

SPECTROSCOPIE

TABLES

2010

NOM :.....

Prénom :.....

Groupe :.....

SOMMAIRE

RESONANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE ^1H	2
Annexe 1 : Déplacements chimiques de composés monofonctionnels:.....	2
Annexe 2- Déplacements chimiques de composés difonctionnels: X-CH ₂ -Y	3
Annexe 3- Déplacements chimiques de composés trifonctionnels:	4
Annexe 4 : Déplacements chimiques de protons oléfiniques :.....	5
Annexe 5 : Déplacements chimiques de protons aromatiques	6
Annexe 6 : constantes de couplage	7
Annexe 7 : tableau général des déplacements chimiques des ^1H	8
RESONANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE ^{13}C	9
Annexe 8 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcane	9
Annexe 9 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcènes	10
Annexe 10 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcynes	11
Annexe 11 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcynes	12
Annexe 12 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcane substitués.....	13
Annexe 13 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcènes substitués.....	14
Annexe 14 : déplacements chimiques des ^{13}C d'aromatiques.....	15
Annexe 15 : tableau général des déplacements chimiques des ^{13}C	16
SPECTROSCOPIE INFRA-ROUGE.....	17
1/Par ordre décroissant de nombre d'onde :	17
2/ Par fonction	18
2/1 Alcane	18
2/2 Alcènes	18
2/3 Aromatiques	19
2/4 Alcynes - Nitriles	19
2/5 Alcools - Phénols	19
2/6 Ethers-Epoxydes	20
2/7 Dérivés Carbonylés	20
2/8 Amines	22
2/9 Dérivés nitrés	22
SPECTROSCOPIE ULTRA-VIOLETTE.....	23
Diènes.....	23
Diénone.....	24
Aromatiques monosubstitués : C ₆ H ₅ -R.....	25
Aromatiques Carbonylés: C ₆ H ₅ -COR.....	25

RESONANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE ^1H

Annexe 1 : Déplacements chimiques de composés monofonctionnels:

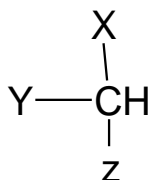
Groupe X	$\text{CH}_3\text{-X}$	$\text{-CH}_2\text{-X}$	-CH-X	$\text{-CH}_3\text{-C-X}$	$\text{-CH}_2\text{-C-X}$	-CH-C-X
-H	0,23	0,86	1,33	0,86	1,33	1,56
-C=C	1,73	2,00	2,10	1,00	1,35	1,55
-C \equiv C	1,75	2,15	2,70	1,15	1,50	1,80
-C \equiv N	1,98	2,35	2,80	1,30	1,60	2,00
-Ph	2,34	2,60	2,87	1,18	1,60	1,80
-CHO	2,17	2,40	2,40	1,13	1,65	1,90
-COR	2,10	2,40	2,55	1,05	1,50	1,70
-COPh	2,50	2,90	3,40	1,18	1,60	2,00
-CO ₂ R	2,10	2,20	2,50	1,15	1,70	1,80
-CONR ₂	2,05	2,23	2,40	1,10	1,60	1,80
-I	2,16	3,17	4,25	1,80	1,80	2,10
-Br	2,68	3,36	4,20	1,80	1,90	2,00
-Cl	3,05	3,44	4,10	1,50	1,80	2,00
-F	4,26	4,40	4,80	1,40	1,80	2,10
-OR	3,38	3,40	3,60	1,20	1,50	1,75
-OPh	3,82	3,95	4,60	1,30	1,50	1,70
-OCOR	3,65	4,10	5,00	1,25	1,60	1,80
-OCOPh	3,82	4,20	5,10	1,50	1,70	1,90
-NR ₂	2,30	2,60	2,90	1,05	1,45	1,70
-NR ₃	3,20	3,10	3,60	1,40	1,70	2,00
-NRPh	2,70	3,10	3,60	1,10	1,50	1,80
-NHCOR	2,80	3,30	3,80	1,10	1,50	1,90
-NO ₂	4,30	4,40	4,60	1,60	2,05	2,50
-SR	2,09	2,50	3,00	1,25	1,60	1,90
-SO ₂ R	2,80	2,90	3,10	1,35	1,70	

Annexe 2- Déplacements chimiques de composés difonctionnels: X-CH₂-Y

Y/X	CH ₃	C=C	C≡C	Ph	CN	COR	COOR	CONR ₂	COPh	Cl	Br	I	NR ₂	NCOR	OH	OR	OPh	OCOR	SR
CH ₃	1,34	1,97	2,14	2,63	2,31	2,47	2,33	2,23	2,99	3,57	3,40	3,20	2,50	3,26	3,70	3,36	4,04	4,12	2,53
	C=C	2,73	3,39	3,30	3,15	3,13	3,10	3,14	3,39	4,09	3,93	3,87	3,30	3,82	4,13	3,97	4,78	4,68	3,08
		C≡C	3,11	3,52	3,37	3,37	3,27	3,26	3,51	4,09	3,86	3,49	3,50	3,94	4,28	4,03	4,90	4,71	3,31
			Ph	3,92	3,68	3,55	3,55	3,67	3,92	4,55	4,50	3,90	3,54	4,35	4,58	4,52	4,90	5,08	3,70
				CN	4,13	3,63	3,48	3,52	3,77	4,07	4,26	3,65	3,50	4,20	4,49	4,20	5,16	5,06	3,57
					COR	3,62	3,32	3,52	3,77	4,46	4,26	3,75	3,50	3,52	4,49	4,29	5,16	5,06	3,57
						COOR	4,22	4,95	3,62	4,24	3,70	3,72	4,22	3,87	5,92	4,13	4,60	6,49	5,00
							CONR ₂	3,30	3,66	4,17	3,92	3,65	3,39	4,09	4,38	4,18	5,05	4,95	3,46
								COPh	3,91	4,60	4,43	3,89	3,64	4,34	4,63	4,43	5,30	5,20	3,71
									Cl	5,28	5,16	4,99	4,33	5,03	5,32	5,4	5,99	5,89	4,4
										Br	4,94	4,38	4,13	4,83	5,12	4,92	5,79	5,69	4,20
											I	3,89	3,62	4,32	4,61	4,41	5,28	5,18	3,69
												NR ₂	3,10	4,07	4,36	4,16	5,03	4,93	3,44
													NCOR	4,77	5,06	4,86	5,73	5,63	4,14
														OH	5,35	5,15	6,02	5,92	4,43
															OR	4,49	5,82	5,72	4,23
																OPh	6,69	6,59	5,10
																	OCOR	6,49	5,00
																		SR	3,51

