

OBSAH

Kombinované využití údajů o molekule	
Identifikace koncových a vnitřních skupin v molekule	7
Obecné schéma postupu při spektrální identifikaci látek	8
Příklad 1	
Příklad 2	
Příklad 3	
Příklad 4	
Určení sumárního vzorce organické látky analýzou okolí molekulárního iontu v hmotnostním spektru	21
Příklad 5	
Tabulky – Obrázky	
MS	
Nuklidické hmotnosti a izotopické rozdělení	25
Elementární složení molekulárních iontů	27
Korelační tabulka hmotností	33
Izotopické linie fragmentů s bromem a chlorem	39
Hmotnostní spektra rozpouštědel	40
Izotopické rozdělení prvků periodického systému	42
NMR	
Přehledná tabulka chemických posunů různých protonů	43
Orientační tyčové grafy protonové NMR spektrometrie	45
Chemické posuny různě vázaných protonů – $^1\text{H-NMR}$	46
Chemické posuny různých atomů uhlíku – $^{13}\text{C-NMR}$	47
Chemické posuny u substituovaných alkanů	48
Parametry Z pro výpočet chemických posunů alkenických protonů	49
Vliv substituentu na chemický posun aromatických protonů, $^1\text{H-NMR}$	51
Vliv substituentu na chemické posuny alifatických sloučenin, $^{13}\text{C-NMR}$	53
Vliv substituentu na chemický posun olefinických uhlíkových atomů, $^{13}\text{C-NMR}$	54
Vliv substituentu na chemické posuny substituovaných benzenů $^{13}\text{C-NMR}$	55
Vliv substituentu na chemické posuny substituovaných pyridinů	57
IR	
Přehledná tabulka charakteristických vibrací	59
Orientační tyčové grafy infračervené spektrometrie	61
Infračervená spektra některých rozpouštědel a suspenzačních činidel	63
Určení typu substituce derivátů benzenu	64

Recenzenti: prof. RNDr. Lumír Sommer, DrSc.
RNDr. Břetislav Smysl, CSc.

UV VIS

Absorpce běžných rozpouštědel v UV VIS	65
Absorpce chromoforů v ultrafialové oblasti spektra	66
Absorpce jednoduchých chromoforických skupin	67
Ultrafialová absorpce monosubstituovaných derivátů benzenu	68
Literatura	69

Obrázky

Obrázek 1. Spektra MS, IR, NMR a UV VIS k příkladu 1	9
Obrázek 2. Spektra IR, MS a NMR k příkladu 2	12
Obrázek 3. Spektra MS, IR a NMR k příkladu 3	14
Obrázek 4. Spektra MS, IR a NMR k příkladu 4	18
Obrázek 5. Protonová rezonance a selektivně dekaplované spektrum nikotinu	21
Obrázek 6. Hmotnostní spektrum a další spektra a údaje k příkladu 5	23
Obrázek 7. Izotopické linie fragmentů s bromem a chlorem	39
Obrázek 8. Hmotnostní spektra rozpouštědel	40
Obrázek 9. Izotopické rozdělení prvků v periodické soustavě	42
Obrázek 10. Orientační tyčové grafy orbitiví NMR spektrometrie	45
Obrázek 11. Chemické posuny různě vázaných protonů – ^1H -NMR	46
Obrázek 12. Chemické posuny různých atomů uhlíku – ^{13}C -NMR	47
Obrázek 13. Orientační tyčové grafy infračervené spektrometrie (1)	61
Obrázek 14. Orientační tyčové grafy infračervené spektrometrie (2)	62
Obrázek 15. Infračervená spektra některých rozpouštědel a suspenzačních činidel	63
Obrázek 16. Určení typu substituce derivátů benzenu	64
Obrázek 17. Absorpce běžných rozpouštědel	65

IR

.....	59
.....	61
.....	63
.....	64