH}_2(3)$	31,64	32,30	30,95	31,96	32,36	32,73	
HMPA	CH_3	36,87	37,04	36,42	36,88	37,10	37,00	36,46
Kyselina octová	CO	17,99	172,31	171,93	175,82	173,21	175,11	177,21

	CH ₃	20,81	20,51	20,95	20,37	20,73	20,56	21,03
Mazací tuk	CH ₂	29,76	30,73	29,20	30,21	30,86	31,29	
Metanol	CH ₃	50,41	49,77	48,59	49,97	49,90	49,86	49,50
Nitrometán	CH ₃	62,50	63,21	63,28	61,16	63,66	63,08	63,22
Octan etylový	CH ₃ CO	21,04	20,83	20,68	20,56	21,16	20,88	21,15
	CO	171,36	170,96	170,31	170,44	171,68	172,89	175,26
	CH ₂	60,49	60,56	59,74	60,21	60,98	61,50	62,32
	CH ₃	14,19	14,50	14,40	14,19	14,54	14,49	13,92
n-Pentán	CH ₃	14,08	14,29	13,28	14,25	14,37	14,39	
	CH ₂ (2)	22,38	22,98	21,70	22,72	23,08	23,38	
	CH ₂ (3)	34,16	34,83	33,48	34,45	34,89	35,30	
i-Propanol	CH ₃	25,14	25,67	25,43	25,18	25,55	25,27	24,38
	CH	64,50	63,85	64,92	64,23	64,30	64,71	64,88
Pyridín	CH ₂ (2)	149,90	150,67	149,58	150,27	150,76	150,07	149,18
	CH ₂ (3)	123,75	124,57	123,84	123,58	127,76	125,53	125,12
	CH ₂ (4)	135,96	136,56	136,05	135,28	136,89	138,35	138,27
Silikónový mazací tuk	CH ₃	1,04	1,40		1,38		2,10	
Tetrahydrofurán	CH ₂	25,62	26,15	25,14	25,72	26,27	26,48	25,67
	CH ₂ O	67,97	68,07	67,03	67,80	68,33	68,83	68,68
Toluén	CH ₃	21,46	21,46	20,99	21,10	21,50	21,50	21,50
	C	137,89	138,48	137,35	137,91	138,90	138,85	
	CH(2)	129,07	129,76	128,88	129,33	129,94	129,91	
	CH(3)	128,26	129,03	128,18	128,56	129,23	129,20	
	CH(4)	125,33	126,12	125,29	125,68	126,28	126,29	
Trietylamín	CH ₃	11,61	12,49	11,74	12,35	12,38	11,09	9,07
	CH ₂	46,25	47,07	45,74	46,77	47,10	46,96	47,19

Tabuľka 8.4.5. Testovacie štandardy pre NMR

Chloroform v acetóne	Tvar čiary pre ¹ H NMR
1,2-Dichlórbenzén v acetóne	Rozlíšenie v ¹ H NMR
1,4-Dioxán v benzéne	Citlivosť/rozlíšenie v ¹³ C NMR
Etylbenzén, TMS v chloroforme	Citlivosť v ¹ H NMR
Formamid v DMSO	Citlivosť v ¹⁵ N NMR
GaCl ₃ , DSS v D ₂ O	Autotest
3-Heptanón v chloroforme	¹ H NMR App test
Metyljodid, Trimetylfosfit, Cr(acac) ₃ v chloroforme	Test nepriamej detekcie
Mentol v chloroforme	Demonštrácia APT, DEPT
TMS v chloroforme	Tvar čiary
Trifluórmetylbenzén v benzéne	Citlivosť v ¹⁹ F NMR
Trifenylfosfát v chloroforme	Citlivosť v ³¹ P NMR

Tabuľka 8.4.6. Chemické posuny protónov štandardov (v CCl₄ vzhľadom na TMS)

Štandard	Vzorec	Skratka	M.h.	T.v. / T.t.	δ / ppm		
					interný	externý	protóny
Acetanhydrid	(CH ₃ CO) ₂ O	Ac ₂ O	102,1	139	2,19	2,19	CH ₃
Acetón	(CH ₃) ₂ CO	AcMe	58,1	56	2,09	2,09	CH ₃
Acetonitril	CH ₃ CN	MeCN	41,1	81	1,97	1,90	CH ₃
Anizol	C ₆ H ₅ OCH ₃		108,1	154	3,75	3,69	CH ₃
Benzén	C ₆ H ₆		78,1	80	7,21	7,26	Ar – H
Cyklohexán	C ₆ H ₁₂	cyHe	84,2	81	1,44	1,49	CH ₂
Dichlórétán	ClCH ₂ CH ₂ Cl	DCE	99	83	5,30	-	CH ₂
4,4-Dimetyl-4-silapentánkarboxylát sodný	(CH ₃) ₃ Si(CH ₂) ₂ CO ₂ Na	TSPA	168,2	>	0,000	-	CH ₃
		DSC		300			

4,4-Dimetyl-4-silapentánsulfonát sodný	$(\text{CH}_3)_3\text{Si}(\text{CH}_2)_3\text{SO}_3\text{Na}$	TSPSA DSS	218,3	200	0,015	-	CH_3
Dimetylsulfoxid	$(\text{CH}_3)_2\text{SO}$	DMSO	78,1	189	2,55	-	CH_3
Dioxán	$\text{O}(\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{O}$		88,1	101	3,57	-	CH_2
1,1,3,3,5,5-Hexakis-(trideuterometyl)-1,3,5-trisilacyklohexán	$(\text{CD}_3)_6(\text{CH}_2)_3\text{Si}_3$	$d_{18}\text{-CS}$	216,6	208	-0,327	-	CH_2
Hexametyldisilán	$(\text{CH}_3)_3\text{SiSi}(\text{CH}_3)_3$	HMDS	146,4	112,3	0,037		
Hexametyldisilazán	$(\text{CH}_3)_3\text{SiNHSi}(\text{CH}_3)_3$	HMDS A	161,4	125	0,042	-	CH_3
Hexametyldisiloxán	$(\text{CH}_3)_3\text{SiOSi}(\text{CH}_3)_3$	HMDS O	162,4	100	0,055	-	CH_3
Chloroform	CHCl_3		119,4	61	7,26	-	CH
Kyselina octová	CH_3COOH	AcOH	60,1	117	2,07	2,10	CH_3
Metanol	CH_3OH	MeOH	32	64,7	3,38	3,40	CH_3
Metyljodid	CH_3I	MeI	141,9	42	2,16	2,19	CH_3
Nitrometán	CH_3NO_2		61	101	4,28	4,31	CH_3
Oktametylcyklotetrasiloxán	$(\text{CH}_3)_8\text{Si}_4\text{O}_4$	OCTS	296,8	175	0,085	-	CH_3
Tetrakis(trimetylsilyl)metán	$[(\text{CH}_3)_3\text{Si}]_4\text{C}$	TTSM	304,8	307	0,236	-	CH_3
Tetrakis(trimetylsilyl)-silán	$[(\text{CH}_3)_3\text{Si}]_4\text{Si}$	TTSS	320,9	267	Solid state NMR		CH_3
Tetrametylsilán	$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	TMS	88,2	27	0,00	0,00	CH_3
3-(Trimetylsilyl)-3,3,2,2-tetradeuteropropánová kyselina - Na soľ	$(\text{CH}_3)_3\text{Si}(\text{CD}_2)_2\text{CO}_2\text{Na}$	$d_4\text{-TSPA}$	172,2	> 300	0,000	-	CH_3
Toluén	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$		92,1	111	2,34	2,33	CH_3
Voda	H_2O		18	100	4,79	-	O-H
				/0			

Tabuľka 8.4.7. Oblasti chemických posunov rôznych protónov

Skupina	δ/ppm	Skupina	δ/ppm
$\text{CH}_3\text{-C}$	1,9-0,8	$\text{CH}_2(\text{cyklická})$	2,5- 0,2
$\text{CH}_3\text{-C}$	2,7-1,6	$\text{CH}_2(\text{acyklická})$	1,4- 1,2
$\text{CH}_3\text{-C}$	2,2-1,8	$\text{CH}_2(\text{halogén})$	1,9- 1,3
$\text{CH}_3\text{-S}$	2,6-2,0	$\text{CH}_2\text{-CO}$	2,4- 2,1
$\text{CH}_3\text{-Ar}$	2,8-2,1	$\text{CH}_2\text{-N}$	3,5- 2,4
$\text{CH}_3\text{-N}$	3,1-2,7	$\text{CH}_2\text{-Ar}$	3,0- 2,6
$\text{CH}_3\text{-O}$	4,0-3,2	$\text{CH}_2\text{-O}$	4,4- 3,4
$\text{CH}_3\text{-halogén}$	4,3-2,3	$\text{CH}_2=\text{C}$ (nekonjugovaná)	5,0- 4,6
$\text{CH}(\text{acyklická})$	1,9-1,4	$\text{CH}_2=\text{C}$ (konjugovaná)	5,7- 5,3
CH-CO	2,7-2,4	R-OH	5,2- 1,4
$\text{CH}=\text{C}$	3,1-2,4	Ar-OH	12,5- 4,5
CH-Ar	3,1-2,8	$\text{CH}=\text{CH-OH}$	16,0-15,0
CH-S	3,2-3,1	COOH	13,0- 9,7
CH-O	5,1-3,8	$\text{C}=\text{H-OH}$	10,2- 8,8
$\text{CH}(\text{cyklická})$	4,5-3,9	R-NH	1,8- 0,4
$\text{CH}(\text{halogén})$	4,2-4,0	Ar-NH	4,0- 3,4
$\text{CH}(\text{nekonjugovaná})$	5,7-5,2	CO-NH	8,5- 5,5
$\text{CH}(\text{konjugovaná})$	6,7-5,7	R-NH	7,7- 7,1
$\text{CH}(\text{heteroaromatická})$	8,6-6,2	Ar-NH	9,5- 8,5
$\text{CH}=\text{O}$	10,1-9,5	R-SH	1,5- 1,1
		Ar-SH	4,0- 3,0

Tabuľka 8.4.8. Intenzity pásov multipletov v závislosti od spinového kvantového čísla I_B

Multiplet	Intenzita pásov			
	$I_B = 1/2$	n	$I_B = 1$	n
Singlet	1	0	1	
Dublet	1 1	1		
Triplet	1 2 1	2	1 1 1	1
Kvartet	1 3 3 1	3		
Kvintet	1 4 6 4 1	4	1 2 3 2 1	2
Sextet	1 5 10 10 5 1	5		
Septet	1 6 15 20 15 6 1	6	1 3 6 7 6 3 1	3
Oktet	1 7 21 35 35 21 7 1	7		
Nonet	1 8 28 56 70 56 28 8 1	8	1 4 10 16 19 16 10 4 1	4
	$I_B = 3/2$	n		
Singlet	1	1		
Kvartet	1 1 1 1	2		
Septet	1 2 3 4 3 2 1	3		
Dekaplet	1 3 6 10 12 12 10 6 3 1	4		
Tridekaplet	1 4 10 20 31 40 44 40 31 20 10 4 1	5		

