

تمتص المجموعات الوظيفية الأشعة تحت الحمراء بترددات مميزة لكل مجموعة. وهي عبارة عن مجموعات من الذرات مرتبطة ببعضها البعض بطرق محددة يشار إليها بعد ذلك بالمجموعات الوظيفية. وهذه الترددات خاصة بالجزء وبالتالي فهي ممتازة للكشف عن المجموعات الوظيفية الأساسية في الجزيئات الأكبر. ويمكن أن تؤدي الدراسة التفصيلية لمكان ظهور مثل هذه النطاقات تحت الحمراء في بعض الأحيان إلى أدلة هيكلية مثيرة للاهتمام للغاية مثل الاتصال وتكوين هذه المجموعات. قد تحدث تغييرات طفيفة بسبب البيئة الكيميائية المحيطة بالمجموعة الوظيفية. والذي غالباً ما يكون قابلاً لوجود مجموعة وظيفية معينة في الجزء. تؤدي العديد من المجموعات الوظيفية إلى ظهور أكثر من نطاق امتصاص مميز بالإضافة إلى مناطق متداخلة مع مجموعات وظيفية أخرى في نطاقات تردد الامتصاص.