

Ramanova mikro-spektroskopie - [RMS]

(Lucia Becherová, Martin Člupek, Marie Švecová)

1. Úvod

Ramanova spektrometrie je metodou vibrační molekulové spektroskopie, která byla pojmenována po indickém fyzikovi Čandrašékharu Venkatau Ramanovi (Nobelova cena 1930). Profesor Raman společně s K. S. Krišnanem popsali v roce 1928 jev neelastického optického rozptylu, který je základem metody. Jedná se o metodu vhodnou pro identifikaci látek, při určování jejich složení a struktury. Používá se při analýze pevných látek (krystalické i amorfni materiály, kovy, polovodiče, polymery atp.), kapalin (čisté látky, roztoky vodné i nevodné), plynů, dále též při analýze povrchů (např. sorbenty, elektrody, senzory) či při analýze biologických systémů (od biomolekul až po organismy). Své uplatnění Ramanova spektroskopie nachází od mineralogie a geochemie, přes chemický a farmaceutický průmysl až po biologii a lékařství.

Od svého objevu v roce 1928 až téměř do poloviny 70. let se však Ramanova spektroskopie používala pouze pro studium makroskopických materiálů a sloužila tak především k získávání informací o základních molekulárních vlastnostech (především strukturních parametrech) látek. Limitujícím faktorem širšího využití metody byla až do 60. let 20. století absence zdroje intenzivního monochromatického záření. S využitím laseru, vysokovýkonného budícího zdroje, pro excitaci Ramanova rozptylu se však objevila možnost využít metodu také pro mikroanalýzu, protože vyšší zářivé toky, poskytované laserem, do značné míry kompenzují pokles v počtu analyzovaných molekul. Využití laseru vytvořilo z Ramanovy mikrospektroskopie jedinečnou metodu, která svými možnostmi předčila do té doby známé techniky mikroanalýzy vzorku. Na rozdíl od nich totiž umožňuje selektivně rozlišit chemickou formu jednotlivých složek mikroskopického vzorku. První komerčně dostupný Ramanův mikro-spektrometr (mikroskop) se začal prodávat v roce 1977 pod označením Mole (Jobin Yvon, Francie).

Mimo to byl v roce 1974 náhodně pozorován další optický jev, svázaný s Ramanovou spektroskopií, u kterého se uplatňují nano- a mikro- strukturní motivy. Tímto jevem je zesílení intenzity Ramanova rozptylu pro molekuly látek adsorbovaných na vhodných kovových substrátech.

2. Teorie

Podstatou Ramanova rozptylu je zářivý dvoufotonový přechod mezi dvěma stacionárními vibračními stavy molekuly, jejichž energie jsou E_1 a E_2 , vyvolaný interakcí s fotonem dopadajícího záření o frekvenci $\nu_0 > |E_2 - E_1| / h$, kde h je Planckova konstanta, a provázený vyzářením fotonu rozptýleného záření o frekvenci ν_R (viz Obr. 1). Tento rozptylový efekt si lze zjednodušeně představit jako současnou absorpci fotonu budícího záření molekulou, kdy molekula přechází na

virtuální energetickou hladinu, a emisi sekundárního fotonu, za splnění podmínky zachování energie:

$$h\nu_R = h\nu_0 \pm (E_2 - E_1) \quad (1)$$

Existuje několik možností takto uskutečněného přechodu podle polohy virtuální energetické hladiny vůči vlastním stavům molekuly (např. normální a rezonanční Ramanův jev).

Ramanův jev je možno popsat pomocí kvantové teorie, jeho základy je však možno vystihnout i v klasickém přiblížení. V klasickém přiblížení platí pro molekulu interagující se zářením, že v molekule je indukován dipólový moment $\mathbf{p}$:

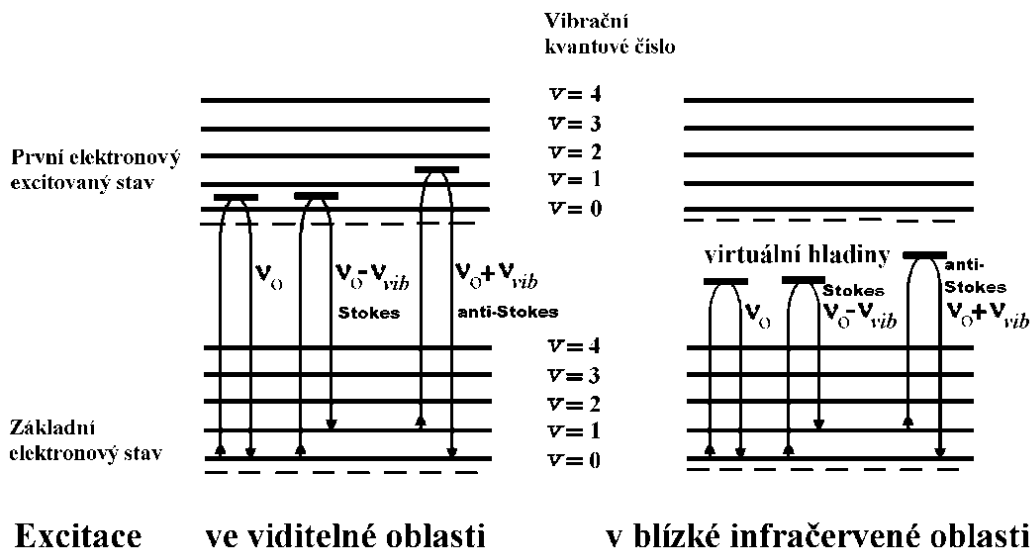
$$\mathbf{p} = \alpha E \cos(2\pi\nu_0 t) + \frac{1}{2} \frac{\partial \alpha}{\partial q} q E \{ \cos[2\pi(\nu_0 - \nu_{vib})t] + \cos[2\pi(\nu_0 + \nu_{vib})t] \} \quad (2)$$

kde ν_0 je frekvence budícího záření, ν_{vib} je vibrační frekvence, $\mathbf{E}$ je vektor intenzity elektrického pole dopadajícího záření, q jsou vnitřní souřadnice molekuly a α je polarizovatelnost molekuly (polarizibilita, tj. míra „obtížnosti“, s níž se vychylují negativní náboje elektrickým polem). Z rovnice (2) vyplývá, že molekula emituje záření s nezměněnou frekvencí (ν_0 - Rayleighův rozptyl) a dále záření s frekvencemi ($\nu_0 + \nu_{vib}$) a ($\nu_0 - \nu_{vib}$), které se souhrnně nazývají Ramanův rozptyl, při čemž nižší frekvence ($\nu_0 - \nu_{vib}$) odpovídá Stokesovu rozptylu, zatímco vyšší frekvence ($\nu_0 + \nu_{vib}$) náleží anti-Stokesovu rozptylu. Z rovnice je též zřejmé, že pro vznik Ramanovy linie je nutné, aby při daném vibračním pohybu docházelo ke změně polarizovatelnosti, tedy aby

$$\frac{\partial \alpha}{\partial q} \neq 0 \quad (3)$$

Pokud by změna polarizovatelnosti během vibračního pohybu byla nulová, zůstal by v rovnici (2) nenulový pouze člen pro Rayleighův rozptyl. Rovnice (3) se označuje za základní výběrové pravidlo pro Ramanovu spektrometrii, které je principiálně odlišné pro pozorování vibračního modu v infračervené spektrometrii, kde touto základní podmínkou je změna dipólového momentu během příslušného vibračního pohybu.