Annexe 3- Déplacements chimiques de composés trifonctionnels:**Règle de calcul : (en ppm)**

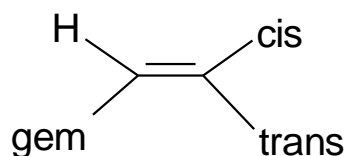
$$\delta = 2,50 + \sigma_X + \sigma_Y + \sigma_Z$$



Groupe fonctionnel	σ_i
-R	0
-F	1,59
-Cl	1,56
-Br	1,53
-NO ₂	1,84
-NH ₂	0,64
-NH ₃ ⁺	1,34
-NHCOR	1,80
-OH, -OR	1,14
-OAr	1,79
-OCOR	2,07
-Ar	0,99
-C=C	0,46
-C≡C	0,79
-C≡N	0,66
-COR, -COOR, -COOH	0,47
-CONH ₂	0,60
-COAr	1,22
-SH, -SR	0,61
-SO ₂ R	0,94

Annexe 4 : D placements chimiques de protons ol finiques :**R gle de calcul :**

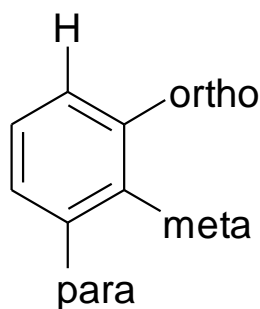
$$\delta = 5,28 + Z_{\text{gem}} + Z_{\text{cis}} + Z_{\text{trans}} \text{ (ppm)}$$



GROUPPE	Z _{gem}	Z _{cis}	Z _{trans}
-H	0	0	0
-R	0,44	-0,26	-0,29
-R cycle	0,71	-0,33	-0,30
-CH ₂ O	0,67	-0,02	-0,07
-CH ₂ X	0,72	0,12	0,07
-CH ₂ N	0,66	-0,05	-0,23
-C≡C-	0,50	0,35	0,10
-C≡N	0,23	0,78	0,58
-C=C	0,98	-0,04	-0,21
-COR	1,10	1,13	0,81
-COOH	1,00	1,35	0,74
-COOR	0,84	1,15	0,56
-CHO	1,03	0,97	1,21
-CONR ₂	1,37	0,93	0,35
-OR	1,18	-1,06	-1,28
-OCOR	2,09	-0,40	-0,67
-Ar	1,35	0,37	-0,10
-Cl	1,00	0,19	0,03
-Br	1,04	0,40	0,55
-NR ₂	0,69	-1,19	-1,31
-SR	1,00	-0,24	-0,04

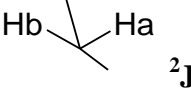
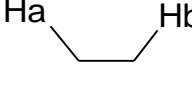
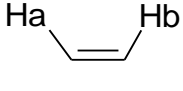
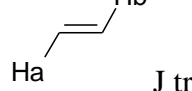
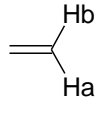
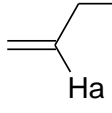
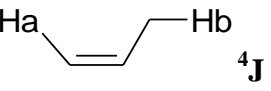
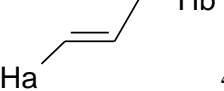
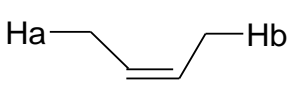
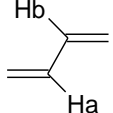
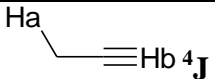
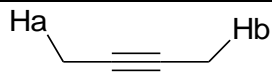
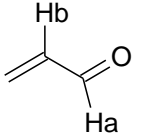
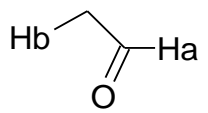
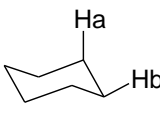
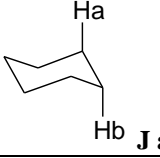
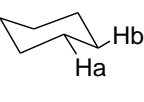
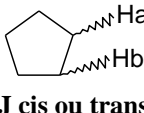
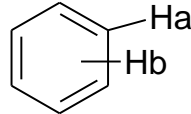
Annexe 5 : Déplacements chimiques de protons aromatiques**Règle de calcul:**

