

Tabelle A.135 (Fortsetzung)

Wellenzahl ¹⁾ in cm ⁻¹	Schwingungstyp	Verbindungen
2900...2400 m	—O—D-Valenz —N—D-Valenz	Amine, Alkohole
2830...2815 m	—O—CH ₃ -Valenz	Methylether (vgl. Abb. E.25)
2820...2760 m	—N—CH ₃ -Valenz	N-Methyl-amine (vgl. Abb. E.32)
2820...2720 m	—C(O)—H-Valenz	Aldehyde
2600...2550 w	—S—H-Valenz	Thiole, Thiophenole (vgl. Abb. E.68)
2300...2100 m-s	—C=X-Valenz (X=C,N,O)	Acetylene, Nitrile, Kohlenmonoxid
2270...2000 s	—Y=C=X-Valenz (Y=N,C; X=O,S) —N ₃ -Valenz	Ketene, Isocyanate, Isothiocyanate, Azide
2260...2190 w	—C=C-Valenz	1,2-disubstituierte Acetylene
2260 m	—N=N-Valenz	Diazoniumverbindungen
2260...2210 m	—C=N-Valenz	Nitrile (vgl. Abb. E.27)
2185...2120 m	—N=C-Valenz	Isocyanide
2140...2100 m	—C=C-Valenz	monosubstituierte Acetylene (vgl. Abb. E.62)
1850...1600 s	—C=O-Valenz	Carbonylverbindungen
1785...1700 s	—C=O-Valenz	Carbonsäurehalogenide
1840...1780 s	—C=O-Valenz	Carbonsäureanhydride (vgl. Abb. E.42)
1780...1720 s	—C=O-Valenz	(2 Banden)
1780...1750 s	—C=O-Valenz	Carbonsäurephenyl- bzw. -vinylester
1760...1700 s	—C=O-Valenz	gesättigte Carbonsäuren (vgl. Abb. E.38)
1720...1690 s	—C=O-Valenz	α, β-ungesättigte und aromatische Carbonsäuren (vgl. Abb. E.41, E.68)
1750...1730 s	—C=O-Valenz	gesättigte Carbonsäurealkylester
1730...1710 s	—C=O-Valenz	gesättigte Aldehyde und Ketone, α, β-ungesättigte und aromatische Carbonsäureester (vgl. Abb. E.4, E.9)
1745 s	—C=O-Valenz	Cyclopentanon
1715 s	—C=O-Valenz	Cyclohexanon
1705 s	—C=O-Valenz	Cycloheptanon
1715...1680 s	—C=O-Valenz	α, β-ungesättigte und aromatische Aldehyde (vgl. Abb. E.5, E.6)
1690...1630 s	—C=N-Valenz	Azomethine, Oxime usw.
1690...1660 s	—C=O-Valenz	α, β-ungesättigte und aromatische Ketone
1690...1650 s	—C=O-Valenz	primäre, sekundäre und tertiäre Carbonsäureamide (Amidbande I)
1675...1630 m	—C=C-Valenz	Aromaten, Olefine (vgl. Abb. E.41, E.60)
1650...1620 m	—NH ₂ -Deform.	primäre Säureamide (Amidbande II)
1650...1550 m	—N—H-Deform.	primäre und sekundäre Amine (vgl. Abb. E.25, E.27, E.28)
1630...1615 m	H—O—H-Deform.	Kristallwasser in Hydraten
1610...1590 m	Ringschwingung	Aromaten (vgl. Abb. E.11, E.27, E.38, E.62, E.64)
1610...1560 ss	—CO-Valenz in COO [⊖]	Salze von Carbonsäuren
1600...1775 1500	—NH ₄ [⊕] -Deform.	Ammoniumsalze (2 Banden)
1570...1510 m	—N—H-Deform.	sekundäre Säureamide (Amidbande II)
1560...1515 s	—NO ₂ -Valenz	Nitroalkane und aromatische Nitroverbindungen (vgl. Abb. E.28, E.65)
1500...1480 m	Ringschwingung	Aromaten (vgl. Abb. E.27, E.38, E.62, E.64)

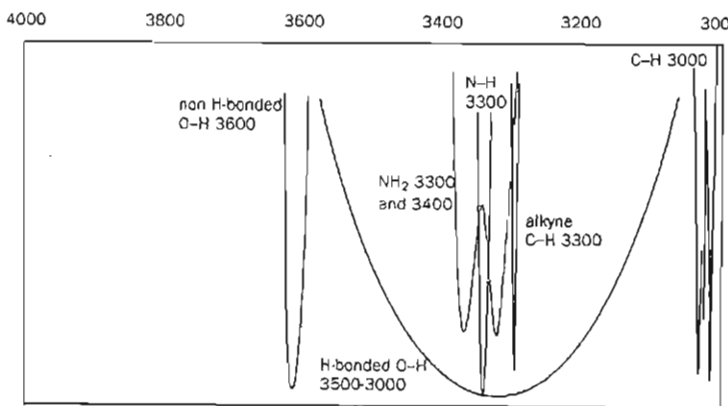
Tabelle A.135 (Fortsetzung)