Pokud je daný vibrační mód aktivní v Ramanově spektru, bude pro něj principiálně možné pozorovat dvě linie, a to symetricky rozložené kolem linie Rayleighova rozptylu – ve Stokesově oblasti ($\nu_R = \nu_0 - \nu_{vib}$) a v anti-Stokesově oblasti ($\nu_R = \nu_0 + \nu_{vib}$). V řadě praktických případů jsou však měřena spektra pouze v oblasti Stokesova rozptylu, a to s ohledem na nutnost odfiltrovat Rayleighův rozptyl, jehož intenzita je zhruba 10^5 - 10^{12} -krát vyšší než intenzita běžných Ramanových linií.



Obr. 1: Schéma dvoufotonových přechodů; Ramanův a Rayleighův rozptyl při excitaci ve viditelné a blízké infračervené oblasti ($\uparrow$ - značí excitaci, $\downarrow$ - značí emisi fotonu)

Ramanova spektra stejně jako infračervená spektra poskytují informace o vibračních (a rotačních) pohybech polyatomických částic (molekul, krystalů atd.). Frekvence normálních vibračních módů závisí na hmotnostech zúčastněných atomů a na síle vazeb mezi nimi, tj. na základních parametrech popisujících strukturu molekuly. Obecně vzato, identifikační možnosti Ramanovy spektrometrie jsou srovnatelné s potenciálem infračervené spektrometrie. Je třeba zdůraznit, že **vibrační frekvence molekul jsou nezávislé na tom, zda je studujeme infračervenou nebo Ramanovou spektroskopií**, avšak intenzity spektrálních linií budou pro obě spektroskopické techniky zřetelně odlišné. **V Ramanově spektru je intenzita pásů úměrná druhé mocnině změny polarizovatelnosti během vibračního pohybu $(\delta\alpha/\delta q)^2$, zatímco v infračerveném spektru je úměrná druhé mocnině změny dipólového momentu.** Přiřazení pásů jednotlivým vibračním módům se tak provádí podobně, jak je obvyklé při interpretaci absorpčních spekter ve střední infračervené oblasti. Kombinované tabulky charakteristických vibračních frekvencí funkčních skupin obsahují pro danou funkční skupinu společný údaj o poloze pásu (vlnočtu, cm^{-1}) a zvláště údaje o intenzitě pásu v infračerveném a v Ramanově spektru. Zatímco v infračervených spektrech jsou intenzivní pásy pro vibrace s výraznou změnou dipólového momentu (vibrace polárních skupin, např. $-\text{OH}$, $-\text{C}=\text{O}$, $-\text{NO}_2$), intenzity pásů v Ramanových spektrech souvisejí se změnou polarizovatelnosti (intenzivnější pásy jsou pro symetrické vibrace a vibrace ve fázi než pro vibrace antisymetrické a v protifázi, obzvláště intenzivní jsou pásy vícenásobných symetrických vazeb – např. $-\text{C}\equiv\text{C}-$, $-\text{C}=\text{C}-$, $-\text{N}=\text{N}-$). Vzhled infračervených a Ramanových spekter je tak silně ovlivněn symetrií molekul (buněk krystalu) a symetrií jednotlivých vibračních pohybů. (pozn. Polohy a intenzity vybraných charakteristických vibrací jsou pro ilustraci shrnuty v příloze tohoto návodu).

Pro základní popis výhod a nevýhod mikrospektroskopické techniky je důležité si uvědomit, že při minimalizaci měřené plochy vzorku klesne v důsledku menšího počtu molekul intenzita

měřeného signálu. Další problém představuje neideálnost optických vlastností objektivů, kdy se část zářivého toku průchodem přes objektiv a ostatní optické prvky ztrácí. Tento negativní efekt je pouze částečně kompenzován použitím vysokovýkonného zdroje záření (laser). Možnost prostorově rozlišené mikroanalýzy však spolehlivě převáží uvedené nevýhody. Použitím mikroskopických technik totiž můžeme v běžné Ramanově spektroskopii dosáhnout i k analýze velmi malých množství vzorků, konkrétně k velmi malému množství pevných látek (jednotlivé krystaly). Mikroanalýza vzorku je významná technika poskytující informace o fyzikálně-chemických vlastnostech specifické mikroskopické oblasti studovaného vzorku a může, při využití technik spektrálního mapování či zobrazování, sloužit ke sledování distribuce analytu. To už je ale problematika, která přesahuje náplň této laboratorní úlohy.

Povrchem zesílený Ramanův rozptyl (surface-enhanced Raman scattering – SERS) patří mezi techniky objevené experimentálně bez předchozího teoretického odvození. Teoretický popis tohoto jevu je i dnes poměrně komplikovaný a přesahuje možnosti tohoto návodu. Zjednodušeně můžeme konstatovat, že schopnost či neschopnost určitého substrátu zesilovat signál Ramanova rozptylu je dána fyzikálními vlastnostmi použitého kovu ale i morfologií povrchu substrátu v nano-až mikroměřítku. Povrchové zesílení je z větší části způsobeno interakcí laserového záření s povrchem vhodného kovu, následkem čehož dojde ke kolektivní oscilaci elektronů ve vodivostním pásu (Povrchová plasmonová resonance – SPR). Vybuzená povrchová plasmonová vlna pak vytváří pulsující energetické pole, které na vhodně strukturovaném povrchu vystupuje nad úroveň substrátu, obklopuje molekulu analytu, která se nachází v blízkosti povrchu, interaguje s jejími elektrony a zvyšuje tak jejich polarizaci. Nevýhodou je, že míra povrchového zesílení není pro všechny spektrální pásy stejná, ale závisí na orientaci navázané molekuly vůči povrchu kovového substrátu – neplatí intenzity uvedené v tabulkách charakteristických vibrací.

3. Zadání práce

1. Seznamte se s obsluhou příslušného typu Ramanova spektrometru (*demontrace a dohled asistenta*)
2. Proměřte zadaný vzorek a zhodnoťte vliv mikro-, nano- uspořádání na získaná data (*dohled asistenta*)
3. Získané závěry shrňte ve formě krátkého, výstižného protokolu

4. Popis zařízení

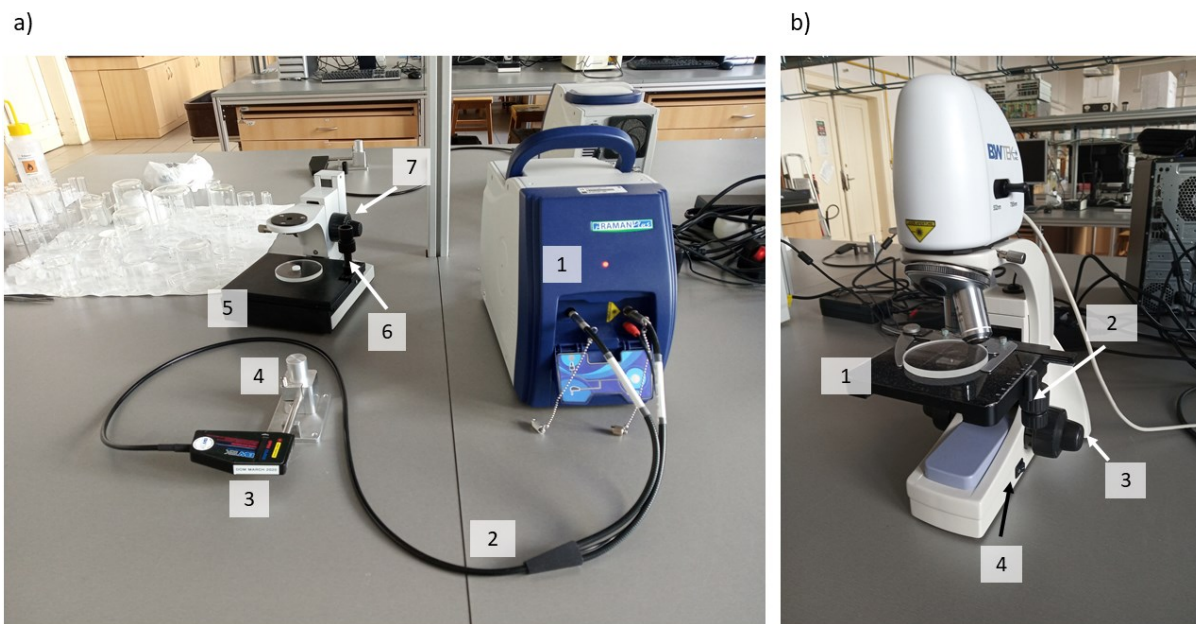
Pro Ramanovu spektrometrii se používají jak disperzní spektrometry, tak spektrometry s Fourierovou transformací (FT). Hlavními součástmi spektrometru jsou: zdroj excitujícího záření (laser), vzorkovací prostor (komora), sběrná optika, disperzní prvek (disperzní spektrometry) / interferometr (FT spektrometry), detektor.

