



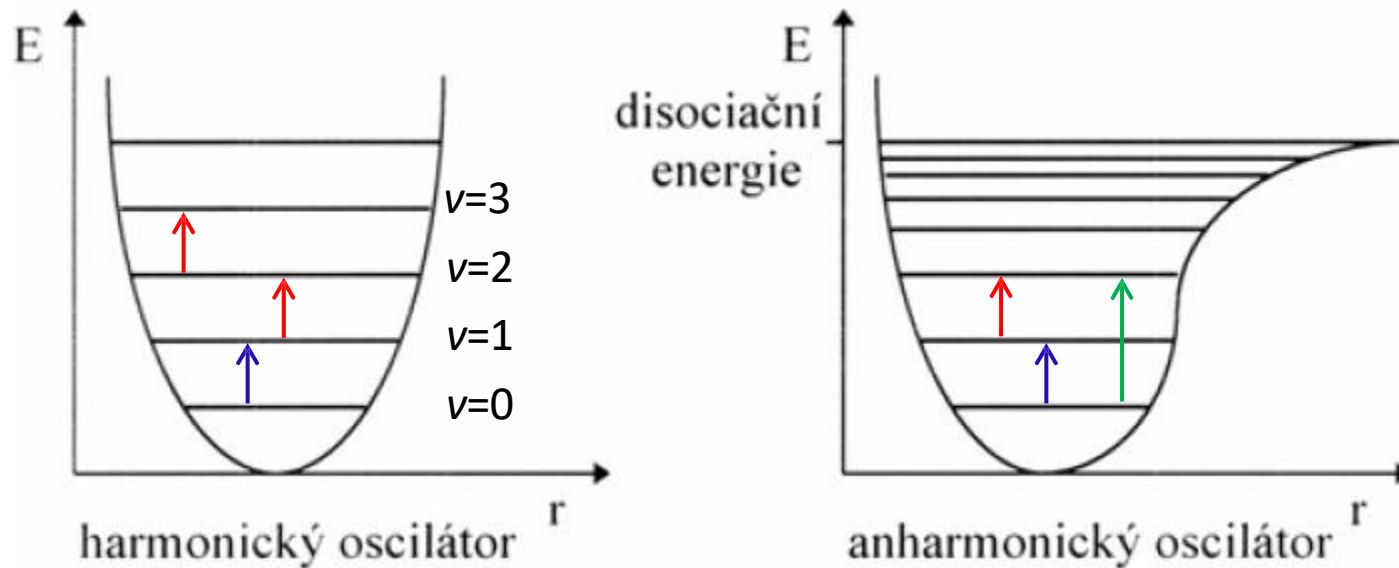
Ústav analytické chemie  
VŠCHT PRAHA

# INTERPRETACE INFRAČERVENÝCH SPEKTER



# Obecné základy IČ

- nedestruktivní metoda strukturní analýzy
- měření přechodů mezi **vibračními** hladinami
- **změna dipólového momentu** během vibrace



fundamentální přechod  $\Delta v = 1$  (z  $v = 0$  na  $v = 1$ )

**horký přechod**  $\Delta v = 1$  (např. z  $v = 1$  na  $v = 2$ )

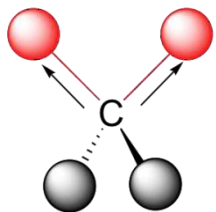
**svrchní přechod**  $\Delta v > 1$  (např. z  $v = 0$  na  $v = 2$ ) = **overtón**

# Obecné základy IČ

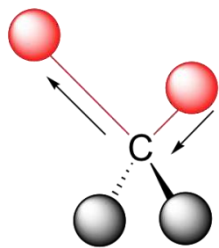
- harmonický oscilátor – ekvidistantně rozložené hladiny
  - fundamentální i horký přechod mají stejnou energii → degenerované hladiny → nelze je odlišit
- anharmonický oscilátor – rozdílné rozložení energetických hladin
  - s rostoucí energií se rozdíl zmenšuje
  - lze pozorovat fundamentální i horké přechody, overtóny nejsou přesný dvojnásobek fundamentálního přechodu

# Obecné základy IČ

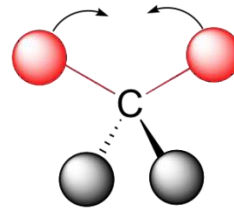
- typy vibrací:
  - valenční (změna délky vazby)
    - symetrická, antisymetrická, asymetrická
  - deformační (změna vazebných úhlů)
    - nůžková, deštníková, kývavá, vějířová, kroutivá
    - rovinná, mimorovinná
    - symetrická, antisymetrická, asymetrická



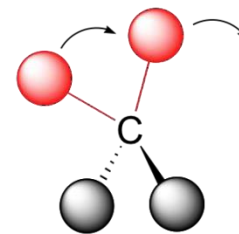
symetrická valenční



antisymetrická valenční



deformační  
nůžková

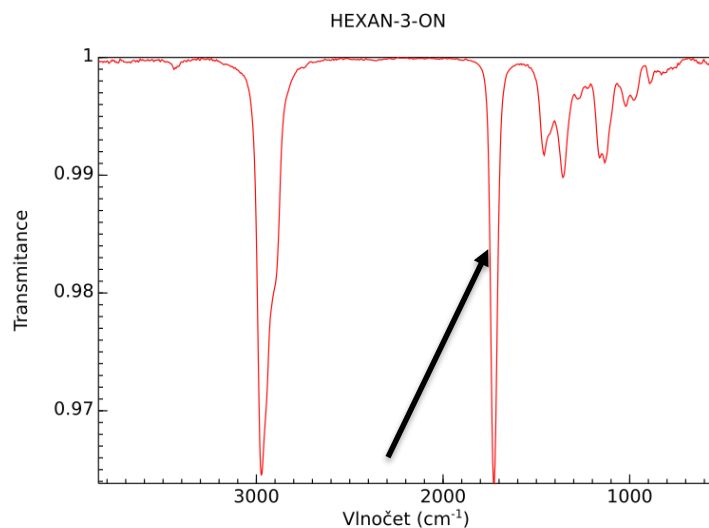


deformační  
kývavá

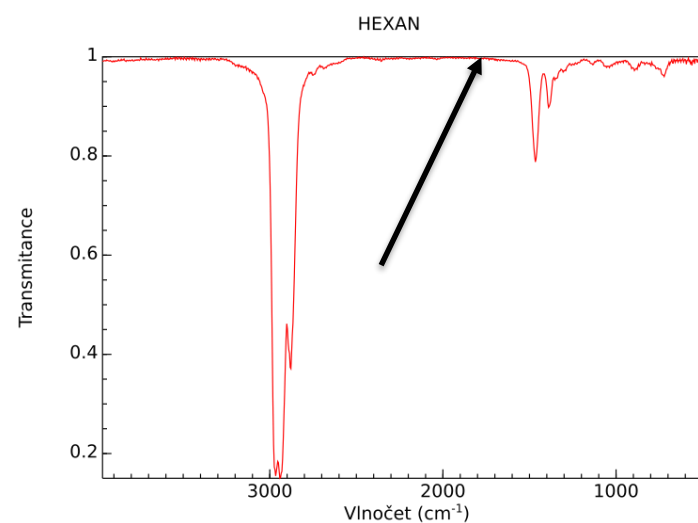
- střední infračervená oblast (cca 4 000–400  $\text{cm}^{-1}$ )
  - zejména fundamentální přechody (občas overtony)
  - oblast charakteristických vibrací (obvykle 4 000–1 300  $\text{cm}^{-1}$ )
    - pásy charakterizují jednotlivé funkční skupiny
  - oblast otisku palce (obvykle 1 300–400  $\text{cm}^{-1}$ )
    - pásy charakterizují celou molekulu (skeletální vibrace)
- parametry spektra:
  - poloha (vlnčet) maxima absorpčního pásu
  - relativní intenzita pásu
  - šířka pásu (v polovině jeho výšky)

