

Chromophore in der IR-Spektroskopie

1. Alkylgruppen

	ν (C-H)	δ (C-H)	δ (CH) rocking
allgem.:	3000 – 2850	1470 – 1430; 1390 - 1370	720 w
C-CH ₃	2× s	1× 1×	-
-CH ₂ -	2× s	1× -	1× (n ≥ 4)
-CH-	1× bei 2890 – 2880 w		

In Cyclopropanan, Epoxiden, Azirinen, sowie bei Halogensubstitution ca 3050 cm⁻¹ w

In S-CH₃, N-CH₃, O-CH₃ O-CH₂-O: 2780 – 2850 m

2. Alkene

	ν (C-H) : 3100 – 3000 m	ν (C=C) 1700 – 1600	δ (C-H) 1000 – 600
	3080	1645 m	990 s, 910 s
	3080	1655 m	890 s
	3020	1660 m	730 – 675 („cis-Peak“)
	3020	1675 w	965 s
	3020	1670 w	840 – 800

3. Aromatische Ringe

ν (C-H): 3100 – 3000; Ober- und Kombinationsschwingungen: 2000 – 1600. Z. T. sehr schwach

ν (C=C): 1630 – 1460 oft 3: 1600/1580/1500; fingerprint: 1225 – 950

δ (C-H): 950 – 600 „Substitutionsmusterbanden“

Substitution	Bande	Substitution	Bande	Substitution	Bande
Mono	770 – 730 710 - 690	Tri-1,2,3	780 – 760 745 – 705	Tetra-1,2,4,5	870 – 855
di-ortho	770 - 735	Tri-1,3,5	865 – 810 730 – 675	Tetra1,2,3,5	850 – 840
di-meta	810 – 750 710 – 690	Tri-1,2,4	825 – 805 885 – 870	Penta	870
di-para	840 - 810	Tetra-1,2,3,4	810 - 800	Hexa	-

3. Dreifachbindungen und kumulierte Doppelbindungen: 2300 - 1900

Terminale Alkine: ν = 2140–2100 und ν (C-H): 3300 s Interne Alkine: 2260–2150 (vw – s)

Nitrile: 2260 – 2200 Isonitrile 2160 – 2100 Diazoniumgruppen: 2250 s

Allene: 1950 m Azide: 2160 – 2120 Diazoverbindungen: 2120 – 2080 s Ketene: 2170 – 2140 Isocyanate: 2275 – 2250 Isothiocyanate: 2140 – 1990 CO₂: 2370

4. Carbonylgruppen ν (C=O) : 2000 – 1600

Ketone 1725 - 1705

Arylketone 1700 - 1680

α - β -ungesättigte Ketone 1680 – 1665

α , β , α' , β' -ungesättigte Ketone 1670 – 1660

Diarylketone 1670 – 1660

Cyclische Ketone: \geq 6-Ring 1725 – 1705

Cyclopentanone 1750 – 1740

Cyclobutanone 1780

Aldehyde: ν (C=O) und ν (C-H) bei 2820 und 2720

Gesättigt: ν (C=O): 1740 - 1720

Aryl-substituiert: 1715 – 1695

α , β -ungesättigt: 1705 – 1680

enolisierter β -Ketoaldehyd 1670 – 1645

Ester:

Gesättigt: ν (C=O) 1750 – 1735 ν (C-O) 1300 – 1050, meist 2 Banden

Aryl und α , β -unges. 1730 – 1725 (Benzoeester, Acrylester)

Vinylester, Phenylester 1800 - 1750

Caprolacton 1730

Valerolacton 1750

Butyrolacton 1770

Propiolacton 1840

Carbonsäuren: 1700 – 1725 Carboxylate: 1610 – 1550 und

Ungesättigt 1680 – 1710 1420 - 1300

Carbonsäureanhydride 1850 – 1800 und 1790 – 1740 sowie ν (C-O) 1300 – 1050

Aryl- und ungesättigt 1830 – 1780 und 1770 – 1710

5-Ring-anhydride 1870 – 1820 und 1800 – 1750

Carbonsäurechloride

Gesättigt: 1815 – 1790

Unges. 1790 - 1750

Carbonsäureamide, Lactame, Harnstoffe, Imide: 1700 – 1600 ν (C=O) „Amid-I“, 1600 – 1500 ν (N-H) „Amid-II“ – Verbindungen mit NH-Gruppen zeigen starke Abhängigkeit der Valenzschwingungslage von Präparation und Konzentration wegen Beeinflussung der Wasserstoffbrückenbindungen.

Halogenverbindungen:

Alkyl-F	1365 – 1120	Aryl-F:	1270 – 1100
Alkyl-Cl	830 – 560	Aryl-F	1100 – 1030
Alkyl-Br	630 – 515	Aryl-Br	1075 - 1030
Alkyl-I	ca 500	Aryl-I	ca 1060

Alkohole, Phenole:

Freie OH-Gruppe:	3650 – 3590		
OH in H-Brücken	3600 – 3200		
δ (OH)	1410 – 1260		
ν (C-O)	1150 – 1040	Ether:	1150 – 1070

Amine

ν (N-H) 3500 – 3300

Nitroverbindungen

ν (N=O) ca. 1560 und ca. 1350

deuterierte Verbindungen: ν (C-D) etwa bei ν (C-H) / 1.37