



МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
кафедра органической химии.

доц. Тарасевич Б.Н.

ИК спектры основных классов органических соединений.

Справочные материалы.

Москва 2012

Введение

В настоящее время в области спектрометрической идентификации органических соединений сложилась парадоксальная ситуация. С одной стороны в интернете, на дисках и в рамках программного обеспечения ИК спектрометров существуют доступные для пользователей массивы справочных данных в виде ИК спектров. В этих условиях роль такого, казалось бы архаичного инструмента, как таблицы должна сойти на нет. Однако, этого не происходит. Справочные таблицы незаменимы в процессе освоения метода ИК спектроскопии при решении учебных задач, табличными данными пользуются неспециалисты при эпизодическом обращении к ИК спектрам. Поисковые и экспертные системы зачастую выдают результат в виде нескольких альтернативных структур и окончательный выбор осуществляется пользователем с использованием таблиц или литературных данных.

При интерпретации ИК спектров важно обращать внимание не только на положение максимумов характеристических полос, но и на их интенсивности, форму, расположение относительно других полос. Нижеприведённые таблицы снабжены рисунками - схематическими изображениями характеристических участков спектров отдельных классов органических соединений и фрагментами ИК спектров реальных соединений, что на наш взгляд должно помочь при интерпретации. Автор будет благодарен читателям за пожелания и замечания.

При составлении настоящих таблиц автор использовал следующие известные издания:

1. Э.Преч, Ф.Бюльманн, К.Аффольтер, Определение строения органических соединений, изд. "Мир", "БИНОМ лаборатория знаний", М., 2006;

2. Л.Беллами, Инфракрасные спектры сложных молекул, ИЛ, М., 1963;

3. Л.Беллами, Новые данные по ИК спектрам сложных молекул, изд. "Мир", М., 1971;

4. К.Накамото, ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений, изд. "Мир", М., 1991;

Обозначения и сокращения

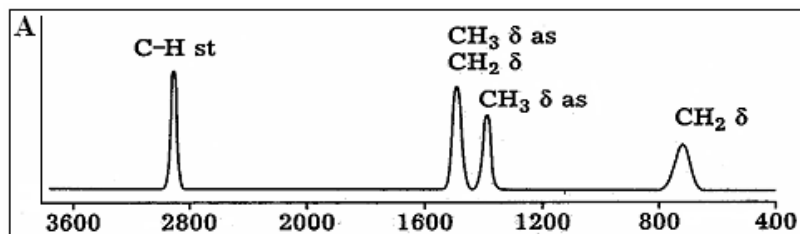
ar	ароматическое колебание
as	антисимметричное колебание
comb	комбинационная частота
hal	галоген
ip	плоскостное колебание (in plane)
oop	внеплоскостное колебание (out of plane)
sh	плечо полосы (shoulder)
st	валентное колебание (stretch)
sy	симметричное колебание
эксп	эксперимент
δ	деформационное колебание
γ	скелетное колебание
ν	частота, валентное колебание
с.	сильная полоса
ср.	полоса средней интенсивности
пер.	полоса переменной интенсивности
сл.	слабая полоса
оч. сл.	очень слабая полоса
шир.	широкая полоса

Оглавление

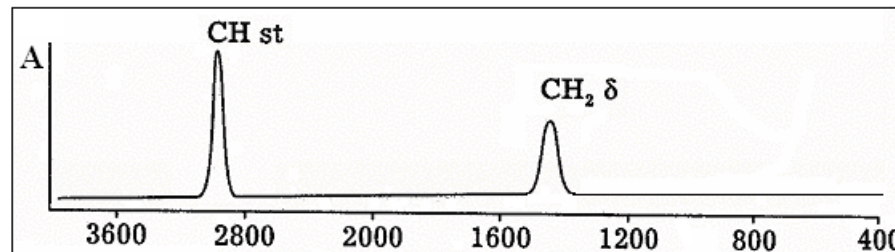
Введение.....	2
Колебания связей С-Н в алканах.....	4
Алкены.....	5
Кумулированные двойные связи.....	8
Алкины.....	9
Ароматические соединения.....	11
Спирты и фенолы.....	12
Простые эфиры, эпоксиды, перекиси.....	14
Альдегиды и кетоны.....	16
Карбоновые кислоты.....	19
Сложные эфиры и лактоны.....	21
Производные карбоновых кислот.....	23
Амиды кислот, пептиды, лактамы, уретаны(карбаматы).....	25
Аминокислоты, белки.....	28
Амины, имины и их соли.....	29
Непредельные азотсодержащие соединения.....	31
Соединения, содержащие связи азот-кислород.....	33
Гетероциклические соединения.....	36
Галогенпроизводные органических соединений.....	37
Серосодержащие функциональные группы.....	39
Металлоорганические соединения. Металлоалканы.....	41
Частоты валентных колебаний (см^{-1}) связей углерод-углерод и металл-углерод в винильных и ацетиленовых металлоорганических соединениях.....	42
Частоты валентных колебаний (см^{-1}) связей металл-углерод N(MC) и металл-галоген N(MX) в металлгалогенидных соединениях.....	43
Частоты колебаний связей металл-кольцо n(MK) в циклопентадиенильных комплексах MCp_2 (D_{5d} или D_{5h}).....	44
Частоты колебаний (см^{-1}) металл-кольцо n(MK) в дибензольных комплексах MPh_2	44
Частоты колебаний (см^{-1}) C=O и M-C в мооядерных карбонилах металлов.....	44
Соединения бора.....	45
Фосфорорганические соединения.....	46
Кремнийорганические соединения.....	48
Неорганические ионы и молекулы.....	50
Влияние изотопического замещения на частоты колебаний.....	52

Колебания связей С-Н в алканах

Alk

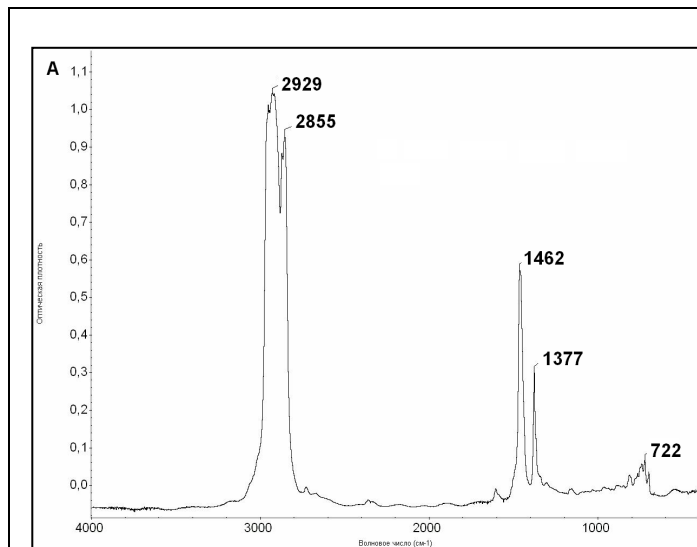


Поглощение в алканах.

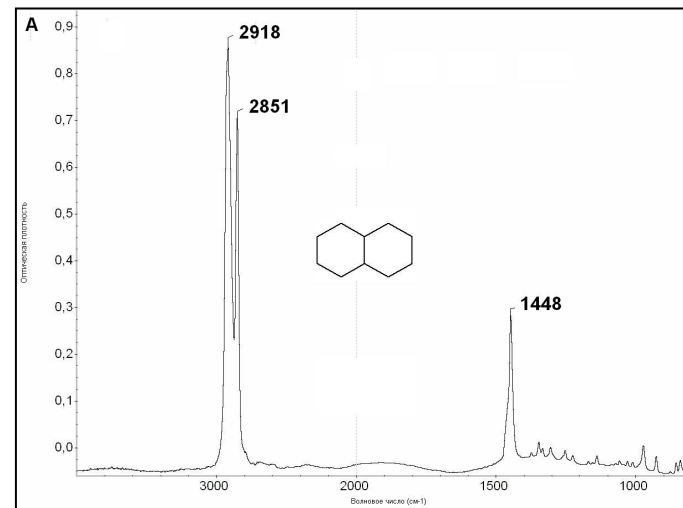


Поглощение в циклических алканах.

СТРУКТУРНЫЕ ФРАГМЕНТЫ 1	ВОЛНОВЫЕ ЧИСЛА CM^{-1} (ДЛИНА ВОЛНЫ МКМ) 2	ТИПЫ КОЛЕБАНИЙ, (ИНТЕНСИВНОСТИ) 3	КОММЕНТАРИИ 4
-CH ₃	2975-2950 (3,36-3,39) 2885-2860 (3,47-3,50) 1470-1435 (6,80-6,97) 1385-1370 (7,22-7,30)	ν_{as} (с.) ν_{s} (с.) δ_{as} (ср.) δ_{s} (с.)	Для присоединённых к гетероатомам CH ₃ групп: O-CH ₃ 2830-2815 cm^{-1} , N-CH ₃ 2820-2730 cm^{-1} C-CH ₃ 1375 cm^{-1} , N-CH ₃ 1426 cm^{-1} , O-CH ₃ 1455 cm^{-1} , P-CH ₃ 1299 cm^{-1} , S-CH ₃ 1325 cm^{-1}
-CH ₂ -	2940-2915 (3,40-3,45) 2870-2845 (3,49-3,52) 1480-1440 (6,76-6,94)	ν_{as} (с.) ν_{s} (с.) δ , (ср.), CH ₂ ножничное	В случае -CH ₂ -CO- проявляются в виде сильных узких полос области 1400-1440 cm^{-1}
(CH ₂) _x	720-740 (13,89-13,50)	δ , (ср.), CH ₂ маятниковое	Иногда дублет в твердом состоянии (полиэтилен).
-CH ₂ - в циклопропане	3080-3040 (3,25-3,29) 1020-1000 (9,80-10,0)	ν_{as} (ср.) скелетное (ср.)	То же для эпоксисоединений.
C(CH ₃) ₂	1385-1370 (7,22-7,30) 1370-1365 (7,30-7,33) 1145 (8,73), 1179(8,55)	δ , (ср.), δ , (ср.),	Две полосы примерно равной интенсивности.
-C(CH ₃) ₃	1395-1385 (7,17-7,22) 1365 (7,33)		Две полосы с отношением интенсивностей примерно 1:2.

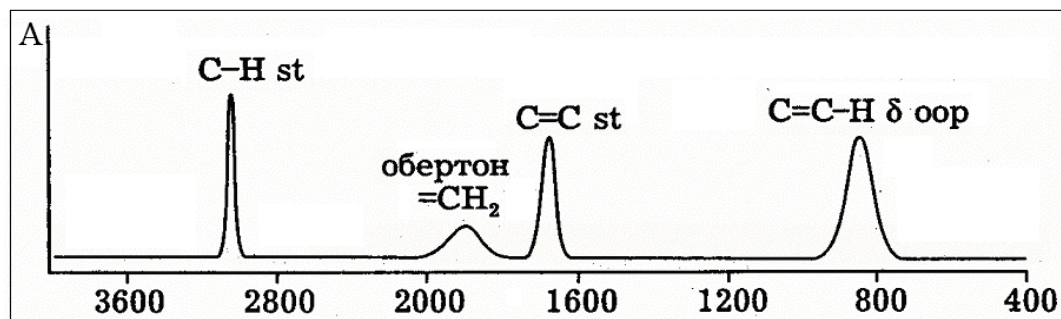
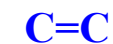


Пример. ИК спектр дизельного топлива (смесь углеводородов).



Пример. ИК спектр декалина.

Алкены.



Поглощение в алкенах.

Валентные колебания связей C-H в алкенах

HRC=CH ₂	3095-3010 (3,29-3,32)	ν _{as} ср.	В эту область попадают валентные колебания C-H ароматических, гетероароматических, малых циклов, галогенированных алкильных групп.
	2975 (3,37)		
	3040-3010 (3,29-3,32)	ν _s ср.	
		ν _{C-H} ср.	

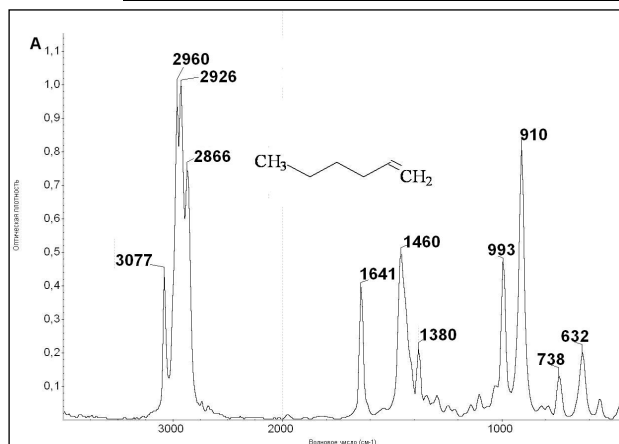
$RR'C=CH_2$	3095-3075 (3,23-3,25)	ν_{C-H} ср.	
$HRC=CR'H$ цис-	3040-3010 (3,20-3,32)	ν_{C-H} ср.	
$HRC=CR'H$ транс-	3040-3010 (3,29-3,32)	ν_{C-H} ср.	
Деформационные колебания связей C-H в алкенах и типы замещения при двойных связях			
$HRC=CH_2$	1850-1800 (5,41-5,56) 1420-1410 (7,04-7,09) 1300-1290 (7,69-7,75) 995-985 (10,05-10,15) 915-905 (10,93-11,05)	Обертон δ_{CH} плоское δ_{CH} плоское δ_{CH} неплоское δ_{CH} неплоское	Концевая винильная группа. Частоты плоских колебаний попадают в область ν_{C-C} и δ_{C-H} в насыщенных соединениях, они имеют пониженную по сравнению с неплоскими колебаниями интенсивность.
$RR'C=CH_2$	1800-1750 (5,56-5,62) 1420-1410 (7,04-7,09) 895-885 (11,17-11,30)	Обертон δ_{CH} плоское	Концевая метиленовая группа.
$HRC=CR'H$ цис-	1420-1400 (7,04-7,14) 730-665 (13,70-15,04)	δ_{CH} плоское δ_{CH} неплоское	
$HRC=CR'H$ транс-	1310-1290 (7,63-7,75) 980-960 (10,20-10,42)	δ_{CH} плоское δ_{CH} неплоское	
$RR'C=CR'H$	850-790 (11,76-12,66)	δ_{CH} неплоское	Тризамещение при двойной связи, слабая полоса.
Наиболее характеристичными являются полосы неплоских деформационных колебаний в области $1000 - 650 \text{ см}^{-1}$.			

Валентные колебания связей C=C в алкенах

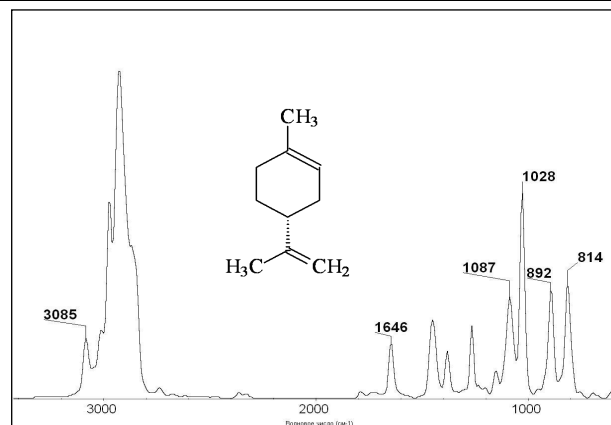


C=C несопряж.	1680-1620 (5,95-6,17)	пер.	Как правило малоинтенсивная полоса.
$HRC=CH_2$	1645-1640 (6,08-6,10)	ср.	Концевая винильная группа.
$RR'C=CH_2$	1660-1640 (6,02-6,10)	ср.	Концевая метиленовая группа.
$HRC=CR'H$ цис-	1665-1635 (6,01-6,12)	ср.	Интенсивность понижается при увеличении симметрии молекулы, в симметричных структурах полоса может отсутствовать.
$HRC=CR'H$ транс-	1675-1665 (5,97-6,00)	ср.	
$RR'C=CR'H$	1675-1665 (5,97-6,00)	пер.	Тризамещение при двойной связи.

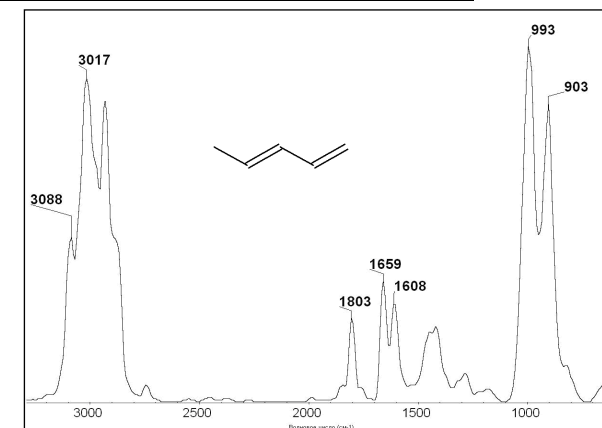
$RR'C=CR''R'''$	1690-1670 (5,92-5,99)	сл.	Тетразамещение при двойной связи.
Диены	1650 (6,06) 1600 (6,25)		Две полосы, интенсивность полосы $\sim 1650 \text{ см}^{-1}$ повышена. В транс-бутадиене-1,3 одна полоса $\nu_{C=C}^{as} \sim 1600 \text{ см}^{-1}$.
Полиены	1650-1580 (6,06-6,33)		Широкая полоса.
C=C, соряженная с фенилом	~ 1625 ($\sim 6,16$)	с.	Повышенная интенсивность, может наблюдаться полоса 1590 см^{-1} .
C=C, соряженная с C=O	1660-1580 (6,02-6,33)	с.	Повышенная интенсивность.
$F_2C=C$	~ 1750 (5,71)	-	В группе $-HC=CH-CF_3$ влияния F не наблюдается. При присоединении к C=C Cl, Br, I частота $\nu_{C=C}$, соответственно, понижается: 1610, 1605, 1593 см^{-1} .



Пример. ИК спектр линейного алкена.



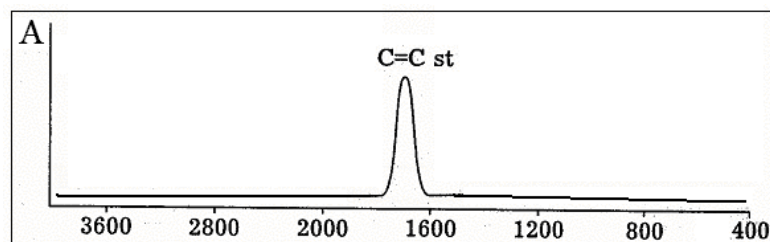
Пример. ИК спектр несопряжённого диена - (R)-лимонена.



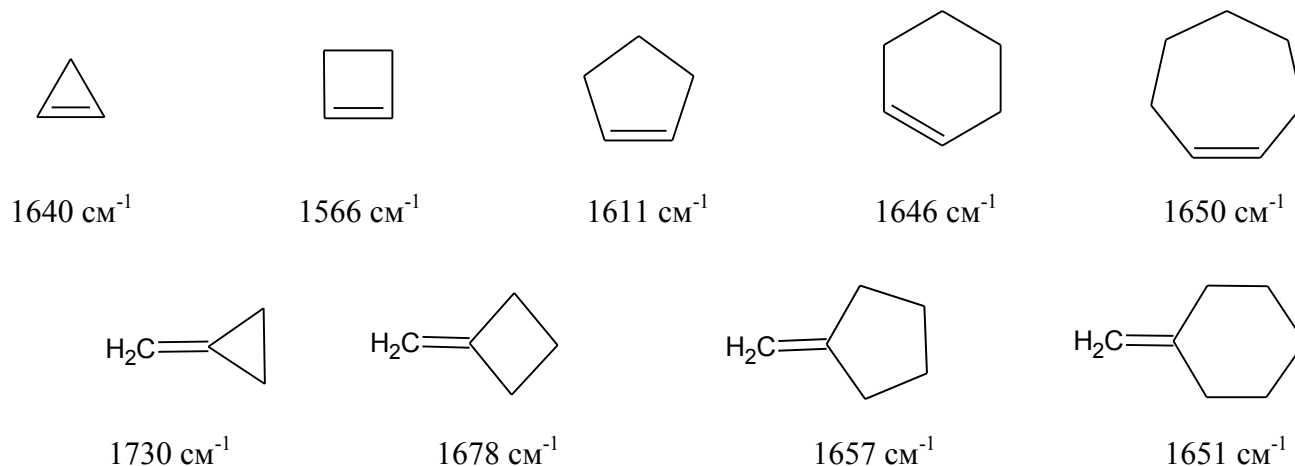
Пример. ИК спектр сопряжённого диена - пентадиена-1,3.