# Postup interpretace IČ spekter

- spektrum se interpretuje od nejvyšších frekvencí směrem k nižším (zleva doprava)
- největší píky jsou obvykle pro sloučeninu strukturně nejvýznamnější
- není nutné identifikovat všechny pásy ve spektru, ale pro danou funkční skupinu chceme najít všechny její charakteristické vibrace
- absence charakteristického pásu má stejný identifikační význam jako jeho přítomnost (=pokud ve spektru nenajdeme charakteristický pás, pak struktura nebude obsahovat danou funkční skupinu)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Tabulky charakteristických vibrací

alkan					
3045–2965	w-m	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	$-(\text{C}=\text{O})-\text{CH}_3$	
3010–2960	w-m	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	$-(\text{C}=\text{O})-\text{CH}_3$	
2970–2840	m	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$-(\text{C}=\text{O})-\text{CH}_3$	
3030–2950	w-m	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	$-\text{O}-\text{CH}_3$	
2985–2920	w-m	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	$-\text{O}-\text{CH}_3$	
2880–2815	m	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$-\text{O}-\text{CH}_3$	
3000–2965	m-s	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	Ar-CH <sub>3</sub>	
2955–2935	m-s	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	Ar-CH <sub>3</sub>	
2930–2920	m-s	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	Ar-CH <sub>3</sub>	
2975–2950	m-s	m	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	$-\text{CH}_3$	vlnčet roste s elektronegativním substituentem
2940–2915	m-s	m-s	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2$	
2885–2865	m	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$-\text{CH}_3$	
2870–2840	m	m-s	$\nu_s(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2$	
2890–2880	w	m	$\nu(\text{CH})$	$>\text{CH}-$	
1480–1440	m	w-m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-(\text{C})-$ $-\text{CH}_2-(\text{O})-$	nůžková vibrace CH <sub>2</sub> , může se překrývat s pásem Ar nebo -CH <sub>3</sub>
1475–1435	m	m	$\delta_d(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{C})-$ $\text{CH}_3-(\text{O})-$	možný překryv s pásem Ar nebo -CH <sub>2</sub> -
1450–1390	m-s	w	$\delta_d(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{C}=\text{O})-\text{C}-$ $\text{CH}_3-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-$ $\text{CH}_3-(\text{S}=\text{O})-\text{C}-$ $\text{CH}_3-\text{N}<$	
1450–1405	m-s	m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-\text{X}$	X: $-(\text{C}=\text{O})-$ , $-\text{COOR}$ , $-\text{C}=\text{C}-$ , $-\text{C}\equiv\text{C}-$ , $-\text{Ar}$ , $-\text{C}\equiv\text{N}$ , $-\text{NO}_2$ , $-\text{Cl}$ , $-\text{Br}$
1390–1345	m-s	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{C})-$ $\text{CH}_3-(\text{O})-$	pokud jsou dvě či tři CH <sub>3</sub> skupiny připojeny na stejný uhlíkový atom dochází k rezonanci → dublet
v případě výskytu dubletu, jehož obě složky jsou zhruba stejně intenzivní, je ve struktuře látky přítomno rozvětvení $>\text{C}(\text{CH}_3)_2$ ; v případě dubletu, jehož složka o nižším vlnčtu je zhruba 2x intenzivnější, je ve struktuře látky přítomna skupina $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ . Pokud ve spektru je pouze singlet, je tím potvrzena přítomnost skupiny $\text{CH}_3-(\text{C})-$ či $\text{CH}_3-(\text{O})-$ a zároveň vyloučeno možné výše uvedené rozvětvení.					

# Tabulky charakteristických vibrací

Tabulka I pokračování

Vlnočet, $\text{cm}^{-1}$	Intenzita	Přifažení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
+3360-3320	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$	-CONH <sub>2</sub>	3220-3180
3340-3300	m	$\nu(\text{CH})$	-C≡C-H	2140-2100
+3300-2500	m,br komb.p.	$\nu(\text{OH})^+$ skupina pásů 2500-2700	-COOH, charakteristická skupina pásů 2500-2700	1740-1680
+3300-3130	v	$\nu(\text{OH})$	-C=N-OH	1690-1650
+3220-3180	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$	-CONH <sub>2</sub>	1670-1650
+3210-3160	w-m,sh	$2x\delta(\text{NH}_2)$	-NH <sub>2</sub> , 1.svrchní tón, zesílený Fermiho rezonancí, pozorovatelný u kapalin	1650-1580
3200-2500	v,br	$\nu(\text{OH})$ H-vazba	-OH, intramol. chelatační	1420-1260
+3180-3140	m	$\nu(\text{NH})$	-CO-NH-, cis	okolo 3080
+3100-3070	w amid.p.II	svrchní tón	-CO-NH-, trans	1570-1515
3095-3075	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$	>C=CH <sub>2</sub>	1985-1780
3100-3000	m komb.p.	$\nu(\text{CH})^+$ s růstem substituce jádra, pro Ar-NO <sub>2</sub> deriváty 1. maximum i okolo 3100	Ar, několik pásů, počet klesá	2000-1650
+3080	w	komb.p.?	-CO-NH-, cis	1680-1630
3050-2995	m	$\nu(\text{CH})$	=CH-  1685-1620 konjugované: 1650-1590	izolované:
2995-2940	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)^{(1)}$	-(C)- <u>CH<sub>3</sub></u> -, -(O)- <u>CH<sub>3</sub></u>	2895-2840
2955-2915	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$	-(C)- <u>CH<sub>2</sub></u> -, -(O)- <u>CH<sub>2</sub></u>	2880-2835
2890-2850	w	$\nu(\text{CH})$	C-H, nasyc.	1340
2895-2840	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	-(C)- <u>CH<sub>3</sub></u> -, -(O)- <u>CH<sub>3</sub></u>	1470-1385

Tabulka I pokračování

Vlnočet, $\text{cm}^{-1}$	Intenzita	Přifažení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
+1610-1550	s	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$	-COO <sup>-</sup>	1420-1335
1590-1570	v	$\nu(\text{C}=\text{C})^{(2)}$	Ar, intenzivní pouze při konjugaci, obvykle 1580	1525-1470
1580-1490	w	$\delta(\text{NH})$	-NH-	1190-1170
+1570-1515	s amid.p.II	$\delta(\text{NH})$	-CO-NH-, trans	1305-1200
1570-1485	vs	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$	-NO <sub>2</sub>	1385-1315
1550-1510	s amid.p.II	$\delta(\text{NH})$	-CO-NH-, trans	1350-1200
1525-1470	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle 1490 a silnější než 1600 $\text{cm}^{-1}$	1465-1415
1480-1440	m	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	-(C)- <u>CH<sub>3</sub></u> -, -(O)- <u>CH<sub>3</sub></u> (může se překrývat s pásem Ar)	1395-1345
1470-1440	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(C)- <u>CH<sub>2</sub></u> -, -(O)- <u>CH<sub>2</sub></u> - (může se překrývat s pásem Ar)	785- 720
1475-1315	m	$\delta(\text{OH})$	C=N- <u>OH</u>	960- 930
1465-1415	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar	900- 670
1460-1340	w	$\nu_{\text{s}}(\text{NCO})$	-N=C=O	-
1450-1390	s	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	<u>CH<sub>3</sub></u> -(C=O)-O-, <u>CH<sub>3</sub></u> -N<, <u>CH<sub>3</sub></u> -(C=O)-C-, <u>CH<sub>3</sub></u> -(S=O)-C-	1385-1300
1445-1385	m-s	$\delta(\text{CH}_2)$	- <u>CH<sub>2</sub></u> -(X), X:-(C=O)-, -COOR, -C=C-, -C=C-, Ar, -CN, NO <sub>2</sub> , Cl, Br	785-720
1440-1395	w $\nu(\text{CO})$	$\delta(\text{OH})^+$	- <u>COOH</u> , dimerní forma	1320-1210
1440-1325	m	$\delta(\text{CH})$	-CHO	975-780
1440-1390	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-HC= <u>CH<sub>2</sub></u>	1300-1290



# Tabulky charakteristických vibrací

Tabulka I pokračování

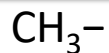
Vlnočet, $\text{cm}^{-1}$	Intenzita	Přifažení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
+1610-1550	s	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$	$-\text{COO}^-$	1420-1335
1590-1570	v	$\nu(\text{C}=\text{C})^{(2)}$	Ar, intenzivní pouze při konjugaci, obvykle 1580	1525-1470
1580-1490	w	$\delta(\text{NH})$	$-\text{NH}-$	1190-1170
+1570-1515	s amid.p.II	$\delta(\text{NH})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$ , trans	1305-1200
1570-1485	vs	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$	$-\text{NO}_2$	1385-1315
1550-1510	s amid.p.II	$\delta(\text{NH})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$ , trans	1350-1200
1525-1470	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle 1490 a silnější než $1600 \text{ cm}^{-1}$	1465-1415
1480-1440	m	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	$-(\text{C})-\underline{\text{CH}_3}$ , $-(\text{O})-\underline{\text{CH}_3}$ (může se překrývat s pásem Ar)	1395-1345
1470-1440	m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-(\text{C})-\underline{\text{CH}_2}$ , $-(\text{O})-\underline{\text{CH}_2}$ - (může se překrývat s pásem Ar)	785- 720
1475-1315	m	$\delta(\text{OH})$	$\text{C}=\text{N}-\underline{\text{OH}}$	960- 930
1465-1415	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar	900- 670
1460-1340	w	$\nu_{\text{s}}(\text{NCO})$	$-\text{N}=\text{C}=\text{O}$	-
1450-1390	s	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	$\underline{\text{CH}_3}-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-$ , $\underline{\text{CH}_3}-\text{N}<$ , $\underline{\text{CH}_3}-(\text{C}=\text{O})-\text{C}-$ , $\underline{\text{CH}_3}-(\text{S}=\text{O})-\text{C}-$	1385-1300
1445-1385	m-s	$\delta(\text{CH}_2)$	$-\underline{\text{CH}_2}(\text{X})$ , $\text{X}:-(\text{C}=\text{O})-$ , $-\text{COOR}$ , $-\text{C}=\text{C}-$ , $-\text{C}=\text{C}-$ , Ar, $-\text{CN}$ , $\text{NO}_2$ , Cl, Br	785-720
1440-1395	w $\nu(\text{CO})$	$\delta(\text{OH})+$	$-\underline{\text{COOH}}$ , dimerní forma	1320-1210
1440-1325	m	$\delta(\text{CH})$	$-\text{CHO}$	975-780
1440-1390	m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-\text{HC}=\underline{\text{CH}_2}$	1300-1290

