

A szerves vegyületek szerkezetének meghatározására kezdetben az elemi analízist és az analógiákon alapuló szerkezetbizonyító szintézist illetve lebontást alkalmazták. Bonyolultabb vegyületek szerkezetének megállapítása ezen módszerek kombinálását igényelte: idő- és anyagigényes eljárás volt. Ugrásszerű fejlődést okozott a szerkezetmeghatározásban a különböző fizikai szerkezet- és tisztaságvizsgáló módszerek megjelenése és ezek megfelelő érzékenységgé történt fejlesztése. A fejlesztések eredményeképpen a szerkezetvizsgálathoz szükséges idő- és anyagigény nagyságrendekkel csökkent, sőt a vizsgálatok végeztével bizonyos esetekben a minta változatlan állapotban visszanyerhető volt. A jelenlegi szerves kémiai gyakorlatban legelterjedtebben a mágneses magrezonancia jelenségén alapuló ^1H NMR- és ^{13}C NMR-spektroszkópiát, az infravörös sugárzás és az anyag kölcsönhatását kihasználó IR-spektroszkópiát, a röntgensugárzás kristályokon való szóródásán alapuló röntgendiffrakciós módszert, valamint a nagy energiájú elektronok szerves molekulákkal történő kölcsönhatását felhasználó tömegspektrometriát alkalmazzák. A gyakorló szerves kémikus önállóan leginkább az első három spektroszkópiás módszert használja, míg a tömegspektrometriai adatok kiértékelésekor a szakterület specialistáit hívja segítségül, a röntgendiffrakciós vizsgálatoknak pedig csak a végeredményéről kap tájékoztatást.

Mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópiák

A szerves kémikus számára az esetek többségében elegendő az atomokat kétféle „elemi részecskéből” álló képződményeknek tekinteni: ezek közül az egyik az elektron, ami valódi elemi részecske, a másik az atommag, ami izotóponként ismert szerkezetű összetett rendszer, de a szerves kémikus számára általában egységes egészként jelenik meg. A kvantummechanika szerint mind az elektronhoz, mind a különböző atommagokhoz tartozik saját impulzusmomentum, vagy más néven spinmomentum, amit röviden **spinnek** nevezünk. A spin kvantált vektormennyiség, azaz nem vehet fel tetszőleges értékeket. Lehetséges értékeit a **spinkvantumszámok** befolyásolják: ezek skaláris mennyiségek. A spinkvantumszámok egy-egy atommagra (izotópra) adott értékek és röviden magspinnek is nevezik őket: lehetséges értékük $I = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots, 6$. Mint ismeretes, mozgó elektromos töltések mágneses teret indukálnak, így az említett részecskék spinjéhez meghatározott összefüggés szerint az $I = 0$ eset kivételével nullától különböző mágneses momentum is rendelhető (az atommag mágneses térrel való kölcsönhatása során a mágneses momentum is szerepel a kölcsönhatást leíró egyenletekben, de mivel atomi állandókat tartalmazó egyenleteken keresztül egyértelmű összefüggésben van a spinkvantumszámokkal, a probléma mélyebb szintű tárgyalásától és a konkrét reakcióegyenletek felírásától eltekintünk, lévén ezek szükségtelenek az alapszintű alkalmazott NMR spektroszkópiához). Ennek megfelelően a nullától különböző spinkvantumszámmal rendelkező atommagok esetében van esély arra, hogy a mágneses magrezonancia spektroszkópiát szerkezetvizsgálat céljára felhasználhassuk. Legegyszerűbben tárgyalható az $I = \frac{1}{2}$ spinkvantumszámmal rendelkező atommagok esete: szerencsére mind a protonnak (^1H), mind a szén egyik természetes izotópjának, a ^{13}C izotópnak spinkvantumszáma $\frac{1}{2}$, így a szerves molekulák leggyakoribb összetevői NMR spektroszkópiával tanulmányozhatók. Erős homogén mágneses térben az $I = \frac{1}{2}$ spinkvantumszámú magok, így a protonok és a ^{13}C atommagok két, egymástól kismértékben különböző energiájú állapotban létezhetnek: a kisebb energiájút alapállapotnak, a nagyobb energiájút gerjesztett állapotnak nevezzük (az alap- és a gerjesztett állapot közti energiakülönbség a mágneses tér erősségétől függ: erősebb mágneses térhez nagyobb

energiakülönbség tartozik). Amennyiben a rendszernek például elektromágneses sugárzás útján energiát adunk át, akkor az alap- és a gerjesztett állapot közötti energiakülönbségnek megfelelő frekvenciánál abszorpciót észlelünk: az alapállapotú magok meghatározott energia felvételével gerjesztett állapotba kerülnek (a környezettel való kölcsönhatás következtében bekövetkező energiavesztés miatt a gerjesztett magok előbb-utóbb alapállapotba jutnak vissza és a folyamat kezdődhet előlről). Mivel az elektromágneses sugárzás energiája egyértelmű összefüggésben van a frekvenciával, az abszorpció meghatározott frekvenciánál következik be: a frekvencia (adott mágneses tér esetén) jellemző az atommagra. Kiszámítható, hogy a protonok pl. 4,7 Tesla erősségű mágneses tér esetén 202,07006 MHz frekvenciájú sugárzással gerjeszthetők: eközben $1,9 \times 10^{-5}$ kcal / mól energiát vesznek fel. A gerjesztési frekvenciák tehát atommag-fajtánként eltérőek: adott erősségű mágneses tér esetén a proton és a ^{13}C atommag, valamint a többi mágnesesen aktív mag teljesen más frekvenciájú elektromágneses sugárzást abszorbeál: az abszorpciók a jelenleg szokásos mágneses térerősségek esetén a 60 – 750 MHz tartományba esnek.

