

Úvod do strukturní analýzy farmaceutických látek

Garant předmětu: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Vyučující: prof. RNDr. Pavel Matějka, Ph.D., A136, linka 3687, matejkap@vscht.cz
doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D., A28, linka 4110, dolenskb@vscht.cz

Infračervená spektrometrie - Tabulky

*Příprava předmětu byla podpořena
projektem OPPA č. CZ.2.17/3.1.00/33253*



**Evropský sociální fond
Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti**

Tabulka I. Vlnočty charakteristických vibrací některých vazeb a skupin

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
3670-3580	v	v(OH)	-OH (izolované, neinteragující)	1420-1260
+3640-3150	m-s,br	v(OH)	-OH (pevné či kapal. látky)	1440-1290
3620-3200	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 vlnočet koncentračně závislý	1440-1290
3550-3200	w-m	2x v(C=O)	>C=O, 1.svrchní tón, obvykle úzký pás	1720±60

Tabulka I. Vlnočty charakteristických vibrací některých vazeb a skupin

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
3540-3480	m-s	$\nu_{as}(\text{NH}_2)$	-CO-NH ₂	3420-3380
3500-3300	w	$\nu(\text{NH})$	-NH-	1580-1490
3450-3250	w-m	$\nu_s(\text{NH}_2)$	-NH ₂	1650-1580
+3450-3300	w-m,br	$\nu_{as}(\text{NH}_2)$	-NH ₂	3400-3250
3420-3380	m-s	$\nu_s(\text{NH}_2)$	-CO-NH ₂	1690-1670
+3400-3250	w-m,br	$\nu_s(\text{NH}_2)$	-NH ₂	3210-3160
+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	$\nu(\text{OH})+$ komb.p.	-COOH, charakteristická skupina pásů 2500-2700	1740-1680
+3220-3180	m-s	$\nu_s(\text{NH}_2)$	-CONH ₂	1670-1650
+3210-3160	w-m,sh	$2x\delta(\text{NH}_2)$	-NH ₂ , 1.svrchní tón, zesílený Fermiho rezonancí, pozorovatelný u kapalin	1650-1580
3200-2500	v,br	$\nu(\text{OH})$	-OH, intramol. chelatační H-vazba	1420-1260
3095-3075	m	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	>C=CH ₂	1985-1780
3090-3000	m	$\nu(\text{CH})+$ komb.p.	Ar, několik pásů, počet klesá s růstem substituce jádra, pro Ar-NO ₂ deriváty 1. maximum i okolo 3100	2000-1650
3050-2995	m	$\nu(\text{CH})$	=CH-	izolované: 1685-1620 konjugované: 1650-1590
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

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
2890-2880	w	v(CH)	C-H, nasyc.	1340
2895-2840	m-s	v _s (CH ₃)	-(C)- <u>CH₃</u> , -(O)- <u>CH₃</u>	1470-1385
2880-2830	m	v _s (CH ₂)	-(C)- <u>CH₂</u> -, -(O)- <u>CH₂</u>	1480-1385
2830-2810	w-m	v(CH)	-CHO	} 1740-1685
2745-2650	w	v(CH)+ svrchní tón	-CHO, obvykle okolo 2720	
§2350	s	v(CO ₂)	oxid uhličitý, obvykle ruší ve spektru dublet 2360, 2335	670
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	svrchní tón a komb.p.	Ar, skupina 2-6 pásů charakt. pro typ substiuce	1625-1585
1985-1775	w	2xγ(CH)	R- <u>CH=CH₂</u> , RR'- <u>C=CH₂</u>	1690-1620
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
1750-1690	s	v(C=O)	R- <u>CO</u> -R, ' nasycené 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-O</u> -R, estery aromátů	1330-1250
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

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
1690-1670	s	$\nu(\text{C}=\text{O})$	-CO-NH ₂	1620-1590
1690-1650	w	$\nu(\text{C}=\text{N})$	C=N-OH	1475-1315
1685-1620	w-m	$\nu(\text{C}=\text{C})$	>C=C<, >C=CH ₂	1440-1290 a 1000-650
⁺ 1670-1650	s	$\nu(\text{C}=\text{O})$ amid.p.I	-CO-NH ₂	1650-1620
⁺ 1650-1620	w-m	$\delta(\text{NH}_2)$ amid.p.II	-CO-NH ₂	1420-1400
1650-1580	s-m	$\delta(\text{NH}_2)$	-NH ₂	Ar:1360-1200 R :1100-1000
1650-1590	m	$\nu(\text{C}=\text{C})$	-C=C-C=C-, často dva pásy: slabší u cca 1650, silnější 1605	-
1640-1580	vs	$\nu(\text{C}=\text{O})$	enol forma β -diketonů	-
⁺ 1645-1615	v	$\delta(\text{H}_2\text{O})$	H ₂ O, krystalová v., v. v rozpouštědle	-
1625-1585	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle 1600	1590-1570
1620-1590	w-m	$\delta(\text{NH}_2)$	-CO-NH ₂	1420-1400
⁺ 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
1570-1485	vs	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$	-NO ₂	1385-1315
1525-1470	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle 1490 a silnější než 1600 cm ⁻¹	1465-1415
1480-1440	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(C)-CH ₂ -, -(O)-CH ₂ - (může se překrývat s pásem Ar)	785- 720