Tabulka I – pokračování

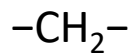
Vlnočet, $\text{cm}^{-1}$	Intenzita	Přifažení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
1440-1310	m-s	$\delta(\text{COH})$	terc.-OH, Ar-OH (pozor na překryv pásů)	1260-1100
1420-1400	m amid.p.III	$\nu(\text{CN})$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$	1150
+1420-1335	m	$\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$	$-\text{COO}^-$	-
1415-1350	w	$\delta(\text{CH})$	$-\text{CH}=\text{CH}-$ , cis	1000- 665
1395-1345	m-s	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	$\underline{\text{CH}_3}-(\text{C})-\underline{\text{CH}_3}(\text{O})-$ , (odkaz platí pouze pro dublet) v případě výskytu dubletu, jehož obě složky jsou zhruba stejně intenzivní, je ve struktuře látky přítomno rozvětvení $>\text{C}(\text{CH}_3)_2$ ; v případě dubletu, jehož složka o nižším vlnočtu je zhruba 2x intenzivnější, je ve struktuře látky přítomna skupina $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ . Pokud ve spektru studované látky není přítomen dublet, ale pouze singlet, je tím potvrzena přítomnost skupiny $\underline{\text{CH}_2}-(\text{C})-$ či $\underline{\text{CH}_3}-(\text{O})-$ a zároveň vyloučeno možné výše uvedené rozvětvení.	1255-1125

-

# Alkany



Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
2995–2950	m–s	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$
2895–2840	m–s	$\nu_s(\text{CH}_3)$
1475–1435	m	$\delta_{as}(\text{CH}_3)$
1390–1335	m–s	$\delta_a(\text{CH}_3)$



Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
2940–2915	m	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$
2870–2840	m–s	$\nu_s(\text{CH}_2)$
1480–1440	m	$\delta(\text{CH}_2)$
785–720	w–m	$\rho(\text{CH}_2)$

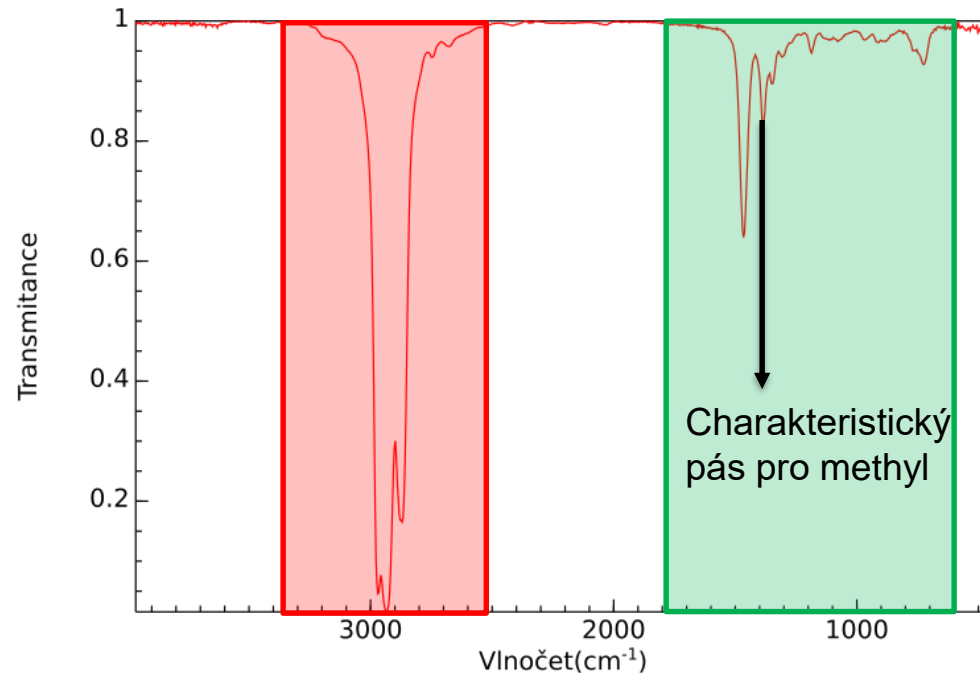


Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
2890–2880	w	$\nu(\text{CH})$
1360–1320	w	$\delta(\text{CH}_2)$

Intenzita:

s	silná	(strong)
m	střední	(medium)
w	slabá	(weak)

OKTAN



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

2995–2840 cm<sup>-1</sup>: obvykle 2 nebo 4 pásy, často překrývající se pásy

1480 – 1440 cm<sup>-1</sup>: 2 pásy, časté překryvy

1395 – 1365 cm<sup>-1</sup>: deštníková vibrace -CH<sub>3</sub> (typická pro methyl), pokud je zde dublet, dochází k větvení (isopropyl – stejné intenzity, tercbutyl – dvojnásobná intenzita u nižšího vlnočtu)

785 – 720 cm<sup>-1</sup>: kolébatá vibrace -CH<sub>2</sub>- (intenzivnější s delším řetězcem)

# Alkeny

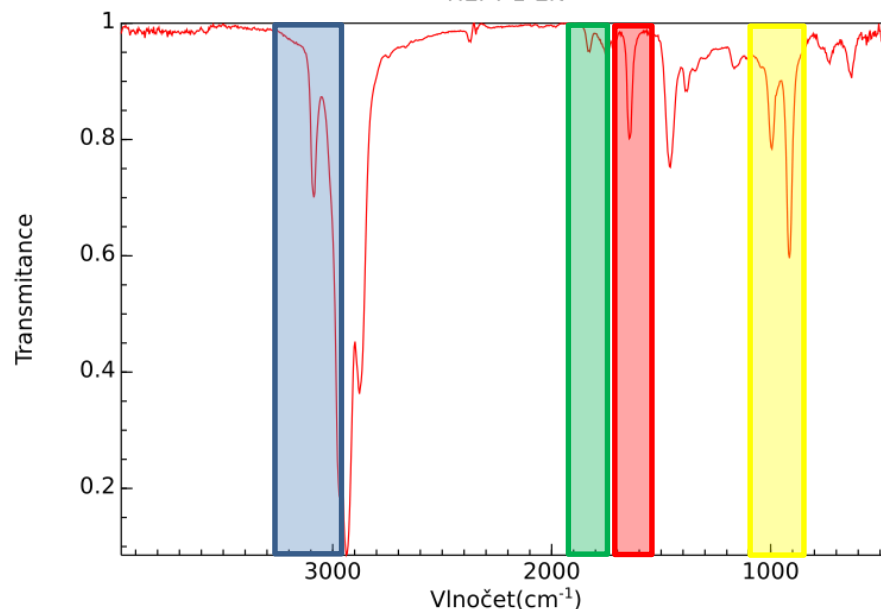
## terminální alkeny

Vlnčet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3100–3050	w–m	$\nu_{as} (=CH_2)$
3020–2960	w–m	$\nu_s (=CH_2)$
1985–1800	w	$2x\delta(CH), 2x\delta(CH_2)$
1675–1625	w–m	$\nu(C=C)$
1425–1405	w–m	$\delta(CH_2)$
1010–940	s	$\delta(CH)$
980–885	s	$\delta(CH_2)$

## cis/trans alkeny

Vlnčet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3065–3010	m	$\nu(C-H)$
1680–1620	w–m	$\nu(C=H)$
1425–1355	w	$\delta(C-H), cis$
1340–1260	v	$\delta(C-H), trans$
1295–1200	w	$\rho(C-H), cis$
980–955	s	$\gamma(C-H), trans$
980–880	w–m	$\gamma(C-H), cis$
730–650	s	$\gamma(C-H), cis$

