

应该对各官能团的特征吸收熟记于心（我自己常常记不牢，估计是老了，唉!），因为官能团特征吸收是解析谱图的基础。

对一张已经拿到手的红外谱图：

（1）首先依据谱图推出化合物碳架类型：根据分子式计算不饱和度，公式：

不饱和度 = $F + 1 + (T - O) / 2$ 其中：

F：化合价为 4 价的原子个数（主要是 C 原子），

T：化合价为 3 价的原子个数（主要是 N 原子），

O：化合价为 1 价的原子个数（主要是 H 原子），

我以前本科上谱学导论时老师给过公式，但字母都被我改了：F、T、O 分别是英文 4, 3 1 的首字母，这样我记起来就不会忘了（：）。

举个例子：比如苯： C_6H_6 ，不饱和度 = $6 + 1 + (0 - 6) / 2 = 4$ ，3 个双键加一个环，正好为 4 个不饱和度；

（2）分析 $3300 \sim 2800 \text{ cm}^{-1}$ 区域 C-H 伸缩振动吸收；以 3000 cm^{-1} 为界：高于 3000 cm^{-1} 为不

饱和碳 C-H 伸缩振动吸收，有可能为烯，炔，芳香化合物，而低于 3000 cm^{-1} 一般为饱和 C-H 伸缩振动吸收；

（3）若在稍高于 3000 cm^{-1} 有吸收，则应在 $2250 \sim 1450 \text{ cm}^{-1}$ 频区，分析不饱和碳碳键的伸缩振动吸收特征峰，其中：

炔 $2200 \sim 2100 \text{ cm}^{-1}$

烯 $1680 \sim 1640 \text{ cm}^{-1}$

芳环 $1600, 1580, 1500, 1450 \text{ cm}^{-1}$

若已确定为烯或芳香化合物，则应进一步解析指纹区，即 $1000 \sim 650 \text{ cm}^{-1}$ 的频区，以

确定取代基数和位置（顺反，邻、间、对）；

（4）碳骨架类型确定后，再依据其他官能团，如 C=O, O-H, C-N 等特征吸收来判定化合物的官能团；

（5）解析时应注意把描述各官能团的相关峰联系起来，以准确判定官能团的存在，如 2820 ， 2720 和 $1750 \sim 1700 \text{ cm}^{-1}$ 的三个峰，说明醛基的存在。

解析的过程基本就是这样吧，至于制样以及红外谱图软件的使用，一般的有机实验书上都有比较详细的介绍的，这里就不唠叨了。

这是一个令人头疼的问题，有事没事就记一两个吧：

1. 烷烃：C-H 伸缩振动（ $3000 \sim 2850 \text{ cm}^{-1}$ ）

C-H 弯曲振动（ $1465 \sim 1340 \text{ cm}^{-1}$ ）

一般饱和烃 C-H 伸缩均在 3000 cm^{-1} 以下，接近 3000 cm^{-1} 的频率吸收。

2. 烯烃：烯烃 C-H 伸缩（ $3100 \sim 3010 \text{ cm}^{-1}$ ）

C=C 伸缩（ $1675 \sim 1640 \text{ cm}^{-1}$ ）

烯烃 C-H 面外弯曲振动（ $1000 \sim 675 \text{ cm}^{-1}$ ）。

3. 炔烃：伸缩振动（ $2250 \sim 2100 \text{ cm}^{-1}$ ）

炔烃 C-H 伸缩振动（ 3300 cm^{-1} 附近）。

4. 芳烃： $3100 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$ 芳环上 C-H 伸缩振动

$1600 \sim 1450 \text{ cm}^{-1}$ C=C 骨架振动

$880 \sim 680 \text{ cm}^{-1}$ C-H 面外弯曲振动

芳香化合物重要特征：一般在 1600 ， 1580 ， 1500 和 1450 cm^{-1} 可能出现强度不等的 4 个峰。 $880 \sim 680 \text{ cm}^{-1}$ ，C-H 面外弯曲振动吸收，依苯环上取代基数和位置不同而发生变化，在

芳香化合物红外谱图分析中,常常用此频区的吸收判别异构体。

5.醇和酚: 主要特征吸收是 O-H 和 C-O 的伸缩振动吸收,

O-H 自由羟基 O-H 的伸缩振动: $3650\sim3600\text{cm}^{-1}$,为尖锐的吸收峰,
分子间氢键 O-H 伸缩振动: $3500\sim3200\text{cm}^{-1}$,为宽的吸收峰;

C-O 伸缩振动: $1300\sim1000\text{cm}^{-1}$

O-H 面外弯曲: $769\sim659\text{cm}^{-1}$

6. 醚: 特征吸收: $1300\sim1000\text{cm}^{-1}$ 的伸缩振动,

脂肪醚: $1150\sim1060\text{cm}^{-1}$ 一个强的吸收峰

芳香醚: 两个 C-O 伸缩振动吸收: $1270\sim1230\text{cm}^{-1}$ (为 Ar-O 伸缩)
 $1050\sim1000\text{cm}^{-1}$ (为 R-O 伸缩)

