

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

Ramanova spektroskopie - Tabulky

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



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

INTERPRETACE RAMANOVÝCH SPEKTER

Frekvence jednotlivých vibračních modů jsou nezávislé na tom, zda je sledujeme pomocí infračervené či Ramanovy spektrometrie. Odlišnosti v obou typech spekter jsou v intenzitách pásů, které souvisejí s odlišnými výběrovými pravidly pro tyto dva typy vibrační spektroskopie.

V níže uvedené Tabulce I je přehled vybraných pásů významných typů látek s údaji o relativních intenzitách v Ramanových spektrech.

Při hledání v tabulce se předpokládá postup od vyšších vlnočtů k nižším. V rubrice "Další charakteristický pás" je uvedena oblast, ve které se musí vyskytovat spektrální pás (či více pásů) charakteristický pro danou funkční skupinu. V některých případech je odkaz na širší oblast, která je rozdělena na dílčí podoblasti například s ohledem na vliv okolních skupin, větvení skeletu apod. Pokud odkaz na další vlnočty (vlnočtový interval) uveden není, je tím seznam typických pásů významných pro charakterizaci dané funkční skupiny vyčerpán. V případech, kdy se v dané oblasti překrývají pásy více funkčních skupin, je samozřejmě nutné zkoumat všechny možnosti, které pro přiřazení přicházejí v úvahu. Je třeba zvažovat vzájemné překryvy pásů a brát v potaz zastoupení různých funkčních skupin v molekule. Jestliže je daná funkční skupina málo zastoupená v molekule, veškeré její pásy budou slabší vůči dominantnímu typu skeletu či převažujícímu typu funkční skupiny.

Tabulka I byla sestavena na základě údajů převzatých z níže uvedených publikací. Při sestavování byl brán zřetel na významné typy funkčních skupin resp. hlavní typy skeletu organických molekul a řada detailních informací byla vynechána. Tato tabulka není určena pro detailní interpretaci Ramanových spekter, jejím účelem je shrnutí pouze základních charakteristik důležitých pro výuku principů Ramanovy spektroskopie, a to však nejen v rámci uvedené laboratorní úlohy.

1/ G. Socrates: Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies, J.Wiley, Chichester Third Edition 2001.

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.

Tabulka I. Vlnočty charakteristických vibrací některých vazeb a skupin v Ramanových spektrech

Vlnočet, cm ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
voda – v organickém rozpouštědle				
3760-3580	vw-w	v _{as} (H ₂ O)	H₂O	3640-3500
3640-3500	w-m, br	v _s (H ₂ O)	H₂O	1640-1605
1640-1605	vw	δ(H ₂ O)	H₂O	-
voda – krystalová, rozpouštědlo				
3600-3100	m,br	v(OH)	H₂O	1645-1615
1645-1600	v	δ(H ₂ O)	H₂O ,	-
alkoholy, fenoly				
3670-3580	vw-w,	v(OH) – bez vlivu vodíkových můstků, úzký	-OH , izolované	1420-1260
3600-3400	vw	v(OH) – významný vliv intramolekulárních vodíkových můstků, vlnočet koncentračně nezávislý, širší než pro izolované –OH, užší než v případě intermolekulárních můstků	-OH , intramol. H-vazba	1440-1300
3600-3150	vw-w,br	v(OH) -OH , pevné či kapal. l. – významný vliv intermolekulárních vodíkových můstků , vlnočet s rostoucí koncentrací klesá		1440-1290
3200-2500	w, br	v(OH) -OH , pevné či kapal. l . – chelátovaná –OH skupina		1440-1290
1440-1310	m-w	δ(COH) (pozor na překryv pásů)	terc.-OH, Ar-OH	1260-1100
1400-1260	m-w	δ(COH)	ROH , R ₂ OH , (prim. a sek.)	1150-1000
1260-1170	m-w	v(CO)	Ar-OH	-
1215-1100	m-s	v(CO)	R ₃ C- OH , (terc.)	800-750
1150-1070	s-m	v(CO)	R ₂ CH- OH , (sekund.)	900-800
1090-1000	s-m	v(CO)	R-OH, (primar.)	900-800