HEPT-1-EN



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

3100–2960 cm<sup>-1</sup>: oblast valenční vibrace  $>C=CH_2$  (symetrická vibrace kolem 3000 cm<sup>-1</sup>, často se překrývá s  $-CH_3/-CH_2-$ )

1985–1800 cm<sup>-1</sup>: overton mimorovinné vibrace, málo intenzivní

1675–1625 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace dvojně vazby

1010–940 cm<sup>-1</sup>: mimorovinné vibrace

neoznačené pásy patří vibracím methyly a methyleny (předchozí snímek)

# Alkyny

CH $\equiv$ C –

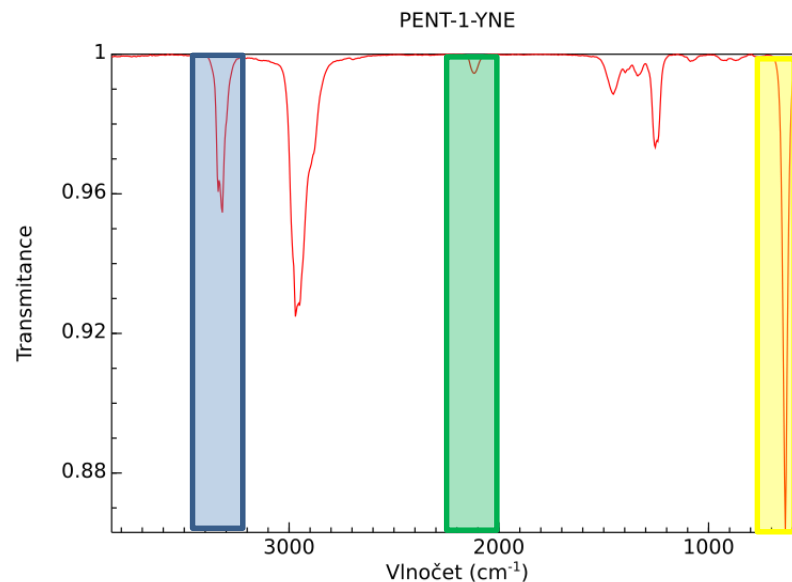
Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3340–3280	m–s	$\nu(\text{C–H})$
2260–2190	v	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$ R <sub>1</sub> –C $\equiv$ C–R <sub>2</sub> (disub.)
2150–2100	w–m	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$ –C $\equiv$ C–H
1375–1225	w–m	2x $\omega(\text{C–H})$
1020–905	w–m	$\nu(\text{C–C}\equiv\text{C})$
730–575	m–s	$\delta(\text{C–H})$

3340–3280 cm<sup>-1</sup>: oblast valenční vibrace  $\equiv\text{C–H}$   
(terminální alkyn)

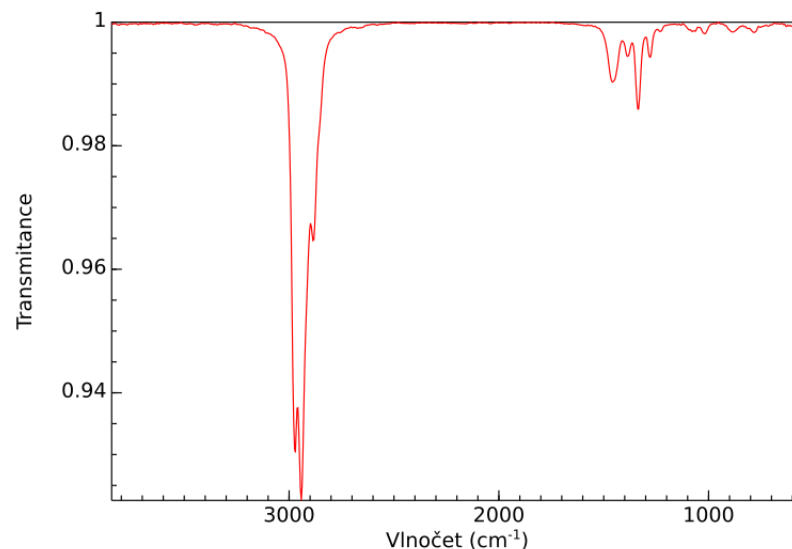
2260 – 2100 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace trojné vazby –C $\equiv$ C–  
(terminální alkyny u nižších vlnočtů, disubstituované u  
vyšších, symetrické vůbec)

695 – 575 cm<sup>-1</sup>: deformační vibrace CH, typická hodnota  
630 cm<sup>-1</sup>

neoznačené pásy patří vibracím methyly a  
methyleny



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)  
OKT-4-YN



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Areny

Vlnčet ( $\text{cm}^{-1}$ )	Intenzita	Vibrace
3105–3000 skupina pásů	m	$\nu(\text{C-H})$
2000–1650 několik pásů	w	overtony + kombinační přechody
1625–1590	v	$\nu(\text{C=C})$
1590–1575	v	$\nu(\text{C=C})$
1525–1470	v	$\nu(\text{C=C})$
1470–1430	v	$\nu(\text{C=C})$
900 – 670	m–s	$\gamma(\text{CH})$ charakterizuje substituci

3100–3000  $\text{cm}^{-1}$ : skupina pásů (alkeny pouze jeden pás), valenční vibrace CH

2000–1650  $\text{cm}^{-1}$ : skupina overtonů (charakterizuje substituci)

1625–1430  $\text{cm}^{-1}$ : valenční vibrace ar. kruhu

900–670  $\text{cm}^{-1}$ : mimorovinnné vibrace CH

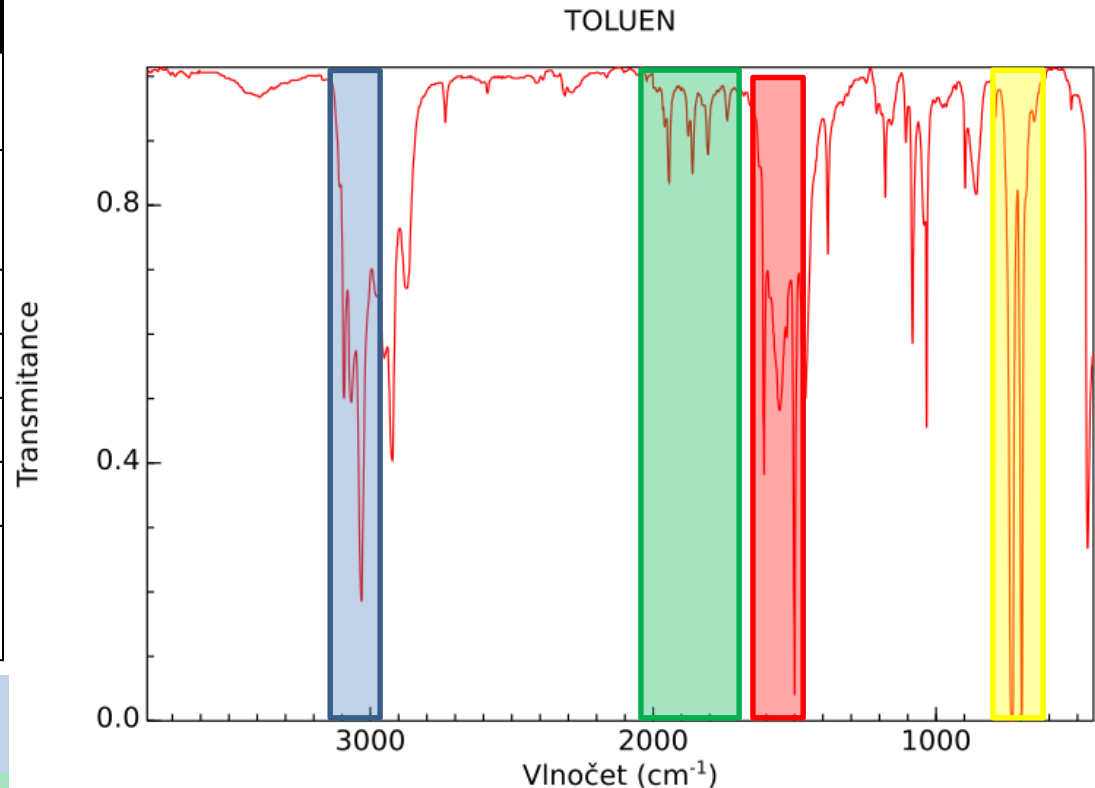
mono: 820–720  $\text{cm}^{-1}$  (s) a 710–670  $\text{cm}^{-1}$  (s)

ortho: 790–720  $\text{cm}^{-1}$  (s)

