

Tabulka I Vlnočty charakteristických vibrací některých vazeb a skupin				
Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
3760-3580	w-m	v _{as} (H ₂ O)	H ₂ O v rozpouštědle	3620-3500
3670-3580	v	v(OH) neinteragující)	-OH (izolované,	1420-1260
3650-3500	v	v(OH)	C=N-OH 1690-1650	
+3640-3150	m-s,br	v(OH)	-OH (pevné či kapal. látky)	1440-1290
3620-3500	s, br	v _{as} (H ₂ O)	H ₂ O v rozpouštědle	1645-1615
+3600-3100	s,br	v(OH)	H ₂ O, krystalová voda	1645-1615
3590-3400	v,br	v(OH)	-OH, intramol. H-vazba vlnočet koncentračně nezávislý	1440-1300
3550-3500	w-m	v(OH)	-COOH, monomer, neasociované molekuly	1800-1740
3550-3330	m-w	v _{as} (NH ₂)	-NH ₂ , vliv asociace menší než u -OH	3450-3250
3550-3230	m-s, br	v(OH)	-OH, dimerní a polymerní intermol. H-vazba, konc.závislé	1440-1290
3550-3200	w-m	2x v(C=O)	>C=O, 1.svrchní tón, obvykle úzký pás	1720±60
3540-3480	m-s	v _{as} (NH ₂)	-CO-NH ₂	3420-3380
3500-3300	w	v(NH)	-NH-	1580-1490
3460-3420	m-s	v(NH)	-CO-NH-, trans	1700-1665
3450-3250	w-m	v _s (NH ₂)	-NH ₂	1650-1580
+3450-3300	w-m,br	v _{as} (NH ₂)	-NH ₂	3400-3250
3440-3300	m	v(NH)	-CO-NH, cis	1700-1665
3420-3380	m-s	v _s (NH ₂)	-CO-NH ₂	1690-1670
+3400-3250	w-m,br	v _s (NH ₂)	-NH ₂	3210-3160
+3370-3270	m	v(NH)	-CO-NH-, trans	3100-3070

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
+3360-3320	m-s	$\nu_{as}(\text{NH}_2)$	-CONH ₂	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	1740-1680
+3300-3130	v	$\nu(\text{OH})$	-C=N-OH	1690-1650
+3220-3180	m-s	$\nu_s(\text{NH}_2)$	-CONH ₂	1670-1650
+3210-3160	w-m,sh	$2x\delta(\text{NH}_2)$ Fermiho rezonancí, pozorovatelný u kapalin	-NH ₂ , 1.svrchní tón, zesílený	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	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	>C=CH ₂	1985-1780
3100-3000	m komb.p.	$\nu(\text{CH})+$ s růstem substituce jádra, pro Ar-NO ₂ 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	$\nu_{as}(\text{CH}_3)^{(1)}$	-(C)- <u>CH</u> ₃ , -(O)- <u>CH</u> ₃	2895-2840
2955-2915	m	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	-(C)- <u>CH</u> ₂ -, -(O)- <u>CH</u> ₂	2880-2835
2890-2880	w	$\nu(\text{CH})$	C-H, nasyc.	1340
2895-2840	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	-(C)- <u>CH</u> ₃ , -(O)- <u>CH</u> ₃	1470-1385

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
2880-2830	m	v _s (CH ₂)	-(C)- <u>CH</u> ₂ -, -(O)- <u>CH</u> ₂	1480-1385
2830-2810	w-m	v(CH)	-CHO	} 1740-1685
2745-2650	w svrchní tón	v(CH)+	-CHO, obvykle okolo 2720	
~2350	s	v(CO ₂)	oxid uhličitý, obvykle ruší ve spektru dublet 2360, 2335	670
2285-2250	vs	v _{as} (N=C=O)	-N=C=O, isokyanát	1460-1340
2270-2200	v	v(C≡N)	-C≡N	-
2260-2190	w	v(C≡C)	-C≡C-, u sym. molekuly chybí	-
2140-2100	w-m	v(C≡C)	-C≡C-H	1375-1225
2000-1650	w a komb.p.	svrchní tón	Ar, skupina 2-6 pásů charakt. pro typ substiuce	1625-1585
1985-1775	w	2xγ(CH)	R- <u>CH=CH</u> ₂ , RR'- <u>C=CH</u> ₂	1690-1620
1870-1780	vs	v _{as} (C=O)	-CO-O-CO-	1800-1710
1840-1770	s	v(C=O)	β,γ- laktony	1370-1160
1800-1710	s	v _s (C=O)	-CO-O-CO-, separace obou (C=O) pásů obvykle 60 cm ⁻¹	-
1800-1750	vs	v(C=O)	vinyl a fenylestery	1310-1250
1800-1740	s	v(C=O)	-COOH, monomerní	1380-1280
1750-1720	s	v(C=O)	-CO-O-, nasycené estery	1300-1150
1745-1705	s	v(C=O)	R- <u>CO</u> -R', nasycené ketony + cyklické ketony	1325-1175
1745-1650	vs	v(C=O)	-CHO, POZOR ! předchozí char. pásy 2830-2650	1440-1325
1740-1705	s	v(C=O)	-CO-O-, α,β-nenas. estery	1345-1250
1730-1705	s	v(C=O)	Ar- <u>CO</u> -O-R, estery aromátů	1330-1250

