

## FREQUENCES CARACTERISTIQUES D'ABSORPTION INFRAROUGE (cm<sup>-1</sup>)

Intensités en absorption infrarouge :

F	forte
m	moyenne
f	faible
v	variable

<u>ALCANES</u>			<u>ALCENES</u>		
<u>Valence C-H</u>			<u>Valence C=C</u>		
-CH <sub>3</sub>	2975-2950	m	C=C non conj.	1680-1620	v
	2885-2860	m	CHR=CH <sub>2</sub>	1645-1640	v
-CH <sub>2</sub>	2940-2915	m	CHR=CHR' cis	1665-1635	v
	2870-2845	m	CHR=CHR' trans	1675-1665	v
-CH-	2900-2880	f	CRR'=CH <sub>2</sub>	1660-1640	v
-CH <sub>2</sub> -	3080-3040	v	CRR'=CHR''	1675-1665	v
(cyclopropane)			CRR'=CR''R'''	1690-1670	f
			C=C conjugué avec		
			Un phényle	~ 1625	F
			C=O ou C=C	1660-1580	F
			<u>Valence et déformation C-H</u>		
	<u>Déformation C-H</u>		CHR=CH <sub>2</sub>	3040-3010	m
δ <sub>as</sub> CH <sub>3</sub>	1470-1435	m		3095-3075	m
δ <sub>s</sub> CH <sub>3</sub>	1385-1370	F		1420-1410	f
δ <sub>s</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1385-1380	F (1)		1300-1290	v
	1370-1365	F (1)		995-985	m
δ <sub>s</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	1395-1385	m(½)		915-905	F
	1370-1360	F (1)		1850-1800	m
-CH <sub>2</sub> -	1480-1440	m	harmonique		
-CH-	~1340	f	CHR=CHR' cis	3040-3010	m
				1420-1400	f
				730-665	F
			CHR=CHR' trans	3040-3010	m
				1310-1290	f
				980-960	F
			CRR'=CH <sub>2</sub>	3095-3075	m
				1420-1410	f
				895-885	F
			harmonique	1800-1780	m
			CRR'=CHR''	3040-3010	m
				850-790	m
<u>Vibrations du squelette</u>					
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1175-1165	m			
	1170-1140	m			
	840-790	v			
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	1255-1245	F			
	1250-1200	m			
-(CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> -					
n=1	815-800	f			
2 adjacents	760-745	f			
3 adjacents	750-730	v			
≥ 4 adjacents	~720	v			
-CH <sub>2</sub> -	1020-1000	m			
(cyclopropane)					

## ALCYNES ET ALLENES

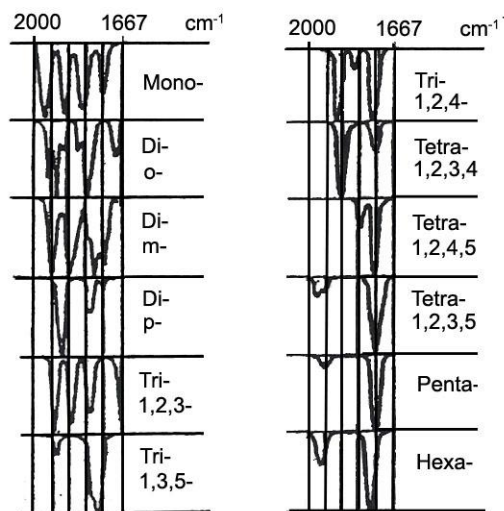
<u>Alcyne</u>		
RC≡CH <sub>3</sub>	3310-3300	m
	2140-2100	f
RC≡CR'	2260-2190	v
<u>Allènes</u>		
C=C=C	1970-1950	m
	~ 1060	m

## COMPOSES HOMOCYCLIQUES AROMATIQUES

<u>Valence</u>		
C-H	3080-3030	m à f
C=C	1625-1575	v
	1590-1575	v
	1525-1475	v
	1465-1440	v

<u>Déformation C-H hors du plan</u>			
monosubstitution		770-730	F
5 atomes H adjacents		710-690	F
Disubstitution en 1:2		770-735	F
4 H adjacents			
disubst. 1:3	1 H	900-860	m
	3 H	810-750	F
	3 H	720-685	m
subst. 1:4 et 1:2:3:4		860-800	F
trisubstit. 1:2:3	(3 H)	800-770	F
	(3 H)	720-685	m
trisubstit. 1:2:4	(2 H)	860-800	F
	(1 H)	900-860	m
trisubstit. 1:3:5	(1H)	900-860	m
	(1 H)	865-810	F
	(1 H)	730-675	F
subst. 1:2:3:5, 1:2:4:5			
et 1:2:3:4:5		900-860	m