900-800	s-m	v(CCO)	R-OH, (primar.)	-
900-800	s	v(CCO)	R-OH ₂ , (sekund.)	-
800-750	s	δ(CO)	R ₃ C-OH, (terc.)	-

karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, izolované molekuly

3580-3500	vw	v(OH)-COOH, monomer		1800-1740
		neasociované molekuly		
1800-1740	w-m	v(C=O)	-COOH, monomerní	1380-1280
1380-1280	m-w	δ(OH)	-COOH, monomerní	1190-1075
1190-1075	w	v(CO)	-COOH, monomerní forma -	

karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, asociované molekuly

3200-2230	vw-w, br	v(OH)-COOH, dimerní, asoc.		1725-1700
		vlnočet s rostoucí koncentrací klesá,	intermol. H-vazba	
1725-1700	w-m	v(C=O)	-COOH, dimerní forma	1440-1395
		1725-1700 – nasycené kys.,		
		1710-1680 – nenasyčené a Ar kys.		
1440-1395	w-m	δ(OH)+ v(CO)	-COOH, dimerní forma	1320-1210
1320-1210	v (m-s)	v(CO)	-COOH, dimerní forma	970-875
			dimerní forma, někdy dublet	
970- 875	m,br	γ(OH)	-COOH, dimerní forma	-

karboxylové kyseliny – disociovaná forma (anion), asociované molekuly

1655-1540	w	v _{as} (COO ⁻)	-COO ⁻	1440-1335
1440-1335	m-s	v _s (COO ⁻)	-COO ⁻	-
		širší pás s raménky (dva až tři píky)		

aminy – primární

3550-3280	m-w	v _{as} (NH ₂)	-NH ₂	3450-3160
		vlnočet s rostoucí koncentrací klesá,	intermol. H-vazba,	vliv menší než u -OH
		širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi		
3450-3160	vw-w	v _s (NH ₂)	-NH ₂	1650-1580
		vlnočet s rostoucí koncentrací klesá,	intermol. H-vazba,	vliv menší než u -OH
		širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi		
1650-1580	w	δ(NH ₂)	-NH ₂	Ar: 1360-1240 R : 1295-1145
1360-1240	m-w	v(CN)	ArNH ₂	1120-1020
1295-1145	m-w	ρ(NH ₂)	RNH ₂ , často překryv pásů	1240-1020
1240-1020	m-s	v(CN)	RNH ₂ , často překryv pásů	-
1120-1020	m-w	ρ(NH ₂)	ArNH ₂ , často překryv pásů	1120-1020

aminy – sekundární

3500-3300	w	v(NH)	-NH-	1580-1490
1580-1490	w	δ(NH)	-NH -	R: 1190-1170
		pro ArNH riziko překryvů		Ar:1360-1250
1360-1250	m-w	v(CN)	Ar ₂ NH, Ar-NH-R	1280-1180
1280-1180	m-w	v(C _R N)	Ar-NH-R	-
1190-1170	m	v _{as} (CNC)	R ₂ NH	1145-1130
1145-1130	m-w	v _s (CNC)	R ₂ NH	1145-1130
750- 700	w,br	ω(NH)	-NH-	-

amidy - primární

3540-3320	m-w	$\nu_{as}(\text{NH}_2)$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$	3420-3180
nižší vlnočety při vlivu H-vazby, širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
3420-3180	m-w	$\nu_s(\text{NH}_2)$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$	1690-1640
nižší vlnočety při vlivu H-vazby, širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
1690-1640	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$, amid I	1640-1590
1640-1590	w-m	$\delta(\text{NH}_2)$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$, amid II	1420-1400
1420-1400	m	$\nu(\text{CN})$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$, amid III	1170-1130
1170-1130	vw	$\rho(\text{NH}_2)$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$, nezřetelný	600-550
600- 550	m	$\delta(\text{N}-\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{NH}_2$	-

amidy - sekundární

3460-3270	m-w	$\nu(\text{NH})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$, trans	1700-1665, 3100-3070
širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
3180-3140	m-w	$\nu(\text{NH})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$, cis	1700-1630
3100-3070	vw	svrchní tón	$-\text{CO}-\text{NH}-$, trans	1700-1665
od amid.p.II, velmi slabý, často nezřetelný				
1700-1630	w-m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$, amid I	1570-1510
1570-1510	m-w	$\delta(\text{NH})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$, amid II	1305-1200
1350-1310	s	$\nu(\text{CN})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$, amid III, cis	820-780
1305-1200	s	$\nu(\text{CN})$	$-\text{CO}-\text{NH}-$, amid III, trans	770-620
obvykle okolo 1260 cm^{-1}				
820-780	m-s,br	$\gamma(\text{NH})$	$-\text{NH}-\text{CO}-$, cis	-
770- 620	w,br	$\gamma(\text{NH})$	$-\text{NH}-\text{CO}-$, trans	-