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
1725-1720	vs	v(C=O)	H- <u>CO-O</u> -R	1195-1180
1725-1700	vs	v(C=O)	-COOH, dimerní forma	1440-1395
1715-1680	vs	v(C=O)	Ar- <u>COOH</u> , dimerní forma	1440-1395
1705-1650	vs	v(C=O)	Ar <u>CO</u> -, α,β -nenas. ketony	okolo 1300
1700-1665	s amid.p.I	v(C=O)	-CO-NH-	1550-1510
1690-1670	s	v(C=O)	-CO-NH ₂	1620-1590
1690-1650	w	v(C=N)	C=N-OH	1475-1315
1685-1620	w-m	v(C=C) >C=CH ₂	>C=C<, 1000-650	1440-1290 a/nebo
+1680-1630	s amid.p.I	v(C=O)	-CO-NH-	1570-1515
+1670-1650	s amid.p.I	v(C=O)	-CO-NH ₂	1650-1620
+1670-1630	s	v(C=O)	-CO-N<, stejný vlnočet i v roztocích	-
+1650-1620	w-m amid.p.II	δ (NH ₂)	-CO-NH ₂	1420-1400
1650-1580	s-m	δ (NH ₂)	-NH ₂ R :1100-1000	Ar:1360-1200
1650-1590	m	v(C=C)	-C=C-C=C-, často dva pásy: slabší u cca 1650, silnější 1605	-
1640-1580	vs	v(C=O)	enol forma β -diketonů	-
+1645-1615	v	δ (H ₂ O)	H ₂ O, krystalová v., v. v rozpouštědle	-
1625-1585	v	v(C=C)	Ar, obvykle 1600	1590-1570
1620-1590	w-m	δ (NH ₂)	-CO-NH ₂	1420-1400

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
+1610-1550	s	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$	-COO ⁻	1420-1335
1590-1570	v	$\nu(\text{C}=\text{C})^{(2)}$	Ar, intenzivní pouze při konjugaci, obvykle 1580	1525-1470
1580-1490	w	$\delta(\text{NH})$	-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 ₂	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 cm ⁻¹	1465-1415
1480-1440	m	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	-(C)- <u>CH</u> ₃ , -(O)- <u>CH</u> ₃ (může se překrývat s pásem Ar)	1395-1345
1470-1440	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(C)- <u>CH</u> ₂ , -(O)- <u>CH</u> ₂ - (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</u> ₃ -(C=O)-O-, <u>CH</u> ₃ -N<, <u>CH</u> ₃ -(C=O)-C-, <u>CH</u> ₃ -(S=O)-C-	1385-1300
1445-1385	m-s	$\delta(\text{CH}_2)$	- <u>CH</u> ₂ -(X), X:-(C=O)-, -COOR, -C=C-, -C≡C-, Ar, -CN, NO ₂ , 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</u> ₂	1300-1290