A szerves molekulákban az atommagok a molekula elektronrendszerén belül helyezkednek el és ezen keresztül kapcsolódnak egymáshoz. Az elektronrendszer szintén kölcsönhatásba lép a mágneses térrel, így a mágneses tér az elektronok közvetítésével fejt ki hatását az egyes atommagokra. Ez a hatás abban nyilvánul meg, hogy az elektronrendszer a kölcsönhatás eredményeképpen kismértékben gyengíti vagy erősíti a külső mágneses tér hatását, ennek következtében még az egy molekulán belüli azonos atommagok sem pontosan az adott magra számított frekvenciájú sugárzással gerjeszthetők: a frekvenciák a számítottól pozitív és negatív irányban egyaránt eltérhetnek. Egy adott atommag gerjesztési frekvenciája tehát attól függ, hogy pontosan milyen az elektronrendszer a környezetében, ez utóbbi pedig a kémiai szerkezet (kötéstípus, kötéspolaritás) függvénye: eltérő kémiai környezetű atommagok gerjesztési vagy más néven rezonanciafrekvenciája eltérő.

A rutin NMR méréseket úgy végzik, hogy a vizsgálandó mintát feloldják olyan oldószerben, amelyik nem tartalmaz a minta mérés tartományában abszorbeáló atommagokat: ez általában deutérált szerves oldószerek felhasználását jelenti. A szerves oldószer minden protonját deutériumra cserélik, mert a deutérium rezonanciafrekvenciája jelentősen eltér a protonétól, így a protonok mérését nem zavarja. A leggyakrabban használt deutérált oldószerek: deuterokloroform, CDCl_3 , hexadeutero-dimetil-szulfid vagy DMSO-d_6 , $\text{CD}_3\text{-S(O)-CD}_3$.

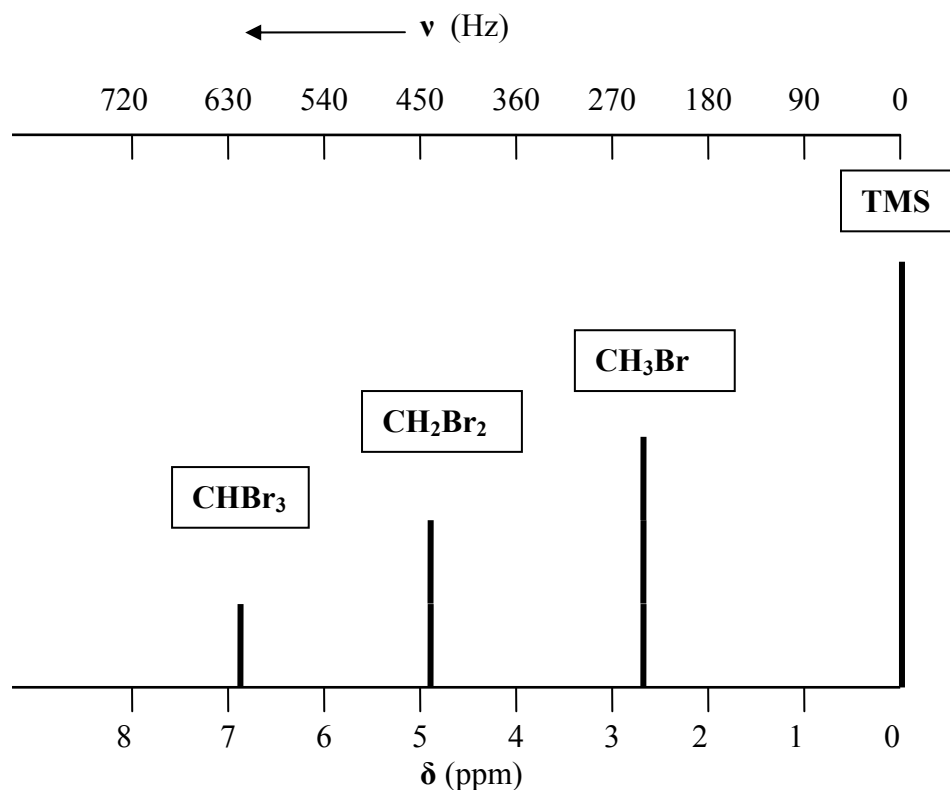
Az oldatot a vizsgálandó mintán kívül kevés tetrametilszilán -TMS, $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ – is tartalmaz. Az oldatot egy megfelelő üvegcsőbe töltik és behelyezik a készülékbe, ahol az erős homogén mágneses térben elvégzik a besugárzást és a különböző frekvenciákon bekövetkező abszorpciókat egy írószerkezet segítségével grafikusán megjelenítik. Az ábra vízszintes tengelyén nem abszolút frekvenciákat tüntetnek fel, hiszen ezek az alkalmazott mágneses tér erősségétől függenek, tehát készülékfüggők. A készüléktől való függetlenítést az alábbiak szerint érték el:

- a mintával együtt feloldott tetrametilszilán protonjainak rezonanciafrekvenciáját választották a skála kezdőpontjának az ^1H NMR spektroszkópiában: a TMS 12 azonos kémiai környezetű hidrogént tartalmaz, amelyek 1 rezonanciajelet adnak; a ^{13}C NMR spektroszkópiában a TMS (^{13}C) szénjelét választották a skála kezdőpontjának: a TMS 4 azonos kémiai környezetű szénatomot tartalmaz, amelyek 1 rezonanciajelet adnak.
- a TMS-től, mint 0-ponttól egy adott rezonanciajelnek hertzben mért távolságát elosztották a TMS adott készüléken megahertzben mért rezonanciafrekvenciájával:

$$\delta = \frac{\text{adott jel távolsága a TMS protonjelétől (Hz)}}{\text{a TMS adott készülékre jellemző frekvenciája (MHz)}}$$

Az így kapott δ érték az úgynevezett **kémiai eltolódás, ppm** egységekben kifejezve (ppm: **part per million** = milliomodrész; az, hogy a nevezőben a TMS frekvenciáját MHz-ben és nem Hz-ben fejeztük ki, egymillióval való szorzásnak felel meg, a kémiai eltolódás tehát azt jelenti, hogy a kémiai környezet hány milliomodrészben változtatja meg az adott proton rezonanciafrekvenciáját a TMS protonjainak rezonanciafrekvenciájához képest).

Az NMR készüléket általában nem az általa generált mágneses tér erősségével jellemzik, hanem azzal, hogy a TMS protonjai a készülék mágneses terében milyen frekvencián adnak rezonanciajelet: egy 90 MHz-es készülék esetében a TMS protonjai 90 MHz-nél, míg egy 250 MHz-es készülék esetében a TMS protonjai 250 MHz-nél adnak jelet.



A fenti ábrán a CH_3Br , a CH_2Br_2 és a CHBr_3 ekvimoláris elegyének 90 MHz-es készüléken felvett NMR spektruma látható (az NMR jeleknek vonalakat feleltettünk meg). A készüléken a TMS protonjai 90 000 000 Hz-nél, azaz 90 MHz-nél adnak jelet (ez a ppm-skála 0-pontja), a CH_3Br protonjainak rezgési frekvenciája 90 000 237 Hz, a CH_2Br_2 protonjainak rezgési frekvenciája 90 000 441 Hz, míg a CHBr_3 protonjának rezgési frekvenciája 90 000 614 Hz. A fenti képlet szerinti ppm-ekben kifejezett kémiai eltolódások:

$$\text{CH}_3\text{Br}: 237 / 90 = 2,63 \text{ ppm}, \quad \text{CH}_2\text{Br}_2: 441 / 90 = 4,90 \text{ ppm}, \quad \text{CHBr}_3: 614 / 90 = 6,82 \text{ ppm}.$$

A tetrametilszilán mind a protonjai, mind a szénmagjai viszonylag sűrű elektronfelhőben található (a szilícium elektronegativitása kicsi): ez a sűrű elektronfelhő jelentősen árnyékolja a külső mágneses tér hatását. A legtöbb szerves vegyületben a protonok és a szénmagok árnyékoltsága a TMS-ben tapasztaltaknál kisebb, így a szerves vegyületek túlnyomó többségének ^1H NMR és ^{13}C NMR jelei a spektrumokban – hasonlóan a fenti 3 példához – a TMS-től balra, azaz pozitív δ -értékeknél található, csak kevés vegyületnél figyelhetők meg negatív kémiai eltolódások. Mindezek alapján indokolt a TMS-t a ppm-skála kiindulópontjának tekinteni.

A szerves vegyületekben található különböző kémiai környezetű ^{13}C magok kémiai eltolódása az esetek túlnyomó többségében 0 – 240 ppm, míg a protonok kémiai eltolódása 0 – 13 ppm tartományba esik (megjegyzendő, hogy a két tartomány nem fed át egymással, mert a két mag gerjesztési frekvenciája távol van egymástól).

Tipikus ^{13}C NMR eltolódások (az adatok tájékoztató jellegűek, csak a tendenciákat tükrözik):

C = O, C = S	C = C és aromás C	telített C, oxigénhez kötve	telített C, szénhez kötve
240 – 150 ppm	150 – 100 ppm	100 – 50 ppm	50 – 0 ppm

Az sp^3 hibridállapotú szenet tartalmazó CH_3 (metil), CH_2 (metilén) és CH (metin) csoportok protonjainak várható körülbelüli ^1H NMR kémiai eltolódását a következő durva becsléssel jósolhatjuk meg:

- kiindulunk abból, hogy egy átlagos metilcsoport protonjainak kémiai eltolódása kb. 0,9 ppm, egy átlagos metilén-csoport protonjaié kb. 1,3 ppm, míg egy átlagos metincsoport protonjáé kb. 1,7 ppm;
- ezekhez az eltolódásokhoz kb. 1 ppm-et kell hozzáadni, amennyiben az említett csoportokhoz a következők közül 1 kapcsolódik: $-\text{C}=\text{C}$, $-\text{C}\equiv\text{CR}$, $-\text{C}\equiv\text{N}$, $-\text{C}=\text{O}$, $-\text{SH}$, $-\text{SR}$;
- az eltolódásokhoz kb. 1,5 ppm-et kell hozzáadni, amennyiben a fenti csoportokhoz a következők közül 1 kapcsolódik: $-\text{Ar}$ (aromás), $-\text{NH}_2$, $\begin{array}{c} \text{---S---R} \\ || \\ \text{O} \end{array}$;
- az eltolódásokhoz kb. 2 ppm-et kell hozzáadni, amennyiben a fenti csoportokhoz a következők közül 1 kapcsolódik: $-\text{OH}$, $-\text{OR}$, $-\text{NHC}(\text{O})\text{R}$, $-\text{Cl}$, $-\text{Br}$, $-\text{I}$, $-\text{SO}_2\text{R}$;
- az eltolódásokhoz kb. 2,5 ppm-et kell hozzáadni, amennyiben a fenti csoportokhoz egy $-\text{OAr}$ csoport kapcsolódik;
- az eltolódásokhoz kb. 3 ppm-et kell hozzáadni, amennyiben a fenti csoportokhoz a következők közül 1 kapcsolódik: $-\text{NO}_2$, $\text{OC}(\text{O})\text{R}$, $-\text{F}$.

A közelítés csak durva becslést tesz lehetővé. Ha a CH_2 vagy CH csoportokhoz az említett funkciós csoportok közül több is kapcsolódik, a megadott tendenciák fokozottan érvényesülnek, de az eltolódás-változások nem additívak: lásd fentebb a CH_3Br a CH_2Br_2 és a CHBr_3 spektrumát.

Olefinekben az sp^2 hibridállapotú szénatomokhoz közvetlenül kapcsolódó protonok hozzávetőleges eltolódás-tartománya 4,5 – 5,5 ppm, az aromás gyűrűhöz kapcsolódó protonok esetén ez az értéktartomány kb. 6,5 – 8 ppm, míg az acetilének sp hibridállapotú szénatomjához kapcsolódó proton rezonanciafrekvenciája kb. 2,5 ppm.

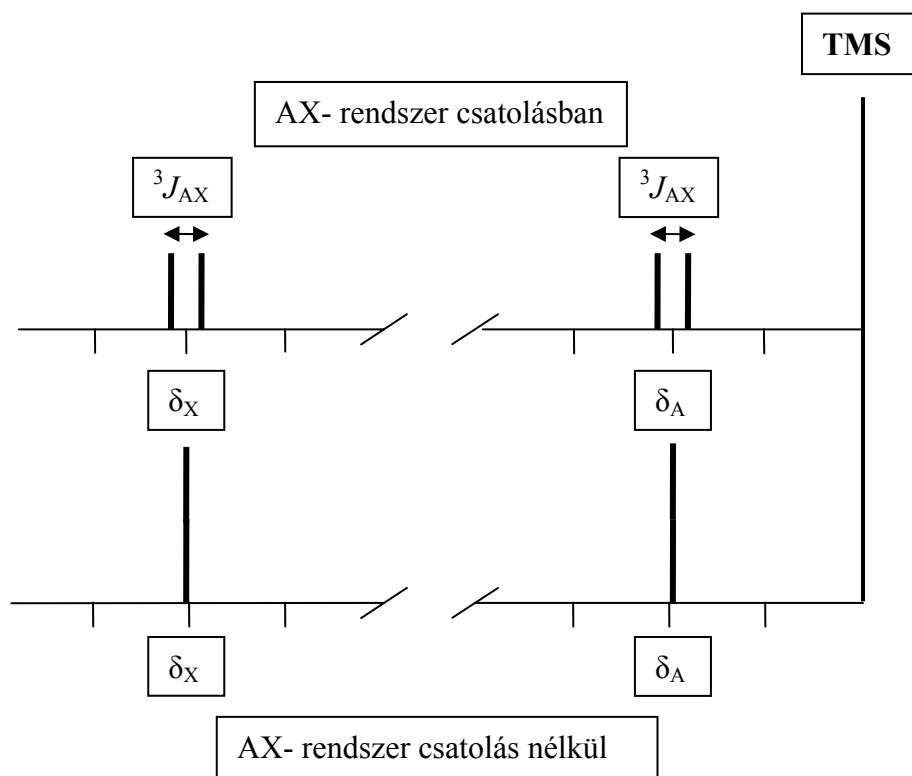
A karbonilcsoporthoz közvetlenül kapcsolódó aldehidproton jele kb. 9 – 10 ppm között várható, míg a karboxilcsoport oxigénhez kapcsolódó protonja 10 – 13 ppm közötti tartományban jelenhet meg.