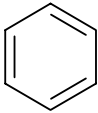
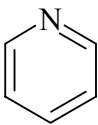

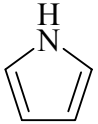

 Tabuľka 8.4.9. Počet čiar (x) v multipletoch rôznych spinových systémov (n) pre $I_B = 1/2$

n	$J / \Delta \nu < 0,03$		x	$J / \Delta \nu > 0,03$
	Spinový systém	Multiplety		
1	<i>A</i>	s	1	1
2	<i>A</i> ₂	s	1	1
2	<i>AB</i>	d, d	4	4
3	<i>A</i> ₃	s	1	1
3	<i>AB</i> ₂	t, d	5	9
3	<i>AMX</i>	k, k, k	12	12
3	<i>ABC</i>	k, k, k	12	15
4	<i>A</i> ₄	s	1	1
4	<i>A</i> ₂ <i>B</i> ₂	t, t	6	18
4	<i>AA'BB'</i>			26
4	<i>ABCD</i>	o, o, o, o	32	56

 Tabuľka 8.4.10. Vicinálne interakčné konštanty $^3J_{cis}$ a $^3J_{trans}$ v 1,2-disubstituovaných eténoch

X	Y	$^3J_{cis}$	$^3J_{trans}$
H	H	11,7	19,0
CH ₃	CH ₃	11,9	15,5
CH ₃	C ₆ H ₅	11,5	15,7
CH ₃	CN	11,0	16,0
CH ₃ COO	CH ₃ COO	11,9	15,5
F	F	-2,0	9,5
Cl	Cl	5,3	12,1
Br	Br	4,7	11,8
CH ₃	F	4,5	11,1

Tabuľka 8.4.11. Interakčné konštanty J v skupinách rôznych zlúčenín

Skupiny	J / Hz	Skupiny	J / Hz
Geminálne 2J:		Aromatické protóny:	
CH ₂ (cyklické)	0 – 20		1,2- 7,0 – 9,2
CH ₂ (acyklické)	12 – 15		1,3- 1,1 – 3,1
CH ₂ -CO	16 – 20		1,4- 0,0 – 0,7
= CH ₂	0 – 3		
Vicinálne 3J:			
CH – CH	6 – 8		
CH – CH (cyklopentán)	4 – 5		2,3- 3,9 – 5,1
CH _a – CH _a (cyklohexán)	8 – 10		2,4- 1,4 – 2,5
CH _a – CH _e (cyklohexán)	2 – 3		2,5- 0,6 – 1,2
CH _e – CH _e (cyklohexán)	2 – 3		2,6- 0,0 – 0,3
CH – CH = O	2 – 3		3,4- 7,4 – 8,6
= CH – CH = O	6		3,5- 1,0 – 1,6
CH – OH	3 – 7		2,3- 1,8 – 2,0
CH – NHCO	5 – 9		2,4- 0,7
CH – SH	8		2,5- 1,3 – 1,5
CH = CH (<i>cis</i>)	6 – 12		3,4- 3,2 – 3,8
CH = CH (<i>trans</i>)	12 – 18		2,3- 2,4 – 3,1
= CH – CH	4 – 10		2,4- 1,3 – 1,5
= CH – CH =	9 – 13		2,5- 1,9 – 2,2
			3,4- 3,4 – 3,8
Ďalekého dosahu:			2,3- 4,9 – 5,8
CH = C – CH (4J)	1 – 2		2,4- 1,2 – 1,7
CH ≡ C – CH (4J)	2 – 3		2,5- 3,2 – 3,7
CH – C = C – CH (5J)	1 – 2		3,4- 3,4 – 4,3
CH – C ≡ C – CH (5J)	2 – 3		

 Tabuľka 8.4.12. Interakčné konštanty $^1J_{CH}$ niektorých organických zlúčenín

Zlúčenina	$^1J_{CH}$ / Hz	Zlúčenina	$^1J_{CH}$ / Hz
CH ₄	125,0	CH ₂ =CH ₂	156,2
CH ₃ CHO	127,0	Ph	158,5
CH ₃ COOH	130,0	CH ₂ =C=CH ₂	168,2
CH ₃ NH ₂	133,0	H-CH=O	172,0
CH ₃ CN	136,1	(CH ₃) ₂ N-CH=O	191,2
CH ₃ OCH ₃	140,0	H-COO ⁻	194,2
CH ₃ OH	141,0	H-COOH	222,0
CH ₃ N ⁺ H ₃	145,0	H-C ≡ C-H	249,0
CH ₃ NO ₂	146,0	H-C ≡ C-Ph	251
CH ₃ F	149,0	H-C ≡ CCH ₂ OH	253,0
CH ₂ F ₂	184,5	CH ₃ -C ≡ CH	248,0
CHF ₃	239,1	H-C ≡ N ⁺ -H	320,0

Tabuľka 8.4.13. Inkrementy na výpočet interakčných konštánt $^1J_{CH}$ alifatických zlúčenín

Substituent X	Inkrement z_i / Hz	Substituent X	Inkrement z_i / Hz
$(CH_3)_3C$	-3,0	CH_2I	7,0
CH_3CO	-1,0	NH_2	8,0
H	0,0	CCl_3	9,0
CH_3	1,0	$C \equiv N$	11,0
C_6H_5	1,0	OH	18,0
CHO	2,0	C_6H_5O	18,0
CH_2Cl	3,0	F	24,0
CH_2Br	3,0	I	26,0
COOH	5,5	Cl	26,0
$CHCl_2$	6,0	Br	26,0
$C \equiv CH$	7,0		

 Tabuľka 8.4.14. Interakčné konštanty $^2J_{CH}$ niektorých organických zlúčenín

Zlúčenina	$^2J_{CH}$ / Hz
CH_3CH_3	- 4,5
$CH_2=CH_2$	- 2,4
$CH \equiv CH$	49,3
CH_3-CHO	26,7
$CH_2=CH-CHO$	26,9
$Cl-CH_2CHO$	32,5
Cl_2CHCHO	35,3
Cl_3CCHO	46,3
$ClCH=CHCl$ (E-)	0,8
$ClCH=CHCl$ (Z-)	16,0

 Tabuľka 8.4.15. Interakčné konštanty $^1J_{CC}$ niektorých organických zlúčenín

Zlúčenina	$^1J_{CC}$ / Hz	Zlúčenina	$^1J_{CC}$ / Hz
CH_3-CH_3	34,6	$\underline{CH_3C} \equiv CH$	67,4
CH_3-CH_2CN	33,0	C_6H_6	57,0
CH_3CH_2OH	37,7	$CH_2=CH_2$	67,6
CH_3COO^-	51,6	$\underline{CH_2=CH-COOH}$	70,4
CH_3COOH	56,7	$\underline{CH_2=CH-CN}$	70,6
CH_3-CN	56,5	$HC \equiv CH$	171,5

 Tabuľka 8.4.16. Shooleryho konštanty σ_s na výpočet chemických posunov protónov v substituovaných metánoch $X-CH_2-Y$

X,Y	σ_s	X,Y	σ_s
Cl	2,53	HO	2,56
Br	2,33	RO	2,36
I	1,82	C_6H_5O	3,23
CH_3	0,47	RS	1,64
$R_2C=CR$	1,32	RCOO	3,13
$R-C \equiv C$	1,44	ROCO	1,55
C_6H_5	1,83	RCO	1,70
R_2N	1,57	R_2NCO	1,59
CF_3	1,14	$N \equiv C$	1,70

Tabuľka 8.4.17. Inkrementy substituentov na výpočet chemických posunov protónov metylénových a metínových skupín

Substituent		Substituent	
C—C	0	RCOO	2,7
C=C	0,8	C ₆ H ₅ COO	2,9
C≡C	0,9	NH ₂	1,0
C ₆ H ₅	1,3	NR ₂	1,0
Cl	2,0	RS	1,0
Br	1,9	CHO	1,2
I	1,4	RCO	1,2
OH	1,7	COOH	0,8
RO	1,5	COOR	0,7
O ⁻	2,3	C≡N	1,2

Tabuľka 8.4.18. Chemické posuny protónov halogénalkánov a halogéncykloalkánov

R	X			
	F	Cl	Br	I
CH ₃	4,26	3,05	2,68	2,16
RCH ₂	4,35	4,40	3,31	3,14
R ₂ CH	-	4,02	4,10	4,20
C ₅ H ₉ (cyklo)	-	4,31	4,39	4,34
C ₆ H ₁₁ (cyklo)	-	3,89	4,11	4,34
CH ₂	5,45	5,33	4,94	3,90
CH	6,49	7,24	6,82	4,91
CH ₂ CH ₂		3,70	3,63	3,7
CH ₃ CH		5,80	5,86	
		2,10	2,47	

Tabuľka 8.4.19. Chemické posuny uhlíkových atómov ¹³C halogénmetánov

X	δ / ppm			
	CH ₃ X	CH ₂ X ₂	CHX ₃	CX ₄
F	75,2	109,0	116,4	118,5
Cl	24,9	54,0	77,5	96,5
Br	10,0	21,4	12,1	-28,7
I	20,7	-54,0	-139,9	-292,5

Tabuľka 8.4.20. Chemické posuny uhlíkových atómov ¹³C alkánov

Zlúčenina	Atóm	δ _c / ppm
CH ₄		-2,3
CH ₃ -CH ₃		8,4
CH ₃ CH ₂ CH ₃	C ¹	15,4
	C ²	15,9
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃	C ¹	13,0
	C ²	24,8
(CH ₃) ₃ CH	C ¹	24,3
	C ²	25,2
(CH ₃) ₄ C	C ¹	31,3
	C ²	27,7

Tabuľka 8.4.21. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C cykloalkánov

Zlúčenina	δ_c / ppm
Cyklopropán	-2,8
Cyklobután	23,1
Cyklopentán	26,3
Cyklohexán	27,8
Cykloheptán	28,8
Cykloooktán	27,8
Cyklononán	27,0
Cyklodekán	26,0

Tabuľka 8.4.22. Empirické parametre na výpočet chemických posunov uhlíkových atómov ^{13}C alkánov

n	A_n	m	α_{mn}	β_n	δ_n
1	6,8	2	9,56	-2,99	0,49
		3	17,83		
		4	25,48		
2	15,34	2	9,75	-2,69	0,25
		3	16,70		
		4	21,43		
3	23,46	2	6,60	-2,07	0
		3	11,14		
		4	14,70		
4	27,77	2	2,26	0,86	0
		3	2,96		
		4	7,35		

