Mirek Soroka

LABORATORIUM CHEMII ORGANICZNEJ

DLA P.T. NIEDORAJDÓW

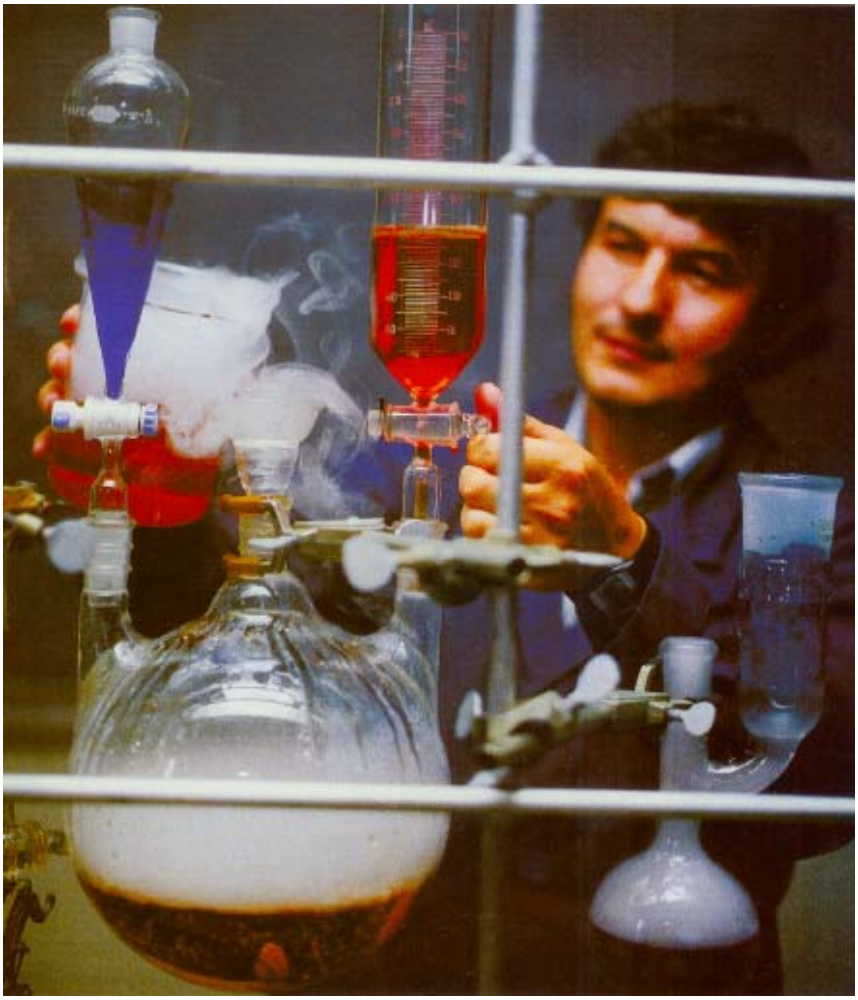
czyli

KUCHNIA CHEMII ORGANICZNEJ
DLA TYCH, CO PO RAZ PIERWSZY ...

Część 2.3.

Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych

Zbiór problemów



Wrocław, 2004-12-12

Copyright © 2004 by Mirek Soroka.
This Academic Workbook (AW) has been compiled from many sources by Mirek Soroka. The reproduction or utilization of any page of this AW or AW in whole, in any form or by any electronic, mechanical, electrostatic, magnetic, or the other means, now known or hereafter invented, including xerography, photocopying, and recording, and in any information storage and retrieval system is permitted, but not recommended.
Copying is an essence of the Nature. However, it is obviously much easier, and much cheaper to buy an original printout of this AW, what gives you additionally an opportunity to get my autograph or even dedication …
So, please buy the original!

Mirek Soroka
93rd semester student

Ten zbiór problemów spektroskopowych został skompilowany przez Mirka Sorokę z wielu źródeł. Nie mam nic przeciwko kopiowaniu jakiejkolwiek strony tego zbioru, a nawet jego całości – wszak kopiowanie jest istotą Natury, jednakowoż kupienie dzieła oryginalnego jest w tym przypadku znacznie łatwiejsze i tańsze, a ponadto daje Ci możliwość uzyskania autografu, a nawet dedykacji autora ...
Dlatego też proszę – kup oryginał!

Mirek Soroka
Student 93 semestru

Looking for a reaction?
Try me! I am a chemist.

Drogi Czytelniku,
jako człowiek obcujący na co dzień z książkami, wiesz doskonale o tym, że nie sposób napisać i wydać książkę bez błędów!
Również i w tym zborze jest ich zapewne bez liku.
Podczas powstawania książki jest wiele węzłów technologicznych, w których mogą się pojawić błędy.
Autor mógł coś źle napisać. Błędnie mogło być coś przepisane. Pomylić się, źle zrozumieć albo wręcz poprawić po swojemu, mógł komputer.
W tym zbiorze istotnie tak właśnie było. Już po wydrukowaniu problemów spektroskopowych zauważyłem, że w tabelach IR, zamiast wiązań potrójnych, napisanych czcionką CatBats, pojawiła się stylizowana litera „H”.
Nie chcę jednak żadnych błędów „zwalać” na komputery. W tym miejscu chciałbym jednak zwrócić uwagę Czytelnika na to, że we współczesnym świecie coraz więcej błędów powoduje właśnie „inteligentna aparatura”. Co więcej, ośmielam się twierdzić, że im bardziej „inteligentna” jest aparatura analityczna, tym większe ma skłonności do oszukiwania! Mam tego rozliczne przykłady, które udało mi się w porę zauważyć. Strach pomyśleć, ilu nie zauważyłem! Niewinna też jest „Brać Drukarska”. Wszystkie błędy są wyłącznie moją winą.
Dlatego proszę o uważne czytanie i natychmiastowe zapisywanie zauważonych błędów, choćby na wewnętrznej stronie okładki, a następnie przesłanie ich na mój adres e-mailowy. Zrewanżuję się, jeśli będę mógł, kopią następnego wydania. Jeśli, ma się rozumieć, otrzymam również adres nadawcy. Będę wdzięczny również za wszelkie uwagi i sugestie, a zwłaszcza za uzupełnienie tabel korelacyjnych o niezbędne dane, które były wynikiem systematycznego rozwiązywania problemów.

Właścicielem tej książeczki jest . . . . . .

Semestr . . . . . roku akademickiego . . . . . / . . . . . .

Podpis . . . . . .

Mirek Soroka

LABORATORIUM CHEMII ORGANICZNEJ

DLA P.T. NIEDORAJDÓW

czyli

KUCHNIA CHEMII ORGANICZNEJ
DLA TYCH, CO PO RAZ PIERWSZY ...

Część 2.3.

Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych

Zbiór problemów

Elektroniczna wersja tej książki
jest moim darem dla
Biblioteki Politechniki Wrocławskiej
Mirek Soroka
2007-12-12

Dla wszystkich badaczy sztuki chemicznej,
to znaczy dla naturalnych synów Hermesa Trismegistosa,
autor prosi Boga o zdrowie i o błogosławieństwo.

Michael Sendivogius (Michał Sędziwój, 1604)
i MS (2004, student 93 semestru)...

Wrocław, 2004-12-12

Spis treści

1. Wstęp (4 str.)
2. Algorytm (4 str.)
3. Przykład (3 str.)
4. For those who do not understand Polish (9 pages)
5. Problemy, wstęp i literatura (1)
5.1. Zadania MS040300-MS040946 (143 zadania z IR/NMR i MS w postaci numerycznej)
5.2. Zadania MS040008-MS040144 (58 zadań z MS w postaci numerycznej)

6. Tabele korelacyjne

Mass spektrometry (MS) (3 tabele)

- MS_Tabela 1. Rozpowszechnienie i dokładne masy izotopów pierwiastków częściej występujących w związkach organicznych.
- MS_Tabela 2. Kationorodniki i kationy częściej występujące w widmach masowych (EI)
- MS_Tabela 3. Rodniki i cząsteczki obojętne obserwowane w widmach masowych (EI)

^{1}H Nuclear Magnetic Resonanse (NMR) (8 tabel)

- NMR_Tabela 1.1. Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji α- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3)
- NMR_Tabela 1.2. Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji α- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3), podstawniki złożone.
- NMR_Tabela 1.3. Wpływ efektu indukcyjnego dwóch podstawników w pozycji α- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metylenowej (n=2) w wybranych związkach o wzorze X-CH_2-X.
- NMR_Tabela 2.1. Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji β- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3)
- NMR_Tabela 2.2. Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji β- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3), podstawniki złożone
- NMR_Tabela 3. Wartości przesunięć chemicznych wybranych związków nienasyconych, aldehydów, imin, etc.
- NMR_Tabela 4. Wpływ podstawnika na przesunięcie chemiczne protonów w pozycji o-, m- i p- w monopodstawionych pochodnych benzenu (Ph-X)
- NMR_Tabela 5. Typowe wartości przesunięć chemicznych protonów wymienialnych (na heteroatomach)

Infrared Spectroscopy (IR) (7 tabel)

- IR_Tabela 1. Zakres 3650-2350 cm^{-1} (pasma rozciągające grup –O-H, -N-H i C-H
- IR_Tabela 2. Zakres 2500-1900 cm^{-1} (wiązania wielokrotne)
- IR_Tabela 3.1. Zakres 2000-1400 cm^{-1} (wybrane fragmenty i wiązania podwójne, bez C=O)
- IR_Tabela 3.2. Zakres 2000-1400 cm^{-1} (drgania wiązań podwójnych, wybrane związki karbonylowe)
- IR_Tabela 4.1. Zakres 1500-600 cm-1 (drgania wybranych fragmentów i grup funkcyjnych, część I)
- IR_Tabela 4.2. Zakres 1500-600 cm-1 (drgania wybranych fragmentów i grup funkcyjnych, część II)
- IR_Tabela 4.3. Zakres 1500-600 cm-1 (drgania wybranych fragmentów i grup funkcyjnych, część III)

7. Lista z numerami zadań

Drogi Czytelniku,

jeśli wykonałeś już w swoim życiu pół kopy syntez lub zbadałeś z pół tuzina reakcji organicznych – ta książka nie jest dla Ciebie. Nie trać czasu. Możesz ją spokojnie odłożyć na półkę. Ona jest dla tych, którzy „pierwszy raz", chyba ..., że chcesz nauczyć czegoś autora, czyli mnie. To co innego. Oczekuję na Twój e-mail (miroslaw.soroka@pwr.wroc.pl).

Metody spektroskopowe zdominowały współczesną chemię, zwłaszcza chemię organiczną. Praca w laboratorium chemicznym, które nie ma dostępu do nowoczesnych spektrometrów, a zwłaszcza do wielkiej trójki: spektrometr mas (**MS**), spektrometr magnetycznego rezonansu jądrowego (**NMR**) i spektrometr w podczerwieni (**IR**) - nie jest możliwa. Metody te stały się niezastąpionym narzędziem badawczym, a spektrometry są zwykle instalowane „pod ręką", często w miejscu dokonywania eksperymentu, a nierzadko wykonuje się nawet eksperymenty bezpośrednio w spektrometrach! Coraz częściej stosuje się je również do kontroli procesów technologicznych bezpośrednio na instalacjach przemysłowych. Od dawna stosuje się je w badaniach kosmicznych. Stosuje się je również w naszym codziennym życiu, choćby do tak trywialnych, żeby nie powiedzieć zbytecznych celów, jak na przykład analiza zawartości etanolu w wydychanym powietrzu.

Nic więc dziwnego, że wykłady i ćwiczenia z „metod spektroskopowych" są oferowane na każdym uniwersytecie. Żeby jednak nabyć biegłości w stosowaniu metod spektroskopowych, nie wystarczy tylko wysłuchać kilku wykładów, bądź przeczytać kilka książek. Niezbędny jest trening. Ta książeczka jest właśnie pomyślana jako narzędzie do treningu. Jest ona fragmentem „Laboratorium chemii organicznej", a składa się z ponad setki zadań wybranych z obszernej kolekcji zgromadzonej przez autora w czasie ponad 90 semestrów studiów. Są to zadania „rzeczywiste", to znaczy takie, do których widma zostały wykonane z rzeczywistych substancji w naszych laboratoriach, głównie przez studentów „odrabiających" laboratorium z metod spektroskopowych. Do zbioru dodano algorytm rozwiązywania problemów spektroskopowych, zadanie wzorcowe i minimalny zestaw tabel korelacyjnych skompilowanych z różnych źródeł literaturowych.

Kilkanaście stron tej książeczki napisano po angielsku (I believe!), żeby umożliwić studiowanie tego podręcznika studentom, którzy nie posługują się językiem polskim. Ten zbiór zadań nie zawiera rozwiązań - głównie z powodów oszczędnościowych, ale także z tego powodu, że problemy w nim umieszczone są łatwe. Powinny być łatwe dla większości studentów, bowiem rzadko dotyczą związków, których masa cząsteczkowa przekracza 250. Większość problemów składa się z trzech widm: IR, ^{1}H NMR i MS. Z tego wydania usunięto widma UV, jako, że ich moc dowodowa jest niewielka, co nie podważa, ma się rozumieć, dużego znaczenia spektroskopii UV/Vis, jako taniego i czasami niezastąpionego narzędzia analitycznego. W tym zbiorze nie ma również analizy elementarnej, która jeszcze niedawno była podstawowym narzędziem strukturalnym.

Nie muszę przypominać, że niemal każde laboratorium dysponujące spektrometrami jest w posiadaniu mniej lub bardziej obszernych bibliotek widm, a nierzadko programów, które umożliwiają komputerowe porównanie zmierzonego widma z widmem w posiadanych zbiorach, co umożliwia automatyczną identyfikację substancji badanej w czasie kilku minut. Już w epoce przed-komputerowej taką możliwość dawały algorytmy umieszczane w atlasach widm, z najbardziej chyba znanym „SpecFinderem" Sadtlera. Czy jest zatem sens, żeby ćwiczyć umiejętność, która wydaje się zbyteczna we współczesnym świecie? Którą za nas może wykonać komputer? Nie wiem. A czy jest jakiś sens w rozwiązywaniu krzyżówek? A w układaniu puzzli? Sądzę, że rozwiązywanie problemów z metod spektroskopowych przypomina właśnie układanie puzzli, a może nawet, do pewnego stopnia, pracę śledczego, który na podstawie zebranych dowodów powinien wyjaśnić sprawę i wskazać „przestępcę". Potraktowanie tego zbioru problemów jak

książeczki do intelektualnej rozrywki pozwoli, jak sądzę, zażyć Czytelnikowi trochę przyjemności. Miłej i przyjemnej zabawy!

Korzystając z przywileju autora, udzielę jeszcze rady początkującym studentom. Przypuśćmy, że jesteś Studentem wydziału chemicznego lub „parachemicznego", jakiegokolwiek uniwersytetu na świecie. Twój profesor żąda od Ciebie żebyś robił reakcje charakterystyczne grup funkcyjnych, albo, co gorsza, każe Ci robić „pochodne" (co to jest pochodna w sensie chemicznym, a nie matematycznym, jest wyjaśnione w innych częściach tej serii, jak również w każdym podręczniku analizy organicznej). Co masz robić? Co powinieneś zrobić? Cóż, moja rada jest prosta – zmień profesora, a jeśli nie jest to możliwe – zmień uniwersytet, bowiem jeśli uczelnia żąda od Ciebie „czegoś takiego" - jest przestarzała. Nie jest Ciebie godna. Nie szanuje Twojego czasu i nie daje Ci szans na właściwy rozwój. Na nawiązanie kontaktu ze współczesną światową nauką. Jej nauczyciele stracili kontakt z teraźniejszością i ciągle żyją w XIX wieku. W żadnym wypadku nie słuchaj też rad tych starszych studentów, którzy twierdzą, że to dla Twojego dobra, że nauczysz się reakcji, że trzeba najpierw oczyścić, przedestylować, zrobić krystalizację, zrobić chromatografię, ...

Nic podobnego! Zawsze należy dać pierwszeństwo metodom spektroskopowym! Najwięcej błędów analitycznych, a zwłaszcza strukturalnych, opisanych w literaturze chemicznej, popełniono właśnie dlatego, że zamiast od razu zmierzyć widma, nawet surowego produktu, nawet *„in situ"*, *„on place"*, a nawet *„in vivo"*, poddawano badaną próbkę rozmaitym wstępnym obróbkom, w trakcie których zawarte w niej związki ulegały daleko idącym przeobrażeniom. Pamiętaj, że życie toczy się w umiarkowanych warunkach, a większość związków chemicznych, zwłaszcza tych, które składają się na matrycę analityczną, zwaną żywym organizmem, są od tej matrycy uzależnione. Bez niej ulegają przeobrażeniom, a nawet całkowitemu rozkładowi.

Badania strukturalne mają również swój wymiar ekonomiczny. Zilustruję to następującym przykładem. Przypuśćmy, że masz substancję do analizy. Nieważne skąd. Masz wyznaczyć jej strukturę. Zabierasz się metodycznie do pracy. Przypuśćmy, że zrobisz to (zgodnie z życzeniem Twoich nauczycieli) metodami XIX wieku. Musisz zmierzyć temperaturę topnienia (jest to tzw. „stała fizyczna" związku chemicznego). Potrzebujesz do tego około 2-10mg. Jeśli masz ciecz, jest gorzej! Do oznaczenia temperatury wrzenia potrzeba kilka ml, bowiem tzw. „mikrometody" są obarczone sporym błędem, a do tego wymagają aparatury i niemałego doświadczenia. Są przeto zawodne. Musisz również zmierzyć gęstość i współczynnik załamania światła (to też są „stałe fizyczne"). Na to potrzeba ze dwa mililitry bezcennej próbki. Wprawdzie większość substancji odzyskasz, jednak ta część, która zwilża powierzchnie naczyń, będzie stracona, chyba, że zadasz sobie niemało trudu, żeby ją odzyskać i ponownie oczyścić. Masz już zatem temperaturę topnienia (lub temperaturę wrzenia), współczynnik załamania światła, gęstość, ...

I co z tego wynika? Nic! Możesz wprawdzie obliczyć refrakcję, a jeśli oznaczysz masę cząsteczkową, to nawet refrakcję molową, jednak nie ma prostej i pewnej relacji między refrakcją molową, a strukturą, wobec tego nic Ci to nie daje. Jeśli nie masz dostępu do spektrometrów, pozostaje Ci wykonanie wielu żmudnych reakcji, jak w XIX wieku! Jak to robiono powszechnie aż do połowy wieku XX, kiedy to metody spektroskopowe definitywnie wyeliminowały identyfikację „chemiczną". Wyeliminowały do tego stopnia, że niejeden student na pytanie: Czy zrobiłeś może najpierw reakcję w próbówce? Odpowiada z pewnym niepokojem: A CO TO JEST PRÓBÓWKA?!

Możesz, podejrzewając, że związek, który dostałeś do analizy jest już związkiem znanym, zaglądnąć do tabel i poszukać, który ze związków w znanych kolekcjach ma takie same lub podobne cechy. Do niedawna takie tabele były powszechnie dostępne w postaci opasłych tomów, w których związki były poukładane według rosnących temperatur topnienia (w jednych), a to według rosnących wartości współczynnika załamania światła (w innych), a to według temperatur wrzenia, a to według gęstości, ...

Obecnie takie tabele jest bardzo trudno znaleźć. Są tylko w niektórych „starych” uniwersyteckich bibliotekach. Mamy XXI wiek. Pod dostatkiem komputerów i baz danych. Można więc niedużym wysiłkiem skompilować taką tabelę samemu. Na przykład z dostępnych katalogów odczynników chemicznych (osobiście cenię bardzo Aldricha!). Można sięgnąć do chemicznych baz danych, na przykład do „Beilsteina”. Katastrofa! Możesz łatwo sprawdzić, ze w tych bazach jest tyle temperatur topnienia konkretnego związku, ilu autorów! Sprawdź sam! Powiedzmy dla acetanilidu …

Wróćmy do naszych poszukiwań. Przypuśćmy, że „badana” substancja jest w „Kalendarzu Chemika”, w „Hanbook of Chemistry and Physics” i w „Katalogu Aldricha”. Wówczas, jeśli wszystkie zmierzone przez nas „stałe fizyczne” odpowiadają stałym fizycznym tylko jednemu związkowi z tych tabel, to można domniemywać, że to jest właśnie ten związek. Jednak zgodnie z **„zasadą N+1”**, powinno się przedstawić jeszcze jeden, niezależny dowód struktury takiego związku. Trzeba zatem wykonać jeszcze reakcje grupowe i charakterystyczne, a nawet, wspomnianą już, „pochodną”. Na każdą reakcję potrzebujesz około 100 mg, a na „pochodną” nawet więcej. Jak nie masz wprawy, to zmarnujesz nawet kilkaset miligramów, a nawet kilka gramów bezcennej badanej substancji. Zwyczajowo oznacza się jeszcze rozpuszczalność, co również ma pewne walory identyfikacyjne, bowiem pozwala na dodatkową klasyfikację badanego związku. Trzeba wreszcie wziąć pod uwagę, że wiele prób nie doprowadzi do żadnego wniosku. Do żadnej konkluzji! Trzeba je będzie powtórzyć, albo wykonać inne ...

Jeśli podsumujemy zużycie substancji na pomiary „stałych fizycznych” i wykonanie niezbędnych reakcji, to wyjdzie nam około 1-5 gramów! A Twój bezcenny czas?!
A wynik? Wynik jest zwykle ciągle niepewny!
A tu ciągle muszę wysłuchiwać kąśliwych uwag, że spektrometry są DROGIE! Moim zdaniem, w każdym domu powinien być spektrometr!

Nic więc dziwnego, że w „dawnych czasach” te wszystkie dowody uzupełniano jeszcze niezależną syntezą związku, na co Rosjanie mówią *„wstriecznyj sintiez”* (встречный синтез). To znaczy, że wykonuje się syntezę na drodze, która nie jest w żaden sposób związana z dotychczasową metodą syntezy, ani z pochodzeniem badanego związku. Porównanie właściwości badanej substancji z właściwościami związku uzyskanego na niezależnej drodze było zawsze (i jest w dalszym ciągu!) koronnym dowodem poprawności oznaczonej struktury. Jest to bezcenne narzędzie zwłaszcza wtedy, gdy związek badany ma silne działanie biologiczne. Brak aktywności oznacza wówczas niezbicie, że struktura została oznaczona błędnie!

Wróćmy teraz do metod spektroskopowych. Żeby zrobić widmo masowe potrzeba „niewidzialną” ilość substancji! Zwykle mniej niż mikrogram. Opisano już przypadki zmierzenia widma masowego z attomolowej ilości substancji! W dodatku, jeśli badany związek znajduje się akurat w bibliotece widm, to natychmiast po wykonaniu pomiaru, komputer automatycznie dokona identyfikacji! Żeby zmierzyć widmo IR potrzebujemy około miligrama substancji. I znowu, jeśli tylko widmo tej substancji znajduje się w pamięci komputera, to komputer z łatwością nam ją zidentyfikuje. Mało tego, poda nam listę substancji, których widma są podobne do widm w pamięci komputera. Dodam, że w chwili obecnej chyba nie ma substancji (zadań) w tym zbiorze, której widm nie można znaleźć w komercyjnych bazach danych. Do pomiaru widma NMR użyjemy zwyczajowo 20-30 mg, ale za to możemy zmierzyć nie tylko widmo „protonowe” (^{1}H), ale również „węglowe” (^{13}C), „fosforowe” (^{31}P), „selenowe”(kilka izotopów), „azotowe” (^{15}N), „fluorowe” (^{19}F) (w zależności od tego, jakie pierwiastki mamy w związku i jakimi dysponujemy możliwościami aparaturowymi). Do tego, w przeciwieństwie do metod „chemicznych”, całość związku możemy najczęściej z łatwością odzyskać. Dysponując tak druzgocącymi dowodami, nie sposób nie wskazać „przestępcy”!

Jeśli dodam do tego, że większość reakcji można wykonać bezpośrednio w probówce NMR, w kuwecie IR, albo w komorze MS, to nic dziwnego, że każdy kto ma dostęp do takiej aparatury uzyskuje błyskawicznie bardzo dużą ilość znaczącej informacji. Reszta wymaga już tylko logicznego myślenia. Obowiązek ćwiczenia swoich umiejętności w tej materii nakładają na nas – chemików, również wydawcy czasopism naukowych. Nie sposób opublikować pracę eksperymentalną w dziedzinie chemii, bez przedstawienia dowodów eksperymentalnych, wśród których znajdują się oczywiście spektrometria mas, spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego, spektroskopia w podczerwieni, spektroskopia Ramana, spektroskopia w ultrafiolecie i ... analiza elementarna! Wyniki tych pomiarów są wymagane od autorów przez wszystkie znaczące czasopisma chemiczne.

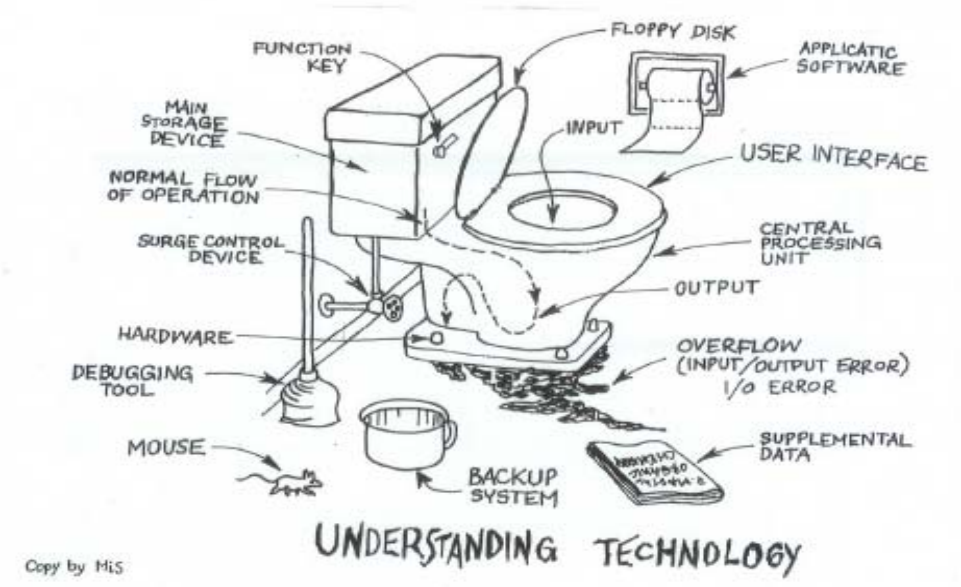
Problemy do tego zbioru wybrano metodą losową. Tak, jak się je wpisywało. Kolejność zadań jest przypadkowa. Widma pochodzą z różnych okresów i były wykonywane na rozmaitych spektrometrach. Wymienię z pamięci: Tesla 60, Tesla 80, Tesla 100, Varian 60, Bruker 250, Bruker 300, Specord 75IR, Specord 71IR, Zeiss UR10, Perkin Elmer 2000, MSD Hewlett-Packard, Finnigan MAT, i wiele innych. Większość widm wykonał autor, jednak niemałą liczbę pomiarów wykonali inni, spośród których chciałbym wymienić: Panią Mgr Urszulę Walkowiak, Panią Inż. Elżbietę Mróź i Pana Dr Andrzeja Nosala. Analizy elementarne, których wprawdzie w tym zbiorze nie umieszczono, wykonywała z nieustanną perfekcją Pani Czesława Andrzejewska. Chciałbym w tym miejscu podziękować mojej Siostrzenicy Iwonce, która wzięła na siebie ciężar przepisania i sprawdzenia zadań, na co się przecież złożyło miliony cyferek! Pewien udział w tej książce ma również Krysia Soroka, a prywatnie moja Żona …

W tym zbiorze nie ma rozwiązań problemów. Jak już wspomniałem, są one bowiem nie tylko łatwe, ale również mają względny nadmiar informacji potrzebnych do wyznaczenia struktury. Nie daje to dużej możliwości popełnienia pomyłki ...

Chociaż ...? Nie ma zadań łatwych i trudnych. Są tylko takie, które potrafimy rozwiązać, ale są i takie, których rozwiązać nie potrafimy. Niech zatem o stopniu trudności zadecyduje statystyka. Zadanie, które rozwiąże 90% studentów uznaję za łatwe, a takie, które rozwiąże tylko 10% studentów – za trudne.

Wspaniałej rozrywki!

Mirek Soroka
Student 93 semestru



Algorytm.

Zgodnie z zasadami omówionymi we wstępie, zebraliśmy widma. Przyjmijmy, że minimum stanowią trzy: widmo masowe (**MS**), widmo protonowego rezonansu magnetycznego (**NMR**) i widmo w podczerwieni (**IR**). Rozwiązanie problemu polega na znalezieniu takiej struktury, która będzie zgodna ze wszystkimi szczegółami każdego widma. Jak się do tego zabrać? Jak to zrobić?

Interpretacja danych spektroskopowych nie ma w zasadzie jednego, jedynego sposobu postępowania. Metoda postępowania i sposób rozwiązywanie struktury, a zarazem identyfikacja związku organicznego, zależy od upodobań każdego z nas. Zależy przede wszystkim od tego czym dysponujemy. Zależy też od naszej wiedzy na temat każdej z metod z osobna. Silnie zależy od naszych poprzednich doświadczeń i przyzwyczajeń. Zwykle jedno widmo wnosi już wystarczającą ilość informacji do rozwiązania struktury. Wówczas dwa widma spełniają **„regułę N+1”**, o której już wspominałem. Natomiast trzy lub cztery widma, analiza elementarna oraz inne dane (na przykład o pochodzeniu próbki, dodatkowe pomiary fizyczne, wykonane reakcje, a nawet właściwości organoleptyczne!) dają w sumie znacznie więcej informacji, niż ich potrzebujemy do rozwiązania struktury. Jeśli zatem natrafisz Czytelniku na zadanie trudne, nie trać nadziei – w końcu je rozwiążesz!

Materię bada się materią i logiką!

Rozwiązywanie problemów spektroskopowych opiera się więc na logice. Dlatego też, im więcej treningu, im więcej „przypadków” rozwiążemy, tym łatwiej będzie się nam rozwiązywać następne. Dotyczy to zresztą wszystkich rodzajów ludzkiej aktywności. Tylko perfekcyjna praktyka tworzy perfekcjonistę.

Mój algorytm jest następujący:

Rozwiązując jakikolwiek problem mam zawsze pod dostatkiem papieru do pisania, a sposób prowadzenia notatek przypomina do złudzenia protokół z „przesłuchania”. Zapisuję wszystkie uwagi, nawet takie, których nie wykorzystam w ostatecznej wersji raportu czy świadectwa analizy. Pamiętam o tym, żeby odnotować nie tylko to co widać, ale także to czego nie widać! Negatywna odpowiedź pozwala bowiem wykluczyć wiele fragmentów i grup funkcyjnych.