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
1440-1310	m-s	$\delta(\text{COH})$ (pozor na překryv pásů)	terc.-OH, Ar- <u>OH</u>	1260-1100
1420-1400	m amid.p.III	$\nu(\text{CN})$	-CO-NH ₂	1150
+1420-1335	m	$\nu_s(\text{COO}^-)$	-COO ⁻	-
1415-1350	w	$\delta(\text{CH})$	-CH=CH-, cis	1000- 665
1395-1345	m-s	$\delta_s(\text{CH}_3)$	<u>CH₃</u> -(C)-, <u>CH₃</u> -(O)-, (odkaz platí pouze pro dublet)	1255-1125
v případě výskytu dubletu, jehož obě složky jsou zhruba stejně intenzivní, je ve struktuře látky přítomno rozvětvení >C(CH ₃) ₂ ; v případě dubletu, jehož složka o nižším vlnočtu je zhruba 2x intenzivnější, je ve struktuře látky přítomna skupina -C(CH ₃) ₃ . Pokud ve spektru studované látky není přítomen dublet, ale pouze singlet, je tím potvrzena přítomnost skupiny <u>CH₃</u> -(C)- či <u>CH₃</u> -(O)- a zároveň vyloučeno možné výše uvedené rozvětvení.				
1385-1330	m-s	$\delta_s(\text{CH}_3)$	<u>CH₃</u> -(C=O)-, <u>CH₃</u> -(C=O)-O-	-
1385-1315	vs	$\nu_s(\text{NO}_2)$	-NO ₂	-
1380-1280	m-s	$\delta(\text{OH})$	-COOH, monomerní forma	1190-1075
1375-1225	w-m	$\delta(\text{CH})$	-C≡C-H	695-575
1370-1310	m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	<u>CH₃</u> -(N<)	-
1370-1160	s	$\nu(\text{CO})$	β,γ -laktony	-
1360-1250	s	$\nu(\text{CN})$	Ar ₂ <u>NH</u> , Ar- <u>NH</u> -R	1280-1180
1360-1200	s	$\nu(\text{CN})$	Ar <u>NH</u> ₂	-
1350-1340	m	$\delta(\text{CH})$	>C=CH-	850-790
1350-1300	m	$\delta(\text{CH})$	-HC=CH-, trans	980-955
1350-1300	w-m amid.p.III	$\nu(\text{CN})$	-NH-CO-	800
1350-1260	s	$\delta(\text{COH})$	<u>ROH</u> , R ₂ <u>OH</u> , (prim. a sekund.)	1130-1020
1345-1250	s $\nu(\text{C-C})$	$\nu(\text{C-O}) +$ pás širší než u ketonů	-CO-O-, α,β -nenas. estery,	1200-1150

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
cca 1340	w	δ(CH)	-C-H, nasyc.	-
1340-1300	m-s	δ _s (CH ₃)	<u>CH</u> ₃ -(S=O)-C-	-
1330-1250	vs	v _{as} (COC)	Ar- <u>CO-O</u> -R, širší než u ketonů	1150-1080
1325-1290	w	v(CH)	-CH=	1000- 665
1325-1175	m-s	v(CC) (často obtížně rozpoznatelný)	R-CO-R'	1100
1320-1310	m-s	v(CO)	-COOH, dimerní forma, někdy dublet	955-915
1305-1200	w	amid.p.III	-CO-NH-, trans, obvykle 1260	770- 620
okolo 1300	m	δ(C-CO-C)	Ar- <u>CO</u> -Ar(-R), obecně několik pásů	1225-1075
1300-1290	w	δ(CH)	-CH=CH ₂	995-900
1300-1150	vs	v _{as} (COC)	R- <u>CO-O</u> -R, nasyc. (obvykle širší než u ketonů)	1160-1050
1280-1180	s	v(C _R N)	Ar- <u>NH</u> -R	-
1275-1230	vs	v _{as} (COC)	=C-O-C	1120-1020
1260-1150	s	v(CO)	Ar- <u>OH</u>	-
1255-1245	m	v(CC)	-C(CH ₃) ₃	1225-1165
1225-1165	m	v(CC)	-C(CH ₃) ₃	930- 925
1225-1075	s	v(C _{Ar} C)	Ar- <u>CO</u> -	-
1220-1190	w		>C(CH ₃) ₂	-
1215-1100	s	v(CO)	R ₃ C- <u>OH</u> , (terc.)	-
1200-1150	s	v _s (COC)	R- <u>CO-O</u> -R', α,β-nenasyc.	-
1195-1180	vs	v _{as} (COC)	<u>HCOOR</u>	1160-1050

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
1190-1170	m	v(CN)	R ₂ <u>NH</u>	750- 700
1190-1075	s	v(CO)	-COOH, monomerní forma	-
1175-1165	m	v(CC)	-CH(CH ₃) ₂	1150-1130
1160-1050	s	v _s (COC)	R- <u>CO-O</u> -R', nasyc.	-
1155-1060	s	v _{as} (COC)	-O-, alifat.ethery	1140- 900
1150-1130	w-m		-CH(CH ₃) ₂	840- 790
1140- 900	s	v _s (COC)	-O-, =C-O-C, alifat.ethery	-
1130-1065	s	v(CO)	R ₂ CH- <u>OH</u> , (sekund.)	-
okolo 1100	m	v(CCC)	R- <u>CO</u> -R', několik pásů při delších řetězcích	-
1100-1000	w-m	v(CN)	R <u>NH</u> ₂ , často překryt ostat. pásy	900- 650
1085-1020	s	v(CO)	R- <u>OH</u> , (primar.)	-
995- 980	s	γ(CH)	-CH=CH ₂	915- 905
980- 955	s	γ(CH)	R- <u>CH=CH</u> -R, trans	-
975- 780	w	γ(CH)	-CHO	-
960- 930	m	v(NO)	-C=N-OH	-
955- 915	m,br	γ(OH)	-COOH, dimerní forma	-
930- 925	m		-C(CH ₃) ₃	-
915- 905	s	γ(CH)	R- <u>CH=CH</u> ₂	-
900- 650	s,br	γ(NH)	-NH ₂	-
900- 830	m-s	γ(CH)	Ar, izolovaný H: subst. 1,3-, 1,2,3,5-, 1,2,4,5-, 1,2,3,4,5-	-
895- 885	s	γ(CH)	RR', <u>C=CH</u> ₂	-