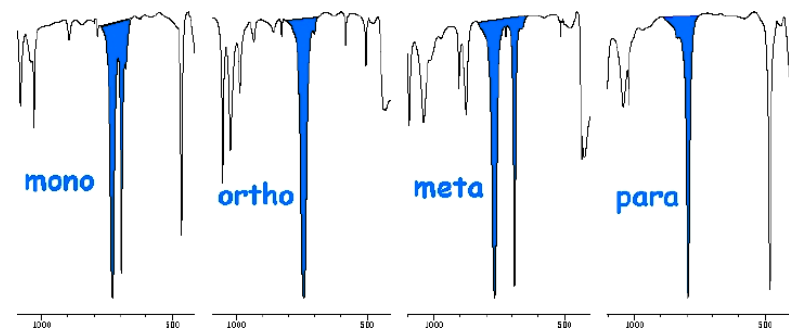
meta: 960–900  $\text{cm}^{-1}$  (m) a 880–830  $\text{cm}^{-1}$  (m)

820–765  $\text{cm}^{-1}$  (m–s) a 710–680  $\text{cm}^{-1}$  (s)

para: 860–780  $\text{cm}^{-1}$  (s)

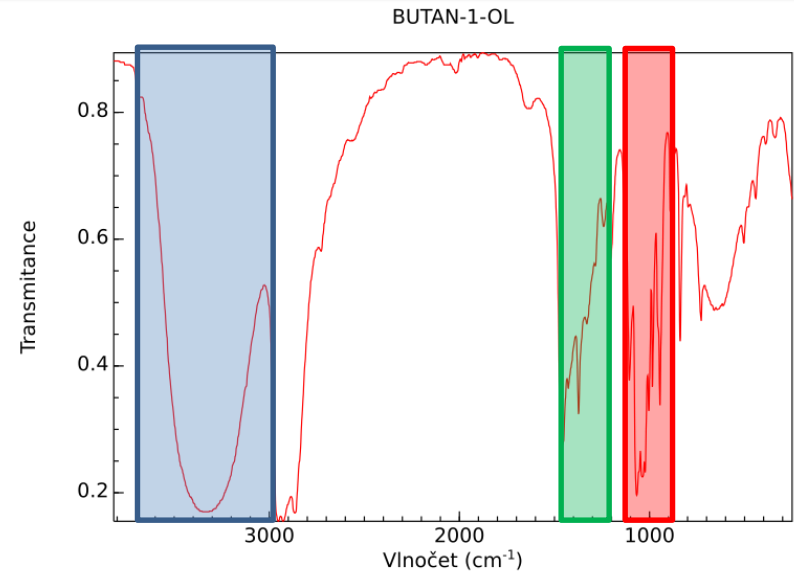


upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)



# Alkoholy

Vlnčet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3550–3230	m–s, br	$\nu$ (OH)
1440–1260	w	$\delta$ (COH) obvykle překrytý jinými pásy
1260 - 1020	s	$\nu$ (CO) charakterizuje typ alkoholu



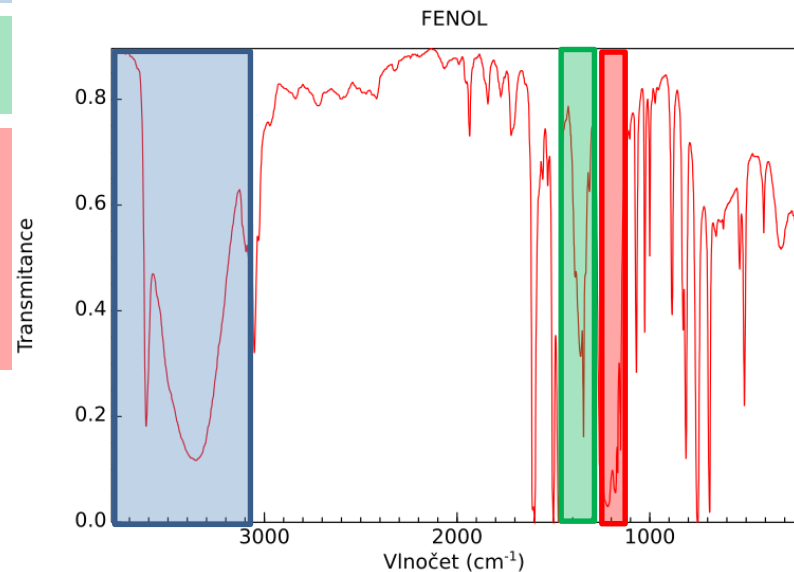
upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

3550–3230 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace OH, **široký pás**

1410–1260 cm<sup>-1</sup>: deformační vibrace COH, často skrytý pod dalšími vibracemi (podložení dalších vibrací)

1260–1020 cm<sup>-1</sup>:

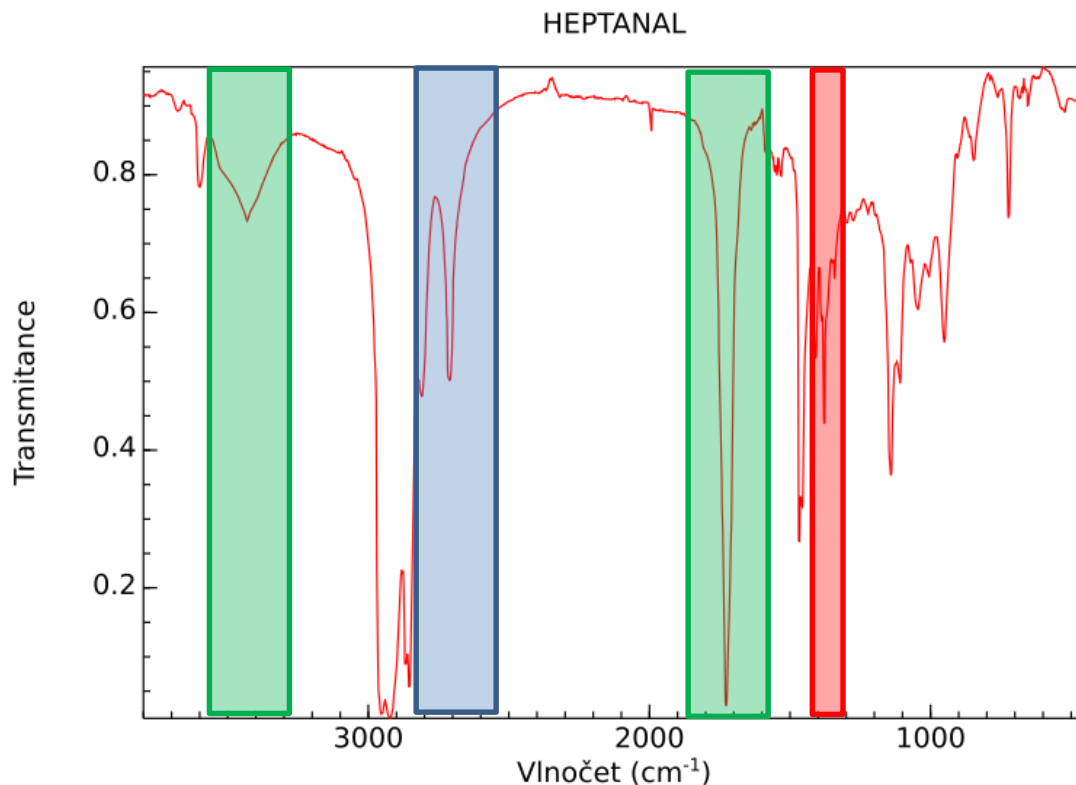
Ar-OH	1260–1180 cm <sup>-1</sup>
3° OH	1205–1125 cm <sup>-1</sup>
2° OH	1125–1085 cm <sup>-1</sup>
1° OH	1085–1030 cm <sup>-1</sup>