Pro Ramanovu spektrometrii lze využít jako zdroje záření různé typy laserů, které pokrývají viditelnou (VIS) oblast, blízkou infračervenou (NIR) oblast, případně i ultrafialovou (UV) oblast. U

jednoduchých spektrometrů je k dispozici jeden laser, obvykle pevnolátkový či diodový, pracující v kontinuálním nebo kvasikontinuálním režimu. U vědeckých systémů jsou připraveny optické cesty pro několik laserů, umožňujících přizpůsobit vlnovou délku excitace řešené problematice. Výhodou excitace v UV-VIS oblasti je vyšší intenzita rozptylu (intenzita rozptylu klesá se čtvrtou mocninou vlnové délky excitujícího záření), naopak zásadní nevýhodou jsou rizika velmi intenzivní fluorescence nebo nežádoucích fotochemických reakcí. Tato rizika jsou dána polohou virtuální hladiny v oblasti elektronově excitovaných hladin (obr. 1). Právě potlačení rizika nežádoucích fotochemických a fotofyzikálních procesů je hlavní výhodou excitace Ramanova jevu v NIR oblasti, kdy virtuální hladina je pod úrovní elektronově excitovaných stavů (obr. 1). NIR excitace však vzhledem k nižší intenzitě rozptylu vyžaduje systémy o vysoké světelnosti a vysoce citlivé (chlazené) detektory. Tok záření Ramanova rozptylu obecně též roste se zvyšujícím se tokem excitujícího laserového záření, to znamená se zvyšujícím se **výkonem laseru** („laser power“). Výkon laseru je však limitován riziky ohřevu vzorku, jeho rozkladu, příp. riziky dalších nežádoucích fotochemických a fotofyzikálních procesů. Výkon laseru lze obvykle softwarově nastavit a přizpůsobit jeho hodnotu vlastnostem vzorku, požadavkům na rychlost analýzy a na hodnotu poměru signál/šum.

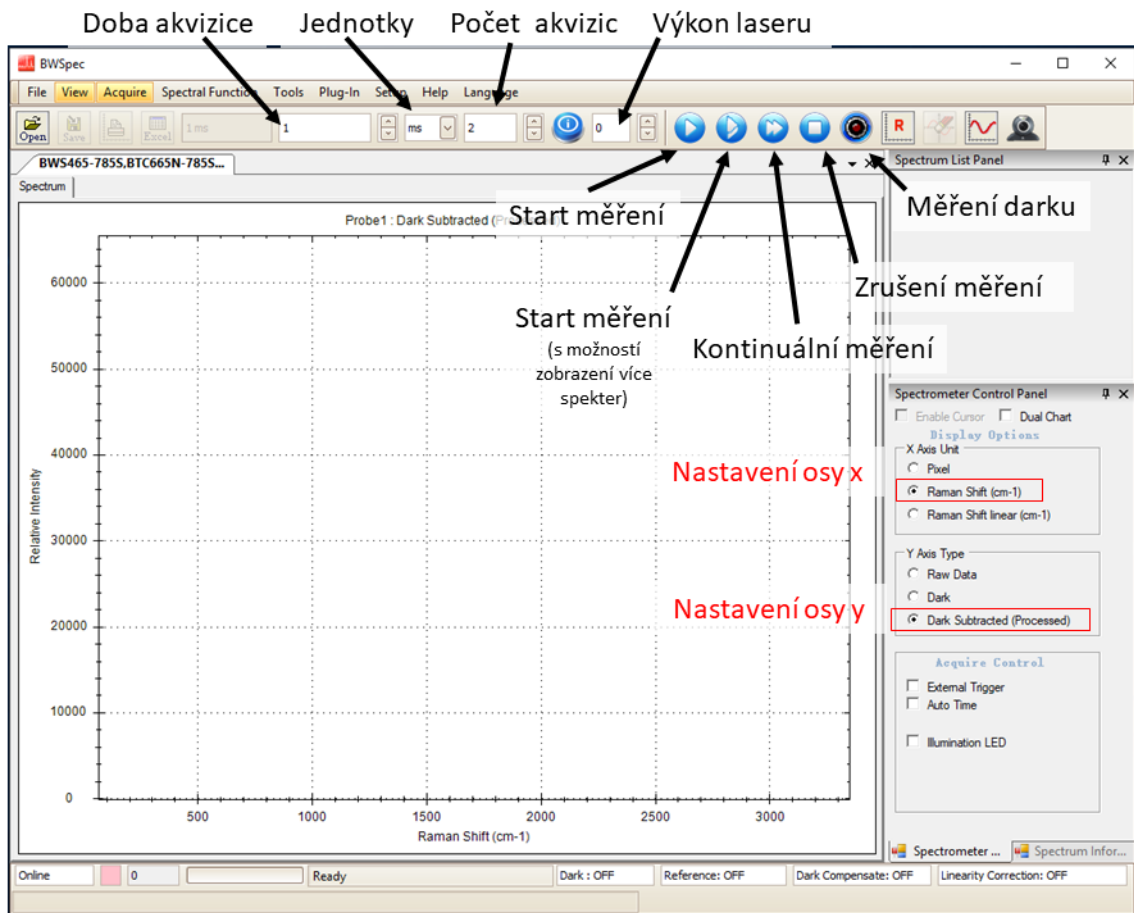
Důležitým aspektem umístění vzorku v kyvetovém prostoru je též **možnost jeho přesného polohování** vůči excitujícímu paprsku a sběrné optice rozptýleného záření. Přístroje jsou často vybaveny x-y-z polohovacím zařízením, ať již s manuálním ovládáním či s krokovými motory s řízením pomocí joysticku, tlačítek či ovládacího softwaru. Zásadní je především vzdálenost vzorku od sběrné optiky, tak aby rozptýlené záření bylo optimálně soustředěno buď na vstupní štěrbinu dispersního Ramanova spektrometru, či na vstupní aperturu Ramanova spektrometru s Fourierovou transformací, případně do sběrného optického vlákna.