Валентные колебания C=C связей в циклических олефинах

C=C



Поглощение в циклических алкенах.

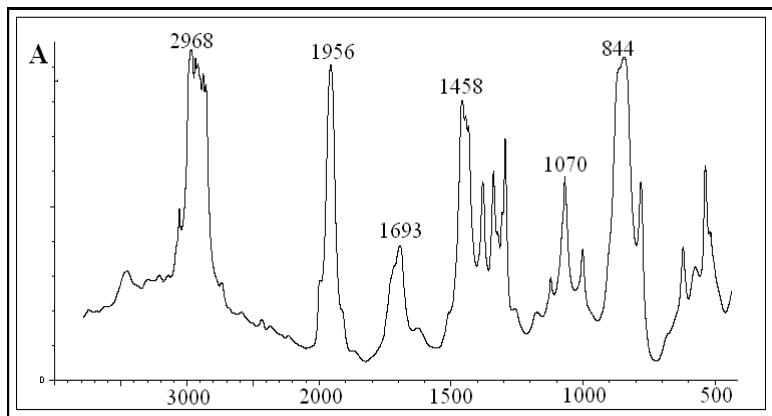


Кумулированные двойные связи

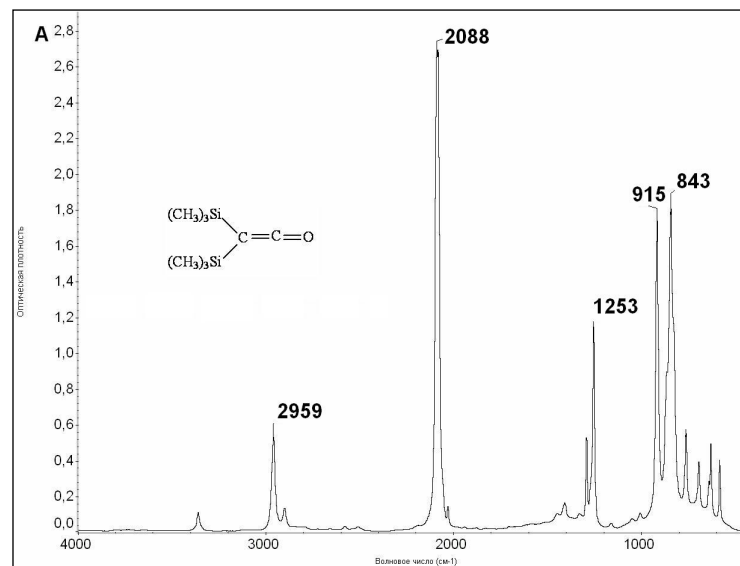


C=C=C C=C=CH_2 (аллены)	1970-1950 (5,08-5,13) 1060 (9,43) 850 (11,76)	ν_{as} ср. ср. $\delta_{\text{C-H}}$ ср.	Дублет 1930-1970 при концевом положении и при присоединении электроотрицательных групп. Верные колебания =CH_2 , для концевых групп.
C=C=O (кетены)	2150 (4,65) 1120 (8,93)	ν (с.) (с.)	
O=C=O , CO_2	2349,3 (4,256)	ν_{as} (оч.с.)	Атмосферный углекислый газ, используется для градуировки.
C=C=N (кетенимины)	~2000 (~5,00)	ν (с.)	
N=C=N (карбодиимиды)	2155-2130 (4,64-4,70) 2145 (4,66), 2115 (4,73)	ν (оч.с.) ν (оч.с.)	Алифатические. Ароматические.
N=C=O (изоцианаты)	2275-2260 (4,39-4,42) 1390-1350 (7,19-7,41)	δ_{as} (с.) ν_{s} (сл.)	Положение не зависит от сопряжения. Не имеет практического применения.
N=C=S (изотиоцианаты)	2140-1990 (4,67-5,26) 2130-2140 (4,70-4,90)	ν (с.) ν (с.)	Алифатические. Ароматические. Другие полосы: 1090 cm^{-1} (с.), 930 cm^{-1} (с.)
-N_3 (азиды)	2160-2120 (4,63-4,72) 1350-1180 (7,41-8,48)	ν_{as} (с.) ν_{s} (ср.)	

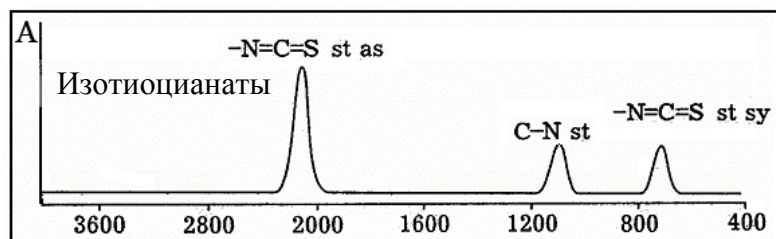
$\text{RHC}=\text{N}^+=\text{N}^-$ $\text{RR}'\text{C}=\text{N}^+=\text{N}^-$ (диазосоединения)	2050-2035 (4,88-4,92) 2030-2000 (4,93-5,00)	ν (с.) ν (с.)	Если R карбонильная группа, $2100\text{-}2080\text{ см}^{-1}$, Если R карбонильная группа, $2075\text{-}2050\text{ см}^{-1}$
---	--	--------------------------	--



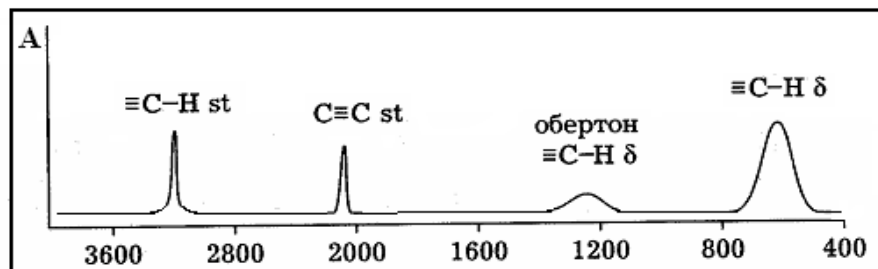
Пример. ИК спектр 1,2-пентадиена.



Пример. ИК спектр кетена.

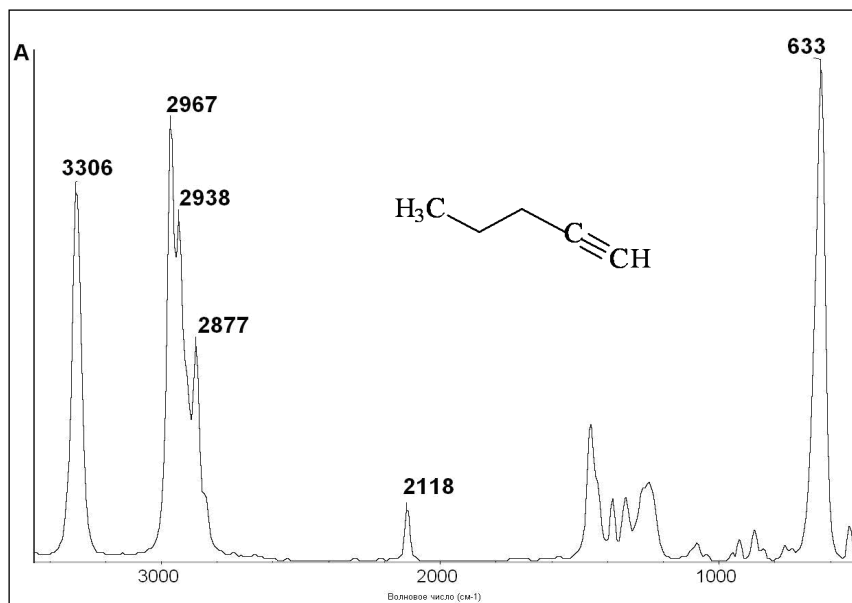


Алкины и тройные связи $\text{C}\equiv\text{N}$ $\text{C}\equiv\text{C}$ $\text{C}\equiv\text{N}$

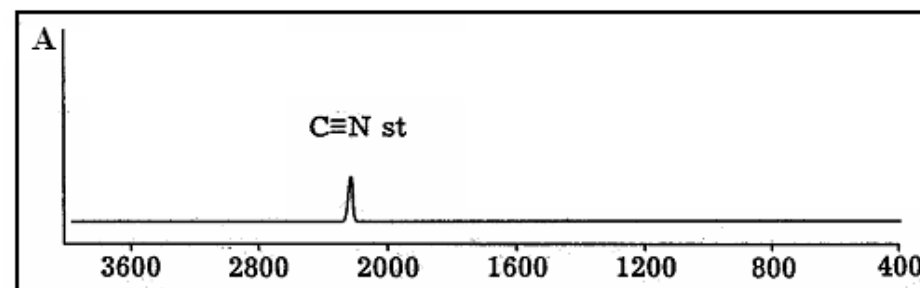


Поглощение в алкинах.

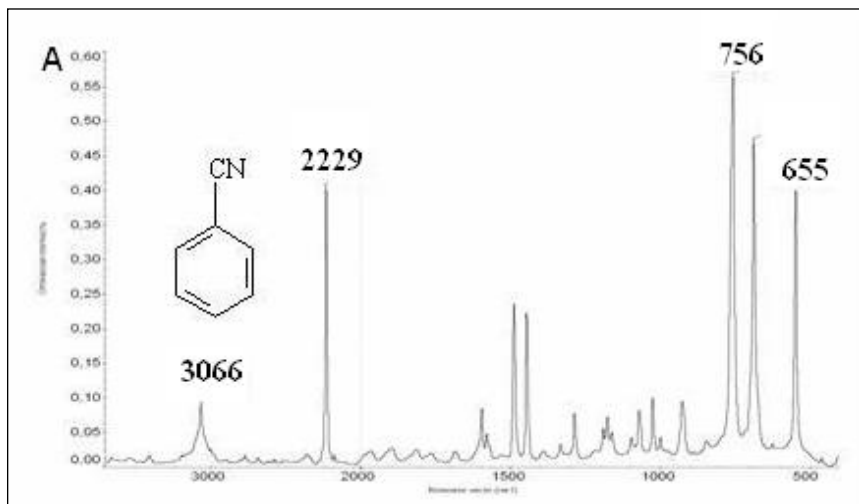
$\equiv\text{C-H}$ (алкины) $\text{R-C}\equiv\text{C-H}$ $\text{R-C}\equiv\text{C-R}'$	3310-3200 (3,02-3,12) 700-600 (14,29-16,67) 2140-2100 (4,67-4,76) 2260-2190 (4,42-4,57)	$\nu_{\text{C-H}}$ (ср. узкая) $\delta_{\text{C-H}}$ (широкая) $\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$ (ср.) $\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$ (оч.сл.)	Интенсивность $\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$ увеличивается при сопряжении с C=O . В симметричных соединениях отсутствует при $\text{R} = \text{R}'$.
R-CN (нитрилы)	2260-2240 (4,42-4,46) 2230-2220 (4,48-4,50) 2240-2200 (4,46-4,50)	ν_{CN} (ср.) ν_{CN} (с.) ν_{CN} (ср.)	Предельные нитрилы. α, β -непредельные ациклические нитрилы. Арилнитрилы.
$\text{R-N}^+\equiv\text{C}^-$ (изонитрилы)	2185-2120 (4,58-4,72)	ν_{CN} (с.)	
$\text{R-S-C}\equiv\text{N}$ (тиоцианаты)	2140 (4,90) 2175-2160 (4,60-4,63)	ν_{CN} (с.) ν_{CN} (с.)	Алифатические. Ароматические.
$-\text{N}_2^+$ (соли диазония)	2300-2230 (4,35-4,49)	ν (с.)	От типа аниона не зависит.



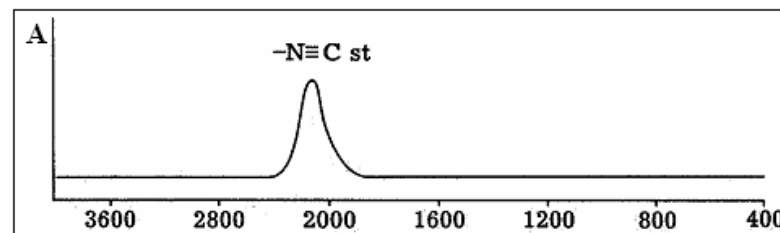
Пример. ИК спектр пентина-1.



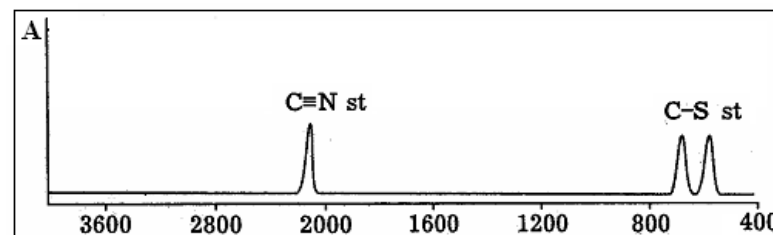
Нитрилы.



Пример. ИК спектр ароматического нитрила.




Изонитрилы.



Тиоцианаты.

Ароматические соединения

Ar

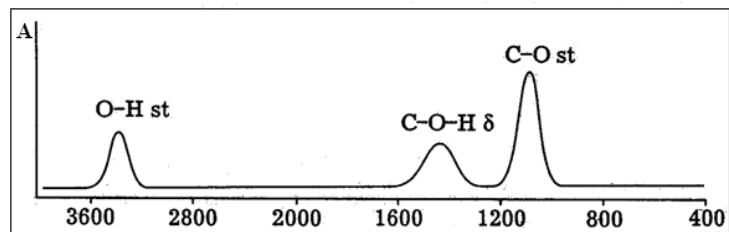
Валентные колебания С-Н связей.			
С-Н	3080-3030 (3,25-3,30)	ν_{CH}	Обычно несколько либо слабых, либо переменной интенсивности полос
Валентные колебания ароматического кольца.			
	1600-1575 (6,16-6,35) 1525-1475 (6,56-7,78) 1590-1575 (6,29-6,36) 1465-1440 (6,38-6,94)	Полосы переменной интенсивности	Пульсационные колебания углеродного скелета. Полоса $\sim 1500 \text{ см}^{-1}$ обычно интенсивнее, чем 1600 см^{-1} . Введение сопряженных заместителей повышает интенсивность этих полос. Полоса 1450 см^{-1} перекрывается полосой деформационных колебаний CH_2 .
Плоскостные деформационные колебания С-Н в области $1225-950 \text{ см}^{-1}$.			
Монозамещенные, 1,3-, 1,2,3- и 1,3,5-замещ.	1175-1125 (8,51-8,89) 1110-1070 (9,01-9,35) 1070-1000 (9,35-10,00)	сл. сл. сл.	Отсутствует у 1,3,5-замещенных.
1,2-, 1,4- и 1,2,4-замещ.	1225-1175 (8,17-8,51) 1125-1090 (8,89-9,17) 1070-1000 (9,35-10,00)	сл. сл. сл.	
1,2-, 1,2,3- и 1,2,4- замещ.	1000-960 (10,00-10,42)	сл.	

Внеплоскостные деформационные колебания С-Н в области 1000-650 см ⁻¹ .			
Монозамещенные	770-730 (12,99-13,70) 710-690 (14,08-14,49)	с. с.	Для алкильных заместителей отнесения надежны, в случае полярных заместителей при отнесении следует соблюдать осторожность.
1,2-замещ.	770-735 (12,99-13,61)	с.	
1,3-замещ.	900-860 (11,11-11,63)	ср.	
1,3-замещ.	810-750 (12,35-13,33) 725-680 (13,74-14,71)	с. ср.	
1,4- и 1,2,3,4-замещенные	860-800 (11,63-12,50)	с.	Для алкильных заместителей отнесения надежны, в случае полярных заместителей при отнесении следует соблюдать осторожность.
1,2,3-замещенные	800-770 (12,50-12,99) 720-685 (13,89-14,60)	с. ср.	
1,2,4-замещенные	860-800 (11,63-12,50) 900-860 (11,11-11,63)	с. ср.	
1,3,5-замещенные	900-860 (11,11-11,63) 865-810 (11,56-12,35) 730-675 (13,70-14,81)	ср. с. с.	
1,2,3,5-, 1,2,4,5-, и 1,2,3,4,5-замещенные	900-860 (11,11-11,63)	ср.	

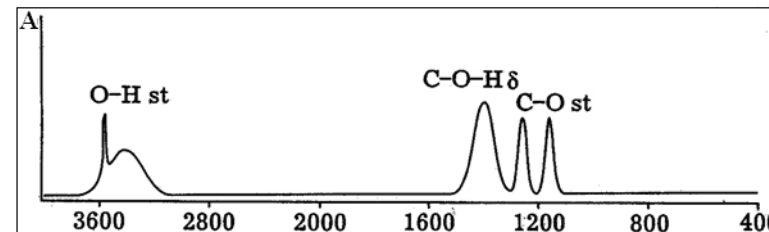
В области 2000 – 1600 см⁻¹ все ароматические соединения имеют группу слабых полос (обертон и составные частоты), число и положение которых определяются типом замещения бензольного кольца.

Спирты и фенолы

R-OH

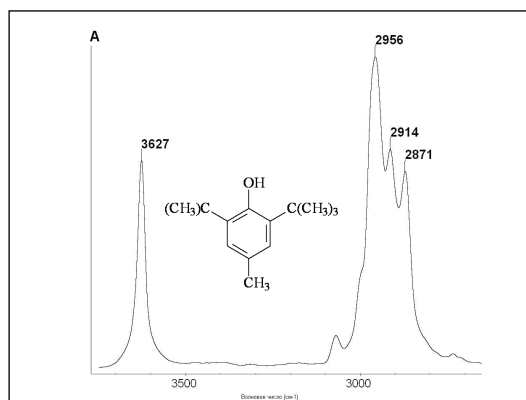


Спирты.

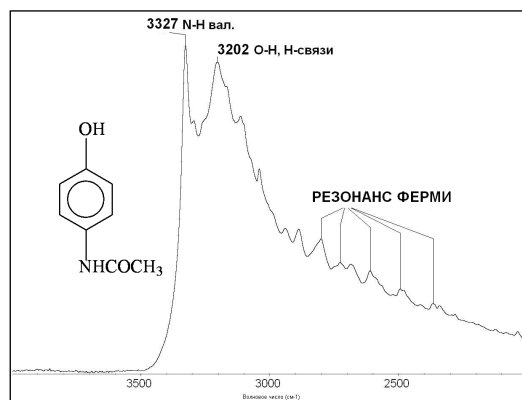


Фенолы.