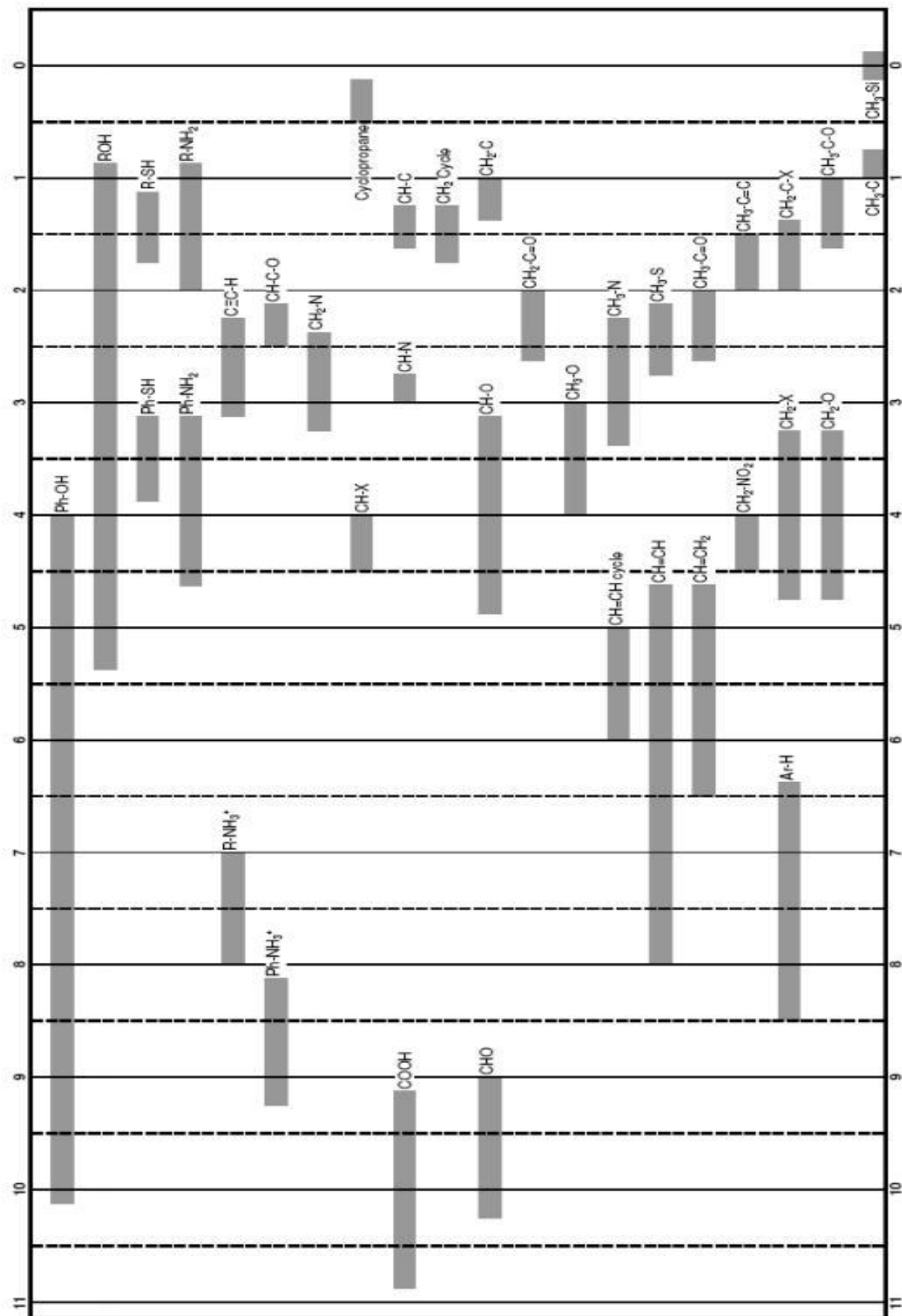
$$\delta = 7,27 + Z_{\text{ortho}} + Z_{\text{méta}} + Z_{\text{para}} \text{ (ppm)}$$



GROUPE	ortho	méta	para
-H	0,00	0,00	0,00
-NO ₂	0,95	0,17	0,33
-CHO	0,58	0,21	0,27
-COCl	0,83	0,16	0,30
-COOH	0,80	0,14	0,20
-COOCH ₃	0,74	0,07	0,20
-COCH ₃	0,64	0,09	0,30
-CO-NH ₂	0,46	0,09	0,17
-CN	0,27	0,11	0,30
-Ph	0,18	0,00	0,08
-CH ₂ Cl	0,00	-0,01	0,00
-CH ₃	-0,17	-0,09	-0,18
-CH ₂ -CH ₃	-0,15	-0,06	-0,18
-CH(CH ₃) ₂	-0,14	-0,09	-0,18
-C(CH ₃) ₃	0,01	-0,10	-0,24
-C=CH ₂	0,04	-0,04	-0,12
-CH ₂ OH	-0,10	-0,10	-0,10
-CH ₂ -NH ₂	0,00	0,00	0,00
-F	-0,30	-0,02	-0,22
-Cl	0,02	-0,06	-0,04
-Br	0,22	-0,13	-0,03
-I	0,40	-0,26	-0,03
-OCH ₃	-0,43	-0,09	-0,37
-OCOCH ₃	-0,21	-0,02	-0,44
-OH	-0,50	-0,14	-0,40
-NH ₂	-0,75	-0,24	-0,63
-N(CH ₃) ₂	-0,60	-0,10	-0,62
-NH-CO-CH ₃	0,14	-0,07	-0,27

Annexe 6 : constantes de couplage

Type	Ja-b en Herz	Ja-b moyen	Type	Ja-b en Herz	Ja-b moyen
 2J	0-30	12-15	 3J	4-10	7
 J cis	6-12	10	 J trans	12-18	17
 2J	0-3	2	 3J	4-10	7
 4J	0-3	2	 4J	0-3	1.5
 5J	0-3	1-2	 5J	9-13	10
 4J	2-3		 5J	2-3	
 5J	5-8	6	 5J	1-3	2-3
 J ax eq	0-5	2-3	 J ax-ax	6-14	8-10
 J eq eq	0-5	2-3	 J cis ou trans	5-10	
					
Ortho	6-10	9			
Méta	1-3	3			
Para	0-1	0			

Annexe 7 : tableau général des déplacements chimiques des ^1H 

RESONANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE ^{13}C

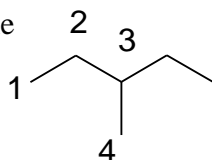
Annexe 8 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcane

Règle de Grant et Paul

Paramètres d'additivité de déplacements dans les hydrocarbures

$\delta_{\text{Ci}} = -2,5 + \Sigma$ incréments dus à la substitution et à la ramification

Exemple : 3-méthylpentane



$$\delta_{\text{C1}} = -2,5 + \Sigma \text{ incréments} = -2,5 + 9,1 + 9,4 + 2*(-2,5) + 0,3 = 11,3$$

C1 possède 1C en α , 1 en β , 2 en γ et 1 en δ

$$\delta_{\text{C2}} = -2,5 + \Sigma \text{ incréments} = -2,5 + 2*9,1 + 2*9,4 - 2,5 - 2,5 = 29,5$$

C2 possède 2C en α , 2 en β , 1 en γ et c'est un carbone secondaire relié à un carbone tertiaire $2^\circ(3^\circ)$.

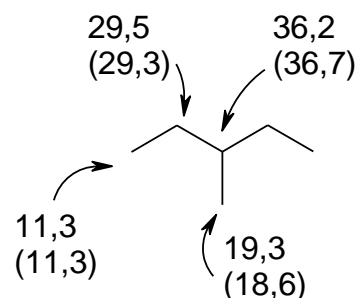
$$\delta_{\text{C3}} = -2,5 + \Sigma \text{ incréments} = -2,5 + 3*9,1 + 2*9,4 + 2(-3,7) = 36,2$$

C3 possède 3C en α et 2 en β , et c'est un carbone tertiaire relié à deux carbones secondaires $3^\circ(2^\circ)$.

$$\delta_{\text{C4}} = -2,5 + \Sigma \text{ incréments} = -2,5 + 9,1 + 2*9,4 + 2(-2,5) - 1,1 = 19,3$$

C4 possède 1C en α , 2 en β et 2 en γ et c'est un carbone primaire relié à un carbone tertiaire $1^\circ(3^\circ)$.