Pro potřeby této úlohy jsou v analytické laboratoři instalovány dva disperzní Ramanovy spektrometry iRaman Plus (B&W Tek, USA) s příslušenstvím pro měření kapalných a pevných vzorků. Měřicí sondu je možné rovněž připojit k optickému mikroskopu, který nahrazuje vzorkový prostor. K excitaci Ramanova rozptylu jsou využity termoelektricky chlazené diodové lasery, poskytující záření o vlnové délce 785 nm s maximálním výkonem 450 mW (ca 350 mW v prostoru vzorku, po průchodu vláknovou optikou). Držáky vzorku jsou umístěny mimo tělo přístroje a excitující záření je na vzorek fokusováno pomocí měřicí hlavičky spojené s přístrojem optickými vlákny, kdy jedno vlákno vede excitující záření a druhé slouží k přenosu vzorkem rozptýleného záření. Rayleighův rozptyl je odfiltrován tak, že rozsah přístroje je od cca 65 cm⁻¹ do 3350 cm⁻¹ ve Stokesově oblasti. Rozsah je pevně určen, protože přístroj neobsahuje žádné pohyblivé prvky, disperzní mřížka i mnohokanálový termoelektricky chlazený detektor jsou fixovány ve výrobcem nastavených polohách. K vlastnímu tělu spektrometru je pak vláknovou optikou připojena měřicí hlavička, která je buď fixována v držáku pro vialky, tělu x-y-z polohovacího zařízení nebo optickému mikroskopu (Obr. 1).



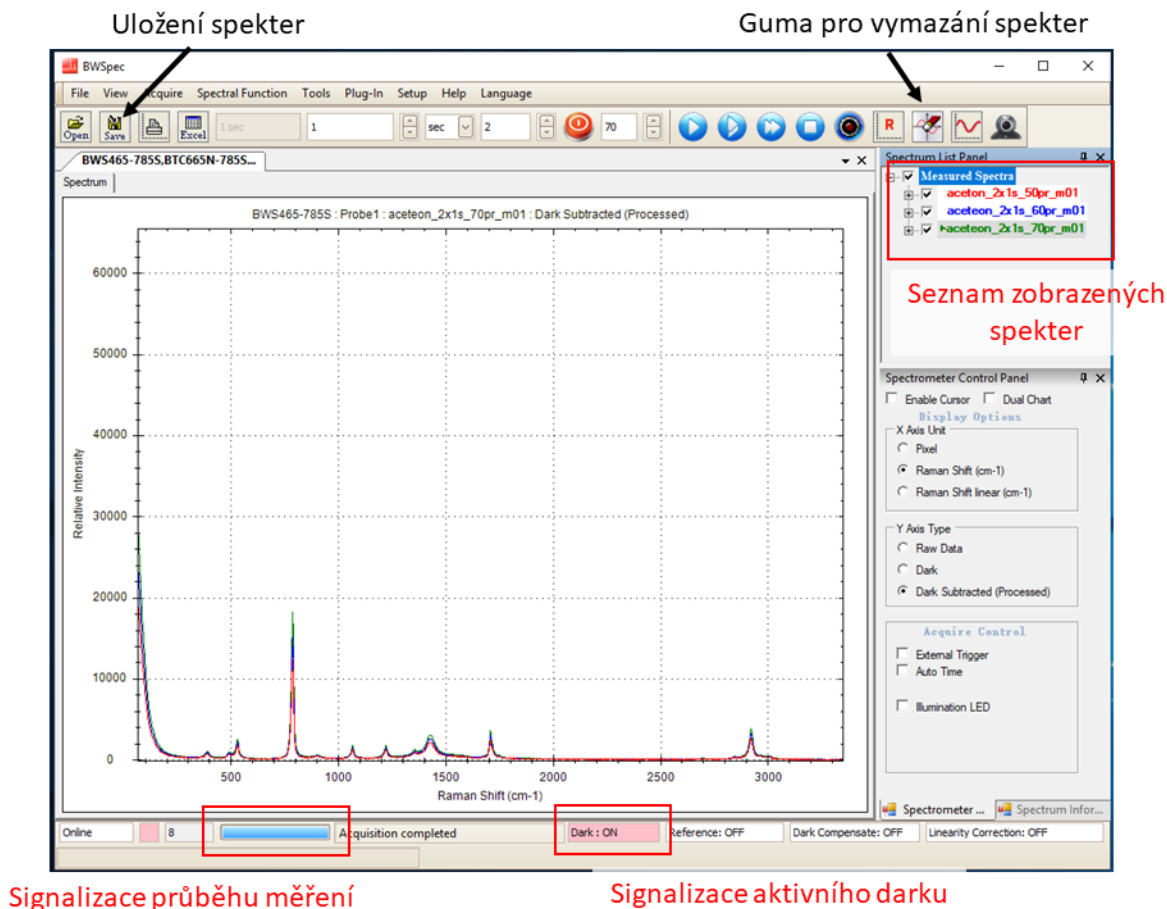
Obr. 1 Pohled na spektrometr iRaman Plus s příslušenstvím pro a) makroskopické a b) mikroskopické vzorkování; označení součástí a) 1 - tělo spektrometru, 2 – vláknová optika, 3 – sonda, 4 – držák na vialky, 5 – x-y polohovací stolek pro pevné vzorky, 6 – posun stolku v ose x a y, 7 – fokusace; b) 1 - x-y polohovací stolek mikroskopu, 2 - posun stolku v ose x a y, 3 – fokusace, 4 - osvětlení

Ramanova spektra budete měřit v prostředí softwaru BWSpec (B&W Tek, USA), který řídí celý spektrometr. Nastavení jednotlivých parametrů je poměrně intuitivní na horní liště základního okna (Obr. 3). První pole slouží k nastavení doby samotné akumulace (ve vedlejší okně je pak možnost volby jednotky v milisekundách, sekundách a minutách), druhé pak k počtu opakování jednotlivých akumulací. Poslední aktivní pole slouží k nastavení výkonu laseru v procentech z maximálního možného (ca 350 mW v závislosti na použitém příslušenství, nenastavuje se absolutní hodnota). Další tlačítka slouží ke spuštění jednotlivého měření (jednoduchá šipka), záznamu spektra a přidání do aktuálního pracovního okna s hromadným zobrazením získaných spekter (ikona s dvěma šipkami přes sebe), kontinuální měření (dvojitá šipka), dále tlačítko pro zastavení měření (čtvereček) a záznam korekce (dark) při vypnutém laseru (černočervené kolečko). V pravé části je nutné zkontrolovat správné volby, tedy že na ose x máme Ramanův posun („Raman shift“ v cm^{-1}), na ose y spektrum korigované na „dark“ (konkrétně „dark subtracted“) a v základním nastavení vypnuté externí spouštění zahájení měření (external trigger) či časovač (auto time).



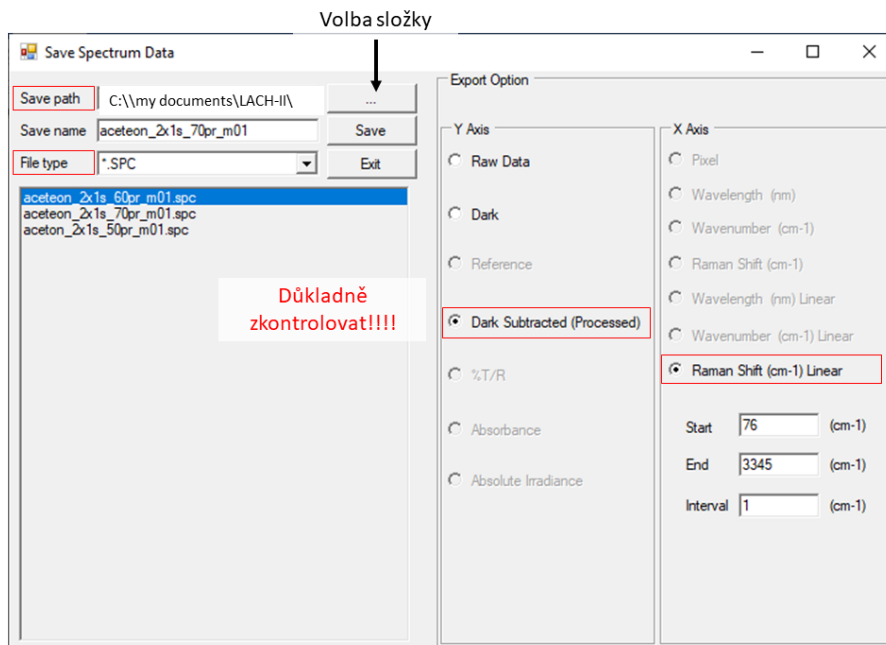
Obr. 3 Hlavní okno programu BWSpec a představení základních funkcí