1. Runda pierwsza.

1.1. Zaczynam od widma masowego. Szukam jonów o najwyższych wartościach **m/z** i zakładam, że wśród nich, któryś może być jonem molekularnym. Ze swoich studiów nad spektrometrią masową wiem, że **intensywności pików w regionie molekularnym są funkcją struktury**, wobec tego z wyglądu regionu molekularnego staram się wnioskować o obecności heteroatomów, a zwłaszcza chloru i bromu, siarki, krzemu, selenu, itp. Jeśli dostrzegam charakterystyczny obraz dla obecności pierwiastków dwu- lub poliizotopowych, to z intensywności sygnałów staram się wydedukować liczbę tych pierwiastków w cząsteczce. Dla chloru i bromu jest to bardzo łatwe. Dla innych pierwiastków wymaga chwili zastanowienia, a nawet dokonania obliczeń statystycznych, a nawet symulacji. Jeśli ich nie widzę, to również odnotowuję ten fakt w protokole. Wówczas mogę przypuszczać, że związek zawiera jedynie **C**, **H**, **N** i **O**, pamiętając ciągle o pierwiastkach monoizotopowych (zwłaszcza **I**, **F** i **P**). W takiej sytuacji, jeśli **m/z** jest poniżej 1000, pik o największej intensywności w regionie molekularnym jest zapewne jonem molekularnym (pamiętam o tym, że intensywność jonu **M+1** jest proporcjonalna do liczby atomów węgla w cząsteczce, wobec tego od $\mathbf{C_{91}}$ intensywność jonu **M+1** będzie wyższa niż jonu **M**).

W ten sposób znajduję przypuszczalną masę cząsteczkową związku. Jeśli **M** jest nieparzyste, to związek zawiera nieparzystą liczbę atomów azotu (albo nie jest to jon molekularny). Zakładam, że intensywności sygnałów są zmierzone w miarę dokładnie, wobec tego normalizuję intensywności jonów **M+1** i **M+2** w stosunku do jonu **M** (z definicji=100%), a następnie korzystając z tablic Beynona wyznaczam prawdopodobny wzór sumaryczny związku. Jeśli mam wątpliwości, biorę pod uwagę więcej jonów z listy Beynona, ale tylko o zbliżonych intensywnościach pików w regionie molekularnym. Od razu wyliczam wartość **U(RDB)** z równania:

$$U=[2 + \Sigma n_i(W_i-2)]/2$$

gdzie n_i jest liczbą atomów, zaś W_i wartościowością **i**-tego pierwiastka.

Jeśli **U** jest ułamkowe, to nie jest to jon molekularny, a kation. Jeśli związek ma niedużą masę cząsteczkową, to dla tego wzoru sumarycznego i odpowiadających mu liczbie miejsc nienasycenia **U** staram się narysować możliwie największą liczbę wzorów strukturalnych, korzystając ze znanej mi teorii strukturalnej. Jeśli jest to możliwe, to od razu proponuję jedną lub kilka prawdopodobnych struktur.

Odnotowuję wartości **m/z** pików o najwyższych intensywnościach, a zwłaszcza **jonu głównego** (o intensywności 100%). Z tabeli najczęściej obserwowanych jonów odpisuję struktury jonów odpowiadających wartościom **m/z** na widmie. Następnie tworzę zbiór fragmentów z różnic $M-F_i = R_i$ lub N_i dla kolejnych jonów fragmentarycznych, co daje mi listę prawdopodobnych rodników R_i lub cząsteczek obojętnych N_i, które powstają w wyniku fragmentacji jonu molekularnego. Odnajduję te rodniki i cząsteczki obojętne w tablicy najczęściej występujących fragmentów opuszczających.

W sumie, po takiej analizie mam najczęściej **masę cząsteczkową** i **wzór sumaryczny**, informację o obecności lub nieobecności wielu pierwiastków, oraz kilka, do kilkunastu fragmentów cząsteczki, na które składają się jony (kationo-rodniki i kationy) oraz fragmenty opuszczające (rodniki i cząsteczki neutralne). Na ogół jest to informacja wystarczająca do złożenia z tych fragmentów jednej lub kilku struktur. Nierzadko „ostatecznej".

1.2. Rzucam okiem na widmo w podczerwieni, ale tylko na zakres powyżej 1500 cm^{-1} i odnotowuję obecność (lub brak) podstawowych grup funkcyjnych, a zwłaszcza **CH** od alkinów, **OH**, **NH**, NH_2 (3600-3200 cm^{-1}), **CH** alkenowe i aromatyczne (3200-3000 cm^{-1}), **CH** alifatyczne (3000-2700 cm^{-1}), grupy zawierające wiązania potrójne i skumulowane, a zwłaszcza **CN**, **NC**, **CC**, **NCO**, a także **SH**, **PH**, itp. (2700-2000 cm^{-1}), drgania fragmentów wiązań podwójnych, a zwłaszcza grupy **C=O** (2000-1500 cm^{-1}), odnotowując konsekwentnie również brak odpowiednich pasm, co sugeruje brak odpowiadających im fragmentów w strukturze. Pamiętam o tym, że pełna interpretacja widm w podczerwieni jest sztuką wymagającą starannych studiów porównawczych, a nawet wykonania dodatkowych eksperymentów. Jeśli więc nie jestem pewien mojej diagnozy, stawiam przy moich werdyktach znaki zapytania, co oznacza, że muszę wrócić do udokładniania struktury i korelacji później. W wyniku tych operacji mam najczęściej listę rozmaitych fragmentów, które mogą być w cząsteczce, a także listę fragmentów, których zapewne nie ma. Pamiętam o tym, że wyrokowanie na podstawie jednego tylko widma w podczerwieni może być ryzykowne.

1.3. Analizuję widmo magnetycznego rezonansu jądrowego (w tym zbiorze, tylko protonowe). Odnotowuję ile mam grup sygnałów, które będą zapewne odpowiadały protonom lub grupom nierównocennym. Staram się od razu wyznaczyć relacje ilościowe między nimi, z dokładnością dostępną z pomiaru, pamiętając o tym, że powinny to być liczby całkowite, ewentualnie z mnożnikiem 2, 3, 4, ..., a rzadziej większym. Z multipletowości sygnałów wnioskuję o strukturze poszczególnych grup, a jeśli brakuje multipletów, to zapisuję sobie, że nie ma grup etylowych,

etylidenowych, izopropylowych, etc. Z wartości przesunięć chemicznych wnioskuję o rodzaju podstawnika, sygnując jako **X** podstawniki o elektroujemności większej od węgla (**N, O, F, P, S, Cl, Se, Br, I**), a **M** podstawniki o elektroujemności mniejszej od węgla (**Si, B, metale**). Odnotowuję zwłaszcza sygnały o dużych wartościach przesunięć chemicznych, a także protonów będących pod wpływem dodatniej wartości pola indukowanego. To pozwala na identyfikację protonów układów aromatycznych, olefinowych, aldehydowych, i protonów „odsłoniętych" (**COOH, SO_3H, POH, NH amidowe**, etc.), jak i zauważenie obecności pierwiastków bardziej elektrododatnich od węgla.

1.4. Jeśli mam widmo w ultrafiolecie (**UV**) i ewentualnie w świetle widzialnym (**Vis**), to odnotowuję obecność (lub brak) chromoforów. Jeśli są, to z wielkości absorbancji właściwej wyliczam z dokładnością do rzędu wielkości, wartość absorbancji molowej (zakładając, że masa cząsteczkowa wynosi 100), a na tej podstawie z tablic korelacyjnych wypisuję potencjalne chromofory.

Jeśli mam analizę elementarną, to wyliczam z niej wzór sumaryczny, na przykład $[C_9H_9NO]_n$, gdzie **n** jest liczbą całkowitą.

1.5. Na podstawie tych wszystkich wniosków, rysuję na kartce papieru możliwie największą liczbę wzorów strukturalnych, nie będących w sprzeczności z wykonanymi widmami. Jeśli brakuje mi wprawy, to korzystam z pomocy katalogu odczynników chemicznych lub dostępnych baz danych. Staram się nie ulec „zauroczeniu" pierwszą zaproponowaną strukturą! (proszę pamiętać o wektorze inercji). Następnie analizuję każdą z tych struktur, **doszukując się przede wszystkim sprzeczności** między proponowaną strukturą, a posiadanym widmem.

1.5.1. Przewidywana jonizacja i fragmentacja cząsteczki musi być zgodna z obserwowanym widmem masowym. Nie może być na widmie żadnych dodatkowych fragmentów, może za wyjątkiem tych, które mogą pochodzić z powietrza (**H_2O – 18, N_2 – 28, O_2 –32, CO_2 –44**), jeśli już naprawdę w żaden sposób nie da się ich wytłumaczyć inaczej.

1.5.2. W widmie w podczerwieni powinno się zinterpretować wszystkie większe sygnały, korzystając ze szczegółowych tabel i dokładnych opisów poszczególnych klas związków.

1.5.3. W widmie **NMR** powinno się opisać wszystkie sygnały, a następnie zweryfikować wartości przesunięć chemicznych i stałych sprzężeń z wartościami literaturowymi. Jeśli jest taka możliwość, należy skorzystać z powszechnie dostępnych programów, które nie tylko wyliczają przesunięcia chemiczne, ale pozwalają również wykonać pełną symulację widma.

Jeśli wszystkie wnioski zapiszę wyraźnie na protokole „przesłuchań", to zwykle jestem w stanie zaproponować w sposób pewny strukturę, która będzie zgodna z posiadanym zestawem danych. Jak Sherlock Holmes. Wówczas koronnym dowodem powinno być porównanie widm z widmami z atlasów, a jeśli ich nie mamy, to najlepiej jest wykonana widma próbki wzorcowej i porównać je z widmami substancji badanej. Wszystkie widma powinny być parami identyczne.

Potwierdzenie poprawności wyznaczonej struktury syntezą związku, aczkolwiek bardzo eleganckie, nie jest konieczne. Wykracza ponadto poza ramy tego kursu.

Może się wszakże zdarzyć, że po wykonaniu całej tej mrówczej pracy, nie będę w stanie zaproponować żadnej struktury! To niekoniecznie musi oznaczać, że struktura jest nierozwiązywalna! Najczęściej oznacza to, że w pierwszej rundzie zbierania dowodów musiałem coś przeoczyć. Przeglądam więc jeszcze raz protokół analizy i szukam ewentualnych błędów. Jeśli nie mogę ich znaleźć, wracam (najlepiej za kilka dni) jeszcze raz do początku i analizuje wszystkie

widma ponownie, z nadzieją, że może gdzieś się pomyliłem (na przykład: nie mam jonu molekularnego, źle zinterpretowałem najważniejsze pasma w IR, źle odczytałem integrację, itp.).

2. Runda druga.

W tej rundzie zbieramy informacje uzupełniające, starając się zinterpretować dostępne dane z możliwie jak największą szczegółowością.

2.1. Z widma masowego wypisuję wszystkie jony fragmentaryczne, a następnie systematycznie, jon po jonie, sprawdzam w tabelach częściej występujących jonów czy przypadkiem nie ma któregoś z moich jonów w tych zbiorach. Czasami korzystne może być użycie zwykłej tablicy Beynona, w której są przecież wszystkie jony zawierające **C, H, N** i **O**. Następnie tworzę zbiór fragmentów neutralnych (rodniki i cząsteczki obojętne), które są (mogą być) produktami fragmentacji, tworząc nie tylko szereg zaczynający się od jonu molekularnego (**M-F$_i$**), ale również szeregi zaczynające się od kolejnych jonów fragmentarycznych (**F$_1$-F$_i$, F$_2$-F$_i$**, itd.). Daje to dodatkowo kilka do kilkunastu fragmentów, których strukturę odnajduję w tablicach fragmentów obojętnych najczęściej występujących na widmach masowych. Są to na ogół trwałe rodniki lub proste cząsteczki, takie jak: woda, azot, tlenek węgla, dwutlenek węgla, siarka, keten, cyjanowodór, acetylen, etylen, itp. Taka procedura odpowiada założeniu (najczęściej nieprawdziwemu), że jon molekularny rozpada się szybko z wytworzeniem jonu fragmentarycznego, a ten dalej do kolejnych kationów lub kationo-rodników. Wprawdzie nie jest to zgodne z mechanizmami fragmentacji, tym nie mniej, taka analiza daje czasami informacje, których się nie dostrzeże w żaden inny sposób.

2.2. Na widmie w podczerwieni analizuję jeszcze raz poszczególne regiony grup funkcyjnych, tym razem włączając w to również region tzw. „odcisku palca". Jeśli mam widmo wzorca, to mogę porównać wprost widmo substancji badanej z tym widmem. Staram się zinterpretować wszystkie sygnały o dużej intensywności. Szukam również pasm absorpcji określających izomery podstawieniowe w układach aromatycznych, a także analizuję względne intensywności sygnałów. Do wykonania takiej analizy niezbędne są monografie, podręczniki i tabele. Dlatego też „moi" studenci mogą przynosić na egzamin wszystkie „ściągi", włączając w to dowolne podręczniki. Najlepszym miejscem na każdy egzamin jest oczywiście Biblioteka …

2.3. Na widmie NMR porównuję wartości stałych sprzężenia spinowo-spinowego i wartości przesunięć chemicznych z wartościami obliczonymi na podstawie danych literaturowych. Jeśli mam taką możliwość, to symuluję widmo, korzystając z odpowiedniego programu.

W wyniku tych operacji powinienem uzyskać definitywne potwierdzenie struktury.

Jeśli po tym wszystkim dalej jestem niepewny, a co gorsza, nie umiem zaproponować żadnej struktury, odkładam analizę na kilka dni (jeśli jest to możliwe), albo proszę o pomoc kolegę. W ostateczności udaję się na konsultację do profesora …

Przykład.

Analizowana substancja **MSMS810000** jest cieczą o przyjemnym słabym zapachu, rozpuszczalną w alkoholu i eterze, nierozpuszczalną w wodzie. Oznaczona temperatura wrzenia wynosi 213-214°C, a ciecz nie krzepnie nawet podczas długiego przechowywania w zamrażarce w temperaturze –20°C. Oznaczony na refraktometrze współczynnik załamania światła wynosi 1,5050, zaś gęstość (przy pomocy piknometru) 1,047. Wykonano ponadto widmo masowe (**MS**), widmo magnetycznego rezonansu protonowego (**NMR**) i widmo w podczerwieni (**IR**).

MSMS810000

IR (film cieczy):
3100vw
3045w
2990m
2945w
2920vw
2880vw
1978vw
1920vw
1878vw
1785vw
1725vs
1608w
1590w
1455m
1372m
1315m
1275vs
1175m
1108s
1070m
1025m
935w
860w
680w

NMR (CDCl3):
1,37t (3), J=7,4
4,35q (2), J=7,4
7,48m (3), J nieozn.
8,05m (2), J nieozn.

MS (70eV):
152 (3)
151 (38)
150 (380)
135 (48)
122 (1898)
105 (10000)
77 (8282)
51 (5685)
45 (516)
39 (623)
29 (3088)
28 (4142)
27 (3200)
15 (88)

Analiza klasyczna.

Ze zbiorów (katalogi, kalendarze, etc.) właściwości fizycznych odczynników chemicznych wybrano kilka związków, kierując się wartością temperatury wrzenia. Związki te zestawiono w poniższej tabeli.

Nazwa związku	Temp.topn. [^{o}C]	Temp.wrz. [^{o}C]	Gęstość [g/cm^{3}]	n20/D	Inne
MSMS810000	Nie krzepnie w –20	**213-214**	**1,047**	**1,5050**	r.A, E, t.r.W, bezb.
Aldehyd 3-chlorobenzoesowy	17-18	213-214	1,246	1,5591	tr. W, r.E, bezb.
Chlorek 4-chlorobenzylu	29	213-214	subl.	subl.	Igły, nr.W, łr.A, E, bezb., lakrymator
Bezwodnik cytrakonowy	7	213-214	1,2380	1,4710	r.A, +W>kwas, bezb.
Izoforon	-	213-214	0,9255	1,4789	nr.W, r.A,E, bezb., Lpw, zapach mięty
Acetylopirogronian etylu	18	213-215	1,1251	1,4757	Kryst.chł., bezb.
2-acetylotiofen	9	213,5	1,167	-	r.E, bezb.
Benzoesan etylu	**-34**	**213,5**	**1,0467**	**1,5052**	0,1W, r.A, E, bezb.

Zebranie tych danych wymaga nieco pracy w bibliotece, jednak zestawienie i porównanie wyników pomiarów z danymi literaturowymi, daje tylko jedną możliwość – wszystkie dane są zgodne tylko z danymi dla benzoesanu etylu. Jest to więc prawdopodobnie ten związek.

Jak widać, klasyczna metoda analizy może przynieść zadowalające rezultaty, wszakże pod jednym zasadniczym warunkiem – związek taki musi istnieć w bazach danych. Jeśli nie, to taka metoda jest oczywiście bezużyteczna. Nie doprowadzi do żadnego wyniku. Dlatego też w epoce „przedspektrokopowej" starano się kolekcjonować starannie „stałe fizyczne" dla wszystkich nowych związków. Głównie właśnie dla celów identyfikacyjnych. Nie muszę dodawać, że taka metoda „porównawcza" wymaga staranności i uczciwości wszystkich badaczy, bowiem wszystkie wyniki muszą się odznaczać precyzją. Muszą być prawdziwe. Jeśli nie, to zebrane dane jak i nasz materiał dowodowy, będą nieprzydatne do celów identyfikacyjnych.

Wróćmy jednak do metod spektroskopowych.

Na **widmie masowym** odnajduję najdalej leżące jony przy **152, 151** i **150**. Jeśli jon **150** jest jonem molekularnym, to „zwykły" wygląd regionu molekularnego wyklucza obecność chloru, bromu, siarki, selenu, krzemu, i innych pierwiastków z dużym udziałem cięższych izotopów (porównaj rozpowszechnienie tych izotopów w Przyrodzie). Wyklucza także obecność jodu, bowiem intensywność jonu M+1 jest za duża, jak na obecność pierwiastków monoizotopowych. Normalizuję intensywności w regionie molekularnym, przyjmując intensywność jonu **150** jako **100%**. Wyliczona intensywność jonu **M+1** wynosi wówczas około **10%**, wobec tego badany związek zawiera nie więcej niż **9 atomów węgla** w cząsteczce. Dla masy **150** i dla intensywności **M+1=10%**, a **M+2=0,8%**, znajduję w tablicy Beynona cztery wzory sumaryczne, z których najbardziej prawdopodobny jest wzór $\mathbf{C_9H_{10}O_2}$. Na próbę przyjmuję ten wzór jako prawdziwy. Wyliczam dla niego **U**, które wynosi **5**, z czego wynika, że może to być jon molekularny (**U** nie jest ułamkowe), a ponadto, że jest to raczej związek aromatyczny (**U** dla benzenu wynosi 4), który zawiera jeszcze jakąś grupę funkcyjną z wiązaniem podwójnym lub układem cyklicznym.

Rzut oka na **widmo w podczerwieni** natychmiast wskazuje na brakujące miejsce nienasycenia. Bardzo silne pasmo przy **1725** jest z pewnością spowodowane obecnością grupy karbonylowej. Między **3100, a 3000 cm^{-1}** widać wyraźnie **CH** aromatyczne, a poniżej **3000 cm^{-1} CH** alifatyczne.

Widmo NMR potwierdza nie tylko obecność obydwu grup funkcyjnych, to znaczy alifatycznych i aromatycznych, ale daje nam dodatkową precyzyjną informację o tym, jakie to mogą być grupy. Układ **tryplet (3) i kwartet (2)** musi być grupą etylową, zaś położenie kwartetu wskazuje z całą pewnością na obecność silnie elektroujemnego podstawnika, którym musi być grupa dwuwiązalna, prawdopodobnie tlen. Podobnie, dwie grupy sygnałów w regionie aromatycznym wskazują jednoznacznie na monopodstawiony benzen, mamy zatem grupę fenylową. W sumie, mamy: $\mathbf{C_6H_5}$**-, -C(=O)-, i –O-**$\mathbf{CH_2CH_3}$, co daje tylko jedną możliwość, a mianowicie benzoesan etylu: $\mathbf{C_6H_5}$**-C(=O)-O-**$\mathbf{CH_2CH_3}$. Dla pewności wypisuję jeszcze wszystkie możliwe wzory strukturalne dla $\mathbf{C_9H_{10}O_2}$, ale szybko dostrzegam, że tylko jeszcze jeden z nich ma sens chemiczny i może być brany pod uwagę, a mianowicie – propionian fenylu $\mathbf{C_6H_5}$**-O-C(=O)-**$\mathbf{CH_2CH_3}$, jednak szybko stwierdzam, że ani fragmentacja w widmie masowym, ani położenia sygnałów na widmie NMR, nie są z tą strukturą spójne.

A teraz, znając już strukturę, zgodnie z zasadami wracam do starannej analizy danych.

MS. Jon **135** powstaje przez oderwanie rodnika metylowego od jonu molekularnego (**150-15**). Jon **122** (**150-28**) powstaje w wyniku eliminacji etylenu z estru etylowego, co jest częstym przypadkiem dla estrów karboksylowych, a jeszcze częstszym dla fosforowych czy sulfonowych. Jon **105**

odpowiada oczywiście bardzo trwałemu kationowi fenyloacyliowemu (**$PhCO^+$**) i jest charakterystyczny dla wszystkich związków fenyloacylowych, począwszy od benzaldehydu, a skończywszy na benzofenonie. Jest to najczęściej jon główny. Oczywiście, utworzenie tego jonu musi poprzedzić oderwanie fragmentu **150-105=45**. Jest to grupa etoksylowa. Masie **77** odpowiada jon **$C_6H_5^+$**, masie **29** – jon **$CH_3CH_2^+$**, a masie **15** kation **CH_3^+**. Itd. ...
Zatem, na widmie masowym nie ma ani jednego sygnału, który byłby sprzeczny z wyznaczoną strukturą. Proszę zrobić podobną analizę dla propionianu fenylu ...
I co?

NMR. To widmo już zostało całkowicie rozwiązane w pierwszym etapie. Pozostaje nam tylko skomentować wartość stałej sprzężenia **J=7,4 Hz**, typową dla grupy etylowej przy tlenie.

IR. Jeszcze raz – **3100** i **3045** – typowe pasma aromatycznych **CH**. **2990, 2945, 2920** i **2880** – typowe alifatyczne **CH**. **1978, 1920, 1878, 1785** można przypisać aromatycznym nadtonom charakterystycznym dla monopodstawionego benzenu, jednak analiza tak słabych pasm wymaga bardzo starannych studiów. Studiów z porządnym podręcznikiem do spektroskopii IR. **1725** – najsilniejsze pasmo w widmie, odpowiada oczywiście grupie karbonylowej od estru aromatycznego. Itd., itd. Bardzo niebezpiecznie jest interpretować wszystkie pasma w widmie w podczerwieni. Dlatego też, należy ograniczyć się wyłącznie do tych, których położenie uchodzi za pewne. Na ogół region tzw. „odcisku palca" pozostawiamy bez lub z bardzo skromną interpretacją.

Gdybyśmy dysponowali jeszcze innymi danymi, takimi jak widmo **^{13}C NMR**, widmo **Ramana**, widmo w **ultrafiolecie**, czy choćby **analizą elementarną**, to oczywiście wzmocniłoby to wartość dowodową i pewność wyznaczenia struktury. Nie jest to jednak konieczne. Czasopisma chemiczne wymagają dla związków znanych tylko jednego dodatkowego dowodu.

Struktura badanego związku nie daje żadnej możliwości wystąpienia jakiejkolwiek izomerii, wobec tego na tym kończymy analizę.

Spectroscopic identification of organic compounds

Introductory remarks

We have chosen for this short course some selected spectroscopic methods, namely: **mass spectrometry (MS)**, **nuclear magnetic resonance (NMR)**, and **infrared spectroscopy (IR)**. Why? There are many reasons. Let me briefly describe one of them.

There is no doubt that one of the oldest and the most important question is: What is the structure of the matter? How the Nature made all those things? I am not going back to the Ancient Times, to those Great Greek Philosophers who first asked this question. However, let me shortly analyze the problem. For simplicity, let me analyze only primary structure, I mean how atoms are bonded together into the molecule. Now, it is obvious, that having only a few different atoms, for example: carbon, hydrogen, nitrogen, oxygen, phosphorus, and maybe sulfur, it is possible to construct, according to the structural theory, enormous number of molecules. Moreover, all of these molecules will differ in their physical, chemical, biological, etc., properties. Even these molecules which contain the same elements and the same number of atoms of these elements. We called such molecules isomers. Obviously, also the isomers have different properties. Let me write an equation:

$$\mathbf{P_m = f(S_m)}$$

What means: the properties (**P_m**) depend on a structure of molecule (**S_m**). This is understandable for people of today. Probably nobody would oppose it. But, if it is true, a derived relation must be also true. The structure of molecule could be "calculated" from its properties.

$$\mathbf{S_m = g(P_m)}$$

It means, that having some data concerning the properties of a specific molecule, we should be able to solve its structure. However, problem lays in enormous complexity of both relations. The Structure Activity Relationship (**SAR**), and its quantitative approaches (**QSAR**), as well as Activity Structure Relationship (**ASR**), and its quantitative approaches (**QASR**) are too complex to calculate them by modern mathematical methods and machines, too complicated to solve, to estimate, or even to guess! There is no question, that these relations exist, but till now, there are no simple equations which could describe them. That is why it is so difficult to design "rationally" structure which will posses needed properties!

Fortunately, there are few exceptions from the "law of complexity". Exceptions, where both relations are relatively simple. So simple that they could be described by mathematic methods, by quantum mechanic, or even by correlations. And can be solved!

Generally, these exceptions are the spectroscopic methods. Most of them have an excellent theoretical background and could be described by mathematical operators. From a broad spectrum of such methods, the simplest, and the most useful are "Three Greats": **Mass Spectrometry** (**MS**), **Nuclear Magnetic Resonance** (**NMR**), and **Infrared Spectroscopy** (**IR**). These methods follow both equations, we described earlier. In easier case - when we have the structure, we can predict spectrum, an vice versa, in a more difficult case, when we have a spectrum we can elucidate the structure. Moreover, these methods can be also used by those, who are not very familiar with math on a very high and sophisticated level! A simple algebra is good enough to solve a lot of spectroscopic problems!

Because of their simplicity and broad applications the spectroscopic methods have dominated modern laboratories as indispensable tools in research and developing centers, analytical institutions, academic labs, forensic labs, and even in the industry for process control. Therefore, it

is not unusual that universities around the world offer and organize courses concerning the "spectrometric identification of chemical compounds", and related.

This is the main reason why!

This short course can not "substitute" necessity of practicing! Lecturing is probably the worst method of knowledge distribution. After all, we do have XXI Century. There is enormous amount of information in the Internet. It is easy to find some basic information in Wikipedia, for example. Anybody can learn everything from these sources. There are also more than hundred books devoted to spectrometric methods. However, I recommend for my courses endlessly one of the bestsellers – **Silverstein's "Spectrometric Identification of Organic Compounds"** (any edition), for reading and learning, and my "workbook" with more than 150 problems, for training.

Since it is impractical to wait till students will read the books, I want to introduce you shortly to this course. Let me present bases of these three spectrometric methods, in an encyclopedic mode.

Mass spectrometry

Knowing the exact mass of molecule was a dream of many generations of chemists. Finally, mass spectrometers solved this problem, and dream became a reality. Till now we do not have any method for simple and direct weighting a molecule. Theoretically, it seems to be possible to build a device based on the gravitation force. Observing a deflection of a moving molecule near a big constant mass can gives data necessary for calculation of molecular mass. However, values of such deflection will be probably too small for practical application, since mass of molecule is extremely low. Situation changes dramatically when we add one or more charges to the molecule. Since we perfectly know the laws which govern the movement of charge in an electric as well as in a magnetic fields (see electron beam TV set, for example), we can indirectly measure the mass of molecule! The law of ion deflection on accelerating voltage and magnetic flux density is given by equation:

$$\mathbf{m/z = B^2r^2/2V}$$

where **m** is mass of the ion, **z** is charge of it, **r** is the radius of curvature of the deflected ion, **B** is magnetic field strength, and **V** is accelerating voltage.

All we need, is just to add a charge to the molecule, and to measure precisely **B**, **r** and **V**, directly, or by comparison with standards. When **z=1**, and charged molecule is stable enough to reach detector, we can calculate the molecular mass. Great! But where is the structure?

Briefly speaking, the structure could be derived from three parameters related to mass spectrometry: **fragmentation** of charged molecule, a specific **distribution of isotopes**, and **specific masses of isotopes** in the Nature.

Let us start from the last parameter. Since every isotope has unique mass, their combination (molecule) has to be also unique, and it is a kind of "physical constant" for molecule. Precisely speaking, for all its isomers. For example, mass 122.03678 can be assigned only to the one molecular formula, namely $C_7H_6O_2$. Not $C_6H_8N_3$, not C_7H_8NO, not C_7H_7P, not anything else, but only $C_7H_6O_2$! From high resolution mass spectrometry we do have not only exact value of molecular formula, but we do have more – we have a molecular formula! Exact molecular formula! Not molecular formula with many uncertainties when we calculate it from elemental analyses. Having such information it is not very difficult to write several structures of possible compounds (chemistry

students do it for training!). First, it is good idea to calculate **degree of unsaturation** (**U**), which is defined as follows:

$$\mathbf{U = [2 + \Sigma n_i(w_i\text{-}2)]/2}$$

Where **U** is a degree of unsaturation (number of double bond and rings); $\mathbf{n_i}$ is a number of atoms of element **i**, and $\mathbf{w_i}$ is a valency of this element. For example, for $C_7H_6O_2$ degree of unsaturation is:

$$\mathbf{U = [(2 + 7x(4\text{-}2) + 6x(1\text{-}2) + 2x(2\text{-}2)]/2 = [2 + 14 \text{-}6 + 0]/2 = 5}$$

What means that this molecule contains 5 double bonds, or 4 double bonds and one cycle, or two triple bonds and one double bond, etc. This parameter tells us also whether this **m/z** value could be a molecular ion, and moreover, it makes easier drawing the possible structures of molecules. For **U=5** the obvious molecular structure (for $C_7H_6O_2$) is just benzoic acid! There are three formal double bonds, one ring, and another double bond in the carbonyl group. High resolution mass spectrometry is almost perfect analytical tool. However, it has unfortunately one serious limitation – the instrument costs a fortune! Only very rich labs could afford such an expensive instrument.

Fortunately, low resolution mass spectrometers are relatively cheap! Can we use them for structure elucidation? Yes, of course. Low resolution means that we can be certain of at least the integer part of a molecular mass. For example: 122.05 or 122,1, but not worse. Once again, we do have an exact mass! But where is the structure?