Déplacements calculés (déplacements observés) en ppm pour le 3-méthylpentane



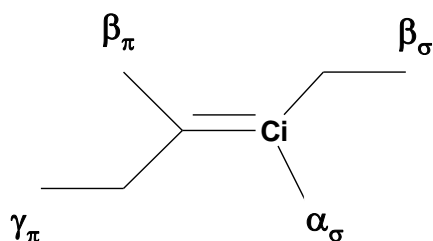
Annexe 9 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcane

Composé	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
Méthane	-2,3				
Ethane	6,5				
Propane	16,1	16,3			
n-Butane	13,1	24,9			
n-Pentane	13,7	22,6	34,6		
n-Hexane	13,7	22,8	31,9		
n-Heptane	13,8	22,8	32,2	29,3	
n-Octane	13,9	22,9	32,2	29,5	
n-Nonane	13,9	22,9	32,3	29,7	30,0
n-Décane	14,0	22,8	32,3	29,8	30,1
Isobutane	24,6	23,3			
2-Méthylbutane	21,9	29,7	31,7	11,4	
Néopentane	31,7	28,1			
2,2-Diméthylbutane	28,7	30,2	36,5	8,5	
2,3-Diméthylbutane	19,1	33,9			
2-Méthylpentane	22,4	27,6	41,6	20,5	14,0
3-Méthylpentane	11,3	29,3	36,7	18,6 (C-6)	
3,3-Diméthylpentane	7,7	33,4	32,2	25,6 (C-6)	
Cyclopropane	-2,8				
Cyclopentane	25,8				
Cyclohexane	27,6				

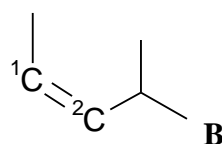
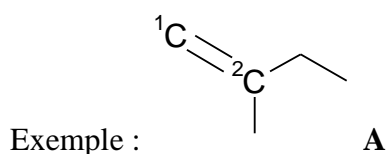
Annexe 10 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcènes

Règle de calcul:

$$\delta_{\text{C}_i} = 123,1 + \sum A_l + S$$



Position <i>l</i>	<i>A_l</i> (ppm)	Substitution	S(ppm)
α_σ	11	(Z)	-1,2
β_π	-7,1	gem α	-4,9
β_σ	6	gem β	1,2
γ_π	-1,9	mult σ	1,3
γ_σ	-1	mult π	-0,7
δ_π	1,1		
δ_σ	0,7		
ϵ_σ	0,2		



A : C1 $\delta = 123,1 + 2 * \beta_\pi + \gamma_\pi + \text{gem}\beta$

$$\delta = 123,1 + 2 * (-7,1) + (-1,9) + 1,2 = 108,2 \text{ (obs : 108,6 SDBS)}$$

C2 $\delta = 123,1 + 2 * \alpha_\sigma + \beta_\sigma + \text{gem}\alpha$

$$\delta = 123,1 + 2 * (11) + (6) + (-4,9) = 146,2 \text{ (obs : 147,7 SDBS)}$$

B : C1 $\delta = 123,1 + \alpha_\sigma + \beta_\pi + 2 * \gamma_\pi + (\text{Z}) + \text{mult}\pi$

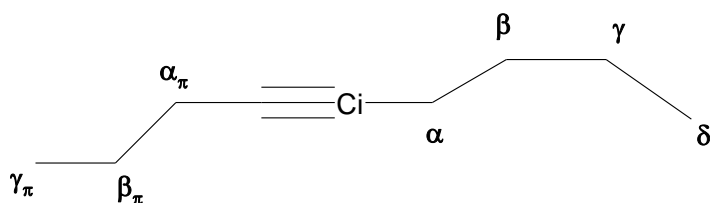
$$\delta = 123,1 + (11) + (-7,1) + 2 * (-1,9) + (-1,2) + (-0,7) = 121,3 \text{ (obs : 121,4 SDBS)}$$

C2 $\delta = 123,1 + \alpha_\sigma + 2 * \beta_\sigma + \beta_\pi + (\text{Z}) + \text{mult}\alpha$

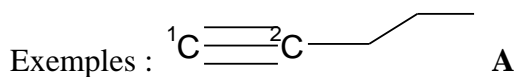
$$\delta = 123,1 + (11) + 2 * (6) + (-7,1) + (-1,2) + 1,3 = 139,1 \text{ (obs : 138,6 SDBS)}$$

Annexe 11 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcynes**Règle de calcul:**

$$\delta_{\text{C}_i} = 71,9 + \sum A_l$$



Position l	$A_l(\text{ppm})$
α	6,9
α_π	-5,7
β_π	2,3
β	4,8
γ_π	-1,3
γ	-0,1
δ_π	0,6
δ	0,5



$$\mathbf{A} : 1\text{C } \delta = 71,9 + \alpha + \beta + \gamma$$

$$\delta = 71,9 + 6,9 + 4,8 + (-0,1) = 83,5 \text{ (obs : 84,5 SDBS)}$$

$$2\text{C } \delta = 71,9 + \alpha_\pi + \beta_\pi + \gamma_\pi$$

$$\delta = 71,9 + (-5,7) + (2,3) + (-1,3) = 67,2 \text{ (obs : 68,3 SDBS)}$$

Annexe 12 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcane substitués

Y	α		β		γ
	Terminal	Interne	Terminal	Interne	
CH ₃	9	6	10	8	-2
CH=CH ₂	20		6		-0,5
C≡CH	4,5		5,5		-3,5
COOH	21	16	3	2	-2
COO-	25	20	5	3	-2
COOR	20	17	3	2	-2
COCl	33	28		2	
CONH ₂	22		2,5		-0,5
COR	30	24	1	1	-2
CHO	31		0		-2
Phényl	23	17	9	7	-2
OH	48	41	10	8	-5
OR	58	51	8	5	-4
OCOR	51	45	6	5	-3
NH ₂	29	24	11	10	-5
NH ₃ ⁺	26	24	8	6	-5
NHR	37	31	8	6	-4
NR ₂	42		6		-3
NR ₃ ⁺	31		5		-7
NO ₂	63	57	4	4	
C≡N	4	1	3	3	-3
SH	11	11	12	11	-4
SR	20		7		-3
F	68	63	9	6	-4
Cl	31	32	11	10	-4
Br	20	25	11	10	-3
I	-6	4	11	12	-1