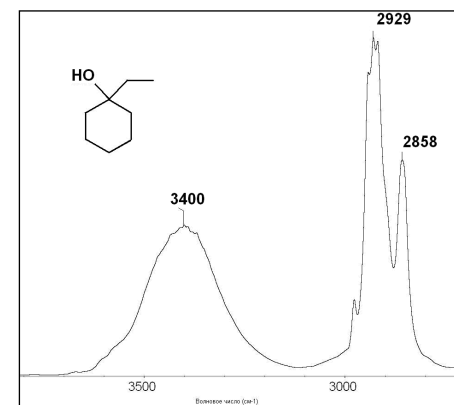
Валентные колебания О-Н			
Свободные группы О-Н	3670-3580 (2,73-2,79)	ν_{OH} , (пер.)	Проявляется в виде узкой полосы в спектрах разбавленных растворов в инертных растворителях или в газовой фазе.
Внутри- и межмолекулярные Н-связи в димерах и полимерах.	3550-3400 (2,82-2,94) 3400-3200 (2,94-3,125)	Широкая интенсивная полоса иногда со сложным контуром.	При разбавлении растворов спирта или фенола в инертном растворителе появляется узкая полоса неассоциированных молекул в случае межмолек. Н-связей, чего не происходит при образовании внутримолек. Н-связей.
В третичных спиртах и в орто-замещенных фенолах возможно появление полосы свободных гидроксильных групп.			
Другие колебания, связанные с группой С-О-Н			
R-O-H	1450-1250 (6,90-8,00)	δ_{OH} (шир.)	Широкие малоинформативные полосы. Колебания связанной ОН группы.
R-O-H	750-650 (13,33-15,38)	δ_{OH} (шир.)	
Первичные спирты	1075-1000 (9,30-10,00)	с.	широкая
	1350-1260 (7,40-7,94)	с.	
Вторичные спирты	1125-1030 (8,93-9,71)	с.	широкая
	1350-1260 (7,41-7,94)	с.	
Третичные спирты	1170-1100 (8,55-9,09)	с.	широкая
	1410-1310 (7,09-7,63)	с.	
Фенолы	1230-1140 (8,13-8,77)	с.	
	1410-1310 (7,09-7,63)	с.	



Пример. Поглощение свободной ОН группы в пространственно затруднённом феноле – ионоле.



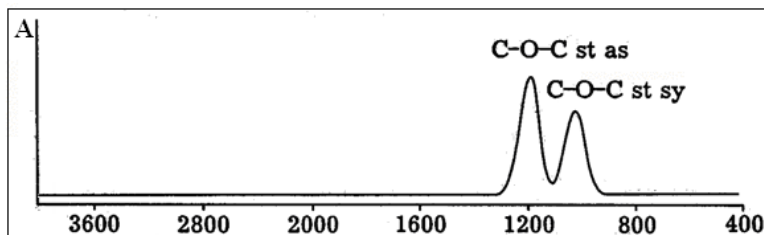
Пример. Поглощение связанной ОН группы в



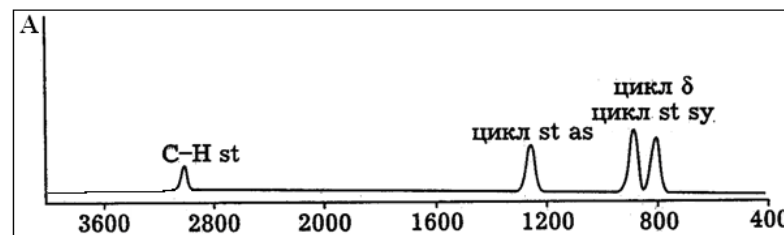
Пример. Поглощение связанной ОН группы в спирте.

Простые эфиры, эпоксиды, перекиси

R-O-R, -O-O-



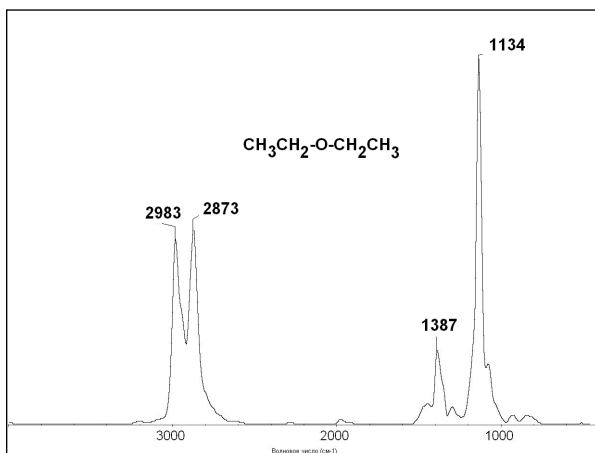
Простые эфиры



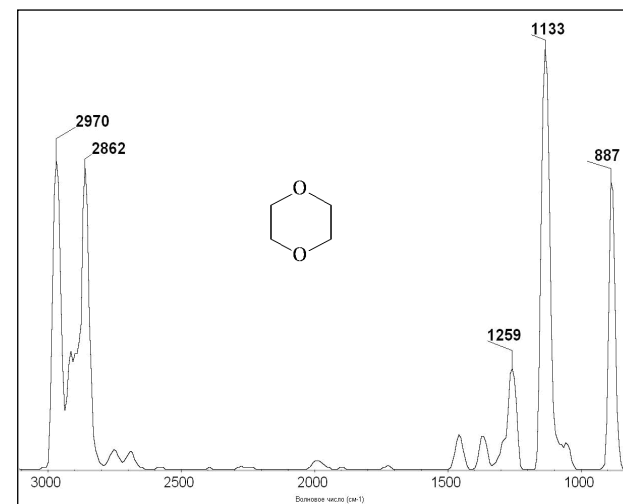
Эпоксиды

Алифатически е -C-O-C- трет C ₃ C-O-	1150-1060 (8,70-9,43) 920-800 (10,87-12,50)	ν_{C-O-C} с. с.	Очень широкая и интенсивная полоса, чувствительная к структурным изменениям. В эту же область попадают полосы средней интенсивности колебаний углеродного скелета.
Ароматические и винильные =C-O-C-	1270-1230 (7,87-8,13) 1075-1020 (9,30-9,80)	с. с.	
Циклические эфиры Эпоксисоедине ния Эфиры с большими циклами Кетали, ацетали -C-O-C-O-C-	1260-1240 (7,94-8,07) 950-860 (10,53-11,63) 865-750 (11,56-13,32) 1140-1070 (8,77-9,35) 1200-1040 (8,34-9,62)	с. пер. ср. с.	Симметричные валентные колебания кольца. Антисимметричные валентные колебания кольца. Группа из 4-5 полос.
Перекиси R-O-O-R Алифатически е Ароматические	890-830 (11,24-12,05) ~1000 (~10)	ν_{O-O} оч. сл. сл.	Первичные гидроперекиси 1488 (6,72), 1435 (6,97) Вторичные гидроперекиси 1352-1334 (7,40-7,50)
Озониды	1060-1040 (9,43-9,62)		Могут наблюдаться полосы $\nu_{C=O}$ продуктов разложения озонидов.

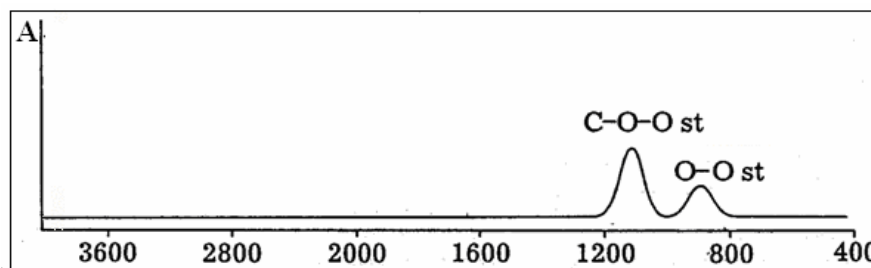
Полосы метоксигруппы.			
Alk-O-CH ₃	2830-2815 (3,53-3,55)	ν_{C-H} ср.	ν_s CH ₃
Ar-O-CH ₃	~2850 (~3,51)	ν_{C-H} ср.	ν_s CH ₃



Пример. ИК спектр диэтилового эфира.



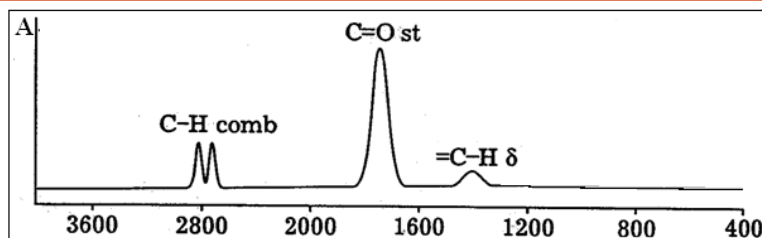
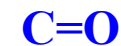
Пример. ИК спектр диоксана.



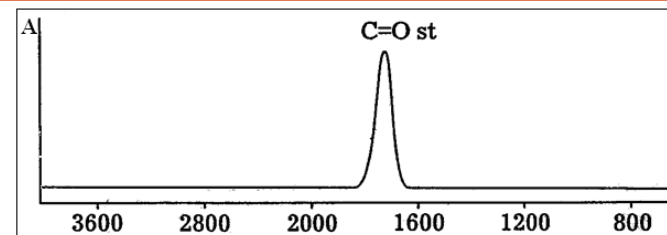
Пероксиды

Литература

Н.А.Шиманко, М.В.Шишкина, Инфракрасные и ультрафиолетовые спектры поглощения ароматических эфиров, “Наука”, М., 1987.

Альдегиды и кетоны


Альдегиды

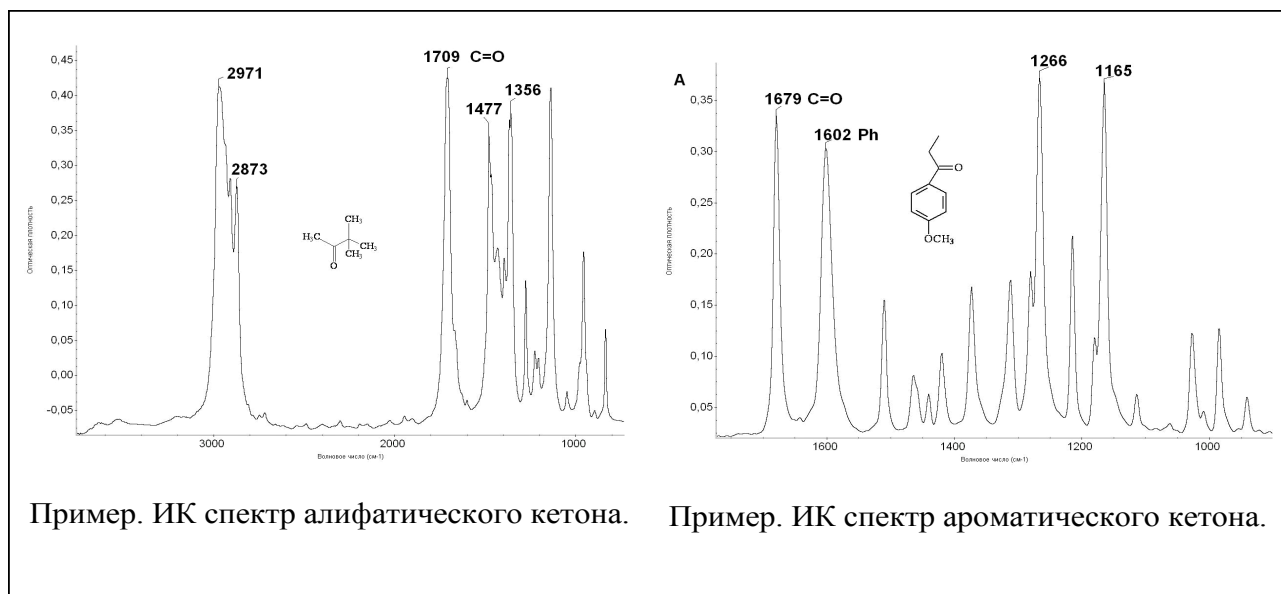


Кетоны

Альдегиды.			
Предельные алифатические -CH ₂ -CHO	1740-1720 (5,75-5,81)	с.	Участие в образовании водородных связей заметно понижает частоту ν_{CO} (например, в случае внутримолекулярной Н-связи в салициловом альдегиде до 1666 см ⁻¹).
α,β – непредельные C=C-CHO	1705-1685 (5,78-5,93)	с.	
Сопряженные полиеновые C=C-C=C-	1680-1660 (5,95-6,02)	с.	
Ароматические	1715-1695 (5,83-5,90)	с.	
Другие колебания	2880-2650 (3,47-3,77) 975-780 (10,26-12,82)	ν_{CH} (сл. или ср.) δ_{CH} (ср.)	Возможно появление двух полос. Полоса средней интенсивности около 2720 см ⁻¹ в сочетании с полосой поглощения C=O является надежным указанием на альдегидную группу.

Кетоны. Валентные колебания $\nu_{C=O}$ в кетонах.			
Алифатические -H ₂ C-CO-CH ₂ -	1725-1700 (5,80-5,88)	с.	На положение полосы $\nu_{C=O}$ влияют следующие факторы: 1) физическое состояние пробы; 2) растворитель(в случае растворов); 3) электронные эффекты ближайших заместителей; 4) сопряжение с кратными связями и ароматическими кольцами; 5) наличие меж- и внутримолекулярных Н – связей; 6) кинематические эффекты заместителей и напряжение циклов в случае циклических структур.
Циклобутанон	1780-1760 (5,62-5,68)	с.	
Циклопентанон	1750-1740 (5,71-5,75)	с.	
Циклогексанон	1720-1700 (5,81-5,88)	с.	
α, β -непредельные C=C-CO	1695-1660 (5,90-6,02)	с.	
C=C-CO-C=C	1670-1660 (5,99-6,02)	с.	
Арилалкилкетоны Ar-CO-Alk	1700-1680 (5,88-5,92)	с.	
Диарилкетоны Ar-CO-Ar	1670-1660 (5,99-6,02)	с.	
α -Галогензамещ. CX-CO	1745-1725 (5,72-5,80)	с.	
α, α' -Дигалогензамещённые CX-CO-CX	1765-1745 (5,67-5,72)	с.	
α -Дикетоны -CO-CO-	1730-1710 (5,78-5,85)	с.	
β -Дикетоны Енольная форма -CO-C=C-OH Кетонная форма CO-CH ₂ -CO	1640-1535 (6,10-6,52) ~1720 (~5,81)	с. с.	В области 3200-2700 см ⁻¹ появляется широкая полоса ν_{OH} . В кетонной форме при компланарном расположении C=O групп в результате колебательного взаимодействия наблюдаются 2 полосы.
-CO-CH ₂ -CH ₂ -CO-	1725-1705 (5,80-5,87)	с.	

1,2- и 1,4-Хиноны.			
6-членный цикл	1690-1660 (5,92-6,02)	с.	Для 1,4- хинонов может наблюдаться более одной полосы.
2 группы С=О в разных циклах.	1655-1635 (6,04-6,12)	с.	
Другие колебания в ИК спектрах кетонов.			
CH ₃ -CO-	1360-1355 (7,35-7,38)	с.	δ_{CH_3}
-CH ₂ -CO-	1435-1405 (6,97-7,12)	с.	δ_{CH_2}
Все кетоны	3550-3200 (2,82-3,13)	сл.	Обертон ν_{CO} , полоса может быть ошибочно отнесена к колебаниям О-Н группы.



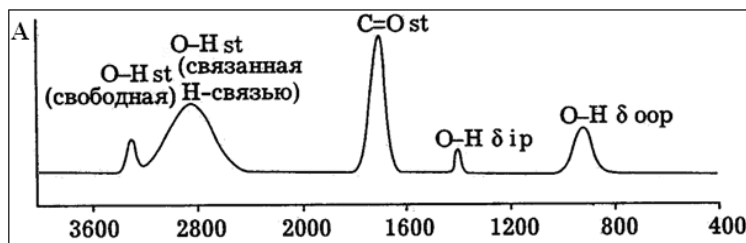
Частоты валентных колебаний карбонильной группы в некоторых соединениях

Alkan(CO)X.

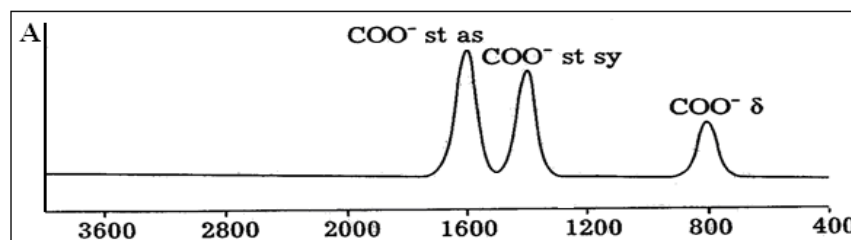
X	ЧАСТОТЫ, CM^{-1}	X	ЧАСТОТЫ, CM^{-1}
Cl	1815-1785	NH ₂	1695-1650
F	~1870	S	1720-1690
Br	1812	SiR ₃	~1620
OR	1750-1735		

Карбоновые кислоты

COOH



Карбоновые кислоты

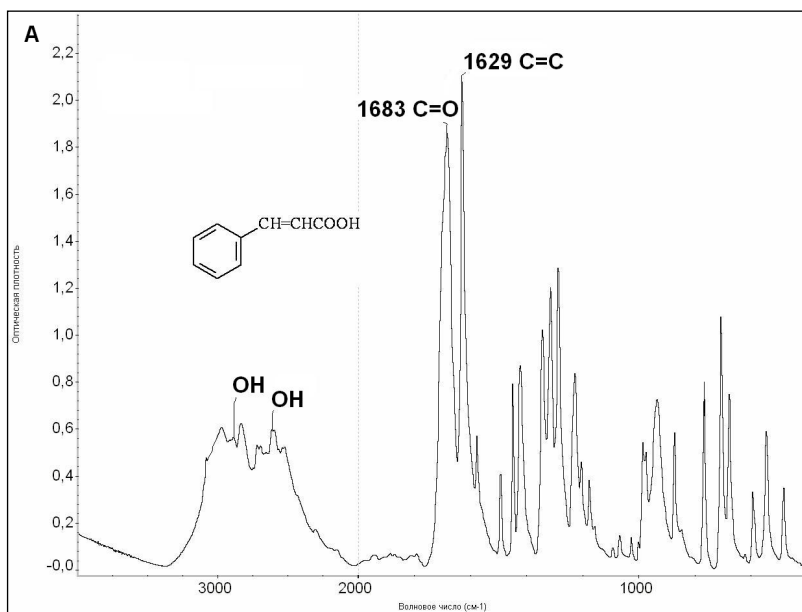


Кабоксилат анион

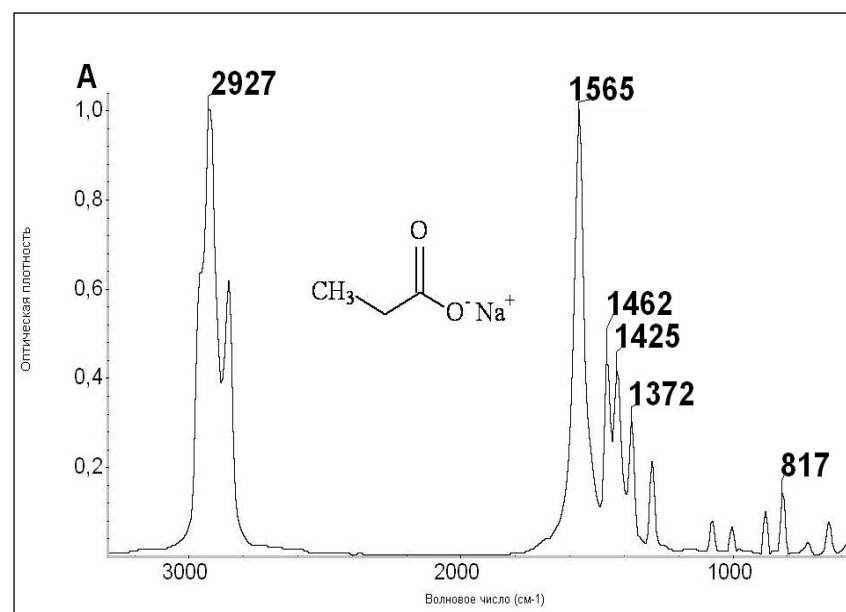
Валентные колебания карбонильной группы.

