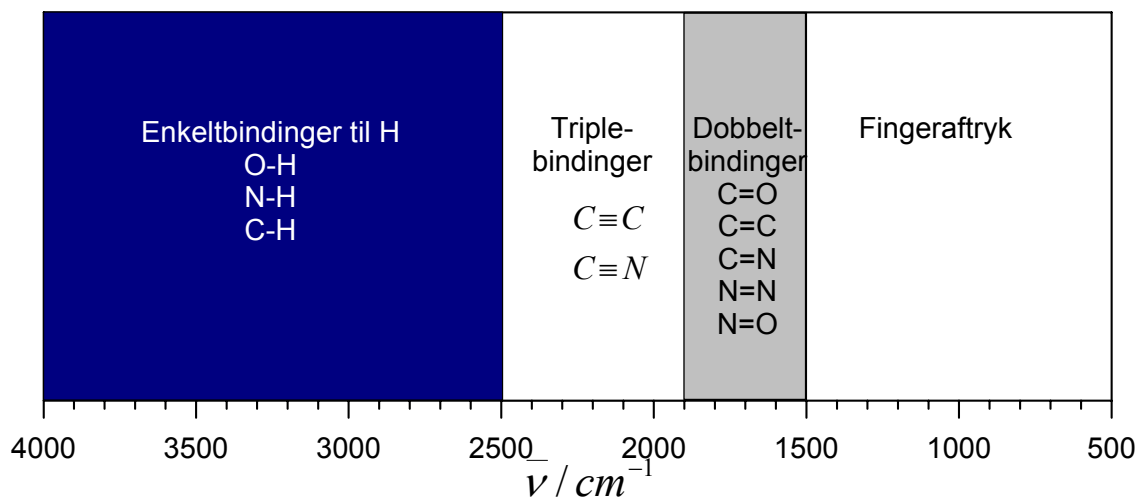
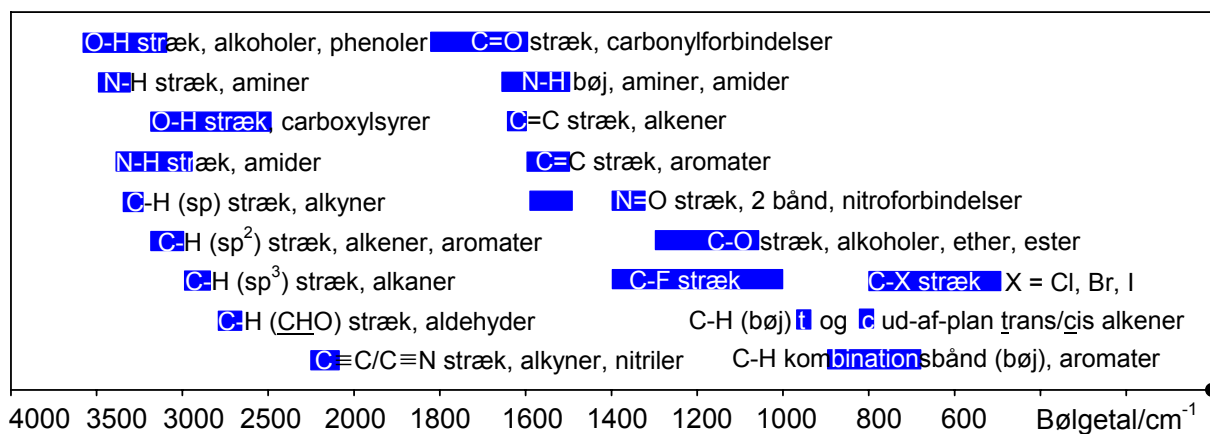