Általánosságban azt mondhatjuk, hogy egy molekula különböző kémiai környezetű ^1H vagy ^{13}C atommagjai a megadott tartományokon belül különböző helyeken adnak rezonanciajeleket (véletlen egybeesések időnként előfordulhatnak). A különböző kémiai környezetű magok számát egy molekulán belül a szerkezeti képlet szemrevételezésével, a molekula szimmetriaelemeinek alkalmazásával lehet megállapítani: ha az NMR felvétel körülményei között az egyszeres kötések körüli rotáció nem gátolt, elegendő a molekula legszimmetrikusabb (a gyakorlatban esetleg nem is megvalósuló) konformációját figyelembe venni.

Az ^1H NMR spektroszkópiában egy molekula jeleinek integráljai arányosak az őket létrehozó protonok számával, így az ^1H NMR spektrumból megállapítható a különböző kémiai eltolódású jeleket létrehozó protonok számaránya. Ez a fajta integrálhatóság a ^{13}C NMR spektroszkópiában nem áll fenn.

Egy adott NMR-aktív mag megérzi a környezetében lévő NMR-aktív magok mágneses állapotát: a hatást a kötések keresztül az elektronrendszer közvetíti. Az egymással ilyen kapcsolatban lévő magokról azt mondjuk, hogy spin-spin csatolásban vannak. A csatolást a csatolási állandóval jellemezzük, aminek jele „ J ”. A csatolási állandó nagyságát hertzben adjuk meg. A csatolási állandókat aszerint is megkülönböztetjük, hogy hány kötésen át terjedő hatást írnak le. A CH_2 csoport azonos szénatomhoz kapcsolódó 2 protonja egymástól két kötésnyi távolságban van: H-C-H (geminális hidrogének). A csatolási állandó jelölése ez esetben: $^2J_{\text{HH}}$. A H-C-C-H szerkezeti részlet protonjai egymástól 3 kötésnyi távolságban vannak (vicinális hidrogének), csatolási állandójuk jelölése: $^3J_{\text{HH}}$. Konjugált vagy aromás rendszerek esetében a csatolás 3 kötésnél tovább is terjedhet.

Hogyan értelmezhető a csatolás? Vegyünk pl. egymástól 3 kötésnyi távolságban levő két nagyon különböző kémiai környezetű protont, az egyiket jelöljük „A”, a másikat „X” betűvel ($\text{H}_\text{A}\text{-C-C-H}_\text{X}$), utalva a jelek kémiai eltolódása közötti nagy távolságra. Az „A” proton egy adott mágneses állapotához az „X” proton két lehetséges állapota tartozik: vagy az alapállapot, vagy a kicsit magasabb energiájú gerjesztett állapot. Attól függően, hogy az „X” proton melyik állapotban van, vagy egy kicsit erősíti, vagy egy kicsit gyengíti az „A” proton környezetében a külső mágneses tér hatását, ennek megfelelően az „A” proton „X” állapotától függően egy adott frekvencia helyett ennél vagy egy kicsit kisebb, vagy egy kicsit nagyobb frekvenciájú sugárzással gerjeszthető: így a spektrumban két egymáshoz közeli jelet kapunk az „A” protonra jellemző kémiai eltolódásnál. A jelek intenzitása 1 : 1, mivel annak a valószínűsége, hogy „X” proton alap- vagy gerjesztett állapotban van, gyakorlatilag 50 – 50% (az alap- és gerjesztett állapot közötti energiakülönbség olyan kicsi, hogy pl. 300 K hőmérsékleten 7,05 Tesla erősségű mágneses térben 100 000 alapállapotú protonra 99 995 gerjesztett állapotú proton jut: ez gyakorlatilag 1 : 1 arány). Az elmondottak az „X” proton vonatkozásában ugyanígy igazak, ennek megfelelően az „X” proton jele is megduplázódik.



Egyszerű kombinatorikai megfontolások alapján több protonból álló spinrendszerek csatolásai is jól leírhatók abban az esetben, ha a kémiai eltolódások elég messze vannak egymástól. Amennyiben a rezonanciafrekvenciákat az egyes protonokra hertzben adjuk meg, az egyes protonok hertzben kifejezett eltolódás-különbsége jóval nagyobb kell hogy legyen, mint az aktuális csatolási állandó: $\Delta\delta(\text{Hz}) \gg J(\text{Hz})$. Ebben az esetben beszélünk elsőrendű csatolásról. Ha $\Delta\delta(\text{Hz}) / J(\text{Hz}) < 5$, a multiplikálódott jelek összezsúszhatnak, számítógép nélkül nehezen értelmezhető spektrumot adva.