Предельные алифатические -CH ₂ -COOH	~1760 (~5,68) 1725-1700 (5,80-5,88)	с. с.	Мономеры. Димеры.
α, β -непредельные C=C-COOH	~1720 (~5,81) 1715-1680 (5,83-5,95)	с. с.	Мономеры. Димеры.
Ароматические Ar-COOH	~1720 (~5,81) 1700-1680 (5,88-5,95)	с. с.	Мономеры. Димеры.
α -Галогенк-ты CHX-COOH	1740-1715 (5,75-5,83)	с.	Смещения частот +(10-20 cm^{-1} для Br и Cl); + 50 cm^{-1} для CF ₃ .
Кислоты с Н-связями	1680-1650 (5,95-6,06)	с.	

Колебания гидроксильной группы и С-О связей.			
Свободная группа OH	3550-3500 (2,82-2,86)	ν_{OH} ср.	
Связанная группа OH	3300-2500 (3,00-4,00)	сл.	Широкая полоса или группа полос, часто перекрывается с валентными колебаниями С-Н.
Любая группа OH	955-890 (10,47-11,24)	δ_{OH} пер.	Широкая полоса неплоских деформационных колебаний OH.
О-Н	1440-1395	δ_{OH} пер.	
С-О	1320-1210	ν_{C-O}	
Карбоксилат-анион	1650-1550 ~1400-1300	ν_{C-O}^{as} с. ν_{C-O}^s ср.	Появление двух полос при добавлении триэтиламина к раствору кислоты в CCl_4 и исчезновение ν_{O-H} используют для идентификации кислот.



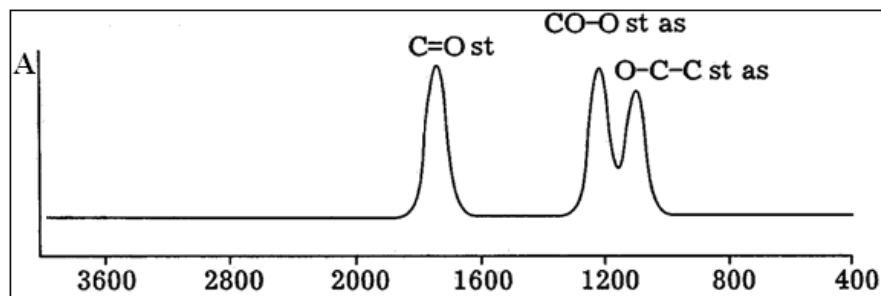
Пример. ИК спектр коричной кислоты



Пример. Натриевая соль пропионовой кислоты.

Сложные эфиры и лактоны

COOR



Сложные эфиры и лактоны

Валентные колебания C=O в сложных эфирах.

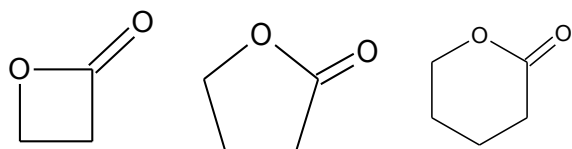
-CH ₂ -COOR	1750-1735 (5,71-5,76)	с.	Предельные алифатические сложные эфиры.
-C=C-COO-R	1730-1715 (5,78-5,53)	с.	α,β-Непредельные сложные эфиры.
Ar-COO-R	1730-1715 (5,78-5,53)	с.	Ароматические сложные эфиры.
-COO-C=C- -COO-Ar	1800-1770 (5,56-5,65)	с.	Виниловые эфиры и эфиры фенолов. Имеется сильная полоса ν _{C=C} при 1690-1650 см ⁻¹ .
β-Кетоэфиры: Енольная форма -COH=CH- COOR Кетонная форма CO-CH ₂ -COOR	1655-1635 (6,04-6,12) ~1735 (~5,76)	с. с.	Широкая интенсивная полоса ν _{C=C} при 1630 см ⁻¹ . β-Кетонная ν _{C=O} при 1750 см ⁻¹ .

Колебания C-O-C в сложных эфирах 1300 – 1000 см⁻¹.

HCOOR	1200-1180 (8,33-8,48)	оч.с., шир.	Формиаты.
CH ₃ COOR	1250-1230 (8,00-8,13)	оч.с., шир.	Ацетаты.
R'-COOR	1200-1170 (8,33-8,55) 1250-1160 (8,00-8,62)	оч.с., шир. оч.с., шир.	Пропионаты. Высшие эфиры.
Эфиры α,β- непредельных алифатических кислот	1310-1250 (7,63-8,00) 1180-1130 (8,48-8,85)	оч.с., шир. оч.с., шир.	Две интенсивные полосы.

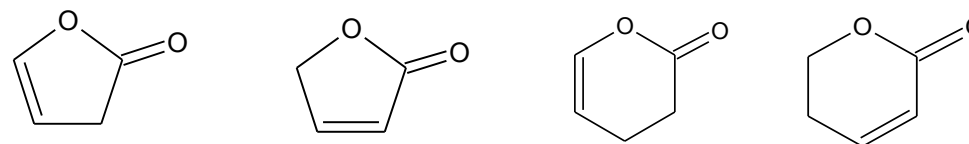
Эфиры ароматических кислот	1300-1250 (7,69-8,00) 1150-1100 (8,70-9,09)	с., шир. с., шир.	
Эфиры первичных спиртов	1064-1031 (9,40-9,70)	с., шир.	
Эфиры вторичных спиртов	~1100 (~9,09)	с., шир.	

Насыщенные лактоны.

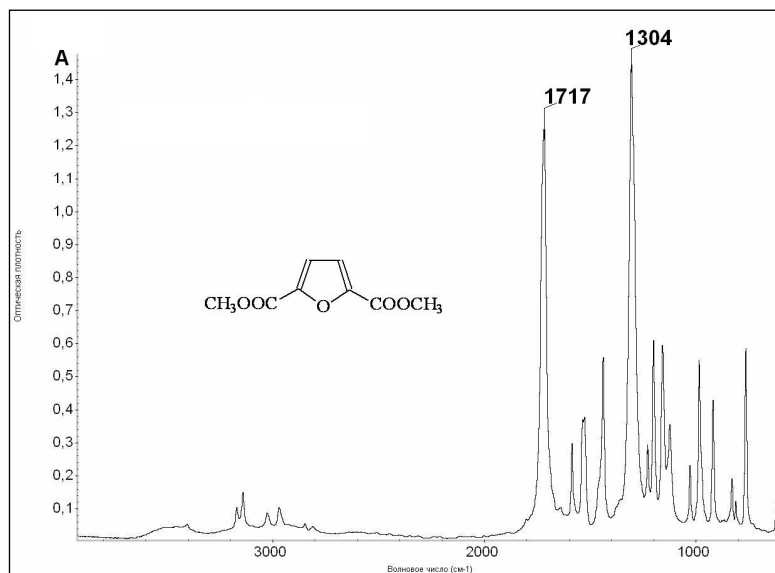


1840 (5,43) 1770 (5,65) 1735 (5,76)

Ненасыщенные лактоны.



~1800 (5,55) ~1750 (5,71) 1760 (5,68) 1720 (5,81)

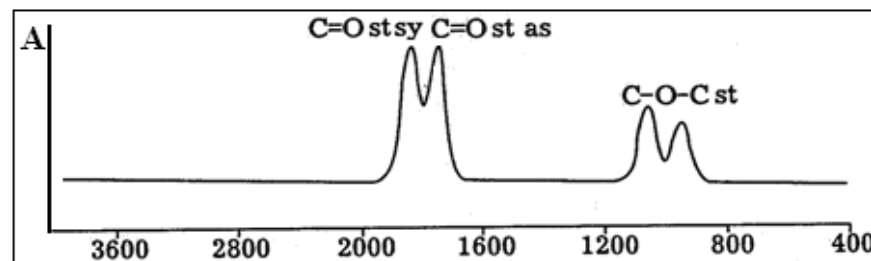


Пример. ИК спектр сложного эфира.

Производные карбоновых кислот

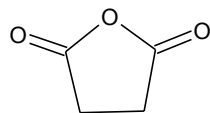


Другие колебания, иногда проявляющиеся в спектрах кислот.			
Твердые жирные кислоты	1350-1180 (7,41-8,48)	сл.	Колебания CH_2 групп, число полос в этой области увеличивается на одну при увеличении числа атомов С на один в цепях C_{16} – C_{21} . Составные частоты.
	1440-1395 (6,94-7,17)	δ сл.	
	1320-1210 (7,58-8,26)	δ с.	
Галогенангидриды карбоновых кислот.			
Насыщенные кислоты Alk- COCl	1815-1785 (5,51-5,60)	ν_{CO} с.	Последовательность частот C=O в галогенангидридах: $\text{RCOBr} > \text{RCOCl} > \text{RCOI}$. ν_{CO} для $\text{RCOF} \sim 1870 \text{ cm}^{-1}$ (5,35)
Ненасыщенные кислоты C=C-COCl	1800-1770 (5,56-5,65) 1750-1700 (5,71-5,88)	ν_{CO} с. сл.	

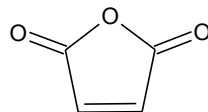


Ангидриды карбоновых кислот $-\text{CO-O-CO}-$ $\nu_{\text{C=O}}$.

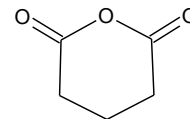
Ациклические насыщенные	1840-1800 (5,44-5,56) 1780-1740 (5,62-5,75) 1175-1045 (8,51-9,57)	ν^s с. ν^{as} с. δ с.	Все ангидриды дают две полосы на расстоянии около 60 cm^{-1}
----------------------------	---	--	--

Валентные колебания C=O групп в циклических ангидридах.


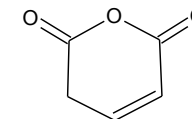
1870-1830 (5,35-5,46)
1800-1760 (5,65-5,68)



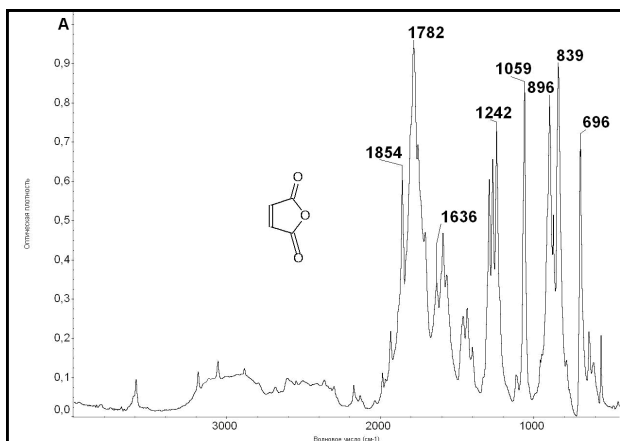
1850-1810 (5,41-5,53)
1795-1740 (5,57-5,75)



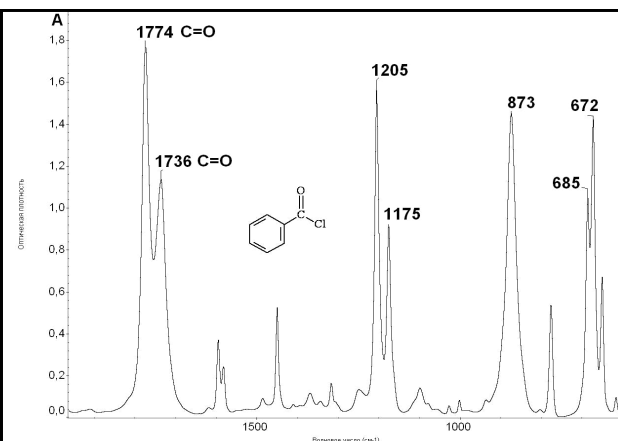
~1800 (~5,56)
~1750 (~5,71)



~1780 (~5,62)
~1735 (~5,77)



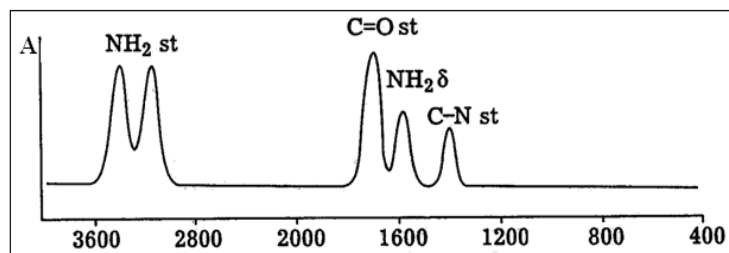
Пример. ИК спектр малеинового ангидрида.



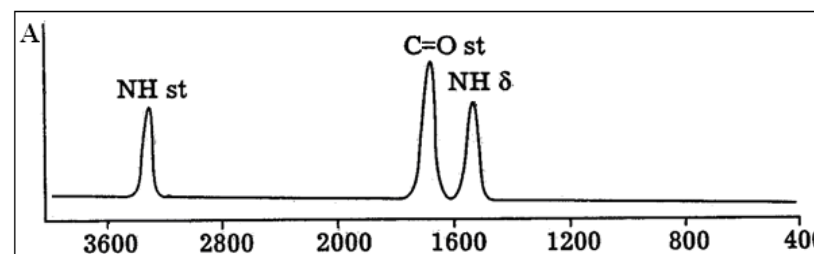
Пример. ИК спектр хлорангидрида бензойной кислоты.

Алифатические перекиси R-CO-O-O-CO- R	1820-1810 (5,50-5,53) 1800-1780 (5,56-5,62)	ν^s с. ν^{as} с.	Для F-C(O)-O-O-C(O)-F имеются полосы 1934, 1905, 1899 cm^{-1}
Ароматические перекиси Ar-CO-O-O-CO- -Ar	1805-1780 (5,54-5,62) 1785-1755 (5,60-5,70)	ν^s с. ν^{as} с.	

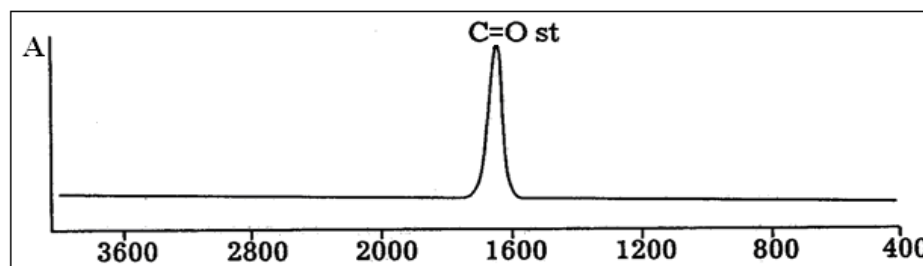
Амиды кислот, лактамы, уретаны(карбаматы)



Первичные амиды



Вторичные амиды



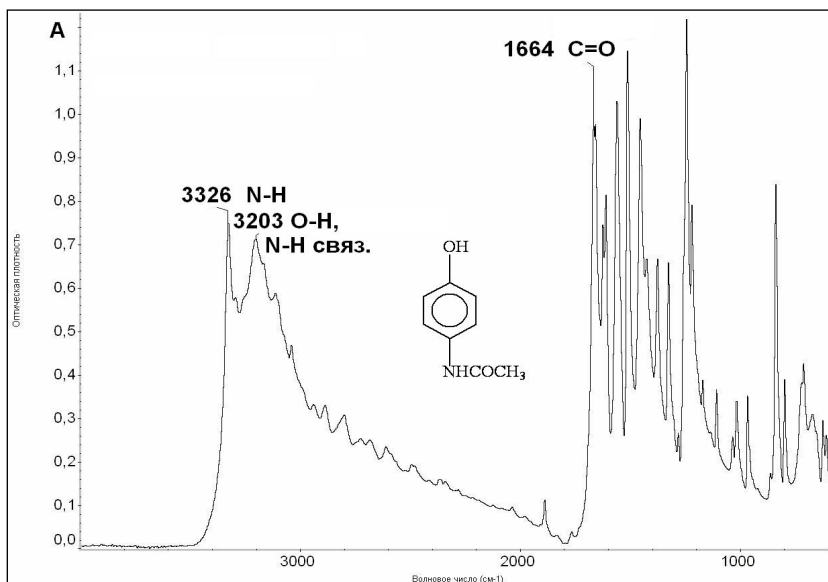
Третичные амиды

Валентные колебания N-H.			
Первичные амиды -CO-NH ₂	3540-3480 (2,83-2,88)	с.	Свободная группа NH ₂ , две полосы (в разбавленных растворах), иногда называемые Амид А и Амид В.
	3420-3380 (2,92-2,96)	с.	
Вторичные амиды -CONHR	3360-3320 (2,97-3,01)	ср.	Ассоциированные группы NH ₂ , две полосы, вид спектра усложняется при перекрытии с ν _{OH}
	3220-3180 (3,11-3,15)	ср.	
Лактамы	3460-3420 (2,89-2,93)	с.	Свободная группа NH ₂ , одна полоса.
	3330-3070 (3,00-3,26)	ср.	Ассоциированные группы NH ₂ , одна полоса.
Лактамы	~3440 (~2,91)	ср.	Свободная форма Ассоциированная форма.
	3175-3070 (3,15-3,26)	ср.	

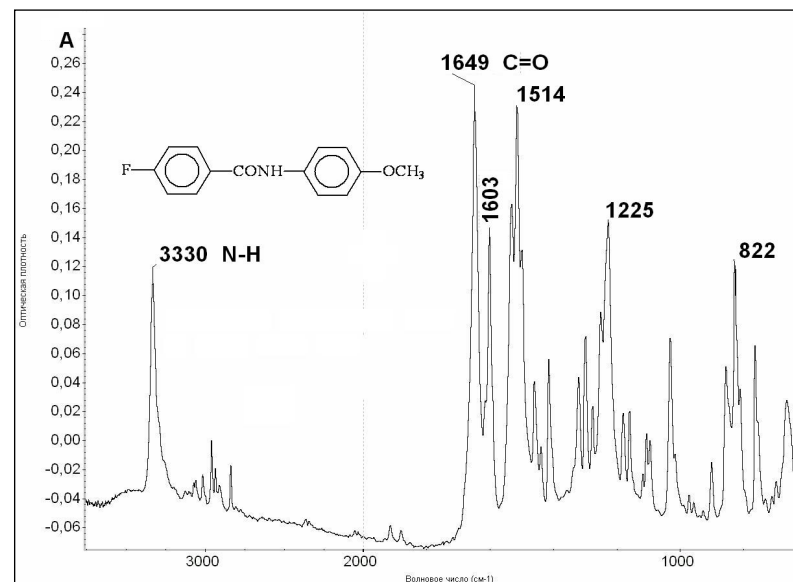
Валентные колебания C=O (полоса Амид I)			
Первичные амиды твердое сост. разб. растворы	~1650 (~6,06) ~1690 (~5,92)	с. с.	
Вторичные амиды твердое сост. разб. растворы	1680-1630 (5,95-6,14) 1700-1665 (5,88-6,01)	с. с.	
Третичные амиды твердое сост. и разб. растворы	1670-1630 (5,99-6,14)	с.	Не зависит от состояния пробы.
Лактамы: Четырехчленные, Пятичленные, с большими циклами	~1750 (~5,71) ~1700 (~5,88) ~1650 (~6,06)		Внеплоскостные веерные колебания N-H дают широкую полосу 800-700 см ⁻¹
Пептиды Амид II Амид III Амид IV Амид V	1655-1630 (6,04-6,13) 1630-1510 (6,13-6,62) 1260-1300 (7,94-7,69) ~620 (~16,13) ~750 (~13,33)	с. $\delta_{\text{NH}+\nu_{\text{CN}}}$, ср. $\delta_{\text{NH}+\nu_{\text{CN}}}$, сл. $\delta_{\text{O}=\text{C}-\text{N}}$, сл. δ_{NH}	Полоса обусловлена взаимодействием ν_{CN} и ν_{CO} Интенсивность зависит от концентрации. Малоинформативна.