amidy - terciární

1670-1630	w-m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{N}<$	870-700
870-700	s	$\nu_{as}(\text{C}-\text{N}-\text{C})$	$-\text{CO}-\text{N}<\text{C}$	620-570
620-570	m	$\delta(\text{N}-\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{N}<\text{C}$	-

alkyny (alkiny) – alkylacetylény

3340-3280	w-m	$\nu(\text{CH})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	2150-2100
2150-2100	s-m	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	1020-905
1020-905	w-m	$\nu(\text{C}-\text{C}\equiv\text{C})$	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}$	370-220
370-220	w-m	$\delta(-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-

alkyny (alkiny) – dialkylacetylény

2260-2190	vs-s	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	
u symetrické molekuly vs někdy doprovázen pásem okolo 2310 cm^{-1}				

alkeny – vinyl a vinyliden deriváty (koncová dvojná vazba)

3120-3050	m	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	3050-2960
3050-2960	m	$\nu_s(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1685-1620
1685-1620	s	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1440-1360
1440-1360	m-s	$\delta(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1320-1250
pozor na překryvy pásů				
1320-1250	m-w	$\delta(\text{CH})$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1180-1010
1180-1010	m	$\delta(\text{CH})$	$>\text{CH}=\text{CH}_2$	980- 810
980- 810	w	$\gamma(\text{CH})$	$>\text{CH}=\text{CH}_2$	-

alkeny, cykloalkeny a jejich deriváty – (vnitřní dvojná vazba, dvojně vazby)

3060-2995	m	v(CH)	=CH-	izolované: 1685-1620 konjugované: 1660-1580
1685-1620	s-vs	v(C=C)	>C=C<, izolované	1440-1190
1660-1580	s-m	v(C=C)	-C=C, konjugované	1440-1190
1440-1340	s-m	v(C=C)	poloha pásu klesá se stupněm konjugace, cyklické, více C=C vazeb vibrace nenasyčených kruhů	konjugace s C=C, Ar, C=O -
1350-1340	w	δ(CH)	>C=CH-, trisub.	850-790
1350-1260	w-vw	δ(CH)	-HC=CH-, trans	1000- 910
1295-1190	s-m	ρ(CH)	-HC=CH-, cis	980- 880
1000- 910	m	γ(CH)	R-CH=CH-R, trans	630- 430
980- 880	m	γ(CH)	R-CH=CH-R, cis	730- 660
850- 790	w	γ(CH)	RR'>C=CH-R"	-
730- 660	w	γ(CH)	R-CH=CH-R, cis	-
630- 430	w	γ(CH) δ(CH)	R-CH=CH-R, trans	-

aromatické uhlovodíky

3105-3000	m-s	v(CH)	Ar	1630-1590
			několik pásů, počet klesá s růstem substituce jádra pro Ar-NO ₂ deriváty 1. maximum i nad 3105	
1630-1590	m-s	v(C=C)	Ar, obvykle 1600	1590-1575
1590-1575	v	v(C=C)	Ar,	1525-1470
1525-1470	w	v(C=C)	Ar, obvykle okolo 1490	1470-1425
1470-1425	w	v(C=C)	Ar	1290- 990
			interval závisí na typu subst., pro Ar, 1,2,4,5-tetrasubstit., penta- a hexasub. přímý odkaz do oblastí v celkovém intervalu 575- 385	
1290-1130	m	δ(CH)	Ar, 1,4-disubstit.	880- 790
1270-1220	m	δ(CH)	Ar, 1,2,4-trisubstit.	680- 610
1190-1070	w	δ(CH)	Ar, 1,2,3,4-tetrasubstit.	585- 565
1170-1120	m	δ(CH)	Ar, 1,2,3,5-tetrasubstit.	580- 505
1150-1030	m-s	δ(CH)	Ar, 1,2,3-trisubstit.	670- 500
1140-1020	m-s	δ(CH)	Ar, 1,2-disubstit.	790-650
1040-990	m-vs	δ(CH)	Ar, monosubstit.	710-605
1025-990	vs	δ(CH)	Ar, 1,3-disubstit., Ar, 1,3,5-trisubstit.	800-660 535-495
880- 790	s	γ(CH)	Ar, 1,4-disubstit.	-
800- 660	m-s	γ(CH)γ(CC)	Ar, 1,3-disubstit.	-
790- 650	s	γ(CH)γ(CC)	Ar, 1,2-disubstit.	590- 510
710- 605	m-w	γ(CC),γ(CH)	Ar, monosubstit.	-
680- 610	m-s	γ(CC)	Ar, 1,2,4-trisubstit.	-
670- 500	s	γ(CC)	Ar, 1,2,3-trisubstit.	-
590- 510	m-s	γ(CC)	Ar, 1,2-disubstit.	-
585- 565	s	γ(CC)	Ar, 1,2,3,4-tetrasubstit.	-
580- 505	v	γ(CC)	Ar, 1,2,3,5-tetrasubstit.	-
575- 545	s-vs	γ(CC)	Ar, pentasubstit.	-
535- 495	m-s	γ(CC)	Ar, 1,3,5-trisubstit.	280- 250
470- 420	s-m	γ(CC)	Ar, 1,2,4,5-tetrasubstit.	-
415- 385	s-m	γ(CC)	Ar, hexasubstit.	-
280- 250	m-s	γ(CC)	Ar, 1,3,5-trisubstit.	-