Tabuľka 8.4.23. Inkrementy substituentov na výpočet chemických posunov uhlíkových atómov ^{13}C alkánov

Substituent X	z_i / ppm			
	α	β	γ	δ
H	0,0	0,0	0,0	0,0
CH ₃ , CH ₂ , CH	9,1	9,4	-2,5	0,3
C=C	19,5	6,9	-2,1	0,3
C≡C	4,4	5,6	-3,4	-0,6
C ₆ H ₅	22,1	9,3	-2,6	0,3
F	70,1	7,8	-6,8	0,0
Cl	31,0	10,0	-5,1	-0,5
Br	18,9	11,0	-3,8	-0,7
I	-7,2	10,9	-1,5	-0,9
O	49,0	10,1	-6,2	0,0
O-CO	56,5	6,5	-6,0	0,0
NH ₂	28,3	11,3	-5,1	0,0
N ⁺ H ₃	26,0	7,5	-4,6	0,0
NO ₂	61,6	3,1	-4,6	-1,0
N≡C	31,5	7,6	-3,0	0,0
S	10,6	11,4	-3,6	-0,4
SO	31,1	9,0	-3,5	0,0
SCN	23,0	9,7	-3,0	0,0
CHO	29,9	-0,6	-2,7	0,0
CO	22,5	3,0	-3,0	0,0
COOH	20,1	2,0	-2,8	0,0
COO ⁻	24,5	3,5	-2,5	0,0
CON	22,0	2,6	-3,2	-0,4
COCl	33,1	2,3	-3,6	0,0
CN	3,1	2,4	-3,3	-0,5
N ⁺ R ₃	30,7	5,4	-7,2	-1,4

Tabuľka 8.4.24. Stérické korekčné faktory S

Pozorovaný ^{13}C	Počet nevodíkových substituentov na najviac rozvetvenom α -substituente			
	1	2	3	4
Primárny	0,0	0,0	-1,1	-3,4
Sekundárny	0,0	0,0	-2,5	-7,5
Terciárny	0,0	-3,7	-9,5	-15,0
Kvartérny	-1,5	-8,4	-15,0	-25,0

Tabuľka 8.4.25. Konformačné korekčné faktory K pre γ -substituenty

Konformácia	K
Synperiplanárna	-4,0
Synklinálna	-1,0
Antiklinálna	0,0
Antiperiplanárna	2,0
Voľne otáčavá	0,0

Tabuľka 8.4.26. Inkrementy na výpočet posunov ^{13}C NMR signálov substituovaných alkánov

Substituent X	δ / ppm		
	α	β	γ
H	0	0	0
CH_3	9	10	-2
SH	11	12	-6
NH_2	29	11	-5
Cl	31	11	-4
F	68	9	-4

Tabuľka 8.4.27. Empirické parametre na výpočet chemických posunov uhlíkových atómov ^{13}C substituovaných cyklohexánov

Poloha	A_i								
	CH_3	OH	OCH_3	OCOCH_3	NH_2	F	Cl	Br	I
α_a	1,4	39	47	42		61	33	28	11
α_e	6,0	43	52	46	24	64	33	25	3
β_a	5,4	5	2	3		3	7	8	9
β_e	9,0	8	4	5	10	6	11	12	13
γ_a	-6,4	-7	-7	-6		-7	-7	-6	-6
γ_e	0	-3	-3	-2	-2	-3	0	1	2
δ_a	0	-1	-1			-2	-1	-1	-1
δ_e	-0,2	-2	-2	-2	-1	-3	-2	-1	-2

Tabuľka 8.4.28. Inkrementy na výpočet chemických posunov protónov >C=CH- substituovaných alkénov

Substituent	Z _{gem}	Z _{cis}	Z _{trans}
H	0	0	0
Alkyl	0,45	-0,22	-0,28
Aryl	1,38	0,36	-0,07
CH ₂ -Hal	0,70	0,11	-0,04
CH ₂ -O	0,64	-0,01	-0,02
CH ₂ -N	0,58	-0,10	-0,08
CH ₂ -S	0,71	-0,13	-0,22
CH ₂ -CO	0,69	-0,08	-0,06
CH ₂ -C≡N	0,69	-0,08	-0,06
CHF ₂	0,66	0,32	0,21
CF ₃	0,66	0,61	0,32
>C=C<	1,00	-0,09	-0,23
-C=C-C=C-	1,24	0,02	-0,05
C≡C	0,47	0,38	0,12
F	1,54	-0,40	-1,02
Cl	1,08	0,18	0,13
Br	1,07	0,45	0,55
I	1,14	0,81	0,88
O-CH ₃	1,22	-1,07	-1,21
O-CH=CH	1,21	-0,60	-1,00
O-COR	2,11	-0,35	-0,64
N<	0,80	1,26	-1,21
NH-COR	2,08	-0,57	-0,72
SR	1,11	-0,29	-0,13
SO ₂ R	1,55	1,16	0,93
SCN	0,80	1,17	1,11
CHO	1,02	0,95	1,17
CO-CH ₂	1,10	1,12	0,87
CO-CH=CH	1,06	0,91	0,74
CH ₂ -COOH	0,97	1,41	0,71
CH=CH-COOH	0,80	0,98	0,32
CONR ₂	1,37	0,98	0,46
COCl	1,11	1,46	1,01
C≡N	0,27	0,75	0,55

Tabuľka 8.4.29. Inkrementy z_i a z'_i pre substituenty X a korekčné faktory K pri výpočte chemických posunov uhlíkových atómov alkénov

Substituent X	δ / ppm					
	z' _i			z _i		
	α	β	γ	α	β	γ
CH ₃ CH ₂ CH	7,9	-1,8	+1,5	+10,6	+7,2	-1,5
OH					6,0	
OR	-38,9	-1,0		+29,4	+2,0	
OCOCH ₃	-27,0			+18,0		
CHO	+13,1			+12,7		
COCH ₃	+ 5,8			+15,0		
COOH	+ 8,9			+ 4,2		
COOR	+ 7,0			+ 6,0		
Cl	- 6,0	+2,0		+ 3,0	-1,0	
Br	- 1,4	+2,0		- 7,9	0	
I	+ 7,0			- 38,1		
CN	+15,1			- 14,2		

C ₆ H ₅	- 11,0	+12,0
Substituenty v polohe		K
$\alpha\alpha'$ (trans)		0
$\alpha\alpha'$ (cis)		-1,1
$\alpha\alpha$		-4,8
$\alpha'\alpha'$		+2,5
$\beta\beta$		+2,3

Tabuľka 8.4.30 Inkreментy z_j substituentov na výpočet chemických posunov uhlíkových atómov ¹³C vinylových zlúčenín

Substituent X	δ / ppm	
	z_1	z_2
H	0,0	0,0
CH ₃	10,6	-7,9
CH ₃ CH ₂	15,5	-9,7
CH ₃ CH ₂ CH ₂	14,0	-8,2
(CH ₃) ₂ CH	20,4	-11,5
(CH ₃) ₃ C	25,3	-13,3
ClCH ₂	10,2	-6,0
BrCH ₂	10,9	-4,5
ICH ₂	14,2	-4,0
HOCH ₂	14,2	-8,4
CH ₂ =CH	13,6	-7,0
C ₆ H ₁₁ (cyklo)	12,5	-11,0
F	24,9	-34,3
Cl	2,6	-6,1
Br	-7,9	-1,4
I	-38,1	7,0
CH ₃ O	29,4	-38,9
CHO	13,1	12,7
CH ₃ CO	15,0	5,8
COOH	4,2	8,9
COOC ₂ H ₅	6,3	7,0
C≡N	-15,1	14,2

Tabuľka 8.4.31. Chemické posuny uhlíkových atómov ¹³C alkínov

Substituent X	δ / ppm	
	C ¹	C ²
H	71,9	71,9
CH ₃	79,2	66,9
C ₄ H ₉	83,0	66,0
C ₆ H ₅	84,6	78,3
CH ₂ OH	83,0	73,8

Tabuľka 8.4.32. Inkrementy na výpočet chemických posunov protónov substituovaných benzénov

Substituent X	$\sigma_s, \delta/\text{ppm}$		
	2-	3-	4-
H	0	0	0
CH ₃	-0,20	-0,12	-0,22
CH ₂ CH ₃	-0,14	-0,06	-0,17
CH(CH ₃) ₂	-0,13	-0,08	-0,18
C(CH ₃) ₃	0,02	-0,08	-0,21
CH ₂ Cl	0,00	0,00	0,00
CH ₂ OH	-0,07	-0,07	-0,07
CF ₃	0,32	0,14	0,20
CCl ₃	0,64	0,13	0,10
CH=CH ₂	0,06	-0,03	-0,10
C≡CH	0,15	-0,02	-0,01
C ₆ H ₅	0,37	0,20	0,10
F	-0,26	0,00	-0,20
Cl	0,03	-0,02	-0,09
Br	0,18	-0,08	-0,04
I	0,39	-0,21	0,00
OH	-0,56	-0,12	-0,45
OCH ₃	-0,48	-0,09	-0,44
C ₆ H ₅ O	-0,29	-0,05	-0,23
OCOCH ₃	-0,25	-0,03	-0,13
NH ₂	-0,75	-0,25	-0,65
NHCH ₃	-0,80	-0,22	-0,68
N(CH ₃) ₂	-0,66	-0,18	-0,67
NHCOCH ₃	0,12	-0,07	-0,28
NHNH ₂	-0,60	-0,08	-0,55
C ₆ H ₅ N=N	0,67	0,20	0,20
NO	0,58	0,31	0,37
NO ₂	0,95	0,26	0,38
SH	-0,08	-0,16	-0,22
SCH ₃	-0,08	-0,10	-0,24
C ₆ H ₅ S	-0,06	-0,09	-0,15
SO ₂ CH ₃	0,60	0,26	0,33
SO ₂ Cl	0,76	0,35	0,45
CHO	0,56	0,22	0,29
COCH ₃	0,62	0,14	0,21
C ₆ H ₅ CO	0,47	0,13	0,22
COOH	0,85	0,18	0,27
COOCH ₃	0,71	0,11	0,21
COO ⁻	0,90	0,17	0,27
CONH ₂	0,61	0,10	0,17
COCl	0,84	0,22	0,36
COBr	0,80	0,21	0,37
C ₆ H ₅ N=CH	0,60	0,20	0,20
C≡N	0,36	0,18	0,28

Tabuľka 8.4.33. Inkrementy substituentov na výpočet chemických posunov uhlíkových atómov ^{13}C monosubstituovaných benzénov