Tabelsamling for spektroskopi

IR-spektrrets grundopdeling



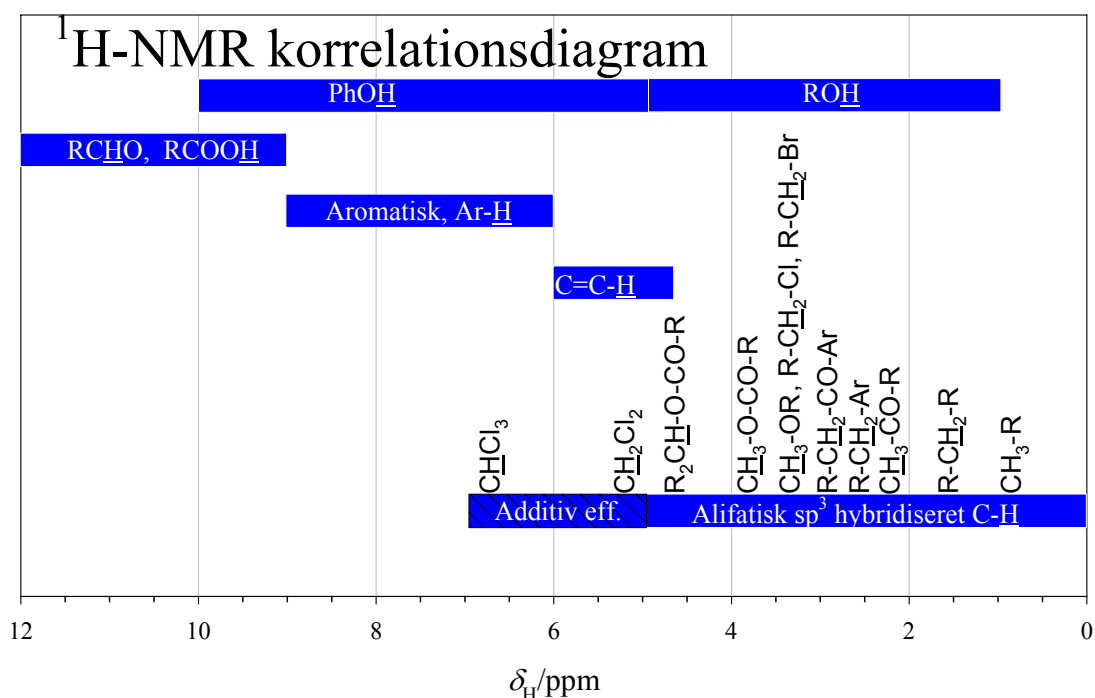
IR-korrelationsdiagram



IR-bølgeintervaller for forskellige typer af alifatiske carbonylforbindelser.

carbonyl-forbindelser	struktur	Bølgeinterval cm^{-1}	ekstra bånd cm^{-1}
syreanhydrid		1850-1800 + 1790-1740	1300-1050 (C-O, stærk, 1-2 bånd)
syrechlorid		1815-1790	
ester		1750-1725	1300-1050 (C-O, stærk, 2 bånd)
aldehyd		1740-1715	
keton		1725-1700	
carboxylsyre		1725-1700	3100-2500 (O-H, stærk), 1300-1050 (C-O, stærk)
amid		1700-1600	