Po vložení vzorku do vzorkového prostoru a jeho zakrytí je nutné změřit korekci pro vypnutí laser. Tato reference, označovaná jako dark, v sobě zahrnuje informace o dopadajícím záření na detektor z různých netěsností systému (např. nedoléhající víčko kyvetového prostoru), které mohou způsobovat různé interference a defekty ve finálním spektru. Hlavní vliv na intenzitu zaznamenaného záření má především doba a počet jednotlivých akumulací, proto je nutné při každé změně těchto parametrů dark aktualizovat, stejně tak jako při výměně vzorku. Informace o aktuálním a používaném darku je signalizována uprostřed dolní lišty (Obr. 4). Poslední důležitá ikona z daného pracovního okna je symbolizována gumou a slouží k vymazání všech spekter v pracovním okně (v některých případech nutné pro obnovení možnosti změření darku).



Obr. 4: Hlavní okno programu BWSpec a představení dalších základních funkcí

Nevýhodou softwaru je, že automaticky neukládá naměřená data. Je velmi důrazně doporučováno okamžitě po doměření každého spektra ho ručně uložit s aktuálním (a správně zvoleným) darkem pro korekci. Spektrum vyberte z nabídky v pravé části okna, klikněte na něj pravým tlačítkem myši a přejmenujte ho. Název spektra volte jednoznačný (zkrácený název vzorku a experimentálních podmínek), abyste byli schopni z něho identifikovat konkrétní experiment. Jelikož je software vyvinut zahraniční firmou, vyvarujte se používání diakritiky a dalších speciálních znaků v názvu (především čárky a tečky). Místo mezer je vhodné používat pomlčky. Správně pojmenované spektrum následně uložte pomocí ikony v levém horním rohu (Obr. 4). Ve vyskakovacím okně (Obr. 5) zkontrolujte správnou cestu k vaší složce pro uložení spektra (případně změňte pomocí tlačítka se třemi tečkami), jeho název a volbu formátu *.spc (běžný formát pro ukládání spekter, kompatibilní s dalšími softwary). V pravé části rovněž zkontrolujte ukládaný rozsah spektra (pro celý experiment stejný). Po kontrole všech parametrů uložte spektrum tlačítkem „save“.

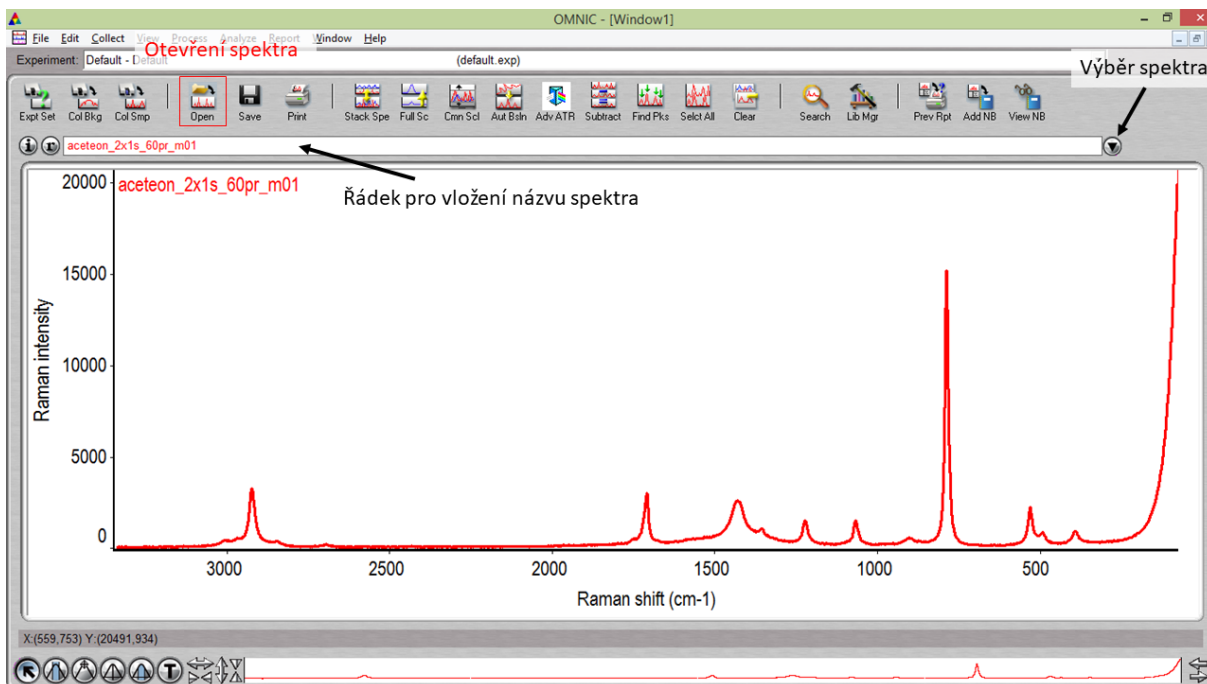


Obr. 5: Příklad uložení spektra

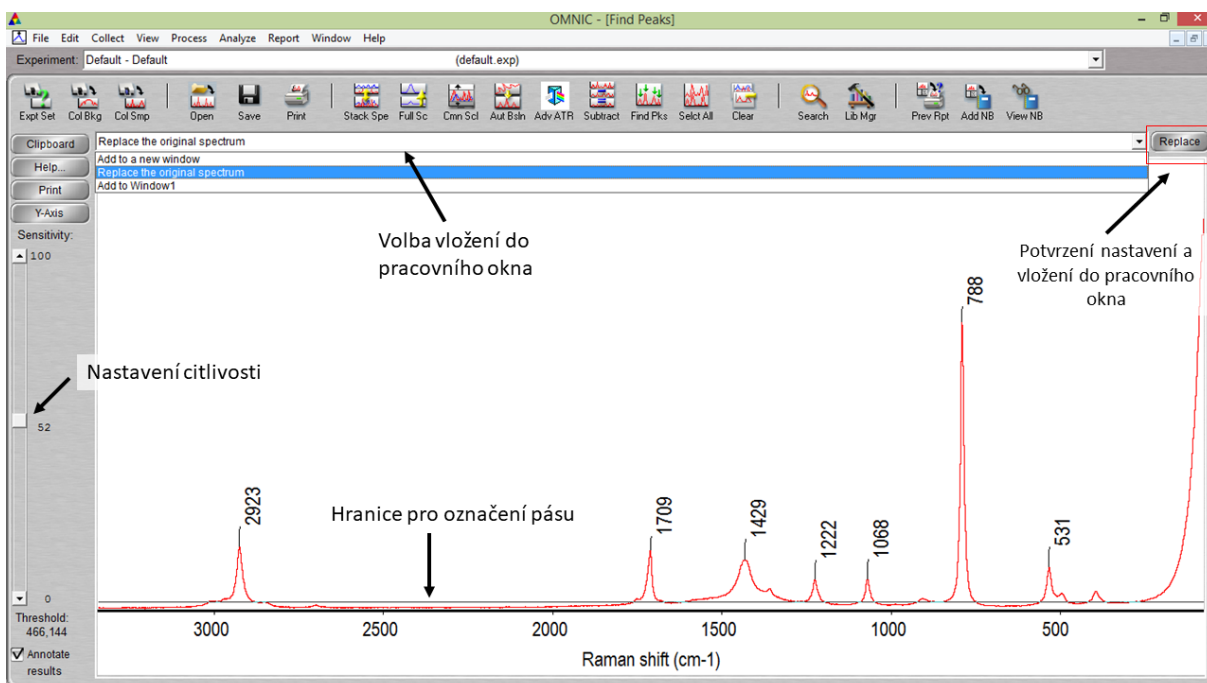
Možnosti operací se spektry jsou v rámci programu BWSpec poměrně omezené a další zpracování dat bude probíhat v programu Omnic (Thermo Scientific, USA).