Полоса Амид II (составные частоты деформационных колебаний NH и колебаний C-N).			
Первичные амиды: твердые разб. растворы	1650-1620 (6,06-6,17) 1620-1590 (6,17-6,31)	ср. ср.	
Вторичные амиды: твердые разб. растворы	1570-1515 (6,37-6,0) 1550-1510 (6,45-6,62)	ср. ср.	

Производные мочевины RNH-CO-NHR	~1660 (6,02)		
Уретаны (карбаматы) RR'N-COOR	1735-1700 (5,76-5,88) 1710-1690 (5,85-5,92)		Растворы в хлороформе.

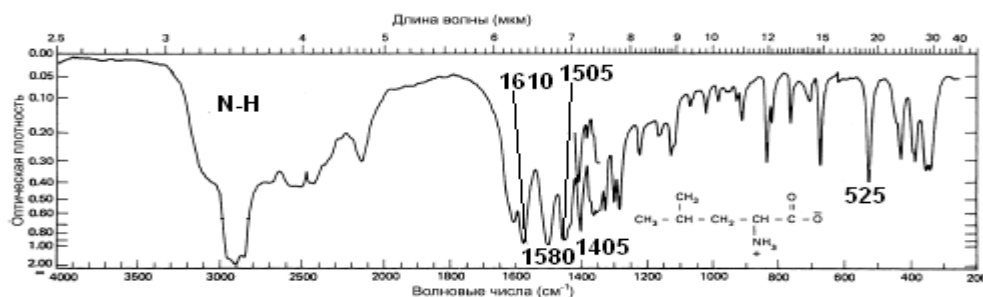


Пример. ИК спектр вторичного амида с гидроксильной группой (парацетамол, тв.).



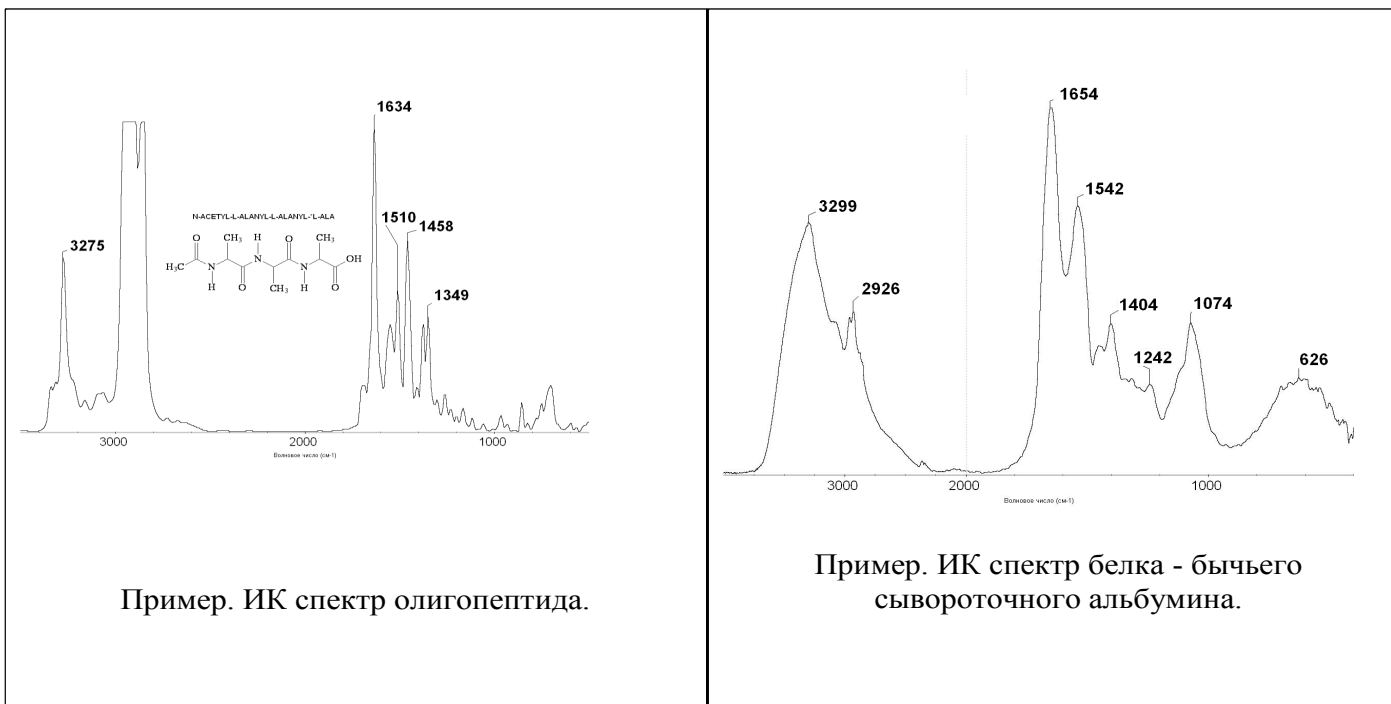
Пример. ИК спектр вторичного амида.

Аминокислоты, белки.

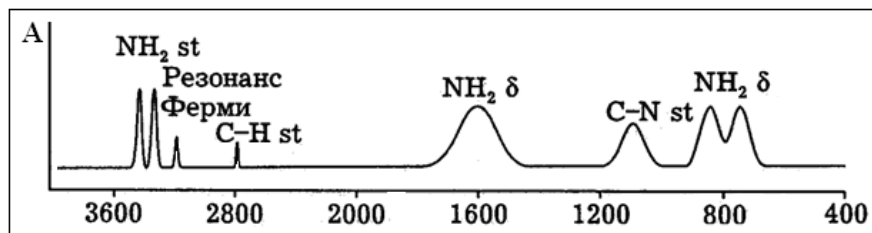


Поглощение аминокислоты лейцина.

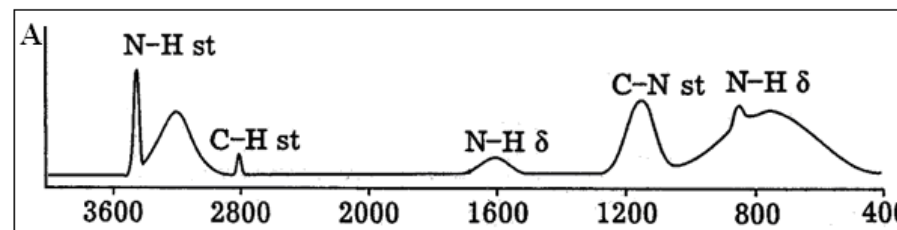
Содержащие NH ₂ - группы аминокислоты.	3130-3030 (3,20-3,30) 1660-1610 (6,02-6,21) 1550-1485 (6,45-6,73)	$\nu_{\text{N-H}}$ ср. $\delta_{\text{N-H}}$, сл. $\delta_{\text{N-H}}$, ср.	Валентные колебания NH ₃ ⁺ Деформац. колебания NH ₃ ⁺ , Аминокислотная полоса I Деформац. колебания NH ₃ ⁺ , Аминокислотная полоса II
Дикарбоновые α-аминокислоты	1755-1720 (5,70-5,81)	с.	Валентные колебания C=O в COOH
Дикарбоновые аминокислоты	1730-1700 (5,78-5,88) 1230-1215 (8,13-8,23)	с. с.	Валентные колебания C=O в COOH Колебания с участием связи C-O-C
Все аминокислоты	1600-1560 (6,25-6,41) 2760-2530 (3,62-3,95) 2140-2080 (4,67-4,81) 1335-1300 (7,49-7,70)	с. сл. сл. ср.	Колебания -CO ₂ ⁻
Соли аминокислот H₂N-(CH₂)_n-CO₂⁻M⁺			
-NH ₂	3400-3200 (2,94-3,13)	$\nu_{\text{N-H}}$ с.	Две полосы
-CO ₂ ⁻	1600-1560 (6,25-6,41)	с.	
Хлористоводородные соли аминокислот [H₃N⁺-(CH₂)_n-CO₂H]Cl			
-NH ₃ ⁺	3130-3030 (3,20-3,30) 1610-1590 (6,21-6,29) 1550-1485 (6,45-6,73) 1335-1300 (7,49-7,70) 1230-1215 (8,13-8,23)	ср. сл. пер. ср. с.	Валентные колебания $\nu_{\text{N-H}}$ в -NH ₃ ⁺ Деформационные колебания -NH ₃ ⁺ Деформационные колебания -NH ₃ ⁺ Колебания с участием -C-O- связей



Амины **N-H**

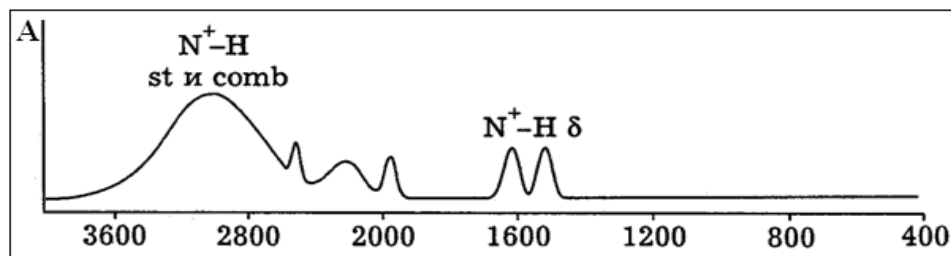


Первичные амины.



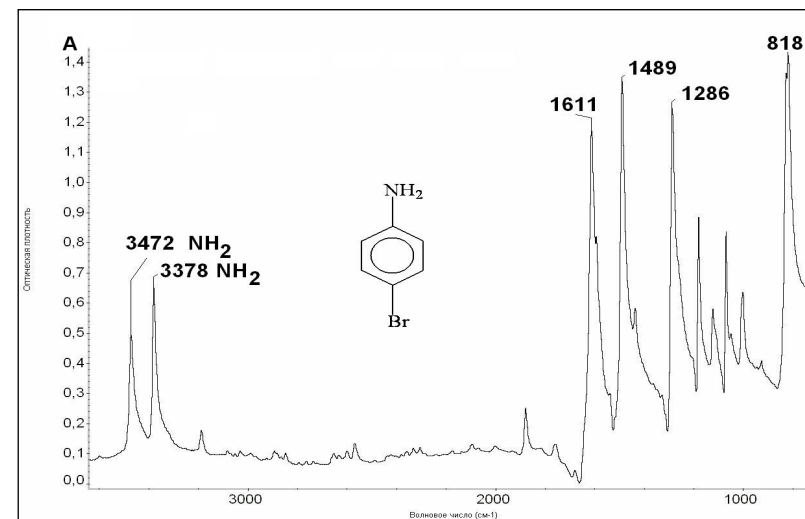
Вторичные амины.

Валентные колебания NH.			
Первичные амины R-NH ₂	3500-3300 (2,86-3,03)	сл.	Две полосы ν_{as} ν_s
Вторичные амины R ₂ N-H	3500-3300 (2,86-3,03)	сл.	Одна полоса ν_{N-H}
Имины C=NH	3400-3200 (2,94-3,13)	пер.	Одна полоса, имеется $\nu_{C=N}$ при 1690-1640 см ⁻¹
Ассоциированная группа NH	3400-3100 (2,94-3,23)	ср.	
Деформационные колебания NH			
Первичные амины -NH ₂	1650-1580 (6,06-6,33) 900-650 (11,2-15,4)	ср. с. ср.	Плоские деформационные колебания. Неплоские деформационные колебания широкая полоса.
Вторичные амины R ₂ NH	1650-1550 (6,06-6,45)	сл.	Ассоциированные амины. Положение полосы зависит от степени ассоциации.
Другие колебания.			
Алифатич. амины	1220-1020 (8,2-9,8)	сл., ср.	
Ароматич. амины:			
первичные	1340-1250 (7,46-8,00)	с.	
вторичные	1350-1280 (7,41-7,81)	с.	
третичные	1360-1310 (7,35-7,63)	с.	
Соли аминов.			
NH ₄ ⁺	3300-3030 (3,03-3,30) 1430-1390 (7,00-7,20)	с. с.	ν_{N-H} , шир., δ_{N-H} , шир.,
RNH ₃ ⁺	~3000 (3,33) ~2500 (4,00) ~2000 (5,00) 1600-1575 (6,25-6,35) 1500 (6,67)	δ_{N-H} , шир., с. δ_{N-H} , ср. δ_{N-H} , ср. δ_{N-H} δ_{N-H}	Несколько полос
R ₂ NH ₂ ⁺	2700-2250 (3,70-4,44)	с.	ν_{N-H} . Иногда проявляется в виде группы полос.
R ₃ NH ⁺	2700-2250 (3,70-4,44)	с	ν_{N-H} . Иногда проявляется в виде группы полос.
R ₄ N ⁺	-	-	Не имеет характеристических полос
R ₂ C=NH ⁺ -	2500-2300 (4,00-4,34) 2200-1800 (4,55-5,56)	ср	Широкая полоса, иногда проявляется в виде группы полос.



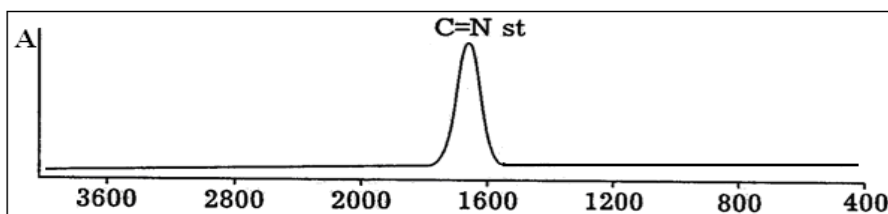
Катион аммония.

Пример. ИК спектр первичного амина.

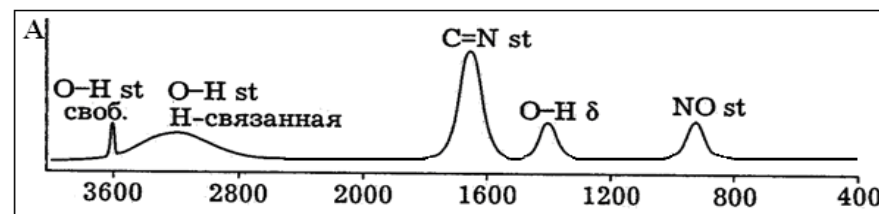


Непредельные азотсодержащие соединения

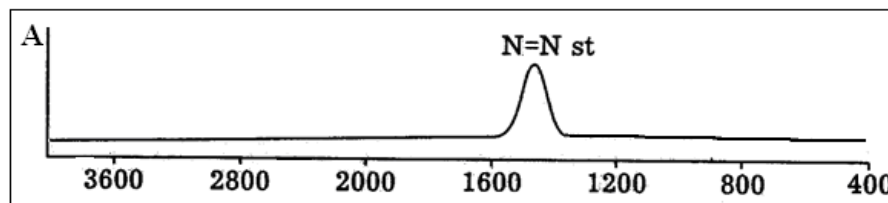
C=N, C≡N, N=C=N, -N=N-, N=C=O, =N, ≡N.



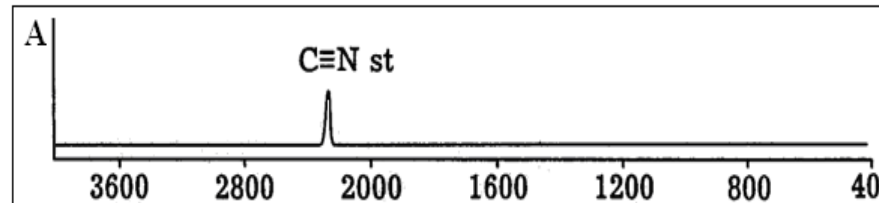
Имины.



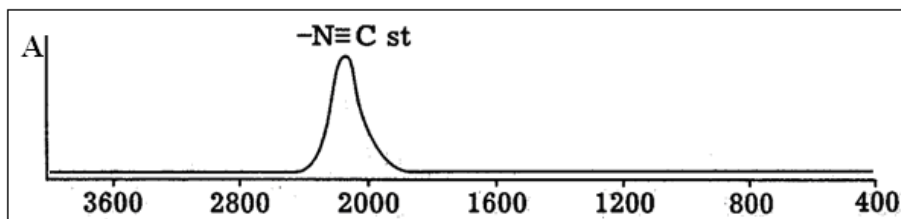
Оксимы.



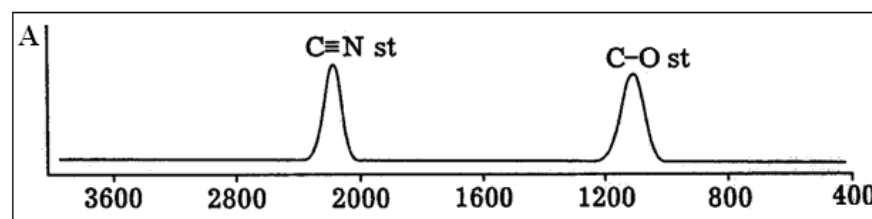
Азосоединения.



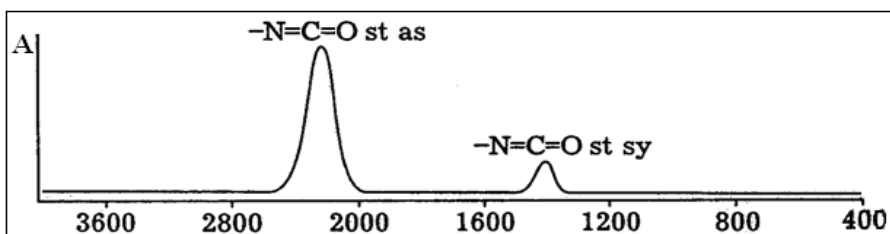
Нитрилы.



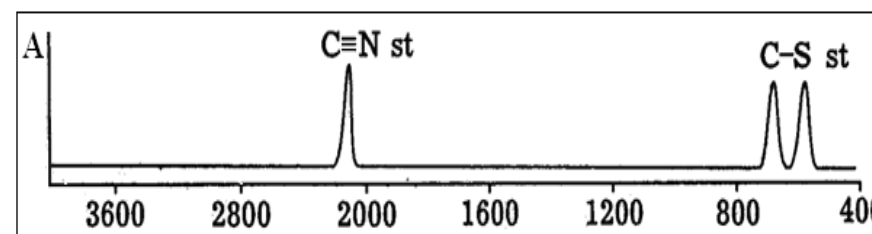
Изонитрилы.



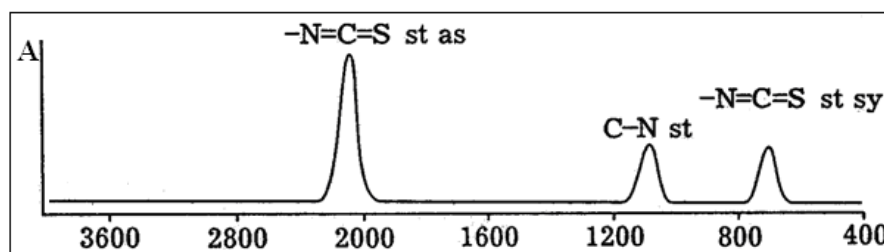
Цианаты.



Изоцианаты



Тиоцианаты



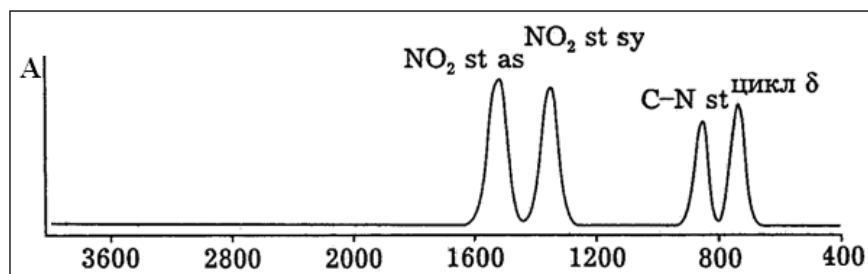
Изотиоцианаты.

C=N			
C=N в открытой цепи	1690-1635 (5,92-6,12)	пер.	Оксазолины -N=C-O-, оксимы C=N-O-, оксазины, азометины C=N и др.
C=N α,β-непредельные	1665-1630 (6,01-6,14)	пер.	
C=N в цикле	1660-1480 (6,02-6,76)	пер.	