Dans la région de 2000 à 1600 cm<sup>-1</sup>, on peut observer des harmoniques ou des bandes de combinaison. Leur nombre et leur position et leur intensité relative dépend du type de substitution. Généralement de faible intensité, elles peuvent servir de confirmation de la substitution, mais on doit opérer en solution concentrée et en l'absence d'autres absorptions gênantes dans cette zone.



## ALCOOLS ET PHENOLS

<u>Valence O-H</u>		
OH libres	3670-3580	v
OH liés (liaison H)		
- intermoléculaire (changement d'intensité et déplacements de fréquence par dilution)		
ass. en dimères	3550-3450	v
ass. en polymères	3400-3230	F
- intramoléculaires*	3590-3420	v
- chélates*	3200-1700	f
* pas de changement par dilution		
tropolones	~ 3100	
- OD	2780-2400	v

### Valence C-O et déformation O-H dans le plan

alcools primaires	1075-1000	F
	1350-1260	F
alcools secondaires	1120-1030	F
	1350-1260	F
alcools tertiaires	1170-1100	F
	1410-1310	F
phénols	1230-1140	F
	1410-1310	F

## ALDEHYDES

<u>Valence C=O</u>		
aliphatiques sat.	1740-1720	F
$\alpha$ : $\beta$ insaturés	1705-1685	F
polyènes conjugués	1680-1660	F
aldéhydes d'aryles	1715-1695	F
-C(OH)=C-CHO (liaison H intramoléculaire)	1670-1645	F

<u>Valence CH</u>		
CHO	2880-2650	m à f
doublet possible par résonance de Fermi		

<u>Déformation CH</u>		
$\delta$ CH	975-780	f

### autres vibrations des caractéristiques des

<u>aldéhydes</u>		
- aliphatiques	1440-1325	m
- d'aryle	1415-1350	m
	1320-1260	m
	1230-1160	m

## ACIDES CARBOXYLIQUES

<u>Vibrations OH</u>		
OH libres	3550-3500	m
OH liés	3300-2500	f
OH libres et liés	955-890	v

<u>Valence C=O</u>		
acides aliph. sat.	1725-1700	F
acides $\alpha$ : $\beta$ insat.	1715-1680	F
acides d'aryle	1700-1680	F
acides à liaison H intra	1680-1650	F
$\alpha$ -halogénoacides	1740-1715	F
acides gras solides	1350-1180	f
CO <sub>2</sub> H comb. $\nu$ C-O + $\delta$ OH	1440-1395	f
	1320-1210	F
ion RCO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1610-1550	F
	1420-1300	m

## CETONES

<u>Valence C=O</u>		
-CH <sub>2</sub> -CO-CH <sub>2</sub> -		
acyclique	1725-1700	F
acyl. $\alpha$ : $\beta$ insat.	1695-1660	F
diènonnes conj.	1690-1660	F
quinones :		
2 CO même cycle	1690-1655	F
2 CO dans 2 cycles	1655-1635	F
cétone à cycle-4	1780-1760	F
cétone à cycle-5	1750-1740	F
cétone à cycle-6	1720-1700	F
cétone à cycle-7	1715-1700	F
cétones halogénées en $\alpha^*$ :		
cétone d'aryle	1700-1680	F
cétone diaryle	1670-1660	F
-CO-CO-	1730-1710	F
-CO-CH <sub>2</sub> -CO-(énolique)	1640-1535	F
-CO-C=C-OH (ou NH <sub>2</sub> )	1640-1535	F
-CO-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -OH-(ou NH <sub>2</sub> )	1655-1610	F
-CO-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -CO-	1725-1705	F
-CO-O-CH <sub>2</sub> -CO-	1745-1725	F
tropolones	1620-1600	F

### Autres vibrations

CH <sub>3</sub> -CO-	1360-1355	F
-CH <sub>2</sub> -CO-	1435-1405	F
cétones d'alkyles	1325-1215	m
cétones d'aryles	1225-1075	m
harmonique $\nu$ C=O	3550-3200	f