Structure is in another property of elements and their isotopes – namely their natural distribution, which is relatively constant on the Earth. Almost all elements have not only unique atomic mass, but also unique isotopes distribution. For example: carbon has two isotopes – ^{12}C (98.9%) and ^{13}C (1.1%); hydrogen has ^{1}H (99.985%) and ^{2}H (0.0115%), nitrogen has ^{14}N (99.63%) and ^{15}N (0.37%), oxygen has three isotopes – ^{16}O (99.76%), ^{17}O (0.04%) and ^{18}O (0.20%); chlorine has two isotopes – ^{35}Cl (75.78%) and ^{37}Cl (24.22%); fluorine, phosphorus and iodine are monoisotopic elements, etc. The consequence of this nature of elements is that instead of a molecular ion (a sum of masses of highly distributed isotopes), there are some "satellite" peaks (a sum of masses of less distributed isotopes) which intensities depend on distribution of those isotopes. For example, for hypothetical compound "CH" we will observe three peaks on mass spectrum: the most intense peak with m/z=13 could be derived as a sum of ^{12}C and ^{1}H (intensity 100%); the next peak, called M+1 peak, with m/z=14, which is the sum of ^{13}C and ^{1}H, and ^{12}C and ^{2}H (intensity about 1.1%), and a very small (intensity about 0.01%) peak with m/z=15, which contains the heaviest isotopes of carbon and hydrogen, namely: ^{13}C and ^{2}H. These three (or sometimes more) peaks we call molecular region peaks. The rule is that: **"relative intensities of peaks in the molecular region are "physical constant" for given molecular formula, and indicate precisely on the exact molecular formula"**. This is true, because any combination of elements gives always readable pattern of peaks in this region. It is possible to calculate the formula mathematically from intensities of peaks in the molecular region, but in many cases it is much easier to use the corresponding tables (Beynon's Tables are well known).

And the last parameter of mass spectrum is a pattern of fragmentation. Generating ion, what is necessary to measure mass spectrum, adding also some excess of energy to the molecule. Some highly energetic ions reach detector, but others do not. Some population of ions fragmentate giving new ions and neutral fragments. The pattern of fragmentation is very characteristic for a specific compound. Usually spectrometer has a library of previously recorded mass spectra, so computer can easily compare measured spectrum against those in the library. However, for some simple molecules it is also not very difficult to do it manually. Lets go back to our sample we solved by high resolution mass spectrum. How to do it by low resolution mass spectrometry? On the mass spectrum there are three main peaks [m/z (intensity)]: – 122 (90%), 105 (100%), 77 (70%). First,

from intensities of peaks in the molecular region and Beynon Tables it is possible to find the most probably molecular formula – it is $C_7H_6O_2$. Next, from the table of fragments we can find $C_6H_5CO^+$ for m/z=105, and C_6H_5 for m/z=77. Then, from the table of a neutral molecule we can find hydroxyl radical (122-105=17), CO_2 plus hydrogen (122-77=45). What else do we need? The problem is solved! From one single spectrum!

NMR spectroscopy

One of the fundamental properties of a nucleus is its **spin quantum number** (**I**), which is related to structure of nucleus. Since the structure of nucleus depends on numbers of neutrons and protons, therefore spin number (**I**) could be related to the mass and atomic number of isotope. Briefly speaking in the following way:

Atomic number	Mass	Spin Number
any	odd	1/2, 3/2, 5/2, …
odd	even	1, 2, 3, …
Even	even	0

If a nucleus has a spin quantum number (**I**) other than zero it has magnetic moment, which could be explained as a result of charge movement. In other words, a spinning nucleus generates a magnetic field. For simplicity, let me discuss the simplest situation when **I=1/2**. In such case this nucleus behaves like a small magnet. In the absence of an external magnetic field, the sum of magnetic moments for same spin population is zero, because of their statistical distribution in the space. However, when this spinning nucleus is placed in a uniform homogenous external magnetic field ($\mathbf{B_o}$), the magnetic vector will assume only a discrete number of orientations, equal to **2I+1**. For spin number **I=1/2** there are two possible orientations: aligned with $\mathbf{B_o}$ (low energy state), or aligned against $\mathbf{B_o}$ (high energy state). Therefore, when we do have the **ΔE** we can write a general equation of spectroscopy:

$$\Delta E = h\nu$$

At equilibrium, the two spin states are populated according to Boltzman distribution, and in this spectroscopy, the ground state (lowest energy) has a slightly larger population than excited state (highest energy) spin state, because low **ΔE**, therefore low energy of irradiation in this area (radio frequencies). For protons the ratio is approximately 1/100,000 in a 2.35 T (tesla) external field (**ΔE** is 6×10^{-24} J), what means that only one spin more (per 100,000) is on the ground state. Such high value of $\mathbf{N/N_o}$ lowers sensitivity of this spectroscopy, especially when we compare NMR to visible region for example, where almost all molecules are on the ground state (lowest energy). Anyway, nucleus can absorb energy, and this absorption can be detected as an nuclear magnetic resonance signal.

The energy difference is proportional to magnetic field $\mathbf{B_o}$:

$$\Delta E = \gamma \times B_o \times h/2\pi$$

where the proportionality constant (**γ**) is a property of nucleus (gyromagnetic constant). Since **ΔE** increases as the $\mathbf{B_o}$ increases, the greater magnetic field, the greater is the resolution of NMR spectrum. At the present time, a routine spectrometer works at 300,000 MHz in a 7.05 T, but in many labs there are much stronger magnets. The main problem is of course the cost of such spectrometers.
Combine those two equations:

$$\Delta E = h\nu \text{ and } \Delta E = \gamma \times B_o \times h/2\pi$$

thereafter:

$$h\nu = \gamma \times B_o \times h/2\pi$$

so:

$$\nu = \gamma \times B_o/2\pi$$

A transition between spin states can occur when the nucleus absorbs a quantum energy exactly equal to **ΔE**. This exact frequency is called **resonance frequency**. So, we briefly described how the nuclear magnetic resonance works. Well. But where is the structure?

The structure could be derived from the electrons which shield the nucleus. Thus, when a molecule is placed in a magnetic field, the bonding and nonbonding electrons surrounding the nucleus, induce a week (but stronger than nucleus) electric current. The current flow induces obviously magnetic field (**B_i**) which opposes the applied field (**B_o**). In consequence, the nucleus is out of resonance, since effective magnetic field (**B_{ef}**) is much lower than it is necessary to follow the resonance condition, described in the last equation. Since **B_{ef}** is constant, we have to change B_o (or **ν**) to observe resonance again. So:

$$B_{ef} = B_o - B_i$$

Since **B_i** depends on an electron density, and in fact, the electron density is the structure of molecule, it obviously depends (strongly) on a structure. Let me show it on a simple example, but before, it is time for some definitions.

First parameter which describes NMR spectrum is **chemical shift** (δ [ppm]), which is defined:

$$\delta = [(\nu_i - \nu_o)/ \nu_{ap}] \times 10^6$$

Where **ν_i** is frequency of proton(s) in the sample, **ν_o** is a frequency of protons in the standard; and **ν_{ap}** is a frequency of apparatus (instrument).

The chemical shift (δ), instead of λ or ν, was introduced for simple reasons: it is impossible to stabilize precisely neither magnetic field nor frequency, and it is impossible to measure them with high precision. Parameter δ is a substitute of λ, ν or **1/ λ**, and depends on neither frequency nor **B_o**.

The second parameter of an NMR spectrum is an **integration** of signals. It is the same as intensity of absorption in any spectroscopy – integration depends proportionally on numbers of nuclei. It is useful for structure elucidation as well as for quantitative analyses.

And the last parameter is **J** [Hz] - **spin-spin coupling constant**. Briefly, when the proton **A** is bonded to proton **X**, both induce a very weak magnetic moment in the electrons of the chemical bonds attached to them. So, the proton **A** "see" all possible spin combinations of proton **X**. Fortunately, only two, according to equation **m=2nI+1**. In consequence, the signal of proton **A** will be split to a doublet, and vice versa, the signal of proton **X** will be split also to a doublet. Distance between the lines in the doublet measured in Hz, is called a spin-spin coupling constant (**J**), and it does not depend on value of **B_o**. In the slightly more complicated spin system, on the spectrum of CH_3CH_2Br we will observe two groups of signals: triplet (with intensities of lines as 1:2:1) of CH_3 group, and quartet (with intensities of lines as 1:3:3:1) for the CH_2 group, for the same reason as described before.

It was said, that **B_i** depends on the structure. Let me describe this relation. Suppose we do have all four methyl halogenides. Is it possible to identify them by proton NMR? Easily! **Electronegativity** of fluorine (4.0) is higher than chlorine (3.0), bromine (2.8) and iodine (2.5). When electronegativity of X in CH_3-X increases, the electron density over the methyl protons decreases, therefore, the **B_i** decreases, therefore much lower **B_o** is necessary to keep the protons in resonance.

We called this effect deshielding, what means that deshielded protons resonate at lower fields (than standard). If we understand this, it is clear that chemical shifts of CH_3-X will be exactly in the same order as the electronegativity of X. Thus, methyl fluoride has a chemical shift 4.26 ppm, methyl chloride 3.05 ppm, methyl bromide 2.68 ppm, and methyl iodide 2.16 ppm. The tetramethylsilane (standard for ^{1}H and ^{13}C NMR) has chemical shift equal zero from definition. Obviously, the silicon has much less electronegativity than any halogens, even less than carbon. Such a data can be compiled to the correlation tables. Shortly, acidic protons absorb at more than 10 ppm, aldehydic protons absorb about 10 ppm, aromatic protons between 6.5 to 9, alkenes between 5 to 7, esters about 3.5 to 4.5, ethers about 3, acetone about 2, acetyl group about 2, benzylic protons about 1.8 to 2.5, aliphatic protons about 0.5 to 1.5, etc. More examples are collected in the tables.

Infrared spectroscopy

The infrared spectroscopy can be directly used for identification of functional groups present in the compound. When the sample is prepared quantitatively there is also a possibility to use it for quantitative analysis, to obtain the data concerning the amounts of one or more compounds in the sample. Theory of infrared spectroscopy is well established (based on simple harmonic oscillators), but in a common practice analyses of spectra are based on the correlation between structure and bands positions and intensities.

Let's have a look at the molecule. Whole molecule, fragments of it, functional groups, and even single atoms, are not static, but vibrate about their equilibrium positions, even in the solid state. Frequency of such vibrations depends on mass of atoms or fragments, and the length and strength of bonds. A typical and useful range of frequency for structure elucidation is between $1.2x10^{13}$ to $1.2x10^{14}$ Hz what corresponds to wave number between 4000 cm-1 to 400 cm-1. The energy of this irradiation is between $4.79x10^{3}$ and $4.79x10^{4}$ [kJ/mol]. Infrared irradiation is absorbed by an active part of the molecule and converted to energy of molecular vibrations. This results in excitation from a ground state (lower vibrational energy level) to an excited state (higher energy level). Each vibrational energy level has many rotational energy levels, which are all similar, but not identical. This results in a closely spaced family of peaks, usually unresolved. Therefore, we observe rather broad bands in an infrared spectrum, than discrete absorption lines. In a typical spectrum band positions are usually expressed in wave number (**$1/\lambda$**) on the x-axis, and band intensities are expressed on the y-axis as transmittance or absorbance. From many possibilities, only two types of molecular vibrations give strong bands in the infrared spectrum: stretching vibration and bending vibration. However, both must result in a change in the molecular dipole moment. Thus, the stretching of a very symmetrical molecule is inactive and not result in absorption in the infrared region. Bending, scissoring, rocking, twisting, wagging, etc., give also bands in infrared spectrum, but they are rather weak, and extremely difficult for calculation and interpretation.

How to find the structure from infrared spectrum? Simple molecule such as carbon dioxide has spectrum that is relatively easy to interpret. However, as the complexity of the molecule increases it becomes more difficult to assign absorption band to a particular vibrational mode. As it was said, the infrared spectroscopy is a correlational one. It means that in past chemists have collected enormous numbers of spectra of all classes of compounds, so, it is possible to assign particular band on the spectrum to the vibration of a specific functional group. For example: the carbonyl bond stretching always occurs in the range 1650-1850 cm^{-1} in any organic molecule. Acyl halogenides absorb at 1800-1850 cm^{-1}, aliphatic esters at 1730-1760 cm^{-1}, aliphatic aldehydes at 1720-1740 cm^{-1}, aliphatic acids and aliphatic ketones at 1700-1725 cm^{-1}, aliphatic amides at 1640-1680 cm^{-1}, and so on. It is not difficult to find absorption bands of single bonds to hydrogen (C-H, O-H, N-H) between 2500-4000 cm^{-1}, characteristic absorption of triple bond between 2000-2500 cm^{-1}, and some other functionalities. What is necessary for interpretation of IR spectra? Practice, … and good correlation charts.

Finally, it is worth to note, that not only presence, but also absence of particular functional groups should be noted from the spectrum. For example, if there is no band between 1500-2000 cm^{-1}, there is certainly no carbonyl group in the elucidated structure. More examples and details you will find in the collection of problems.

Example of spectrometric identification of organic compound (instead of algorithm)

Suppose, that we obtained a substance with unknown structure for analysis. After coding (ID=**MSMS810000**), and dividing into four portions, we started our job. First, we determined some physical properties and found that this substance is a liquid with pleasant smell, soluble in alcohol and ether, insoluble in water, and has a boiling point 213-214 ^{o}C, melting point below -20 ^{o}C (does not freeze in the refrigerator), $n^{20}/_{D}$=1.5050 and $d^{20}/_{4}$=1.047. Additionally, mass spectrum, proton magnetic resonance spectrum and infrared spectrum, were measured. Spectra were digitalized (for saving space and paper) and collected on the attached work-sheets.

Classical approach

From the handbooks (e.g. Handbook of Chemistry & Physics) compounds with similar boiling points were selected, and their properties were recorded in the following table.

Name of compound	melting point [^{o}C]	boiling point [^{o}C]	density $d^{20}/_{4}$ [g/cm^{3}]	$n^{20}/_{D}$	other
MSMS810000	Do not freeze at – 20	**213-214**	**1,047**	**1,5050**	s. A, E, i. W, colourless
3-chlorobenzaldehyde	17-18	213-214	1,246	1,5591	i. W, s. E, colourless
4-chlorobenzylchloride	29	213-214	subl.	subl.	Needless, i. W, s. A, E, colourless, lachrymator
citraconic anhydride	7	213-214	1,2380	1,4710	s. A; reacts W-> acid, colourless
isophoron	n.d.	213-214	0,9255	1,4789	i. W, s. A,E, colourless, dist. with W, mentha smell
etyl acetylpyruvate	18	213-215	1,1251	1,4757	Cryst. chl., colourless
2-acetyltiophene	9	213,5	1,167	-	s. E, colourless
ethyl benzoate	**-34**	**213,5**	**1,0467**	**1,5052**	0,1 W, s. A, E, colourless

Collecting these data needs some work in the library, but simple comparison of the measured data with those found in the literature gives only one possibility – the **MSMS810000 is identical with ethyl benzoate**. As we can see from this example, a classical approach can give solution but under certain conditions: first, the compound must exist and be recorded in the data bases, handbooks, etc.; and the second, the data must be collected with possible highest precision. Must be perfectly reliable. If not, all of these data will be useless for identification.

Spectrometric identification

On the **mass spectrum** (see work-sheet) we see a group of peaks with m/z=152, 151 and 150. Suppose that 150 is the molecular ion. Therefore, a typical intensities of 151 and 152 exclude the presence of chlorine, bromine, sulfur, selenium, silicon, and other elements with higher distribution of heavier isotopes. It indicates also on absence of monoisotopic elements, especially iodine, since the intensity of M+1 ion is too high. Normalizing the intensities of peaks in the molecular region toward 150 (as 100%), we calculated that relative intensities are: about 10% for M+1, and 0.8% for M+2. Since a main constituent of M+1 peak is ^{13}C, we can estimate C_{max} as equal [10%]/[1.1%], what gives no more than 9 carbon atoms in the molecule. From the Beynon's Table, for M=150

(100%), M+1 (10%), and M+2 (0.8%) we can find only four molecular formulas, from which the most probably is $C_9H_{10}O_2$. Suppose it is true. Calculation of degree of unsaturation gives:

$$\mathbf{U = [2 + 9(4-2) + 10(1-2) + 2(2-2)]/2 = 5}$$

What indicates that it can be a molecular ion (integer), and probably it is an aromatic compound (**U** for benzene is equal 4), which contains also one additional double bond or cycle (+1).

At **infrared spectrum** we see immediately this additional double bond – a very strong band at 1725 indicate on presence of carbonyl group (C=O). We see also aromatic C-H (between 3100-3000 cm^{-1}), and aliphatic C-H (below 3000 cm^{-1}).

A **proton magnetic resonance (^{1}H NMR)** spectrum also confirms the presence of both groups, and additionally solves precisely the structure of aliphatic part of molecule. The triplet with integration 3 (relative), and the quartet with integration 2 (relative) give us precisely an ethyl group. Chemical shift of CH_2 group indicate on presence of a strong electronegative element, probably oxygen. The two multiplets (with integrations 3:2) about 7 ppm indicate on presence of monosubstituted benzene, namely phenyl. In summary, we found the following groups: C_6H_5-, -C(=O)-, and -O-CH_2CH_3, what gives only one possibility: ethyl benzoate [C_6H_5-C(=O)-O-CH_2CH_3]. We excluded the phenyl propanoate [C_6H_5-O-C(=O)-CH_2CH_3], which contains similar functions, because neither fragmentation pattern on mass spectrum nor chemical shifts of signal on the proton magnetic resonance spectrum, are consisted with the structure. Therefore, the structure is solved.

Now, let's re-analyze the rest of the data from collected spectra.

Mass spectrum. The presence of the ion 135 could be explained by fragmentation of molecular ion with evolution of methyl radical (150-135=15). Similarly, ion 122 (150-122=28) indicates on the evolution of ethylene, what is a common path of fragmentation of ethyl esters. Ion 105 (150-105=45) represents a very stable phenylacylium cation, and it is a common ion for compounds which have a structure Ph-C(=O)-X, for example: benzaldehyde, acetophenone, benzophenone, etc. A very frequent ion 105 is a main peak. A neutral molecule with m/z=45, must be an ethoxyl radical, what can be found in any table of common fragment lost, in mass spectrometry textbook, as well as in Beynon's Table. And the last main peak – ion 77, is obviously the phenyl cation. Therefore, there are no peaks in the mass spectrum (and no neutral particles) which are inconsistent with the structure proposed. Try to analyze a "theoretical" spectrum of phenyl propanoate. You will certainly find a lot of discrepancies.

Proton magnetic resonance spectrum has been already solved. What is worth to note, it is a J=7.4 Hz, which is a common vicinal coupling constant for ethyl group connected to the oxygen.

Infrared spectrum. Once again, 3100 and 3045 are typical for aromatic C-H. 2990, 2945, 2920 and 2880 – are typical for aliphatic C-H. 1978, 1920, 1878, 1785 – aromatic overtones characteristic for mono-substituted benzene, however, the analysis of such weak bands is very laborious, and needs a lot of referencing data. 1725 – the strongest band on the spectrum indicates obviously on a presence of a carbonyl group. Etc., etc. An interpretation below 1500 cm^{-1} is risky, although this region, called a "fingerprint" region, has some value for identity confirmation.

Of course, it is possible to collect many other data, for example: ^{13}C NMR, Raman spectrum, high resolution mass spectrum, ultraviolet spectrum, and elemental analysis, but usually chemistry journals accept articles for publication on the basis of "N+1 rule", what means "a minimum data", for confirmation of the structure. For a new compounds, elemental analysis is required additionally. The structure we solved has no isomers, therefore this is the end of our hard work.

MSMS810000

IR (liquid film), [cm^{-1}], (w – weak, m – medium, s – strong, v – very):

3100vw
3045w
2990m
2945w
2920vw
2880vw
1978vw
1920vw
1878vw
1785vw
1725vs
1608w
1590w
1455m
1372m
1315m
1275vs
1175m
1108s
1070m
1025m
935w
860w
680w

NMR ($CDCl_3$), δ [ppm], J [Hz], (t –triplet, q – quartet, m – multiplet):

1,37t (3), J=7,4
4,35q (2), J=7,4
7,48m (3), J n.d.
8,05m (2), J n.d.

MS (70eV), m/z (relative intensity):

152 (3)
151 (38)
150 (380)
135 (48)
122 (1898)
105 (10000)
77 (8282)
51 (5685)
45 (516)
39 (623)
29 (3088)
28 (4142)
27 (3200)
15 (88)

Problemy.

Ze względów oszczędnościowych (obrazki zajmują dużo miejsca nie tylko na papierze, ale przede wszystkim na dysku) wszystkie widma przekształcono do postaci numerycznej. Podane są położenia sygnałów i odpowiadające im intensywności. Autor zdaje sobie sprawę z tego, że obraz jest wart 10000 słów, jednak ten sposób zapisywania widm został sprawdzony na wielu pokoleniach studentów. Jedyną jego wadą, jest to, że niektórzy studenci, po intensywnym treningu na widmach „cyfrowych", mają czasami kłopoty z widmami „obrazkowymi". Może w następnym wydaniu ...

Widma IR.
Wszystkie widma w podczerwieni wykonywano w sposób rutynowy. Gazy i pary w kuwecie gazowej, ciecze w postaci filmu między okienkami z bromku potasu. Widma ciał stałych wykonywano w bromku potasu (1/200-1/100). Widma wydrukowano w postaci zależności przepuszczalności (transparencji) (w [%]), jako funkcji liczby falowej. Intensywności sygnałów podano względnie jako: vs (bardzo silne), s (silne), m (średnie), w (słabe) i vw (bardzo słabe). Pełny opis numeryczny widma w podczerwieni jest bardzo trudny, wobec tego widma te podano z komentarzami, które przede wszystkim dotyczą szerokości sygnałów.

Widma NMR.
Wykonano w sposób standardowy, najczęściej w CCl_4, $CDCl_3$ lub D_2O. Podano wartości przesunięcia chemicznego w [ppm], multipletowość sygnałów, odpowiednio: s (singlet), d (doublet), t (triplet), q (quartet). Wyższe multipletowości opisano słownie: quintet, sextet, heptet, oktet, nonet, etc. Jeśli z widma nie można było wyznaczyć liczby sygnałów, to opisano taką grupę jako m (multiplet), bez względu na to, jakiego rzędu jest ten sygnał. Wartości stałych sprzężenia spinowo-spinowego J podano w [Hz]. Jeśli nie udało się odczytać wartości J, to podano, że ich nieoznaczono (J nieozn.). Integrację przeliczono do najniższego stosunku liczb, zatem 1 do 2 do 3, może oznaczać zarówno 1 do 2 do 3, jak i 2 do 4 do 6, 3 do 6 do 9, itd.

Widma MS.
Podano wartości m/z oraz odpowiadające im intensywności sygnałów, którą znormalizowano w stosunku do jonu głównego, którego intensywność przyjęto jako 10000 (zgodnie zresztą z zasadami większości producentów spektrometrów mas). Pominięto większość jonów izotopowych dla jonów fragmentarycznych, natomiast dla regionu o najwyższej wartości m/z podano również intensywności tych jonów izotopowych, których intensywność była co najmniej 1.

Każde zadanie, bez względu na stopień złożoności umieszczono na osobnej stronie, pozostawiając Czytelnikowi miejsce na rozwiązanie problemu, notatki i „grafikę konferencyjną".

Zalecane podręczniki:

1. Silverstein, Bassler, Morrill, „Spectrometric identification of organic compounds", 5-th edition, 1991, John Wiley & Sons. (jak i wszystkie następne i poprzednie wydania, począwszy od roku 1974, w tym tłumaczenie polskie).
2. Praca zbiorowa pod redakcją Szafrana, „Określanie struktury związków organicznych metodami spektroskopowymi", PWN Warszawa, 1988.
3. Praca zbiorowa pod redakcją Zielińskiego i Rajcy, „Metody spektroskopowe i ich zastosowanie do identyfikacji związków organicznych", WNT Warszawa, 1995 (i wydania późniejsze).
4. Vogel, „Preparatyka organiczna" (tłumaczenie. polskie), WNT Warszawa, 2006. Rozdział 3.
5. Achremowicz, Soroka, „Laboratorium chemii organicznej", Politechnika Wrocławska, 1980. Rozdział 2.3. i 6. Przez sentyment dla autorów …

MS040300

IR (film cieczy):
3300s (poszerzone)
2985m
2945m
2880w
1665vs
1565s
1440m
1375m
1360w
1298m
1155w
1120vw
1075vw
1040vw
1004vw
935vw
715w (szerokie)
595m
460w

NMR (CCl4):
1,12t (3), J=7,0
1,93s (3)
3,22dxq (2), J=7,0
8,2d (1)szerokie, J=7,0

MS (70eV):
89 (7)
88 (108)
87 (2186)
72 (806)
60 (345)
59 (128)
45 (913)
44 (3678)
43 (5172)
42 (1148)
41 (460)
40 (185)
30 (10000)
29 (1712)
28 (2854)
27 (903)
18 (2700)
15 (3829)
14 (1037)

MS040302

IR (film cieczy):
2988m
2948m
2928w
2880w
2860vw
1728vs
1667m
1450m
1380w
1370m
1312m
1295m
1272m
1268m
1185s
1104m
1040s
970m
918w
839w
690w

NMR (CCl4):
1,24t (3), J=6,8
1,88dxd (3), J=1,7 J=6,8
4,13q (2), J=6,8
5,81dxq (1), J=16,0 J=1,7
6,95dxq (1), J=16,0 J=6,8

MS (70eV):
115 (1)
114 (14)
101 (6)
100 (62)
99 (1038)
86 (416)
71 (49)
70 (540)
69 (10000)
45 (850)
43 (754)
42 (746)
41 (5898)
40 (753)
39 (3254)
29 (2914)
28 (2326)
27 (1951)
26 (700)
18 (807)
15 (1822)

MS040303

IR (film cieczy):
3075w
3035w
2270vs
1950vw
1872vw
1782vw
1728w
1675vw
1603s
1585m
1515s
1460w
1390w
1285vw
1145w
1110m
1072m
1028m
903m
750s
684s
628w
567m
492w

NMR (CCl4):
7,24s

MS (70eV):
121 (51)
120 (809)
119 (10000)
91 (9998)
77 (323)
76 (285)
75 (266)
74 (326)
65 (1825)
64 (9521)
63 (4211)
52 (1122)
51 (2513)
50 (2303)
41 (2534)
39 (3858)
38 (4096)
37 (2501)
28 (7185)

MS040304

IR (film cieczy):
2978s
2862s
1470w
1370vw
1175vw
1068vs
1035w
908m
650w

NMR (CCl4):
1,80s (1)
3,64s (1)

MS (70eV):
74 (8)
73 (129)
72 (2820)
71 (2585)
43 (2113)
42 (10000)
41 (5171)
40 (1055)
39 (1762)
29 (1468)
28 (1762)
27 (2584)
26 (535)

MS040306

IR (film cieczy):
2940s
2865m
1711vs
1451m
1438m
1350m
1340m
1315m
1270w
1222m
1122m
1052w
1020w
990vw
910m
862m
748m
650w
488m
410m

NMR (CCl4):
1,83m (3)
2,25m (2)

MS (70eV):
100 (8)
99 (135)
98 (2001)
83 (583)
80 (234)
70 (1695)
69 (2344)
55 (10000)
43 (1565)
42 (9141)
41 (4180)
39 (2993)
29 (1303)
28 (3912)
27 (3910)

MS040308

IR (KBr):
3108m
3085m
3065m
3042m
2985w
2950w
2860w
1948w
1868w
1700w
1612m
1602m
1535s
1495m
1487m
1442m
1418m
1392m
1345vs
1325s
1300m
1265w
1225m
1200m
1178w
1105m
1085m
1010m
852s
812w
792m
750m
690s
623w
590m
520w
468w

NMR (aceton-d6):
4,78s (1)
7,78d (1), J=9,0
8,27d (1), J=9,0

MS (70eV):
219 (2)
218 (25)
217 (301)
216 (29)
215 (311)
138 (72)
137 (821)
136 (10000)
120 (200)
106 (1821)
90 (3042)
89 (3499)
78 (3755)
63 (2289)
51 (1021)
50 (822)
39 (1341)
30 (5120)

MS040309

IR (stop):
3520vs
3092m
1868w
1725w
1572s
1512w
1470s
1450vs
1412s
1320m
1298s
1265m
1230s
1225s
1168vs
1132m
1105s
1030vw
912s
795s
718w
620m
595m
572m
498m
400m

NMR (aceton-d6):
2,12s (1)
7,11d (1), J=9,4
7,41d (1), J=9,4

MS (70eV):
204 (1)
203 (23)
202 (342)
201 (131)
200 (3104)
199 (602)
198 (8612)
197 (521)
196 (8089)
171 (48)
169 (318)
167 (301)
164 (272)
163 (81)
162 (1732)
161 (228)
160 (2750)
137 (90)
136 (451)
135 (1002)
134 (2752)
133 (1681)
132 (4300)
109 (700)
108 (412)
107 (1122)
100 (375)
99 (3412)
98 (1415)
97 (10000)
96 (1348)
95 (402)
90 (650)
87 (854)
86 (185)
85 (552)
84 (520)
83 (602)
75 (650)
74 (1191)
73 (2622)
72 (1635)
71 (713)
67 (559)
66 (1292)
65 (400)
64 (206)
63 (2304)
62 (5225)
61 (4712)
60 (1817)
53 (1662)
50 (822)
49 (1755)
48 (2048)
47 (1182)
38 (1413)
37 (3302)
36 (1529)
35 (1603)
29 (1157)

MS040310

IR (KBr):
3080w
3040w
3025w
2920w
2860w
2815w
1602s
1570m
1515m
1465w
1440w
1410m
1365s
1315m
1230m
1195w
1170w
1155s
1140s
1070m
1015w
945m
912w
818s
760m
720w
678m
632vw
530m
510m

NMR (aceton-d6):
3,09s (6)
6,87d (2), J=9,4
7,50m (3)
7.90d+m (4), J=9,4

MS (70eV):
227 (42)
226 (530)
225 (3152)
153 (89)
152 (75)
148 (1395)
122 (39)
121 (925)
120 (10000)
105 (2403)
104 (1780)
93 (750)
92 (921)
91 (1502)
90 (523)
79 (2249)
78 (1798)
77 (6455)
76 (623)

MS040311

IR (film cieczy):
3140m
3110w
2855m
2810m
1675vs
1570m
1475m
1465m
1390s
1370m
1275m
1245w
1225w
1212vw
1160m
1078m
1020s
945w
928m
880m
840w
765m
755s
590m