Substituent	δ / ppm			
	C_{ipso}	2-	3-	4-
X				
$\text{N}(\text{CH}_3)_2$	22,4	-15,7	0,8	-11,8
NHCH_3	21,7	-16,2	0,7	-11,8
NH_2	19,2	-12,4	1,3	-9,5
NHCOCH_3	11,1	-9,9	0,2	-5,6
OH	26,9	-12,7	1,4	-7,3
O^-	39,6	-8,2	1,9	-13,6
O-CH_3	30,2	-14,7	0,9	-8,1
$\text{C}_6\text{H}_5\text{O}$	29,1	-9,5	0,3	-5,3
OCOCH_3	23,0	-6,4	1,3	-2,3
$\text{C}_6\text{H}_5\text{N=N}$	24,0	-5,8	0,3	2,2
H	0,0	0,0	0,0	0,0
CH_3	9,3	0,6	0,0	-3,1
CH_2CH_3	15,7	-0,6	-0,1	-2,8
$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	20,1	-2,0	0,0	-2,5
$\text{C}(\text{CH}_3)_3$	22,1	-3,4	-0,4	-3,1
CH_2Cl	9,1	0,0	0,2	-0,2
CH_2Br	9,2	0,1	0,4	-0,3
CF_3	2,6	-3,1	0,4	3,4
CH_2OH	13,0	-1,4	0,0	-1,2
CH_2NH_2	14,9	-1,6	-0,2	-2,0
CH_2CN	1,6	-0,7	0,5	-0,7
$\text{CH}=\text{CH}_2$	7,6	-1,8	-1,8	-3,5
$\text{C}\equiv\text{CH}$	-6,1	3,8	0,4	-0,2
C_6H_5	13,0	-1,1	0,5	-1,0
F	35,1	-14,3	0,9	-4,4
Cl	6,4	0,2	1,0	-2,0
Br	-5,4	3,3	2,2	-1,0
I	-32,3	9,9	2,6	-0,4
$\text{N}^+\equiv\text{N}$	-12,7	6,0	5,7	16,0
NC	-1,8	-2,2	1,4	0,9
NCO	5,7	-3,6	1,2	-2,8
NO	37,4	-7,7	0,8	7,0
NO_2	19,6	-5,3	0,8	6,0
CHO	9,0	1,2	1,2	6,0
COCH_3	9,3	0,2	0,2	4,2
COOH	2,4	1,6	-0,1	4,8
COO^-	7,6	0,8	0,0	2,8
COOCH_3	2,1	1,2	0,0	4,4
CONH $_2$	5,4	-0,3	-0,9	5,0
COCl	4,6	2,9	0,6	7,0
CN	-16,0	3,5	0,7	4,3
SH	2,2	0,7	0,4	-3,1
SCH_3	9,9	-2,2	0,1	-3,7
$\text{SC}(\text{CH}_3)_3$	4,5	9,0	-0,3	0,0
SO_2Cl	15,6	-1,7	1,2	6,8
SO_3H	15,0	-2,2	1,3	3,8

Tabuľka 8.4.34. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C heterocyklických zlúčenín

Zlúčenina	Uhlíkové atómy	δ / ppm
Furán	C^2, C^5	143,0
	C^3, C^4	109,9
Pyrol	C^2, C^5	118,4
	C^3, C^8	108,0
Tiofén	C^2, C^5	124,9
	C^3, C^5	126,4
Pyridín	C^2, C^6	149,7
	C^3, C^5	123,6
	C^4	135,5
Pyrazol	C^3, C^5	133,3
	C^4	104,7
Imidazol	C^2	135,7
	C^4, C^5	121,8
1,2,3-Triazol	C^4, C^5	130,4
1,2,4-Triazol	C^3, C^5	147,6
Tetrazol	C^5	144,0
Pyridazín	C^3, C^6	151,7
	C^4, C^5	126,8
Pyrimidín	C^2	158,3
	C^4, C^6	156,7
	C^5	121,7
Pyrazín	$\text{C}^2, \text{C}^3, \text{C}^5, \text{C}^6$	145,2
<i>sym</i> -Triazín	$\text{C}^2, \text{C}^4, \text{C}^6$	166,8
<i>sym</i> -Tetrazín	C^3, C^6	161,2

Tabuľka 8.4.35. Inkrementy na výpočet chemických posunov uhlíkov ^{13}C substituovaných pyridínov

Substituent	z_i / ppm					
	2-X	2-	3-	4-	5-	6-
CH ₃		9,1	-1,0	-0,1	-3,4	-0,1
CH ₂ CH ₃		14,0	-2,1	0,1	-3,1	0,2
CH		3,5	-2,6	1,3	4,1	0,7
OH		14,9	-17,2	0,4	-3,1	-6,8
OCH ₃		15,3	-13,1	2,1	-7,5	-2,2
NH ₂		11,3	-14,7	2,3	-10,6	-0,9
F		14,4	-14,7	5,1	-2,7	-1,7
Cl		2,3	0,7	3,3	-1,2	0,6
Br		-6,7	4,8	3,3	-0,5	1,4
CHO		3,5	-2,6	1,3	4,1	0,7
COCH ₂		4,3	-2,8	0,7	3,0	-0,2
CN		-15,8	5,8	-1,7	3,6	1,9
NO ₂		8,0	-5,1	5,5	6,6	0,4
3-X	2-	3-	4-	5-	6-	
CH ₃		1,3	9,0	0,2	-0,8	-2,3
CH ₂ CH ₃		0,3	15,0	-1,5	-0,3	-1,8
OH		-10,7	31,4	-12,2	1,3	-8,6
NH ₂		-11,9	21,5	-14,2	0,9	-10,8
F		-11,5	36,2	-13,0	0,9	-3,9
Cl		-0,3	8,2	-0,2	0,7	-1,4
Br		2,1	-2,6	2,9	1,2	-0,9
I		7,1	-28,4	9,1	2,4	0,3
CHO		2,4	7,9	0,0	0,6	5,4
COCH ₃		0,5	-0,3	-3,7	-2,7	4,2
CONH ₂		2,7	6,0	1,3	1,3	-1,5
CN		3,6	-13,7	4,4	0,6	4,2
4-X	2-	3-	4-			
CH ₃		0,5	0,8	10,8		
CH ₂ CH ₃		0,0	-0,3	15,9		
CH(CH ₃) ₂		0,4	-1,8	21,4		
C(CH ₃) ₃		0,1	-3,4	23,4		
CH=CH ₂		0,3	-2,9	8,6		
NH ₂		0,9	-13,8	19,6		
F		2,7	-11,8	33,0		
Br		3,0	3,4	-3,0		
CHO		1,7	-0,6	5,5		
COCH ₃		1,6	-2,6	6,8		
CN		2,1	2,2	-15,7		

 Tabuľka 8.4.36. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C karbonylových skupín aldehydov a ketónov

R	δ / ppm	
	R - CHO	R - CO - CH ₃
H	-	199,7
CH ₃	199,7	206,0
CH ₂ CH ₃	201,8	207,6
CH(CH ₃) ₂	204,0	211,8
C(CH ₃) ₃	205,9	213,5
C ₆ H ₁₁ (cyklo)	201,8	209,4
CH=CH ₂	192,4	197,2
C ₆ H ₅	192,0	197,6
CH ₂ Cl	193,3	200,7
CCl ₃	175,9	186,3

Tabuľka 8.4.37. Chemické posuny uhlíkov ^{13}C alkoholov

Alkohol	δ / ppm				
	α	β	γ	δ	ϵ
Metanol	49,3				
Etanol	53,3	17,9			
1-Propanol	64,7	26,1	10,3		
2-Propanol	63,7	25,4			
1-Butanol	61,7	35,3	19,4		
2-Butanol	69,0	22,9 ^{C¹} 32,3 ^{C³}	10,2		
1-Pentanol	62,1	32,8	28,5	22,9	14,1
2-Pentanol	67,3	23,6 ^{C¹} 41,9 ^{C³}	19,4	14,3	
3-Pentanol	74,1	30,0	10,1		

Tabuľka 8.4.38. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C polyolov

Polyol	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5	C-6
Glycerol	66,9	76,4	66,9			
Erytritol	66,2	75,3	75,3	66,2		
Ribitol	65,5	75,4	75,6	75,4	65,5	
Xylitol	65,9	75,2	73,9	75,2	65,9	
D-Arabitol	66,5	73,6	74,0	74,5	66,2	
D-Mannitol	67,3	75,3	73,6	73,6	75,3	67,3
D-Sorbitol	65,8	74,5	72,9	74,3	76,1	66,1
Galaktitol	66,2	73,3	72,6	72,6	73,3	66,2

Tabuľka 8.4.39. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C monosacharidov

Monosacharid	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5	C-6	Ostatné
α -D-Ribopyranóza	96,25	72,75	71,95	70,00	65,70	-	-
β -D-Ribopyranóza	96,55	73,75	71,70	69,95	65,70	-	-
α -D-Ribofuranóza	99,00	73,70	72,75	85,75	64,10	-	-
β -D-Ribofuranóza	103,65	78,00	73,15	85,20	65,25	-	-
2-Deoxy- α -D-Ribopyranóza	91,65	35,15	64,65	67,50	62,85	-	-
2-Deoxy- β -D-Ribopyranóza	93,85	33,80	66,50	67,35	66,00	-	-
2-Deoxy- α -D-Ribofuranóza	91,65	41,15	70,95	85,30	61,55	-	-
2-Deoxy- β -D-Ribofuranóza	98,05	41,15	70,95	85,30	61,55	-	-
α -D-Arabinopyranóza	96,85	71,95	72,55	68,55	66,40	-	-
β -D-Arabinopyranóza	92,60	68,70	68,70	68,55	62,55	-	-
α -D-Arabinofuranóza	101,15	70,25	70,25	81,50	61,30	-	-
β -D-Arabinofuranóza	95,20	70,25	70,25	81,50	62,55	-	-
α -D-Xylopyranóza	92,30	71,6	73,0	69,6	61,1	-	-
β -D-Xylopyranóza	96,7	74,1	75,9	69,4	65,3	-	-
α -D-Lyxopyranóza	95,0	71,5	71,1	68,5	63,9	-	-
β -D-Lyxopyranóza	95,0	70,8	73,7	67,6	64,9	-	-
α -D-Allopyranóza	93,7	72,6	73,5	68,5	72,1	62,9	-
β -D-Allopyranóza	94,4	74,4	72,1	67,8	72,3	62,3	-
α -D-Glukopyranóza	93,9	73,1	74,4	71,2	72,9	62,4	-
β -D-Glukopyranóza	97,1	75,6	77,3	71,2	77,3	62,4	-
Metyl- α -D-glukopyranozid	100,5	73,1	74,8	71,4	72,8	62,3	56,8
Metyl- β -D-glukopyranozid	104,5	74,6	77,3	71,2	77,3	62,4	58,8
α -D-Mannopyranóza	94,5	71,2	70,8	67,5	72,9	61,6	-
β -D-Mannopyranóza	94,1	71,8	73,6	67,1	76,7	61,6	-
Metyl- α -D-mannopyranozid	101,9	71,7	71,0	67,9	73,6	62,1	56,2
Metyl- β -D-mannopyranozid	102,2	71,5	74,2	68,0	77,5	62,2	57,8
α -L-Rhamnopyranóza	94,9	71,9	70,8	73,2	69,2	17,8	-
β -L-Rhamnopyranóza	94,5	72,3	73,9	72,8	72,8	17,8	-
α -D-Galaktopyranóza	93,2	70,2	69,4	70,2	71,2	62,1	-
β -D-Galaktopyranóza	97,5	73,0	73,8	69,7	75,9	61,9	-
α -L-Fukopyranóza	93,2	70,4	69,2	72,8	67,0	16,6	-
β -L-Fukopyranóza	97,3	72,8	74,0	72,4	71,5	16,6	-
α -D-Talopyranóza	94,7	70,7	69,7	65,1	71,2	61,5	-
β -D-Talopyranóza	94,2	68,7	71,6	68,5	75,7	61,3	-
β -D-Talofuranóza	101,0	75,2	81,9	82,5	71,9	62,8	-
α -D-Psicopyranóza	85,9	98,7	71,2	66,4	66,7	58,8	-
β -D-Psicopyranóza	64,9	99,5	71,2	64,0	69,9	65,0	-
α -D-Psicofuranóza	64,1	104,4	71,2	72,6	83,7	62,2	-
β -D-Psicofuranóza	63,6	106,7	75,6	71,9	83,7	63,3	-
α -D-Fruktofuranóza	62,1	105,3	83,0	77,0	82,2	62,1	-
β -D-Fruktofuranóza	63,9	102,4	76,5	75,5	81,5	63,3	-
β -L-Fruktopyranóza	64,1	99,1	70,5	68,4	70,0	64,7	-
α -L-Sorbopyranóza	65,4	98,8	74,8	71,3	70,3	62,6	-
β -L-Sorbofuranóza	64,9	102,8	76,2	76,9	78,6	61,5	-
α -D-Tagatopyranóza	63,2	99,2	71,6	70,7	67,2	64,8	-
β -D-Tagatopyranóza	64,4	99,3	70,1	64,6	70,3	61,1	-
α -D-Tagatofuranóza	-	103,6	77,6	-	80,2	62,0	-
β -D-Tagatofuranóza	64,1	98,7	71,3	74,8	81,0	62,8	-