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
860- 800	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 2 soused. H-atomy: subst. 1,4-, 1,2,3,4-	-
850- 790	s	$\gamma(\text{CH})$	$\text{RR}'\text{C}=\text{CHR}''$	-
840- 790	w		$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	-
820- 760	m	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 3 soused. H-atomy: subst. 1,3-, 1,2,3-	730- 680
cca 800	m-s,br	$\gamma(\text{NH})$	$-\text{NH}-\text{CO}-$, cis	-
785- 750	w-m	$\rho(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-\text{CH}_x$, $x \neq 2$	-
770- 735	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 4 soused. H-atomy: 1,2-	-
770- 735	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 5 soused. H-atomů: monosubstit.	730- 680
770- 620	m,br	$\gamma(\text{NH})$	$-\text{NH}-\text{CO}-$, trans	-
750- 700	s,br	$\omega(\text{NH})$	$-\text{NH}-$	-
750- 600	m,br	$\gamma(\text{NH}_2)$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$	-
750- 735	w-m	$\rho(\text{CH}_2)$	propyl, $(\text{CH}_2)_n-(\text{O})-$, $n > 4$	-
735- 720	w-m	$\rho(\text{CH}_2)$	$(\text{CH}_2)_n-(\text{C})-$, $n > 3$	-
730- 665	m	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{R}'$, cis	-
730- 680	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, monosubstit., 1,3-, 1,2,3-, 1,2,4-	-
695- 575	m-s	$\delta(\text{CH})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-
okolo 670	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 6 soused. H-atomů, benzen	-
^g 670	w	$\delta(\text{CO}_2)$	CO_2 , oxid uhličitý	-

Poznámka: ⁽¹⁾ Valenční vibrace $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$ by měla být správně označena $\nu_{\text{d}}(\text{CH}_3)$. Označení ν_{as} se však běžně používá, a bylo proto zachováno i v této tabulce.

⁽²⁾ Konjugace benzenového jádra s další funkční skupinou.

Použité zkratky:

Intenzita: s - silná, m - střední, w - slabá, v - proměnná, br - široký pás, sh - raménko (anglicky shoulder).

Popis vibračních kmitů: ν - valenční, δ - deformační, γ - mimorovinný, ω - kývavý (anglicky wagging), ρ - kolébavý (angl. rocking), as - antisymetrický, s - symetrický, d - degenerovaný, amid.p. I - III - označení amidických pásů I - III, vystihující silné spřažení vibrací v amidech, komb.p. - kombinační pásy. R - alkyl, Ar - aryl.

Vysvětlivky:

Běžně jsou uvedeny vlnočty získané ze spekter roztoků látek v organickém rozpouštědle.

Odlišují-li se charakteristické vlnočty ze spekter pevných, kapalných či silně asociovaných vzorků, pak jsou označeny symbolem ⁺; charakteristiky plynných látek symbolem ^g.

Absorpční pás je charakteristický pro uvedenou funkční skupinu. V případech, kdy poloha absorpčního pásu závisí na zbytku molekuly, **absorpční pás charakterizuje podtrženou část molekuly. Zbytek (alkylovou skupinu, aromát, atd.) je nutno prokázat nalezením jemu odpovídajících absorpčních pásů.**

Při hledání v tabulce se předpokládá postup od vyšších vlnočtů k nižším. V rubrice "Další charakteristický absorpční pás" je uvedena oblast, ve které se **musí** vyskytovat absorpční pás (či více pásů) charakteristický pro danou funkční skupinu. Pokud další vlnočty uvedeny nejsou, je tím seznam absorpčních pásů významných pro charakterizaci dané funkční skupiny vyčerpán. V případech, kdy se v dané oblasti překrývá absorpce funkčních skupin, je samozřejmě nutné zkoumat všechny možnosti, které pro přiřazení přicházejí v úvahu.