

## PŘÍLOHA – 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 <sup>-1</sup>	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
<b><u>voda – v organickém rozpouštědle</u></b>				
3760-3580	vw-w	v <sub>as</sub> (H <sub>2</sub> O)	<b>H<sub>2</sub>O</b>	3640-3500
3640-3500	w-m, br	v <sub>s</sub> (H <sub>2</sub> O)	<b>H<sub>2</sub>O</b>	1640-1605
1640-1605	vw	δ(H <sub>2</sub> O)	<b>H<sub>2</sub>O</b>	-
<b><u>voda – krystalová, rozpouštědlo</u></b>				
3600-3100	m,br	v(OH)	<b>H<sub>2</sub>O</b>	1645-1615
1645-1600	v	δ(H <sub>2</sub> O)	<b>H<sub>2</sub>O</b> ,	-
<b><u>alkoholy, fenoly</u></b>				
3670-3580	vw-w,	v(OH) – bez vlivu vodíkových můstků, úzký	<b>-OH</b> , 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	<b>-OH</b> , intramol. H-vazba	1440-1300
3600-3150	vw-w,br	v(OH) <b>-OH</b> , pevné či kapal. l. – významný vliv intermolekulárních vodíkových můstků , vlnočet s rostoucí koncentrací klesá		1440-1290
3200-2500	w, br	v(OH) <b>-OH</b> , 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)	<b>ROH</b> , R <sub>2</sub> <b>OH</b> , (prim. a sek.)	1150-1000
1260-1170	m-w	v(CO)	<b>Ar-OH</b>	-
1215-1100	m-s	v(CO)	R <sub>3</sub> C- <b>OH</b> <sub>2</sub> (terc.)	800-750
1150-1070	s-m	v(CO)	R <sub>2</sub> CH- <b>OH</b> , (sekund.)	900-800
1090-1000	s-m	v(CO)	R-OH <sub>2</sub> (primar.)	900-800
900-800	s-m	v(CCO)	R-OH <sub>2</sub> (primar.)	-
900-800	s	v(CCO)	R-OH <sub>2</sub> (sekund.)	-
800-750	s	δ (CO)	R <sub>3</sub> C-OH, (terc.)	-
<b><u>karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, izolované molekuly</u></b>				
3580-3500	vw	v(OH) <b>-COOH</b> , monomer neasociované molekuly		1800-1740
1800-1740	w-m	v(C=O)	<b>-COOH</b> , monomerní	1380-1280
1380-1280	m-w	δ(OH)	<b>-COOH</b> , monomerní	1190-1075
1190-1075	w	v(CO)	<b>-COOH</b> , monomerní forma -	
<b><u>karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, asociované molekuly</u></b>				
3200-2230	vw-w, br	v(OH) <b>-COOH</b> , dimerní, asoc. vlnočet s rostoucí koncentrací klesá,		1725-1700 intermol. H-vazba
1725-1700	w-m	v(C=O) 1725-1700 – nasycené kys., 1710-1680 – nenasyčené a Ar kys.	<b>-COOH</b> , dimerní forma	1440-1395
1440-1395	w-m	δ(OH)+ v(CO)	<b>-COOH</b> , dimerní forma	1320-1210
1320-1210	v (m-s)	v(CO)	<b>-COOH</b> , dimerní forma dimerní forma, někdy dublet	970-875
970- 875	m,br	γ(OH)	<b>-COOH</b> , dimerní forma	-

**karboxylové kyseliny – disociovaná forma (anion), asociované molekuly**

1655-1540	w	$\nu_{as}(\text{COO}^-)$	$-\text{COO}^-$	1440-1335
1440-1335	m-s	$\nu_s(\text{COO}^-)$	$-\text{COO}^-$	-

širší pás s raménky (dva až tři píky)

**aminy – primární**

3550-3280	m-w	$\nu_{as}(\text{NH}_2)$	$-\text{NH}_2$	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	$\nu_s(\text{NH}_2)$	$-\text{NH}_2$	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	$\delta(\text{NH}_2)$	$-\text{NH}_2$	Ar: 1360-1240 R : 1295-1145
1360-1240	m-w	$\nu(\text{CN})$	$\text{ArNH}_2$	1120-1020
1295-1145	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	$\text{RNH}_2$ , často překryv pásů	1240-1020
1240-1020	m-s	$\nu(\text{CN})$	$\text{RNH}_2$ , často překryv pásů	-
1120-1020	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	$\text{ArNH}_2$ , často překryv pásů	1120-1020

**aminy – sekundární**

3500-3300	w	$\nu(\text{NH})$	$-\text{NH}-$	1580-1490
1580-1490	w	$\delta(\text{NH})$	$-\text{NH}-$	R: 1190-1170 Ar: 1360-1250
pro ArNH riziko překryvů				
1360-1250	m-w	$\nu(\text{CN})$	$\text{Ar}_2\text{NH}$ , $\text{Ar-NH-R}$	1280-1180
1280-1180	m-w	$\nu(\text{C}_R\text{N})$	$\text{Ar-NH-R}$	-
1190-1170	m	$\nu_{as}(\text{CNC})$	$\text{R}_2\text{NH}$	1145-1130
1145-1130	m-w	$\nu_s(\text{CNC})$	$\text{R}_2\text{NH}$	1145-1130
750- 700	w,br	$\omega(\text{NH})$	$-\text{NH}-$	-