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Aldehydy

Vlnčet ( $\text{cm}^{-1}$ )	Intenzita	Vibrace
3470–3320	w	2x $\nu(\text{C}=\text{O})$
2830–2810	w–m	$\nu(\text{C}-\text{H})$
2745–2650	w–m	$\nu(\text{C}-\text{H})$
1740–1685	s	$\nu(\text{C}=\text{O})$
1450–1325	m–s	$\rho(\text{C}-\text{H})$
975–780	w–m	$\delta(\text{C}-\text{H})$



dostupné z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

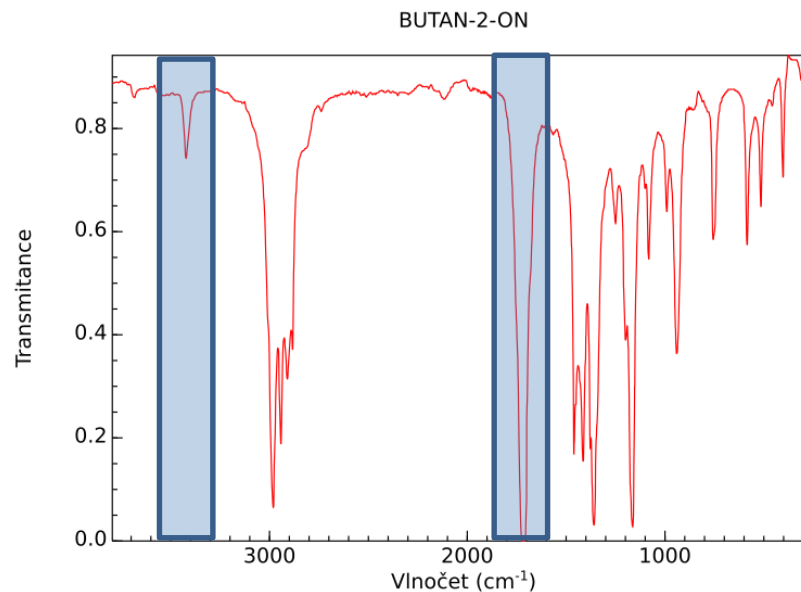
2830 – 2650  $\text{cm}^{-1}$ : valenční vibrace CH, tzv. Fermiho rezonance, dva pásy vzdálené přibližně 100  $\text{cm}^{-1}$

1740 – 1685  $\text{cm}^{-1}$ : valenční vibrace karbonylu;  
aromatické a nenasycené spíše u nižších vlnčetů;  
na dvojnásobku vlnčetu je patrný slabý overton

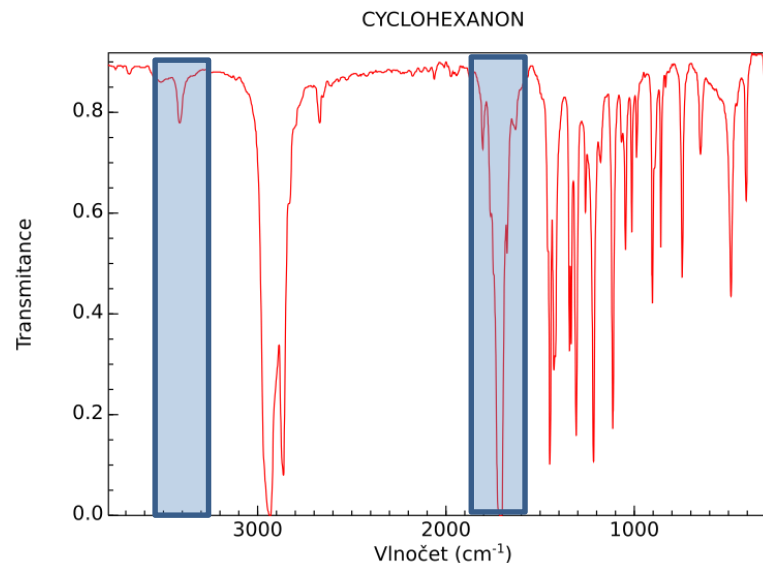
1450 – 1325  $\text{cm}^{-1}$ : deformační vibrace CHO

# Ketony

Vlnočť (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3500–3260	w	2x v(C=O)
1745–1660	s	v(C=O)
1325–1175	m–s	v(CC)
~1100	w–m	v <sub>as</sub> (CCC)
~1300	m	v(CCC)
1225–1075	s	v(C <sub>Ar</sub> C)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

1740 – 1685 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace karbonylu;  
aromatické a nenasycené spíše u nižších vlnočtů;  
na dvojnásobku vlnočtu je patrný slabý overton

**!Ketony se určí tak, že se vyloučí ostatní  
karbonylové sloučeniny!**



# Estery

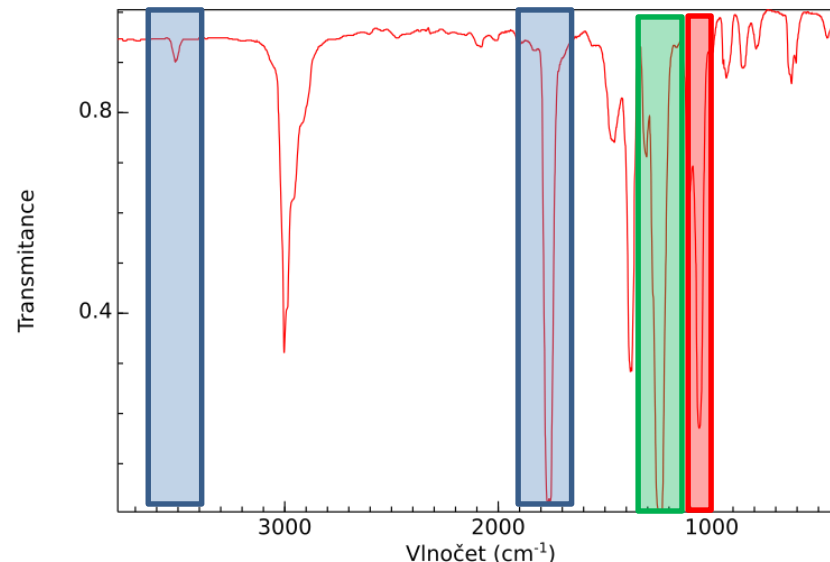
Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
~3450	w	2x v(C=O)
1800–1715	s	v(C=O)
1310–1250	s	v <sub>as</sub> (C–O–C), Ar–CO–O–R
1150–1100	s	v <sub>s</sub> (C–O–C), Ar–CO–O–R
1275–1185	s	v <sub>as</sub> (C–O–C), R–CO–O–R'
1160–1050	s	v <sub>s</sub> (C–O–C), R–CO–O–R'

1800 – 1715 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace karbonylu  
aromatické a nenasycené spíše u nižších vlnočtů;  
na dvojnásobku vlnočtu je patrný slabý overtón

1310 – 1185 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace C-O-C, velmi silný pás,  
obvykle intenzivnější než v(C=O)

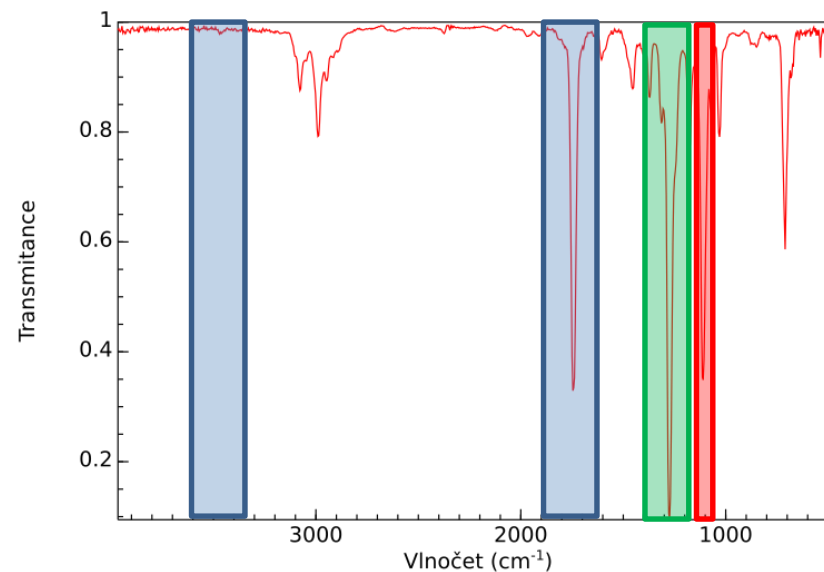
1160 – 1050 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace C-O-C