NMR (CCl4):
6,65dxd (1), J=3,4 J=1,7
7,33d (1), J=3,4
7,80d (1), J=1,7
9,70s (1)

MS (70eV):
98 (13)
97 (138)
96 (2425)
69 (58)
68 (325)
67 (525)
53 (224)
52 (171)
51 (424)
50 (488)
49 (332)
42 (756)
41 (316)
40 (898)
39 (10000)
38 (3215)
37 (2125)
29 (3652)
28 (1082)
27 (155)

MS040314

IR (film cieczy):
3085m
3060w
3035m
3020w
1990vw
1920w
1870vw
1700vw
1690vw
1600m
1585s
1485m
1440vs
1220m
1148m
1070m
1030m
990m
742s
700vs
600m
400m

NMR (CCl4):
7,25m (2)
7,55m (1)
8,58m (2)

MS (70eV):
81 (15)
80 (591)
79 (10000)
78 (1325)
54 (7)
53 (650)
52 (9546)
51 (3626)
50 (2481)
39 (1328)
38 (613)
28 (2020)
27 (714)
26 (1319)
18 (1488)

MS040317

IR (film cieczy):
3370s (szerokie)
2970s
2945m
2880m
1465m
1420w
1380m
1340w
1310w
1260w
1150m
1128m
1110m
1040m
968m
955m
925w
852w
600w

NMR (CCl4):
0,91t (6), J=6,7
1,48dxq (4), J=6,7 J=6,0
3,38q (1), J=6,0
4,02s (1)

MS (70eV):
88 (9)
87 (21)
86 (10)
61 (32)
60 (358)
59 (10000)
58 (812)
57 (652)
55 (312)
45 (421)
43 (712)
42 (385)
41 (3428)
39 (716)
31 (8022)
29 (2150)
28 (1752)
27 (1803)
26 (312)
18 (305)
15 (958)

MS040320

IR (KBr):
3455s
3300m
3070m
3030m
1958vw
1920vw
1832vw
1625s
1600s
1565m
1482m
1440s
1340m
1325m
1275m
1158m
1140w
980w
760m
732w
660w

NMR (aceton d6):
5,60s (2),szeroki
6,60m (2)
7,40m (1)
8,02m (1)

MS (15eV):
96 (17)
95 (634)
94 (10000)
67 (9998)
41 (4282)
39 (5428)
28 (3615)
18 (3888)

MS040321

IR (film cieczy):
3090w
3068w
3038w
3000w
2820m
2750m
1980w
1900vw
1820vw
1755w
1685vs
1630s
1610m
1580m
1500w
1455m
1395w
1295w
1255w
1126s
1070w
1012w
972m
746s
682m

NMR (CCl4):
6,62dxd (1), J=16,3, J=7,4
7,41d (1), J=16,3
7,40m (5)
9,66d (1), J=7,4

MS (15eV):
134 (24)
133 (367)
132 (3706)
131 (6420)
103 (6278)
91 (512)
78 (5310)
77 (7485)
51 (10000)
39 (2082)

MS040322

IR (film cieczy):
3125m
3095m
1945vw
1823vw
1620s
1545vs
1490m
1420w
1350vs
1270s
1240w
1152w
1126m
1070m
922m
842m
831m
738s
707m
668w

NMR (aceton d6):
7,90t (1), J=9,4
8,85m (2)

MS (15eV):
188 (7)
187 (49)
186 (650)
140 (78)
94 (3142)
82 (1018)
68 (1107)
50 (1409)
30 (10000)

MS040325

IR (KBr):
3320m
3125m
1620s
1597m
1520m
1495m
1430m
1365m
1335s
1315s
1275s
1250m
1225m
1140m
1102m
1065m
915m
855w
832w
740w

NMR (aceton d6):
2,16s (3)
2,19s (3)
2,81s (1)
8,02d (1), J=9,4
8,45dxd (1), J=2,7, J=9,4
9,05d (1), J=2,7

MS (15eV):
240 (12)
239 (106)
238 (1020)
181 (580)
152 (1010)
122 (1100)
115 (1185)
91 (1422)
79 (4520)
78 (3615)
77 (1710)
59 (3815)
56 (4380)
41 (4920)
30 (4480)
28 (3805)
15 (10000)

MS040326

IR (film cieczy):
2980m
2945m
2920m
2885m
1773vs
1460m
1380m
1375m
1295w
1225m
1175s
1135m
1120m
1045m
1023s
972w
960w
915m
778w
708w
662w

NMR (CCl4):
1,23d (3), J=6,7
1,7-2,9m (3)
4,20m (2)

MS (15eV):
102 (5)
101 (46)
100 (476)
71 (154)
56 (4415)
41 (10000)
28 (4998)
18 (1906)
15 (1368)

MS040327

IR (film cieczy):
3350vs (szerokie)
3090m
3015m
2990m
2930m
2870m
1650m
1455m
1425m
1230m
1115m
1025s
990s
918s
640w

NMR (CCl4):
4,04dxt (2), J=1,4 J=1,4, J=4,8
4,40s (1)
5,10dxm (1), J=1,4, J=9,6, J=nieozn.
5,25dxm (1), J=1,4, J=17,4, J=nieozn.
5,94dxdxt (1), J=4,8, J=9,6, J=17,4

MS (15eV):
60 (5)
59 (69)
58 (1918)
57 (10000)
39 (3556)
31 (6014)
29 (9180)

MS040328

IR (film cieczy):
3085m
3060m
3030m
3005m
1948vw
1880vw
1805vw
1755vw
1610m
1498s
1468m
1222w
1082w
1045w
1036m
897m
815w
747s
680s

NMR (CCl4):
0,55-1,05m (4)
1,80m (1)
7,07m (5)

MS (15eV):
120 (27)
119 (561)
118 (5556)
117 (10000)
115 (3618)
103 (1123)
91 (4365)
51 (2560)
39 (3364)
28 (2246)

MS040329

IR (film cieczy):
3050w
2990w
1470w
1424m
1290vs
1260vs
1210s
1120vs
1045vs
837m
667m
623s

NMR (CCl4):
3,59q, J=9,8

MS (15eV):
212 (1)
211 (95)
210 (4278)
191 (531)
141 (806)
128 (423)
83 (6340)
64 (10000)
33 (8062)

MS040330

IR (film cieczy):
3485vw
3005w
2855m
1745vs
1435m
1245vs
1045s
980w
840m

NMR (CCl4):
1,98s (1)
3,60s (1)

MS (15eV):
76 (5)
75 (42)
74 (1110)
59 (700)
43 (9542)
29 (1864)
15 (10000)

MS040331

IR (KBr):
3300s (szeroki)
3155s (szeroki)
2800w
1660-1570s (szerokie)
1385m
1350m
1150m
1045w
1005w
870w
700w (szerokie)

NMR (CDCl3):
2,00s (3)
6,15s (2), szeroki

MS (15eV):
61 (32)
60 (380)
59 (5932)
44 (7133)
43 (4481)
42 (2280)
15 (10000)

MS040332

IR (kuweta gazowa):
3315s
3270s
1320m
1350m
940s

NMR (aceton d6):
2,05 quintet (rozpuszczalnik)
2,78s

MS (15eV):
28 (50)
27 (231)
26 (10000)
25 (2308)
24 (742)

MS040334

IR (film cieczy):
3420w
3005m
2960m
2930m
1720s
1420m
1365m
1220ms
1090w
900w

NMR (CCl4):
2,08s

MS (15eV):
60 (5)
59 (72)
58 (2220)
43 (10000)
28 (1542)
15 (4604)

MS040335

IR (film cieczy):
3010w
2950w
2295w
2255m
1445m
1375m
1040w
920w
745w

NMR (CCl_4):
1,98s

MS (15eV):
43 (1)
42 (259)
41 (10000)
40 (5402)
39 (1900)
38 (1104)
28 (1906)
18 (602)
14 (2001)

MS040336

IR (film cieczy):
2950w
1565vs
1430m
1405m
1380m
1100w
915w

NMR (CCl4):
4,30s

MS (15eV):
63 (23)
62 (87)
61 (5562)
46 (3866)
30 (10000)
15 (7062)

MS040337

IR (film cieczy):
2985m
2960m
2500w
2470uv
1255s
1240s

NMR (CCl4):
2,17s

MS (15eV):
144 (1)
143 (25)
142 (2215)
127 (1981)
28 (692)
15 (10000)

MS040338

IR (film cieczy):
3350vs (szerokie)
2945m
2835m
1450m
1420m
1120m
1025vs
650m (szerokie)

NMR (CCl4):
3,38s (3)
4,51s (1)

MS (15eV):
34 (45)
33 (177)
32 (7732)
31 (10000)
30 (833)
29 (5592)
28 (2380)
18 (2141)
15 (5011)

MS040339

IR (film cieczy):
3500-2400 szerokie
z maks. 3000s
1715vs
1410m
1360m
1280s
1230s
1050w
1010m
930m
890m

NMR (CCl4):
2,06s (3)
11,48s (1)

MS (15eV):
62 (3)
61 (126)
60 (5462)
45 (8980)
43 (9943)
29 (1592)
28 (3180)
15 (10000)

MS040340

IR (film cieczy):
3090vw
3070w
2970vw
2860vw
1975vw
1920vw
1825vw
1775vw
1685vs
1605m
1582m
1450m
1425m
1362s
1305w
1268vs
1178w
1078w
1025m
955m
758s
688s

NMR (CCl4):
2,47s (3)
7,50m (3)
7,90m (2)

MS (15eV):
122 (14)
121 (206)
120 (2258)
105 (8615)
91 (323)
77 (10000)
51 (4630)
43 (2582)
28 (2336)
15 (1720)

MS040342

IR (film cieczy):
2989m
2948w
2918w
2880vw
1740vs
1468w
1450w
1370m
1240vs
1098w
1045s
935w
920w
840w
780vw

NMR (CCl4):
1,23t (3), J=7,1
1,97s (3)
4,06q (2), J=7,1

MS (70eV):
90 (1)
89 (25)
88 (251)
73 (328)
70 (833)
61 (1032)
45 (1412)
43 (10000)
29 (2477)
15 (3762)

MS040343

IR (film cieczy):
3095w
3040m
1965vw
1820w
1480m
1038m
670s

NMR (CCl4):
7,29s

MS (15eV):
80 (17)
79 (672)
78 (10000)
77 (2500)
63 (310)
52 (2522)
51 (2443)
50 (1981)
39 (1750)
28 (2250)

MS040345

IR (film cieczy):
3070w
3035m
2970m
2943m
2880w
1950vw
1870vw
1810vw
1750vw
1610w
1498m
1458m
743m
692s

NMR (CCl4):
1,20t (3), J=7,4
2,61q (2), J=7,4
7,12s (5)

MS (15eV):
108 (9)
107 (210)
106 (2360)
91 (10000)
79 (620)
78 (1180)
77 (1200)
65 (1490)
51 (2045)
39 (1610)
28 (1300)

MS040346

IR (kuweta gazowa):
2990s
2875s
1390w
1370vw
1140vs
1072w
930vw
840vw

NMR (CCl4):
1,12t (3), J=7,1
3,38q (2), J=7,1

MS (15eV):
76 (8)
75 (132)
74 (2593)
59 (3772)
45 (3183)
31 (10000)
29 (4940)
15 (1668)

MS040347

IR (film cieczy):
3360vs (szerokie)
2975s
2930m
2880m
1450m
1378m
1325w
1272w
1082m
1045s
878m
650m

NMR (CCl4):
1,18t (3), J=7,3
3,63q (2), J=7,3
4,51s (1)

MS (15eV):
48 (5)
47 (42)
46 (1410)
45 (3462)
31 (10000)
29 (2114)
15 (1536)

MS040348

IR (film cieczy):
2940vw
1910w
1817vs
1422m
1365m
1098s
1022w
952s
586s

NMR (CCl4):
2,64s

MS (15eV):

67 (2)
66 (11)
65 (959)
63 (2956)
43 (5461)
28 (2104)
15 (10000)

MS040349

IR (film cieczy):
3070w
2225s
1975vw
1905vw
1815vw
1775vw
1605w
1585w
1490m
1450m
1290w
1198w
1180vw
1165w
1070w
1038w
925w
755s
680s

NMR (CCl4):
7,55m

MS (15eV):
105 (27)
104 (798)
103 (10000)
77 (918)
76 (5958)
50 (3047)
39 (1095)

MS040350

IR (film cieczy):
2996s
2980s
2926m
2868m
1470m
1438w
1382w
1373m
1224s
1158m
1038m
930w
878m
535m

NMR (CCl4):
1,72d (6), J=6,7
4,24 heptet (1), J=6,7

MS (70eV):
125 (19)
124 (591)
123 (20)
122 (602)
109 (128)
107 (130)
82 (159)
81 (178)
80 (162)
79 (181)
43 (10000)
41 (5058)
39 (2586)
27 (5114)
15 (904)

MS040351

IR (film cieczy):
3098w
3068m
3040w
2860w
2825m
2732m
2700w
1980vw
1912vw
1835vw
1750w
1705vs
1660m
1600s
1585m
1460m
1392m
1312m
1207s
1170m
1075w
1025w
922vw
825s
742s
683s
650m

NMR (CDCl3):
7,58 m (3)
7,90 m (2)
9,98s (1)

MS (70eV):
108 (18)
107 (302)
106 (3918)
105 (4262)
77 (10000)
51 (9085)
50 (5403)
39 (1958)
38 (1264)
37 (1260)

MS040352

IR (KBr):
3300-220s (szerokie)
maks. 3070
2830
2670
oraz 2550
1950w
1915w
1790m
1680vs (poszerzone)
1603m
1580m
1498w
1455w
1420s
1328s
1285vs
1178s
1128m
1100w
1070m
1025m
1000w
928s (poszerzone)
800m
702s
675m
660m

NMR (CDCl3):
7,60 m (3)
8,20 m (2)
12,69s (1)

MS (70eV):
124 (19)
123 (231)
122 (2978)
105 (6913)
94 (298)
77 (10000)
51 (7860)
50 (4532)
39 (1901)
38 (1429)
37 (953)

MS040353

IR (film cieczy):
3120w
3080m
2870vw
1975vw
1915vw
1810vw
1775vw
1625w
1610m
1572w
1525vs
1482m
1350vs
1320m
1175w
1110w
1070w
1022w
932w
850s
790s
700s
678s

NMR (CCl4):
7,57 m (3)
8,20 m (2)

MS (70eV):
125 (19)
124 (212)
123 (3002)
107 (117)
93 (1118)
77 (10000)
65 (1588)
51 (7242)
39 (1116)
30 (2119)
28 (2845)
18 (1437)

MS040354

IR (film cieczy):
3290m
2965s
2940m
2885m
2815m
1450m
1378m
1328w
1188vw
1138m
1045vw
720m (szerokie)

NMR (CCl_4):
0,60s (1)
1,05t (6), J=7,3
2,61q (4), J=7,3

MS (70eV):
75 (1)
74 (62)
73 (1240)
72 (650)
58 (5458)
44 (2352)
30 (10000)
15 (1644)

MS040355

IR (film cieczy):
2960s
2940s
2930m
2900m
2860m
2573w
1462m
1370m
1217w
1175w
1163m
1205w
862vw
818vw
588w

NMR (CCl4):
1,41s (9)
1,68s (1)

MS (70eV):
92 (117)
91 (147)
90 (2498)
75 (1312)
57 (6580)
41 (10000)
39 (2893)
29 (5522)
15 (816)

MS040356

IR (film cieczy):
2950w
1832vs
1760vs
1433m
1372m
1225m
1150s
1120vs
1045m
1000vs
895s
805w
780w

NMR (CCl4):
2,18s

MS (70eV):
89 (2)
88 (10)
87 (283)
60 (46)
43 (10000)
15 (3423)

MS (15eV):
89 (4)
88 (19)
87 (562)

MS040357

IR (film cieczy):
3068m
3040m
3008m
3005m
2960m
2905m
2840m
1937w
1845w
1780w
1710w
1604s
1590m
1500s
1470m
1455m
1442m
1338w
1305m
1285m
1250vs
1180m
1172m
1155w
1078m
1040s
1020m
995w
880m
780m
750s
687s

NMR (CCl4):
3,70s (3)
6,85 m (3)
7,15 m (2)

MS (70eV):
110 (38)
109 (635)
108 (8174)
93 (1588)
78 (9082)
65 (10000)
51 (3065)
39 (6248)
28 (2953)
15 (2042)

MS040358

IR (film cieczy):
3360vs (szerokie)
2978s
2945m
2885m
1470m
1415w
1378m
1370m
1340w
1325m
1165s
1132s
1110m
950s
814m

NMR (CCl4):
1,15d (6), J=6,7
3,93heptet (1), J=6,7
4,58s (1)

MS (70eV):
61 (2)
60 (41)
59 (340)
58 (26)
57 (29)
46 (220)
45 (1000)
44 (350)
43 (1900)
42 (492)
41 (745)
31 (591)
30 (112)
29 (1204)
28 (196)
27 (168)
15 (256)

MS040359

IR (film cieczy):
3093w
2988m
2946m
2918m
2882w
1726vs
1650m
1470m
1450m
1395w
1371s
1310s
1300vs
1260s
1228m
1178s
1155s
1095m
1033s
978m
858m
772m
665w
650w

NMR (CCl4):
1,30t (t), J=6,9
4,25q (2), J=6,9
6,80s (1)

MS (70eV):
144 (7)
143 (98)
127 (4478)
99 (4822)
82 (1864)
71 (1338)
55 (3863)
45 (2002)
43 (1051)
20 (10000)
28 (4600)
27 (5003)
26 (3145)
15 (1224)

MS040360

IR (film cieczy):
2990m
2940m
2265w (ostre)
1745vs
1470w
1450w
1400m
1372m
1335m
1300w
1262m
1200vs
1120w
1100w
1028s
932w
850w
680vw

NMR (CCl4):
1,30t (3), J=7,3
3,50s (2)
4,25q (2), J=7,3

MS (70eV):
115 (1)
114 (8)
113 (130)
86 (478)
68 (3382)
29 (10000)
15 (978)

MS040361

IR (film cieczy):
3095m
3068m
3035m
2930w
2900w
1960w
1880w
1815w
1725vs
1606m
1585w
1497s
1458s
1430w
1412m
1330m (szerokie)
1215w
1185w
1090m
1075m
1058m
1030m
1002w
750m
726s
692s
640vw
530m
475m

NMR (CCl4):
3,54s (2)
7,15 m (5)

MS (70eV):
212 (2)
211 (23)
210 (138)
119 (608)
91 (10000)
65 (2256)
39 (1463)
28 (1952)

MS040362

IR (film cieczy):
3400m
3330m
2960s
2910s
2870s
1625m (szerokie)
1480m
1397m
1368s
1265w
1215w
1080w
1062m
1020w
932w
895w
815m (szerokie)
712m

NMR (CCl4):
0,87s (9)
1,00s (2)
2,38s (2)

MS (70eV):
89 (1)
88 (22)
87 (340)
86 (160)
72 (728)
57 (439)
55 (993)
41 (1283)
30 (10000)

MS040363

IR (kuweta gazowa):
2970vw
2820m
2728s
2708m
1760vs
1440w
1412m
1370m
1355m
1290m
1122m
1102m
928w
900w

NMR (CCl4):
2,14d (3), J=2,8
9,78q (1), J=2,8

MS (70eV):
46 (11)
45 (126)
44 (5601)
43 (2788)
29 (10000)
15 (7783)
14 (3021)

MS040364

IR (film cieczy):
2965s
2920m
2895m
2858s
2760w
2700w
1458m
1448m
1370m
1290m
1255s
1170w
1120vs
1082m
1048m
885s
870s

NMR (CCl4):
3,60s

MS (70eV):
90 (10)
89 (95)
88 (2104)
87 (192)
58 (2272)
43 (966)
28 (10000)
18 (1534)
15 (2442)

MS040365

IR (film cieczy):
3022m
2955m
2925m
2865m
1940vw
1860vw
1775vw
1750vw
1618m
1598w
1495m
1470w
1460w
1378w
1170vw
1096vw
1040w
874w
765ws
688s

NMR (CCl4):
2,24s (3)
6,90 m (2)

MS (70eV):
108 (13)
107 (329)
106 (3812)
105 (1668)
91 (10000)
79 (1131)
78 (834)
77 (1666)
65 (1072)
51 (1548)
39 (1905)
15 (596)

MS040366

IR (film cieczy):
3008w
2970w
2917m
1715vs
1425m
1405m
1365m
1160s
1035w
968w
745w

NMR (CCl4):
2,11s (3)
2,60s (2)

MS (70eV):
116 (1)
115 (10)
114 (83)
99 (633)
71 (696)
57 (628)
43 (10000)
28 (1581)
18 (2041)
15 (2908)

MS040367

IR (film cieczy):
2990m
2950w
2920w
2880vw
1735vs
1470w
1450w
1418w
1395w
1372m
1330m
1308w
1270m
1190m
1150s
1100w
1035s
950w
865w
842w
672w

NMR (CCl4):
1,28t (3), J=7,1
3,23s (1)
4,16q (2), J=7,1

MS (70eV):
162 (1)
161 (5)
160 (31)
133 (1233)
115 (2592)
88 (1125)
60 (1098)
43 (5387)
32 (2250)
29 (10000)
15 (1198)

MS040368

IR (film cieczy):
3300vs
3085m
3065m
3040w
3025w
2112m
1962w
1890w
1816w
1765w
1680w
1605m
1577m
1488s
1445s
1245m (szerokie)
1070m
1025m
915m
750vs
687s
650s
615s
528m
512m

NMR (CCl4):
2,98s (1)
7,40 m (5)

MS (70eV):
104 (36)
103 (869)
102 (10000)
76 (3862)
75 (1053)
74 (1368)
51 (1685)
50 (2248)
39 (729)
28 (1634)

MS040369

IR (kuweta gazowa):
3018vw
2990w
2870vw
1465vw
1275s
1260s
1140w
745vs
725w

NMR (CCl4):
5,32s

MS (70eV):
89 (4)
88 (506)
87 (32)
86 (308)
85 (56)
84 (5004)
51 (3258)
49 (10000)
38 (81)
37 (243)
36 (836)
35 (1026)
14 (706)
13 (502)

MS040370

IR (film cieczy):
3300vs (szer. od 3550 do 3100)
2920s
2860s
1587s
1450m
1358m
1238w
1065s
1020vs
868m
848m

NMR (D2O 99,9%):
2,80t (1), J=5,9
3,70t (1), J=5,9
4,78s (3,1) –HOD

MS (70eV):
63 (1)
62 (13)
61 (454)
42 (683)
30 (10000)
28 (4772)
18 (3181)

MS040372

IR (film cieczy):
3095w
3065m
3038m
2980w
2920m
2860w
2840w
1955w
1878w
1815w
1760w
1715w
1609m
1498m
1455m
1438m
1425m
1320w
1240w
1202w
1072m
1028w
978w
960w
918w
768m
722s
690s
675w
563m
468w

NMR (CCl4):
1,88s (3)
3,58s (2)
7,23s (5)

MS (70eV):
140 (48)
139 (95)
138 (1002)
93 (23)
92 (788)
91 (10000)
65 (1988)
45 (1348)
39 (1542)
28 (1101)
18 (432)

MS040373

IR (film cieczy):
3440vs (szerokie)
3078m
3042m
2958m
2928m
2865m
1945vw
1905vw
1860vw
1820vw
1782vw
1690vw
1598s
1512m
1508s
1496s
1468s
1445m
1382m
1330m
1300m
1240s
1210s
1172s
1105s
1042m
982m
930w
840s
750s
709m

NMR (CCl4):
2,20s (3)
4,91s (1)
6,85 m (4)

MS (70eV):
110 (48)
109 (782)
108 (10000)
107 (9052)
91 (1068)
90 (3426)
89 (1918)
80 (2603)
79 (6450)
78 (1506)
77 (5878)
63 (1506)
53 (3012)
52 (1781)
51 (3838)
50 (2330)
39 (5206)
28 (9047)
27 (4794)
18 (4662)
15 (1373)

MS040374

IR (film cieczy):
3500-2300 (szerokie)
maks.3100vs
1730vs (szerokie)
1412s
1268s
1210vs
930vs
788s
650m

NMR (aceton-d6):
4,26s (2)
10,4s (1), poszerzony

MS (70eV):
97 (23)
96 (210)
95 (63)
94 (630)
79 (10)
77 (30)
52 (3120)
50 (10000)
45 (3141)
28 (5026)
14 (4283)

MS040377

IR (film cieczy):
3100w
3056w
3030m
2962s
2930m
2870m
1898vw
1790vw
1740vw
1516m
1465m
1385m
1365w
1308vw
1280vw
1110vw
1058vw
1022vw
812s
780w
540m

NMR (CCl4):
1,22d (6), J=7,0
2,28s (3)
2,82 heptet (1), J=7,0
7,02s (4)

MS (70eV):
136 (12)
135 (235)
134 (2132)
121 (47)
119 (10000)
91 (3624)
77 (1252)
79 (489)
78 (424)
65 (1213)
41 (2136)
39 (1875)
28 (1501)
18 (1057)
15 (752)

MS040379

IR (film cieczy):
3360vs (szerokie)
2950m
2880m
1410m (szerokie)
1330w
1255w
1200w
1085s
1040s
880m
860m

NMR (aceton-d6):
3,63s (2)
4,36s (1)

MS (70eV):
64 (1)
63 (29)
62 (300)
61 (1121)
45 (232)
44 (194)
43 (651)
33 (3277)
32 (1085)
31 (10000)
29 (1863)
28 (918)
18 (2498)

MS040382

IR (kuweta gazowa):
2980s
2940s
2880s
1468m
1388m
1262vw
1142w
915vw

NMR (CCl4):
0,90t (1), J=5,1
1,28 m (1)

MS (70eV):
74 (1)
73 (52)
72 (912)
71 (57)
70 (29)
57 (733)
43 (10000)
42 (6282)
41 (5313)
39 (1436)
29 (2595)
15 (584)

MS040383

IR (film cieczy):
3440s
3360s
3220m
3022s
2920s
2865m
1875w
1760w
1622s (szer.)
1512s
1450m
1380w
1330w
1268s
1180m
1120m
1082w
1038w
810s
712m

NMR (CCl4):
2,20s (3)
3,29s (2)
6,42d (2), J=8,0
6,85d (2), J=8,0

MS (70eV):
109 (24)
108 (680)
107 (8131)
106 (10000)
91 (120)
80 (540)
79 (813)
78 (581)
77 (1533)
54 (382)
53 (754)
52 (1101)
51 (1103)
50 (689)
39 (989)
28 (1878)
27 (1233)
26 (504)

MS040384

IR (film cieczy):
2998m
2920m
1440m
1408m
1312m
1052vs
950m
930w
895vw
692m
665w

NMR (CCl4):
2,55s

MS (70eV):
80 (175)
79 (184)
78 (3422)
63 ((6983)
61 (1385)
45 (4603)
15 (10000)

MS040385

IR (film cieczy):
2925vs
2855s
1452m
1260w
1042vw
903w
860w

NMR (CCl4):
1,43s

MS (70eV):
86 (11)
85 (372)
84 (5542)
69 (2528)
56 (10000)
41 (6999)
39 (2771)

MS040386

IR (film cieczy):
3108w
3082m
3065m
3035m
1960w
1880w
1810w
1745w
1612m
1578m
1500m
1448m
1330w
1280w
1222m
1180w
1072w
1032w
938s
830vw
770w
740m
728s
685s
562m
490m

NMR (CCl4):
6,64d (1), J=14,0
7,07d (1), J=14,0
7,22s (5)

MS (70eV):
186 (3)
185 (121)
184 (1381)
183 (130)
182 (1482)
105 (35)
104 (882)
103 (10000)
77 (7081)
51 (6491)

MS040387

IR (film cieczy):
2982m
2948m
2886m
1550vs
1465m
1438m
1382s
1350m
1228m
1130w
1100vw
895vw
870vw
795m
758vw
730w
605w

NMR (CCl4):
1,02t (3), J=6,8
2,02txq (2), J=6,8, J=6,7
4,32t (2), J=6,7

MS (70eV):
45 (3)
44 (283)
43 (8413)
41 (8408)
39 (2667)
30 (1 533)
27 (10000)
15 (1602)

MS040388

IR (KBr):
3266m
3200m
3065m
3026m
2934w
2860w
2807w
1666vs
1603s
1559s
1502m
1490m
1438m
1371m
1324m
1265m
1180w
1040w
1014w
960w
905w
755s
693m
603w
535m
509m

NMR (aceton-d6):
2,12s (3)
3,30s (1)
7,25m (3), J nieozn.
7,70m (2), J nieozn.