Exemple : butan-2-ol (Butane C1=13,1 et C2 = 24,9)

$$\text{C1} = 13,1 + 8 = 21,1 \text{ (obs 22,8)}$$

$$\text{C2} = 24,9 + 41 = 65,9 \text{ (obs 69,3)}$$

$$\text{C3} = 24,9 + 8 = 32,9 \text{ (obs 32,1)}$$

$$\text{C4} = 13,1 - 5 = 8,1 \text{ (obs 10,0)}$$

Annexe 13 : déplacements chimiques des ^{13}C d'alcènes substitués

Règle de calcul: $\delta_{\text{C}_i} = 123,5 + \sum Z_i + S$

Y	Z γ_π	Z β_π	Z α_π	C=Ci	Z α_σ	Z β_σ	Z γ_σ
Alkyl	1,5	-1,8	-7,9		10,6	7,2	-1,5
C6H5			-11		12		
C(CH3)3			-14		25		
Cl		2	-6		3	-1	
Br		2	-1		-8	0	
I			7		-38		
OR		-1	-39		29	2	
OCOCH3			-27		18		
CHO			13		13		
COCH3			6		15		
COOH			9		4		
COOR			7		6		
C \equiv N			15		-16		

S terme correctif pour les groupes cis, trans et géminés

		S
$\alpha_\sigma\alpha_\pi$	trans	0
$\alpha_\sigma\alpha_\pi$	cis	-1,1
$\alpha_\sigma\alpha_\sigma$	gem	-4,8
$\alpha_\pi\alpha_\pi$	gem	2,5
$\beta_\sigma\beta_\sigma$		2,3

Exemple : 2-propényl méthyl ether

$$\text{C1} = 123,5 - 39 - 7,9 + 2,5 = 79,1 \text{ (obs 80,7)}$$

$$\text{C2} = 123,5 + 29 + 10,6 - 4,8 = 158,3 \text{ (obs 160,9)}$$

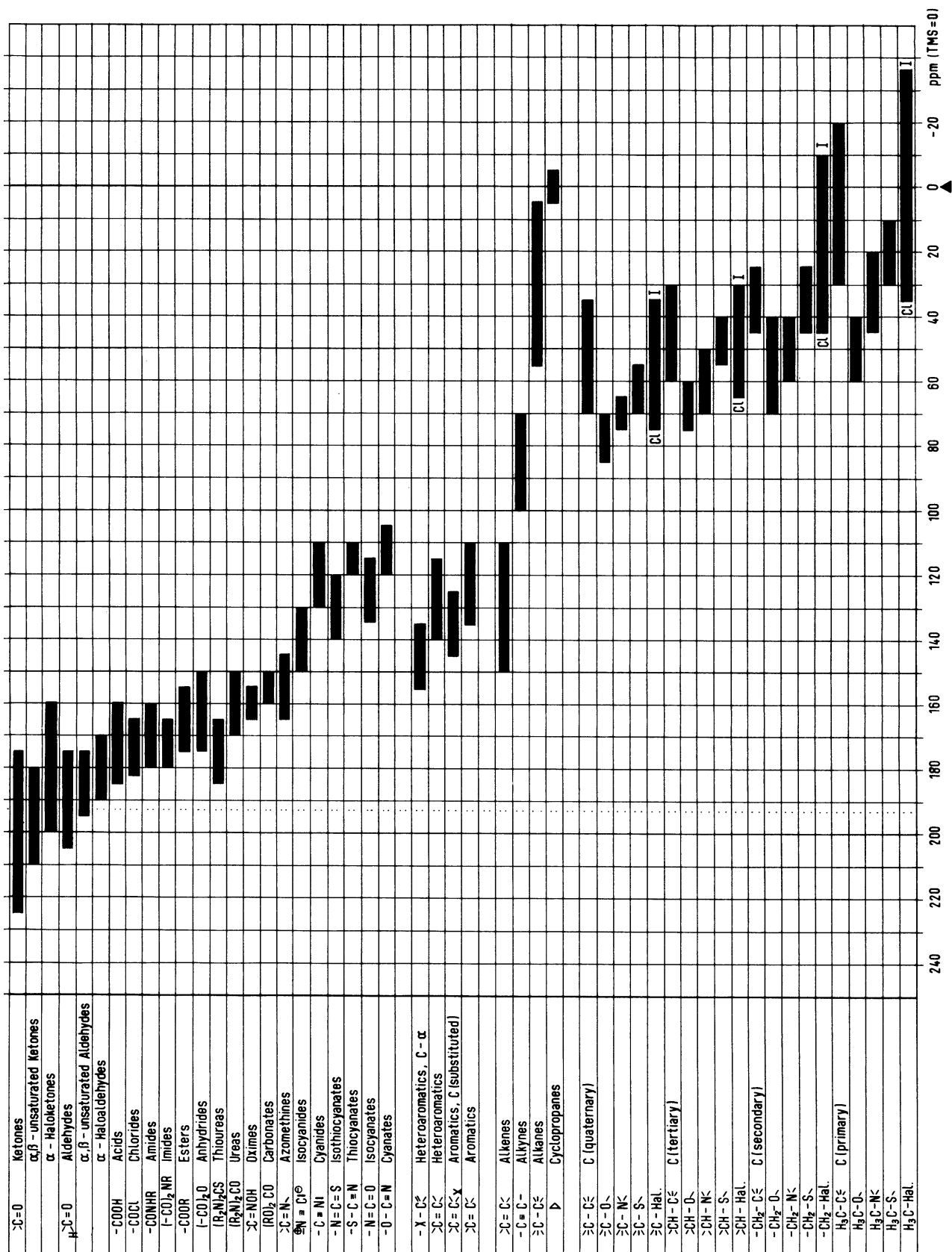
Annexe 14 : déplacements chimiques des ^{13}C d'aromatiques