ETHYLACETÁT



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

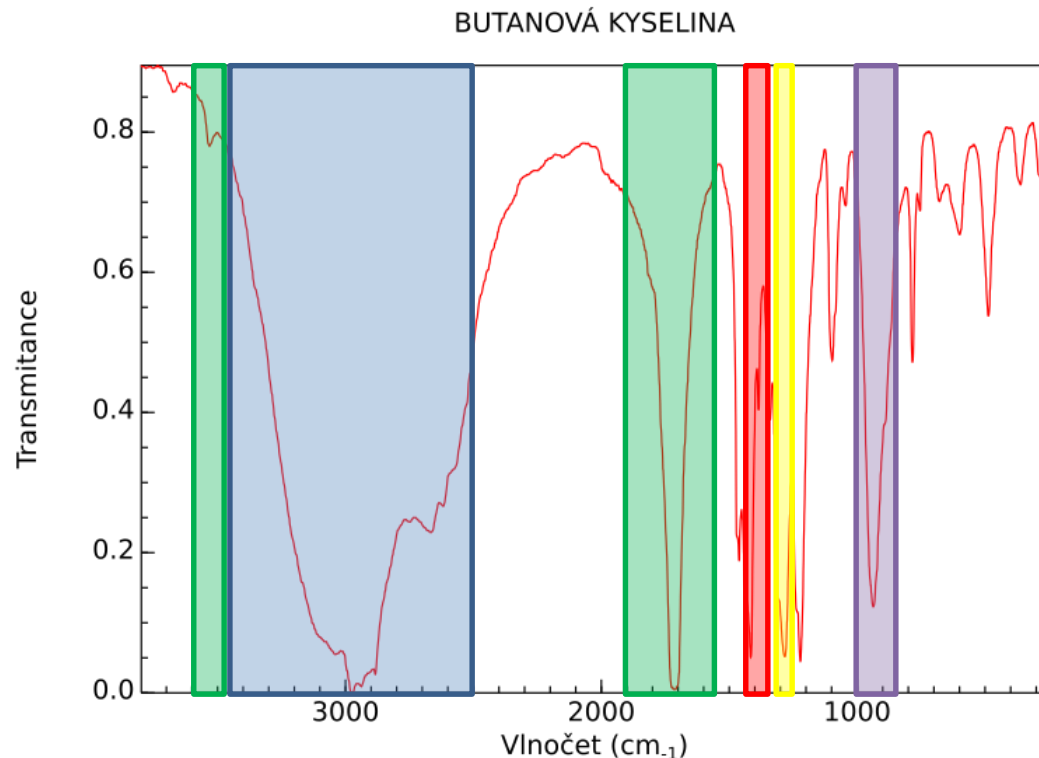
ETHYLBENZOÁT



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Karboxylové kyseliny

Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3500–3200	w	2x v(C=O)
3300–2500	m, br	v(OH)
2700–2500	m	kombinační přechody
1740–1660	s	v(C=O)
1440–1395	w	v(C–O) + δ(O–H)
1320–1210	s	v(C–O)
970–875	s	γ(O–H)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

3300–2500 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace OH, **široký pás**, na rozdíl od alkoholů, zasahuje pás pod 3000 cm<sup>-1</sup>

1740–1680 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace karbonylu;

aromatické posun k nižším vlnočtům);

na dvojnásobku vlnočtu je patrný slabý overton

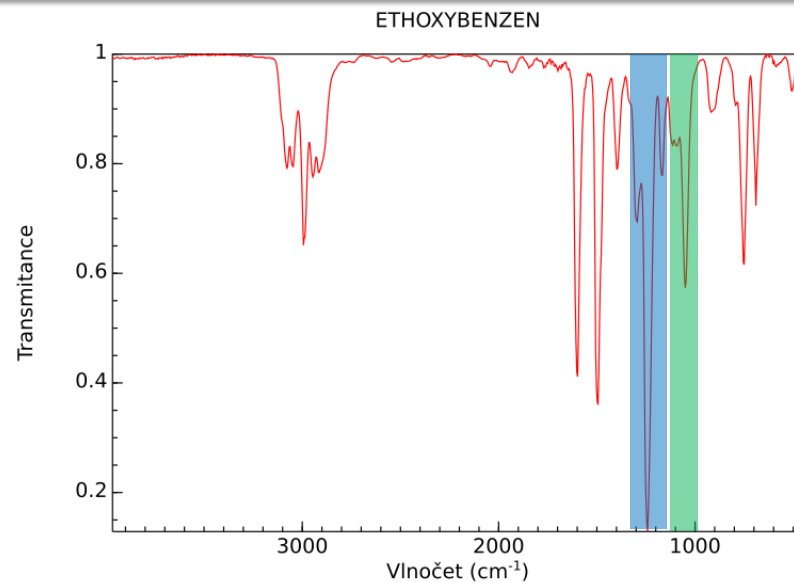
1440–1395 cm<sup>-1</sup>: kombinace deformační OH a valenční CO vibrace

1320–1210 cm<sup>-1</sup>: valenční CO vibrace

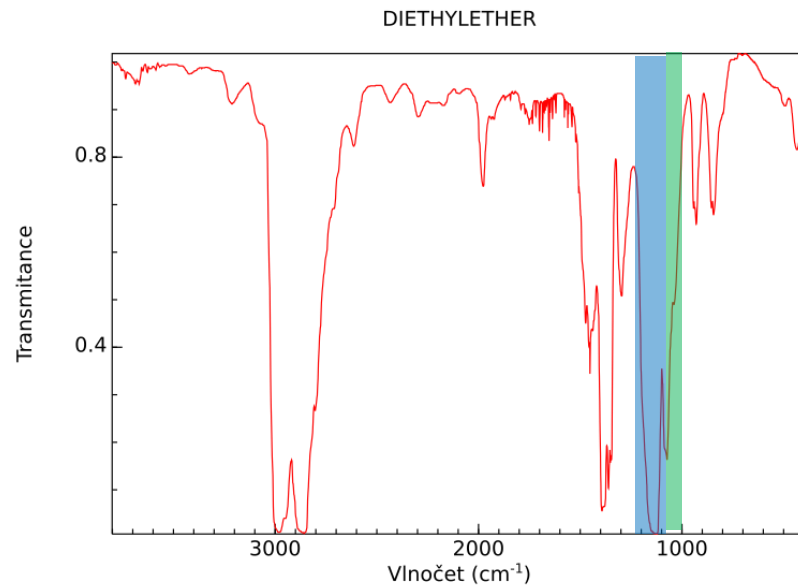
970–875 cm<sup>-1</sup>: mimorovinná OH vibrace

# Ethery

Vlničet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
1310–1210	s	$\nu_{as}(\text{C-O-C})$ Ar-O-R'
1120–1020	s	$\nu_s(\text{C-O-C})$ Ar-O-R'
1155–1060	s	$\nu_{as}(\text{C-O-C})$ R-O-R'
1140–900	s	$\nu_s(\text{C-O-C})$ R-O-R'



dostupné z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)



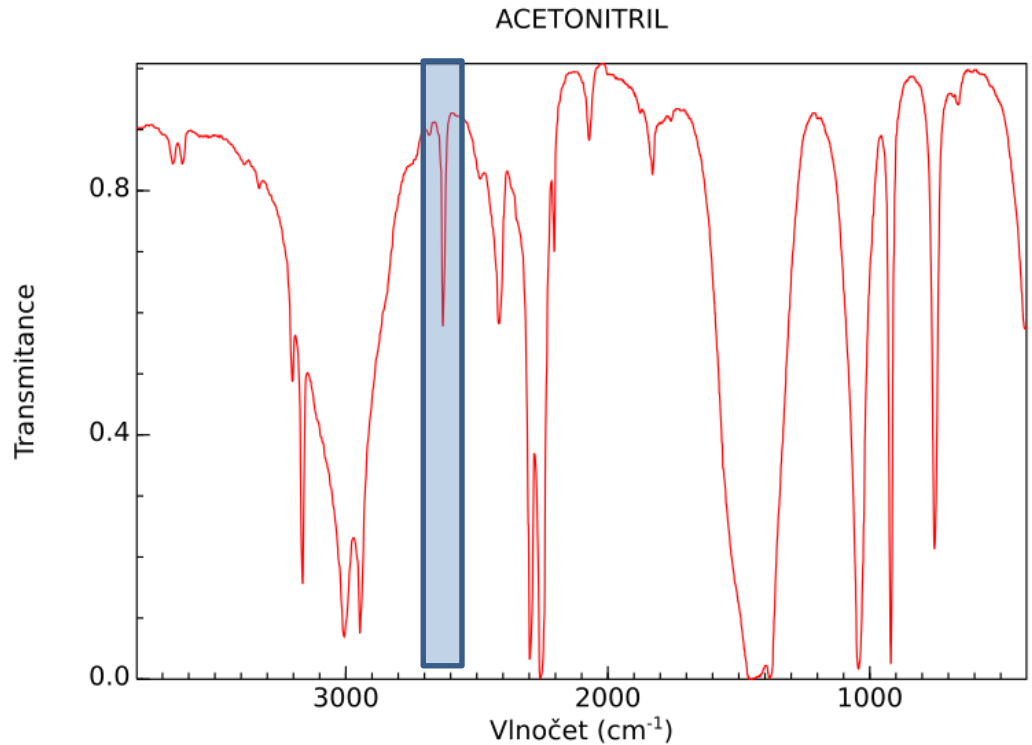
upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Nitrily

## nitrily

Vlnčet ( $\text{cm}^{-1}$ )	Intenzita	Vibrace
2270–2200	v	$\nu(\text{C}\equiv\text{N})$