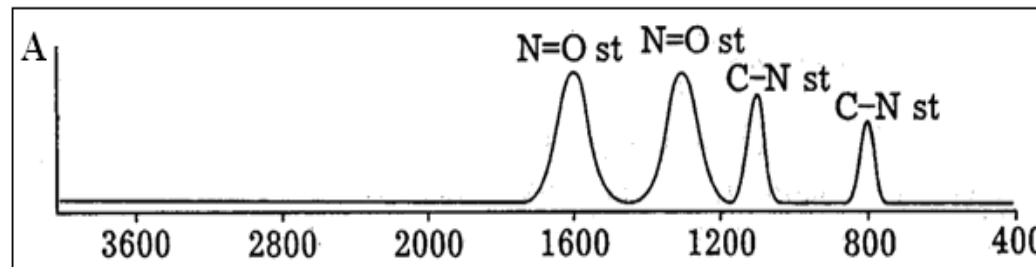
C≡N (нитрилы)			
Предельные нитрилы C≡N	2260-2240 (4,43-4,46)	ν_{CN} сл., ср.	
α, β -непредельные нитрилы C≡N	2235-2215 (4,47-4,52)	ν_{CN} с.	Узкая одиночная полоса.
Арилнитрилы	2240-2220 (4,46-4,51)	ν_{CN} ср., с.	
Изонитрилы	2185-2120 (4,58-4,72)	ν_{NC} с.	:C ⁻ ≡N ⁺ -
Структуры типа X=C=У			
Карбодиимиды	2155-2130 (4,64-4,70)	с.	N=C=N
Изоцианаты	2275-2240 (4,40-4,46)	с.	N=C=O
-N=N-			
-N=N-	1600-1400 (6,25-7,15)	ν_{NN} пер.	Азосоединения
Ar-N=N-Ar	1440-1410 (6,94-7,09) 1510 (6.62)	ν_{NN} , транс- ν_{NN} , цис-	В симметричных транс-азосоединениях не наблюдается из-за запрета по симметрии.
N≡N			
Азиды -N ₃	2160-2120 (4,63-4,72) 1350-1180 (7,41-8,48)	с. сл.	
Соли диазония -N ₂ ⁺	2300-2230 (4,35-4,49)	с.	

Соединения, содержащие связи азот-кислород

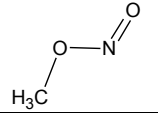
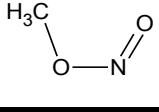
N-O



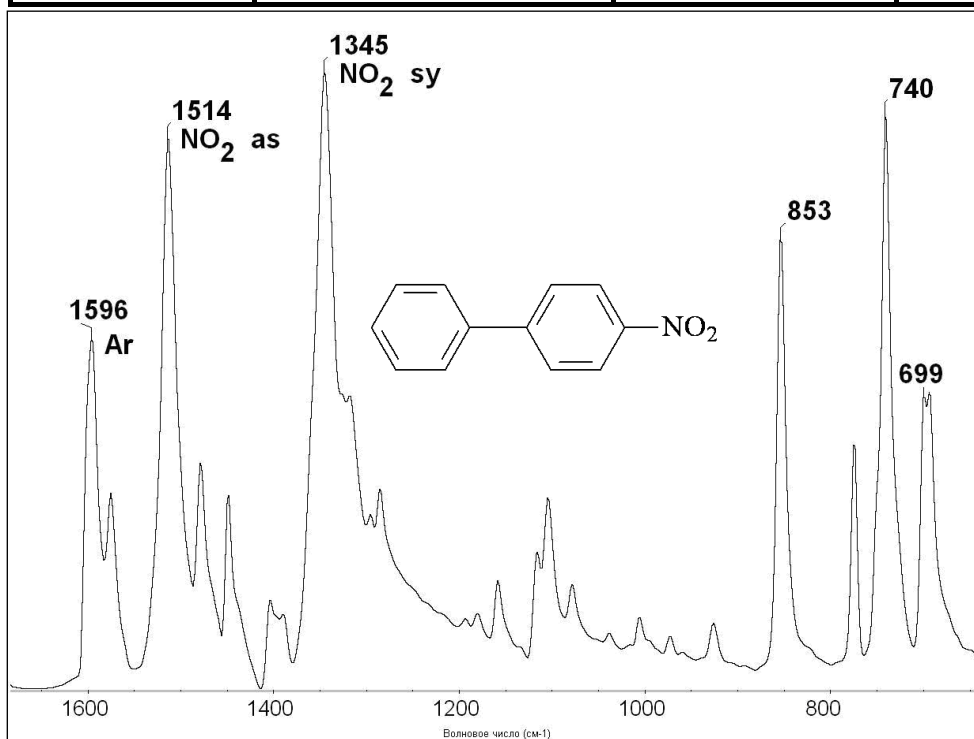
Нитросоединения.



Нитрозосоединения.

Нитросоединения R-NO₂			
алкильные	1570-1550 (6,37-6,45) 1360-1320 (7,36-7,58)	$\nu_{\text{NO}}^{\text{ас}}$ оч.с. $\nu_{\text{NO}}^{\text{с}}$ оч.с.	Все три типа соединений имеют полосы средней интенсивности 870-830 см ⁻¹ (11,49-12,05 мкм), которые могут перекрываться с ароматическим поглощением. Группа NO ₂ чувствительна к сопряжению, резонансным эффектам и пространственным влияниям. Проявляются эффекты ассоциации.
нитропарафины	920-830 (10,88-12,05)	пер.	
олефиновые	1505-1500 (6,65-6,67) 1360-1330 (7,36-7,52)	$\nu_{\text{NO}}^{\text{ас}}$ оч.с. $\nu_{\text{NO}}^{\text{с}}$ оч.с.	
арильные	1560-1500 (6,41-6,57) 1356-1340 (7,37-7,46)	$\nu_{\text{NO}}^{\text{ас}}$ оч.с. $\nu_{\text{NO}}^{\text{с}}$ оч.с.	
Нитраты R-O-NO₂			
Колебания NO ₂	1655-1610 (6,04-6,21) 1300-1255 (7,69-7,97)	$\nu_{\text{NO}}^{\text{ас}}$ с. $\nu_{\text{NO}}^{\text{с}}$ с.	
Другие колебания	870-690 (11,5-14,5)	пер.	
Нитраминаы R-NH-NO₂			
R-NH-NO ₂	1600-1530 (6,25-6,54) 1300-1260 (7,69-7,94) 790-770 (12,66-12,99)	$\nu_{\text{NO}}^{\text{ас}}$ с. $\nu_{\text{NO}}^{\text{с}}$ с. ср.	
Нитрозосоединения R-C-N=O			
Мономеры	1600-1500 (6,25-6,67)	$\nu_{\text{N=O}}$ с.	CIN=O 1799 см ⁻¹ , BrN=O 1801 см ⁻¹ , FN=O 1844 см ⁻¹ (газ)
Алифатические димеры цис-транс-	1290-1175 (7,75-8,51) 1290-1176 (7,75-8,50)		
Ароматические димеры цис-транс-	1390 (7,20), 1410 (7,09) 1300-1250 (7,69-8,00)		
Нитриты RO-N=O			
RO-N=O	3360-3220 (2,98-3,11)	ср.	Обертон $\nu_{\text{N=O}}$
транс-форма	1680-1650 (5,95-6,06) 815-750 (12,27-13,33) 625-565 (16,00-17,70)	$\nu_{\text{N=O}}$, оч. с. с. с.	Колебание с участием связи N-O Деформационное колебание $\delta_{\text{O=N-O}}$ 
цис-форма	1625-1610 (6,16-6,21) 850-810 (11,76-12,35) 690-615 (14,49-16,26)	$\nu_{\text{N=O}}$, оч. с. с. с.	Колебание с участием связи N-O Деформационное колебание $\delta_{\text{O=N-O}}$ 

Нитрозамины $R_2N-N=O$			
N-N=O	1500-1480 (6,67-6,76)	$\nu_{N=O}$, с.	Для твердых образцов. Для разбавленных растворов.
N-N=O	1460-1440 (6,85-6,94)	$\nu_{N=O}$, с.	
	~1050 (~9,52) ~660 (~15,15)	с. с.	
Окиси аминов $R_3C-N \rightarrow O$			
N-Окиси алифатич. аминов	970-950 (10,31-10,53)	$\nu_{N \rightarrow O}$, с.	
N-Окиси пиридинов и пиримидинов	1300-1250 (7,69-8,00)	$\nu_{N \rightarrow O}$, пер.	В неполярном растворителе.
Азоксисоединения $R-N=N \rightarrow O$	1310-1250 (7,63-8,00)	$\nu_{N \rightarrow O}$, с.	



Пример. ИК спектр ароматического нитросоединения.

Гетероциклические соединения

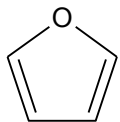
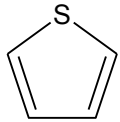
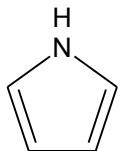
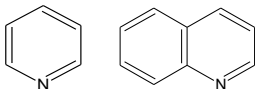
Heterocycl

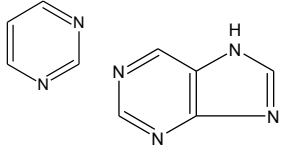


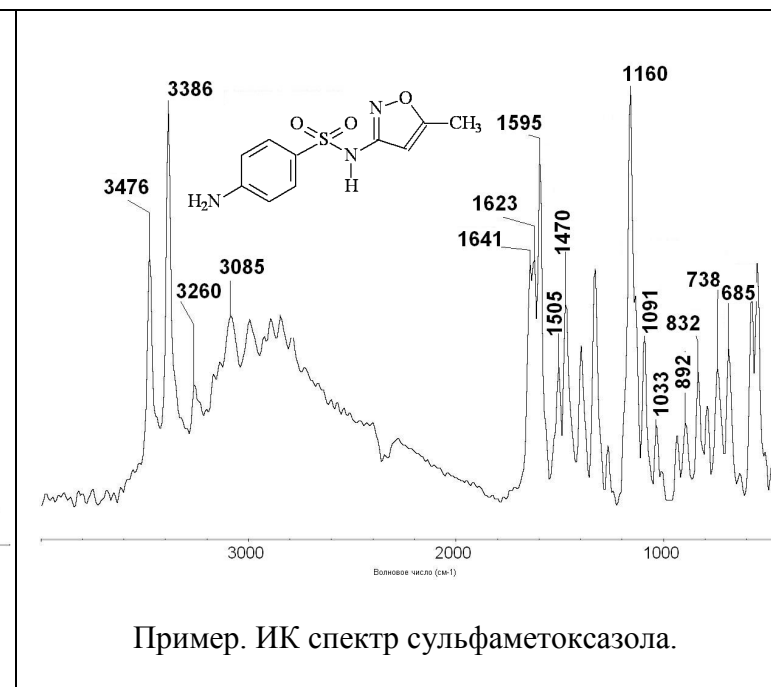
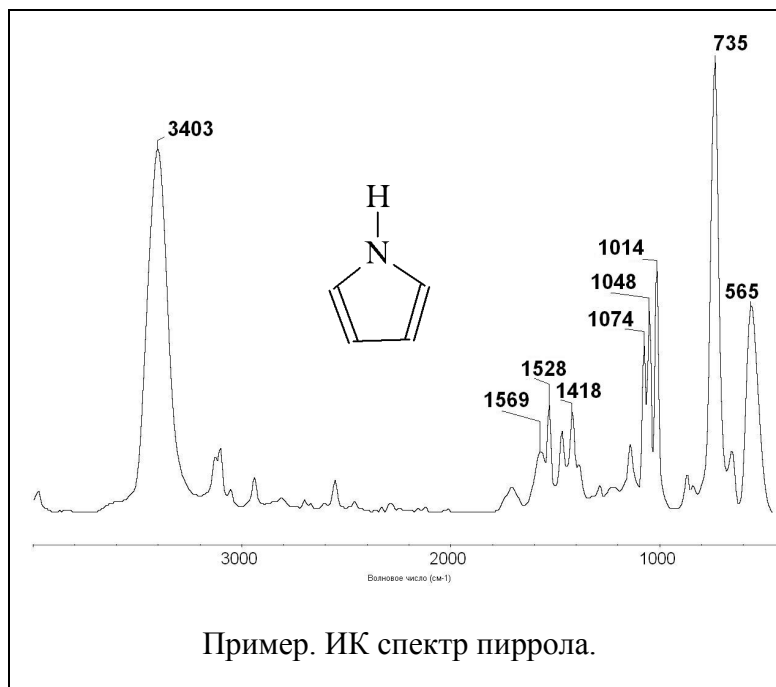
Фураны



Пирролы

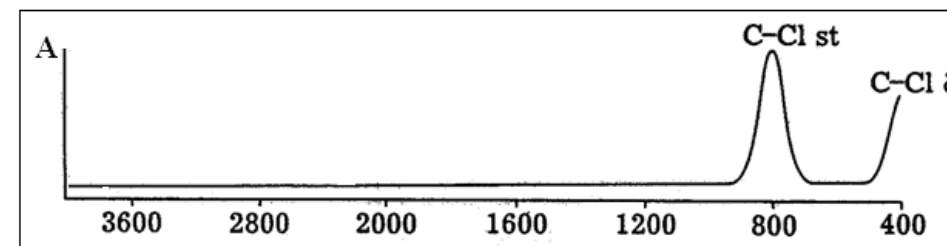
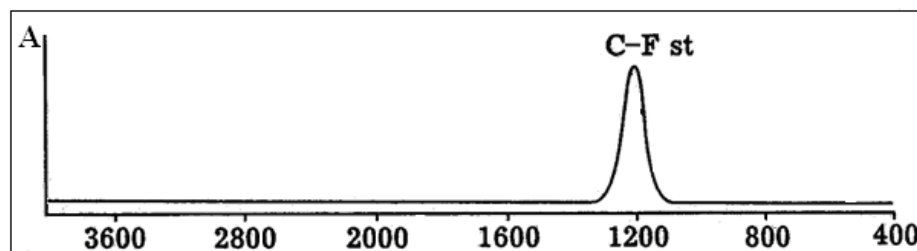
Фураны 	3165-3125 (3,16-3,20) ~1565 (~6,39) ~1500 (~6,67) 1030-1015 (9,70-9,85) 885-870 (11,3-11,5) 800-740 (12,5-13,5)	ν_{C-H} Колебания кольца с.	Наиболее характерна для фуранов.
Тиофены 	3125-3050 (3,20-3,28) ~1520 (~6,58) ~1040 (~9,60) 750-690 (13,3-14,5)	ν_{C-H} Колебания кольца с.	Самая сильная из полос тиофена.
Пирролы 	3440-3400 (2,91-2,94) ~1565 (~6,39) ~1500 (~6,67)	ν_{N-H} ср. пер. пер.	В растворах. Колебания кольца, аналогичные полосы имеются в индолах.
Пиридины и хинолины 	3070-3020 (3,26-3,31) ~1200 (~8,33) 1100-1000 (9,09-10,00) 900-670 (11,11-14,93) 710 (14,08) 1650-1580 (6,06-6,33) 1580-1550 (6,33-6,45) 1510-1480 (6,62-6,76)	ν_{C-N} с. с. δ_{C-H} с. δ_{C-H} с. δ_{C-H} с. ср. сл. ср.	Только для пиридинов. Только для пиридинов. Только для пиридинов. Колебания кольца. Колебания кольца. Колебания кольца.

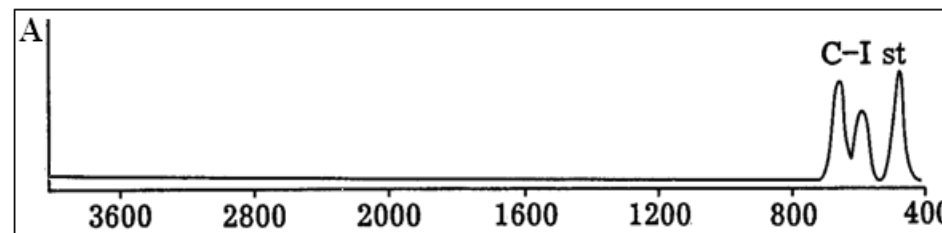
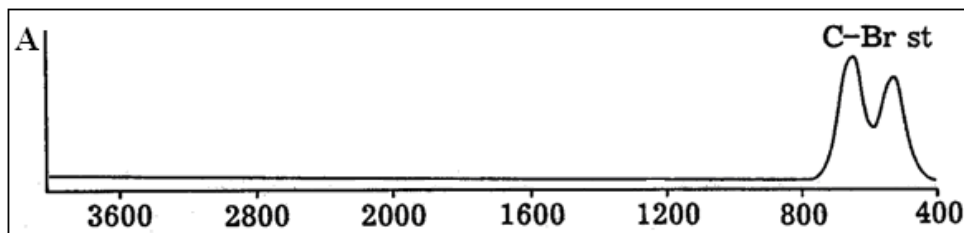
<p>Пиримидины и пурины</p> 	<p>3060-3010 (3,27-3,32) 100-960 (10,00-960) 875-775 (12,12-12,90) 1580-1520 (6,33-6,58)</p>	<p>ν_{C-H}, с. с. ср. ср.</p>	<p>Деформационные колебания C-H. Деформационные колебания C-H. Колебания кольца.</p>
--	--	--	--



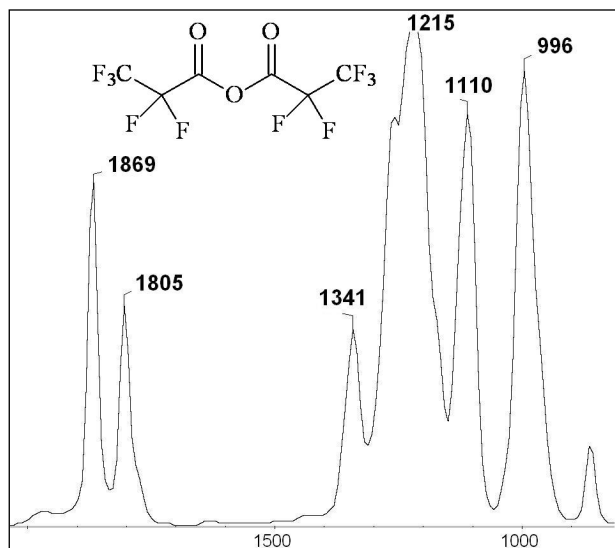
Галогенпроизводные органических соединений

Hal

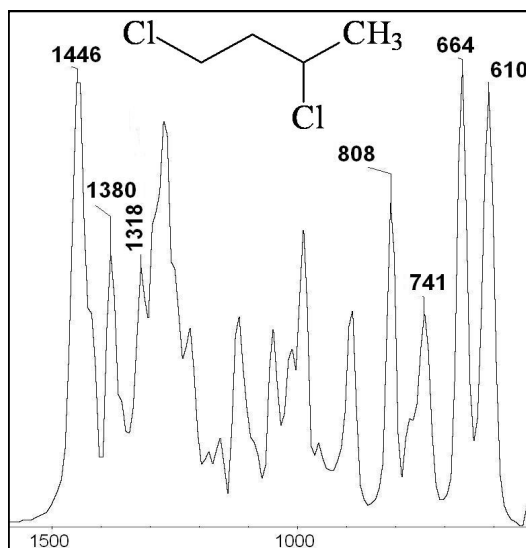




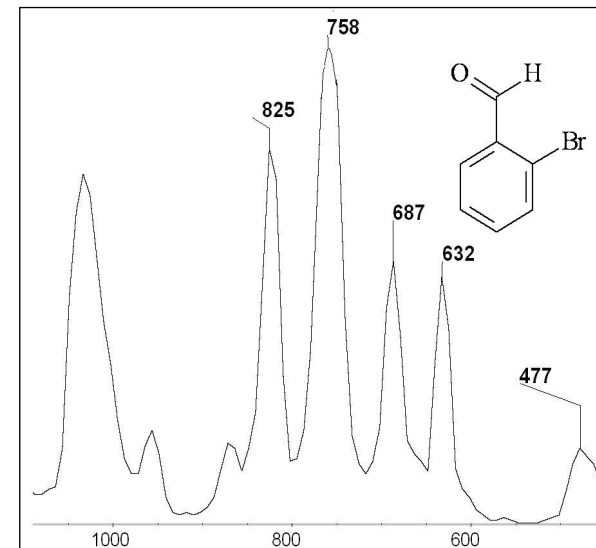
Валентные колебания C-Hal			
C-F монофторзамещенные	1110-1000 (9,01-10,00)	с.	
C-F дифторзамещенные	1250-1050 (8,00-9,50)	оч. с.	Две полосы.
C-F полизамещенные	1400-1100 (7,14-9,10)	оч. с.	Ряд полос.
CF ₃ -CF ₂ -	1365-1325 (7,33-7,55)	с.	
C-Cl монохлорзамещенные	750-700 (13,23-14,30) 650 (15,40)	с. с.	Только для растворов.
C-Cl полизамещенные	800-700 (12,50-14,30)	оч. с.	
C-Br	515-680 (19,42-14,70) 560 (17,87)	с.	Только для растворов.
C-I	485-610 (20,62-16,39)	с.	
Другие колебания			
CF ₃ -Ar	1330-1310 (4,10-4,26)	с.	
	1185-1170 (8,44-8,55)	с.	
CF ₃ -CF ₂ -	1150-1130 (8,70-8,85)	с.	
	745-730 (13,42-13,70)	с.	