Tabuľka 8.4.40. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C di- a polysacharidov

Disacharid / Polysacharid	C-1'	C-2'	C-3'	C-4'	C-5'	C-6'	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5	C-6
α -Cellobióza	103,9	74,7	77,2	71,1	77,2	62,4	93,1	72,9	72,9	80,1	71,6	61,8
β -Cellobióza	103,9	74,7	77,2	71,1	77,2	62,4	97,1	75,7	76,1	80,1	75,7	61,8
α -Laktóza	104,0	72,2	73,9	69,8	76,3	62,1	93,0	72,6	74,0	79,9	72,5	61,4
β -Laktóza	104,0	72,2	73,9	69,8	76,3	62,1	97,0	75,2	75,9	79,9	75,6	61,4
α -Maltóza	100,9	73,8	73,8	70,7	73,0	61,9	93,2	72,6	71,1	78,9	74,3	61,9
β -Maltóza	101,0	74,3	74,6	71,0	73,4	62,5	97,1	75,7	77,8	78,5	76,1	62,5
α,β -Trehalóza	104,0	74,3	77,0	70,9	76,8	62,3	101,3	74,0	74,6	70,9	72,9	62,0
Sacharóza	93,1	73,4	73,9	70,5	72,2	61,6	63,4	104,7	82,5	78,0	75,4	62,9
Amylóza (rozpustný škrob)	100,7	78,2	74,3	72,5	72,2	61,6	-	-	-	-	-	-

 Tabuľka 8.4.41. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C karbonylových skupín karboxylových kyselín a ich derivátov

R	δ / ppm					
	RCOOH	RCOO ⁻	RCOCl	RCOOCH ₃	RCOOCOR	RCONH ₂
H	166,3	171,3		161,6		165,5
CH ₃	178,1	181,7	168,6	170,7	167,3	172,7
CH ₂ CH ₃	180,4	185,1	174,7	173,3	170,3	177,2
CH(CH ₃) ₂	184,1		178,0	175,7	172,8	
C(CH ₃) ₃	185,9	188,6	180,3	178,9	173,9	180,9
C ₆ H ₁₁ (cyklo)	182,1	185,4	176,3	175,3		
CH=CH ₂	171,3	179,3		165,5		168,3
C ₆ H ₅	172,6	175,6	168,0	166,8	162,8	169,7
CH ₂ Cl	173,8	174,7	167,7	167,8	162,1	
CHCl ₂	170,3	170,6	165,5			
CHCl ₃	167,1			161,0	154,1	

 Tabuľka 8.4.42. Chemické posuny uhlíkových atómov ^{13}C karbkatiónov

Katión	δ / ppm	Katión	δ / ppm
(CH ₃) ₂ C ⁺ H	317,8	H ₂ C ⁺ OH	222,0
(CH ₃) ₃ C ⁺	332,2	CH ₃ C ⁺ (OH) ₂	194,4
(C ₆ H ₅) ₂ C ⁺ H	198,4	HC ⁺ (OH) ₂	209,8
(C ₆ H ₅) ₃ C ⁺	210,9	C ⁺ (OH) ₃	220,8

Tab. 8.4.43.: Základné charakteristiky nuklidov v NMR spektroskopii

Atómové číslo	Atómová hmotnosť	Symbol	Názov prvku	Spin	Prirodzený výskyt (%)	Frekvencia	Quadropól. Moment	Receptivita
1	1	H	Vodík (prócium)	1/2	99,99	299,860		1,00
1	2	D	Deutérium	1	0,02	46,031	0,00273	1,4386E-06
1	3	T	Tritium	1/2		319,840		
2	3	He	Hélium	-1/2	0,00	228,426		
3	6	Li	Lítium	1	7,42	44,127	-0,0008	0,00062807
3	7	Li	Lítium	3/2	92,58	116,537	-0,045	0,270175439
4	9	Be	Berylium	-3/2	100,00	42,136	0,052	0,013824561
5	10	B	Bór	3	19,58	32,216	0,074	0,003859649
5	11	B	Bór	3/2	80,42	96,170	0,0355	0,132280702
6	13	C	Uhlík	1/2	1,11	75,407		0,000175439
7	14	N	Dusík	1	99,63	21,669	0,016	0,000998246
7	15	N	Dusík	-1/2	0,37	30,396		3,84211E-06
8	17	O	Kyslík	-5/2	0,04	37,653	-0,026	1,07193E-05
9	19	F	Fluór	1/2	100,00	282,127		0,829824561
10	21	Ne	Neón	-3/2	0,26	23,672	0,09	6,29825E-06
11	23	Na	Sodík	3/2	100,00	79,319	0,12	0,092105263
12	25	Mg	Horčík	-5/2	10,13	18,356	0,22	0,000270175
13	27	Al	Hliník	5/2	100,00	78,134	0,149	0,205263158
14	29	Si	Kremík	-1/2	4,70	59,574		0,000366667
15	31	P	Fosfor	1/2	100,00	121,386		0,066140351
16	33	S	Síra	3/2	0,76	23,017	-0,055	1,70702E-05
17	35	Cl	Chlór	3/2	75,53	29,380	-0,08	0,00354386
17	37	Cl	Chlór	3/2	24,47	24,456	-0,0632	0,000661404
18		Ar	Argón					
19	39	K	Draslík	3/2	93,10	13,993	0,055	0,00047193
19	41	K	Draslík	3/2	6,88	7,680	0,067	5,75439E-06

20	43	Ca	<i>Vápnik</i>	-7/2	0,15	20,179	-0,05	9,24561E-06
21	45	Sc	<i>Skandium</i>	7/2	100,00	72,841	-0,22	0,3
22	47	Ti	<i>Titán</i>	-5/2	7,28	16,909	0,29	0,000151579
22	49	Ti	<i>Titán</i>	-7/2	5,51	16,905	0,24	0,000207018
23	50	V	<i>Vanád</i>	6	0,24	29,897	0,21	0,000132456
23	51	V	<i>Vanád</i>	7/2	99,76	75,873	-0,052	0,378947368
24	53	Cr	<i>Chróm</i>	-3/2	9,55	16,949	±0.03	8,59649E-05
25	55	Mn	<i>Mangán</i>	5/2	100,00	74,200	0,55	0,174385965
26	57	Fe	<i>Železo</i>	1/2	2,19	9,709		7,36842E-07
27	59	Co	<i>Kobalt</i>	7/2	100,00	71,148	0,4	0,275438596
28	61	Ni	<i>Nikel</i>	-3/2	1,19	26,796		4,21053E-05
29	63	Cu	<i>Med'</i>	3/2	69,09	79,547	-0,211	0,064035088
29	65	Cu	<i>Med'</i>	3/2	30,91	85,212	-0,195	0,035263158
30	67	Zn	<i>Zinok</i>	5/2	4,11	18,761	0,15	0,000116667
31	69	Ga	<i>Gálium</i>	3/2	60,40	71,971	0,178	0,041578947
31	71	Ga	<i>Gálium</i>	3/2	39,60	91,447	0,112	0,055964912
32	73	Ge	<i>Germánium</i>	-9/2	7,76	10,460	-0,22	0,000108246
33	75	As	<i>Arzén</i>	3/2	100,00	51,344	0,29	0,025087719
34	77	Se	<i>Selén</i>	1/2	7,58	57,188		0,000522807
35	79	Br	<i>Bróm</i>	3/2	50,54	75,128	0,33	0,039649123
35	81	Br	<i>Bróm</i>	3/2	49,46	80,983	0,28	0,048596491
36	83	Kr	<i>Kryptón</i>	-9/2	11,55	11,539	0,23	0,000215789
37	85	Rb	<i>Rubídium</i>	5/2	72,15	28,952	0,25	0,00754386
37	87	Rb	<i>Rubídium</i>	3/2	27,85	98,118	0,12	0,048596491
38	87	Sr	<i>Stroncium</i>	-9/2	7,02	12,996	0,36	0,000187719
39	89	Y	<i>Ytrium</i>	-1/2	100,00	14,694		0,000117193
40	91	Zr	<i>Zirkónium</i>	-5/2	11,23	27,876		0,001059649
41	93	Nb	<i>Niób</i>	9/2	100,00	73,394	-0,22	0,480701754
42	95	Mo	<i>Molybdén</i>	5/2	15,72	19,542	0,12	0,000505263
42	97	Mo	<i>Molybdén</i>	-5/2	9,46	19,951	1,1	0,000322807