MS (70eV):
137 (19)
136 (289)
135 (3122)
95 (20)
94 (701)
93 (10000)
76 (1982)
75 (1317)
51 (605)
43 (2712)

MS040389

IR (film cieczy):
3350vs
2965s
2940m
2878m
1462w
1375w
1235vw
1100w
1065m
1058m
1015m
968m
880vw
858vw

NMR (CCl4):
0,90t (3), J=6,8
1,54txq (2), J=6,8, J=6,7
3,49t (2), J=6,7
4,51s (1)

MS (70eV):
62 (2)
61 (16)
60 (431)
59 (670)
42 (980)
31 (10000)
15 (621)

MS040390

IR (stop):
3530s (poszerzone)
3070w
3030w
2960s
2875m
1885vw
1745vw
1620m
1583m
1510m
1465m
1418s
1385w
1362w
1287s
1262m
1220m
1180m
1150s
1110m
1085m
1060m
1003w
942s
850m
805s
732m
690vw
580m
495vw
465vw

NMR (CCl4):
1,18d (6), J=7,1
2,21s (3)
3,14heptet (1), J=7,1
4,73s (1)
6,44s (1)
6,65d (1), J=7,9
7,04d (1), J=7,0

MS (70eV):
152 (17)
151 (246)
150 (2215)
135 (10000)
121 (206)
116 (650)
107 (675)
105 (388)
91 (1822)
79 (480)
78 (311)
77 (912)
65 (628)
53 (421)
51 (758)
43 (189)
41 (618)
39 (1344)
29 (214)
28 (501)
27 (1100)
15 (768)

MS040391

IR (film cieczy):
3370m
3290m
2980vs
2920vs
2875s
1605m (poszerzone)
1460m
1375m
1350w
1300vw
1225vw
1155w
1135w
1120vw
995w
860vw
870vw

NMR (CCl4):
0,89t (3), J=6,0
0,98d (3), J=6,4
1,09s (2)
1,20dxq (2), J=6,0 J=6,4
2,75hextet (1), J=6,4

MS (70eV):
75 (1)
74 (13)
73 (240)
72 (300)
58 (912)
44 (10000)
42 (984)
41 (1415)
30 (1153)
15 (1151)

MS040392

IR (film cieczy):
3060w
3030m
2930s
2880m
2865m
2840m
1658w
1448m
1440m
1265w
1138m
1035w
915m
872m
715m
635m

NMR (CCl4):
1,65m (2)
2,00m (2)
5,64t (1), J=1,5

MS (70eV):
84 (7)
83 (218)
82 (3260)
67 (10000)
54 (8152)
41 (4614)
39 (5269)
27 (3141)

MS040393

IR (film cieczy):
2980vs
2940s
2910s
2880s
1470m
1440w
1387m
1370m
1328m
1278w
1265m
1172w
1090w
942w
872w
812w
800w
726s
682m

NMR (CCl4):
1,03d (6), J=6,3
1,95txheptet (1), J=6,3, J=6,4
3,35d (2), J=6,4

MS (70eV):
95 (5)
94 (111)
93 (172)
92 (223)
91 (372)
79 (175)
77 (375)
56 (706)
43 (10000)
42 (5412)
41 (6240)
39 (1763)
29 (941)
28 (1648)
27 (2708)
18 (1060)
15 (824)

MS040394

IR (stop):
3500-2300 szerokie
z maks. 3025s
2925s
1950w
1870w
1810w
1710vs (poszerzone)
1608m
1496m
1450m
1415s
1290s
1250m
1212s
1160m
1078m
1030m
1000w
925m (szerokie)
830w
742m
692s
560m
520w
460w

NMR (CCl4):
2,75m (4)
7,20s (5)
10,98s (1)

MS (70eV):
152 (21)
151 (244)
150 (2448)
131 (102)
105 (1603)
104 (4998)
103 (1001)
91 (10000)
79 (954)
78 (1503)
77 (1831)
65 (1289)
51 (1976)
39 (1385)
27 (1304)

MS040396

IR (film cieczy):
2968s
2940s
2880m
1465m
1440w
1380w
1295w
1263m
1220m
1100vw
1048vw
995vw
912vw
868vw
738m
640m
560m

NMR (CCl4):
0,96t (3), J=6, 0
1,65m (4)
3,38t (2), J=6, 7

MS (70eV):
139 (7)
138 (141)
137 (8)
136 (151)
109 (132)
107 (140)
95 (70)
93 (75)
82 (68)
81 (47)
80 (73)
79 (51)
57 (10000)
41 (9348)
39 (1932)
29 (8131)

MS040398

IR (film cieczy):
3390s (szerokie)
2978s
2930s
2885m
1468m
1375m
1330w
1278m
1225w
1188s
1168s
1060m
1000vw
938s
880s
722w

NMR (CCl4):
0,90t (3), J=6,7
1,14s (6)
1,48q (2), J=6,7
3,19s (1)

MS (70eV):
75 (13)
74 (191)
73 (4218)
59 (10000)
55 (4875)
45 (1182)
43 (4608)
41 (2603)
39 (1317)
31 (5538)
29 (2501)
28 (2240)
27 (2372)
15 (2403)

MS040399

IR (film cieczy):
2962m
2948m
2880m
1745s
1468m
1438m
1380w
1365w
1325w
1260m
1195m
1172m
1110m
1100m
1018w
835vw
750vw

NMR (CCl4):
0,92t (3), J=6,0
1,50m (4)
2,23t (2). J=6,4
3,60s (3)

MS (70eV):
118 (1)
117 (8)
116 (120)
115 (60)
101 (80)
87 (2439)
85 (2825)
74 (10000)
59 (2831)
57 (4236)
56 (892)
55 (2056)
43 (6545)
41 (4371)
39 (1539)
29 (5780)
28 (3589)
27 (3592)
18 (3337)
15 (7701)

MS040830

IR (film cieczy):
3500-2400 szerokie
z pasmami
2987s
2948s
2665m
2564m
1717vs
1467m
1416m
1384w
1326w
1291m
1241s
1080m
934m
848m
810w
772w
608w

NMR (CDCl3):
1,16t (3), J=7,5
2,39q (2), J=7,5
11,7s, szeroki (1)

MS (70eV):
76 (42)
75 (319)
74 (9388)
73 (5782)
57 (3612)
56 (1960)
55 (2018)
47 (551)
46 (712)
45 (6676)
42 (681)
37 (280)
30 (1698)
29 (10000)
27 (7386)
26 (2558)

MS040831

IR(film cieczy):
2969s
2939m
2878m
1739vs
1462m
1422w
1372m
1352w
1305m
1257m
1186s
1096m
1050w
1028m
934m
854w
757w

NMR(CDCl3):
0,95t (3), J=7,4
1,26t (3), J=7,1
1,65 sextet (2), J=7,4, J=7,4
2,28t (2), J=7,4
4,13q (2), J=7,1

MS(70eV):
118(2)
117(21)
116(339)
101(498)
89(1206)
88(3998)
73(1660)
71(8833)
69(926)
61(1052)
60(2261)
45(2050)
43(10000)
42(1706)
29(8295)
27(4317)
15(3212)

MS040832

IR (film cieczy):
3369m
3292m
2958s
2926s
2873s
2862s
1607m (szerokie)
1465m
1379m
1123w
1082w
967w
836m
793m
736w

NMR (CDCl3):
0,91t (3), J=6,8
1,08s (2)
1,38m (4H), J nieozn.
2,69t (2), J=6,6

MS (70eV):
75 (1)
74 (21)
73 (422)
72 (518)
58 (1078)
55 (233)
44 (10000)
43 (412)
30 (1004)
29 (502)
27 (966)
15 (722)

MS040834

IR (film cieczy):
2973vs
2936m
2879m
1468w
1379m
1368m
1327m
1169m
1126m
1111s
1015s
905w
796w

NMR (CDCl3):
1.13 d (6), J=6.2
3.64 heptet (1), J=6.2

MS (70eV):
104 (1)
103 (24)
102 (347)
88 (92)
87 (1524)
69 (320)
59 (1020)
46 (242)
45 (10000)
43 (3956)
41 (1238)
39 (451)
31 (323)
27 (822)

MS040835

IR (film cieczy):
3024w
3008w
2977w
2946w
2919w
2815m
2784m
1694vs
1642m
1445m
1394w
1377w
1150s
1079m
971s
933m
545m

NMR (CDCl3):
2.03d (3), J=6,8
6,16dd (1), J=5,4, J=7,9
6,90dq (1), J=6,8, J=5,4
9,50d (1), J=7,9

MS (70eV):
72 (23)
71 (343)
70 (7622)
69 (3208)
55 (320)
48 (108)
42 (1722)
41 (10000)
39 (6802)
38 (1123)
37 (708)
27 (1602)
26 (498)
15 (401)

MS040836

IR (film cieczy):
2979s
2942s
2883m
2831m
2724m
1733vs
1693m
1462m
1415m
1393m
1339m
1154m
1093m
1025m
947m
851m
662w
517w

NMR (CDCl3):
1,11t (3), J=7,4
2,48dq (2), J=1,4, J=7,4
9,79t (1), J=1,4

MS (70eV):
60 (16)
59 (218)
58 (6419)
57 (1878)
55 (235)
44 (223)
43 (408)
42 (306)
39 (751)
30 (612)
29 (10000)
27 (3503)
26 (1012)

MS040837

IR(film cieczy):
2962s
2937m
2875m
2720w
1729s
1466m
1415m
1380m
1150m
1128m
971m

NMR(CDCl3):
0,97t (3), J=6,1
1,16tq (2), J=6,1, J=6,7
2,40dt (2), J=1,8, J=6,7
9,76t (1), J=1,8

MS(70eV):
74(17)
73(256)
72(5692)
71(564)
57(2318)
44(10000)
43(7398)
42(1107)
41(5670)
38(401)
29(4855)
27(5575)
26(603)

MS040838

IR (film cieczy):
2966s
2884m
1747vs
1470m
1455m
1408m
1313w
1279w
1231w
1153s
959m
834m
772m

NMR (CDCl3):
2,16t (1), J=7,2
1,96m (1), J=7,2

MS (70eV):
86 (14)
85 (236)
84 (4212)
83 (192)
67 (114)
56 (2906)
55 (10000)
42 (1526)
38 (341)
27 (2410)
26 (908)

MS040839

IR(film cieczy):
3359s
2962vs
2934s
2876s
1460s
1385s
1373s
1328m
1301w
1272w
1184w
1152w
1130w
1099s
1055s
1023m
1006m
934m
880m

NMR(CDCl3):
0,85d (3), J=6,4
0,88d (3), J=6,5
1,09d (3), J=6,3
1,55m (1), J nieozn.
2,10s, szeroki (1)
3,50m (1), Jnieozn.

MS(70eV):
90(2)
89(34)
88(612)
87(208)
73(1409)
57(308)
55(1057)
45(10000)
44(1523)
39(652)
29(512)
27(618)
15(3502)

MS040840

IR (film cieczy):
3370m
3331m
3062m
3027m
2890m
2860m
1643w
1605m
1495m
1453s
1385m
1059w
1026w
869m
737m
698s
582m

NMR (CDCl3):
1,66s (2)
3,82s (2)
7,26 m (5)

MS (70eV):
109 (15)
108 (422)
107 ((5227)
106 (10000)
105 (960)
104 (948)
91 (1792)
79 (4828)
78 (1952)
77 (2877)
76 (818)
52 (921)
51 (2080)
30 (8652)

MS040843

IR (film cieczy):
3276m
2932s
2851s
2804m
2733m
1443m
1384w
1331w
1318m
1258w
1191w
1165w
1146w
1115m
1051m
1035m
939w
860m
745m
547m

NMR (CDCl3):

1,53 m (6), J nieozn.
1,69 s, poszerz.
2,80 m (4), J nieozn.

MS (70eV):
87 (7)
86 (297)
85 (4955)
84 (10000)
70 (1118)
57 (3466)
56 (5450)
44 (2255)
42 (2142)
30 (1552)
27 (1382)
26 (397)

MS040844

IR (film cieczy):
3435w
2986m
2940m
1742vs
1717vs
1651m
1467w
1448m
1412m
1367s
1319s
1266s
1117m
1153s
1097m
1042s
935w
852w
803w
625w
543m

NMR (CDCl3):
1,29t (3), J=7,2
2,27s (3)
3,45s (2)
4,20q (2), J=7,2

MS (70eV):
132 (5)
131 (43)
130 (633)
102 (367)
88 (1795)
85 (1380)
69 (520)
61 (411)
60 (916)
45 (580)
43 (10000)
27 (1210)
15 (1113)

MS040845

IR (film cieczy):
3342s (szerokie)
2957s
2873s
1471m
1388m
1367m
1292w
1247w
1114w
1042vs
1003m
961w
940w
901w
819w

NMR (CDCl3):
0,91d (6), J=6,6
1,76 nonet (1), J=6,6
2,30s, szeroki (1)
3,39d (2), J=6,6

MS (70eV):
76 (1)
75 (15)
74 (334)
60 (355)
59 (10000)
57 (875)
56 (193)
43 (1199)
42 (291)
41 (1842)
31 (2797)
29 (998)
27 (734)
15 (1023)

MS040846

IR (film cieczy):
2972m
2916m
2860m
1440m
1376m
1202vs
950m
742m
500m

NMR (CDCl3):
1,85t (3), J=7,5
3,19q (2), J=7,5

MS (70eV):
158 (1)
157 (231)
156 (10000)
141 (238)
128 (790)
127 (3042)
29 (7552)
27 (6312)
15 (3100)

MS040848 50 (212)

IR (film cieczy):
3067w
2978w
2935w
2860w
1613m
1578m
1523vs
1483m
1461m
1430w
1384w
1348s
1307m
1278w
1203w
1164w
1150w
1083w
1038w
955w
859m
788m
729s
666m
475w

NMR (CDCl3):
2,60s (3)
7,34m (2), J nieozn.
7,48dt (1), J=1,2, J=7,5
7,96dd (1), J=1,4, J=7,5

MS (70eV):
139 (5)
138 (59)
137 (722)
121 (305)
120 (3380)
107 (131)
93 (422)
92 (3843)
91 (3700)
90 (702)
89 (1662)
77 (2061)
66 (711)
65 (10000)
64 (1024)
63 (2680)

MS040849

IR (film cieczy):
3068w
3022w
2981w
2953w
2926w
1574m
1382w
1282w
1129w
1091w
1056s
1042m
1017w
937w
805w
747vs
700w
678m
552w

NMR (CDCl3):
2,39s (3)
7,14m (2), J nieozn.
7,22dd (1), J=2,4, J=6,6
7,33dd (1), J=2,2, J=6,8

MS (70eV):
130 (4)
129 (93)
128 (1202)
127 (661)
126 (3628)
125 (1822)
92 (733)
91 (10000)
90 (1141)
89 (1476)
65 (1001)
64 (380)
63 (1712)
62 (750)
49 (260)
37 (428)
35 (1288)

MS040850

IR(film cieczy):
3331vs, szeroki
2944s
2883s
1474m
1422m
1376m
1232m
1183m
1063vs
986m
940m
922m
869w
779w
666m, szerokie
528m

NMR(CDCl3):
1,86quintet (2), J=5,6
2,03s, szeroki (2)
3,88t (4), J=5,6

MS(70eV):
78(1)
77(3)
76(88)
60(19)
59(254)
58(7486)
57(6120)
56(443)
46(1208)
45(2111)
44(624)
31(10000)
27(4623)
26(1212)

MS040851

IR(film cieczy):
3444m
3363s
3216m
3059w
1621vs
1598s
1486s
1450m
1321m
1302m
1267m
1164m
1077s
993m
889s
851m
771s
681s
563w
529w

NMR(CDCl3):
3,60s (2)
6,39dd (1), J=8,0
6,54dd (1), J=1,8, J=7,9
6,66dd (1), J=1,9, J=1,9
6,97dd (1), J=1,8, J=8,0

MS(70eV):
131(7)
130(230)
129(3298)
128(752)
127(10000)
102(365)
100(1082)
93(131)
92(1871)
65(2502)
51(2201)
46(912)
37(41)
35(122)

MS040852

IR (film cieczy):
3094w
3063w
3027w
2876m
2803m
1602s
1577m
1508vs
1444m
1346s
1229m
1192m
1166m
1131w
1060m
991m
945m
864w
750s
691s
516m

NMR (CDCl3):
6,63d (2), J=8,3
6,66t (1), J=7,3
7,16dd (2), J=7,3, J=8,3

MS (70eV):
123 (26)
122 (631)
121 (6834)
120 (10000)
106 (601)
105 (1633)
104 (1750)
92 (598)
91 (892)
77 (2804)
60 (722)
51 (1920)
42 (1318)

MS040855

IR (film cieczy):
3086w
3064w
3028m
2966s
2932m
2874m
1605m
1496m
1454m
1376w
1090w
1030w
965w
904w
772m
746m
697vs
556m
486m

NMR (CDCl3):
1,24t (3), J=7,6
2,64q (2), J=7,6
7,18m (3), J nieozn.
7,28m (2), J nieozn.

MS (70eV):
108 (12)
107 (288)
106 (3256)
105 (602)
92 (761)
91 (10000)
79 (392)
78 (848)
77 (846)
65 (842)
51 (1312)

MS040859

IR (film cieczy):
3452m
3368s
3218w
3042w
3021m
2972w
2932w
2858w
1622vs
1585m
1488s
1469s
1443m
1380w
1316w
1303m
1272s
1143m
1065w
1035m
986w
928w
846w
752vs
715w
538w

NMR (CDCl3):
1,86s (3)
3,24s (2)
6,36d (1), J=7,8
6,61t (1), J=7,3
6,90m (2), J nieozn.

MS (70eV):
109 (25)
108 (672)
107 (8301)
106 (10000)
105 (552)
104 (201)
91 (380)
90 (552)
79 (1268)
77 (1702)
53 (978)
27 (930)

MS040860

IR(film cieczy):
3048w
3012m
2957m
2924m
1609vs
1565m
1480m
1453m
1400w
1378w
1294m
1168w
1039m
998m
914m
818s
772w
754w

NMR(CDCl3):
2,29s (3)
2,51s (3)
6,91d (1), J=5,4
6,98s (1)
8,34d (1), J=5,4

MS(70eV):
109(28)
108(802)
107(10000)
106(4655)
92(2103)
79(3628)
65(1856)
51(1157)

MS040861

IR(film cieczy):
3058w
3023m
2972m
2947m
2923m
1597vs
1561m
1494m
1447s
1406s
1386m
1306w
1195m
1069m
1023m
839m
822s
726m
601w
525m
508m

NMR(CDCl3):
2,24s (3)
2,26s (3)
7,03d (1), J=4,9
8,30d (1), J=4,9
8,32s (1)

MS(70eV):
109(28)
108(799)
107(10000)
106(4873)
92(2185)
79(3818)
65(1140)
51(1816)
27(1922)

MS040862

IR (film cieczy):
3064w
2958w
2924m
1595s
1580vs
1470s
1454s
1375m
1265w
1247w
1225w
1157m
1096m
1031m
998w
775s
718w
558w

NMR (CDCl3):
2,52s (6)
6,94d (2), J=7,6
7,44t (1), J=7,6

MS (70eV):
109 (30)
108 (811)
107 (10000)
106 (2930)
92 (1806)
80 (414)
66 (2217)
65 (1828)
63 (933)
42 (906)
39 (3911)

MS040863

IR (film cieczy):
2987s
2942m
1726vs
1477m
1449m
1387m
1303m
1191vs
1156s
1112m
1048w
1010m
841m
748w

NMR (CDCl3):
1,27t (3), J=7,2
4,21q (2), J=7,2
8,05s (1)

MS (70eV):
76 (5)
75 (41)
74 (1152)
73 (199)
57 (127)
56 (422)
47 (833)
45 (3375)
42 (222)
31 (10000)
29 (3831)
27 (5101)
26 (1720)
15 (942)

MS040864

IR(film cieczy):
2963s
2937s
2877m
1729vs
1467m
1381m
1306w
1240w
1182vs
1068w
1015w
925w
891w
820w
737w

NMR(CDCl3):
0,92t (3), J=7,4
1,42 sextet (2), J=7,4
1,64tt (2), J=6,7, J=7,4
4,15t (2), J=6,7
8,04s (1)

MS(70eV):
104(1)
103(10)
102(186)
73(672)
57(850)
56(10000)
41(5798)
31(5812)
27(4503)
15(985)

MS040865

IR(film cieczy):
3451s, szeroki
2984s
2940m
2909w
1737vs
1451m
1373m
1268s
1215s
1133vs
1048s
1020m
932m
860m
757w

NMR(CDCl3):
1,30t (3), J=7,1
1,41d (3), J=6,9
4,22q (2), J=7,1
4,27q (1), J=6,9

MS(70eV):
120(1)
119(6)
118(98)
103(34)
85(28)
75(602)
58(18)
45(10000)
29(2724)
27(1752)
15(653)

MS040866

IR (film cieczy):
2966s
2938m
2878m
1558vs
1467m
1436m
1383s
1282w
1214w
1132m
953w
914w
857w
758m
613w

NMR (CDCl3):
0,97t (3), J=7,4
1,44 sextet (2), J=7,4
1,99tt (2), J=7,0, J=7,4
4,40t (2), J=7,0

MS (70eV):
105 (1)
104 (9)
103 (183)
84 (182)
75 (365)
72 (260)
64 (274)
62 (238)
57 (3972)
56 (1136)
42 (917)
41 (8128)
30 (1416)
29 (10000)
27 (4508)
15 (487)

MS040867

IR (film cieczy):
3038w
2999w
2955m
2910w
2857w
1733vs
1635m
1621m
1439s
1404s
1279s
1208vs
1183s
1069s
989m
855m
812m
663m
625w

NMR (CDCl3):
3,73s (3)
5,80dd (1), J=1,6, J=10,4
6,12dd (1), J=10,4, J=17,4
6,38dd (1), J=1,6, J=17,4

MS (70eV):
88 (1)
87 (9)
86 (208)
85 (1822)
68 (291)
58 (945)
55 (10000)
42 (833)
31 (423)
27 (4552)
26 (1188)
15 (934)

MS040868

IR(film cieczy):
3107w
3012w
2987m
2955m
2931w
2847w
1725vs
1639s
1453s
1440s
1403m
1378m
1326s
1302s
1200s
1164vs
1021m
999m
985w
942m
816m
653m
600w
592w

NMR(CDCl3):
1,93dd (3), J=1,2, J=1,4
3,73s (3)
5,55dq (1), J=1,2, J=0,7
6,07dq (1), J=1,4, J=0,7

MS(70eV):
102(100
101(106)
100(1890)
85(2302)
69(10000)
59(506)
55(298)
53(212)
41(4803)
39(2502)
15(1014)

MS040869

IR(film cieczy):
3052m
2992m
2946m
1577s
1466s
1449s
1432s
1371w
1385w
1277w
1238w
1181m
1124m
1023m
994m
973m
787s
728s
588s

NMR(CDCl3):
2,24s (3)
2,47s (3)
6,99dd (1), J=4,6,7,5
7,35d (1), J=7,5
8,29d (1), J=4,6

MS(70eV):
109(31)
108(810)
107(10000)
106(5882)
92(1923)
80(708)
79(1829)
66(2150)
65(1992)
63(1024)
51(1387)
39(4524)

MS040870

IR (film cieczy):
3417w
2960s
2935m
2875m
1717vs
1467m
1412m
1359s
1259w
1232w
1169s
1111w
1075w
1022w
995w
896w
758w
732w
589w
541w

NMR (CDCl3):
0,88t (3), J=7,3
1,29tq (sextet), (2), J=7,3, J=7,6
1,53tt (quintet), (2), J=7,4, J=7,6
2,11s (3)
2,40t (2), J=7,4

MS (70eV):
102 (4)
101 (63)
100 (924)
85 (751)
71 (528)
58 (5111)
57 (1498)
43 (10000)
39 (502)
27 (852)
15 (633)

MS040871

IR (film cieczy):
3416w
2980s
2940m
2883w
1717vs
1460m
1417m
1366s
1257w
1173s
1087w
996w
945m
760m
590m
517w

NMR (CDCl3):
1,04t (3), J=7,3
2,12s (3)
2,43q (2), J=7,3

MS (70eV):
74 (7)
73 (108)
72 (2406)
57 (698)
43 (10000)
29 (1996)
27 (1189)
15 (699)

MS040872

IR(film cieczy):
2972s
2936s
2876s
1713vs
1470s
1384s
1365m
1282w
1205w
1181m
1129w
1113w
1089m
1026s
983m
963w
894w
859w
753w
611w

NMR(CDCl3):
1,07d (6), J=6,9
2,76 heptet (1), J=6,9

MS(70eV):
116(3)
115(48)
114(621)
71(2912)
43(10000)
41(1888)
27(2226)
15(301)

MS040873

IR (film cieczy):
3010w
2962vs
2935s
2875m
2838w
1465m
4438m
1381w
1295w
1262s
1217m
1180w
1150w
1049w
997w
915w
867w
760s
668w
644m
562m

NMR (CDCl3):
0,91t (3), J=7,4
1,46 tq (sextet) (2), J=7,4, J=6,8
1,53s (1)
1,83 quintet (2), J=6,8
3,40t (2), J=6,8

MS (70eV):
140 (1)
139 (27)
138 (604)
137 (31)
136 (609)
109 (312)
107 (318)
57 (10000)
41 (5615)
29 (4502)
27 (3001)
15 (1122)

MS040874

IR (film cieczy):
2979s
2924m
2867m
1443m
1378m
1242vs
1119w
1063w
960s
769m
561s

NMR (CDCl3):
1,66t (3), J=7,4
3,41q (2), J=7,4

MS (70eV):
112 (1)
111 (94)
110 (4155)
109 (98)
108 (4306)
95 (231)
93 (280)
82 (163)
81 (399)
80 (170)
79 (416)
29 (10000)
27 (5998)

MS040875

IR (film cieczy):
2968m
2906w
2849w
1432s
1418m
1350w
1293s
1240vs
1074w
1052w
943m
853m
834w
763m
650m
591m
563w
550m

NMR (CDCl3):
2,35 quintet (1), J=6,2
3,56t (2), J=6,2

MS (70eV):
206 (1)
205 (61)
204 (1811)
203 (118)
202 (3602)
201 (63)
200 (1878)
124 (247)
123 (7308)
122 (253)
121 (7442)
109 (994)
107 (1003)
95 (1218)
93 (1287)
41 (10000)
39 (3952)

MS040876

IR(film cieczy):
3347vs, szeroki
2968s
2935m
1458m
1418m
1376m
1327m
1201w
1134m
1088m
1054s
1006m
986m
965m
938w
907m
851m
777w
668m, szerokie

NMR(CDCl3):
1,20d (3), J=6,2
1,64dt (2), J=6,2, J=6,0
3,39s, szeroki (2)
3,82dt+dt (2), J=6,2
4,04 tq (sextet) (1), J=6,2, J=6,0

MS(70eV):
92(1)
91(5)
90(108)
75(142)
72(138)
57(785)
47(512)
45(10000)
44(463)
43(1251)
31(198)
29(942)
27(940)

MS040877

IR (film cieczy):
2961s
2933s
2873s
2828s
2809m
2734w
1463s
1388m
1339w
1301w
1233w
1198m
1123vs
1065w
1054w
1016w
989w
959m
940m
828w
758m
667w

NMR (CDCl3):
0,90t (3), J=7,3
1,34tq (sextet), (2), J=7,3, J=7,4
1,53tt (quintet), (2), J=6,7, J=7,4
3,30s (3)
3,35t (2), J=6,7

MS (70eV):
90 (1)
89 (19)
88 (332)
56 (2186)
45 (10000)
41 (913)
33 (204)
29 (708)
27 (556)
15 (1430)

MS040878

IR (film cieczy):
3088m
3064m
3030s
2857s
2789w
1719w
1703w
1603w
1585w
1497s
1454s
1406w
1388w
1361m
1312w
1270w
1254w
1207m
1095vs
1071vs
1028s
1002w
950w
908w
737vs
697vs
631w
606w
583w

NMR (CDCl3):
4,56s (2)
7,32m (5), J nieozn.

MS (70eV):
200 (1)
199 (15)
198 (97)
107 (1648)
92 (10000)
91 (8422)
79 (1622)
77 (1412)
65 (1708)
51 (912)

MS040879

IR(film cieczy):
3415w
2959s
2874m
1717vs
1469m
1425w
1407w
1367s
1291w
1240w
1171s
1118w
972w
949w
758w
594m
529w

NMR(CDCl3):
0,90d (6), J=6,6
2,10s (3)
2,12tx heptet (1), J=6,6, J=6,9
2,28d, J=6,9

MS(70eV):
102(6)
101(94)
100(141)
85(1389)
58(4002)
57(2513)
43(10000)
27(2005)
15(838)

MS040880

IR(film cieczy):
2959s
2931s
2859m
1466m
1438w
1379w
1340w
1278w
1254m
1240m
1203w
760m
726m
646m
564m

NMR(CDCl3):
0,90t (3), J=6,8
1,31m (4), J nieozn.
1,41tt (quintet), (2), J=6,9, J=7,1
1,86tt (quintet), (2), J=6,9, J=7,1
3,41t (2), J=6,9

MS(70eV):
168(1)
167(21)
166(312)
165(23)
164(336)
137(4482)
135(4496)
109(558)
107(564)
85(5382)
69(1189)
56(3124)
55(6588)
43(10000)
42(2215)
41(7223)
27(2905)
15(611)

MS040883

IR(film cieczy):
3417w
2958s
2933s
2874m
1717vs
1467m
1412m
1360s
1226m
1167s
1112w
940w
757w
720w
596w
639w

NMR(CDCl3):
0,87t (3), J=6,8
1,26m (4), J nieozn.
1,55tt (quintet), (2), J=7,3, J=7,4
2,11s (3)
2,39t (2), J=7,4

MS(70eV):
116(2)
115(35)
114(453)
99(302)
85(216)
71(1388)
58(6021)
43(10000)
27(1085)
15(124)

MS040884

IR(film cieczy):
3319vs, szeroki
2965m
2873m
1423m
1279m
1216m
1143m
1072s
1002s
928m
829m
670m
569m
453m

NMR(CDCl3):
2,64s, szeroki (1)
3,52t (2), J=5,4
3,90t (2), J=5,4

MS(70eV):
128(1)
127(16)
126(682)
125(18)
124(693)
97(204)
95(208)
81(112)
79(123)
45(6618)
31(10000)
27(2982)
15(1751)

MS040885

IR (film cieczy):
2971s
2883m
1744vs
1466m
1392m
1366m
1309w
1238vs
1065s
1047s
1020m
967m
910w
894w
838w
759m
632w
607w

NMR (CDCl3):
0,92t (3), J=7,4
1,62tq (sextet), (2), J=6,8, J=7,4
2,02s (3)
4,00t (2), J=6,8

MS (70eV):
104 (1)
103 (6)
102 (97)
73 (998)
61 (1992)
59 (503)
57 (171)
45 (250)
43 (10000)
31 (1820)
29 (907)
27 (1497)
15 (680)

MS040886

IR (film cieczy):
2983s
2942m
2884m
1740vs
1470m
1456w
1374s
1247vs
1182m
1146m
1111s
1020m
960m
888w
821w
629w
611w

NMR (CDCl3):
1,18d (6), J=6,3
1,98s (3)
4,96 heptet (1), J=6,3

MS (70eV):
104 (1)
103 (7)
102 (116)
87 (903)
61 (1733)
59 (876)
43 (10000)
27 (787)
15 (664)

MS040887

IR (film cieczy):
3183m (szerokie)
3063m
2848m
2751w
1665vs
1646s
1621m
1581m
1487m
1460m
1387m
1353w
1322w
1278s
1228m
1204s
1151s
1114m
1029m
947w
884s
863w
766s
716s
667m
563m
539m
453m
411m

NMR (CDCl3):
6,98m (2), J nieozn.
7,52m (2), J nieozn.
9,87s (1)
11,00s (1)

MS (70eV):
124 (67)
123 (778)
122 (10000)
121 (9527)
104 (1001)
94 (556)
93 (2011)
76 (1586)
65 (2152)
47 (423)

MS040888

IR(film cieczy):
2971s
2941s
2882m
2732w
1726vs
1465s
1414w
1381m
1362w
1154s
1096s
1022m
949s
759w

NMR(CDCl3):
1,11t (3), J=7,4
2,46dq (2), J=1,4, J=7,4
9,79t (1), J=1,4

MS(70eV):
60(16)
59(219)
58(6432)
57(1923)
44(201)
43(398)
42(296)
41(250)
39(784)
31(345)
30(602)
29(10000)
27(3518)
26(1007)
15(343)

MS040889

IR(film cieczy):
2935vs
2856s
1449s
1336m
1252m
1191m
1118w
1087e
1029e
1011w
989m
886m
864w
810m
687s
658m
501w
459w

NMR(CDCl3):
1,37m (3), J nieozn.
1,57m (1), J nieozn.
1,84m (4), J nieozn.
2,15m (2), J nieozn.
4,20m (1), J nieozn.