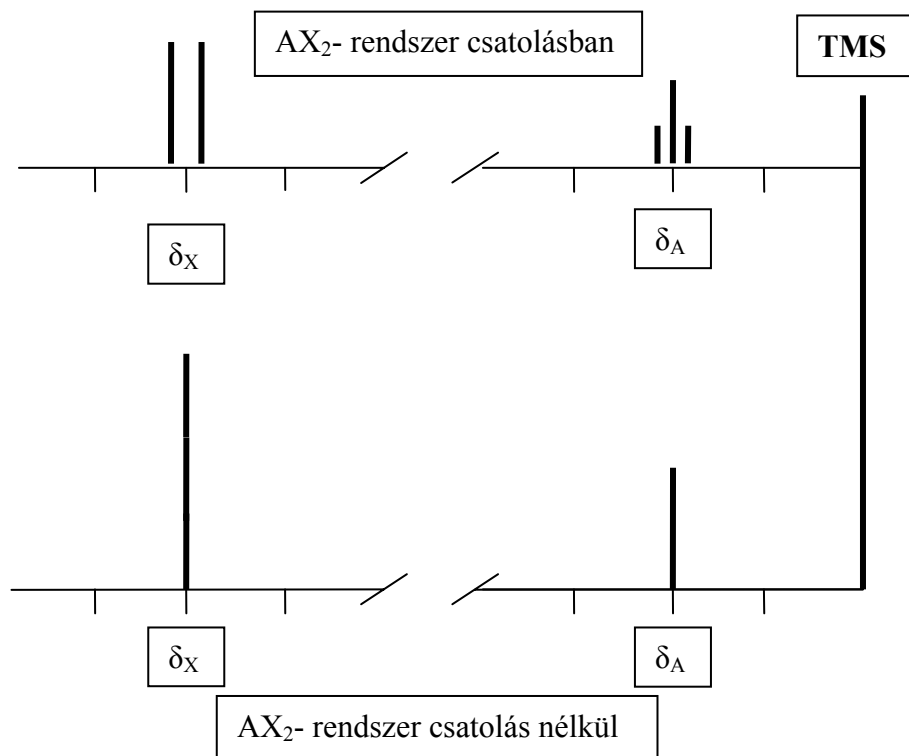
Elsőrendű csatolás esetén elmondhatjuk, hogy egy adott proton jele, ha az adott proton n darab azonos kémiai környezetű protonnal van csatolásban, $(n + 1)$ -szeres felhasadást mutat. A felhasadt jelek intenzitásaránya $I = \frac{1}{2}$ spinkvantumszámú magok (^1H , ^{13}C) esetén a Pascal-háromszög segítségével vezethető le.

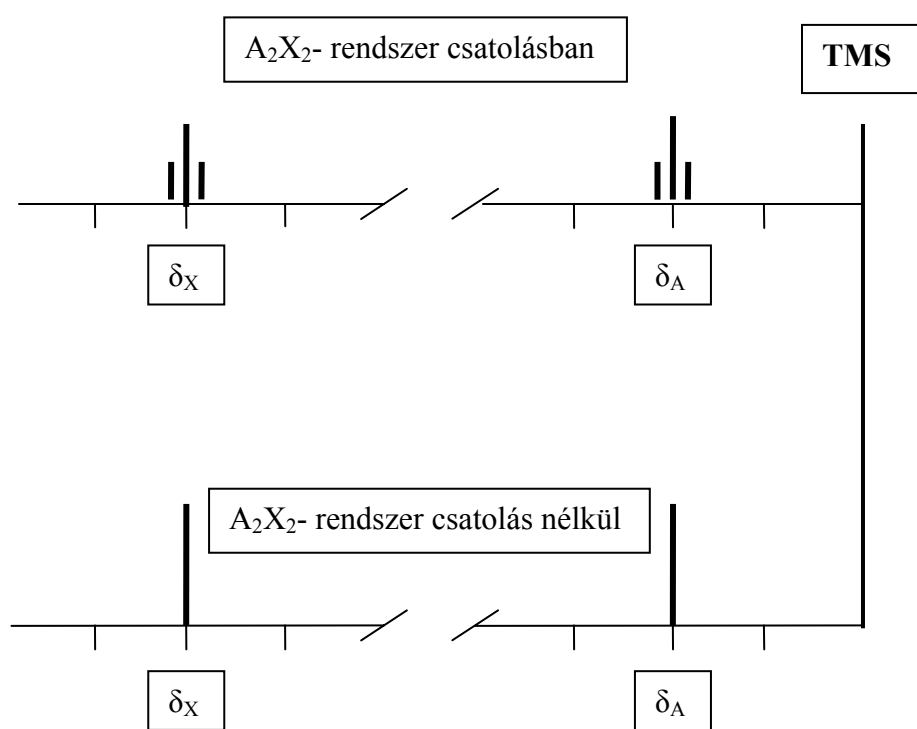
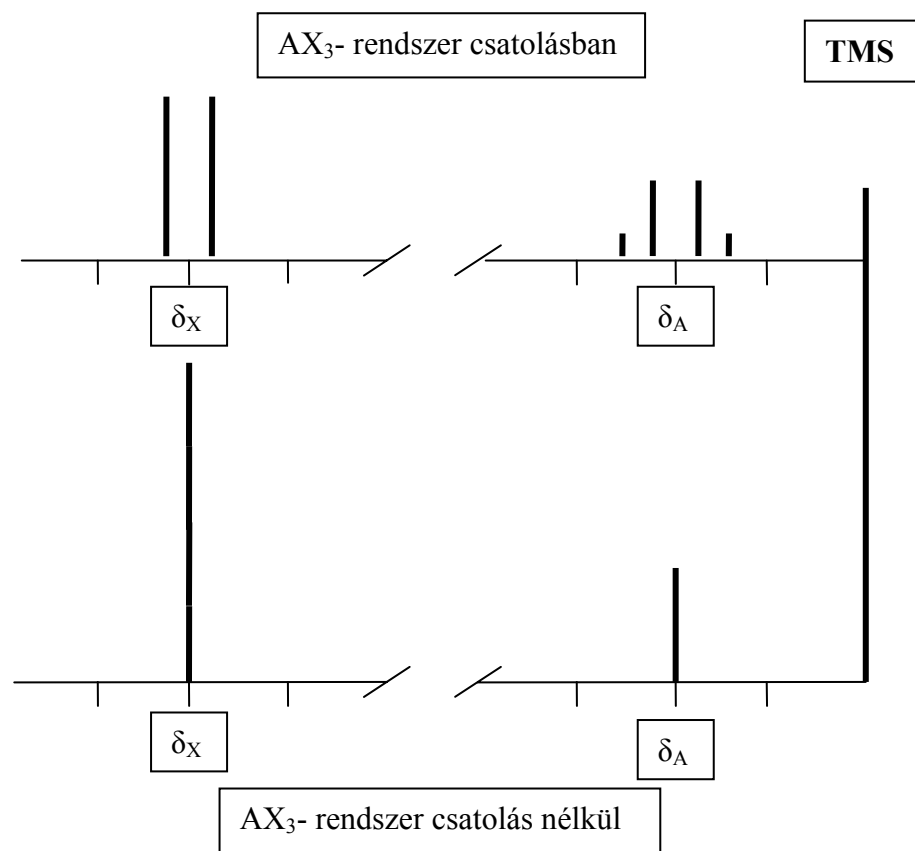
A kiválasztott protonnal csatolásban lévő azonos kémiai környezetű protonok száma

