

# Tabulky pro analýzu spekter

skupina (vazba)	typ sloučeniny	Oblast vlnočtů (cm <sup>-1</sup> )	intenzita pásu
C-H	alkany (-CH <sub>3</sub> , -CH <sub>2</sub> -)	2965-2840	silná
	-CH <sub>3</sub>	1450, 1380	střední
	-CH <sub>2</sub> -	1465	střední
	alkeny (=CH <sub>2</sub> )	3095-3010	střední
	aldehydy	1000-700	silná
	na benzenovém kruhu	2850-2700	slabá
C-C	alkany	900-650	silná
C=C	alkeny	1200-700	slabá
C≡C	alkiny	1680-1620	variab.
C=C	aromáty	2260-2100	variab.
C=O	aromáty	1670-1450	střední
	amidy	~1650	silná
	karboxylové kyseliny	~1710	silná
	ketony	~1715	silná
	aldehydy	~1725	silná
	estery	~1735	silná
C-OH	alkoholy	1150-1040	silná
O=C-O-	estery karbox. kyselin	1300-1100	silná
	ethery	1150-1070	silná
O-H	alkohol volný	3650-3590	var. (ostrý pás)
	alkohol s vodíkovým můstkem	3400-3200	silná (široký pás)
N-H	prim. amin, amid	3500-3300	střední
	sekundární amin, amid	3500	střední
	terciární amin, amid	-	
C-N	aminy	1350-1000	střední
C≡N	nitrily	2280-2200	silná
NO <sub>2</sub>	nitro skupina	1550, 1370	silná

## Redoxní (polo)reakce E° [V]

MnO <sub>4</sub> <sup>-</sup> + 5e + 8H <sup>+</sup> ⇌ Mn <sup>2+</sup> + 4H <sub>2</sub> O	+ 1,359
Pt <sup>2+</sup> + 2e ⇌ Pt	+ 1,200
Ag <sup>+</sup> + e ⇌ Ag	+ 0,799
Fe <sup>3+</sup> + e ⇌ Fe <sup>2+</sup>	+ 0,771
Cu <sup>2+</sup> + 2e ⇌ Cu	+ 0,337
2H <sup>+</sup> + 2e ⇌ H <sub>2</sub>	0,000
Fe <sup>2+</sup> + 2e ⇌ Fe	- 0,440
Zn <sup>2+</sup> + 2e ⇌ Zn	- 0,763

typ protonu	δ
RCH <sub>3</sub>	primární alkyl 0,9
R <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	sekundární alkyl 1,3
R <sub>3</sub> CH	terciární alkyl 1,5
R <sub>2</sub> C=CH <sub>2</sub>	vinyl 4,6-5,9
R-C≡C-H	ethinyl 2-3
Ar-H	aromát 6-8,5
R-CHO	aldehyd 9-10
R-NH <sub>2</sub>	amin 1-5
R-OH	alkohol 1-6
Ar-OH	fenol 4-12
R-COOH	karboxyl 10-12
R-CO-CH <sub>3</sub>	vedle keto- 2-2,7
R-O-CH-R <sub>2</sub>	vedle kyslíku ≈3,8

strukturní jednotka	δ
CH <sub>3</sub> -C-C	0,9-1,3
CH <sub>3</sub> -C-X	X=O,OR,COR,SR,NO <sub>2</sub> , halogen 1,0-1,9
CH <sub>3</sub> -C=C, CH <sub>3</sub> -	1,6-2,0
CH <sub>3</sub> -CO-X	1,9-2,6
CH <sub>3</sub> -aryl	2,1-2,5
CH <sub>3</sub> -S-X	X=alkyl, aryl 2,1-2,6
CH <sub>3</sub> -N	2,1-3,0
CH <sub>3</sub> -halogen	2,1-4,3
CH <sub>3</sub> -O-X	X=alkyl, aryl 3,3-4,0

strukturní jednotka	δ
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -C	cyklopropyl 0,2-0,3
CH <sub>2</sub> =C <sub>n</sub>	n>2 1,0-2,5
C-CH <sub>2</sub> -C (alif.)	1,2-1,4
C-CH <sub>2</sub> -X	X=J,Br,Cl,COR,SR 1,3-1,9
C-CH <sub>2</sub> -CO-X	X=alkyl, aryl, SH, OR, H 2,1-2,4
C-CH <sub>2</sub> -O	epoxy 2,3-2,6
C-CH <sub>2</sub> -N	2,3-3,5
C-CH <sub>2</sub> -aryl	2,6-3,0
CH <sub>2</sub> -O-X	X=aryl, COCF <sub>3</sub> , H, alkyl 3,4-4,4
CH <sub>2</sub> =C-C-C	4,6-5,0
CH <sub>2</sub> =C-C=C CH <sub>2</sub> =C-	5,3-5,7

## Typický chemický posun atomů C:

C (alkan)	~ 0 - 30 ppm
C (alken)	~ 110 - 150 ppm
C (alkin)	~ 70 - 90 ppm
C-N	~ 50
C-O	~ 60
C-F	~ 70 ppm
Aromát	~ 110 - 160 ppm
Ester, amid, kyselina	~ 160-170 ppm
Keton, aldehyd	~ 200-220 ppm

ion	fragment	možný zdroj
P-1	H	
P-15	CH <sub>2</sub>	
P-16	NH <sub>2</sub>	amid
P-17	OH	
P-18	H <sub>2</sub> O	alkohol
P-19	F	fluoro sloučenina
P-26	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	aromát
P-28	CO N <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	keton aromát, ethyl ether, ethyl ester, n-propyl ketony, McLaffertyho přesmyk
P-29	CHO C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	aldehyd ethyl
P-30	CH <sub>2</sub> =NH <sub>2</sub>	primární amin
P-31	OCH <sub>3</sub>	methyl ester
P-32	CH <sub>2</sub> OH	methyl ester
P-35, 37	Cl	chloro sloučenina
P-43	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> CH <sub>2</sub> CO	propyl methyl keton
P-45	CO <sub>2</sub> H	karboxylová kyselina
P-46	NO <sub>2</sub>	nitro aromát
P-57	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	butyl
P-60	CH <sub>3</sub> CO <sub>2</sub> H	acetát
P-79,81	Br	bromo soub.

Fragment	možná skupina	možný zdroj
29	CHO <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	
30	CH <sub>2</sub> =NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	primární amin
31	CH <sub>2</sub> =OH <sup>+</sup>	primární alkohol
41	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	allyl
43	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup> CH <sub>2</sub> CO <sup>+</sup>	propyl acyl
50	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	aromát
51	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup>	fenyl
57	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> <sup>+</sup> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CO <sup>+</sup>	butyl ethyl ketone, propionát ester
58	CH <sub>2</sub> =C(OH)CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	methyl keton (McLaf. přesmyk)
59	CO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> <sup>+</sup> CH <sub>2</sub> =C(OH)NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	methyl ester primární amid (McLaf. přesmyk)
60	CH <sub>2</sub> =C(OH)OH <sup>+</sup>	karboxylová kys. (McLaf. přesmyk)
71	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> <sup>+</sup> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CO <sup>+</sup>	pentyl propyl keton, butyrát ester
74	CH <sub>2</sub> =C(OH)OCH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	methyl ester (McLaf. přesmyk)
76	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> <sup>+</sup>	mono / di-substituovaný benzen
77	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	fenyl
85, 99	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	benzyl
91	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	alkyl
105	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CO <sup>+</sup>	benzoyl