

TABELA DE VALORES DE ABSORÇÃO NO INFRAVERMELHO PARA COMPOSTOS ORGÂNICOS

1) 3.600 - 2.700 cm⁻¹

A absorção nesta região é associada às vibrações de deformação axial nos átomos de hidrogênio ligados a carbono, oxigênio e nitrogênio (C-H, O-H e N-H). Cuidados devem ser tomados quanto à interpretação de bandas de fraca intensidade, uma vez que estas podem ser harmônicas (2 vezes a frequência de bandas fortes na região de 1.900 - 1550 cm⁻¹).

Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Comentários
3.640 - 3.610	O-H (livre)	Banda fina, mais forte quando medida em solução diluída.
3.600 - 3.200	O-H (associado)	3.600 - 3.500: Banda fina resultante de ligações diméricas. 3.400 - 3.200: Banda forte, larga, resultante da associação polimérica. A intensidade da banda depende da concentração.
3.200 - 2.500	O-H (quelato)	Ligação de hidrogênio intramolecular com C=O, NO ₂ : Banda larga, de intensidade normalmente fraca e a frequência é inversamente proporcional à força da ligação.
3.500 - 3.070	N-H	a) NH ₂ livre em amins primárias - amins primárias alifáticas: ~ 3.500 - amins aromáticas: ~ 3.400 b) NH ₂ livre em amidas: 3.500 - 3.400 c) NH ₂ associado em amins primárias - amins alifáticas e aromáticas: 3.400 - 3.100 d) NH ₂ associado em amidas: 3.350 - 3.100 e) NH livre em amins secundárias: - amins primárias alifáticas: 3.350 - 3.300 - amins aromáticas: ~ 3.450 - pirróis, indóis: ~ 3.490 f) NH livre em amidas: 3.460 - 3.420 g) NH associado em amins secundárias: 3.400 - 3.100 h) NH associado em amidas: 3.320 - 3.070
~ 3.300	C-H de alcinos	Confirmado pela presença de uma banda de 2.260 - 2.100 (C≡C).
3.080 - 3.020	C-H de alcenos	

~ 3.030	C-H de aromáticos	Muitas vezes obscurecida.
2.960 - 2.850	C-H alifáticos	CH ₃ , CH ₂ (carbonos prim. e sec.): 2.960 - 2.850 CH (carbono terc.): 2.890 - 2.880
2.820 e 2.720	C-H de aldeídos	

2) 2.300 - 1.900 cm⁻¹

A absorção nesta região é associada às vibrações de deformação axial de triplas ligações e duplas acumuladas.

Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Comentários
2.275 - 2.250	N=C=O (isocianatos)	Banda de forte intensidade.
2.260 - 2.200	C ≡ N (nitrilas)	a) Nitrilas conjugadas: 2.235 - 2.210 b) Nitrilas não conjugadas: 2.260 - 2.240
2.260 - 2.100	C ≡ C	Pode estar ausente em acetilenos simétricos.
~ 2.260	N ≡ N (sais de diazônio)	
2.175 - 2.140	SC ≡ N (tiocianatos)	
2.160 - 2.120	-N=N=N (azidas)	
~ 2.150	C=C=O (cetenas)	
2.140 - 1.990	N=C=S (isotiocianatos)	Banda larga e intensa.
~ 1950	C=C=C (alenos)	Duas bandas para alenos terminais ou ligados a grupos de efeito -I.

3) 2.300 - 1.900 cm⁻¹

A absorção nesta região é associada às vibrações de deformação axial de duplas ligações (não acumuladas) e deformações angulares de N-H e -NH₂. Na maioria dos casos, a posição da banda pode ser alterada por efeitos de conjugação ou efeito indutivo dos grupos substituintes.

Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Comentários
1.820 e 1.760	C=O de anidridos	Aparecem duas bandas, correspondentes aos dois grupos C=O.
1.815 - 1.790	C=O de cloreto de acila	Conjugação desloca a banda cerca de 20 cm ⁻¹ para frequência mais baixa.
1.760 e 1.710	C=O de ác. carboxílicos	O monômero tem banda de ~ 1.760 e o dímero, ~ 1.710. Às vezes não se observa essa banda em solventes polares.
1.750 - 1.740	C=O de ésteres	Absorção sujeita a efeitos de conjugação e de efeito indutivo.
1.740 - 1.720	C=O de aldeídos	Absorção sujeita a efeitos de conjugação e de efeito indutivo.
1.720 - 1.700	C=O de cetonas	Somente para cetonas acíclicas (dialquil-cetonas).
1.700 - 1.630	C=O de amidas	<p>a) Amidas não substituídas</p> <ul style="list-style-type: none"> - livres: ~ 1.690 - associadas: ~ 1.650 <p>Efeito de conjugação ou efeitos indutivos causam deslocamento de cerca de 15 cm⁻¹ para frequência mais alta. Em amidas cíclicas a frequência é aumentada de cerca de 40 cm⁻¹ por unidade de decréscimo do tamanho do anel.</p> <p>b) Amidas N-substituídas: 1.700 - 1.630</p> <p>c) Amidas N,N-substituídas: 1.670 - 1.630</p> <p>Apresentam uma única banda.</p>