7.醛和酮: 醛的主要特征吸收: $1750\sim1700\text{cm}^{-1}$ (C=O 伸缩)

$2820, 2720\text{cm}^{-1}$ (醛基 C-H 伸缩)

脂肪酮: 1715cm^{-1} ,强的 C=O 伸缩振动吸收,如果羰基与烯键或芳环共轭会使吸收频率降低

8.羧酸:羧酸二聚体: $3300\sim2500\text{cm}^{-1}$ 宽,强的 O-H 伸缩吸收

$1720\sim1706\text{cm}^{-1}$ C=O 吸收

$1320\sim1210\text{cm}^{-1}$ C-O 伸缩

920cm^{-1} 成键的 O-H 键的面外弯曲振动

9.酯: 饱和脂肪族酯(除甲酸酯外)的 C=O 吸收谱带: $1750\sim1735\text{cm}^{-1}$ 区域

饱和酯 C-C(=O)-O 谱带: $1210\sim1163\text{cm}^{-1}$ 区域 ,为强吸收

10.胺: $3500\sim3100\text{cm}^{-1}$, N-H 伸缩振动吸收

$1350\sim1000\text{cm}^{-1}$, C-N 伸缩振动吸收

N-H 变形振动相当于 CH₂ 的剪式振动方式, 其吸收带在:

$1640\sim1560\text{cm}^{-1}$, 面外弯曲振动在 $900\sim650\text{cm}^{-1}$.

11.腈:腈类的光谱特征:三键伸缩振动区域,有弱到中等的吸收

脂肪族腈 $2260\sim2240\text{cm}^{-1}$

芳香族腈 $2240\sim2222\text{cm}^{-1}$

12.酰胺: $3500\sim3100\text{cm}^{-1}$ N-H 伸缩振动

$1680\sim1630\text{cm}^{-1}$ C=O 伸缩振动

$1655\sim1590\text{cm}^{-1}$ N-H 弯曲振动

$1420\sim1400\text{cm}^{-1}$ C-N 伸缩

13.有机卤化物: C-X 伸缩 脂肪族 C-F $1400\sim730\text{cm}^{-1}$

C-Cl $850\sim550\text{cm}^{-1}$

C-Br $690\sim515\text{cm}^{-1}$

C-I $600\sim500\text{cm}^{-1}$

红外谱图解析基本知识

基团频率区

中红外光谱区可分成 $4000\text{ cm}^{-1} \sim 1300\text{ (1800)}\text{ cm}^{-1}$ 和 $1800\text{ (1300)}\text{ cm}^{-1} \sim 600\text{ cm}^{-1}$ 两个区域。最有分析价值的基团频率在 $4000\text{ cm}^{-1} \sim 1300\text{ cm}^{-1}$ 之间，这一区域称为基团频率区、官能团区或特征区。区内的峰是由伸缩振动产生的吸收带，比较稀疏，容易辨认，常用于鉴定官能团。

在 $1800\text{ cm}^{-1}\text{ (1300 cm}^{-1}) \sim 600\text{ cm}^{-1}$ 区域内，除单键的伸缩振动外，还有因变形振动产生的谱带。这种振动基团频率和特征吸收峰与整个分子的结构有关。当分子结构稍有不同时，该区的吸收就有细微的差异，并显示出分子特征。这种情况就像人的指纹一样，因此称为指纹区。指纹区对于指认结构类似的化合物很有帮助，而且可以作为化合物存在某种基团的旁证。

基团频率区可分为三个区域

(1) $4000 \sim 2500\text{ cm}^{-1}$ X-H 伸缩振动区，X 可以是 O、N、C 或 S 等原子。

O-H 基的伸缩振动出现在 $3650 \sim 3200\text{ cm}^{-1}$ 范围内，它可以作为判断有无醇类、酚类和有机酸类的重要依据。

当醇和酚溶于非极性溶剂（如 CCl_4 ），浓度于 $0.01\text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ 时，在 $3650 \sim 3580\text{ cm}^{-1}$ 处出现游离 O-H 基的伸缩振动吸收，峰形尖锐，且没有其它吸收峰干扰，易于识别。当试样浓度增加时，羟基化合物产生缔合现象，O-H 基的伸缩振动吸收峰向低波数方向位移，在 $3400 \sim 3200\text{ cm}^{-1}$ 出现一个宽而强的吸收峰。