Règle de calcul:

$$\delta_{\text{C}}(\text{k}) = 128,5 + \sum \text{Zi}$$

Substituant	Z _{C-1}	Z _{C-2}	Z _{C-3}	Z _{C-4}	δ C-substituant
H	0	0	0	0	
CH ₃	9,3	0,7	-0,1	-2,9	21,3
CH ₂ CH ₃	15,6	-0,5	0	-2,6	29,2
CH(CH ₃) ₂	20,1	-2	0	-2,5	34,4
C(CH ₃) ₃	22,2	-3,4	-0,4	-3,1	34,5
CH=CH ₂	9,1	-2,4	0,2	-0,5	137,1
C≡CH	-5,8	6,9	0,1	0,4	84
C ₆ H ₅	12,1	-1,8	-0,1	-1,6	
CH ₂ OH	13,3	-0,8	-0,6	-0,4	64,5
CH ₂ OC(=O)CH ₃	7,7	0	0	0	66,1
OH	26,6	-12,7	1,6	-7,3	
OCH ₃	31,4	-14,4	1	-7,7	54,1
OC ₆ H ₅	29	-9,4	1,6	-5,3	
OC(=O)CH ₃	22,4	-7,1	-0,4	-3,2	
C(=O)H	8,2	1,2	0,6	5,8	192
C(=O)CH ₃	7,8	-0,4	-0,4	2,8	195,7
C(=O)C ₆ H ₅	9,1	1,5	-0,2	3,8	196,4
C(=O)CF ₃	-5,6	1,8	0,7	6,7	
C(=O)OH	2,9	1,3	0,4	4,3	168
C(=O)OCH ₃	2	1,2	-0,1	4,8	166,8
C(=O)Cl	4,6	2,9	0,6	7	
C≡N	-16	3,6	0,6	4,3	119,5
NH ₂	19,2	-12,4	1,3	-9,5	
N(CH ₃) ₂	22,4	-15,7	0,8	-11,8	
NHC(=O)CH ₃	11,1	-9,9	0,2	-5,6	
NO ₂	19,6	-5,3	0,9	6	
N=C=O	5,7	-3,6	1,2	-2,8	
F	35,1	-14,3	0,9	-4,5	
Cl	6,4	0,2	1	-2	
Br	-5,4	3,4	2,2	-1	
I	-32,2	9,9	2,6	-7,3	
CF ₃	2,6	-3,1	0,4	3,4	
SH	2,3	0,6	0,2	-3,3	
SCH ₃	10,2	-1,8	0,4	-3,6	
SO ₂ NH ₂	15,3	-2,9	0,4	3,3	
Si(CH ₃) ₃	13,4	4,4	-1,1	-1,1	

Annexe 15 : tableau général des déplacements chimiques des ¹³C



SPECTROSCOPIE INFRA-ROUGE

1/Par ordre décroissant de nombre d'onde :

Groupement	Liaison	Nombre d'onde	Vibration	Bande
Alcools primaires	O-H	3640	élongation	intense et large
Alcools secondaires	O-H	3630	élongation	intense et large
Alcools tertiaires	O-H	3620	élongation	intense et large
Acides	O-H	3550-3500	élongation	intense et très large
Amines primaires	N-H	3500	élongation asymétrique	faible
		3410	élongation symétrique	faible
Amides primaires	N-H	3500	élongation asymétrique	faible
		3400	élongation symétrique	faible
Amines secondaires	N-H	3350-3310	élongation	faible
Amides secondaires	N-H	3400-3300	élongation	faible
° C-H (alcynes)	C-H	3340-3300	élongation	moyenne et fine
Aromatiques	C-H	3080-3030	élongation	moyenne
=CH ₂ (alcènes)	C-H	3080	élongation asymétrique	moyenne
		2975	élongation symétrique	moyenne
-CH ₃ (alcanes)	C-H	2960	élongation asymétrique	forte
		2870	élongation symétrique	moyenne
-CH ₂ -	C-H	2925	élongation asymétrique	forte
		2850	élongation symétrique	forte
-C-H	C-H	2890	élongation	faible
Aldéhydes	C-H	2830-2720	élongation asymétrique	faible
		2650	élongation symétrique	moyenne
Nitrile	-C° N	2260-2210	élongation	moyenne à forte
C° C	C° C	2150-2100	élongation	faible
Aromatiques	C-H	2000-1660 plusieurs bandes	harmonique des déformations C-H	faible
Aldéhydes aliphatiques	C=O	1740-1720	élongation	forte
Aldéhydes aromatiques	C=O	1715-1695	élongation	forte
Cétones aliphatiques	C=O	1725-1705	élongation	forte
Acides	C=O	1800-1740	élongation	forte
Esters aliphatiques	C=O	1750-1730	élongation	forte
Cétones aromatiques	C=O	1700-1670	élongation	forte
Amides secondaires	C=O	1700-1630	élongation	forte
Amides primaires	C=O	1690-1620	élongation	forte
C=C	C=C	1645	élongation	moyenne
Aromatiques	C=C	1600 et 1500	élongation	variable
Amines primaires	N-H	1640-1560	déformation cisaillement	forte à moyenne
Amines secondaires	N-H	1580-1490	déformation	très faible
Amides primaires	N-H	1650-1590	déformation	moyenne
Amides secondaires	N-H	1570-1510	déformation	
-CH ₂ -	C-H	1470	déformation cisaillement	moyenne
-CH ₃ (alcanes)	C-H	1460	déformation asymétrique	moyenne
		1380	déformation symétrique	
-CH	C-H	1340	déformation	faible

Groupement	Liaison	Nombre d'onde	Vibration	Bande
Alcools	O-H	1410-1330	déformation dans le plan	
Acides	O-H	1380-1280	déformation dans le plan	moyenne
Amines	C-N	1230-1030	élongation	moyenne
Amines aromatiques	C-N	1360-1180	élongation	moyenne à forte
Esters	C-O	1300-1050	élongation 2 bandes	
Acides	C-O	1190-1075	élongation	forte
Alcools tertiaires	C-O	1150	élongation	variable
Ether	C-O	1150-1070	élongation	
Alcools secondaires	C-O	1100	élongation	variable
Alcools primaires	C-O	1050	élongation	variable
Aromatiques	C-H	900-700	déformation dans le plan caractéristique du type de substitution	variable
Amine primaire	N-H	900-650	déformation torsion	moyenne et large
(CH ₂) _n	C-H	725-720	déformation balancement n>4	faible

2/ Par fonction

Les fréquences des bandes d'absorption sont données en cm⁻¹. Les symboles utilisés sont :

-intensité des bandes : F (intense), m (moyenne) et f (faible).