Software Omnic nabízí řadu operací pro zpracování a vyhodnocení spektrálních dat, včetně kvalitativní a kvantitativní analýzy, a je známý svou jednoduchostí, intuitivním a pro uživatele přívětivým rozhraním. Spektra do tohoto programu se importují pomocí ikony „open file“ v levé části horní lišty (Obr. 6) nebo klasicky přes záložku „file“ -> „open“, či klávesovou zkratkou Ctrl + O. Budete-li otevírat do okna více spekter, je vhodné zkopírovat název daného souboru a vložit ho do řádku ukazujícího název aktuálně zvoleného spektra (položka názvu se nepřenáší mezi softwary) a potvrdit entrem.

Pro základní interpretaci Ramanových spekter a určení funkčních skupin neznámých vzorků je vhodné znát přesné pozice pásů. Pro jejich označení lze využít nástroj v záložce „analyse“ → „find peaks“ (či použít klávesovou zkratku Ctrl + K, Obr. 7). Černá linie vymezuje hranici ve spektru, nad kterou jsou označovány jednotlivé pásy (tímto způsobem lze minimalizovat počet pásů v zašuměné oblasti, linii posuňte klikem myši na obrazovce). V levé části obrazovky je dále nástroj pro úpravu citlivosti označování pásů (jsou-li označeny i pásy s příliš nízkou intenzitou, lze citlivost snížit; naopak nejsou-li označeny všechny významné pásy, je vhodné citlivost zvýšit – jednotlivé úpravy je doporučeno konzultovat s vyučujícím). Následně můžete spektrem s označenými pásy nahradit předchozí či ho přidat do stejného nebo jiného pracovního okna. Počet označených pásů je možné následně ještě upravovat (přidávat či mazat) pomocí nástroje „annotation tool“ v levém dolním rohu obrazovky.



Obr. 6: Základní pracovní okno programu Omnic



Obr. 7: Ukázka nastavení pro označení pozice pásu

5. Postup práce

5.1. Analýza vzorku (typ: prášková směs)

- Směsný vzorek podrobíme mikro-spektroskopické analýze, kdy se postupně zaměříme vždy na jeden druh krystalu. Vzorek umístíte pod mikroskopický nástavec, dle pokynů asistenta buď jako rovnoměrnou vrstvu či přímo ve vialce.
- Pomocí optické kamery zaostříte excitační laserový paprsek na povrch krystalu a s použitím předem optimalizovaných parametrů (výkon laseru, integrační čas, počet opakování) změřte spektrum neznámé látky.
- Stejný postup opakujte pro všechny typy krystalů, které identifikujete ve vzorku.

5.2. Analýza vzorku (typ: roztok o stopové koncentraci)

- Při měření vzorků, kde rozpouštědlo mnohonásobně překračuje množství analytu můžeme zkusit využít metodu povrchového zesílení signálu.
- Při normálním měření získáme pouze spektrum rozpouštědla. Za normálních podmínek bychom se mohli pokusit čisté spektrum rozpouštědla od měřeného odečíst (kompenzovat), ale při stopových koncentracích by se výsledné odečtové spektrum ztrácelo ve spektrálním šumu (interferenci) a bylo by neinterpretovatelné.
- Pokud však vzorek smícháte s roztokem nanočástic, které se naučíte připravovat v laboratoři přípravy nano a mikromateriálů, můžete se pokusit získat zesílená spektra analytu, který se bude nacházet v blízkosti těchto nanočástic – a tedy tento identifikovat.

6. Kontrolní otázky

1. Jaká je fyzikální podstata Ramanova rozptylu?
2. Jaké je základní výběrové pravidlo pro to, aby se vibrace projevila v Ramanově spektru?
3. Jak se liší Stokesův a anti-Stokesův rozptyl?
4. Jaké dva základní typy konstrukce Ramanova spektrometru rozlišujeme?
5. Jaké zdroje záření se používají pro buzení Ramanova rozptylu?
6. Popište hlavní části disperzního Ramanova spektrometru.
7. Uvedte společné charakteristiky infračervené a Ramanovy spektroskopie, dále v čem se metody liší a jak se doplňují.

Pozn. Uvedené otázky jsou pouze vzorové, v testu se můžete setkat s jinou formulací.

Příloha – Interpretace 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.

Níže uvedená Tabulka I udává 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 vlnočet (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 ⁻¹	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
<u>voda – v organickém rozpouštědle</u>				
3760-3580	vw-w	$\nu_{as}(\text{H}_2\text{O})$	H₂O	3640-3500
3640-3500	w-m, br	$\nu_s(\text{H}_2\text{O})$	H₂O	1640-1605
1640-1605	vw	$\delta(\text{H}_2\text{O})$	H₂O	-
<u>voda – krystalová, rozpouštědlo</u>				
3600-3100	m,br	$\nu(\text{OH})$	H₂O	1645-1615
1645-1600	v	$\delta(\text{H}_2\text{O})$	H₂O ,	-
<u>alkoholy, fenoly</u>				
3670-3580	vw-w,	$\nu(\text{OH})$	-OH , izolované	1420-1260
	– bez vlivu vodíkových můstků, úzký			
3600-3400	vw	$\nu(\text{OH})$	-OH , intramol. H-vazba	1440-1300
	– významný vliv intramolekulárních vodíkových můstků, vlnočet koncentračně nezávislý, širší než pro izolované –OH, užší než v případě intermolekulárních můstků			
3600-3150	vw-w,br	$\nu(\text{OH})$	-OH , pevné či kapal. l.	1440-1290
	– významný vliv intermolekulárních vodíkových můstků , vlnočet s rostoucí koncentrací klesá			
3200-2500	w, br	$\nu(\text{OH})$	-OH , pevné či kapal. l .	1440-1290
	- chelatovaná –OH skupina			
1440-1310	m-w	$\delta(\text{COH})$	terc.-OH, Ar-OH	1260-1100
	(pozor na překryv pásů)			
1400-1260	m-w	$\delta(\text{COH})$	ROH , R ₂ OH , (prim. a sek.)	1150-1000
1260-1170	m-w	$\nu(\text{CO})$	Ar-OH	-
1215-1100	m-s	$\nu(\text{CO})$	R ₃ C-OH , (terc.)	800-750
1150-1070	s-m	$\nu(\text{CO})$	R ₂ CH-OH , (sekund.)	900-800
1090-1000	s-m	$\nu(\text{CO})$	R-OH, (primar.)	900-800
900-800	s-m	$\nu(\text{CCO})$	R-OH, (primar.)	-
900-800	s	$\nu(\text{CCO})$	R-OH, (sekund.)	-
800-750	s	$\delta(\text{CO})$	R ₃ C-OH, (terc.)	-
<u>karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, izolované molekuly</u>				
3580-3500	vw	$\nu(\text{OH})$	-COOH , monomer	1800-1740
	neasociované molekuly			
1800-1740	w-m	$\nu(\text{C=O})$	-COOH , monomerní	1380-1280
1380-1280	m-w	$\delta(\text{OH})$	-COOH , monomerní	1190-1075
1190-1075	w	$\nu(\text{CO})$	-COOH , monomerní forma	-
<u>karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, asociované molekuly</u>				
3200-2230	vw-w, br	$\nu(\text{OH})$	-COOH , dimerní, asoc.	1725-1700
	vlnočet s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba			
1725-1700	w-m	$\nu(\text{C=O})$	-COOH , dimerní forma	1440-1395
1725-1700 – nasycené kys.,				
1710-1680 – nenasyčené a Ar kys.				