Wellenzahl ¹⁾ in cm ⁻¹	Schwingungstyp	Verbindungen
1470...1400 s-m	—CH ₃ - u. —CH ₂ -Deform.	gesättigte Kohlenwasserstoffe und Kohlenwasserstoffreste (vgl. Abb. E.9, E.11, E.21, E.35, E.48, E.54)
1420...1330 s	—SO ₂ -Valenz	organische Sulfonylverbindungen
1400...1300 s, b	—CO ₂ -Valenz in COO [⊖]	Salze von Carbonsäuren
1390...1370 s	—CH ₃ -Deform.	gesättigte Kohlenwasserstoffe und Kohlenwasserstoffreste (vgl. Abb. E.9, E.11, E.21, E.35, E.48, E.54)
1360...1030 m-s	—C—N-Valenz	Amide, Amine
1350...1240 s	—NO ₂ -Valenz	aliphatische und aromatische Nitroverbindungen (vgl. Abb. E.28, E.65)
1200...1145 s	—SO ₂ -Valenz	organische Sulfonylverbindungen
1300...1020 m-s	—C—O—C-Valenz	Ether, Ester, Anhydride, Acetale
1300...1050	—C—O—C-Valenz	gesättigte Ester, Anhydride (2 Banden)
1275...1200 ss	—C—O—C-Valenz	aromatische und Vinylether (2 Banden) (vgl. Abb. E.25)
1075...1020 s	—C—O—C-Valenz	aliphatische und alicyclische Ether (vgl. Abb. E.32, E.45, E.46)
1150...1020 ss	—C—O—C-Valenz	Phenole (vgl. Abb. E.64, E.65)
1260...1200 s	—C—O-Valenz	tertiäre Alkohole
1200...1150 s	—C—O-Valenz	sekundäre Alkohole (vgl. Abb. E.21)
1150...1100 m	—C—O-Valenz	primäre Alkohole
1050...1010 s	—S=O-Valenz	Sulfoxide
1070...1030 s	—C—H-Deform.	1,2-disubstituierte Ethylene (trans)
970...960 s	—C—H-Deform.	monosubstituierte Ethylene (2 Banden)
995...985 s	—C—H-Deform.	(vgl. Abb. E.60)
915...905 s	O—H...O-Deform.	Carbonsäuren (dimer) (vgl. Abb. E.38, E.41, E.68)
920 b	—C—H-Deform.	1,3-disubstituierte Benzene (2 Banden)
810...750 s	—C—H-Deform.	1,1-disubstituierte Ethylene
710...690 s	—C—H-Deform.	1,4-disubstituierte Benzene (vgl. Abb. E.57, E.65)
890 s	—C—H-Deform.	aromatische und aliphatische Halogenverbindungen
840...810 s	—C—H-Deform.	1,2-disubstituierte Benzene (vgl. Abb. E.27, E.28, E.68)
800...500 m-w	—C—Hal-Valenz	monosubstituierte Benzene (2 Banden) (vgl. Abb. E.11, E.38, E.46, E.60, E.62, E.64)
770...735 s	—C—H-Deform.	n-Paraffine mit mehr als 4 CH ₂ -Gruppen
770...730 s	—C—H-Deform.	organische Schwefelverbindungen (Thiole, Thioether usw.)
710...690 s	—C—H-Deform.	1,2-disubstituierte Ethylene (cis)
780...720 m	—CH ₂ -Deform.	Benzen
800...600 m-w	—C—S-Valenz	
730...680 m	—C—H-Deform.	
670 s	—C—H-Deform.	

¹⁾ ss = sehr stark, s = stark, m = mittel, w = schwach, b = breit, sb = sehr breit

Frequenz [cm ⁻¹]	Intensität	Gruppe	Kommentar
1440-1470	Mittel	CH ₂	Deformation
-1380	Mittel	CH ₃	Deformation
~1350	Stark	NO ₂	Sym. N=O Valenz
1250-1300	Stark	P=O	Valenz
1310-1350	Stark	SO ₂	Antisym. S=O Valenz
1120-1160	Stark	SO ₂	Sym. S=O Valenz
~1100	Stark	C-O	Valenz
950-1000	Stark	C=CH	Deformation
-690 und -750	Stark	Ar-H	Fünf benachbarte Ar-H – out of plane
-750	Stark	AR-H	Vier benachbarte Ar-H – out of plane
-700	Stark	C-Cl	Valenz

Effects of substituents on IR carbonyl frequencies



Effect	Group	C=O stretch, cm ⁻¹	Frequency change ^a , cm ⁻¹
inductive effect	Cl	1800	+85
	OCOR	1765, 1815	+50, +100
	OR	1745	+30
conjugation	H	1730	+15
	C=C	1685	-30
	aryl	1685	-30
ring strain	NH ₂	1630	-85
	5-membered ring	1745	+30
	4-membered ring	1780	+65
	3-membered ring	1815	+100

^a Difference between stretching frequency of C=O and stretching frequency of a typical saturated ketone (1715 cm⁻¹).