Пример. ИК спектр пентафторпропионового ангидрида.



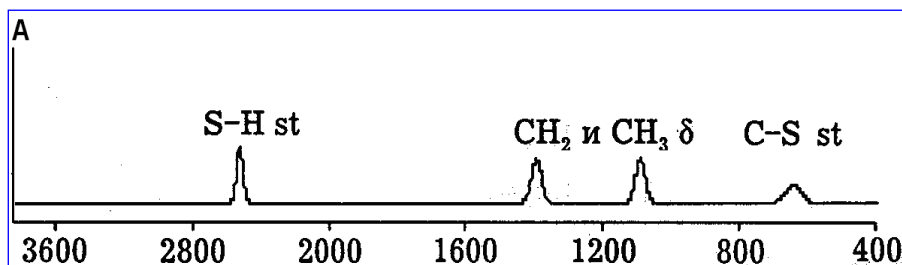
Пример. ИК спектр 1,3-дихлорбутана.



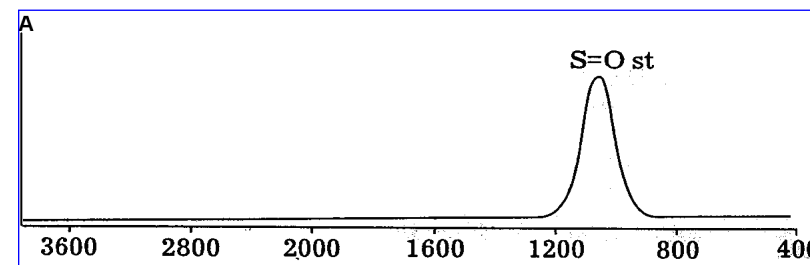
Пример. ИК спектр 2-бромбензальдегида.

Серосодержащие функциональные группы

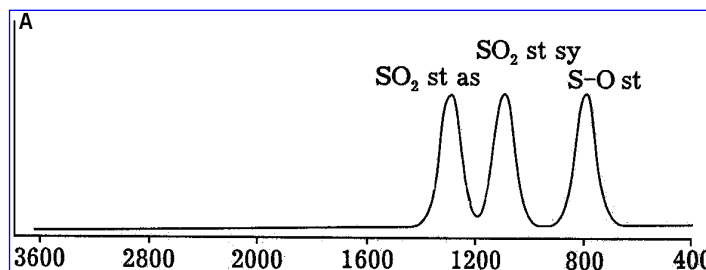
S



Тиолы и сульфиды.



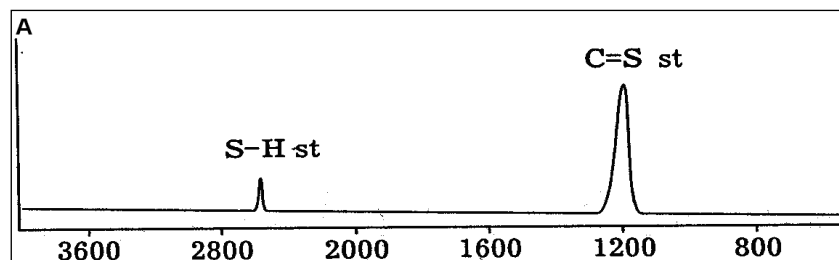
Сульфоксиды.



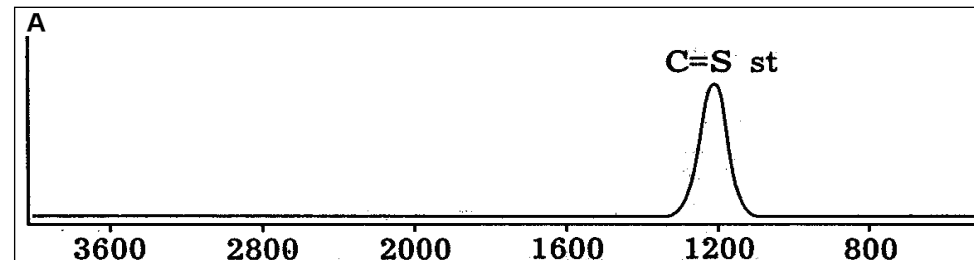
Сульфоны.

Типичные диапазоны (ν в см^{-1})

Отнесение	Диапазон	Примечания
S=O st	1225-980	Сильная, иногда несколько полос
R-SO-R	1060-1015	
R-SO-OH	~1100	S-O st, 870-810, OH st свободная группа ~3700, связанная H-связью ~2900, ~2500
R-SO-OR	~1135	S-O st 740-720, 710-690
RO-SO-OR	1225-1195	
R-SO-Cl	~1135	
SO ₂ ²⁻	1420-1000	Очень сильная полоса
R-SO ₂ -R	1370-1290 1170-1110	
R-SO ₂ -OR	1375-1350 1185-1165	



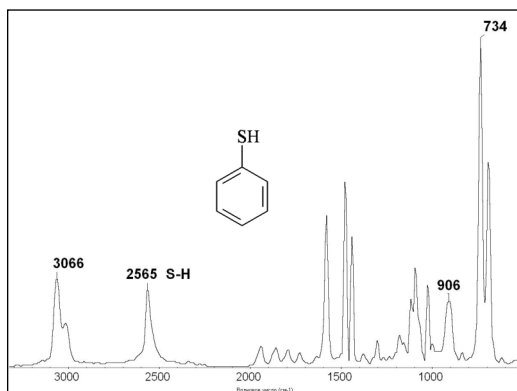
Производные тиокарбонильных соединений.



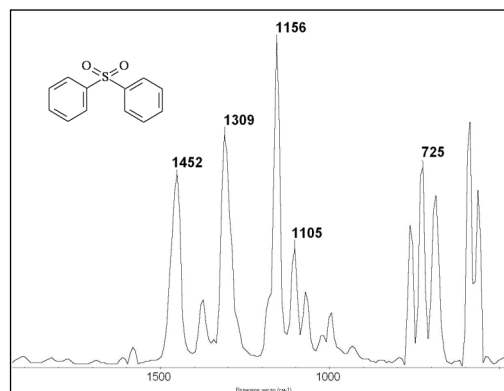
Тиокарбонаты и тиомочевины.

Отнесение	Диапазон	Примечания
S-H st	2560-2510	Слабая, узкая полоса в тритиокарбонатах.
	2600-2500	Слабая, узкая полоса в ксантатах.
C=S st	1100-1020	Очень сильная полоса в тритиокарбонатах.
	1070-1000	Сильная полоса в ксантатах.
	1250-1180	Сильная полоса в тиокарбонатах.
	1400-1100	Сильная полоса в тиомочевинах.

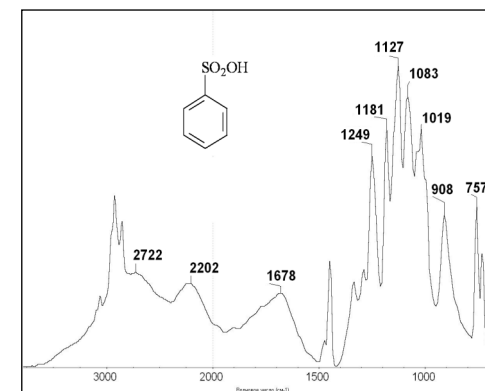
СОС st as	1260-1140	Сильная полоса в ксантатах.
СОС st sy	1150-1090	Полоса от сильной до средней интенсивности в ксантатах.



Пример. ИК спектр тиофенола.



Пример. ИК спектр дифенилсульфона.



Пример. ИК спектр бензолсульфоукислоты.

Металлоорганические соединения. Металлоалканы.

Metallorg

Частоты скелетных колебаний (см^{-1}) металл-углерод для соединений типа $\text{M}(\text{CH}_3)_n$ и $[\text{M}(\text{CH}_3)_n]^{m+}$

СОЕДИНЕНИЯ	КОНФИГУРАЦИЯ	$\text{N}^{\text{A}}(\text{MC})$	$\text{N}^{\text{S}}(\text{MC})$	$\text{D}(\text{CMC})$
$\text{Al}(\text{CH}_3)_3$	Плоская	760	530	170
$\text{As}(\text{CH}_3)_3$	Пирамидальная	583	568	238, 223
$[\text{As}(\text{CH}_3)_4]^+$	Тэтраэдрическая	652	590	217
$\text{B}(\text{CH}_3)_3$	Плоская	1177	680	341, 321
$\text{Be}(\text{CH}_3)_2$	Линейная	1081	-	-
$\text{Bi}(\text{CH}_3)_3$	Пирамидальная	460	460	171
$\text{Cd}(\text{CH}_3)_2$	Линейная	525	460	140
$\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$	Плоская	577	521	162
$\text{Ge}(\text{CH}_3)_4$	Тэтраэдрическая	595	558	195, 175

СОЕДИНЕНИЯ	КОНФИГУРАЦИЯ	N ^A (МС)	N ^S (МС)	D(СМС)
Hg(CH ₃) ₂	Линейная	538	515	160
In(CH ₃) ₃	Плоская	500	467	132
[In(CH ₃) ₂] ⁺	Линейная	566	502	-
P(CH ₃) ₃	Пирамидальная	703	653	305, 263
[P(CH ₃) ₄] ⁺	Тэтраэдрическая	783	649	285
Pb(CH ₃) ₄	Тэтраэдрическая	476	459	120
Sb(CH ₃) ₃	Пирамидальная	513	513	188
Sb(CH ₃) ₅	Тригонально- бипирамидальная	514 экваториальная 456 аксиальная	493 экваториальная 414 аксиальная	213 экваториальная 199 аксиальная
[Sb(CH ₃) ₄] ⁺	Тэтраэдрическая	574	535	178
[Sb(CH ₃) ₃] ²⁺	Плоская	582	536	166
Se(CH ₃) ₂	Нелинейная	604	589	233
[Se(CH ₃) ₃] ⁺	Неплоская	602	580	272
Si(CH ₃) ₄	Тэтраэдрическая	696	598	239, 202
SN(CH ₃) ₄	Тэтраэдрическая	529	508	157
[SN(CH ₃) ₂] ²⁺	Линейная	582	529	180
[SN(CH ₃) ₃] ⁺	Плоская	557	521	152
Te(CH ₃) ₂	Нелинейная	528	528	198
[Te(CH ₃) ₃] ⁺	Неплоская	534	-	-
Ti(CH ₃) ₄	Тэтраэдрическая	577	489	180
W(CH ₃) ₆	Октаэдрическая	482	-	-
Zn(CH ₃) ₂	Линейная	604	503	157
[Zn(CH ₃) ₂] ⁺	-	-	557	-

Частоты валентных колебаний (см⁻¹) связей углерод-углерод и металл-углерод в винильных и ацетиленовых металлоорганических соединениях.

СОЕДИНЕНИЯ	N(C=C)	N(C≡C)	N(M-C)
Zn(CH=CH ₂) ₂	1565	-	-
Hg(CH=CH ₂) ₂	1603	-	541; 513
B(CH=CH ₂) ₂	1604	-	1186

СОЕДИНЕНИЯ	N(C=C)	N(C≡C)	N(M-C)
P(CH=CH ₂) ₃	1590	-	715; 667
Si(CH=CH ₂) ₄	1592	-	732; 583
Ge(CH=CH ₂) ₄	1595	-	600; 561
Sn(CH=CH ₂) ₄	1583	-	527; 513
Pb(CH=CH ₂) ₄	1580	-	495; 481
Si(C≡CH) ₄	-	2053	534; 708 или 687
Ge(C≡CH) ₄	-	2057	507; 523
Sn(C≡CH) ₄	-	2043	504 или 447
As(C≡CH) ₃	-	2053	517; 526
Sb(C≡CH) ₃	-	-	474
(CH ₃) ₂ Si(C≡CH) ₂	-	2041	ν(Si-C≡C) 595
(CH ₃) ₂ Ge(C≡CH) ₂	-	2041	ν(Ge-C≡C) 538; 521
(CH ₃) ₂ Sn(C≡CH) ₂	-	2016	ν(Sn-C≡C) 454; 445

Частоты валентных колебаний (см⁻¹) связей металл-углерод N(MC) и металл-галоген N(MX) в металлгалогенидных соединениях.

СОЕДИНЕНИЯ	N(MC)	N(MX)	СОЕДИНЕНИЯ	N(MC)	N(MX)
CH ₃ CdCl	476	247	(CH ₃) ₃ SbF ₂	591; 546	484; 465
CH ₃ CdBr	475	206	(CH ₃) ₃ SbCl ₂	577; 538	282; 272
CH ₃ CdI	482	167	(CH ₃) ₃ SbBr ₂	569; 526	215; 168
(CH ₃) ₃ SiF	704; 635	898	[(CH ₃) ₂ AuCl] ₂	571; 561	273
(CH ₃) ₃ SiCl	704; 635	472	[(CH ₃) ₂ AuBr] ₂	561; 550	181
(CH ₃) ₃ GeF	623; 576	623	[(CH ₃) ₂ AuI] ₂	550; 545	141; 131
(CH ₃) ₃ GeCl	612; 569	378			

**Частоты колебаний (см^{-1}) металл-кольцо $\nu(\text{МК})$
в циклопентадиенильных комплексах MCp_2 (D_{5d} или D_{5h}).**

Комплекс	FeCp₂	FeCp₂⁺	RuCp₂	OsCp₂	CoCp₂	CoCp₂⁺	NiCp₂
$\nu(\text{МК})$	476	423	385	353	355	455	355
Комплекс	CrCp₂	CrCp₂⁺	VCp₂	VCp₂⁺	MgCp₂⁺	CaCp₂⁺	
$\nu(\text{МК})$	408	479	380	354	524	284	

Частоты колебаний (см^{-1}) металл-кольцо $\nu(\text{МК})$ в дибензольных комплексах MPh_2

Комплекс	MoPh₂	WPh₂	CrPh₂	CrPh₂⁺	VCp₂
$\nu(\text{МК})$	424	331	490	466	424

Частоты колебаний (см^{-1}) C=O и M-C в моноядерных карбонилах металлов.

Соединения	Ni(CO)₄	[Co(CO)₄]⁻	[Fe(CO)₄]²⁻	Fe(CO)₅	Cr(CO)₆	Mo(CO)₆	W(CO)₆	[V(CO)₆]⁻	[Re(CO)₆]⁺	[Mn(CO)₆]⁺
Состояние	газ	р-р в ДМФ	р-р в воде	жидкость	газ					
Симметрия	T _d	T _d	T _d	D _{3h}	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h
$\nu(\text{C=O})$	2131 2057,6	2002 2890	1788 1788	2116 2030 1989	2118,7 2026,7 2000,4	2120,7 2024,8 2000,3	2126,2 2021,1 1997,6	2020 1894 1858	2197 2122 2085	2192 2125
$\nu(\text{M-CO})$	367,5 421	431 556	464 644	418 381 482	379,2 390 440,5	391,2 381 467,2	426 410 374,4	374 393 460	441 426 356	384 390

Частоты колебаний (см^{-1}) металл-кольцо $\nu(\text{МК})$ в дибензольных комплексах MPh_2

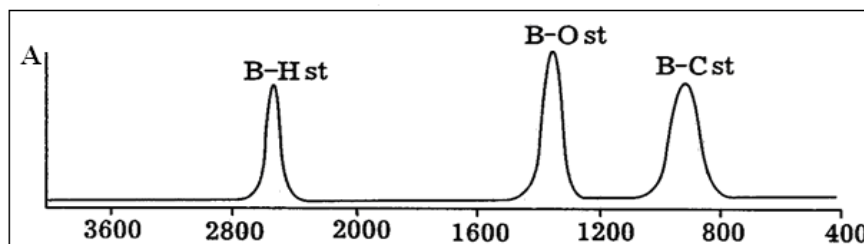
Комплексы	MoPh₂	WPh₂	CrPh₂	CrPh₂⁺	VCp₂
$\nu(\text{МК})$	424	331	490	466	424

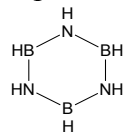
Частоты колебаний (cm^{-1}) C=O и M-C в моноядерных карбонилах металлов.

Соединение	Ni(CO) ₄	[Co(CO) ₄] ⁻	[Fe(CO) ₄] ²⁻	Fe(CO) ₅	Cr(CO) ₆	Mo(CO) ₆	W(CO) ₆	[V(CO) ₆] ⁻	[Re(CO) ₆] ⁺	[Mn(CO) ₆] ⁺
Состояние	газ	р-р в ДМФ	р-р в воде	жидкость	газ					
Симметрия	T _d	T _d	T _d	D _{3h}	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h	O _h
$\nu(\text{C}=\text{O})$	2131 2057,6	2002 2890	1788 1788	2116 2030 1989	2118,7 2026,7 2000,4	2120,7 2024,8 2000,3	2126,2 2021,1 1997,6	2020 1894 1858	2197 2122 2085	2192 2125
$\nu(\text{M}-\text{CO})$	367,5 421	431 556	464 644	418 381 482	379,2 390 440,5	391,2 381 467,2	426 410 374,4	374 393 460	441 426 356	384 390

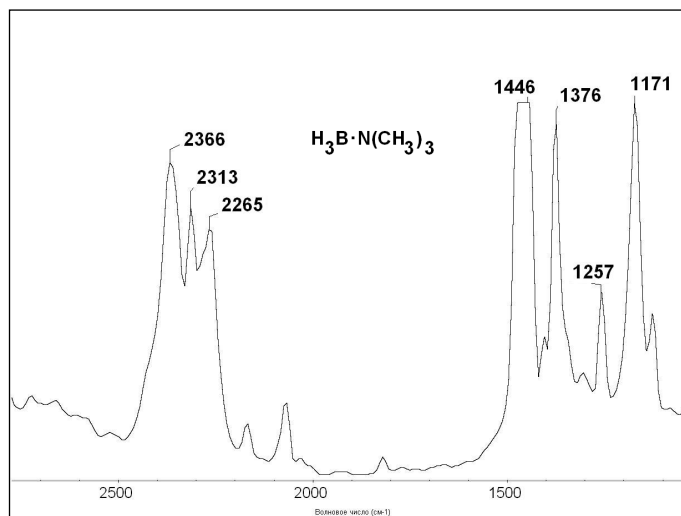
Соединения бора

B



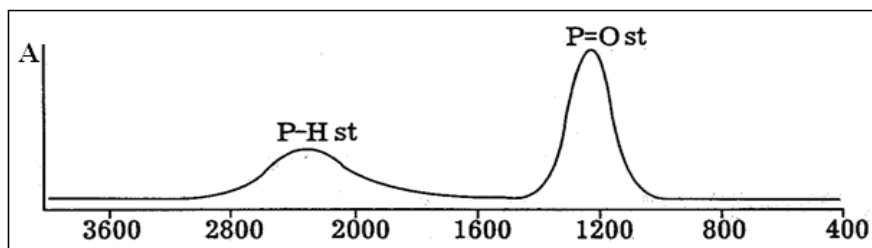
Борные эфиры B(OR) ₃ RB(OR) ₂ R ₂ B(OR)	~1380 (~7,25) ~1350 (~7,41)	ν_{BO} с. ν_{BO} с.	Полоса расщеплена из-за присутствия изотопов ¹⁰ B и ¹¹ B При координации с азотом полоса ν_{BO} исчезает.
Бораны RBH ₂	2640-2350 (3,79-4,26) 2220-1540 (4,50-6,49)	ν_{BH} с. ν_{BHB} с.	Нормальные бораны Водородные мостиковые связи B...H...B
Боразины 	3505-3425 (2,85-2,92) 1470-1330 (6,80-7,52) 700-680 (14,29-14,71)	ν_{NH} ср. ν_{BN} с. δ_{BN}	Две полосы.