**amidy - primární**

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

**amidy - sekundární**

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

**amidy - terciární**

1670-1630	w-m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{N}<$	870-700
870-700	s	$\nu_{\text{as}}(\text{C}-\text{N}-\text{C})$	$-\text{CO}-\text{N}<\text{C}$	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  $\text{cm}^{-1}$

**alkeny – vinyl a vinyliden deriváty (koncová dvojná vazba)**

3120-3050	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	3050-2960
3050-2960	m	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	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	$\nu(\text{CH})$	$=\text{CH}-$	izolované: 1685-1620 konjugované: 1660-1580
1685-1620	s-vs	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$>\text{C}=\text{C}<$ , izolované	1440-1190
1660-1580	s-m	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$-\text{C}=\text{C}$ , konjugované	1440-1190
poloha pásu klesá se stupněm konjugace, konjugace s $\text{C}=\text{C}$ , Ar, $\text{C}=\text{O}$				
1440-1340	s-m	$\nu(\text{C}=\text{C})$	cyklické, více $\text{C}=\text{C}$ vazeb	-
vibrace nenasycených kruhů				
1350-1340	w	$\delta(\text{CH})$	$>\text{C}=\text{CH}-$ , trisub.	850-790
1350-1260	w-vw	$\delta(\text{CH})$	$-\text{HC}=\text{CH}-$ , trans	1000- 910
1295-1190	s-m	$\rho(\text{CH})$	$-\text{HC}=\text{CH}-$ , cis	980- 880
1000- 910	m	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{R}$ , trans	630- 430
980- 880	m	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{R}$ , cis	730- 660
850- 790	w	$\gamma(\text{CH})$	$\text{RR}'>\text{C}=\text{CH}-\text{R}''$	-
730- 660	w	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{R}$ , cis	-
630- 430	w	$\gamma(\text{CH})$ $\delta(\text{CH})$	$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{R}$ , trans	-

**aromatické uhlovodíky**

3105-3000	m-s	$\nu(\text{CH})$	Ar	1630-1590
několik pásů, počet klesá s růstem substituce jádra pro Ar- $\text{NO}_2$ deriváty 1. maximum i nad 3105				
1630-1590	m-s	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle 1600	1590-1575
1590-1575	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar,	1525-1470
1525-1470	w	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle okolo 1490	1470-1425
1470-1425	w	$\nu(\text{C}=\text{C})$	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	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,4-disubstit.	880- 790
1270-1220	m	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,4-trisubstit.	680- 610
1190-1070	w	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,3,4-tetrasubstit.	585- 565
1170-1120	m	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,3,5-tetrasubstit.	580- 505
1150-1030	m-s	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,3-trisubstit.	670- 500
1140-1020	m-s	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2-disubstit.	790-650
1040-990	m-vs	$\delta(\text{CH})$	Ar, monosubstit.	710-605
1025-990	vs	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,3-disubstit., Ar, 1,3,5-trisubstit.	800-660 535-495
880- 790	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 1,4-disubstit.	-
800- 660	m-s	$\gamma(\text{CH})\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,3-disubstit.	-
790- 650	s	$\gamma(\text{CH})\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2-disubstit.	590- 510
710- 605	m-w	$\gamma(\text{CC}),\gamma(\text{CH})$	Ar, monosubstit.	-
680- 610	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,4-trisubstit.	-
670- 500	s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,3-trisubstit.	-
590- 510	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2-disubstit.	-
585- 565	s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,3,4-tetrasubstit.	-
580- 505	v	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,3,5-tetrasubstit.	-
575- 545	s-vs	$\gamma(\text{CC})$	Ar, pentasubstit.	-
535- 495	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,3,5-trisubstit.	280- 250
470- 420	s-m	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,4,5-tetrasubstit.	-
415- 385	s-m	$\gamma(\text{CC})$	Ar, hexasubstit.	-
280- 250	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,3,5-trisubstit.	-