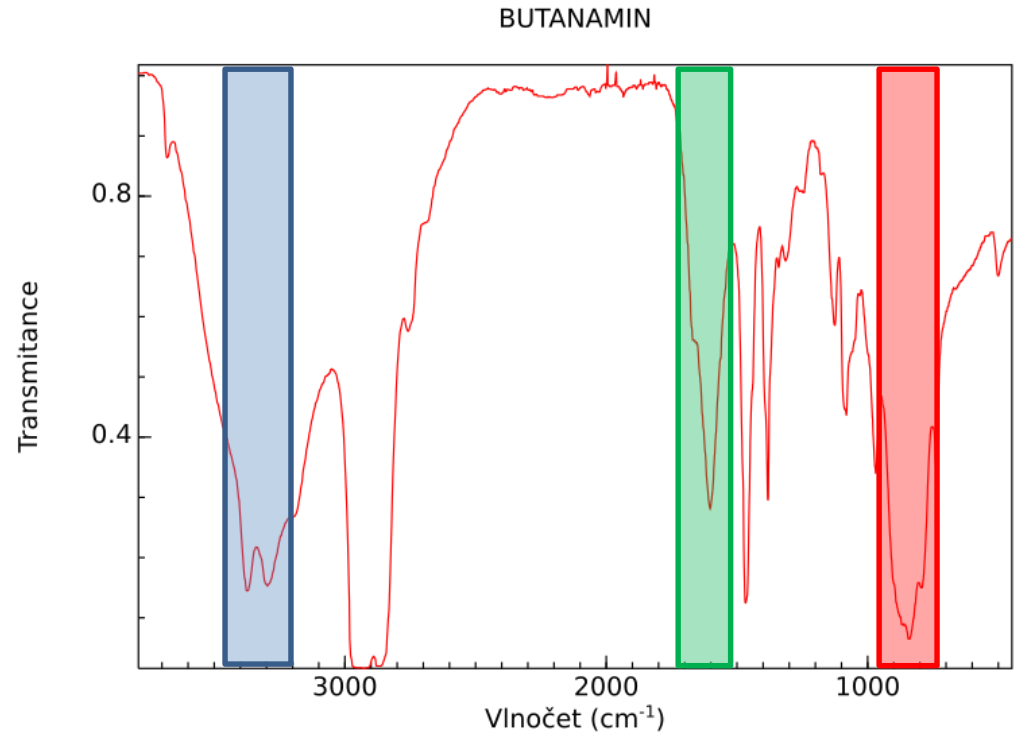
2270 – 2200  $\text{cm}^{-1}$ : valenční vibrace nitrilu  
kvanidová jehla



dostupné z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Aminy

Vlnočet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
3550–3330	w–m	$\nu_{as}(\text{NH}_2)$
3450 – 3250	w–m	$\nu_s(\text{NH}_2)$
1650–1580	m–s	$\delta(\text{NH}_2)$
Ar: 1360–1250	m	$\nu(\text{C-N})$
R: 1240–1020	w–m	$\nu(\text{C-N})$
R: 895–650	m–s, br	$\omega(\text{NH}_2)$



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

3550 – 3250 cm<sup>-1</sup>: valenční vibrace NH<sub>2</sub>,

- primární aminy vykazují 2 pásy vzdálené cca 100 cm<sup>-1</sup>,
- sekundární jeden pás,
- terciární žádný

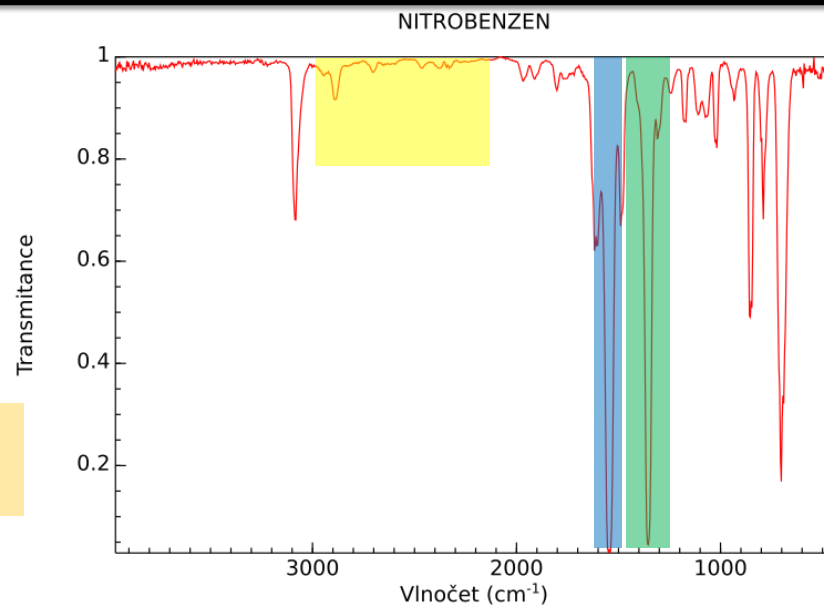
1650 – 1580 cm<sup>-1</sup>: nůžková vibrace NH<sub>2</sub>, pouze primární aminy

900 – 650 cm<sup>-1</sup>: vějířová vibrace NH<sub>2</sub>

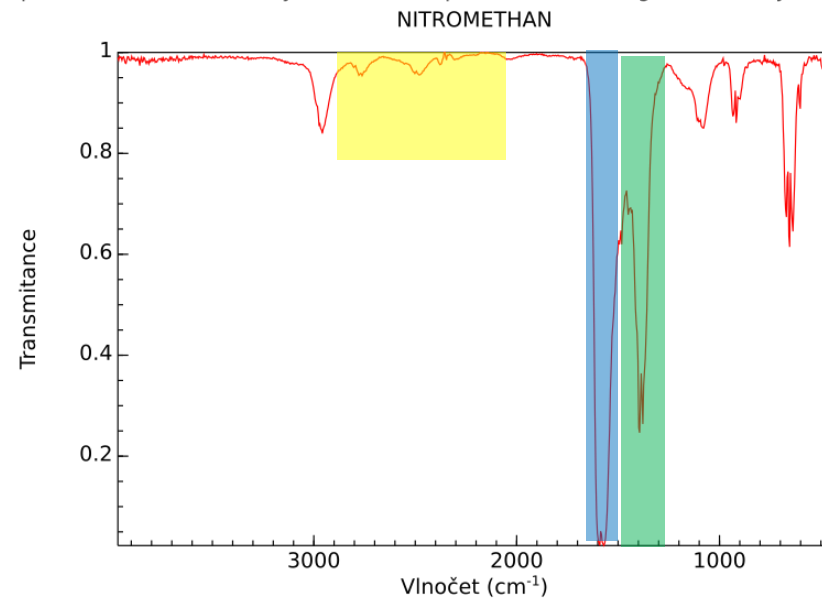
# Nitrosloučeniny

Vlnčet (cm <sup>-1</sup> )	Intenzita	Vibrace
1570 – 1485	vs	$\nu_{as}(\text{NO}_2)$
1385 - 1320	s	$\nu_s(\text{NO}_2)$

kombinační přechody (k prokázání nitroskupiny stačí dva výše zmíněné pásy)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)



upraveno z NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

# Interpretace – „rychloukuchařka“

První nástřel:

Je dobré znát kostru molekuly, pak přidávat substituenty:

pásky v oblasti  $3100\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$  : areny, alkeny

pásky v oblasti  $3000\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$ : alkany

Substituenty:

široký pás, intenzivní pás  $3500\text{--}3000\text{ cm}^{-1}$  : OH skupina

pásky v oblasti  $3550\text{--}3250\text{ cm}^{-1}$ : primární amin (2 pásky), sekundární (1 pás)

velmi intenzivní pás  $1800\text{--}1650\text{ cm}^{-1}$  : karbonyl

- je ve spektru pás OH? → karboxylová kyselina
- jsou ve spektru další dva intenzivní pásky (vibrace CO)? → ester
- jsou ve spektru pásky Fermiho rezonance ( $2830\text{--}2650\text{ cm}^{-1}$ ) → aldehyd
- žádná z právě uvedených tří možností? → keton

dva silné pásky v oblasti  $1570\text{--}1320\text{ cm}^{-1}$  : nitroskupina

Není nutné přiřazovat naprosto všechny pásky ve spektrech. Po prvním nástřelu je ale vhodné dohledat všechny pásky pro dané funkční skupiny. Pokud tyto pásky nejsou ve spektru, pak tam nebude ta právě zjišťovaná funkční skupina. Pokud po přiřazení pásů „nastřelených“ funkčních skupin už nejsou ve spektru další „významné“ pásky, je interpretace skončena.

# Spektra k procvičování

<http://old.vscht.cz/anl/cach2/IC/spektroskopieIR.html>

<http://webspectra.chem.ucla.edu//>

Není-li uvedeno jinak, pochází spektra ze zdroje:

P.J. Linstrom and W.G. Mallard, Eds., **NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69**, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899, <https://doi.org/10.18434/T4D303>, (citováno 13 září 2022).