alkany, alkylové řetězce

2995-2940	m	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	-CH₃	2895-2840
2955-2915	m	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	-CH₂-	2880-2835
2895-2840	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	-CH₃	1470-1385
2880-2830	m-s	$\nu_s(\text{CH}_2)$	-CH₂-	1480-1385
1480-1440	w-m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(C)-CH₂, -(O)-CH₂- (může se překrývat s pásem Ar, -CH ₃)	1305-1295 (odkaz platí pouze pro -(CH₂)_n - n>2)
1470-1440	m	$\delta_d(\text{CH}_3)$	-(C)-CH₃, -(O)-CH₃ (může se překrývat s pásem Ar, -CH ₂ -)	1395-1345
1450-1390	w	$\delta_d(\text{CH}_3)$	CH₃-(C=O)-O-, CH₃-N<, CH₃-(C=O)-C-, CH₃-(S=O)-C-	1385-1300
1445-1385	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-CH₂-X, X:-(C=O)-, -COOR, -C=C-, -C≡C-, Ar, -CN, NO₂, Cl, Br	785-720
1395-1345	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(C)-, CH₃-(O)- dublet typický pro rozvětvení	1255-1130 (odkaz platí pouze pro dublet)
1385-1330	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(C=O)-, CH₃-(C=O)-O-	-
1370-1310	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(N<)	-
1360-1320	w	$\delta(\text{CH})$	-C-H, nasyc.	-
1340-1300	w	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(S=O)-C-	-
1305-1295	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(CH₂)_n- n>2, intenzita roste s n	1100-1040
1255-1245	m	$\nu(\text{CC})$	-C(CH₃)₃	1225-1165
1225-1165	m	$\nu(\text{CC})$	-C(CH₃)₃	1020- 980
1175-1165	w	$\nu(\text{CC})$	-CH(CH₃)₂	1150-1130
1150-1130	w		-CH(CH₃)₂	955- 900
1100-1040	m-s	$\nu(\text{CCC})$	-(CH₂)_n-	900-800
1020- 980	m-s	$\nu(\text{CC})$	-C(CH₃)₃	930- 925
930- 925	m		-C(CH₃)₃	360-270
955- 900	m	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CCH})$	-CH(CH₃)₂	840-790
900-800	m-s	skeletální	-(CH₂)_n-	750-720
840- 790	m	skeletální	-CH(CH₃)₂	495-490
785- 750	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	-CH₂-CH_x, x≠2	-
750- 735	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	propyl, (CH₂)_n-(O)-, n>4	-
735- 720	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	(CH₂)_n-(C)-, n>3	-
495-490	m	skeletální	-CH(CH₃)₂	-
360- 270	m		-C(CH₃)₃	-

aldehydy

2850-2800	w	$\nu(\text{CH})$	-CHO někdy raménko pásu pod 2745 cm ⁻¹	2745-2650
2745-2650	s-m	$\nu(\text{CH})$	-CHO efekt Fermiho resonance	1745-1650
1745-1650	w-m	$\nu(\text{C=O})$	-CHO vyšší hodnota vlnočtu pro nasycené alifatické aldehydy hodnota vlnočtu se snižuje vlivem konjugace C=O vazby s C=C, Ar apod. v okolí	1440-1325
1440-1325	s-m	$\delta(\text{CH})$	-CHO	975-780
975- 780	m	$\gamma(\text{CH})$	-CHO	-

thioly

2600-2520	s	$\nu(\text{SH})$	-SH	750-570
750-570	s	$\nu(\text{CS})$	-C-SH	410-200
410-200	v	$\delta(\text{CS})$	-C-SH	-