BCH_3	1460-1405 (6,85-7,12) 1330-1280 (7,52-7,81)	δ_{CH_3} δ_{CH_3} с.	Колебания кольца.
B-Ar	1440-1430 (6,94-6,99)		
BOH $\text{B}\cdots\text{H-B}$	3300-3200 (3,03-3,12) 2000-1600 (5,00-6,25)	ν_{OH} с. пер.	Широкая полоса в твердых образцах Может быть несколько полос.
BCl	1000-~900 (10,00-11,11)	с.	Соединения, содержащие связи B-Cl

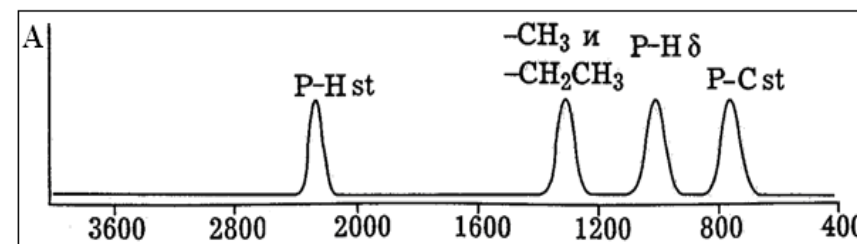


Пример. ИК спектр комплекса боран-триметиламин.

Фосфорорганические соединения

P


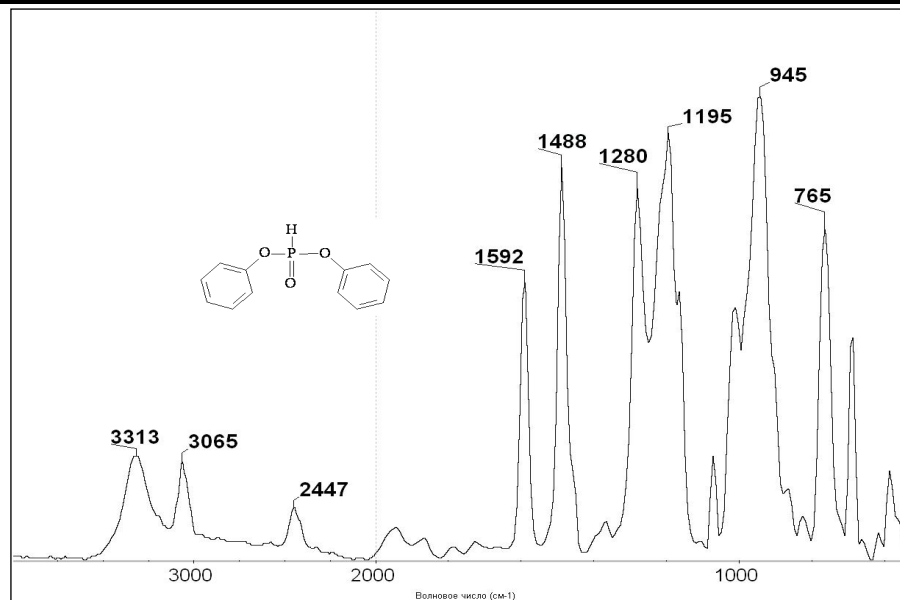
Соединения фосфора.



Фосфины.

Фосфины R_nPH_{3-n}	2275-2440 (4,40-4,01) 1080-1090(9,26-9,17) 910-940 (10,99-10,64) 1405-1440(7,12-6,94)	ν_{PH} ср. δ_{PH_2} ср. δ_{PH_2} δ_{CH_2P}	
Оксиды фосфинов $R_3P^+ \rightarrow O^-$	1140-1300 (8,77-7,69) ~1150(~8,70) ~1190 (~8,40)	с. с. с.	На частоту влияет электроотрицательность заместителей. Алифатические. Ароматические.
Фосфорные кислоты $R_n(HO)_{3-n}PO$	2550-2700 (3,92-3,70) 2100-2350 (4,76-4,26)	ν_{OH} ср. ν_{OH} ср.	Широкая полоса
P=O P=O	1350-1175 (7,41-8,51) 1250-1150 (8,00-8,70)	ν_{PO} с. ν_{PO} оч. с.	Свободные молекулы. Ассоциированные молекулы (водородная связь).
Эфиры фосфорной кислоты $(RO)_3P^+ \rightarrow O^-$ $(ArO)_3P^+ \rightarrow O^-$	~1280 (~7,81) 970-1050 (10,31-9,52) 740-830 (13,51-12,05) 1160-1260 (8,62-7,94) 914-994 (10,94-10,06)	ν_{PO} с. ν_{COP} с. с. ν_{PO} с. ν_{PO} с.	Только для метокси- и этоксипроизводных.
Фосфиты $(RO)_3P$	855-875 (11,70-11,43)	ν_{PO}	
Другие частоты			
PF	815-890 (12,27-11,24)	с.	
PCl	440-580 (22,73-17,24)	с.	
PBr	400-485 (25,00-20,62)		
POP	870-1000 (11,49-10,00)		
PO_3^{2-}	970-1030 (10,31-9,71)		
PO_4^{3-}	1000-1100 (10,00-9,09)		
P-O-CH ₃	1190-1170 (8,40-8,55) ~1460 (6,85)	сл.	
P-O-C ₂ H ₅	1170-1140 (8,55-8,77) ~1485 (6,73)	сл.	

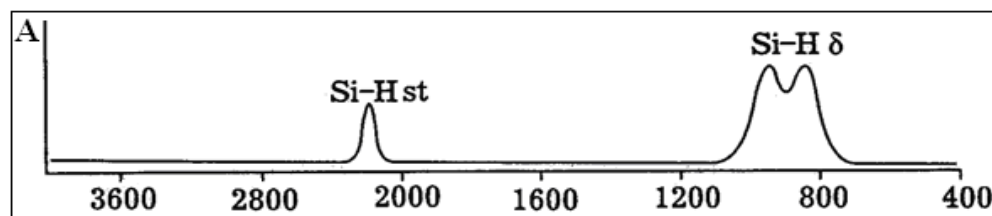
P-O-Alk	1050-990 (9,52-10,10)		
P-O-Ar	1240-1180 (8,07-8,48)	с.	
P-N	930-1110 (10,75-9,01)		
P=N (циклические)	1100-1320 (9,01-7,58)		
P=S	840-600 (11,90-16,65)	с.	



Пример. ИК спектр дифенилфосфита.

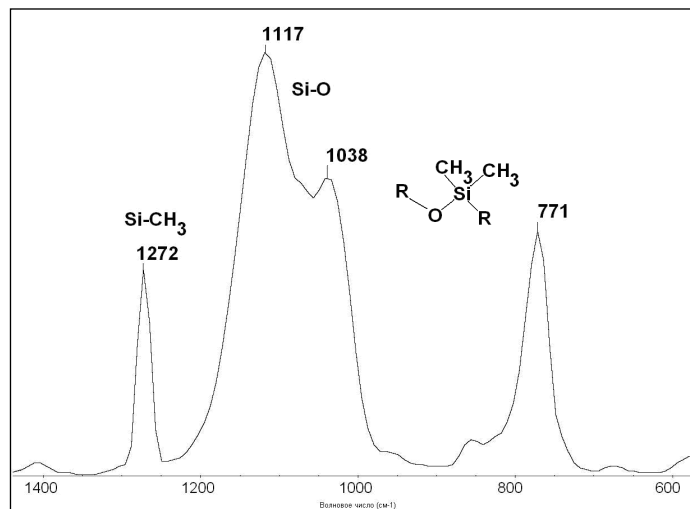
Кремнийорганические соединения

Si



Соединения кремния.

Силаны			
R_nSiH_{4-n}	2250-2100 (4,44-4,76) 840-800 (11,90-12,50) 940-920 (10,64-10,87) 930-910 (10,75-10,99) 945-930 (10,58-10,75)	ν_{SiH} с. δ_{SiH_2} с. δ_{SiH_3} с.	Более точное положение зависит от типа заместителей R.
Силоксаны			
Si-O-Si	1100-1000 ()	ν_{SiOSi} с.	Очень интенсивная широкая полоса.
цикло- (R_2SiO) ₃	~1020 (~9,80)	ν_{SiOSi} с.	
цикло- (R_2SiO) ₄	~1080 (~9,26)	ν_{SiOSi} с.	
цикло- (R_2SiO) ₅	~1080 (~9,26)	ν_{SiOSi} с.	
Другие корреляции			
$SiCH_3$	1280-1250 (7,81-8,00) 860-760 (11,63-13,16)	δ_{CH_3} с. с.	
SiC_2H_5	1250-1220 (8,00-8,20) 1020-1000 (9,80-10,00) 970-945 (10,31-10,58)	ср. ср. ср.	
SiC_6H_5	~1430 (~6,99) 1125-1100 (8,89-9,09) ~730 (~13,70) 700-690 (14,29-14,49)	ср. с. ср. ср.	
$SiOCH_3$	~2840 (~3,52) ~1190 (~8,40) ~1090 (~9,17) 850-800 (11,76-12,50)	с. ср. с. ср.	Группа чувствительна к гидролизу.



Пример. ИК спектр полидиметилсилоксана.

Неорганические ионы и молекулы

Inorg

AsO_4^{3-}	~800 (~12,50)	с.	
AsF_6^-	705-690 (14,18-14,49)	оч. с.	
BH_4^-	2400-2200 (4,17-4,55); 1130-1040 (8,85-9,62)	с.	
BF_4^-	~1060 (~9,43); ~1030 (9,71)	оч. с.	Одна или несколько полос.
BrO_3^-	810-790 (12,35-12,66)	оч. с.	
CO_3^{2-}	1450-1410 (6,90-7,09); 880-800 (11,36-12,50)	ср.	
HCO_3^-	1420-1400 (7,04-7,14); 1000-990 (10,00-10,10); 840-830 (11,90-12,05); 705-695 (14,18-14,39)	с. с.	
ClO_3^-	980-930 (10,20-10,75)	оч. с.	
ClO_4^-	1140-1060 (8,77-9,43)	оч. с.	Широкая полоса.
CrO_4^{2-}	950-800 (10,53-12,50)	с.	Несколько полос.
$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$	950-900 (10,53-11,11)	с.	
CN^- ; CNO^- ; CNS^-	2200-2000 (4,55-5,00)	с.	



CO	2100-2000 (4,76-5,00); ~1830 (~5,46)	с.	Карбонилы металлов.
HF ₂ ⁻	~1450 (6,90); ~1230 (8,13)	с.	
IO ₃ ⁻	800-700 (1250-14,29)	с.	Несколько полос.
MnO ₄ ⁻	920-890 (10,87-11,24); 850-840 (11,76-11,90)	оч. с.; ср.	
NH ₄ ⁺	3335-3030 (3,00-3,30); 1485-1390 (6,73-7,19)	оч. с.; с.	
N ₃ ⁻	2170-2080 (4,61-4,81); 1375-1175 (7,27-8,51)	с.; сл.	
NO ₂ ⁻	1400-1300 (7,14-7,69) 1250-1230 (8,00-8,13); 840-800 (11,90-12,50)	с. оч. с.; сл.	В комплексных нитритах наблюдается две полосы.
NO ₃ ⁻	1410-1340 (7,09-7,46); 860-800 (11,63-12,50)	оч. с.; ср.	
NO ₂ ⁺	1410-1370 (7,09-7,30)	с.	
NO ⁺	2370-2230 (4,22-4,48)	с.	
NO ⁺	1940-1630 (5,16-6,14)	с.	Координационные соединения.
NO ⁻	1170-1045 (8,55-9,57)	с.	Координационные соединения.
NO	1850-1790 (5,41-5,59)	с.	Нитрозилгалогениды.
PF ₆ ⁻	850-840 (11,76-11,90)	оч. с.	
PO ₄ ³⁻ ; HPO ₄ ²⁻ ; H ₂ PO ₄ ⁻	1100-950 (9,09-10,53)	с.	
S ₂ O ₃ ²⁻	1660-1620 (6,02-6,17); 1000-990 (10,00-10,10)	сл.; с.	
SO ₄ ²⁻	1130-1080 (8,85-9,26); 680-610 (14,71-16,40)	оч. с.; ср.	
HSO ₄ ⁻	1180-1160 (8,84-8,62); 1080-1000 (9,26-10,00)	с.; с.	
SO ₃ ²⁻	~1100 (~9,09); 880-840 (11,36-11,90)	пер.; с.	
SeO ₄ ²⁻	~830 (~12,05)	с.	
SiF ₆ ²⁻	~725 (~13,79)	с.	
Все силикаты	1100-900 (9,09-11,11)	с.	
UO ₂ ²⁺	940-900 (10,64-11,11)	с.	

Некоторые соединения благородных газов.			
XeO ₃	780, 344, 833, 317		Пирамидальная молекула.
XeO ₄	775,7, 267, 879,2, 305,9		Тетраэдрическая молекула.
O ₂ XeF ₂	490, 845, 198, 333, 578, 313, 902		Тетраэдрическая молекула.
XeF ₄	554,3, 218, 291, 524,		Плоская квадратная молекула.
OXeF ₄	9206 5676 2856 5276 2336 6086 3656 161		Тетрагонально-пирамидальная молекула.

Литература

- К.Лоусон, Инфракрасные спектры поглощения неорганических веществ, изд. “Мир”, М., 1964;
 К.Накамото, ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений, изд. “Мир”, М., 1991;
 К.Накамото, Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений, изд. “Мир”, М., 1966;
 А.И.Болдырев, Инфракрасные спектры минералов, изд. “Недра”, М., 1976;
 Колебательные спектры в неорганической химии, Сб. статей. Изд. “Наука”, М., 1971;
 И.И.Плюснина, Инфракрасные спектры силикатов, изд. МГУ, М., 1967;
 Ю.Я.Харитонов, Р.Л.Давидович, В.И.Костин, Атлас длинноволновых инфракрасных спектров поглощения комплексных фторидов металлов III – V групп и уранила, изд. “Наука”, М., 1977;

Влияние изотопического замещения на частоты колебаний

Izotop

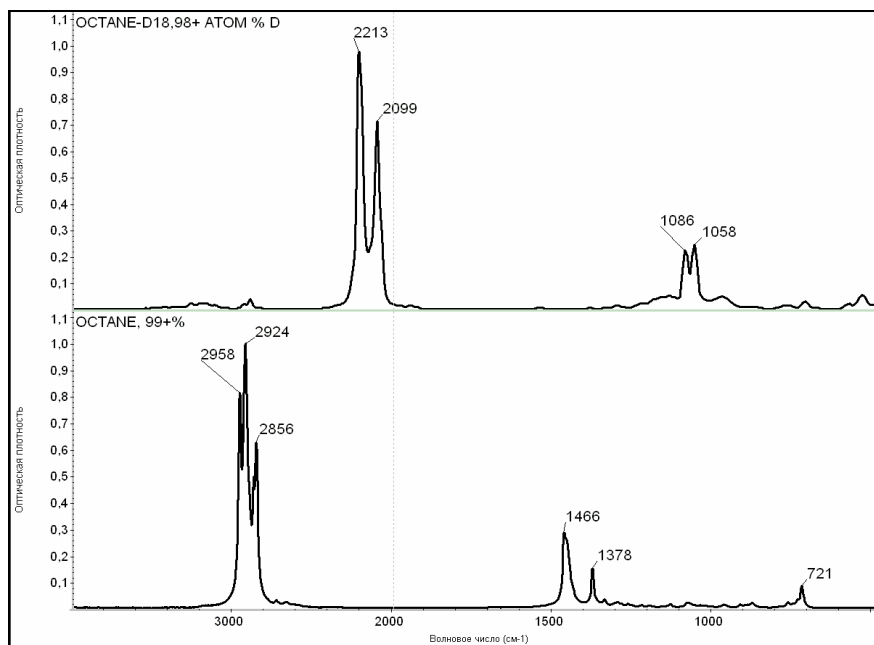
Поскольку колебательный спектр молекулы непосредственно зависит от масс образующих ее атомов, то изотопное замещение приводит к изменению спектра. Геометрические параметры и силовые постоянные при этом не изменяются. Различие в частотах колебаний изотопных разновидностей должна быть тем значительнее, чем больше соотношение масс изотопов m_u/m (m_u – масса более тяжелого изотопа). Наибольший изотопический эффект дает замещение атома водорода (протия) на дейтерий и тритий.

Частота валентных колебаний ν_u в изотопзамещенной двухатомной молекуле X-H (или приближенно для такой связи в многоатомной молекуле), в гармоническом приближении определяется соотношением:

$$\nu_u = \nu \sqrt{\frac{\mu}{\mu_u}} \quad \mu, \mu_u - \text{приведенные массы.}$$

Например, при $m_x \gg m_H$ замена водорода на дейтерий приводит к понижению частоты в $\sqrt{2}$ раз, т.е. на 1000 см^{-1} , на тритий – в $\sqrt{3}$ раз, т.е. на 1300 см^{-1} . С увеличением приведенной массы величины изотопических эффектов резко уменьшаются. Замена изотопа ^{16}O на ^{18}O приводит к смещению до 40 см^{-1} .

В приближении гармонических колебаний справедливо правило: при замене одного или нескольких атомов в молекуле атомами более тяжелых изотопов частоты нормальных колебаний уменьшаются или, по крайней мере, не увеличиваются. Существуют правила произведений и сумм для приближенного вычисления частот одних изотопных разновидностей по другим.



Пример. ИК спектры н-октана и дейтерооктана- d_{18} .

Частоты основных колебаний некоторых изотопзамещенных форм молекулы воды (парообразное состояние) по данным [4].

Молекула	ν в противофазе	ν в фазе	δ изменение вал. угла
H_2^{16}O	3755,79	3656,65	1594,59
HD^{16}O	3707,47	2726,73	1402,20
D_2^{16}O	2788,05	2671,46	1178,33
D_2^{18}O	2764 ± 5	2657 ± 5	1169 ± 2
DT^{16}O	2735 ± 5	-	-
T_2^{16}O	2370 ± 5	-	995 ± 5



Рекомендуемая литература по влиянию изотопного замещения на ИК спектры:

1. М.В.Волькенштейн, Л.А.Грибов, М.А.Ельяшевич, Б.И.Степанов, Колебания молекул, “Наука”, М., 1972;
2. Г.С.Коптев, Ю.А.Пентин, Расчет колебаний молекул, Изд. МГУ, 1977;
3. Л.М.Свердлов, М.А.Ковнер, Е.П.Крайнов, Колебательные спектры многоатомных молекул, “Наука”, М., 1970;
4. Г.В. Юхневич. Инфракрасная спектроскопия воды, “Наука”, М., 1973;