-type de bande :

vibration d'allongement (ν)

vibration de déformation (δ)

2/1 Alcanes

-CH ₃	2960, F, ν _{asC-H}	2870 m, ν _{sC-H}	1460, m, δ _{asC-H}	1380 F, δ _{sC-H}
-CH ₂	2925, F, ν _{asC-H}	2850 F, ν _{sC-H}	1470, m, δ scissoring	720-725, f, δ rocking
-CH	2890, f, ν _{CH}		1340, f, δ _{C-H}	

Cas particuliers :

-CH(CH ₃) ₂		1170 (F) et 1145
-C(CH ₃) ₃		1255 (F) et 1210
-C quaternaire		1195 (F)
cyclopropane	3050 (m, ν _{asCH})	1005-1020

2/2 Alcènes

Suivant la substitution :

3020	(m, ν=C-H)	1645-1670	(m à F, νC=C)
------	------------	-----------	---------------

Cas particuliers :

Les vibrations de déformation (δ hors du plan) des liaisons C-H vinyliques peuvent permettre de déterminer la substitution de la double liaison.

R-CH=CH ₂	1645 m, ν _{CH}	1420 m, δ _{CH} dans le plan	990 et 910 F, δ _{CH} hors du plan
RR'C=CH ₂	1655 m	1415 m	890 F
R-CH=CH-R' (Z)	1660 m	1415 m	675-730 m
R-CH=CH-R' (E)	1675 f		975 F
RR'C=CHR''	1670 m à f		800-840 m à F
RR'C=CR''R'''	1670 f		

Diènes 1,3 : 1650 et 1665 (δ modifiées par la conjugaison)

2/3 Aromatiques

3030 (m, ν=C-H)	1500 et 1600 F, ν C=C	1000-1275 δ dans le plan	700-900 δ hors du plan
--------------------	--------------------------	-----------------------------	---------------------------

Les vibrations de déformation hors du plan peuvent permettre de déterminer la substitution d'un noyau benzénique :

monosubstitué	730-770 et 690-710.
disubstitué-1,2	735-770.
-1,3	690-710 et 750-810.
-1,4	810-840.
trisubstitué- 1,2,3	705-745 et 760-780.
-1,2,4	805-820 et 870-885.
-1,3,5	675-730 et 810-865.

2/4 Alcynes - Nitriles

R-C≡C-H	3300 F, ν _{C-H}	2100-2140 f, ν _{C-C}	600-700 δ _{C-H}
R-C≡C-R'	2190-2260 f, ν _{C-C}		
R-C≡N	2210-2260 variable, ν _{CN}		

2/5 Alcools - Phénols

Suivant la concentration du produit:

3610-3640 F, bande fine ν _{OH} libre	et/ou 3500-3600 F, bande large ν _{OH} dimère	et/ou 3200-3400 F, bande large ν _{OH} polymère
---	---	---

Cas particuliers:

3500-3600 (F, bande fine, ν_{OH} diols et polyols), 2500-3200 (F, ν_{O-H} chélaté avec C=O, NO₂,...).

La bande ν_{C-O} peut permettre de déterminer le type de R-OH étudié mais attention cette bande est déplacée par les substituants situés en α du carbone qui porte l'oxygène (ex: groupement alcoyle: -15, insaturation en α : - Cas particuliers:

30,...).

alcool primaire	1050
alcool secondaire	1100
alcool tertiaire	1150
phénol	1200

2/6 Ethers-Epoxydes

Ethers aliphatiques	1070-1150 (ν_{C-O})
Ethers aromatiques ou vinyliques	1020-1075 et 1200-1275 (ν_{CO})

Cas particuliers :

R-OCH ₃	2815-2830 (ν_{C-H})		
Ar-OCH ₃	2850 (ν_{C-H})		
R-O-CH ₂ -O-R'	2780 (ν_{C-H})		
cétal ou acétal		1040-1200 (ν_{C-O})	
époxyde	3050 (ν_{asCH_2}) ou 3000 (ν_{C-H})	1250 (ν_{CO})	750-840 et 810-950 (δ_{C-H})

2/7 Dérivés Carbonylés

Tous les ν_{C-O} sont très intenses

a-Cétones

R-CO-R	1715
-C=C-CO-R	1675 ($\nu_{C=O}$) et 1650 ($\nu_{C=C}$)
Ar-CO-R	1690
-C=C-C-CO-R	1665

Cas particuliers :

cycloheptanone	1705	
cyclohexanone	1715	
cyclopentanone	1745	
cyclobutanone	1780	
2-halogéno-cétone	0 à +25 (Cl) 0 à + 20 (Br) suivant l'angle des liaisons C=O et C-X.	
dicétone-1,3 (R-CO-C-CO-R ¹)	1720 ($\nu_{C=O}$)	1650 et/ou 1615 $\nu_{C=O}$ conjugué forme énol 1605 $\nu_{C=C}$ forme énol
quinone	1675 ($\nu_{C=O}$) 1600 ($\nu_{C=C}$)	

b-Aldéhydes :

R-CHO	2720 et 2820 (ν_{C-H})	1720 ($\nu_{C=O}$)
-C=C-CHO		1685 ($\nu_{C=O}$)
Ar-CHO		1700 ($\nu_{C=O}$)

c-Acides

R-COOH	2500-3000 ν_{O-H} , large	1760 ou 1710 $\nu_{C=O}$ mono- ou di- mères	1420 et 1200-1300 δ_{OH} et ν_{C-O}	920 δ hors du plan
-C=C-COOH et Ar-COOH		1720 ou 1690 $\nu_{C=O}$ mono- ou di- mères		

d-Esters-Lactones

R-COOR'	1735 ($\nu_{C=O}$)	1050-1300 deux bandes ν_{as} et ν_{sC-O}
-C=C-COOR	1720 ($\nu_{C=O}$)	1050-1200 et 1250-1300 (ν_{C-O})
Ar-COOR	1720 ($\nu_{C=O}$)	1100-1180 et 1250-1300 (ν_{C-O})
R-COO-C=C-	1760($\nu_{C=O}$) et 1650- 1690 ($\nu_{C=C}$)	
Ar-COO-Ar'	1735 ($\nu_{C=O}$)	

Cas particuliers :