Laboratoř charakterizace nano a mikromateriálů

1440-1395	w-m	$\delta(\text{OH}) + \nu(\text{CO})$	-COOH, dimerní forma	1320-1210
Vlnočet, cm^{-1}	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás 1320-1210
			dimerní forma, někdy dublet	
970- 875	m,br	$\gamma(\text{OH})$	-COOH, dimerní forma	-
<u>karboxylové kyseliny – disociovaná forma (anion), asociované molekuly</u>				
1655-1540	w	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$	-COO ⁻	1440-1335
1440-1335	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$	-COO ⁻	-
		širší pás s raménky (dva až tři píky)		

aminy – primární

3550-3280	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$	-NH ₂	3450-3160
vlnočet s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba, širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				vliv menší než u -OH
3450-3160	vw-w	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$	-NH ₂	1650-1580
vlnočet s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba, širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				vliv menší než u -OH
1650-1580	w	$\delta(\text{NH}_2)$	-NH ₂	Ar: 1360-1240 R : 1295-1145
1360-1240	m-w	$\nu(\text{CN})$	ArNH ₂	1120-1020
1295-1145	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	RNH ₂ , často překryv pásů	1240-1020
1240-1020	m-s	$\nu(\text{CN})$	RNH ₂ , často překryv pásů	-
1120-1020	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	ArNH ₂ , často překryv pásů	1120-1020

aminy – sekundární

3500-3300	w	$\nu(\text{NH})$	-NH-	1580-1490
1580-1490	w	$\delta(\text{NH})$	-NH -	R: 1190-1170
		pro ArNH riziko překryvů		Ar:1360-1250
1360-1250	m-w	$\nu(\text{CN})$	Ar ₂ NH, Ar-NH-R	1280-1180
1280-1180	m-w	$\nu(\text{C}_\text{R}\text{N})$	Ar-NH-R	-
1190-1170	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CNC})$	R ₂ NH	1145-1130
1145-1130	m-w	$\nu_{\text{s}}(\text{CNC})$	R ₂ NH	1145-1130
750- 700	w,br	$\omega(\text{NH})$	-NH-	-

amidy - primární

3540-3320	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$	-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	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$	-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	$\nu(\text{C=O})$	-CO-NH ₂ , amid I	1640-1590
1640-1590	w-m	$\delta(\text{NH}_2)$	-CO-NH ₂ , amid II	1420-1400
1420-1400	m	$\nu(\text{CN})$	-CO-NH ₂ , amid III	1170-1130
1170-1130	vw	$\rho(\text{NH}_2)$	-CO-NH ₂ , nezřetelný	600-550
600- 550	m	$\delta(\text{N-C=O})$	-CO-NH ₂	-

amidy - sekundární

3460-3270	m-w	$\nu(\text{NH})$	-CO-NH-, trans	1700-1665, 3100-3070
širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
3180-3140	m-w	$\nu(\text{NH})$	-CO-NH-, cis	1700-1630
3100-3070	vw	svrchní tón	-CO-NH-, trans	1700-1665

		od amid.p.II, velmi slabý, často nezřetelný		
1700-1630	w-m	ν (C=O)	-CO-NH-, amid I	1570-1510
1570-1510	m-w	δ (NH)	-CO-NH-, amid II	1305-1200
1350-1310	s	ν (CN)	-CO-NH-, amid III, cis	820-780
1305-1200	s	ν (CN)	-CO-NH-, amid III, trans	770-620
		obvykle okolo 1260 cm ⁻¹		
820-780	m-s,br	γ (NH)	-NH-CO-, cis	-
770- 620	w,br	γ (NH)	-NH-CO-, trans	-

amidy - terciární

1670-1630	w-m	ν (C=O)	-CO-N<	870-700
870-700	s	ν_{as} (C-N-C)	-CO-N<C	620-570
620-570	m	δ (N-C=O)	-CO-N<C	-

alkyny (alkiny) – alkylacetylény

3340-3280	w-m	ν (CH)	-C $\equiv$ C-H	2150-2100
2150-2100	s-m	ν (C $\equiv$ C)	-C $\equiv$ C-H	1020-905
1020-905	w-m	ν (C-C $\equiv$ C)	H-C $\equiv$ C-C	370-220
370-220	w-m	δ (-C $\equiv$ C-H)	-C $\equiv$ C-H	-

alkyny (alkiny) – dialkylacetylény

2260-2190	vs-s	ν (C $\equiv$ C)	-C $\equiv$ C-	
		u symetrické molekuly vs	někdy doprovázen pásem okolo 2310 cm ⁻¹	

alkeny – vinyl a vinyliden deriváty (koncová dvojná vazba)

3120-3050	m	ν_{as} (CH ₂)	>C=CH ₂	3050-2960
3050-2960	m	ν_s (CH ₂)	>C=CH ₂	1685-1620
1685-1620	s	ν (C=C)	>C=CH ₂	1440-1360
1440-1360	m-s	δ (CH ₂)	>C=CH ₂	1320-1250
		pozor na překryvy pásů		
1320-1250	m-w	δ (CH)	>C=CH ₂	1180-1010
1180-1010	m	δ (CH)	>CH=CH ₂	980- 810
980- 810	w	γ (CH)	>CH=CH ₂	-

alkeny, cykloalkeny a jejich deriváty – (vnitřní dvojná vazba, dvojně vazby)

3060-2995	m	ν (CH)	=CH-	izolované: 1685-1620 konjugované: 1660-1580
1685-1620	s-vs	ν (C=C)	>C=C<, izolované	1440-1190
1660-1580	s-m	ν (C=C)	-C=C, konjugované	1440-1190
		poloha pásu klesá se stupněm konjugace,		konjugace s C=C, Ar, C=O
1440-1340	s-m	ν (C=C)	cyklické, více C=C vazeb	-
		vibrace nenasycených kruhů		
1350-1340	w	δ (CH)	>C=CH-, trisub.	850-790
1350-1260	w-vw	δ (CH)	-HC=CH-, trans	1000- 910
1295-1190	s-m	ρ (CH)	-HC=CH-, cis	980- 880
1000- 910	m	γ (CH)	R-CH=CH-R, trans	630- 430
980- 880	m	γ (CH)	R-CH=CH-R, cis	730- 660
850- 790	w	γ (CH)	RR'>C=CH-R''	-
730- 660	w	γ (CH)	R-CH=CH-R, cis	-

