

UV

Ugrupowanie chromoforowe	Pasma
benzen	E2: 203 nm B: 254 nm
benzen-CO-R(Ar)	246 nm
benzen-CHO	250 nm
benzen-COOH lub benzen-COOR	E2: 230 nm B: 250 – 290 nm (mało intensywne)
Aminokwasy aromatyczne	230 – 280 nm
Poch. kwasu nikotynowego	ok. 266 nm (formy tautomeryczne)
Auksochromy	Przesunięcia pasma podstawowego
R	o, m: +3 nm; p: +10 nm
OH, OR	o, m: +7 nm; p: +25 nm OH w pozycji orto względem C=O wpływa na absorpcję
NH ₂	o, m: +15 nm; p: +58 nm
O ⁻	o, m: +20 nm; p: +78 nm
NH ₃ ⁺	nie przesuwa pasma podstawowego

IR

Fenole			
Ugrupowanie	Pasmo	Położenie	Komentarz
Ar	v C=C	1650 – 1450 cm ⁻¹	
	v C-H	3100 – 3000 cm ⁻¹	
	δ C-H	1200 – 950 cm ⁻¹	
	γ C-H	poniżej 950 cm ⁻¹	
Ar-OH	v C-O	1300 – 1200 cm ⁻¹	
	v O-H	3700 – 2500 cm ⁻¹	
	δ O-H	1400 – 1300 cm ⁻¹	
	γ O-H	poniżej 800 cm ⁻¹	
Kwasy karboksylowe i ich sole			
Ugrupowanie	Pasmo	Położenie	Komentarz
COOH	v C=O	1900 – 1700 cm ⁻¹	
	v C-O	1300 – 1200 cm ⁻¹	intensywne
	v O-H	3700 – 2500 cm ⁻¹	szerokie
	δ O-H	1400 – 1300 cm ⁻¹	
	γ O-H	poniżej 800 cm ⁻¹	
COO ⁻	v C...O	ok. 1600 cm ⁻¹	asymetryczne
		ok. 1400 cm ⁻¹	symetryczne
R-OH	v O-H	3700 – 2500 cm ⁻¹	
	δ O-H, v C-O	1400 – 1000 cm ⁻¹	sprzężone
R	v C-H	3000 – 2800 cm ⁻¹	

Aminokwasy			
Ugrupowanie	Pasmo	Polozenie	Komentarz
NH ₃ ⁺ (α-aminokwasy)	ν N-H	3100 – 2600 cm ⁻¹	
	δ N-H	ok. 1650 cm ⁻¹	asymetryczne
		ok. 1450 cm ⁻¹	symetryczne
COO ⁻ (α-aminokwasy)	ν C...O	ok. 1600 cm ⁻¹	asymetryczne
		ok. 1400 cm ⁻¹	symetryczne
C-N	ν C-N	1300 – 1000 cm ⁻¹	
S-H	ν S-H	ok. 2500 cm ⁻¹	
Ar-NH ₂	ν N-H	ok. 3400 cm ⁻¹	asymetryczne
		ok. 3300 cm ⁻¹	symetryczne
	2 x δ N-H	ok. 3200 cm ⁻¹	nadton
	δ N-H	ok. 1600 cm ⁻¹	
	γ N-H	poniżej 900 cm ⁻¹	
Estry			
Ugrupowanie	Pasmo	Polozenie	Komentarz
COOR	ν C=O	1900 – 1700 cm ⁻¹	
	ν C-O	1300 – 1200 cm ⁻¹	asymetryczne symetryczne
Amidy			
Ugrupowanie	Pasmo	Polozenie	Komentarz
CO-NH	ν C=O	1900 – 1700 cm ⁻¹	amidowe I
	δ N-H	ok. 1600 cm ⁻¹	amidowe II
	ν C-N	1300 – 1000 cm ⁻¹	amidowe III
	δ C=O	poniżej 650 cm ⁻¹	amidowe IV
	γ N-H		amidowe V
	γ C=O	poniżej 800 cm ⁻¹	amidowe VI

¹H-NMR

Ugrupowanie	Polozenie
R	0 – 5 ppm
Ar	6 – 8 ppm
Ar-OH (fenole)	3 – 8 ppm
Ar-OH (kwasy)	5 – 10 ppm
R-OH	4 – 6 ppm
COOH	9,5 – 13 ppm
NH	0,5 – 6 ppm
CO-NH ₂ ; CO-NH	5 – 9 ppm
CO-NH-CO	9 – 12 ppm

¹³C-NMR

Ugrupowanie	Położenie
R	0 – 50 ppm
R (aminokwasy)	40 – 60 ppm
Ar	100 – 150 ppm
COOH (kwasy)	powyżej 160 ppm
COOH (estry)	powyżej 170 ppm
COOH (kwasyamidy)	powyżej 165 ppm

MS

Pochodne	Jony rejestrowane	m/z	Komentarz
Fenole	[M] ⁺	M = M.cz.	Jon molekularny
	[M-CO] ⁺	M-28	Odszczepienie cząsteczki obojętnej CO
	[M-CHO] ⁺	M-29	Odszczepienie cząsteczki obojętnej CHO
Kwasy karboksylowe	[M] ⁺	M = M.cz.	Jon molekularny
	[M-OH] ⁺ (lub [M-H ₂ O] ⁺ o-hydroksykwasy aromatyczne)	M-17 (M-18)	Odszczepienie rodnika ·OH (lub wody)
	[M-COOH] ⁺	M-45	Dalsze odszczepienie cząsteczki obojętnej CO
Aminokwasy alifatyczne	[M] ⁺	M = M.cz.	Odszczepienie rodnika ·COOH
Aminokwasy aromatyczne	[M] ⁺	M = M.cz.	Jon molekularny bardzo nietrwały (bardzo słabo intensywny)
	[M-HCN] ⁺	M-27	
Estry	[M] ⁺	M = M.cz.	Jon molekularny o różnej intensywności
	[M-R] ⁺		Odszczepienie rodnika ·R
	[M-OR] ⁺		Odszczepienie rodnika ·OR
	[M-COOR] ⁺		Odszczepienie rodnika ·COOR
	[M-CH ₂ =CH ₂] ⁺ (estry etylowe)	M-28	Przegrupowanie McLafferty'ego
Amidy	[M] ⁺	M = M.cz.	Jon molekularny
	[M-NH ₂] ⁺	M-16	Odszczepienie rodnika ·NH ₂
	[M-CONH ₂] ⁺	M-44	Odszczepienie rodnika ·CONH ₂