\* Pour les cétones substituées en  $\alpha$ , à l'exception de celles présentant des liaisons H, on observe des déplacements de fréquence de  $\nu$ C=O :

subst. en $\alpha$	déplacement
$\alpha$ : $\beta$ insaturé	-30
cyclopropyle	-20
halogène en $\alpha$	+20
halogène en $\alpha'$	+40
halogène équatorial	
cétone cyclique	+20

## AMINES ET IMINES

<u>Valence N-H</u>		
amine primaire (2 bandes)	3500-3300	v
amine secondaire	3500-3300	v
imines	3400-3300	v
N-H associés	3400-3100	m
N-H libre	2600-2400	v

<u>Déformation N-H</u>		
amine primaire	1650-1580	m-F
amine secondaire	1650-1550	f

<u>Valence C-N</u>		
amine aliphatique	1220-1020	f-m
amine aromatique :		
primaire	1340-1250	F
secondaire	1350-1280	F
tertiaire	1360-1310	F

## COMPOSES AZOTES INSATURES NON AROMATIQUES

<u>Valence C=N</u>		
<i>oxazolones, oximes, oxazines, oxazolines, azométhines diverses etc...</i>		
acyclique	1690-1635	v
acyclique $\alpha : \beta$ insat.	1665-1630	v
cyclique $\alpha : \beta$ insat.	1660-1480	v

<u>Valence A=B=N type allénique</u>		
NCN carbodiimides	2155-2130	TF
NCO isocyanates (RC=N=N) <sup>+</sup>	2275-2240	TF
sels de diazonium	2280-2260	F
-N=N=N azotures	2160-2120	F
	1350-1180	f

<u>Valence C≡N</u>		
nitriles sat.	2260-2240	f à m
nitriles acycl. $\alpha : \beta$ insat.	2235-2215	F
nitriles d'aryle	2240-2220	m à F
	~ 2145	F
isonitriles	2185-2120	F