NMR-tabeller

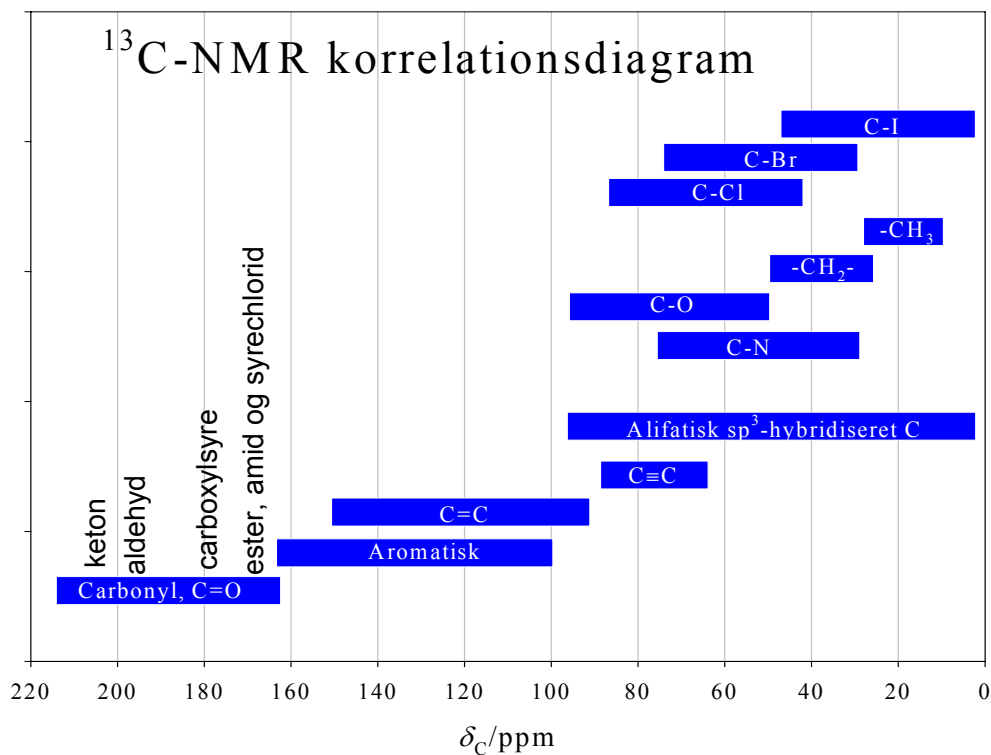


CH ₃ -protoner	δ_H /ppm	CH ₂ -protoner	δ_H /ppm	CH-protoner	δ_H /ppm
CH ₃ -R	0.9	R-CH ₂ -R	1.4	R ₂ -CH-R	1.5
CH ₃ -C-O	1.3	R-CH ₂ -C-O	1.9	R ₂ -CH-C-O	2.0
CH ₃ -C-NO ₂	1.6	R-CH ₂ -C-NO ₂	2.0	R ₂ -CH-C-NO ₂	2.0
CH ₃ -C=C	1.6	R-CH ₂ -C=C	2.1	R ₂ -CH-C=C	2.3
CH ₃ -C≡C	1.8	R-CH ₂ -C≡C	2.2	R ₂ -CHC≡C	2.6
CH ₃ -CO-OR	2.0	R-CH ₂ -CO-OR	2.2	R ₂ -CH-CO-OR	2.5
CH ₃ -CO-N	2.0	R-CH ₂ -CO-N	2.2	R ₂ -CH-CO-N	2.4
CH ₃ -CN	2.0	R-CH ₂ -CN	2.3	R ₂ -CH-CN	2.7
CH ₃ -CO-OAr	2.1	R-CH ₂ -CO-OAr	2.3	R ₂ -CH-CO-OAr	2.7
CH ₃ -S	2.1	R-CH ₂ -S	2.4	R ₂ -CH-S	3.2
CH ₃ -CO-R	2.2	R-CH ₂ -CO-R	2.4	R ₂ -CH-CO-R	2.7
CH ₃ -N	2.3	R-CH ₂ -N	2.5	R ₂ -CH-N	2.8
CH ₃ -Ar	2.3	R-CH ₂ -Ar	2.7	R ₂ -CH-Ar	3.0
CH ₃ -CO-Ar	2.6	R-CH ₂ -CO-Ar	2.9	R ₂ -CH-CO-Ar	3.3
CH ₃ -N-Ar	2.8	R-CH ₂ -N-Ar	3.1	R ₂ -CH-N-Ar	3.0
CH ₃ -N-CO-R	2.9	R-CH ₂ -N-CO-R	3.2	R ₂ -CH-N-CO-R	4.0
CH ₃ -I (spec)	(2.2)	R-CH ₂ -I	3.2	R ₂ -CH-I	4.3
CH ₃ -O-R	3.3	R-CH ₂ -O-R	3.4	R ₂ -CH-O-R	3.7
CH ₃ -Br (spec)	(2.7)	R-CH ₂ -Br	3.5	R ₂ -CH-Br	4.3
CH ₃ -Cl (spec)	(3.0)	R-CH ₂ -Cl	3.6	R ₂ -CH-Cl	4.2
CH ₃ -OH (spec)	3.4	R-CH ₂ -OH	3.6	R ₂ -CH-OH	3.9
CH ₃ -O-CO-R	3.7	R-CH ₂ -O-CO-R	4.1	R ₂ -CH-O-CO-R	4.8
CH ₃ -O-Ar	3.8	R-CH ₂ -O-Ar	4.3	R ₂ -CH-O-Ar	4.5
CH ₃ -NO ₂ (spec)	(4.3)	R-CH ₂ -NO ₂	4.4	R ₂ -CH-NO ₂	4.7
CH ₃ -F (spec)	(4.3)	R-CH ₂ -F	4.5	R ₂ -CH-F	4.8