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
1470-1440	m	$\delta_d(\text{CH}_3)$	$-(\text{C})-\underline{\text{CH}_3}$, $-(\text{O})-\underline{\text{CH}_3}$ (může se překrývat s pásem Ar)	1395-1345
1465-1415	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar	900- 670
1460-1340	w	$\nu_s(\text{NCO})$	$-\text{N}=\text{C}=\text{O}$	-
1450-1390	s	$\delta_d(\text{CH}_3)$	$\underline{\text{CH}_3}-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-$, $\underline{\text{CH}_3}-\text{N}<$, $\underline{\text{CH}_3}-(\text{C}=\text{O})-\text{C}-$, $\underline{\text{CH}_3}-(\text{S}=\text{O})-\text{C}-$	1385-1300
1445-1385	m-s	$\delta(\text{CH}_2)$	$-\underline{\text{CH}_2}(\text{X})$, $\text{X}:-(\text{C}=\text{O})-$, $-\text{COOR}$, $-\text{C}=\text{C}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$, Ar, $-\text{CN}$, NO_2 , Cl, Br	785-720
1440-1395	w	$\delta(\text{OH})+$ $\nu(\text{CO})$	$-\underline{\text{COOH}}$, 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
1440-1310	m-s	$\delta(\text{COH})$	terc.-OH, Ar- <u>OH</u> (pozor na překryv pásů)	1260-1100
1420-1400	m	$\nu(\text{CN})$ amid.p.III	$-\text{CO}-\text{NH}_2$	1150
⁺ 1420-1335	m	$\nu_s(\text{COO}^-)$	$-\text{COO}^-$	-
1415-1350	w	$\delta(\text{CH})$	$-\text{CH}=\text{CH}-$, cis	1000- 665
1395-1345	m-s	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\underline{\text{CH}_3}-(\text{C})-$, $\underline{\text{CH}_3}-(\text{O})-$, dublet typický pro rozvětvení	1255-1125 (odkaz platí pouze pro dublet)
1385-1330	m-s	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\underline{\text{CH}_3}-(\text{C}=\text{O})-$, $\underline{\text{CH}_3}-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-$	-
1385-1315	vs	$\nu_s(\text{NO}_2)$	$-\text{NO}_2$	-
1380-1280	m-s	$\delta(\text{OH})$	$-\text{COOH}$, monomerní forma	1190-1075
1375-1225	w-m	$\delta(\text{CH})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	695-575
1360-1250	s	$\nu(\text{CN})$	$\text{Ar}_2\underline{\text{NH}}$, $\text{Ar}-\underline{\text{NH}}-\text{R}$	1280-1180

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
1360-1200	s	v(CN)	ArNH ₂	-
1350-1340	m	δ(CH)	>C=CH-	850-790
1350-1300	m	δ(CH)	-HC=CH-, trans	980-955
1350-1300	w-m	v(CN) amid.p.III	-NH-CO-	800
1350-1260	s	δ(COH)	ROH, R ₂ OH, (prim. a sekund.)	1130-1020
1345-1250	s	v(C-O) + v(C-C)	-CO-O-, α,β-nenas. estery, pás širší než u ketonů	1200-1150
1190-1170	m	v(CN)	R ₂ NH	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-CO-O-R', nasyc.	-
1150-1130	w-m		-CH(CH ₃) ₂	840- 790
1130-1065	s	v(CO)	R ₂ CH-OH, (sekund.)	-
okolo 1100	m	v(CCC)	R-CO-R', několik pásů	-
1100-1000	w-m	v(CN)	RNH ₂ , často překryt ostat. pásy	900- 650
1085-1020	s	v(CO)	R-OH, (primar.)	-
995- 980	s	γ(CH)	-CH=CH ₂	915- 905
980- 955	s	γ(CH)	R-CH=CH-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	-

Tabulka I – pokračování

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteris- tický pás
915- 905	s	$\gamma(\text{CH})$	R- <u>CH=CH</u> ₂	-
900- 650	s,br	$\gamma(\text{NH})$	-NH ₂	-
900- 830	m-s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, izolovaný H: subst. 1,3-, 1,2,3,5-, 1,2,4,5-, 1,2,3,4,5-	-
895- 885	s	$\gamma(\text{CH})$	RR', <u>C=CH</u> ₂	-
860- 800	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 2 soused. H-atomy: subst. 1,4-, 1,2,3,4-	-
850- 790	s	$\gamma(\text{CH})$	RR' <u>C=CHR</u> "	-
840- 790	w		-CH(CH ₃) ₂	-
820- 760	m	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 3 soused. H-atomy: subst. 1,3-, 1,2,3-	730- 680
785- 750	w-m	$\rho(\text{CH}_2)$	-CH ₂ -CH _x , x≠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
750- 700	s,br	$\omega(\text{NH})$	-NH-	-
750- 600	m,br	$\gamma(\text{NH}_2)$	-CO-NH ₂	-
750- 735	w-m	$\rho(\text{CH}_2)$	propyl, (<u>CH</u> ₂) _n -(O)-, n>4	-
735- 720	w-m	$\rho(\text{CH}_2)$	(<u>CH</u> ₂) _n -(C)-, n>3	-
730- 665	m	$\gamma(\text{CH})$	R- <u>CH=CH</u> -R', cis	-
730- 680	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, monosubstit., 1,3-, 1,2,3-, 1,2,4-	-
695- 575	m-s	$\delta(\text{CH})$	-C≡C-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 $\nu_{as}(CH_3)$ by měla být správně označena $\nu_d(CH_3)$. 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.

Tabulka byla sestavena z údajů uvedených v publikacích:

- 1/ G. Socrates: Infrared Characteristic Group Frequencies, J.Wiley, Chichester 1980.
- 2/ N. P. G. Roeges: A Guide to the Complete Interpretation of Infrared Spectra of Organic Structures, J.Wiley, Chichester 1993.
- 3/ Spectool for Windows 2.1, A Hypermedia Book for Structure Elucidation of Organic Compounds with Spectroscopic Methods, Chemical Concepts, Weinheim 1994.