

Segue: **Tab. 2.10** - Assorbimento del carbonile (C=O)

Gruppo	Banda	Note
Aldeidi		
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C} \\ \\ \text{H} \end{array}$		
(Per (C—H) cfr. anche la Tab. 2.2). Tutti i valori riportati si abbassano di $\approx 10\text{-}20\text{ cm}^{-1}$, quando gli spettri sono rilevati in film liquidi o allo stato solido. Con rilevazioni in fase gas essi aumentano di $\approx 20\text{ cm}^{-1}$.		
Sature	1740–1720	
Aril—CHO	1715–1695	gruppi o-idrossilici o amminici spostano questi valori verso $1655\text{-}1625\text{ cm}^{-1}$ per formazione di legami a ponte di H
α, β -insature	1705–1680	
$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ -insature	1680–1660	
β -chetoaldeidi in forma enolica	1670–1645	abbassamento con ponti di H di tipo chelato

Chetoni		
$\begin{array}{c} \text{R} \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagup \\ \text{R} \end{array}$		
Tutti i valori riportati si abbassano di $\approx 10\text{-}20\text{ cm}^{-1}$ quando gli spettri sono rilevati in film liquido o allo stato solido. Negli spettri in fase gas esso aumentano di $\approx 20\text{ cm}^{-1}$.		
Saturi	1725–1705	
Arilici	1700–1680	
α, β -insaturi	1685–1665	
$\alpha, \beta, \alpha', \beta'$ -insaturi e diarilici	1670–1660	
Ciclopropilici Chetoni con anello a sei e più atomi	1705–1685 valori simili a quelli dei chetoni a catena aperta corrispondenti	(cfr. Fig. 2.17)
Chetoni con anello pentaatomico	1750–1740	la coniugazione con legami (C=C) ecc. influenza questi valori come nei chetoni a catena aperta
Chetoni con anello tetraatomico	≈ 1780	

Gruppo	Banda	Note
α -alogeno chetoni	1745–1725	è influenzata dalla conformazione; i valori più elevati compaiono quando i due alogeni giacciono nello stesso piano di C=O
α, α' -dialogeno chetoni	1765–1745	
1,2-Dichetoni <i>s-trans</i> (per es. a catena aperta)	1730–1710	frequenza di vibrazione di valenza antisimmetrica dei due gruppi C=O; la vibrazione simmetrica è inattiva in IR, ma attiva in Raman
1,2-Dichetoni <i>s-cis</i> , Anello a sei atomi	1760 e 1730	
1,2-Dichetoni <i>s-cis</i> , Anello pentaatomico	1775 e 1760	
<i>o</i> -amino- o <i>o</i> -idrossiaril-chetone	1655–1635	bassa con legami a ponte di H intramolecolari, altri sostituenti, ingombro sterico, ecc. influenzano la posizione della banda
Chinone	1690–1660	C=C generalmente a 1600 cm^{-1} (s)
Tropone	1650	vicino a 1600 cm^{-1} , quando compaiono ponti di H, come nel Tropolone

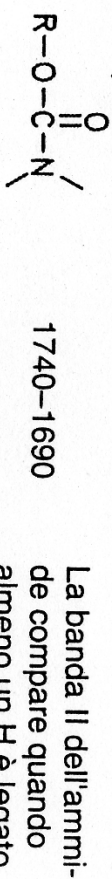
Acidi carbossilici

$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$		
Tutti i tipi	3000–2500	vibrazione di valenza (O—H); un gruppo caratteristico di piccole bande corrispondenti a vibrazioni di combinazione
Saturi	1725–1700	il monomero assorbe vicino a 1760 cm^{-1} , ma è raramente osservato; in spettri di soluzioni due bande possono essere osservate occasionalmente: quella del monomero libero e quella del dimero con legami a ponte di H

Segue: **Tab. 2.10** - Assorbimento del carbonile (C=O)