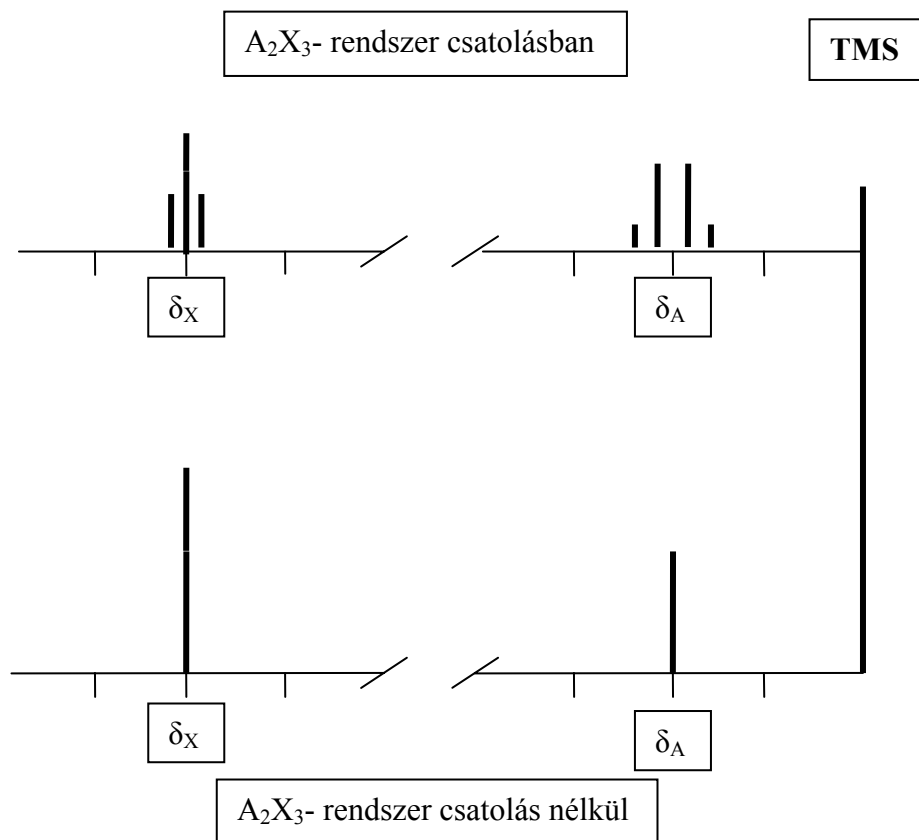
A kiválasztott proton jelének felhasadása $(n + 1)$ -szeres

A felhasadt jel részeinek intenzitásaránya

$n = 0$	1 (szingulett, „s”)	1
$n = 1$	2 (dublett, „d”)	1 1
$n = 2$	3 (triplett, „t”)	1 2 1
$n = 3$	4 (kvartett, „q”)	1 3 3 1
.....	
$n = 6$	7 (szeptett)	1 6 15 20 15 6 1







Elvileg heteroatomhoz kapcsolódó proton is lehet csatolásban szénhez kapcsolódó protonnal, pl. a következő szerkezeti részletben: H-O-C-H. Az ilyen csatolás kizárólag csak akkor valósul meg, ha a heteroatomhoz kapcsolódó proton nem vesz részt gyors kicserélődési folyamatokban (pl. az oldószer, vagy az oldószerben található víznyomok közreműködésével). Gyors protoncsere esetén csatolás nem észlelhető és a gyorsan cserélődő proton jele kiszélesedhet (mint pl. a karboxilcsoport protonjának ^1H NMR-jele).