MS(70eV):
166(1)
165(12)
164(180)
163(14)
162(184)
83(10000)
67(803)
55(7052)
27(1412)

MS040895

IR (film cieczy):
2996s
2945m
2899w
1551vs
1470m
1399s
1373m
1359s
1305m
1179w
1139m
1102s
942w
902w
851s
800w
723w

NMR (CDCl3):
1,49d (6), J=6,6
4,61 heptet (1), J=6,6

MS (70eV):
91 (1)
90 (9)
89 (217)
46 (344)
43 (10000)
42 (887)
41 (7312)
39 (3083)
30 (1841)
27 (7048)
15 (1163)

MS040896

IR(film cieczy):
3310vs, szerokie
2965s
1595s
1471s
1385s
1362m
1311w
1269w
1231m
1184m
1056vs
959m
912s
761m

NMR(CDCl3):
0,96s (6)
2,57s, szeroki (3)
3,19s (2)

MS(70eV):
91(1)
90(18)
89(348)
58(10000)
31(7802)
15(1826)

MS040897

IR(film cieczy):
3356vs, szerokie
2971m
2932m
2879m
1460m
1411m
1378m
1332m
1290m
1236w
1138m
1079m
1047s
991m
924m
839m
804w
658w
523w

NMR(CDCl3):
1,13d (3), J=6,4
3,36dd (1), J=7,8, J=11,3
3,59dd (1), J=2,8, J=11,3
3,84s+m, nałożone (3), J nieozn.

MS(70eV):
78(1)
77(5)
76(144)
61(538)
59(256)
58(247)
57(284)
45(10000)
44(682)
31(1843)
29(2171)
27(1682)
19(801)
15(473)

MS040898

IR(film cieczy):
3319vs, szerokie
3084m
3013m
2987m
2921m
2866s
1647m
1423s
1234m
1114s
1028vs
993vs
919s

NMR(CDCl3):
2,84s, szeroki (1)
4,08d (2), J=5,2
5,06d (1), J=10,4
5,20d (1), J=17,2
5,92ddt (1), J=5,2, J=10,4, J=17,2

MS(70eV):
60(6)
59(86)
58(2518)
57(10000)
56(702)
41(753)
39(2227)
31(3449)
27(2001)
26(1028)

MS040899

IR (film cieczy):
3091w
3067m
3035m
2956m
2894w
1741vs
1608w
1587w
1498m
1456m
1381s
1363s
1227vs
1081w
1027s
966m
922w
903w
837w
750s
698s

NMR (CDCl3):
2,09s (3)
5,11s (2)
7,34s (5)

MS (70eV):
152 (28)
151 (322)
150 (3218)
110 (52)
109 (771)
108 (10000)
91 (5948)
79 (2562)
77 (1703)
65 (1442)
51 (1402)
43 (612)

MS040930

IR(KBr):
3478s
3348s
3175w
1629s
1597w
1570s
1512s
1430s
1346s
1284m
1242vs
1173m
1101m
1015w
873w
779w
742s
697m
662m
558w
523m

NMR(CDCl3):
6,04s, szeroki (2)
6,71dt (1), J=7,7, J=8,4, J=1,4
6,80dd (1), J=8,4, J=1,4
7,35dt (1), J=8,7, J=1,4, J=7,7
8,12dd (1), J=8,7, J=1,4

MS(70eV):
140(59)
139(721)
138(10000)
122(176)
108(465)
104(542)
92(3408)
80(642)
77(1025)
65(3633)
52(788)
44(1018)

MS040931

IR(KBr):
3431m
3329m
3200w
3095w
1625m
1524s
1478m
1350vs
1264m
1090w
995w
930w
868m
817m
792m
736s
669m
540w

NMR(CDCl3):
3,98s, szeroki (2)
6,93d (1), J=8,0
7,26dd (1), J=8,0
7,48s (1)
7,56d (1), J=8,0

MS(70eV):
140(59)
139(671)
138(8998)
108(682)
92(9756)
80(1312)
65(10000)
52(1182)
46(208)

MS040932

IR (KBr):
3472m
3382m
3195w
3049w
1617s
1495s
1288m
1181m
1116w
1089m
1005w
820s
640m
506s

NMR (CDCl3):
3,62s, szeroki (1)
6,57d (1), J=8,6
7,08d (1), J=8,6

MS (70eV):
131 (7)
130 (219)
129 (3133)
128 (712)
127 (10000)
102 (251)
101 (248)
100 (772)
99 (643)
92 (1552)
73 (358)
65 (2312)
46 (1182)

MS040934

IR (KBr):
3500-2300 (szerokie)
z pasmami przy
2932m
2650m
oraz
2538m
1693vs
1419s
1310s
1202s
1177m
916m
894m
803w
537m
583m
545w

NMR (D2O):
2,55s (4)
4,70s (2,1) HOD

MS (70eV):
120 (1)
119 (3)
118 (73)
102 (74)
101 (1383)
100 (2645)
74 (4772)
72 (1201)
56 (2412)
55 (7983)
42 (1181)
29 (3818)
28 (7408)
27 (8121)
26 (3016)

MS040935

IR (KBr):
3500-2200 (szerokie)
z pasmami
2963m
2879m
oraz
2671w
1694vs
1463m
1428m
1408m
1357w
1316w
1280s
1194s
1045w
927m
903w
736m
690m
516m

NMR (D2O):
1,56m (2), J nieozn.
2,33t (2), J=6,4
4,70s (HOD), (1,1)

MS (70eV):
148 (1)
147 (6)
146 (81)
128 (284)
100 (4602)
87 (1720)
85 (1186)
81 (1411)
73 (1455)
60 (2302)
55 (10000)
45 (3723)
42 (3508)
27 (3962)

MS040936

IR (KBr):
3500-2100 (szerokie)
z pasmami przy
3059m
2887m
2687w
2608w
2508w
oraz
2169w
1706s
1637s
1591vs
1460s
1434s
1265s
1221m
992w
949w
925w
874m
864m
786w
634m
609m

NMR (D2O):
4,70s (1)
6,22s (1)

MS (70eV):
118 (48)
117 (242)
116 (5308)
99 (5512)
98 (9087)
88 (4024)
72 (2001)
71 (3006)
70 (1720)
69 (907)
54 (1798)
53 (5081)
45 (10000)
44 (3312)
27 (7003)
26 (6701)

MS040937

IR (KBr):
3469m
3377m
3175w
3074w
3025w
2887w
1610s
1486vs
1279s
1173m
1118w
1065m
999m
818s
687w
596m
495s

NMR (CDCl3):
3,70s, szeroki (1)
6,56d (1), J=8,8
7,23d (1), J=8,8

MS (70eV):
175 (21)
174 (693)
173 (9902)
172 (703)
171 (10000)
92 (3843)
65 (5868)
61 (1255)
49 (1212)
45 (2001)

MS040938

IR (stop. film):
3431m
3352m
3216w
3025m
3921m
2863w
1623s
1516vs
1457w
1380w
1271s
1179m
1124w
1041w
814s
719w
690w
504s

NMR (D2O):
2,18s (3)
4,70s (2,1), (HOD)
6,72d (2), J=8,2
7,03d (2), J=8,2

MS (70eV):
109 (14)
108 (379)
107 (4666)
106 (10000)
79 (652)
77 (977)
66 (80)
53 (499)
35 (47)

MS040939

IR (KBr):
3482m
3361m
3219w
3107w
3083w
1631s
1587s
1506m
1471s
1445s
1395w
1327m
1297vs
1182w
1113m
999w
967w
840m
754m
698w
633m
535m
490m

NMR (CDCl3):
4,39s, szeroki (1)
6,64d (1), J=9,1
8,09d (1), J=9,1

MS (70eV):
140 (63)
139 (750)
138 (10000)
122 (502)
108 (3388)
92 (5008)
80 (1312)
65 (3011)
52 (1189)
44 (1300)

MS040943

IR (KBr):
3400 (szerokie)
3106m
3080m
3045m
2849m
2732w
1706vs
1607s
1541s
1445w
1420w
1346vs
1325m
1826m
1197s
1103m
1007m
851s
816s
739s
678m
538m
512m
463w

NMR (CDCl3):
8,06d (2), J=8,6
8,37d (2), J=8,6
10,14s (1)

MS (70eV):
153 (82)
152 (798)
151 (10000)
150 (8162)
120 (960)
105 (2312)
104 (1682)
92 (748)
77 (6558)
76 (1702)
65 (998)
51 (7012)
50 (3048)

MS040946

IR (film cieczy):
3051s
3018m
2968w
2944w
2919w
2861w
1632w
1601s
1509s
1483w
1431m
1356w
1382w
1270m
1236w
1204w
1173w
1155w
1143w
1124w
1038w
1020w
1010w
960w
885m
849s
812vs
785s
740s
700m
620m
474s

NMR (CDCl3):
2,55s (3)
7,35m (1), J nieozn.
7,48m (2), J nieozn.
7,65s (1)
7,82m (3), J nieozn.

MS (70eV):
144 (68)
143 (1214)
142 (10000)
141 (7892)
126 (156)
115 (2506)
94 (89)
89 (572)

MS040008

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10						42				
20	19	8	1		16	56	115	555	1662	6
30	566	600	8	1				4	246	473
40	520	680	3087	5876	10000	159	22			269
50	32	41	3		18	6	6		5	
60	434	25	1							6962
70				3	6	2	2	4	2	
90					2					
120			30							

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10						64				
30	24	354								
40		60	810	2595	3152	47	7			
50										10000
60	291	26								
70							1			
100					1					
110							2			
120			10							

MS040011

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10								2	42	8
20		1			76	503	3222	8012	10000	7984
30	1432	877	106	4			18	96	52	64
40	24	144	601	257	182	5022	384	226	2	
50	1	2	38	258	44	1221	912	2342	77	9
60	1			1						
70		6	14	2572	4201	271	29	2		
100			1							
130	6									

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10								2	36	1
20			98		8		22	232	9388	3599
30	2477	242	198	6	2			41		
40			18	38	6	1517	98	82		
50						284	1812	2724	94	9
60										1
70		18	24	3307	10000	352	56	1		
80							1			2
110				1						
130	1									

MS040018

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10				2	42	442	4		4	3
20		1				18	202	786	144	1768
30	46	874	631	12	1		6	24	42	142
40	9	92	364	10000	248	34			1	9
50	42	22	4	25	4	42	14	716	18	4
70		92	2181	104	8					
80	1			3						
100	2									
110			1			6				
160									2	
230									1	

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10				1	9	78	1		2	2
20										1456
30	17	821	1121	13						
40			68	10000	228	29				
50								1827	63	5
70		86	5557	259	17					
180							4			
250						11				

MS040020

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										5
20	1	2			5	44	198	622	344	812
30	1644	723	475	11	4	1	52	511	645	1107
40	39	21	3	2	4	5	322	2	14	12
50	2804	6832	304	7		2	4	2	1	
60	18	98	226	289	145	1628	91	2		
70			8	242	924	500	438	10000	667	21
80		2				1	9	9	1	4
90	1	36	22	1265	87	5				
100				2	4	2	2	148	11	2
110			2	1				2	1	
120		1	3	3517	258	21				1
130	1					1				
150							2			
180			1							

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										4
20						2	2	19	24	7
30	812	942	1101	24			9		5	38
40		2		4	2		1			
50	3	42	2			2	9	4		1
60					1	1328	73	2		1
70	9	4	1		1	3	22	5916	398	11
90		4	4	1600	111	6				
100			2		2	1	6	118	9	1
110			22	4	2			1		
120	4	2	4	10000	698	71	1			
130					1					
140				2						1
160						2				

MS040029

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										4
20					6	32	182	466	206	98
30	9	4	6	5	4		54	456	678	912
40	116	12	4	22	54	454	22	102	48	388
50	2760	4602	646	206	4	66	2	16	1	
60	34	133	156	198	61	274	310	26	10	4
70		4	16	300	1019	524	738	8299	827	62
80	2	3	4		2	16	18	5		1
90	4	8	24	42	322	24	6	1		
100			4	8	116	10000	777	47	1	1
110						2		2	2	2
120	1	61	7616	594	53	1				
130	2				1	3	1			1
150		2		1		1	6			
170										16
180						14				
280									1	

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20									22	
40		4		2						
50		18	14							
60						7	9			
70	4				2		20	220	146	18
80									3	
90	16	4	2		146	7				
100					16	4224	324	19	1	
110		2						2		
120		6	10000	778	68					
130		2				1				
140										5
170								14		
190		7								
260		4								

MS040034

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						5	223	1924	465	10000
30	251	795	10				1		1	9
40	6	262	2598	7012	167	1624	41	99	1	
50						88	5	18	24	121
60	2009	827	22	3		1			2	354
70	443	42	6	391	18	4	1	6		
80						2	174	1166	2789	134
90	14	6	6				4		1	
100	1	12	1	2	50	504	18	4		
110	1	1	1	5	128	9042	508	67	1	
120	1	1		1						4
130	1	56	254	5567	320	55	1			
140						48	3			
160	724	98	8	1						
190						2				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							18	51	155	4232
30	91	166	5				9			
40		77	556	4824	112	1109	29	66	1	
50						125	6	29	24	31
60	1874	1028	26	1						30
70	812	54	4	391	41	4				
80							161	992	5298	252
90	24	5	5	2						
100	2	4			99	902	33	8		
110		4		4	275	10000	572	86		
130	4	122	465	9989	567	99	1			
140						92	7	1		
160	1465	131	10	1						

MS040052

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20	1	1			1	4	130	989	2465	658
30	21	1	524	2	2		1	34	116	1402
40	356	4891	2624	1189	41	1			1	7
50	122	184	67	301	546	3146	10000	448	7	
60	1	6	9	26	6	43	18	232	174	2641
70	149	3			8	4	1	60	11	46
80	6	42	25	501	7142	489	14			
90		1						1	4	1
100	1	2				1	3	1		2
110	1	2	1	1	1	1				
120		1								

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			2				4	11	201	19
30	3		141				2	7	2	9
40	44	908	1692	812	26					12
50				4	254	1709	9684	434	8	
60								88	243	3142
70	178	4							2	2
80		4	22	442	10000	674	17			
90					2					
100		6								

MS040055

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20	3					5	61	145	176	25
30	20	5					1	137	380	1435
40	271	217	188	2846	89	25	19	9	1	27
50	273	576	253	68	127	8	1	8	2	
60	23	59	194	444	334	1383	1991	178	5	3
70	4	1		16	83	49	61	415	104	49
80	5	1		2		1	3	11	11	11
90	31	159	514	10000	745	26	1			
100				5	17	9	67	7	1	
110			3				4	5	5	26
120	37	2						1		
130			1	4	18	2381	226	14		
140										
150										

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										
20								7		
30										2
40		3	9	247		2				
50										
60					9	5	38			
70					2					
80							2			
90		11	21	10000	720	11				
100								3		3
110								2		3
120									2	
130					2	7124	648	44		
140										

MS040056

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										99
20					4	66	452	1628	456	922
30	202	10000	326	148				88	154	528
40	88	758	1006	423	48	202	2			
50			1	22		42	4	92	8	1008
60	724	29	2							
70					2					
120			2							

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										21
20								9	141	199
30	54	10000	274	116						
40		218	2021	311	1	156	4			
50										2035
60	1327	48	2							
100										2
110					1					

MS040062

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									198	11
20			1		1	22	387	1179	4702	8529
30	3524	925	446	28				1	9	48
40	142	446	1802	467	125	506	14	16		
50	1	9	45	9	199	368	2849	10000	427	98
60	9							1	18	2
70	24	1	11				9	3	2	
80				1	9	49	2999	7802	421	25
100	8									
110						2				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									42	
20								14	524	2452
30	902	287	285	12			1			
40		22	545	222	42	278	9	21		
50					18	224	1281	9014	354	126
60	6									
70	2		6				8			
80						33	3425	10000	518	36
100	12	1						1		
110						1				

MS040063

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			1				4	77	172	1425
30	29	284	289	16	2		1		1	9
40	24	2805	98	189	6	1				8
50				1	5	242	1204	10000	451	9
60									2	1
70		1		1	1			2		25
80	21	24	20				3	1		
90		1		2		2	1	1	2	
100		2					2	142	14	140
110	12		8		2					
120	1	4	2	2	1					
130						11	546	30	543	25
140	1									
200							2			

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			1			16	333	2222	901	3624
30	82	601	422	23	2		2	48	99	869
40	126	5017	237	311	12	4	1		2	16
50	67	72	22	87	31	511	1217	10000	457	7
60				1			1	1	1	1
70		1	1	1	1	1	1	4		48
80	99	46	98				4	2		
90		4	3	124	2	118	2		2	1
100	1			1	2	12	36	406	13	395
110	12		11		4			2	1	7
120	1	6	2	4	1					
130						11	789	39	772	36
140	1									
150	1	1	1	1						

MS040073

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20	2					11	245	1521	626	618
30	78	1501	1012	44	21	4	2	77	192	1714
40	455	2689	5122	1207	98	5			11	9
50	92	124	52	226	910	10000	1149	148	12	6
60		9	9	9	2	32	11	71	49	3028
70	2286	124	7	1	4	1				66
80	524	68	2	967	49	2				
90		2		2			2	242	4911	351
100	21									
110						4				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20				2				18	98	34
30	24	1312	1365	11	4					18
40	17	365	3904	1344	51	1				14
50				8	802	9691	1298	165	11	
60						4		9	42	4425
70	3105	152	8						5	72
80	1004	77	18	1409	79	5				
90		4						372	10000	686
100	42									
110			4							

MS040083

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						6	132	398	168	804
30	102	1623	1134	42	2		6	188	512	2264
40	541	454	572	18	3		9	2		32
50	279	457	309	378	118	16	2			1
60	9	88	224	578	342	1785	2655	472	56	2
70				6	32	47	46	564	211	928
80	314	66	5				2	4	8	38
90	46	117	1741	425	33	1				
100			5	6	101	77	3149	10000	857	35
110	1		4		2					
120	18	11					2			
140							4			

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								6	2	28
30	16	664	702	12						9
40	28	34	52	1						
50			4	3	8					
60						114	924	127	9	
70								16	32	208
80	56	12								1
90	2	9	507	319	22	1				
100					6	27	1143	10000	824	32
110			2							
120	10	11								

MS040098

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									777	3
20	4				3	9	144	478	220	972
30	118	1442	1100	18	4		17	124	228	666
40	42	80	32	134	62	131	168	8	6	109
50	989	3412	925	137	162	134	33	38	32	8
60	24	118	265	674	84	254	218	20	7	11
70	8	8	2	98	502	458	542	4007	2556	292
80	12	18	4	9	6	34	62	73	14	181
90	74	1122	13	8	4	4	4	28	78	18
100	3	132	756	4999	2067	372	145	144	136	11
110	9	6	78	9	22	89	12	7	2	9
120	92	12	24	16		11	104	12	37	18
130	74	10000	8134	811	49	2	1	2	1	4
140	2	6	4	4	8	1		9	29	3
150		1	2	1			2	1	2	
160	1					6		9		
200		4		1				1		
230	1	2								
260							1			

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									135	
20										18
30	6	545	689				32			
40				34		8	14			
50					24	14		6		
70					34			42	876	113
80	8						8			
90	24	629	87	5						
100			9	789	1546	242	118	85	167	18
110			45		11	6				
120	124	6	31	4			164	6	46	
130	137	8569	10000	992	67					
140								9	48	5
150							6			
190									2	
220			2							

MS040101

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20				24	6	42	444	1233	7476	1488
30	7111	342	224	6	6		46	522	747	2198
40	266	428	98	54	42	6	7	46	56	368
50	2724	4434	1425	834	378	52	66	34	2	22
60	42	285	484	1223	382	1274	122	121	18	12
70	4	6	8	192	724	503	465	3666	2485	5584
80	822	44	6	7	14	122	58	52	38	766
90	288	1924	153	6		2			4	22
100	6	6	31	48	568	224	10000	6002	518	18
110		2	2							
140		4		4	4	2	2	4		
190			2			6				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			4			3		12	165	118
30	934	98	92							
40	7	2			9	3				
50				2			6	8		11
60	8					2				
70	4	2				8		33	354	856
80	72	6	2	6						12
90	34	368	26	1			2	2	1	4
100			4	81	22	156	10000	9642	772	31
110	1					2				
120	2							1	2	
140	2				4	2				
190					4	3				

MS040102

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						24	288	344	802	58
30	41	12	38	9	4		22	456	904	2272
40	656	656	176	566	15	52	99	298	12	121
50	572	521	711	187	607	22		5	88	
60	42	256	403	634	292	2214	4322	498	22	1
70				32	176	98	134	172	234	11
80		4					4	9	22	16
90	11	92	1177	10000	743	22				
100							4	5		
110								2	4	2
120				2						1
130	2			1						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								4	22	
30		1	2							
40	7	5	1	124	4			1		
50			1	3	44	2			66	2
60				7		38	1069	68	1	
70							3	4	9	
80									2	
90			181	10000	718	22				
100								2		
150			1							

MS040103

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						22	323	785	712	2782
30	177	1115	510	4	15		26	804	2116	4442
40	156	116	88	224	112	134	56		23	344
50	3004	3122	361	522	84	134	84	33	11	4
60	58	515	1178	3646	3027	3422	430	34	5	18
70	6		12	398	1189	658	1001	5727	1078	624
80	42	98	26	11	4	56	54	32	4	18
90	23	144	3324	534	56	11	8		7	
100	4	3		31	176	327	77	2016	341	220
110	8									144
120	123	268	24	18	129	6				
130					44	10000	7047	628	55	1
140	1									
150			24							
160										2
170				3						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20									9	8
30	3	222	246	8	1				2	
40				18	14					
50		6				3	42	9		
60				4	6	42	2	1	44	18
70				8				92		
80	2					4				
90		18	16	29	22	1			234	42
100						101	8	266		
110	5		8							
120	4	134	38	8	100	8	1		81	1
130				8	72	6512	10000	882		
150			31	3						
160							2			

MS040104

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					2	4	99	832	1111	1215
30	3402	625	492	11	5			2	5	56
40	42	244	998	162	1314	34	3			
50		4	16	4	99	54	621	142	2912	111
60	2				2		1	1	19	6
70	322	124	401	22	1				2	
80	1	2	1	2	82	26	10000	590	14	
90									6	38
100	784	1965	168	5						
110										2
120						2		2		
160									2	

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			16	18			4	9	38	62
30	542	298	382	6	5					7
40	2	5	62	4	91	3				
50						2	106	24	1285	46
60	1								4	
70	118	67	98	8	1					
80					46	12	10000	608	17	
90									6	98
100	532	3821	278	9						
120				3						
140							4			
150							2			

MS040105

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							98	1124	411	1075
30	78	669	16					17	76	946
40	182	2121	687	742	2522	388	8	9	4	
50	54	105	32	311	998	745	1307	10000	527	18
60			2	7		34	32	2114	106	98
70	82	1254	695	27		4		42	5	99
80	9	501	4085	342	12	81	6			
90									9	124
100	278	19	1							
140						2				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							1	8	32	92
30	11	72	7			6				9
40	7	222	184	254	1501	340	6			
50				11	914	223	1676	10000	987	38
60	3						25	3014	187	88
70	72	2124	1245	56	4				4	9
80	8	372	7671	538	16	156	9	1		
90							11		28	204
100	589	40	2							
180						4				

MS040106

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10			1	4	925	3221	54	34	185	4
20					47	242	1601	5789	9182	10000
30	946	2008	801	42	9		32	134	148	378
40	113	527	325	324	44	1436	143	92	4	
50	3	2	23	122	16	494	319	3026	6229	2116
60	71	8				4		6		44
70	6	4	2	63	116	5	1			
100	4									

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10				1	404	1827	42	12	99	1
20							16	122	5431	4089
30	154	82	108	13						
40	23	111	32	124	105	198	42	23	1	
50						89	402	3108	10000	401
60	32									51
70	11	7	4	44	124	4	1			
90									9	1
100	1									

MS040107

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10					16	224	8	4	8	1
20				1		3	87	624	91	550
30	95	1724	968	82	1			9	28	281
40	64	732	860	10000	239	38				
50	2	2	1	2	1	42	256	401	32	512
60	44	2746	63	13		2				4
70	8	36	142	1384	57	104	4	1		
80							21	54	3	
90		44	5	1						
100		18	67	7	1			1		
110								5		
120							8			
190					5					

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10					4	32	2		4	1
20								44	23	51
30	38	2007	1824	167	6					4
40	18	324	1656	10000	228	32				
50			8			26	634	528	64	1012
60	94	6485	149	29						
70	22	101	312	2915	119	257	8	2		
80							42	111	5	1
90		92	14		12					
100		24	120	7	1			1		
110								7		
120							8		2	
140						4				

MS040108

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						8	223	1627	242	1844
30	182	2312	1564	68	1		4	121	203	1242
40	181	2107	444	10000	242	18				11
50	62	66	12	51	91	33	32	34	6	9
60		2	1	2	1					8
70	9	502	23	2						
80						6	1516	91	6	
100					4					
190			4	1						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								55		46
30	66	2718	2986	63						
40		333	121	10000	212	16				
50								24	19	
70		1507	69	4						
80						9	3824	219	12	
90				6						
190			2							

MS040109

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20	1	4				4	228	2316	942	4725
30	142	6324	848	94	1			34	114	1342
40	244	5737	10000	2298	198	502	24	4		2
50	66	168	18	195	124	6801	1513	2133	166	62
60	124	2	4	8		9		44	12	1325
70	4778	284	7	1				8	4	1
80			1	2	4	18	6	68	22	1
90				24		4	2			
100	6	4				2		4		
130		22	4							
160			8	6						22
170	1						3			
240			9	34						
300						2				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								24	162	924
30	22	2307	756	52						9
40	18	1681	10000	1422	161	174	12	2		
50		2		6	92	6468	1422	2009	158	39
60	122	2							6	476
70	5809	348	10	1					6	
80					2	9		67	71	4
90									1	
100						2		2		
110			4							
180		2								
210										2

MS040110

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						8	134	723	109	411
30	54	512	22				9	174	365	1301
40	98	244	225	87	34	21	19		6	98
50	1147	2385	599	624	287	181	34	44	25	2
60	22	121	268	575	143	727	94	18	12	132
70	100	8	4	77	301	200	165	5126	1142	10000
80	897	43	2		8	36	58	44	11	621
90	884	1807	146	5						
100	5				2	413	162	7185	9372	728
110	41					5		1		9
120			2			3		3	2	1
130		22								
150						24				
180		12								

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20									4	9
30		44	4							
40		26	133	16	1					
50		4	4			65	12	18	11	
60						15	14			
70	72	5				4		311	298	3902
80	426	18	1							42
90	371	504	58	2						
100						28	89	3911	10000	781
110	47									
140						2				
160								4		

MS040111

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									316	9
20						9	119	349	443	1765
30	527	4650	3333	84	6		4	170	462	2652
40	208	617	38	74	12	10	86	16	3	65
50	733	1311	388	257	23	24	2	3		
60	18	196	538	1585	742	8246	598	34	11	4
70	6	8	3	34	166	168	142	1842	432	329
80	61	18	2		10	49	100	86	44	1674
90	855	5568	4442	584	38					2
100			8	8	26	366	108	144	24	1
110			62	2	9	1	1	4	4	9
120	10000	828	54	1						
130	1		1			4	108	1568	141	12
140								1		
160				2						
250								8		

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									64	
20							2	22	38	78
30	54	1771	1984	36			4	8		26
40		18					2	2		
50		1	22	18						
60			2	2	88	1009	67	7	1	
70	2	4				2	6	534	84	168
80	32	3								52
90	172	1576	2576	395	22					
100				4		202	44	122	12	
110			56	11	15			5	6	10
120	10000	817	71	1						
130						6	142	1761	152	15
180						4				
250			2							

MS040112

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									128	1
20			6			2	32	184	92	118
30	32	62	26				3	68	136	204
40	4	6		4	6	4			1	66
50	866	2084	122	36	1			6		88
60	1	12	33	46	28	48	6	2		5
70				36	244	188	298	5668	413	18
80		1					1			
90	8	164	189	18						
100				9	38	10000	783	44		
110			1						18	28
120	10	2								
130					2	178	3517	328	27	
140								2		
160				8						
210				2						
220		4							2	
290							4			8

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									36	
20									10	20
30		28	28							
40				24						
50										8
60						18				
70								845	61	2
90	5	152	338	26						
100					6	10000	776	48		
110									26	6
130					6	257	7294	645	53	
170										4
190		2								

MS040113

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					4	26	222	888	112	2048
30	64	833	224	9			4	26	36	106
40	32	153	1082	10000	241	508	101	11		
50			2	18	2	44	56	26	224	48
60	911	406	9	1				2	8	621
70	178	24	1	132	28	5				
80					548	1444	91	267	1774	83
90	9			1						
100		9	289	48	1			3		
110			1	7		138	22	5		
120		1	2							
130	506	230	16	2						
150		2								

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							9	46	92	1272
30	26	1052	432	7						9
40	16	32	278	10000	227	724	172	24	1	
50						16	111	16	402	28
60	1162	804	18						5	765
70	594	53		245	68	12			14	
80					1480	2252	181	462	5302	253
90	26			2	14					
100		24	1004	52	8			4		
110	33		8	32		402	82	6	1	
120	34									
130	1752	808	54	6						

MS040114

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10				6	21	144	46	68	22	29
20					1	15	246	1821	774	1756
30	88	324	116	4			2	34	92	823
40	98	1625	842	878	41	806	42	34	2	11
50	59	66	15	87	34	621	396	247	16	104
60	10000	378	31	2					4	31
70	14	7	3	3434	333	34	1			
80		1	1	61	22	199	12	189	9	
90		4								
100	1	26	198	275	16	2				
120	2									
150	9									

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10				4	11	87	26	45	9	8
20							2	46	78	245
30	33	110	99	2						4
40	5	324	262	599	18	196	4	2		
50					3	204	315	181	6	38
60	10000	280	42	1						11
70	21	8	1	3189	265	18	1			
80			1	42	24	251	15	199	9	1
90		6								
100	1	28	385	221	13	1				
120							4			
140					2					
150						4		2		
180				4						

MS040115

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									9	
20						4	56	98	14	
30		7	1			21	64	101	223	765
40	63	145	6	124	147	462	93	7	5	42
50	328	433	112	9		2				
60	12	121	278	882	244	1425	79	2		
70			3	78	56	49	34	66	7	
80					9	43	56	38	14	622
90	245	10000	786	29						79
100	4	28				26	18	2		
110					2					
120						322	2435	217	796	62
130	2									
140				2						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
30							48		15	
50				4				28		
60			9			38				29
80										16
90	26	10000	774	28						
100		11				19	42			
120						101	5937	502	1945	153
130	5									