### alkany, alkylové řetězce

2995-2940	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$	<b>-CH<sub>3</sub></b>	2895-2840
2955-2915	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$	<b>-CH<sub>2</sub>-</b>	2880-2835
2895-2840	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	<b>-CH<sub>3</sub></b>	1470-1385
2880-2830	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)$	<b>-CH<sub>2</sub>-</b>	1480-1385
1480-1440	w-m	$\delta(\text{CH}_2)$	<b>-(C)-CH<sub>2</sub>, -(O)-CH<sub>2</sub>-</b> (může se překrývat s pásem Ar, -CH <sub>3</sub> )	1305-1295 (odkaz platí pouze pro <b>-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-</b> <b>n&gt;2</b> )
1470-1440	m	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	<b>-(C)-CH<sub>3</sub>, -(O)-CH<sub>3</sub></b> (může se překrývat s pásem Ar, -CH <sub>2</sub> -)	1395-1345
1450-1390	w	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	<b>CH<sub>3</sub>-(C=O)-O-, CH<sub>3</sub>-N&lt;, CH<sub>3</sub>-(C=O)-C-, CH<sub>3</sub>-(S=O)-C-</b>	1385-1300
1445-1385	m	$\delta(\text{CH}_2)$	<b>-CH<sub>2</sub>-X, X:-(C=O)-, -COOR, -C=C-, -C≡C-, Ar, -CN, NO<sub>2</sub>, Cl, Br</b>	785-720
1395-1345	w-m	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	<b>CH<sub>3</sub>-(C)-, CH<sub>3</sub>-(O)-</b> dublet typický pro rozvětvení	1255-1130 (odkaz platí pouze pro dublet)
1385-1330	w-m	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	<b>CH<sub>3</sub>-(C=O)-, CH<sub>3</sub>-(C=O)-O-</b>	-
1370-1310	w-m	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	<b>CH<sub>3</sub>-(N&lt;)</b>	-
1360-1320	w	$\delta(\text{CH})$	<b>-C-H, nasyc.</b>	-
1340-1300	w	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	<b>CH<sub>3</sub>-(S=O)-C-</b>	-
1305-1295	m	$\delta(\text{CH}_2)$	<b>-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-</b> <b>n&gt;2, intenzita roste s n</b>	1100-1040
1255-1245	m	$\nu(\text{CC})$	<b>-C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	1225-1165
1225-1165	m	$\nu(\text{CC})$	<b>-C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	1020- 980
1175-1165	w	$\nu(\text{CC})$	<b>-CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	1150-1130
1150-1130	w	$\nu(\text{CC})$	<b>-CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub></b>	955- 900
1100-1040	m-s	$\nu(\text{CCC})$	<b>-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-</b>	900-800
1020- 980	m-s	$\nu(\text{CC})$	<b>-C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub></b>	930- 925

930- 925	m		$-C(CH_3)_3$	360-270
955- 900	m		$v(CC), \delta(CCH) -CH(CH_3)_2$	840-790
900-800	m-s	skeletální	$-(CH_2)_n-$	750-720
840- 790	m	skeletální	$-CH(CH_3)_2$	495-490
785- 750	vw	$\rho(CH_2)$	$-CH_2-CH_x, x \neq 2$	-
750- 735	vw	$\rho(CH_2)$	propyl, $(CH_2)_n-(O)-, n > 4$	-
735- 720	vw	$\rho(CH_2)$	$(CH_2)_n-(C)-, n > 3$	-
495-490	m	skeletální	$-CH(CH_3)_2$	-
360- 270	m		$-C(CH_3)_3$	-

### aldehydy

2850-2800	w	$v(CH)$	$-CHO$	2745-2650
			někdy raménko pásu pod $2745 \text{ cm}^{-1}$	
2745-2650	s-m	$v(CH)$	$-CHO$	1745-1650
			efekt Fermiho resonance	
1745-1650	w-m	$v(C=O)$	$-CHO$	1440-1325
			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	s-m	$\delta(CH)$	$-CHO$	975-780
975- 780	m	$\gamma(CH)$	$-CHO$	-

### thioly

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

### fosfiny

2460-2100	m-w	$v(PH)$	$-PH$	1150-965
1150-965	m-w	$\delta(PH)$	$-PH$	-

### isokyanáty

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

### nitrily

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

### thiokyanáty

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

### isothiokyanáty

2150-1990	m,br	$v_{as}(N=C \equiv S)$	$-N=C=S$	1250-925
1250-925	s	$v_s(N=C \equiv S)$	$-N=C=S$	690-650
690-650	s	$\delta_s(N=C \equiv S)$	$-N=C=S$	-

### $\beta,\gamma$ -laktony

1840-1770	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\beta,\gamma$ -laktony	1370-1160
1370-1160	w	$\nu(\text{CO})$	$\beta,\gamma$ -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-, $\alpha,\beta$ -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-, $\alpha,\beta$ -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', $\alpha,\beta$ -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', nasyčené ketony	1325-1175
1705-1650	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	ArCO-, $\alpha,\beta$ -nenas. ketony	1320-1280
1325-1175	m-w	$\nu(\text{CC})$	R-CO-R' (často obtížně rozpoznatelný)	1170-1095
1320-1280	m	$\delta(\text{C-CO-C})$	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 <sub>2</sub>	1385-1315
1385-1315	s-vs	$\nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)$	-NO <sub>2</sub>	1180-850
1180- 850	s-m	$\nu(\text{CN})$	-C-NO <sub>2</sub>	-

**Poznámka:** <sup>(1)</sup> Valenční vibrace  $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$  by měla být správně označena  $\nu_{\text{d}}(\text{CH}_3)$ . Označení  $\nu_{\text{as}}$  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:  $\nu$  - valenční,  $\delta$  - deformační,  $\gamma$  - mimorovinný,  $\omega$  - kývavý (anglicky wagging),  $\rho$  - 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. - kombináční pásy. R - alkyl, Ar - aryl.