Tabel med kemiske skift for methyl (CH₃), methylen (CH₂) og methin (CH) protoner.
R = alkyl, Ar = aromat, phenyl. Mærket (spec) betyder, at værdien kun gælder for en specifik forbindelse.

bindingstype	forbindelse	δ_H -interval ppm
O-H	alkoholer	1-5
	phenoler	4-10
	carboxylsyrer	9-13
N-H	aminer	1-5
	amider	5-12

Tabel med δ_H for protoner i OH og NH.



MS-tabeller

Atom	A		A+1		A+2		Type
	masse	%	masse	%	masse	%	
H	1	100	2	0.015	3		A
C	12	100	13	1.1	14		A+1
N	14	100	15	0.37	16		A
O	16	100	17	0.04	18	0.20	A
F	19	100	20		21		A
Si	28	100	29	5.1	30	3.4	A+2
P	31	100	32		33		A
S	32	100	33	0.79	34	4.4	A+2
Cl	35	100	36		37	32.0	A+2
Br	79	100	80		81	97.3	A+2
I	127	100	128		129		A

Isotoptabel for de mest almindelige grundstoffer.

Antal C	% M	% M+1	% M+2
1	100	1,1	
2	100	2,2	
3	100	3,3	
4	100	4,4	
5	100	5,5	0,12
10	100	11,0	0.54

	M ⁺
antal N	lige
0,2,4..	masse
antal N	ulige
1,3,5...	masse

Tabel for nitrogenregel.

Tabellen viser den additive effekt af flere C-atomer i molekylet

funktionel gruppe	m/z	basis ion	m/z	ionserie
amin	30	CH ₂ =NH ₂ ⁺	30, 44, 58, 72, 86, 100	
alkoholer, ethere	31	CH ₂ =OH ⁺	31, 45, 59, 73, 87, 101	
aldehyder, ketoner	29	CHO ⁺	29, 43, 57, 71, 85, 99,	
alifatiske alkaner	15	CH ₃ ⁺	15, 29, 43, 57, 71, 85, 99	
alkener	27	C ₂ H ₃ ⁺	27, 41, 55, 69, 83, 97	
carboxylsyrer	45	CHO ₂ ⁺	45, 59, 73, 87	
estere	43	C ₂ H ₃ O ⁺	43, 57, 71, 85, 99	
amider	44	CH ₂ NO ⁺	44, 58, 72, 86	
nitroforbindelser	30	NO ⁺	30, 46, 60, 74, 88	
aromater	39	(CH) _n	38-40, 50-52, 63-66, 75-79	
phenylalkyler	77	C ₆ H ₅ ⁺	77, 91, 105, 119, 133	

Tabellen viser ionserier for en række funktionelle grupper

m/z	fragment-ion	fortolkning
30		Aminer, primære, sekundære og tertiære
43		methyllketon, alkylethanoat Z = alkyl, alkoxy etc
77		Substituerede benzener X = halogen, alkyl, alkoxy mm.
91		 tropylium-ion
105		 Z = alkyl, alkoxy etc
149		Fra Phthalater (blødgørere i plastik) R = alkyl

Tabellen viser karakteristiske ioner, som ofte forekommer i massespektre