43	99	Tc	<i>Technécium</i>	9/2		67,493	0,3	0,374385965
44	99	Ru	<i>Ruténium</i>	-5/2	12,72	13,809	0,076	0,000145614
44	101	Ru	<i>Ruténium</i>	-5/2	17,07	15,477	0,44	0,000273684
45	103	Rh	<i>Ródium</i>	-1/2	100,00	9,476		3,10526E-05
46	105	Pd	<i>Paládium</i>	-5/2	22,23	13,722	0,8	0,000247368
47	107	Ag	<i>Striebro</i>	-1/2	51,82	12,138		3,42105E-05
47	109	Ag	<i>Striebro</i>	-1/2	48,18	13,954		4,84211E-05
48	111	Cd	<i>Kadmium</i>	-1/2	12,75	63,573		0,001215789
48	113	Cd	<i>Kadmium</i>	-1/2	12,26	66,503		0,001333333
49	113	In	<i>Indium</i>	9/2	4,28	65,567	1,14	0,014701754
49	115	In	<i>Indium</i>	9/2	95,72	65,707	0,83	0,331578947
50	115	Sn	<i>Cín</i>	-1/2	0,35			
50	117	Sn	<i>Cín</i>	-1/2	7,60	106,847		0,00342807
50	119	Sn	<i>Cín</i>	-1/2	8,60	111,820		0,004421053
51	121	Sb	<i>Antimón</i>	5/2	57,25	71,758	-0,53	0,09122807
51	123	Sb	<i>Antimón</i>	7/2	42,75	38,859	-0,68	0,019473684
52	123	Te	<i>Telúr</i>	-1/2	0,87	94,605		0,00015614
52	125	Te	<i>Telúr</i>	-1/2	6,99	78,473		0,002192982
53	127	I	<i>Jód</i>	5/2	100,00	59,998	-0,79	0,092982456
54	129	Xe	<i>Xenón</i>	-1/2	26,44	82,936		0,005578947
54	131	Xe	<i>Xenón</i>	3/2	21,18	24,587	-0,12	0,000580702
55	133	Cs	<i>Cézium</i>	7/2	100,00	39,330	-0,003	0,047192982
56	135	Ba	<i>Bárium</i>	3/2	6,59	29,789	0,18	0,000315789
56	137	Ba	<i>Bárium</i>	3/2	11,32	33,323	0,28	0,000773684
57	139	La	<i>Lantán</i>	7/2	99,91	42,357	0,21	0,058947368
72	177	Hf	<i>Hafnium</i>	7/2	18,50	9,357	4,5	0,000154386
72	179	Hf	<i>Hafnium</i>	-9/2	13,75	5,607	5,1	4,73684E-05
73	181	Ta	<i>Tantal</i>	7/2	99,99	35,952	3	0,035789474
74	183	W	<i>Volfrám</i>	1/2	14,40	12,493		1,03333E-05
75	185	Re	<i>Rénium</i>	5/2	37,07	67,542	2,8	0,049122807

75	187	Re	<i>Rénium</i>	5/2	62,93	68,223	2,6	0,085964912
76	187	Os	<i>Osmium</i>	1/2	1,64	6,844		0,0000002
76	189	Os	<i>Osmium</i>	3/2	16,10	23,285	0,8	0,000373684
77	191	Ir	<i>Iridium</i>	3/2	37,30	5,155	1,5	4,03509E-06
77	193	Ir	<i>Iridium</i>	3/2	62,70	5,612	1,4	8,77193E-06
78	195	Pt	<i>Platina</i>	1/2	33,80	64,467		0,003350877
79	197	Au	<i>Zlato</i>	3/2	100,00	5,135	0,58	1,05263E-05
80	199	Hg	<i>Ortuť</i>	1/2	16,84	53,707		0,000950877
80	201	Hg	<i>Ortuť</i>	-3/2	13,22	19,791	0,45	0,000189474
81	203	Tl	<i>Tálium</i>	1/2	29,50	171,591		0,050701754
81	205	Tl	<i>Tálium</i>	1/2	70,50	173,278		0,134912281
82	207	Pb	<i>Olovo</i>	1/2	22,60	62,545		0,002070175
83	209	Bi	<i>Bizmut</i>	9/2	100,00	48,185	-0,34	0,136315789
84		Po	<i>Polónium</i>					
85		At	<i>Astát</i>					
86		Rn	<i>Radón</i>					
87		Fr	<i>Francium</i>					
88		Ra	<i>Rádium</i>					
89		Ac	<i>Aktínium</i>					
Lantanidy								
58		Ce	<i>Cér</i>					
59	141	Pr	<i>Prazeodým</i>	5/2	100,00	87,832		0,298245614
60	143	Nd	<i>Neodým</i>	-7/2	12,17	16,305	-0,5	0,000403509
60	145	Nd	<i>Neodým</i>	-7/2	8,30	10,032	-0,3	6,49123E-05
61		Pm	<i>Prométeum</i>					
62	147	Sm	<i>Samárium</i>	-7/2	14,97	12,078	-0,2	2,21053E-05
62	149	Sm	<i>Samárium</i>	-7/2	13,83	9,862	0,058	0,000103509
63	151	Eu	<i>Európium</i>	5/2	47,82	74,367	0,95	0,084210526
63	153	Eu	<i>Európium</i>	5/2	52,18	32,839	2,42	0,007894737
64	155	Gd	<i>Gadolínium</i>	-3/2	14,73	11,453	1,3	3,50877E-05

64	157	Gd	<i>Gadolínium</i>	-3/2	15,68	14,317	1,5	8,42105E-05
65	159	Tb	<i>Terbium</i>	3/2	100,00	68,004	1,3	0,057894737
66	161	Dy	<i>Dyspróziu</i>	-5/2	18,88	9,879	2,3	7,89474E-05
66	163	Dy	<i>Dyspróziu</i>	5/2	24,97	13,744	2,5	0,000280702
67	165	Ho	<i>Holmium</i>	7/2	100,00	61,510	3	0,175438596
68	167	Er	<i>Erbium</i>	-7/2	22,94	8,666	2,8	0,000115789
69	169	Tm	<i>Túlium</i>	-1/2	100,00	24,803		0,000561404
70	171	Yb	<i>Ytterbium</i>	1/2	14,31	52,814		0,000710526
70	173	Yb	<i>Ytterbium</i>	-5/2	16,13	14,551	3	0,0002
71	175	Lu	<i>Lutécium</i>	7/2	97,41	34,207	5,6	0,027368421
71	176	Lu	<i>Lutécium</i>	7	2,59	23,776	8,1	0,000901754
Aktinidy								
90		Th	<i>Tórium</i>					
91		Pa	<i>Protaktínium</i>					
92	235	U	<i>Urán</i>	-7/2		5,369	4,1	
93		Np	<i>Neptún</i>					
94	239	Pu	<i>Plutónium</i>	1/2		$\mu=0.200$		
95	243	Am	<i>Americium</i>	5/2		$\mu=1.4$	4,9	
96		Cm	<i>Curium</i>					
97		Bk	<i>Berkelium</i>					
98		Cf	<i>Californium</i>					
99		Es	<i>Einsteinium</i>					
100		Fm	<i>Fermium</i>					
101		Md	<i>Mendelevium</i>					
102		No	<i>Nobelium</i>					
103		Lw	<i>Lawrencium</i>					

Tabuľka 8.4.44. Chemické posuny vybraných zlúčenín kremíka v ^{29}Si NMR spektroskopii

Zlúčenina	Chemický posun	Zlúčenina	Chemický posun
Me_3SiCl	29,5	Me_4Si	0,0
Me_2SiCl_2	32,0	$\text{Me}_3\text{Si}(\text{OMe})$	17,2
MeSiCl_3	12,1	$\text{Me}_2\text{Si}(\text{OMe})_2$	- 2,5
SiCl_4	- 18,5	$\text{MeSi}(\text{OMe})_3$	- 41,1
$\text{Et}_3\text{PNSiMe}_3$	- 15,73	$\text{Si}(\text{OMe})_4$	- 79,2
$\text{Et}_3\text{PNSiCl}_3$	- 54,35	$\text{Et}_3\text{PNSiMe}_2\text{Cl}$	- 7,87
$\text{Et}_3\text{PNSi}(\text{OMe})_3$	- 69,94	$\text{Et}_3\text{PNSiMeMeCl}_2$	- 25,29

Tabuľka 8.4.45. Chemické posuny vybraných zlúčenín dusíka v ^{15}N NMR spektroskopii

Zlúčenina	Chemický posun	Zlúčenina	Chemický posun
Amíny primárne	-10 - 70	nitro-	310 - 420
sekundárne	10 - 90	nitrózo-	530 - 620
terciárne	20 - 100		800 - 930
Amidy primárne	110 - 130	nitrity	580 - 620
sekundárne	110 - 160	hydrazóny	150 - 185, 320 - 340
terciárne	80 - 125	aminokyseliny (zvit.)	30 - 60
Imidy	70 - 85	enamíny	35 - 110
Izonitrily	150 - 210	prim.alif.amón.ióny	20 - 65
Nitrily	220 - 280	sek.alif.amón.ióny	25 - 80
Diazónium $-\text{C}-\text{N}\equiv\text{N}^+$	310 - 325	terc.alif.amón.ióny	30 - 120
$-\text{C}-\text{N}\equiv\text{N}^+$	215 - 235	anilínium	35 - 70
Diazo $=\text{N}=\text{N}$	225 - 310	oxímy	370 - 415
$=\text{N}=\text{N}$	320 - 440	guanidíny	25 - 70, 170 - 220
Azoxy	330 - 370	močoviny,	
Azo	490 - 560	karbamáty, Laktámy	70 - 130
Pyridíny	225 - 330	tiomočoviny	85 - 120
Pyridíniové dusíky	245 - 540	tioamidy	130 - 165
Indoly, pyroly	120 - 170	nitramíny	160 - 200, 330 - 370
Pyrolové dusíky	165 - 260	piperidíny a	
Triazény	150 - 170, 360 - 380	hydrochinolíny	30 - 90
	440 - 470	aminofosfíny	60 - 110

 Tabuľka 8.4.46. Interakčné konštanty $^1J_{\text{N-H}}$ a $^2J_{\text{N-H}}$

Zlúčenina	Interakčné konštanty $^1J_{15\text{N-H}}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $^2J_{15\text{N-H}}$
R_2NH	- (61.2 - 67)	H-CN	8.7
$\text{R}_2\text{N}^+\text{H}_2$	- (73.3 - 76)	R-CH=N ⁺ =N	0.1 - 0.2
Ar-NH ₂	- (76 - 93)	H-C-N-	- (0.6 - 1.0)
Ar-NHR	- 87	Pyroly	- 4.5
Ar-NHNH ₂	- (90 - 100)	Pyridíny	- (10 - 12)
RNH-CHO	- (88 - 93)	H-C=N-OH	- (14 ± 13)
Pyrol. NH	- (96 - 98)	>N-CHO	- 15
R-CN ⁺ H	- (134 - 136)		
Ar-CN ⁺ H	- (134 - 136)		