MS040116

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			1		3	4	9	98	22	244
30	42	745	499	9	2	9	42	235	789	998
40	34	1	1	2	3	2		1	8	152
50	1172	1546	89	8	2	6	522	145	9	2
60	26	44	46	47	5	1	1	1	2	1
70	2	6	32	184	422	439	354	5147	348	10
80		1	1	2	1	65	66	24	16	
90		1	1	1	1	1	2	9	9	4
100	1	1				1	1	1	6	2
110	8	76	10000	670	3231	215	6			
120								4		
170			14							

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20		1	1	1	1	1	1	1	1	5
30	9	278	389	1			9			1
40					2	8			1	
50	1	4	2	2						
60		1		1	1		2	2	3	1
70		1	2	2	1	6	44	1255	84	2
80							8	4		
90	1			1			2	3	5	
100		4	1		1					
110	4	6	10000	689	3255	216	6			
170		2	2							

MS040117

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						6	311	1872	742	1311
30	68	422	8	12			1	44	125	1004
40	176	2124	466	10000	296	87		1		1
50	44	48	11	68	32	678	3189	426	118	7
60	22	1189	29	5						1
70	4	122	21	1185	41	6				
80				4		2	65	198	10	1
100		11								
110						4	88	14	2	
290						6				
300		4								

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								18	123	168
30	4	286	9	16	2					
40	56	1161	182	9427	221	26				
50			18		6	1006	10000	495	121	4
60	47	3209	72	13						
70		342	68	2925	98	14				
80						2	167	312	18	2
90									11	
100		24								
110						16	136	12	2	
190	8									
290					2					
300		1								

MS040118

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										66
20	8				7	6	29	28	1869	2248
30	76	4	9		4		22	4	2	9
40	68	12	24	36	1658	10000	4572	62	34	
50		4	6	6	7	18	284	7	22	6
60	9			7		5				8
70	4	9	3	6	7	9	3	6	14	
80				7				8		
90	22	1					8			
120				4					3	
160						7				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										162
20		32							224	765
30					16	36				
40			74	72	496	3164	10000	117	76	
50						79	58	46	22	
60	42									
70	58	22	46		26		16	18		
80				21	20					
90	136	16	9							6
150						6			8	

MS040119

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									1342	47
20		2	18		67	124	105	32	856	1875
30	93	1336	5	3	1	39	38	1	8	7
40	157	1091	10000	4882	2109	7192	84	26		
50	4	3	18	21	3	16	16	7	5	112
60	8274	201	7	1		3	1	13	52	352
70	9	4	2	31	4	66	4	16	9	2
80	3	9	4	12		1	51	860	18	4
90		9		1		9	1	1		
100		4		1	139	46	6	1		
110		1				1	1	1		
120	4	2	1	1						
130				1						
140				2		2				
150								1		
200								1		
220		1								
240										
270		1								
280		1								

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									337	
20								13	41	
30		24					52			
40			4119	1384	309	779				
50		6								6
60	10000	237	6							10
70				6		9				
80				13			34	640	17	
100					163	80	1			
120									1	
140								1		
220							1			

MS040120

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										63
20					9	53	271	894	2948	489
30	166	15						3	85	111
40	369	592	1973	504	10000	854	308	11		
50		1	5	31	11	87	25	15		
60			3						1	
70	2		1	13	163	6				
80		1			2				1	
90	118	4								

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										4
20								16	246	14
30	52									
40		3	111	35	10000	277	7			
50						12	8			
70				2	125					
80										5
90	56	2								

MS040121

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						9	79	778	227	2416
30	62	4						53	196	893
40	120	100	49	46	11					
50	181	449	147	36	77	93	14	1337	45	3
60		19	71	303	293	1017	705	87		
70		4		4	47	22	43	686	97	27
90	15	165	430	10000	709	24				
100				9	27	12	43			
110						2			3	55
120	155	3								
130	2			2		11				
140									28	1803
150	198	12								
210										11
300							1			

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20										96
40						6				
50								504	18	1
70								6		
80			24							
90			41	10000	696	20				24
100										27
120	12									
130						18				
140										5450
150	558	35								
160				2						
240						4				
300	2									

MS040122

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						31	181	384	644	182
30	11	22	4	6			14	562	1158	2183
40	411	596	156	18	104	824	242		2	114
50	478	408	1294	465	193	54				2
60	222	377	655	1581	2138	3366	656	54	49	99
70		19	4	68	198	148	286	91	52	28
80	129	36					6	33	62	96
90	432	1886	7180	514	21					
100				4	29	4			16	
110								4	91	10000
120	963	62	2							
130							22	6464	536	46
140								4		
190					7					
200										5

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								5	8	
30									2	16
40	1	9				1				
50		2								
60				4	24	34	25	2		
70		2				2	4		6	
90		294	1662	118	34					
100				2	22	1				
110										7912
120	646	42	1							
130								10000	817	66
190					12					
200										10
250		4								

MS040123

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						1	33	286	48	10
30		1		1	1			31	107	228
40	14	3	1	40	3					50
50	1169	3314	225	45	5	5	4	7		
60	2	29	98	201	57	42	27			2
70				40	357	272	541	7194	491	15
80			2	4	3	18	39	48	20	41
90	6	40	12	95	7			3	39	29
100	14	29	42	7	31	10000	761	49	3	8
110	8	14	1	29	2	36	4			19
120			5	3		8	62	46	24	2
130						20				
140										3
150	45	125	268	172	176	17				
160				11	10	47	5	2		
170		14		8			1			
180	33	517	4108	588	47					
190										
200										
270				1						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			6							
40				6						
50		6								
60									3	
70								49	9	
80					3					
90				90						
100					4	6246	493	28		
110		4								10
130						77	12			
150				7	145	21				
160						14			10	
170		10		9	3					
180	51	609	10000	1431	118	3				
190										
270										3

MS040124

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						8	123	103	282	54
30	15	16					32	379	1039	1248
40	209	416	444	8365	229	53	256	2	2	90
50	791	400	507	90	57	22	5	6	4	2
60	41	386	881	2413	1646	2903	356	57		13
70		4		68	345	450	394	134	74	61
80	22	46	19		4	9	13	60	72	67
90	605	1497	4112	659	29	26			4	8
100	11		23	15	93	123	36	16	2	
110					2	5	30	292	43	300
120	6	4		2					8	2
130	13	22	8	128	46	110	9	12	18	21
140	5	13	6	457	76	407	61	5		5
150					2	107	9	102	4	
160									2	81
170	223	10000	1007	9339	726	20				
180			22		48		29			
190						4	2	57	33	44
200	18	1								
210			2	2574	251	2550	237	16		
240			1							1
250				1						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
40		5	5	944		11				
50	11						5			
70								8		
80	17		8							
90	5		176	332	23					
100						20		8		5
120				8					20	
130						188	20	17	8	20
140	17									
170	5	9808	724	10000	702	19		5		
180				5						
210				5821	530	5497	503	33		
220										
230										
300			1							

MS040125

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						41	544	1834	1572	281
30	333	34						4	26	41
40	74	173	378	332	10000	1528	124	3		
50	4	39	139	162	444	3643	582	750	36	32
60	4									1
70	55	239	4892	6538	256	18			6	
80	11		342	14	1				26	2392
90									26	2392
100	1048	55	5							
110							74	129	7	1
120			1							
140										3
180								2		

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20								5	34	
30	11									
40				5	1044	248	4	1		
50					12	598	212	452	15	1
70		272	4244	10000	379	27				
80									5	
90								7	5	3414
100	1199	61	6							
110							98	195	10	1
180			4							

MS040126

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						6	111	422	195	436
30	80	643	14				4	222	732	2577
40	218	64	306	54	76	518	14	1		80
50	1278	3464	336	136	28	86	5		8	42
60	16	132	282	772	388	2178	511	29	15	
70			3	60	351	222	288	10000	1148	2582
80	176	6								1
90	12	15	108	206	2058	142	8			
100						66	18	8239	638	39
110	1									
120		7								
130					5	2				
140		1						1		5
150			6048	541	59	1				
190								1		
220	2									

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20									15	
30		12								2
40			24							
50		3								5
60						68	12			
70						2	5	558	144	760
80	51	1							6	
90				48	908	61	3			
100						11		5376	424	24
150			10000	879	99	1				
160						2				
220									1	

MS040127

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									117	
20						22	256	706	208	27
30	1505	9					9	356	867	4427
40	335	839	32	76	9		613	26	13	179
50	1705	2040	627	438	26	17			3	8
60	41	464	1273	3122	800	8168	451	13		
70				76	384	332	198	2161	522	2967
80	137	3		6	37	156	272	216	73	1689
90	567	10000	762	29						
100				3	31	31	48	2894	224	13
120	6	283	34							
130						11	19	5882	511	46
140										
180						1				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10									26	
20									26	7
30	251									44
40			7							
50	11	7								
60						134				
70								328	26	1111
80	74	2								
90	18	4003	315	9						
100							18	2418	191	11
110					14					
120		115	7							
130								10000	817	72
160				6						
200			1							

MS040128

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							41	128	27	
30								51	143	416
40										18
50	726	1355	157							
60		152	254	795	754					
70				32	611	596	485	473	282	
80						32	611	596	485	64
90									161	69
100	51	296	1064	91	4					
120						13	638	1189	10000	1098
130	538									
390									18	
460						9				
490								27		

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
30						32				
120									10000	1092
130	542									
340	2									
370									4	
460				2						

MS040129

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					6	42	230	564	172	122
30	4	2	4	4	6		42	466	632	822
40	76	94	34	126	1759	27	5	222	16	409
50	3372	6105	761	144	38	46	14	64	4	2
60	42	148	189	254	89	344	78	16	1	
70	18	22	19	294	1111	622	742	10000	1268	58
80	4		3	3	6	4	6	6	8	4
90	4	44	89	34	16	22	6	4	6	8
100	8	4	18	61	144	648	648	40		
110		27	4							
120	9	6004	498	30						
130	4			3				3		9
140	9									4
150			3		4			2		

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20			1				9	24	8	2
30	2							6	12	16
40	1	4	3	6	179	3				2
50	14	46	21	4	2	2	4	2	2	
60			2	2		4	8			
70	1	2	2	1	2	3	26	1889	322	24
80	2			2	1	6		1	1	
90		34	16	22	1	16		2	2	
100			1	52	78	9402	728	41		
110		2								
120	14	10000	974	63	1					
130										8
140	1	8	1							
150			1			6	1	1		

MS040130

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										22
20						70	292	454	211	324
30	20	218	143	12		6	48	722	1542	3268
40	242	81	80	42	78	624	656	96	12	146
50	578	372	102	1176	87	472	13			
60	131	424	888	2611	3588	1936	322	54	28	87
70	6	50	6	104	299	178	134	123	14	28
80	4	286	11	4		3				
90	24	114	10000	1111	69	2				
100		4		3	8	66	4			66
110		14								17
120	8142	1139	95	4						
130	12					8	2	24	4076	318
140	34									
160							52			
200				4						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
30	6									6
60					8	5				
90			1626	131	80	2				
100				24	18	44				
120	10000	779	81	1						
130					6			24	9442	733
140	84	1								
160								42		
190					2					

MS040131

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						56	534	988	1466	308
30	76	74	92			48	24	402	1666	4642
40	362	1216	466		478	285	92	12	842	155
50	1422	1622	1804		542	222	72	64	46	60
60	58	241	818	2028	1646	10000	1412	76	78	254
70	84	24	46	104	566	358	464	1502	374	88
80	2506	1286	193	42	54	32		48	82	142
90	507	1294	4824	512	66	22	22	34	36	9
100	14			112	44	812	98	22	382	2324
110	169	14	32			16				16
120		544	98	16	11	49	11	16	22	
130				16		19	11			
140		28								
150								92	11	
160				11			24	24	10	
170				4358	338	238				

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							6	9	56	
30	9				16	6	66		18	6
40	12		26	13	113	11	5			
50	14			13	26	4	31	5		4
60	22		6	12	48	92	11	32		34
70	58	18	22	99	10	6	12	121	164	6
80	324	224	26			224				
90		18	1484	192	43	6	5	9	5	4
100			1134	141	32	908	174	2	82	708
110	1724	18		6			9			
120	32	1164	155	674	3	52	5	6	8	
130						2434	11			
140	18	56		9			10			28
150			989			6		42		7
160				9					22	14
170		7	8	10000	779	528	7			
190							5			

MS040132

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					62	492	3078	8078	7398	3948
30	989	766	6				42	132	104	106
40	22	222	1212	741	524	10000	866	356		18
50	82	188	56	516	204	7878	2382	224	6	6
60	42	7	9	84		6	6			4
70		112	1104	4712	6056	210	39	286	42	4
80	2	16	4	46						
90	5		3	3						18
100	2634	1383	74	16	1	224	18			
110		3								34
120	2									
130									2	

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							52	54	2475	824
30	942	78			8		8			
40			9	80	142	604	162	158		
50				8	19	4387	2599	204	2	
60				48						
70	32		1658	3896	10000	341	39			
90	8					8			56	
100	6188	1606	77	16		622	18			
110									24	102
120	5	1								
130					1					

MS040133

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20		2			11	84	328	171	544	10000
30	3441	6002	134	22			14	14	3	
40	51	469	3157	2389	458	3531	252	348	24	456
50	5	2	17	135	18	8	80	13	5076	3026
60	1266	598	14	9	4				22	1162
70	2809	719	26	5		206	9387	2324	62	14
80							3	344	1170	49
90	9			12						
100		6		2	4	2557	89	22		
110										
120				142	6	1				
130			13	6						
140								9		
150	8	485	22	6						
170						3				
180										8
300					1					

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20									14	1059
30	289	1077	13	2						
40			381	418	18	511	13	19		498
50									1841	1483
60	424	383								277
70	2924	102	13			134	10000	2383	58	15
80								162	1331	46
90	9									
100						2464	86	20		
120				174	6	2				
150	12	798	36	10						
180	6									
280										21
300			1							

MS040134

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					9	127	217	66	9	
30							226	1515	1675	177
40									118	965
50	5295	753	27							
60	105	299	151	51						
70			126	1045	3741	5221	3290	441	352	432
80	211	477	204	7						
90		61	8	65	10	11				
100				11	123	100	100	77		
110						10	65	383	611	326
120								2	135	184
130	155	157	5							
140		23		11						
150			8	39	100	3795	254	3791	248	7
160	1									
190								5		
200				2	2					
230			2	11	5183	346	10000	661	4948	325
240	9									
300	5									
310			8							

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
30								17	17	
50	124									
70					38	292	271	14		
80	48		47							
150						2143	141	2091	136	4
220						9				
230					5157	338	10000	664	4944	326
240	9									
260				1						
310			1							
400									1	

MS040135

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										22
20					7	80	380	822	128	732
30	48	182	60				106	1008	1862	4896
40	256	76	172	104	86	1152	184	10	30	246
50	998	649	186	1198	148	708	16			
60	118	804	1324	2364	924	4569	634	102	27	54
70		20	22	129	452	258	74	144	22	38
80	20	640	114	12	4					4
90	22	75	465	3296	218	15				
100		6		4	3	76	37	7	11	122
110	224	12								30
120	66	10000	806	70	2					
130		4						34	6064	514
140	57	4								
160										7
210		4								
300			3							

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					5			5	2	4
30						7			4	24
40						5				
50		8		2						
60						24	8			
90			12	162	11	1				
100						45	17	22		
110	86									
120	14	4446	354	31						
130									10000	793
140	94	1								
260									8	
270		2								

MS040136

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					7	38	153	177	610	40
30	10	12	21	2		67	70	512	698	1212
40	216	615	153	17	201	638	84	79	35	183
50	449	352	657	89	153	17		5		1
60	103	461	662	1172	795	3287	423	109	3	
70		24	130	605	262	317	81	36	48	17
80	24	7	1	1	28	24	21	41	34	67
90	279	635	2039	143	4	2	1	2	24	653
100	1109	326	387	40		3	11	9	1	3
110	48	17	26	5	7					
120			7	2	2	23	234	10000	713	3371
130	237	7								
140				1						
170							1			
230					1					
290										7

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							2	4	14	
30						11		4		
40	1	17	2							
50	1		5	1	1			2		
60					34	253	23	19		
70						3				6
80		1		1						1
90	4	130	716	51	2					9
100	411	31	143	7				7	7	1
110	4		1							
120	5					4	39	10000	704	3274
130	234	7								
180			1							
230				1						
290					1					

MS040137

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					2	23	208	280	989	84
30	1389	13	4		2	3	35	444	1078	3419
40	451	1243	352	41	43	63	338	4	18	92
50	576	604	1735	1129	475	31	3	15	13	5
60	46	447	876	1864	1276	10000	1323	75	20	27
70	6	5	4	53	253	193	104	55	96	200
80	2498	167	5	5	8	13	24	39	32	84
90	202	596	4667	311	10	3	3	2	3	
100				4		78	58	24	5881	431
110	25	4							2	
120			496	41	3				2	2
130		2						19	8503	701
140	66	2								
150			2					3		
200		3								
250	1									

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20				2				11	15	
30	14									9
40	2	8	3	7						
50	4	5	8	33	7				2	
60	3				7	792	66			
70		2								10
80	622	45		3	5	7	3			
90	4	17	1438	106	3					
100						2	15	7	3656	233
110	10								3	
120			172	26						
130							2	4	10000	756
140	66									
150										
290										1

MS040138

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20	2				318	1794	9192	6489	1305	1982
30	31	43	9		2	13	195	311	86	42
40	135	491	722	867	1923	1862	1871	67	7	
50	18	16	334	2827	3518	3906	172	16	2	6
60	9		2		3	5	5	3	14	245
70	193	1718	10000	340	48	1		1		3
80	16	78	131	11	2	2		37	38	5
90									240	2008
100	94	14								
110			2	6		5	32	185	11	1
130										2
160		2								
220		2								
330					9					
390								2		

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20						2	349	382	504	54
30					22		54	2	12	2
40		10	54	122	1322	372	238	2	2	
50				65	1347	2538	86	7		
60						2		6		46
70	136	488	10000	344	41	1				
80	2	26	18	2	4			4	36	6
90			6		5		4	2	252	782
100	39	6								
110				2		8	40	167	8	1
120	1								1	1
130				2					2	
160									6	2
170				2						
200								2		
250			4							
380		2								

MS040139

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					2	22	122	422	212	111
30	2090	23	2				26	428	614	2812
40	102	3	12	28	62	630	282	2	2	269
50	3666	2070	174	574	36	56	2	4		6
60	28	199	299	578	389	10000	643	72	2	42
70			22	306	1678	2364	2226	358	32	46
80	5	950	36		4	6	28	28	2	26
90	8	56	336	808	58	2				
100		12	32	442	622	132	10	4	4	260
110	23		6	5						66
120	50	4524	378	40						
130					8	2	6	1212	96	10
140										5
150	342	172	15	3						
160							2	5804	533	77
170	2									
260							2			

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					11				19	12
30	1380	6	3							24
40					5	9				
50	14	20		38						4
60			5			1431	92	2	5	
70					11	5	18	5	23	
80		534	31	1						
90				226	16	1				
100				70	13	18				316
110	16		5	5						12
120	18	3415	278	23						
130								1352	106	11
140				5						
150	124	98								
160								10000	831	108
170	1									

MS040140

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					17	26	209	251	422	111
30	8	17	11				92	1091	1517	1637
40	68	53	53	81	425	563	41	89	56	803
50	5955	1508	656	476	68	89	38	38	8	5
60	104	296	254	392	221	2188	254	56		5
70	8	11	98	779	3061	2116	9754	3703	588	14
80		51		17		23	32			
90	35	47	500	1328	461	29	8		8	8
100	5	23	5	65	10000	8695	663	56	4	
110	29			8		11		5		50
120	21	675	7559	592	54					
130				5						
140									1355	1196
150	98	2								
160							416	37	5	
170										
180	4			5						
200								4		
220				7						
290								4		

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
40				37	93	56				
50						18				
60						18	28			
70		56		28		28	634	65	28	
80		18		18		18				
90	18				93		56		18	
100					10000	2894	219	13		
110	121		18			18				
120		18	5901	458	38					
130						18	18	28		
140								18	2941	264
150	29									
160							429	39	5	
170							2	2		
200								1		
220				2						
230	1									
290			1							

MS040141

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10										5
20					11	187	902	1736	229	810
30	31	125	56				46	282	471	1856
40	131	86	273	168	6	17	31	3	19	137
50	490	653	471	2141	1419	1988	152	71	5	
60	46	281	381	638	457	188	74	38	64	207
70	19	61	1	28	51	34	2	37	11	62
80	55	3284	1784	101	47					
90		11	53	28	3	63			2	
100									21	579
110	10000	681	64	1						
130			1							
160										
270										3
280										

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20									4	
30										120
40	4		4	6						
50				70	253	159	13	7		
60					25	7	2		3	29
70		2								
80	4	332	514	19						
90			9			5				
100									2	80
110	10000	662	57							
190						1				
220			1		1			1		
230		2								

MS040142

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					2	21	197	642	181	217
30	8	56	6		4		21	360	859	3429
40	327	515	28	252	134	1158	252	12	9	161
50	1226	1964	474	501	38	30	2	5	13	755
60	110	551	1217	2979	816	3926	338	49	29	26
70	13	5	9	73	383	282	165	1347	227	523
80	54	36	2	5	52	132	255	185	116	2309
90	7948	10000	1067	122	6			5	2	4
100		4	25	41	21	237	31	155	81	6
110	2			2		4	17	5	9708	3048
120	252	89	58	4				14		2
130					11	342	7564	665	63	4
140										2
150					4					
180			2							
270				4						

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							7	17		
30		5								7
40					15	5				
50		3		5						
60				3	3	11			5	7
70	3							18	5	24
80										18
90	1885	1537	307	9						
100			11	24	22	54	26	15	47	7
110									6988	1434
120	149	36	49	5	3			22		3
130						140	10000	914	89	7
230			1							
290		1								

MS040143

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20					31	189	984	1579	406	764
30	4315	122	26				102	1691	4445	10000
40	381	109	134	140	28	88	962	7	53	436
50	1985	2521	1228	3152	345	388	5			
60	159	1143	2335	6925	3907	7391	858	226	97	14
70	17			166	681	466	242	175	1443	223
80	134	6138	359	17			14	5		
90	24	81	1187	1171	835	92	17			
100							498	31		4507
110	331	42								
120			618	326	3					
130									5	8241
140	618	66								
210					8					

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
20							8	23	18	4
30	170		2						8	69
40		4				4		9		
50		48	12	66		4				
60	1	1	4	8	106	603	65	5	5	
70									121	17
80	16	1171	73	2		4	2	7		
90		2	159	393	136	5				
100							23	8	1	1529
110	172	16								
120		2	323	95	8					
130								1	7	10000
140	709	87	2							
190									1	
270							1			

MS040144

70eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10					14	66	1	12	11	6
20	1					18	324	3321	1162	1678
30	92	9256	178	945	16	4	9	68	156	1228
40	388	6974	3265	6289	286	644	51	9	1	8
50	59	61	16	78	45	1604	10000	768	28	29
60		2	4				1	1	1	9
70	4	11	12	189	78	8				
80		1						2		
90	2	2		1						
100						1		1		
110		22	1							
120									1	
170							1			

15eV

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10					11	34	1	5	4	1
20								148	382	224
30	22	3688	68	704	8					16
40	166	2921	2322	3714	164	185	42	4		
50					27	947	10000	589	16	11
60										1
70	2	2	11	176	92	6				
80			2					4		
90							1			
110			4							
120					6					
140						2				

MS_Tabela 1. Rozpowszechnienie i dokładne masy izotopów pierwiastków częściej występujących w związkach organicznych.

Z	Symbol	Izotop	Rozpowszechnienie [% atom.]			Masa izotopu
			Zakres z pomiarów	Pochodzenia ziemskiego	Średnio	
1	**H**	1	99.9816 - 99.9975	99.984426 (5)	**99.9850 (70)**	**1.0078250321 (4)**
		2	0.0184 - 0.0025	0.015574 (5)	**0.0115 (70)**	**2.0141017780 (4)**
5	**B**	10	18.927 - 20.337	19.82 (2)	19.9 (7)	10.0129370 (4)
		11	81.073- 79.663	80.18 (2)	80.1 (7)	11,0093055 (5)
6	**C**	12	98.85 - 99.02	98.8922 (28)	**98.93 (8)**	**12.000000000 (0)**
		13	1.15 - 0.98	1.1078 (28)	**1.07 (8)**	**13.0033548378 (10)**
7	**N**	14	99.890 -99.652	99.6337 (4)	**99.632 (7)**	**14.0030740052 (9)**
		15	0.411 - 0.348	0.3663 (4)	**0.368 (7)**	**15.0001088984 (9)**
8	**O**	16	99.7384 -99.7756	99.7628 (5)	**99.757 (16)**	**15.9949146221 (15)**
		17	0.0399 - 0.0367	0.0372 (4)	**0.038 (1)**	**16.99913150 (22)**
		18	0.2217 - 0.1877	0.20004 (5)	**0.205 (14)**	**17.9991604 (9)**
9	**F**	19		100	**100**	18.99840320 (7)
13	**Al**	27		100	100	26.98153844 (14)
14	**Si**	28	92.21 - 92.25	92.22968 (44)	**92.2297 (7)**	**27.9769265327 (20)**
		29	4.69 - 4.67	4.68316 (32)	**4.6832 (5)**	**28.97649472 (3)**
		30	3.10 - 3.08	3.08716 (48)	**3.0872 (5)**	**29.97377022 (5)**
15	**P**	31	100		**100**	**30.97376151 (20)**
16	**S**	32	94.537 - 95.261	95.018 (4)	**94.93 (31)**	**31.97207069 (12)**
		33	0.787 - 0.731	0.750 (7)	**0.76 (2)**	**32.97145850 (12)**
		34	4.655 - 3.993	4.215 (4)	**4.29 (28)**	**33.96786683 (11)**
		36	0.021 -0.015	0.017 (2)	**0.02 (1)**	**35.96708088 (25)**
17	**Cl**	35	75.64 - 75.86	75.771 (45)	**75.78 (4)**	**34.96885271 (4)**
		37	24.36 - 24.14	24.229 (45)	**24.22 (4)**	**36.96590260 (5)**
26	**Fe**	54		5.845 (23)	5.845 (35)	53.9396148 (14)
		56		91.754 (24)	91.754 (36)	55.9349421 (15)
		57		2.1191 (65)	2.119 (10)	56.9353987 (15)
		58		0.2819 (27)	0.282 (4)	57.93332805 (15)
29	**Cu**	63	69.24 - 68.98	69.174 (20)	69.17 (3)	62.9296011 (15)
		65	31.02 - 30.76	30.826 (20)	30.83 (3)	64.9277937 (19)
30	**Zn**	64		48.63 (20)	48.63 (60)	63.9291466 (18)
		66		27.90 (9)	27.90 (27)	65.9260368 (16)
		67		4.10 (4)	4.10 (13)	66.9271309 (17)
		68		18.75 (17)	18.75 (51)	67.9248476 (17)
		70		0.62 (1)	0.62 (3)	69.925325 (4)

34	**Se**	74		0.889 (3)	**0.89 (4)**	**73.9224766 (16)**
		76		9.366 (18)	**9.37 (29)**	**75.9192141 (16)**
		77		7.635 (10)	**7.63 (16)**	**76.9199146 (16)**
		78		23.772 (20)	**23.77 (28)**	**77.9173095 (16)**
		80		49.607 (17)	**49.61 (41)**	**79.9165218 (20)**
		82		8.731 (10)	**8.73 (22)**	**81.9167000 (22)**
35	**Br**	79		50.686 (26)	**50.69 (7)**	**78.9183376 (20)**
		81		49.314 (26)	**49.31 (7)**	**80.916291 (3)**
46	**Pd**	102		1.020 (8)	1.02 (1)	101905608 (3)
		104		11.14 (5)	11.14 (8)	103.904035 (5)
		105		22.33 (5)	22.33 (8)	104.905084 (5)
		106		27.33 (2)	27.33 (3)	105.903483 (5)
		108		26.46 (6)	26.46 (9)	107.903894 (4)
		110		11.72 (6)	11.72 (9)	109.905152 (12)
50	**Sn**	112		0.973 (3)	0.97 (1)	111.904821 (5)
		114		0.659 (3)	0.66 (1)	113.902782 (3)
		115		0.339 (3)	0.34 (1)	114.903346 (3)
		116		14.536 (31)	14.54 (9)	115.901744 (3)
		117		7.676 (22)	7.68 (7)	116.902954 (3)
		118		24.223 (30)	24.22 (9)	117.901606 (3)
		119		8.585 (13)	8.59 (4)	118.903309 (3)
		120		32.593 (20)	32.58 (9)	119.2021966 (27)
		122		4.629 (9)	4.63 (3)	121.9034401 (29)
		l24		5.789 (17)	5.79 (5)	123. 9052746 (15)
53	**I**	127		100	**100**	**126.904468 (4)**
78	**Pt**	190		0.013634 (68)	0.014 (1)	189.959930 (7)
		192		0.782659 (35)	0.782 (7)	191.961035 (4)
		194		32.96700 (77)	32.967 (99)	193.962664 (3)
		195		33.831557 (42)	33.832 (10)	194.964774 (3)
		196		25.24166 (36)	25.242 (41)	195.964935 (3)
		198		7.16349 (42)	7.163 (55)	197.967876 (4)
79	**Au**	197		100	100	196.966552 (3)
80	**Hg**	196		0.15344 (19)	0.15 (1)	195.965815 (4)
		198		9.968 (13)	9.97 (20)	197.966752 (3)
		199		16.873 (17)	16.87 (22)	198.968262 (3)
		200		23.096 (26)	23.10 (19)	199.968309 (3)
		201		13.181 (13)	13.18 (9)	200.970285 (3)
		202		29.863 (33)	29.86 (26)	201.970626 (3)
		204		6.865 (7)	6.87 (15)	203.973476 (3)

MS_Tabela 2. Kationorodniki i kationy częściej występujące w widmach masowych (EI).

Lista jonów umieszczonych w tabeli została arbitralnie wybrana z różnych źródeł. Z tego powodu jest ona daleka od kompletności. Czytelnik powinien ją sobie uzupełnić dopisując do niej jony, które zostały w sposób pewny zidentyfikowane w trakcie rozwiązywania zadań i problemów. Konieczne jest równoczesne korzystanie z tablic Beynona.