630- 430 w $\gamma(\text{CH}) \delta(\text{CH})$ R-**CH=CH**-R, trans -

aromatické uhlovodíky

3105-3000	m-s	$\nu(\text{CH})$	Ar	1630-1590
několik pásů, počet klesá s růstem substituce jádra				
pro Ar-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
1050-990	m-vs	$\delta(\text{CH})$	Ar, monosubstit.	710-605
1025-990	vs	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,3-disubstit.,	800-660
			Ar, 1,3,5-trisubstit.	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	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$	- CH₃	2895-2840
2955-2915	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$	- CH₂ -	2880-2835
2895-2840	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	- CH₃	1470-1385
2880-2830	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)$	- CH₂ -	1480-1385
1480-1440	w-m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(C)- CH₂ , -(O)- CH₂ -	1305-1295
(může se překrývat s pásem Ar, -CH ₃) (odkaz platí pouze pro -(CH ₂) _n - n>2)				
1470-1440	m	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	-(C)- CH₃ , -(O)- CH₃	1395-1345
(může se překrývat s pásem Ar, -CH ₂ -)				
1450-1390	w	$\delta_{\text{d}}(\text{CH}_3)$	CH₃ -(C=O)-O-, CH₃ -N<, CH₃ -(C=O)-C-, CH₃ -(S=O)-C-	1385-1300
1445-1385	m	$\delta(\text{CH}_2)$	- CH₂ -X, X:-(C=O)-, -COOR, -C=C-, -C≡C-, Ar, -CN, NO ₂ , Cl, Br	785-720

Laboratoř charakterizace nano a mikromateriálů

1395-1345	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(C)-, CH₃-(O)- dublet typický pro rozvětvení	1255-1130 (odkaz platí pouze pro dublet)
1385-1330	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(C=O)-, CH₃-(C=O)-O-	-
1370-1310	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(N<)	-
1360-1320	w	$\delta(\text{CH})$	-C-H, nasyc.	-
1340-1300	w	$\delta_s(\text{CH}_3)$	CH₃-(S=O)-C-	-
1305-1295	m	$\delta(\text{CH}_2)$	-(CH₂)_n- n>2, intenzita roste s n	1100-1040
1255-1245	m	$\nu(\text{CC})$	-C(CH ₃) ₃	1225-1165
1225-1165	m	$\nu(\text{CC})$	-C(CH ₃) ₃	1020- 980
1175-1165	w	$\nu(\text{CC})$	-CH(CH ₃) ₂	1150-1130
1150-1130	w		-CH(CH ₃) ₂	955- 900
1100-1040	m-s	$\nu(\text{CCC})$	-(CH₂)_n-	900-800
1020- 980	m-s	$\nu(\text{CC})$	-C(CH ₃) ₃	930- 925
930- 925	m		-C(CH ₃) ₃	360-270
955- 900	m	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CCH})$	-CH(CH ₃) ₂	840-790
900-800	m-s	skeletální	-(CH₂)_n-	750-720
840- 790	m	skeletální	-CH(CH ₃) ₂	495-490
785- 750	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	-CH ₂ -CH _x , x≠2	-
750- 735	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	propyl, (CH₂)_n-(O)- , n>4	-
735- 720	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	(CH₂)_n-(C)- , n>3	-
495-490	m	skeletální	-CH(CH ₃) ₂	-
360- 270	m		-C(CH ₃) ₃	-
<u>aldehydy</u>				
2850-2800	w	$\nu(\text{CH})$	-CHO	2745-2650 někdy raménko pásu pod 2745 cm ⁻¹
2745-2650	s-m	$\nu(\text{CH})$	-CHO	1745-1650 efekt Fermiho resonance
1745-1650	w-m	$\nu(\text{C=O})$	-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	$\delta(\text{CH})$	-CHO	975-780
975- 780	m	$\gamma(\text{CH})$	-CHO	-
<u>thioly</u>				
2600-2520	s	$\nu(\text{SH})$	-SH	750-570
750- 570	s	$\nu(\text{CS})$	-C-SH	410-200
410-200	v	$\delta(\text{CS})$	-C-SH	-
<u>fosfiny</u>				
2460-2100	m-w	$\nu(\text{PH})$	-PH	1150-965
1150-965	m-w	$\delta(\text{PH})$	-PH	-
<u>isokyanáty</u>				
2295-2250	w	$\nu_{\text{as}}(\text{N=C=O})$	-N=C=O,	1460-1340

Laboratoř charakterizace nano a mikromateriálů

1460-1340	s	$\nu_s(\text{N}=\text{C}=\text{O})$	$-\text{N}=\text{C}=\text{O}$	650-580
650-580	w	$\delta(\text{N}=\text{C}=\text{O})$	$-\text{N}=\text{C}=\text{O}$	-

nitrily

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

thiokyanáty

2185-2135	m-s	$\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ velmi úzký pás	$-\text{S}-\text{C}\equiv\text{N}$	1090-925
1090-925	m-s	$\nu_s(\text{S}-\text{C}\equiv\text{N})$	$-\text{S}-\text{C}\equiv\text{N}$	700-670
700-670	s	$\nu_{as}(-\text{C}-\text{S}-\text{C})$	$-\text{C}-\text{S}-\text{C}\equiv\text{N}$	660-610
660-610	s	$\nu_s(-\text{C}-\text{S}-\text{C})$	$-\text{C}-\text{S}-\text{C}\equiv\text{N}$	-

isothiokyanáty

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

β,γ -laktony

1840-1770	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	β,γ -laktony	1370-1160
1370-1160	w	$\nu(\text{CO})$	β,γ -laktony	-

estery

1800-1750	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	vinyl a fenylestery	1310-1250
1750-1720	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	nasycené estery	1300-1150
1740-1705	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{O}-$, α,β -nenas. estery	1335-1250
1730-1705	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$, estery aromatů	1330-1250
1335-1250	m-s	$\nu_{as}(\text{COC})$	$-\text{CO}-\text{O}-$, α,β -nenas. estery, pás širší než u ketonů	1200-1130
1330-1250	m-s	$\nu_{as}(\text{COC})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$, širší než u ketonů	1150-1080
1300-1150	m-s	$\nu_{as}(\text{COC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$, nasyc. (obvykle širší než u ketonů)	1160-1050
1200-1130	w	$\nu_s(\text{COC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}'$, α,β -nenasyc.	-
1200-1180	m-s	$\nu_{as}(\text{COC})$	HCOOR	1165-1050
1165-1100	w	$\nu_s(\text{COC})$	HCOOR	775-620
1160-1050	w	$\nu_s(\text{COC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}'$, nasyc.	-
1150-1080	w	$\nu_s(\text{COC})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$	-
775- 620	m	$\delta(\text{OCO})$	HCOOR	-

ketony

1750-1690	m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$, nasycené ketony	1325-1175
1705-1650	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\text{Ar}-\text{CO}-$, α,β -nenas. ketony	1320-1280
1325-1175	m-w	$\nu(\text{CC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$ (často obtížně rozpoznatelný)	1170-1095
1320-1280	m	$\delta(\text{C}-\text{CO}-\text{C})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{Ar}(-\text{R})$, obecně několik pásů	1225-1075

1225-1075	m	$\nu(\text{C}_{\text{Ar}}\text{C})$	Ar- <u>CO</u> -	-
1170-1095	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	R- <u>CO</u> -R', několik pásů při delších řetězcích	800-700
800-700	m-s	$\nu_s(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	R- <u>CO</u> -R'	630-580
630-580	s-m	$\delta(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	R- <u>CO</u> -R'	-

nitrosloučeniny

1570-1485	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$	-NO ₂	1385-1315
1385-1315	s-vs	$\nu_s(\text{NO}_2)$	-NO ₂	1180-850
1180- 850	s-m	$\nu(\text{CN})$	-C-NO ₂	-

Poznámka: ⁽¹⁾ Valenční vibrace $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$ by měla být správně označena $\nu_d(\text{CH}_3)$. Označení ν_{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: ν - valenční, δ - deformační, γ - mimorovinný, ω - kývavý (anglicky wagging), ρ - 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. - kombinační pásy. R - alkyl, Ar - aryl.