 Tabuľka 8.4.47. Interakčné konštanty $^1J_{\text{N-C}}$

Zlúčenina	Interakčné konštanty $^1J_{15\text{N-13C}}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $^1J_{15\text{N-13C}}$
Pr-NH ₂	- 3.9	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-NH}_2$	- 11.4
Pr-NH ₃ ⁺	- 4.4	4-MeO-C ₆ H ₄ -NH ₂	- 11.0
H ₃ C-NO ₂	- 10.5	4-Cl-C ₆ H ₄ -NH ₂	- 12.5
H ₃ C-NH ₂	- 4.5	4-O ₂ N-C ₆ H ₄ -NH ₂	- 14.7
H ₃ C-CN	- 17.5	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-NH}_3^+$	- 8.9
Me ₃ C-CN	- 15.0	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-NO}_2$	- 14.6
H ₂ C-C≡N	- 20.2	H ₃ C-CH=N-OH (E-)	- 4.0
Pyridín	0.6	(Z-)	- 2.3
Pyridínium	- 11.9	Ph-CH=N-CH ₃	7.1
Pyridínium N-oxid	- 15.2	H ₂ N-CO-NH ₂	- 20.2

Tabuľka 8.4.48. Chemické posuny fosforových atómov ^{31}P niektorých organických zlúčenín fosforu

Zlúčenina	δ / ppm	Zlúčenina	δ / ppm
CH_3PH_2	164	$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{P}=\text{O}$	-48
$(\text{CH}_3)_2\text{PH}$	99	$(\text{CH}_3\text{O})_3\text{P}=\text{O}$	-2
$(\text{CH}_3)_3\text{P}$	62	$(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{P}=\text{O}$	1
$(\text{CH}_3)_2\text{PCl}$	94	$(\text{terc-C}_4\text{H}_9\text{O})_3\text{P}=\text{O}$	14
CH_3PCl_2	-191	$(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})_3\text{P}=\text{O}$	18
$(\text{CH}_3)_2\text{POCH}_3$	-201	$(\text{C}_2\text{H}_5\text{S})_3\text{P}=\text{O}$	61
$(\text{CH}_3\text{O})_3\text{P}$	-141	$(\text{C}_4\text{H}_9\text{S})_3\text{P}=\text{O}$	-43
$(\text{CH}_3\text{S})_3\text{P}$	-125	$(\text{CH}_3)_3\text{P}=\text{S}$	-73
$\text{C}_6\text{H}_5\text{PH}_2$	122	$(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{P}=\text{S}$	-77
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{PH}$	41	$(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})_3\text{P}=\text{S}$	-53
$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{P}$	6	$(\text{C}_2\text{H}_5\text{S})_3\text{P}=\text{S}$	-54
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{PCl}$	-81	$(\text{C}_6\text{H}_5\text{S})_3\text{P}=\text{S}$	-92
$(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})_3\text{P}$	-127	$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{P}=\text{S}$	-17
$(\text{C}_6\text{H}_5\text{S})_3\text{P}$	-132	$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{P}=\text{S}$	-42
$(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{P}$	71	$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{P}=\text{CH}_2$	-24
$(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})_3\text{P}$	89	$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{P}=\text{CH}_2$	-20
PX_3	65 - 118	POX_3	- 110 - -205
$(\text{R}_2\text{N})_3\text{P}$	130 - 150	$(\text{PhO})_3\text{P}=\text{O}$	- 125 - -130
R_3P	- 145 - -185	$(\text{RO})_3\text{P}=\text{O}$	- 110 - -115
$(\text{Me}_3\text{Si})_3\text{P}$	- 240 - -260	$(\text{R}_2\text{N})_3\text{P}=\text{O}$	- 85 - -92
P_4	- 440 - -460	$\text{RP}(\text{O})(\text{OH})_2$	- 78 - -90
RPX_2	200 - 270	$\text{RP}(\text{O})(\text{OR})_2$	- 77 - -87
R_2PX	100 - 200	$(\text{PhO})_3\text{P}=\text{S}$	- 58 - -62
H_3PO_4	0,0	$(\text{RS})_3\text{P}=\text{O}$	- 50 - -53
R_3PO	10 - 70	$(\text{RO})_3\text{P}=\text{S}$	- 40 - -48
PX_5	- 60 - -80	Ph_3P	- 117 - -122
PCl_4^+	100 - 120	$(\text{RS})_3\text{P}$	2 - 8
PO_4^{3-}	15 - 35	$(\text{PhO})_3\text{P}$	12 - 15
PF_6^-	- 120 - -140	$(\text{RO})_3\text{P}$	24 - 30
PCl_6^-	- 290 - -310	$\text{RP}(\text{OR})_2$	66 - 72
PMe_3	- 62	PMeF_2	245
PEt_3	- 20	PMeH_2	- 163,5
PPrn_3	- 33	PMeCl_2	192
PPr_3^i	19,4	PMeBr_2	184
PBu_3^n	- 32,5	PMe_2F	186
PBu_3^i	- 45,3	PMe_2H	- 99
PBu_3^s	7,9	PMe_2Cl	96,5
PBu_3^t	63	PMe_2Br	90,5
P (V) zlúčeniny			
Me_3PO	36,2	Me_3PS	59,1
Et_3PO	48,3	Et_3PS	54,5
Me_4P^+	24,4	Et_4P^+	40,1
PO_4^{3-}	6,0	PS_4^{3-}	87
PF_5	- 80,3	PF_6^-	- 145
PCl_5	- 80	PCl_4^+	86
MePF_4	- 29,9	PCl_6^-	- 295
Me_3PF_2	- 158	Me_2PF_3	8,0

Tabuľka 8.4.49. Interakčné konštanty J_{P-H} a J_{P-C}

Zlúčenina	Interakčné konštanty J_{31P-H}	Zlúčenina	Interakčné konštanty $J_{31P-13C}$
- P - X - H	- 6 - 25	Me ₃ P	- 13,6
PH ₃	179	Ph ₃ P	- 12,5
R ₂ PH	179 - 210	Me ₃ PO	68,3
H ₂ P-PH ₂	186	Ph ₃ PO	104,4
(RO) ₂ HP-	515 - 695	Ph ₃ P=CH ₂	83,6, 100
R ₃ P ⁺ H	~ 525	Ph ₃ P=CMe ₂	81,2, 121,5
MePO(OMe) ₂	142,2	Ph ₃ P=CH-COOMe	91,9, 126,7
		Ph ₃ P ⁺ =CH ₃ I	57,1

Tabuľka 8.4.50. Inkrementy pre výpočet chemických posunov atómov fosforu ³¹P substituovaných alkylfosfinov

R	x _i	R	x _i
CH ₃	0	Ph	+18
CH ₃ CH ₂	+14	Ph-CH ₂	+17
(CH ₃) ₂ CH	+27	CN	- 24

Tabuľka 8.4.51. Chemické posuny vybraných zlúčenín kyslíka v ¹⁷O NMR spektroskopii

Zlúčenina	Chemický posun	Zlúčenina	Chemický posun
Alkoholy prim.	- 40 - 30	ketóny	550 - 575
sek.	40 - 60	aldehydy	575 - 600
terc.	65 - 85	nitro-	590 - 620
Étery	- 30 - 25	dusitany	650 - 670
Estery (C-O)	125 - 180	dusičnany	410 - 430
(C=O)	350 - 375	- <u>Q</u> - N = O	440 - 460
Karboxylové kyseliny	235 - 260	- O - N = <u>Q</u>	700 - 720
Karbonyly	340 - 410	siričitany	230 - 250
Chloridy kyselín	500 - 530	sírany	170 - 185
Amidy	270 - 330	dióxán	12
Anhydridy	240 - 260	H ₃ PO ₃	105 - 125
	380 - 395	H ₃ PO ₄	70 - 85

Tabuľka 8.4.52. Chemické posuny vybraných zlúčenín fluóru v ^{19}F NMR spektroskopii

Zlúčenina	Chemický posun	Zlúčenina	Chemický posun
>CHF	- 205 - - 235	CFCl ₃	0,0
-CHF ₂	- 137 - -145	CF ₂ Br ₂	7
-CF ₂ -O-	- 78 - -92	CFBr ₃	7,4
CF ₃ -C	- 62 - -80	CF ₃ CCl ₃	- 82,2
CF ₃ -S-	- 40 - -45	C ₄ H ₈	- 135,1
F-CO-	30 - 11	C ₆ F ₁₂	- 133,2
F-SO ₂ -	77 - 37	PhF	- 113
>CF ₂ CF ₂	- 190 - - 205	Ar-F	- 125 - -170
-CF(CF ₃) ₂	- 180 - - 195	C ₆ F ₆	- 163
>CF-CF ₃	- 165 - - 205	PhCH ₂ F	- 207
CF ₃ -CF ₂ -	- 83 - -92	PhCF ₃	- 64
CF ₃ -CH ₂ -	- 80 - -90	BeF ₄ ⁻	- 163
CF ₃ -CF<	- 70 - 82	FBCl ₂	- 32
-CHECF ₂	- 185	BF ₃	- 131
-CF ₂ -CH ₂ -	- 125 - -135	SiF ₆ ²⁻	- 127
-CF ₂ -CF ₂ -	- 122 - -135	FSiH ₂	- 151
-CF ₂ -CO-	- 122 - -135	FPOMe	- 52
-O-CF ₂ -CF ₃	- 92 - -98	AsF ₅	- 66
-O-CHF-CF ₃	- 155 - -160	AsF ₆ ⁻	- 69,5
-CF=CF ₂	- 160 - -200	SbF ₅	- 108
-CF ₂ =CF-	- 87 - -132	SbF ₆ ⁻	- 109
-CF=CF-	- 137 - -163	SeF ₆	55
C ₂ H ₅ F	- 213	TeF ₆	- 57
CHF ₂ CHF ₂	- 137	MoF ₆	- 278
CF ₃ COOH (interne)	- 76,5	WF ₆	166
CF ₃ COOH (externe)	- 78,9	ClF ₃	116; - 4
CF ₂ =CH ₂	- 81,3	ClF ₅	247; 412
CF ₂ =CF ₂	- 135	IF ₇	170
CHF=CH ₂	- 114	ReF ₇	345
CH ₃ F	- 271,9	XeF ₂	258
CH ₂ F ₂	- 1436	XeF ₄	438
CF ₂ Cl ₂	- 8	XeF ₆	550

 Tabuľka 8.4.53. Interakčné konštanty $J_{\text{F-H}}$

Zlúčenina	Interakčné konštanty $J_{19\text{F-H}}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $J_{19\text{F-H}}$
CHF	45 - 80	H-C ₆ H ₄ -F orto	6 - 10
H-C-C-F	5 - 30	meta	6 - 8
HFC=	72 - 90	para	~ 2
H-C=C-F cis	- 3 - 20	1,3-F ₂ C ₆ H ₃ - 2,3-	9,1 - 10,5
trans	12 - 52	2,4-	5,9 - 6,6
		2,5-	- 0,85 - - 1,90