14	CH_2
15	CH_3
16	O
17	OH
18	H_2O, NH_4
19	F, H_3O
26	CN, C_2H_2
27	C_2H_3
28	C_2H_4, CO, N_2, CH=NH
29	C_2H_5, CHO
30	CH_2NH_2, NO
31	CH_2OH, CH_3O
32	O_2, S
33	SH, CH_2F
34	H_2S
35	^{35}Cl
36	$H^{35}Cl$
37	^{37}Cl
38	$H^{37}Cl$
39	C_3H_3
40	CH_2-CN
41	C_3H_5, $[CH_2CN+H]$, C_2H_2NH
42	C_3H_6, C_2H_2O
43	C_3H_7, $CH_3C=O$
44	CH_2CHO, $CH_3CH=NH_2$, CO_2, NH_2-C=O, $(CH_3)_2N$
45	CH_3CHOH, CH_2CH_2OH, CH_2OCH_3, COOH,
46	NO_2
47	CH_2SH, CH_3S
48	$[CH_3S+H]$
49	$CH_2{}^{35}Cl$
51	CHF_2, C_4H_3 , $CH_3{}^{37}Cl$
53	C_4H_5
54	CH_2CH_2CN
55	C_4H_7 , CH_2=CH-C=O
56	C_4H_8
57	C_4H_9, $C_2H_5C=O$
58	$[CH_3C(=O)CH_2+H]$, $C_2H_5CHNH_2$, $(CH_3)_2NCH_2$, C_2H_2S
59	C_3H_6OH (wszystkie), $CH_2OC_2H_5$, $(CH_3)_2COH$, $COOCH_3$,
60	$[CH_2COOH+H]$, CH_2ONO

61	$[CH_3COOH+H]$, CH_2CH_2SH, CH_2SCH_3
65	C_5H_5 (cyklopentadienyliowy)
66	C_5H_6 , H-SS-H
67	C_5H_7
68	$CH_2CH_2CH_2CN$
69	C_5H_9, CF_3 , $CH_3CH=CHC=O$ (izomery)
70	C_5H_{10}
71	C_5H_{11}, $C_3H_7C=O$
72	$[CH_2(C_2H_5)C=O+H]$, $C_3H_7CHNH_2$ (izomery), $(CH_3)_2N=C=O$
73	Homologi 59, $(CH_3)_3Si$
74	$[CH_2COOCH_3+H]$
75	$[COOC_2H_5+H]$, C_3H_7S (izomery), $(CH_3O)_2CH$, $(CH_3)_2SiOH$,
76	C_6H_4 (z Ph-X oraz $C_6H_4X_2$)
77	C_6H_5
78	$[C_6H_5+H]$
79	$[C_6H_5+2H]$, ^{79}Br (zob. 81)
80	$H^{79}Br$, pirol-CH_2, CH_3SSH
81	^{81}Br, furan-CH_2, C_6H_9 (izomery)
82	$H^{81}Br$, C_4H_8CN (izomery), C_6H_{10} (izomery), $C^{35}Cl_2$ (zob. 84 i 86)
83	C_6H_{11} (izomery), $CH^{35}Cl_2$ (zob. 85 i 87), C_4H_3S (tiofeny)
84	C_4H_4S (tiofeny), C_6H_{12} (izomery)
85	$C_4H_9C=O$ (izomery), $C^{35}ClF_2$ (zob. 87), C_5H_9O (pirany), $C_4H_5O_2$ (laktony)
86	$[CH_2(C_3H_7)C=O+H]$, $C_4H_9CHNH_2$ (izomery!)
87	Homologi 73, C_3H_7COO, $CH_2CH_2COOCH_3$
88	$[CH_2COOCH_2CH_3+H]$
89	Ph-C, $[COOC_3H_7+2H]$
90	Ph-CH, CH_3CHONO_2
91	$PhCH_2$, tropyliowy, [Ph-C+2H], [Ph-CH+H], $C_4H_8{}^{35}Cl$ (izomery!), zob. 93, Ph-N
92	$[PhCH_2+H]$, pirydyna-CH_2, azatropyliowy
93	$CH_2{}^{79}Br$ (zob. 95), C_7H_9 (izomery!), Ph-O, pirol=C=O

94	[Ph-O+H], pirol-C=O
95	Furan-C=O
96	$(CH_2)_5CN$ (izomery!)
97	C_7H_{13} (izomery!), tiofen-CH_2
98	[Furan-CH_2-O+H],
99	C_7H_{15} (izomery!), $C_6H_{11}O$ (izomery), piranony
100	[$CH_2(C_4H_9)C$=O+H] (izomery!), $C_5H_{11}CHNH_2$ (izomery!)
101	$COOC_4H_9$
102	[CH_2-$COOC_3H_7$+H]
103	[$COOC_4H_9$+2H], $C_5H_{11}S$ (izomery), $(CH_3CH_2O)_2CH$
104	$CH_3CH_2ONO_2$
105	Ph-C=O (indykator dla PhCOG), Ph-CH_2CH_2, $PhCHCH_3$
106	$PhCHNH_2$, $PhNHCH_2$
107	$PhCH_2O$, HO-C_6H_4-CH_2 (izomery), $C_2H_4{}^{79}Br$ (zob. 109)
108	[Ph-CH_2-O+H], CH_3-pirol-C=O (izomery!)
109	Cykloheksen-C=O (α,β)
111	tiofen-C=O
119	CF_2CF_2, Ph-$C(CH_3)_2$, CH_3CH-C_6H_4-CH_3, CH_3-C_6H_4-C=O
120	O=C_6H_4=C=C=O
121	HO-C_6H_4-C=O (izomery), CH_2-C_6H_4-OCH_3, HN=C_6H_4=N=O, C_9H_{13}
122	[Ph-COO+H],
123	F-C_6H_4-C=O, [PhCOO+2H]
125	Ph-S=O
127	I
128	HI
130	Indol-CH_2
131	C_3F_5, Ph-CH=CH-C=O
135	$(CH_2)_4{}^{79}Br$ (izomery, zob. także 137)
138	[HO-C_6H_4-COO+H],
139	Cl-C_6H_4-C=O (zob. 141)
141	CH_2-I
147	$(CH_3)_2Si$=O-$Si(CH_3)_3$ (z silikonów)
149	[Bezwodnik ftalowy+H]
150	Ph-Ph

MS_Tabela 3. Rodniki i cząsteczki obojętne obserwowane w widmach masowych (EI).

Lista tych fragmentów została skompilowana arbitralnie z różnych źródeł. Z tego powodu jest ona daleka od kompletności. Czytelnik powinien ją sobie uzupełnić dopisując do niej te fragmenty, które zostały w sposób pewny zidentyfikowane w trakcie rozwiązywania problemów. Wskazane jest równoczesne korzystanie z tablic Beynona.

1	H
2	2H
3-11	Na ogół błędy spektrometru lub operatora, artefakty
15	CH_3
16	O (najczęściej w grupach funkcyjnych bogatych w tlen – NO_2, N->O, etc.), NH_2 (głównie z amidów)
17	HO
18	H_2O (eliminacja z alkoholi, aldehydów i ketonów)
19	F
20	HF
26	CHCH, CHN
27	CH_2=CH, HCN (głównie hydroksy- i aminonitryle, heterocykle)
28	CH_2=CH_2 (najczęściej eliminacja z estrów), CO, [HCN+H]
29	CH_3CH_2, CHO
30	NH_2CH_2, CH_2O, NO, C_2H_6
31	OCH_3, CH_2OH, CH_2NH_2 (kation jest bardziej stabilny!)
32	CH_3OH, S
33	HS, [CH_3 i H_2O]
34	H_2S
35	^{35}Cl
36	$H^{35}Cl$, [2 H_2O]
37	^{37}Cl, H_2Cl
38	$H^{37}Cl$, C_3H_2, C_2N, F_2
39	C_3H_3, HC_2N
40	CH_3CHCH
41	CH_2=$CHCH_2$
42	CH_2=$CHCH_3$, CH_2=C=O, $(CH_2)_3$, NCO, $NCNH_2$
43	C_3H_7, CH_3C=O, CH_2=CH-O, HCNO,
44	CH_2=CHOH, CO_2, N_2O, $CONH_2$, NH_2=$CHCH_3$, $NHCH_2CH_3$
45	CH_3CHOH, CH_3CH_2O, CO_2H, $CH_3CH_2NH_2$
46	(H_2O and CH_2=CH_2), CH_3CH_2OH, NO_2
47	CH_3S

48	CH_3SH, SO
49	$CH_2{}^{35}Cl$
51	$CH_2{}^{37}Cl$, CHF_2
52	C_4H_4, C_2N_2
53	C_4H_5
54	CH_2=CH-CH=CH_2
55	CH_2=$CHCHCH_3$
56	CH_2=$CHCH_2CH_3$ (izomery), [2CO]
57	C_4H_9, C_2H_5CO
58	N=C=S, [NO+CO], $(CH_3)_2C$=O
59	CH_3O-C=O, CH_3CONH_2
60	C_3H_7OH, CH_2=$C(OH)_2$
61	CH_3CH_2S, –CH_2CH_2SH
62	[H_2S+CH_2=CH_2]
63	CH_2CH_2Cl, CH_3CHCl (zob. 65)
64	C_5H_4 (izomery), S_2, SO_2
65	$CH_2CH_2{}^{37}Cl$, $CH_3CH^{37}Cl$
68	C5H8 (izomery, zwłaszcza CH_2=$C(CH_3)$-CH=CH_2)
69	CF_3, C_5H_9 (izomery)
71	C_5H_{11} (izomery)
73	CH_3CH_2O-C=O
74	C_4H_9OH
75	C_6H_3
76	C_6H_4, CS_2
77	C_6H_5, CS_2H
78	C_6H_6 CS_2H_2, C_5H_4N (izomery)
79	^{79}Br, C_5H_5N (izomery)
80	$H^{79}Br$
81	^{81}Br
82	$H^{81}Br$
85	$C^{35}ClF2$
87	$C^{37}ClF2$
100	CF_2=CF_2
119	CF_3CF_2
122	PhCOOH
127	I
128	HI

NMR_Tabela 1.1. Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji α- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3) (*dopisz ulubione*).

δ [ppm]	**6,0**	5,8	5,6	5,4	5,2	**5,0**	4,8	4,6	4,4	4,2	**4,0**	3,8	3,6	3,4	3,2	**3,0**	2,8	2,6	2,4	2,2	**2,0**	1,8	1,6	1,4	1,2	**1,0**	0,8	0,6
H_nC-Alkil																							**1**		**2**		**3**	
H_nC-Alkenyl																			**1**		**2**		**3**					
H_nC-Alkinyl																	**1**			**2**		**3**						
H_nC-Aryl																	**1**	**2**		**3**								
H_nC-NH_2															**1**		**2**		**3**									
H_nC-NR_2																**1**			**2**	**3**								
H_nC-NRPh													**1**			**2**		**3**										
H_nC-OH												**1**		**2**	**3**													
H_nC-OR													**1**	**2**	**3**													
H_nC-O-Aryl									**1**		**2**	**3**																
H_nC-I											**1**					**2**				**3**								
H_nC-Br											**1**			**2**				**3**										
H_nC-Cl											**1**			**2**		**3**												
H_nC-F							**1**		**2**	**3**																		
H_nC-PR_2																	**1**		**2**		**3**							
H_nC-$P(O)R_2$																	**1**		**2**	**3**								
H_nC-SH(R)															**1**			**2**		**3**								
H_nC-SPh										**1**		**2**		**3**														
CH_2Cl_2					**2**																							

Tabela 1.2. Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji α- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3), (podstawniki złożone).

δ [ppm]	5,6	5,4	5,2	**5**	4,8	4,6	4,4	4,2	**4**	3,8	3,6	3,4	3,2	**3**	2,8	2,6	2,4	2,2	**2**	1,8	1,6	1,4	1,2	**1**	0,8	0,6
H_nC-C(O)H																**1**	**2**	**3**								
H_nC-C(O)R																**1**	**2**	**3**								
H_nC-C(O)Ph												**1**			**2**		**3**									
H_nC-CN														**1**			**2**	**3**								
H_nC-COOH(R)																**1**		**2**	**3**							
H_nC-C(O)NR_2																	**1**	**2**	**3**							
H_nC-NHC(O)R										**1**		**2**		**3**												
H_nC-NO_2							**1**	**2**	**3**																	
H_nC-NC					**1**							**2**		**3**												
H_nC-NCO								**1**				**2**		**3**												
H_nC-NCS									**1**		**2**	**3**														
H_nC-OC(O)R					**1**			**2**			**3**															
H_nC-OC(O)Ph				**1**			**2**			**3**																
H_nC-O-N=O		**1**			**2**		**3**																			
H_nC-OCN			**1**			**2**		**3**																		
H_nC-SCN												**1**		**2**		**3**										
H_nC-S(O)R										**1**			**2**			**3**										
H_nC-SO_3H(R)									**1**			**2**		**3**												

NMR_Tabela 1.3. Wpływ efektu indukcyjnego dwóch podstawników w pozycji α- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metylenowej (n=2) w wybranych związkach o wzorze X-CH_2-X (*dopisz ulubione*).

X = \ δ [ppm]	6,6	6,4	6,2	**6,0**	5,8	5,6	5,4	5,2	**5,0**	4,8	4,6	4,4	4,2	**4,0**	3,8	3,6	3,4	3,2	**3,0**	2,8	2,6	2,4	2,2	**2,0**	1,8	1,6	1,4	1,2	**1,0**
CH_3																												**2**	
-C=C<																			**2**										
-C≡C-																		**2**											
-P(O)(OR)$_2$																			**2**										
-C(=O)-OR																	**2**												
-C(=O)-N<																	**2**												
-CN																**2**													
-N<																	**2**												
-S-R																**2**													
-C(=O)-R																**2**													
-C(=O)-aryl														**2**															
-aryl														**2**															
-I														**2**															
-N_3													**2**																
-OH												**2**																	
-NH-C(=O)-										**2**																			
-Br									**2**																				
-O-R								**2**																					
-Cl							**2**																						
-O-aryl	**2**																												
-OC(=O)-R		**2**																											

NMR_Tabela 2.1. **Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji β- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3), (*dopisz ulubione*).**

δ [ppm]	3,1	**3,0**	2,9	2,8	2,7	2,6	**2,5**	2,4	2,3	2,2	2,1	**2,0**	1,9	1,8	1,7	1,6	**1,5**	1,4	1,3	1,2	1,1	**1,0**	0,9	0,8	0,7	0,6	0,4	0,2
H_nC-C-Alkil																						**1**	**2**		**3**			
H_nC-C-Alkenyl															**1**				**2**			**3**						
H_nC-C-Alkinyl														**1**			**2**			**3**								
H_nC-C-Aryl														**1**			**2**			**3**								
H_nC-C-NR_2															**1**			**2**			**3**							
H_nC-C-NRPh														**1**			**2**				**3**							
H_nC-C-OH(-R)															**1**		**2**			**3**								
H_nC-C-O-R															**1**		**2**			**3**								
H_nC-C-O-Aryl												**1**			**2**				**3**									
H_nC-C-I											**1**			**2**	**3**													
H_nC-C-Br												**1**	**2**	**3**														
H_nC-C-Cl												**1**		**2**		**3**												
H_nC-C-F										**1**			**2**			**3**												
H_nC-C-SH															**1**	**2**			**3**									
H_nC-C-S-R													**1**			**2**				**3**								

NMR_Tabela 2.2. **Wpływ efektu indukcyjnego podstawnika w pozycji β- na wartość przesunięcia chemicznego grupy metinowej (n=1), metylenowej (n=2) i metylowej (n=3), podstawniki złożone (*dopisz ulubione*).**

δ [ppm]	3,1	**3,0**	2,9	2,8	2,7	2,6	**2,5**	2,4	2,3	2,2	2,1	**2,0**	1,9	1,8	1,7	1,6	**1,5**	1,4	1,3	1,2	1,1	**1,0**	0,9	0,8	0,7	0,6	0,4	0,2
H_nC-C-C(O)H													**1**		**2**						**3**							
H_nC-C-C(O)R													**1**				**2**					**3**						
H_nC-C-C(O)Ph													**1**				**2**				**3**							
H_nC-C-CN												**1**			**2**				**3**									
H_nC-C-COOH													**1**		**2**					**3**								
H_nC-C-COOR													**1**		**2**					**3**								
H_nC-C-C(O)NR_2														**1**			**2**				**3**							
H_nC-C-NHC(O)R													**1**				**2**				**3**							
H_nC-C-NO_2							**1**				**2**					**3**												
H_nC-C-OC(O)R												**1**					**2**				**3**							
H_nC-C-OC(O)Ph													**1**				**2**			**3**								

NMR_Tabela 3. **Wartości przesunięć chemicznych wybranych związków nienasyconych, aldehydów, imin, etc. (*dopisz ulubione*).**

δ [ppm]	**10**	9,8	9,6	9,4	9,2	**9,0**	8,8	8,6	8,4	8,2	**8,0**	7,8	7,6	7,4	7,2	**7,0**	6,8	6,6	6,4	6,2	**6,0**	5,8	5,6	5,4	5,2	**5,0**	4,8	4,6
Benzen															X													
Naftalen												1		2														
Antracen										9	1			2														
Fenantren						1					4	23	5															
Furan														2						3								
Pirol											1						2			3								
Tiofen															2	3												
Pirydyna								2								3												
H-C(O)R		X	X																									
H-C(O)Ph	X																											
H-C(O)OR										X	X																	
H-C(OR)$_3$																									X	X		
H-C=N-O-															cis			trans										
H-C=N-N-																					X							
H-C=C-																				x	x	x	x	x				
H-C=C-C=X											x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	X		
H$_2$C=C																									X	X		
CHCl$_3$/CH$_2$Cl$_2$															C										M			

NMR_Tabela 4. **Wpływ podstawnika na przesunięcie chemiczne protonów w pozycji o-, m- i p- w monopodstawionych pochodnych benzenu (Ph-X).**

δ [ppm] / X =	8,3	8,2	8,1	**8,0**	7,9	7,8	7,7	7,6	**7,5**	7,4	7,3	7,2	7,1	**7,0**	6,9	6,8	6,7	6,6	**6,5**
Alkil												all							
t-Bu											o	m	p						
Alkenyl												all							
Alkinyl										o		mp							
Fenyl										o	m	p							
-CF_3								m	o	p									
-CH_2Cl												all							
-CCl_3			o						m	p									
-CH_2OR												all							
-												all							
-CH_2NH_2											all								
-F												m	p	o					
-Cl												all							
-Br									o			mp							
-I							o				p		m						
-OH														m	p	o			
-OR											m			op					
-OC(O)R												mp		o					
-C(O)H					o			p	m										
-C(O)R					o			mp											
-C(O)OH					o					p	m								
-C(O)OR		o							p	m									
-C(O)Cl			o						p	m									
-CN									all										
-NH_2													m			p			o
-NMe_2													m				op		
-NHC(O)R									o										
-NO_2	o						p		m										
-SR											all								
-NCO											all								

NMR_Tabela 5. Typowe wartości przesunięć chemicznych protonów wymienialnych (na heteroatomach).

δ [ppm]		13		12		11		10		9		8		7		6		5		4		3		2		1		0		-1	
TMS																												x			
R-COOH		x	x	x	x	x	x	x																							
$R\text{-}SO_3H$				x	x	x	x	x																							
Aryl-OH													x	x	x	x	x	x	x	x											
[Aryl-OH]n			x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x														
Alkil-OH																			x	x	x	x	x	x	x	x	x				
Enole cykliczne														x	x	x															
Enole-diketony	x	x	x																												
Enole-ketoestry							x	x	x	x																					
H_2O w D_2O																		x	x												
H_2O w $CDCl_3$																								x	x						
H_2O w C_6H_6																										x	x				
H_2O w $(CD_3)_2CO$																						x									
C=N-OH				x	x	x	x	x	x	x																					
$R\text{-}NH_2$ i R_2NH																						x	x	x	x	x	x				
Aryl-NH-																		x	x	x	x	x									
RC(O)-NH-											x	x	x	x	x	x	x	x													
ROC(O)-NH-													x	x	x	x	x	x	x												
R-SH																								x	x	x					
Aryl-SH																					x	x	x								

IR_Tabela 1. Zakres 3650-2350 cm^{-1} (pasma rozciągające grup –O-H, -N-H i C-H.

ν [cm^{-1}] / Grupy funkcyjne	3600	3550	3500	3450	3400	3350	3300	3250	3200	3150	3100	3050	3000	2950	2900	2850	2800	2750	2700	2650	2600	2550	2500	2450	2400
$-CH_3$														s		s									
$-CH_2-$															s	s									
>CH-															w										
cyklopropan/oksiran												w													
-CH=CH-												m													
$-CH=CH_2$												m	m												
$-C=CH_2$											m														
-C≡C-H							s																		
-CHO															s, dwa pasma										
$-O-CH_3$																m									
$-O-CH_2-O-$																	m								
$-N-CH_3$																	m								
aromatyczne C-H												m													
pirydynowe C-H												m													
-COOH		m															w, szer., dimery								
-OH	s		s, polimeryczne							w, kompleksowe, wiązania wodorowe															
$-NH_2$, wolne				m, dwa pasma																					
$-NH_2$, związane					s, dwa pasma																				
>NH, wolne				m, jedno pasmo																					
>NH, związane					s, jedno pasmo																				
$-C(O)NH_2$, wolne			m		m																				
$-C(O)NH_2$, związane						s			s																
-C(O)NH-				m			m				m														
$-NH_3^+$ $RCOO^-$										s, bardzo szeroka seria pasm z nałożonymi pasmami od CH															
NH_4^+ ,$-NH_3^+$ $>NH_2^+$							vs, szerokie												m, seria szerokich pasm						
-S-H																						w			
P(O)-O-H																			m, szerokie						
P-H																									m

IR_Tabela 2. Zakres 2500-1900 cm^{-1} (wiązania wielokrotne).

ν [cm^{-1}] Grupy funkcyjne	2500	2450	2400	2350	2300	2250	2200	2150	2100	2050	2000	1950	1900
R-C≡C-H								w					
R-C≡C-R’						v (zmienne)							
$-C\equiv O^+$										m			
$-NH_3^+$ $RCOO^-$								w					
$R-N_3$								s					
R-CN						m/s							
R-CN sprzęż.							s						
$-CHN-^+$						v							
-O-CN						s							
$-N_2^+$						s							
-S-CN								s					
CO_2				s									
-N=C=O						s							
-N=C=N-								s					
>C=C=O							s						
-N=C=S									s				
>C=C=N-											s		
>C=C=C<												m	
RNH_3^+ Cl^-	m, szerokie												
Si-H					m (zmienne)								
$>C=X^+$			m (zmienne)										
P-H				m									

IR_Tabela 3.1. Zakres 2000-1400 cm^{-1} (wybrane fragmenty i wiązania podwójne, bez C=O).

ν [cm^{-1}] Grupy funkcyjne	2000	1950	1900	1850	1800	1750	1700	1650	1600	1550	1500	1450	1400	1350
>C=C=C<		m												
-CH=CH_2				m				v						
>C=CH_2					m			v						
>C=C<								v						
>C=C< sprzęż.								s						
C-H aromat.	w, grupa pasm charakterystycznych dla rodzaju podstawienia								m		m			
C-H arom.sprz.									s m		v			
>C=N-								v						
>C=N- sprzęż.								v (na ogół słabe)						
-N=N-								v						
-C(O)NH_2 wolne									s					
-C(O)NH_2 zw.								s						
-C(O)NH-										s				
-NH_2								m						
>NH								vw						
-NH_3^+								w		s				
-C(O)-O^-									s					
>C-NO_2										s				
-O-NO_2								s						
>N-NO_2									s					
-O-NO								s						
>N-NO												s		
C-H pirydynowe									m		m			
-C(S)-NH-										s				

IR_Tabela 3.2. Zakres 2000-1400 cm^{-1} (drgania wiązań podwójnych, wybrane związki karbonylowe).

Grupy funkcyjne / ν [cm^{-1}]	2000	1950	1900	1850	1800	1750	1700	1650	1600	1550	1500	1450	1400	1350
ketony nasycone							s							
ketony sprzężone								s						
aryloketony								s						
diaryloketony									m					
α-halogenoketony						s								
α,α'-dihalogenoketony					s									
ketony związane										m (poszerzone)				
ketony cykliczne $(CH_2)_6$							s							
ketony cykliczne $(CH_2)_5$						s								
ketony cykliczne $(CH_2)_4$					s									
aldehydy nasycone						s								
aldehydy sprzężone								s						
aldehydy związane									s					
kwasy nasycone							s							
kwasy nienasycone							m							
kwasy α-halogenokarboks.						s								
kwasy, arylokarboksylowe								s						
estry kwasów karboksyl.						s								
estry kwasów nienasyc.							s							
laktony (4-6)					s									
tioestry									m					
chlorki kwasowe					s									
chloromrówczany					s									
bezwodniki kwasowe				s, dwa pasma										
bezwodniki cykliczne				s, dwa pasma										
amidy I rz.							s							
amidy II rz.							s							
amidy III rz.								s						

IR_Tabela 4.1. Zakres 1500-600 cm-1 (drgania wybranych fragmentów i grup funkcyjnych, część I).

ν [cm^{-1}] Grupy funkcyjne	1500		1450		1400		1350		1300		1250		1200		1150		1100		1050		1000		950		900		850		800		750		700	
CH_3-C			m				s																											
$(CH_3)_2C$			m				s								s														m					
$(CH_3)_3C$			m			m	s					s																						
-$(CH_2)_n$-			m																													m		
cykloheksan			m																	m		m												
cyklobutan			m																			m				m								
-CH=CH- cis																																		w
-CH=CH- trans									m														s											
-CH=CH_2					s					s												s			s									
>C=CH_2						s																				s								
>C=CH-																													s					
benzen, mono-		w													w			w		w											s		s	
benzen, 1,2-di		w										w					w		w		w										s			
benzen, 1,3-di		v													w			w		w				m						s				
benzen, 1,4-di		v										w					w			w								s						
R-CHO					m																				w									
Ph-CHO						m				m				m											w									
R_2C=O														m																				
-COOH				m						s														m										
-COO^-						s																												
mrówczany														s																				
octany											s																							
propioniany														s																				
akrylany										s					s																			
benzoesany									s							s																		

IR_Tabela 4.2. Zakres 1500-600 cm-1 (drgania wybranych fragmentów i grup funkcyjnych, część II).

ν [cm^{-1}] Grupy funkcyjne	1500	1450	1400	1350	1300	1250	1200	1150	1100	1050	1000	950	900	850	800	750	700
epoksydy						s							m	m			
nadtlenki alkil.														m			
nadtlenki aryl.											m						
Bezwodniki								s									
bezw. cykliczne					s												
$-C(O)NH_2$			m														
$-CH_2-O-CH_2-$								s									
etery arylowe						s											
$-CH_2-OH$				s						s							
>CH-OH				s					s								
>C-OH			s					s									
fenole			s				s										
$Ph-NH_2$				s													
Ph-NH-				s													
Ph-N<				s													
pirydyna							s		s				s, dwa pasma, szerokie				
pirymidyna											s				s		
>C-F			vs (zmie nne położenie)														
>C-Cl															m (zmienne)		
$>CFCF_3$																s	
$>C-NO_2$				s													
$-O-NO_2$, $>N-NO_2$					s												
>C-NO, >N-NO			s														
-N=C=S	s																w
-S(O)-										s							
$-SO_2-$				s				s									
$-SO_3H$							s			s							
$-SO_2X$			s				s										

IR_Tabela 4.3. Zakres 1500-600 cm-1 (drgania wybranych fragmentów i grup funkcyjnych, część III).

ν [cm^{-1}] Grupy funkcyjne	1500	1450	1400	1350	1300	1250	1200	1150	1100	1050	1000	950	900	850	800	750	700
$-Si(CH_3)_3$						s						m				w	
$>Si(CH_3)_2$						s									m		
$>Si(CH_3)$						s									m		
>Si-Ph		s						s									
>Si-O-Si<										s							
P=O wolne					s												
P=O związane						s											
P-O-Me							s			s							
P-O-Et								s		s							
P-O-C (alkil)								m		s							
P-O-C (aryl)						s											
P-Ph		m															
P=S																v	
P-F													s				
$(alkil\text{-}O)_2PO_2^-$							s										
$(aryl\text{-}O)_2PO_2^-$									s								
CO_3^-		vs											m				
$SO_4^=$										vs							m
NO_3^-														m			
NO_2^-						vs								w			
NH_4^+			s														
$HPO_4^=$, H_2PO_4										vs							
krzemiany										vs							

Zadania IR/NMR/MS

MS040300
MS040302
MS040303
MS040304
MS040306
MS040308
MS040309
MS040310
MS040311
MS040314
MS040317
MS040320
MS040321
MS040322
MS040325
MS040326
MS040327
MS040328
MS040329
MS040330
MS040331
MS040332
MS040334
MS040335
MS040336
MS040337
MS040338
MS040339
MS040340
MS040342
MS040343
MS040345
MS040346
MS040347
MS040348
MS040349
MS040350
MS040351
MS040352
MS040353
MS040354
MS040355
MS040356
MS040357
MS040358
MS040359
MS040360
MS040361
MS040362
MS040363
MS040364
MS040365
MS040366
MS040367
MS040368
MS040369
MS040370
MS040372
MS040373
MS040374
MS040377
MS040379
MS040382
MS040383
MS040384
MS040385
MS040386
MS040387
MS040388
MS040389
MS040390
MS040391
MS040392
MS040393
MS040394
MS040396
MS040398
MS040399
MS040830
MS040831
MS040832
MS040834
MS040835
MS040836
MS040837
MS040838
MS040839
MS040840
MS040843
MS040844
MS040845
MS040846
MS040848
MS040849
MS040850
MS040851
MS040852
MS040855
MS040859
MS040860
MS040861
MS040862
MS040863
MS040864
MS040865
MS040866
MS040867
MS040868
MS040869
MS040870
MS040871
MS040872
MS040873
MS040874
MS040875
MS040876
MS040877
MS040878
MS040879
MS040880
MS040883
MS040884
MS040885
MS040886
MS040887
MS040888
MS040889
MS040895
MS040896
MS040897
MS040898
MS040899
MS040930
MS040931
MS040932
MS040934
MS040935
MS040936
MS040937
MS040938
MS040939
MS040943
MS040946

Zadania MS

MS040008
MS040011
MS040018
MS040020
MS040029
MS040034
MS040052
MS040055
MS040056
MS040062
MS040063
MS040073
MS040083
MS040098
MS040101
MS040102
MS040103
MS040104
MS040105
MS040106
MS040107
MS040108
MS040109
MS040110
MS040111
MS040112
MS040113
MS040114
MS040115
MS040116
MS040117
MS040118
MS040119
MS040120
MS040121
MS040122
MS040123
MS040124
MS040125
MS040126
MS040127
MS040128
MS040129
MS040130
MS040131
MS040132
MS040133
MS040134
MS040135
MS040136
MS040137
MS040138
MS040139
MS040140
MS040141
MS040142
MS040143
MS040144