胺和酰胺的 N-H 伸缩振动也出现在 $3500 \sim 3100\text{ cm}^{-1}$ ，因此，可能会对 O-H 伸缩振动有干扰。

C-H 的伸缩振动可分为饱和和不饱和的两种：

饱和的 C-H 伸缩振动出现在 3000 cm^{-1} 以下，约 $3000 \sim 2800\text{ cm}^{-1}$ ，取代基对它们影响很小。如 $-\text{CH}_3$ 基的伸缩吸收出现在 2960 cm^{-1} 和 2876 cm^{-1} 附近； R_2CH_2 基的吸收在 2930 cm^{-1} 和 2850 cm^{-1} 附近； R_3CH 基的吸收基出现在 2890 cm^{-1} 附近，但强度很弱。

不饱和的 C-H 伸缩振动出现在 3000 cm^{-1} 以上，以此来判别化合物中是否含有不饱和的 C-H 键。

苯环的 C-H 键伸缩振动出现在 3030 cm^{-1} 附近，它的特征是强度比饱和的 C-H 键稍弱，但谱带比较尖锐。

不饱和的双键 $\text{C}=\text{C}$ 的吸收出现在 $3010 \sim 3040\text{ cm}^{-1}$ 范围内，末端 $=\text{CH}_2$ 的吸收出现在 3085 cm^{-1} 附近。

叁键 $\text{C}\equiv\text{C}$ 上的 C-H 伸缩振动出现在更高的区域（ 3300 cm^{-1} ）附近。

(2) $2500 \sim 1900\text{ cm}^{-1}$ 为叁键和累积双键区，主要包括 $-\text{C}\equiv\text{C}-$ 、 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 等叁键的伸缩振动，以及 $-\text{C}=\text{C}=\text{C}-$ 、 $-\text{C}=\text{C}=\text{O}$ 等累积双键的不对称性伸缩振动。

对于炔烃类化合物，可以分成 $\text{R}-\text{C}\equiv\text{CH}$ 和 $\text{R}_2\text{C}=\text{C}=\text{R}$ 两种类型：

$\text{R}-\text{C}\equiv\text{CH}$ 的伸缩振动出现在 $2100 \sim 2140\text{ cm}^{-1}$ 附近；

$\text{R}_2\text{C}=\text{C}=\text{R}$ 出现在 $2190 \sim 2260\text{ cm}^{-1}$ 附近；

$\text{R}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{R}$ 分子是对称，则为非红外活性。

$-\text{C}\equiv\text{N}$ 基的伸缩振动在非共轭的情况下出现 $2240 \sim 2260\text{ cm}^{-1}$ 附近。当与不饱和键或芳香核共轭时，该峰位移到 $2220 \sim 2230\text{ cm}^{-1}$ 附近。若分子中含有 C、H、N 原子， $-\text{C}\equiv\text{N}$ 基吸收比较强而尖锐。若分子中含有 O 原子，且 O 原子离 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 基越近， $-\text{C}\equiv\text{N}$ 基的吸收越弱，甚至观察不到。

(3) $1900 \sim 1200\text{ cm}^{-1}$ 为双键伸缩振动区

该区域重要包括三种伸缩振动：

C=O 伸缩振动出现在 1900~1650 cm^{-1} ，是红外光谱中特征的且往往是最强的吸收，以此很容易判断酮类、醛类、酸类、酯类以及酸酐等有机化合物。酸酐的羰基吸收带由于振动耦合而呈现双峰

苯的衍生物的泛频谱带，出现在 2000~1650 cm^{-1} 范围，是 C-H 面外和 C=C 面内变形振动的泛频吸收，虽然强度很弱，但它们的吸收面貌在表征芳核取代类型上有一定的作用。

指纹区

(1) 1800 (1300) cm^{-1} ~ 900 cm^{-1} 区域是 C-O、C-N、C-F、C-P、C-S、P-O、Si-O 等单键的伸缩振动和 C=S、S=O、P=O 等双键的伸缩振动吸收。

其中：1375 cm^{-1} 的谱带为甲基的 dC-H 对称弯曲振动，对识别甲基十分有用，C-O 的伸缩振动在 1300~1000 cm^{-1} ，是该区域最强的峰，也较易识别。

(2) 900 ~ 650 cm^{-1} 区域的某些吸收峰可用来确认化合物的顺反构型。

利用上区域中苯环的 C-H 面外变形振动吸收峰和 2000~ 1667 cm^{-1} 区域苯的倍频或组合频吸收峰，可以共同配合确定苯环的取代类型。

水峰一般在 3400-3600，1630，500 以下。

醇 O-H 的峰一般比较钝，酚的 O-H 一般比较尖锐。

水峰中，游离水的 O-H 在 3580-3670 是尖峰；3550-3230 为氢键缔合的 O-H 峰，一般峰形宽，振动频率与浓度无关。

检出限公式为： $DL=3S_b/K$ 。一般检出限的测定方法是用空白溶液进行多次的反复测定，求出噪音的标准偏差 S_b ，然后将其和分析校正曲线的 K 一起代入此式。