 Tabuľka 8.4.54. Interakčné konštanty $J_{\text{F-F}}$

Zlúčenina	Interakčné konštanty $J_{19\text{F-19F}}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $J_{19\text{F-19F}}$
CF ₂	150 - 220	F ₂ C ₆ H ₄ orto	20
F-C-C-F	0 - 20	meta	2 - 5
F ₂ C=	25 - 105	para	10 - 15
F-C=C-F cis	30 - 70	F ₅ C ₆ - orto	- 18 - - 22
trans	105 - 125	meta	- 10 - 10
		para	- 4 - 8

Tabuľka 8.4.55. Interakčné konštanty $^1J_{F-C}$

Zlúčenina	Interakčné konštanty $^1J_{19F-13C}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $^1J_{19F-13C}$
F-CO-	240 - 370	CF	155 - 170
HFC=O	- 369	CF ₂	~ 230
F-CO-CO-Cl	- 376,5	CF ₃ -X	260 - 350
FC=	300 - 376	CH ₃ F	- 161,9
F ₂ C=	285 - 290	CH ₂ F ₂	- 234,8
F ₂ C=Se	- 408	CHF ₃	- 274,3
CHCl=CClF Z-	- 300,0	CF ₄	- 259,2
E-	- 306,2	CF ₃ Cl	- 299
CCl ₂ =CClF	- 303,1	CF ₃ Br	- 324
CBr ₂ =CBrF	- 323,6	CF ₃ I	- 345
CBr ₂ =CF ₂	- 289,9	CF ₃ CH ₃	- 271
CD ₂ =CF ₂	287	CF ₂ Cl ₂	- 325
F-Ph	- 245,1	CF ₂ Br ₂	- 352
C ₆ F ₆	- 260	CHF ₂ -CH ₂ OH	- 241
2-O ₂ N-C ₆ H ₄ -F	- 264,4	CHF ₂ -COOEt	- 245
3-O ₂ N-C ₆ H ₄ -F	- 250,9	CHF ₂ -CN	- 244
4-O ₂ N-C ₆ H ₄ -F	- 256,6	CH ₂ F-COOH	- 181
2-H ₂ N-C ₆ H ₄ -F	- 236,7	CF ₃ -COOH	- 283,2
3-H ₂ N-C ₆ H ₄ -F	- 241,4	CFHCl ₂	- 293,8
4-H ₂ N-C ₆ H ₄ -F	- 233,2	CFCl ₃	- 337
2-F-Pyridín	- 236,3	CFBr ₃	- 372
3-F-Pyridín	- 255,1	H ₃ C-CH ₂ -CH ₂ -F	- 163,3
4-F-Pyridín	261,8	Ph-CH ₂ F	- 165
cyHe-F	- 170	Ph-CF ₃	- 272
cyPe-F	- 173,5	1-F-Naftalén	- 251,2
cyBu-F	- 214,6	2-F-Naftalén	- 246,0

Tabuľka 8.4.56. Interakčné konštanty $^2J_{F-C}$

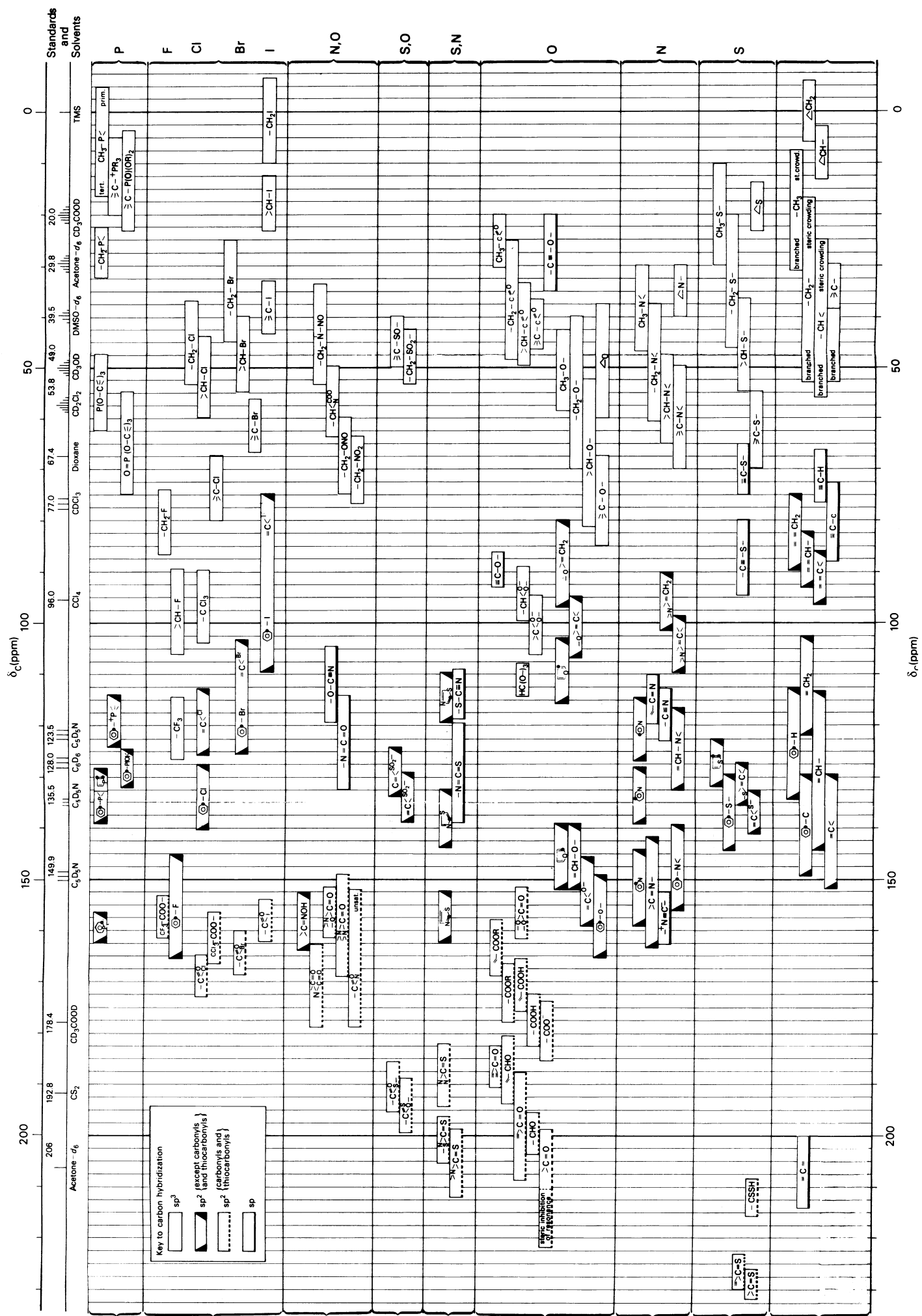
Zlúčenina	Interakčné konštanty $^2J_{19F-13C}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $^2J_{19F-13C}$
F-C-C	20 - 61	CHF=CHF Z-	5,9
H ₃ C-CH ₂ -CH ₂ -F	19,5	CFBr=CFBr Z-	35,8
Me ₂ CH-F	22,4	E-	102,5
Cl ₃ C-CF ₃	- 43,1	CFCl=CHCl E-	20,0
CF ₃ -COOH	43,6	Z-	53,0
CF ₃ -CN	58	C ₆ H ₅ -F	21,0
F ₃ C-CÀC-CF ₃	- 57,2	H ₃ C-C ₆ H ₄ -F	21,1
H ₃ C-COF	59,7	O ₂ N-C ₆ H ₄ -F	24,0
Ph-COF	61,0	2-F-Pyridín	37,6
F-CO-CO-F	103,2	4-F-Pyridín	16,1

Tabuľka 8.4.57. Interakčné konštanty $^3J_{F-C}$

Zlúčenina	Interakčné konštanty $^3J_{19F-13C}$	Zlúčenina	Interakčné konštanty $^3J_{19F-13C}$
H ₃ C-CH ₂ -CH ₂ -F	6,7	cyPe-F	< 1,5
cyHe-F	5	cyBu-F	19,1

Tabuľka 8.4.58. Najčastejšie používané posunové činidlá v NMR spektrometrii

Názov diketónu	Skratka	R	R'	Kov
2,2,6,6-Tetrametyl-3,5-heptándión	DPM, TMHD	$C(CH_3)_3$	$C(CH_3)_3$	Eu, Dy, Gd, Ho, La, Pr, Yb
6,6,7,7,8,8,8-Heptafluór-2,2-dimetyl-3,5-oktándión	FOD	$C(CH_3)_3$	$(CF_2)_2-CF_3$	Ag, Dy, Er, Eu, Ho, Pr, Yb
1-Metyl-3-fenyl-1,3-propándión	BAT	C_6H_5	CH_3	
1,1,1,2,2,6,6,7,7-Dekafluór-3,5-heptándión	FHD	CF_2-CF_3	CF_2-CF_3	
2,2-Dimetyl-6,6,6-trifluór-3,5-heptándión	PTA	$C(CH_3)_3$	CF_3	
2,4-Pentándión	-	CH_3	CH_3	Cr, Ni
3-Heptafluórpropylhydroxy-metylén-(+)/(-)-gáfor				Eu
3-Trifluórmetylhydroxymetylén-(+)/(-)-gáfor				Eu



¹³C NMR chemické posuny vybraných skupin organických zlúčenín

NMR Periodic Table

IA		IIA		IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		Inert Gases			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H 1.00	2 He 4.002602	3 Li 6.941	4 Be 9.012182	5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180	11 Na 22.990	12 Mg 24.305	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.06	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.88	23 V 50.942	24 Cr 52.004	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.63	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc 98.906	44 Ru 101.07	45 Rh 102.905	46 Pd 106.365	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.6	53 I 126.905	54 Xe 131.29
55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57 La 138.905	58 Ce 140.12	59 Pr 140.908	60 Nd 144.242	61 Pm 144.913	62 Sm 150.36	63 Eu 151.964	64 Gd 157.25	65 Tb 158.925	66 Dy 162.50	67 Ho 164.930	68 Er 167.259	69 Tm 168.934	70 Yb 173.054	71 Lu 174.967	72 Hf 178.49
87 Fr 223	88 Ra 226	89 Ac 227	90 Th 232	91 Pa 231	92 U 238	93 Np 237	94 Pu 244	95 Am 243	96 Cm 247	97 Bk 247	98 Cf 251	99 Es 252	100 Fm 257	101 Md 258	102 No 259	103 Lr 260	104 Rn 222

Periodická tabulka nuklidov aktívnych v NMR