fosfiny

2460-2100	m-w	$\nu(\text{PH})$	-PH	1150-965
1150-965	m-w	$\delta(\text{PH})$	-PH	-

isokyanáty

2295-2250	w	$\nu_{\text{as}}(\text{N}=\text{C}=\text{O})$	-N=C=O,	1460-1340
1460-1340	s	$\nu_{\text{s}}(\text{N}=\text{C}=\text{O})$	-N=C=O	650-580
650-580	w	$\delta(\text{N}=\text{C}=\text{O})$	-N=C=O	-

nitrily

2270-2200	s	$\nu(\text{C}\equiv\text{N})$	-C \equiv N	390-340
		velmi úzký pás		odkaz platí pouze pro alifatické nitrily
390-340	s	$\delta(\text{C}-\text{C}\equiv\text{N})$	-C-C \equiv N	200-160
200-160		skeletální	-C-C \equiv N	-

thiokyanáty

2185-2135	m-s	$\nu(\text{C}\equiv\text{N})$	-S-C \equiv N	1090-925
		velmi úzký pás		
1090-925	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{S}-\text{C}\equiv\text{N})$	-S-C \equiv N	700-670
700-670	s	$\nu_{\text{as}}(-\text{C}-\text{S}-\text{C})$	-C-S-C \equiv N	660-610
660-610	s	$\nu_{\text{s}}(-\text{C}-\text{S}-\text{C})$	-C-S-C \equiv N	-

isothiokyanáty

2150-1990	m,br	$\nu_{\text{as}}(\text{N}=\text{C}\equiv\text{S})$	-N=C=S	1250-925
1250-925	s	$\nu_{\text{s}}(\text{N}=\text{C}\equiv\text{S})$	-N=C=S	690-650
690-650	s	$\delta_{\text{s}}(\text{N}=\text{C}\equiv\text{S})$	-N=C=S	-

 β,γ -laktony

1840-1770	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	β,γ -laktony	1370-1160
1370-1160	w	$\nu(\text{CO})$	β,γ -laktony	-

estery

1800-1750	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	vinyl a fenylestery	1310-1250
1750-1720	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	nasyčené estery	1300-1150
1740-1705	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	-CO-O-, α,β -nenas. estery	1335-1250
1730-1705	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	Ar-CO-O-R, estery aromátů	1330-1250
1335-1250	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	-CO-O-, α,β -nenas. estery, pás širší než u ketonů	1200-1130
1330-1250	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	Ar-CO-O-R, širší než u ketonů	1150-1080
1300-1150	v (w-s)	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	R-CO-O-R, nasyc. (obvykle širší než u ketonů)	1160-1050
1200-1130	w	$\nu_{\text{s}}(\text{COC})$	R-CO-O-R', α,β -nenasyc.	-
1200-1180	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	HCOOR	1165-1050
1165-1100	w	$\nu_{\text{s}}(\text{COC})$	HCOOR	775-620
1160-1050	w	$\nu_{\text{s}}(\text{COC})$	R-CO-O-R', nasyc.	-
1150-1080	w	$\nu_{\text{s}}(\text{COC})$	Ar-CO-O-R	-
775-620	m	$\delta(\text{OCO})$	HCOOR	-

ketony

1750-1690	m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	R- CO -R', nasycené ketony	1325-1175
1705-1650	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	Ar CO -, α,β -nenas. ketony	1320-1280
1325-1175	m-w	$\nu(\text{CC})$	R- CO -R' (často obtížně rozpoznatelný)	1170-1095
1320-1280	m	$\delta(\text{C}-\text{CO}-\text{C})$	Ar- CO -Ar(-R), obecně několik pásů	1225-1075
1225-1075	m	$\nu(\text{C}_{\text{Ar}}\text{C})$	Ar- CO -	-
1170-1095	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	R- CO -R', několik pásů při delších řetězcích	800-700
800-700	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	R- CO -R'	630-580
630-580	s-m	$\delta(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	R- CO -R'	-

nitrosloučninny

1570-1485	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$	-NO ₂	1385-1315
1385-1315	s-vs	$\nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)$	-NO ₂	1180-850
1180- 850	s-m	$\nu(\text{CN})$	-C-NO ₂	-

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.

Použité zkratky:

Intenzita: vs - velmi silná, s - silná, m - střední, w - slabá, vw – velmi 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 I - III - označení amidických pásů I - III, vystihující silné spřažení vibrací v amidech, komb.p. - kombinální pásy. R - alkyl, Ar - aryl.