1.675 - 1.645	C=C	Intensidade usualmente de fraca a média. As bandas estão ausentes em alcenos simétricos. A presença de uma ou duas bandas adicionais de 1.650 - 1.600 ocorre em alcenos conjugados.
1.600, 1.580, 1.500 e 1.450	C=C de aromáticos	Vibrações de núcleos aromáticos. A banda de 1.580 é intensa quando o grupo fenila é conjugado com insaturações ou mesmo ligado a átomos com pares de elétrons livres. A banda de 1.450 geralmente é obscurecida e a banda de 1.500 é normalmente mais forte.
1.590 - 1.550	NH ₂	Banda média a forte, correspondente à deformação angular simétrica no plano.
1.560 e 1.350	NO ₂	Bandas fortes de deformação axial assimétrica e simétrica, respectivamente. Ambas estão sujeitas a efeitos de conjugação. (a banda cai -30cm ⁻¹).
1.580 - 1495	N-H	Banda fraca de deformação angular, muitas vezes obscurecida pela banda de 1.560 de aromáticos. Esta banda também é usada para caracterizar aminas e amidas secundárias.

4) 1.500 - 600 cm⁻¹

A absorção nesta região é associada a diversos tipos de vibração: deformações axiais e angulares de ligações C-O, C-N, C-C e C-X.

Número de onda (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Comentários
1.470 - 1.430	CH ₂	Deformação angular de -(CH ₂) _n - sendo que para n > 3 a banda aparece na região por volta de 720 (deformação angular de cadeia).
~ 1.420	CH ₂ adjacente a carbonila	Deformação angular.
1.390 - 1.370	CH ₃	Deformação angular. Em caso de dimetil geminal, a banda aparecerá como um duplete.
1.400 - 500	C-X (X = halogênio)	a) C-F: 1.400-1.000 b) C-Cl: 800-600 c) C-Br: 750-500 d) C-I: ~ 500
1.350 - 1.310 e 1.140 - 1.200	SO ₂ (sulfona)	Bandas intensas de deformação axial assimétrica e simétrica, respectivamente.
1.420 e 1.300 - 1.200	C-O de ác. carboxílicos	Aparecem duas bandas de deformação axial, devido ao acoplamento da deformação angular no plano da ligação O-H e a deformação axial de C-O.
1.300 - 1.050	C-O de ésteres	a) Ésteres saturados: 1.300 - 1.050 b) Ésteres insaturados e aromáticos: 2 bandas (1.300 - 1.250 e 1.200 - 1.050)
1.275 - 1.020	C-O de éteres	a) Éteres alifáticos: 1.070 - 1.150 b) Éteres aromáticos e vinílicos: 2 bandas (1.200 - 1.275 e 1.020 - 1.075)
1.200 - 1.050	C-O de álcoois e fenóis	a) Álcool prim: ~ 1.050 b) Álcool sec: ~ 1.100 a) Álcool terc: ~ 1.150 a) Fenóis: ~ 1.200
1.340 - 1250	C-N de aromáticos	
1.280 - 1.180	C-N de alifáticos	

1.060 - 1.040	S=O (sulfóxido)	Esta banda é deslocada de 10 a 20 cm^{-1} para frequência mais baixa por efeito de conjugação. Grupos metileno na posição alfa dão origem a uma banda de ~ 1.415 .
990 e 910	RCH=CH ₂	Deformação angular fora do plano.
970 - 960	-CH=CH-	
~ 920	O-H	Banda larga (deformação angular) de média intensidade, devido à deformação angular fora do plano da C=O de ác. carboxílicos.
895 - 885	R ₂ C=CH ₂	
840 - 790	R ₂ C=CHR	C-H fora do plano.
730 - 675	-CH=CH-	C-H fora do plano.
770 - 730 e 710 - 690	Anel aromático	Deformação angular de 5 H adjacentes (anéis monossustituídos).
770 - 735	Anel aromático	Deformação angular de 4 H adjacentes (anéis orto-sustituídos). Outros exemplos: piridina orto-sustituída, naftalenos não substituídos em um dos anéis.
810 - 750 e 710 - 690	Anel aromático	Deformação angular de 3 H adjacentes (anéis meta-sustituídos e 1,2,3-trissustituídos). Outros exemplos: naftalenos monossustituídos na posição alfa.
860 - 800	Anel aromático	2 H adjacentes (anéis para-sustituídos e 1,2,3,4-tetrassustituídos).
900 - 860	Anel aromático	H isolado: pode estar presente no benzeno meta-dissustituído, além de outros aromáticos. A banda tem intensidade fraca.
790 - 730	Grupos etila e propila	Deformação angular ("rocking"). a) Etila: 790 - 720 b) Propila: 745 - 730
~ 720	-(CH ₂) _n - (para n > 3)	Deformação angular de cadeia ("rocking").