Gruppo	Banda	Note
Anello esaatomico	≈1640	
Anello pentaatomico	≈1720	

Uretani



Tioesteri e tioacidi

R-CO-SH	1720
R-CO-SR	1690
R-CO-SAr	1710
Ar-CO-SR	1665
Ar-CO-SAr	1685

Tab. 2.11 - Immine, Ossime ecc. >C=N-

Gruppo	Banda	Note
>C=N-H	3400 - 3300 (m)	vibrazione di valenza (N-H); abbassata con ponti di H
>C=N-	1690 - 1640 (v)	di difficile identificazione a causa di grandi differenze di intensità e vicinanza della zona delle vibrazioni di valenza (C=C); le ossime danno in generale bande assai deboli
α, β -insaturo	1660 - 1630 (v)	
Sistemi ciclici coniugati	1660 - 1480 (v)	

Tab. 2.12 - Azocomposti -N=N-

Gruppo	Banda	Note
-N=N-	≈1575 (v)	molto debole o inattivo in IR; di quando in quando compaiono in Raman
$\text{-N}^+=\text{N}^+-\text{O}^-$	≈1570	

Tab. 2.13 - Alcheni >C=C<

Gruppo	Banda	Note
non coniugato	1680-1620 (v)	può essere molto debole, se sostituito più o meno simmetricamente
>C=C<	1680-1620 (v)	
coniugato con anelli aromatici	≈1625 (m)	Più intensa rispetto ai doppi legami non coniugati
Dieni, trieni ecc.	1650 (s) e 1600 (s)	La banda con frequenza più bassa è di solito più intensa e può ricoprire o sovrapporsi alla banda con frequenza più alta
Composti carbonilici α, β -insaturi	1640-1590 (s)	Generalmente molto più debole della banda (C=O)
Esteri enolici eteri enolici e enammine	1690-1650 (s)	

Tab. 2.14 - Gruppi nitro, nitroso, nitrato e nitrito (vibrazioni di valenza N=O)

Gruppo	Banda	Note
$\text{—}\overset{\text{I}}{\underset{\text{I}}{\text{C}}}\text{—NO}_2$	≈ 1560 (s) ≈ 1350 (s)	vibrazione di valenza antisimmetrica e simmetrica del legame NO ₂ ; per coniugazione con legami multipli diminuita di ≈ 30 cm ⁻¹ (vedi Fig. 2.27)
Nitrati R—O—NO_2	1640–1620 (s) 1285–1270 (s)	vibrazione di valenza antisimmetrica e simmetrica
Nitrammine N—NO_2 / /	1630–1550 (s) 1300–1250 (s)	vibrazioni di valenza antisimmetrica e simmetrica
Nitriti R—O—NO	1680–1650 (s) 1625–1610 (s)	le due bande sono attribuite alla forma <i>s-trans</i> e <i>s-cis</i> nel gruppo nitrito
monomero dimerico <i>E</i> <i>Z</i> $\text{—}\overset{\text{I}}{\underset{\text{I}}{\text{C}}}\text{—NO}$	1600–1500 (s) 1290–1190 1425–1370	
Nitrosoammine N—NO	1460–1430 (s)	
N-ossidi aromatici alifatici $\text{R}_3\text{N}^+\text{—O}^-$	1300–1200 (s) 970–950 (s)	la piridina-N-ossido assorbe a 1250 cm ⁻¹ in solventi apolari; sostituenti elettronnattrattori nell'anello aumentano la frequenza e viceversa
NO_3^-	1410–1340 860–800	

Nelle Figure 2.23-2.24c quali esempi illustrativi sono riportati gli spettri IR del toluene e dei tre xiloli isomeri. Lo spettro del triptofano mostra anch'esso le bande caratteristiche di sostituzioni in 1,2.

I valori di Tabella 2.16 valgono approssimativamente anche per sistemi ciclici condensati e piridine (cfr. Fig. 2.29). In generale sostituenti fortemente elettronnattrattori spostano i valori verso frequenze più alte.