<u>Valence N=N</u>		
Azo composés variés	1630-1575	v

## AMIDES

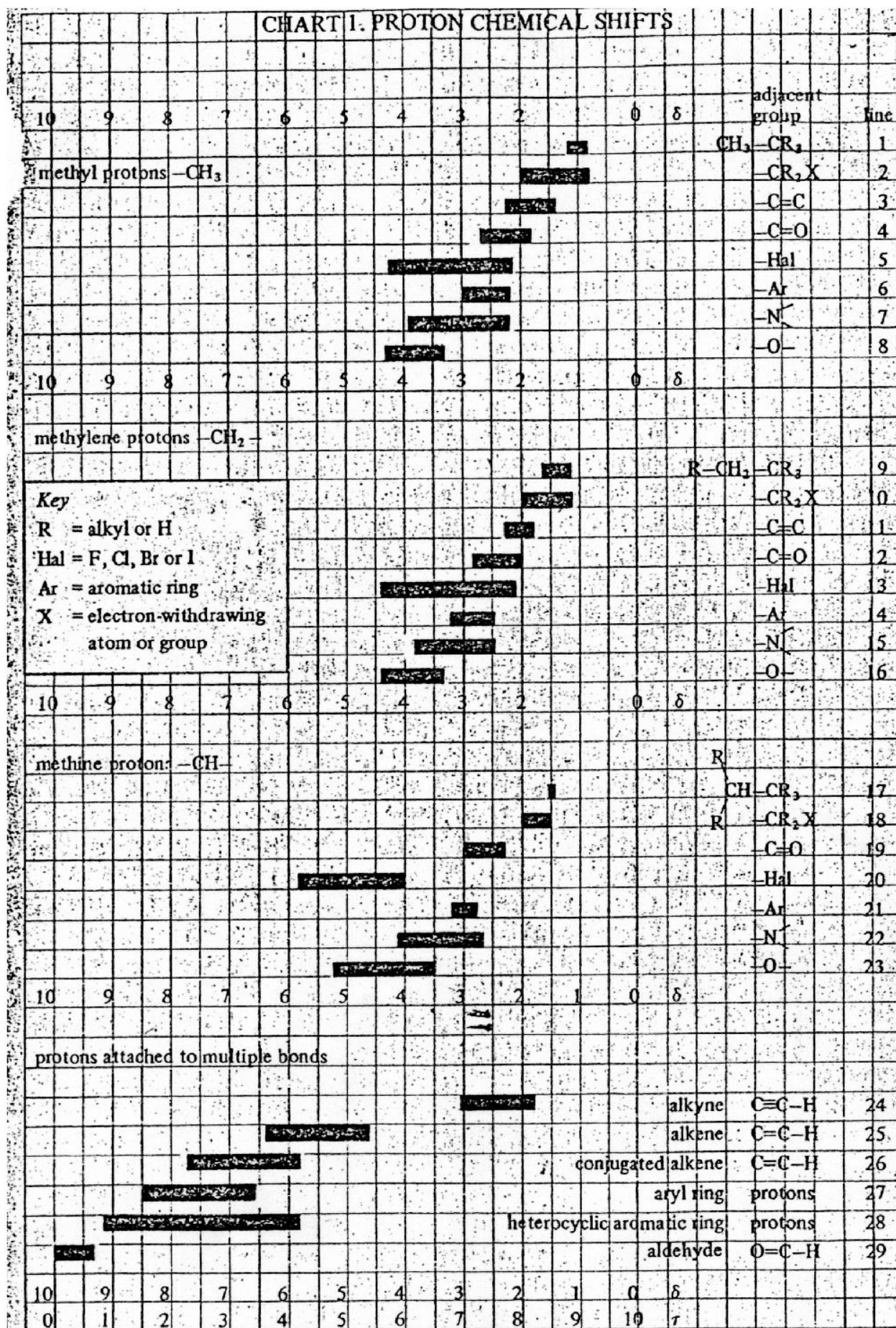
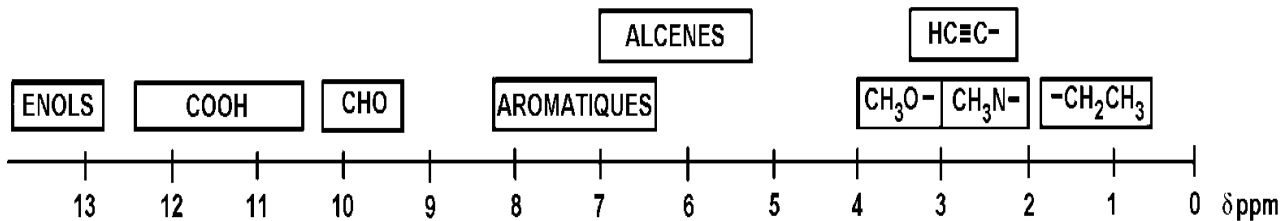
<u>Valence N-H</u>			
amide primaire :			
NH <sub>2</sub> libre	v <sub>a</sub>	3540-3480	F
	v <sub>s</sub>	3420-3380	F
NH <sub>2</sub> liés	v <sub>a</sub>	3360-3320	
	m		
	v <sub>s</sub>	3220-3180	m
amides secondaires :			
NH libre (cis)		3440-3420	F
NH libre (trans)		3460-3440	F
NH liés (cis et trans)		3100-3070	f
NH liés (cis)		3180-3140	m
NH liés (trans)		3300-3270	m

<u>Déformation N-H</u>	
amide secondaire à liaison H (amide V)	~ 700

<u>Valence C=O (amide I)</u>		
amide primaire	~ 1690	F
	~ 1650	F
amides secondaires	1700-1665	F
	1680-1630	F
amides tertiaires	1670-1630	F
$\beta$ -lactame simple	1760-1730	F
$\beta$ -lactame		
noyau condensé	1780-1770	F
$\gamma$ -lactame simple	~ 1700	F
$\gamma$ -lactame		
noyau condensé	1750-1700	F
lactame cyclique à plus grand noyau	~ 1680	F
Urées :		
-NH-CO-CH-	~ 1660	F
-CO-NH-CO-	1790-1720	F
	1710-1670	F
uréthanes	1735-1700	F
carbammates	1710-1690	F

<u>Combinaison <math>\delta</math>NH et <math>\nu</math>CN</u>		
amide primaire (amide I)	1650-1620	F
	1620-1590	F
amides acycliques		
secondaires (amide II)	1570-1515	F
	1550-1510	F
amide secondaire (amide III)	1305-1200	m
<u>Autres vibrations</u>		
amide primaire	1420-1400	m
amide secondaire :		
amide IV	770-620	m
amide VI	630-530	F

# Table RMN



# PROTONS SUBJECT TO HYDROGEN-BONDING EFFECTS

## APPENDIX E (PROTONS ON HETEROATOMS)<sup>a</sup>