Az NMR spektroszkópiában nem csak azonos fajtájú NMR-aktív magok közötti úgynevezett homonukleáris csatolások képzelhetők el, megvalósulhatnak különböző fajtájú magok közötti úgynevezett heteronukleáris csatolások is. A természetes hidrogén 99,98%-ban ^1H izotópot, 0,016%-ban ^2H izotópot (deutériumot) tartalmaz. A deutérium is NMR-aktív, csatol is a protonokkal, de annak a valószínűsége igen csekély, hogy egy molekulában deutérium kerüljön megfelelő kötéstávolságra protontól, így az ehhez a heteronukleáris csatoláshoz tartozó jelek gyakorlatilag nem vehetők észre a rutin NMR spektrumban. A természetes szén 98,9%-ban tartalmazza az NMR-inaktív ^{12}C izotópot, míg az NMR-aktív ^{13}C izotóp 1,108%-ban fordul elő benne. Az előbbiekhöz hasonlóan a ^{13}C izotóp kis százalékos aránya miatt a ^{13}C - ^1H csatolások csak igen kis intenzitású, alig észrevehető jelet adnak az ^1H NMR spektrumban. A ^{13}C NMR spektrumban a ^{13}C - ^{13}C homonukleáris csatolások hanyagolhatók el: kicsi a valószínűsége annak, hogy 1 molekulán belül két ^{13}C izotóp csatolási közelségbe kerüljön. A ^{13}C - ^1H heteronukleáris csatolásokat a ^{13}C NMR spektrum felvétele közben egy technikai „trükkkel” kiküszöbölik.

A fent elmondottaknak megfelelően tehát a rutin ^{13}C NMR spektrum annyi szingulettből áll, ahány különböző kémiai környezetű szénatomot tartalmaz a vizsgált molekula. A rutin ^1H NMR spektrumban viszont gyakorlatilag csak az ^1H - ^1H homonukleáris csatolások láthatók,

aminek következtében multiplettek jelennek meg. Elsőrendű csatolás esetén ha a kiválasztott proton több, de azonos kémiai környezetű protonnal áll kölcsönhatásban, a multiplettek alapján bizonyos csoportok könnyen azonosíthatók. Az alapképzés során csak ilyen egyszerű esetekkel foglalkozunk.

Elsőrendű csatolás esetén: -CH₂-CH₃ csoport (A₂X₃ rendszer) kvartett-triplett
 -CH-CH₃ csoport (AX₃ rendszer) kvartett-dublett
 -CH₂-CH₂- csoport (A₂X₂ rendszer) tripllett-tripllett
 -CH-CH₂- csoport (AX₂ rendszer) tripllett-dublett
 -CH(CH₃)₂ csoport (AX₆ rendszer) szeptett-dublett.

Infravörös spektroszkópia

A szerves molekulák az infravörös tartományba eső hullámhosszúságú elektromágneses sugárzással is kölcsönhatásba tudnak lépni. Ilyenkor a molekulák kvantált rezgési nívói gerjesztődnek (vegyértékrezgés és deformációs rezgés), ami azzal jár, hogy bizonyos frekvenciáknál a sugárzás abszorpciója következik be. Ez a spektrumokban (itt nem részletezett módon) elnyelési sávok megjelenéséhez vezet. Ezeknek a sávoknak a spektrumban elfoglalt helye bizonyos funkciós csoportok jelenlétére utal. A sávok helyét az IR spektrumban a hullámhossz reciprokában, hullámszámokban (cm⁻¹) adják meg.

Az IR spektrumok legintenzívebb sávjai a C = O csoport vegyértékrezgéséhez (kb. 1640 – 1810 cm⁻¹ hullámszámmal), illetve az alkoholok, éterek, észterek és karbonsavak C – O vegyértékrezgéséhez (1000 – 1300 cm⁻¹) köthetők. Jellegzetes még a karbonsavak O – H vegyértékrezgésének 3300 – 2500 cm⁻¹ hullámszámok között megjelenő rendkívül széles, általában középerős sávja is.

Tömegspektrometria

A tömegspektrometriai mérések során a vizsgálandó mintát valamilyen módon ionizálják (a klasszikus elektron-impakt módszer esetén pl. nagy energiájú elektronokkal érik el az ionizációt) majd a keletkező molekulaiont (amennyiben ennek az élettartama elég hosszú) és / vagy az ennek szétesése során keletkező molekulatöredékeket, az úgynevezett fragmenseket detektálják tömegszám szerint.

Szerkezet-meghatározás

A szerkezet-meghatározás a tárgyalt 4 egymástól független vizsgálati módszer által szolgáltatott adatok összevetésén alapul: ha valakinek az egyik módszer adatai alapján kialakul egy hipotézise, meg kell vizsgálnia, hogy a többi független vizsgálatból nyert adatok ezt egyértelműen megerősítik-e. Ellentmondás-mentesség esetén valószínűsíthető egy szerkezet. A mellékelt spektrumokon a szerkezet-meghatározás az elmondottak alapján gyakorolható.