Tab. 2.15 - Composti aromatici (vibrazioni di valenza C=C)

Gruppo	Bande	Note
anelli aromatici	≈ 1600 (m) ≈ 1580 (m) ≈ 1500 (m)	più intensa, quando vi è possibilità di coniugazione ulteriore con l'anello arilico di solito la più intensa delle due o tre bande

Tab. 2.16 - Esempio di sostituzione nell'anello benzenico 

Gruppo	Bande	Grado di sostituzione
5 H vicini	770–735 (s) 710–685 (s)	Monosostituzione; in genere due bande (cfr. toluene)
4 H vicini	760–740 (s)	Disostituzione in 1,2 (cfr. 1,2-dimetilbenzene)
3 H vicini	800–770 (s)	Disostituzione in 1,3 Trisostituzione in 1, 2, 3
2 H vicini	840–800 (s)	Disostituzione in 1,4 Trisostituzione in 1,3,4 ecc.
H isolati	900–800 (w)	Disostituzione in 1,3 ecc.; di solito non sufficientemente intensa per essere sfruttabile


Tab. 2.17 - Composti dello zolfo S

Gruppo	Banda	Note
-S-H	2600-2550 (w)	vibrazione di valenza (S-H); più debole di O-H e meno influenzata dai ponti di H. Tale assorbimento è intenso negli spettri Raman
$\text{C}=\text{S}$	1200-1050 (s)	
$\text{C}=\text{N}-\text{H}$	≈3400	vibrazione di valenza (N-H); allo stato solido diminuita fino a 3150 cm ⁻¹
	1550-1460 (s) 1300-1100 (s)	ammide II ammide I
$\text{S}=\text{O}$	1060-1040 (s)	
Solfoni		
SO_2	1350-1310 (s) 1160-1120 (s)	
Solfonammidi		
$\text{R}-\text{SO}_2-\text{N}$	1370-1330 (s) 1180-1160 (s)	
Solfonati		
$\text{R}-\text{SO}_2-\text{OR}'$	1420-1330 (s) 1200-1145 (s)	
Solfati		
$\text{RO}-\text{SO}_2-\text{OR}'$	1440-1350 1200-1145	

Tab. 2.18 - Composti del fosforo P

Gruppo	Banda	Note
P-H	2400-2350 (s)	netta
P-fenile	1440 (s)	netta
P-O-alchile	1050-1030 (s)	
P-O-arile	1240-1190 (s)	
P=O	1300-1250 (s)	
P-O-P	970-910 (s)	larga
O \parallel $\text{P}-\text{OH}$ \mid	2700-2560 1240-1180 (s)	O-H in ponti di H vibrazione di valenza (P=O)-

Tab. 2.19 - Gruppi funzionali con legami C—O semplici
Zona spettrale di forti sovrapposizioni! Le bande acquistano significato solo se accompagnate anche da altre indicazioni strutturali a colori

Gruppo	Banda	Note
Alcoli $\text{C}-\text{OH}$	1250-1000 (s)	alcoli primari verso il limite inferiore della regione, quelli terziari ed i fenoli verso il limite superiore, spesso doppietto
Eteri $\text{C}-\text{O}-\text{C}$	1150-1070 (s)	talvolta suddiviso (vedi Fig. 2.18)
$\text{C}-\text{O}-\text{C}$ //	1275-1200 (s) 1075-1020 (s)	
Epossidi	~1250, ~900, ~800	
		
Esteri $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ \parallel O	1330-1050 (s)	2 bande δ_{as} più intense a lunghezze d'onda basse
$\text{CH}_3\text{CO}-\text{O}-\text{C}$ $\text{RCO}-\text{O}-\text{CH}_3$	~1240 ~1165	vibrazione di valenza anti-simmetriche

Tab. 2.20 - Composti alogenati C-Alogeno

Gruppo	Alchil-alogeno	Arilalogeno
C-F	1365-1120 (s)	1270-1100
C-Cl	830- 560 (s)	1100-1030
C-Br	680- 515 (s)	1075-1030
C-I	≈ 500 (s)	≈ 1060

} vibrazioni di scheletro

Tab. 2.21 - Ioni inorganici

Gruppo	Banda	Note
Ammonio	3300-3030	tutte le bande sono intense
Cianuro, Tiocianato,		
Cianato	2200-2000	
Carbonato	1450-1410	
Solfato	1130-1080	
Nitrato	1380-1350	
Nitrito	1250-1230	
Fosfato	1100-1000	