H-COOR (formiate)			1180(ν_{C-O})
CH ₃ -COOR (acétate)	1365-1380 (ν_{C-H})		1240 (ν_{C-O})
R-COOCH ₃	1415-1440 (ν_{sC-H})	1355-1365 (ν_{asC-H})	1165(ν_{C-O})
2-halogéno-esters		+ 10 à +40 (Cl, Br)	
R-CO-COOR	1745 ($\nu_{C=O}$ ester).		
R-CO-C-COOR'	1720(ν_{C-O} , cétone), 1735 (ν_{C-O} , ester)	1650 ($\nu_{C=O}$, émol) et 1630 ($\nu_{C=C}$, émol).	
lactone	1735 (cycle à 6)	1720 (cycle à 6 et conjuguée)	
	1770 (cycle à 5)	1750 (cycle à 5 et conjuguée).	

e-Amides

R-CONH ₂	3400 et 3500 ν_{N-H} libre deux bandes ou 3050-3200 ν_{N-H} associé plusieurs bandes	1690 ou 1650 $\nu_{C=O}$ libre ou associé bande I des amides	1600 ou 1640 δ_{N-H} libre ou associé bande II des amides	
R-CONHR'	3440 ou 3070 et 3300 ν_{N-H} libre ou associé	1680 ou 1655 $\nu_{C=O}$ libre ou associé bande I des amides	1530 ou 1550 δ_{N-H} libre ou associé bande II des amides	1260 ou 1300 ν_{C-N} libre ou associé bande III des amides
R-CONR'R''		1650 $\nu_{C=O}$		

Cas particuliers : -C=C-CO-N : -15 et -C=C-CO-N-C=C- : +15

2/8 Amines

R-NH ₂	3400 et 3500 f, ν_{N-H}	1560-1640 δ_{N-H}	1030-1230 ν_{C-N}	650-900 m, bande large
R-NH-R'	3310-3350 f, ν_{N-H}	1490-1580 δ_{N-H}	1030-1230 m, ν_{C-N}	
R-NR'R''			1030-1230 m, ν_{C-N}	
Ar-NH ₂	3400 et 3500 m, ν_{N-H}		1250-1360 F, ν_{C-N} Et 1180-1280 m, ν_{C-N}	

2/9 Dérivés nitrés

R-NO ₂	1560 F, ν_{asNO_2}	1350 F, ν_{sNO_2}	850 ν_{C-N}
Ar-NO ₂	1515-1550 F, ν_{asNO_2}	1345-1385 ν_{sNO_2}	870 ν_{C-N}

SPECTROSCOPIE ULTRA-VIOLETTE

Règles de WOODWARD-FIESER

Diènes

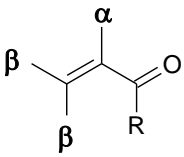
Règle : base + somme des incréments

Type de diène	base de calcul
transoïde	214 nm
cisoïde	253 nm
Cyclohexadiène	260 nm

Substituants	Incréments
double liaison supplémentaire	+ 30 nm
Phényle conjugué	+60 nm
groupement alkyle	+ 5 nm
RO-	+ 6 nm
RCOO-	0 nm
Cl, Br	+ 10 nm
R ₂ N-	+ 60 nm
double liaison exo cyclique	+ 5 nm

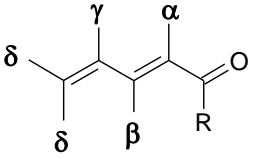
Carbonyles α - β -insaturés

Règle : base + somme des incréments

	R = alkyle	R = H	R = OH, OR	énone dans cycle à 5
Base de calcul	215 nm	210 nm	195 nm	202

Substituants	Incréments α	Incréments β
alkyle	+10nm	+12nm
-OH, - OAlkyl	+35nm	+30nm
-OC(=O)R	+6nm	+6nm
-Cl	+15nm	+12nm
-Br	+25nm	+30nm
-NR ₂		+95nm

Diénones**Règle : base + somme des incréments**

	R = alkyle
Base de calcul	245 nm
Double liaison exocyclique	+ 5
Double liaison supplémentaire	+ 30
Phényle conjugué	+60
Diène homoannulaire	+ 35

Substituants	Incréments α	Incréments β	Incréments γ	Incréments δ
alkyle	+10nm	+12nm	+18nm	+18nm
-OH,	+35nm	+30nm		+50nm
-OAlkyl	+35nm	+30nm	+17nm	+31nm
-OC(=O)R	+6nm	+6nm		+6nm
-Cl	+15nm	+12nm		
-Br	+25nm	+30nm	+30nm	

Corrections de solvant :

Solvants	Correction
hexane	+11nm
cyclohexane	+11nm
éther	+8nm
dioxanne	+5nm
éthanol	0nm
méthanol	0nm
eau	-11nm

Aromatiques monosubstitués : C₆H₅-R

R	E nm (ε _{max})	B nm (ε _{max})	R	E nm (ε _{max})	B nm (ε _{max})
H	203,5 (7400)	254 (204)	NH ₂	230 (8600)	280 (1430)
NH ₃ ⁺	203 (7500)	254 (160)	O ⁻	235 (8400)	287 (2600)
CH ₃	206,5 (7000)	261 (225)	NHCOCH ₃	238 (10500)	
I	207 (7000)	257 (700)	COCH ₃	245,5 (9800)	278 (1100)
Cl	209,5 (7400)	263,5 (190)	CH=CH ₂	248 (14000)	282 (750), 291 (500)
Br	210 (7900)	261 (192)	CHO	244 (15000)	280 (1500)
OH	210,5 (6200)	270 (1450)	C ₆ H ₅	251,5 (18300)	
OCH ₃	217 (6400)	269 (1480)	O-C ₆ H ₅	255(11800)	272 (2000), 278 (1800)
SO ₂ NH ₂	217,5 (9700)	264,5 (740)	NO ₂	252 (10000)	280 (1000)
CN	224 (13000)	271 (1000)	CH=CH-C ₆ H ₅ (E)	283 (12300)	
COO ⁻	224 (8700)	268 (560)	CH=CH-C ₆ H ₅ (Z)	295,5 (25000)	
COOH	230 (11600)	273 (970)			

Aromatiques Carbonylés: C₆H₅-COR

Base	R=alkyle : 246 nm	R=H : 250 nm	R=OH, OR' : 230 nm
------	-------------------	--------------	--------------------

substituant	<i>ortho</i>	<i>mé</i> ta	<i>para</i>
alkyle	3	3	10
OH ou OR'	7	7	25
O-	11	20	78
Cl	0	0	10
Br	2	2	13
NH ₂	13	13	58
NHCOCH ₃	20	20	45
NR ₂	20	20	85

Règle : base + somme des incréments ortho+ méta+para