

TABLES DE FREQUENCES DE VIBRATION CARACTERISTIQUES EN IR

Groupement	Liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Vibration	Intensité
Alcools et phénols	O-H libre	3650-3590	élongation	variable et fine
Alcools et phénols	O-H assoc.	3400-3200	élongation	forte et large
Acides	O-H assoc.	3300-2500	élongation	forte et très large
Amines primaires	N-H	3500	élongation asymétrique	moyenne
		3410	élongation symétrique	moyenne
Amines secondaires	N-H	3500-3310	élongation	moyenne
≡C-H (alcynes)	C-H	≈ 3300	élongation	moyenne et fine
Aromatiques	C-H	3080-3030	élongation	variable
HC=CH ₂ (vinyl)	C-H	3095-3075	élongation	moyenne
		3040-3010	élongation	moyenne
=CH ₂ (alcènes disubstitués géminés)	C-H	3095-3075	élongation	moyenne
		3040-3010	élongation	moyenne
HC=CH ou C=CH	C-H	3040-3010	élongation	moyenne
-CH ₃ (alcanes)	C-H	≈ 2960	élongation asymétrique	forte
		≈ 2870	élongation symétrique	forte
-CH ₂ - (alcanes)	C-H	≈ 2925	élongation asymétrique	forte
		≈ 2850	élongation symétrique	moyenne à forte
-C-H (aliphatiques)	C-H	2890-2880	élongation	faible
Aldéhydes	C-H	2900-2800	élongation	faible
		2775-2700	élongation	moyenne
Nitriles	C≡N	2260-2210	élongation	moyenne à forte
Alcynes	C≡C	2140-2100	élongation	faible
Aldéhydes aliphatiques	C=O	1740-1720	élongation	forte
Aldéhydes aromatiques	C=O	1715-1690	élongation	forte
Cétones aliphatiques	C=O	1725-1705	élongation	forte

Cétones aromatiques	C=O	1700-1670	élongation	forte
Acides	C=O	1725-1700	élongation	forte
Esters aliphatiques	C=O	1750-1730	élongation	forte
Alcènes	C=C	1675-1645	élongation	moyenne
Aromatiques	C=C	1600 ; 1580 1500 ; 1450	élongation ; 4 bandes	variables
Amines primaires	N-H	1640-1560	déformation cisaillement	forte à moyenne
Amines secondaires	N-H	1580-1490	déformation dans le plan	très faible
Groupement nitro (aliphatique)	C-NO ₂	1570-1550 1380-1370	élongation élongation ; 2 bandes	intense
Groupement nitro (aromatique)	C-NO ₂	1570-1500 1370-1300	élongation élongation ; 2 bandes	intense
-CH ₂ -	C-H	1485-1470	déformation cisaillement	moyenne à forte
-CH ₃ (alcanes)	C-H	1470-1430 1380-1370	déformation asymétrique déformation symétrique	moyenne à forte moyenne à forte
-CH	C-H	≈ 1340	déformation	faible
HC=CH ₂ (vinyls)	C-H	1420-1410	déformation dans le plan	moyenne à forte
C=CH ₂ (alcènes disubstitués gémés)	C-H	1420-1410	déformation dans le plan	moyenne à forte
Amines aliphatiques	C-N	1220-1020	élongation	moyenne
Amines aromatiques	C-N	1360-1180	élongation	moyenne à forte
Esters	C-O	1300-1050	élongation ; 2 bandes	fortes
Acides	C-O	1300-1200	élongation	forte
Alcools tertiaires	C-O	1200-1125	élongation	variable
Alcools secondaires	C-O	1125-1085	élongation	variable
Alcools primaires	C-O	1085-1050	élongation	variable
Ethers	C-O	1150-1020	élongation	forte

Aromatiques	C-H	910-690	déformation hors du plan	variables
Amines primaires	N-H	900-650	déformation torsion	moyenne et large
$(\text{CH}_2)_n ; n \geq 4$	C-H	725-720	déformation balancement (rocking)	moyenne à faible
$\text{HC}=\text{CH}_2$ (vinyls)	C-H	995-985 915-905	déformation hors du plan	fortes
$\text{C}=\text{CH}_2$ (alcènes disubstitués géminés)	C-H	895-885	déformation hors du plan	forte
$-\text{CH}=\text{CH}$	C-H	Cis 730-675 trans 970-960	déformation hors du plan CH déformation hors du plan CH	moyenne forte
$\equiv\text{C}-\text{H}$ (alcynes)	C-H	700-600	déformation hors du plan CH	forte

Première approche d'analyse d'un spectre IR

Un groupe carbonyle est-il présent ?

Les groupes **C=O** donnent une absorption intense dans la région **1820-1600 cm^{-1}** . La bande est souvent la plus **intense** du spectre. Sa largeur est moyenne. **Vous ne pouvez pas la rater.**

a - Si un groupe C=O est présent :

1 - ACIDES (COOH) : si **OH** est aussi présent. La bande **OH** est **très large 3400-2400 cm^{-1}** (elle recouvre les C-H).

2 - AMIDES (O=C-NHR) monosubstituée sur l'azote ou (**O=C-NH₂**) non substituée sur l'azote : vérifiez qu'il y a une ou **2** bandes **N-H** dans la zone **3500 cm^{-1}** (**intensité moyenne à forte**).

3 - ESTERS (O=C-O-R): vérifiez la présence **C-O** (absorption **intense** vers **1000 à 1300 cm^{-1}**).

4 - ANHYDRIDES (O=C-O-C=O) : si **2** absorptions **C=O** vers **1760 et 1810 cm^{-1}** .

5 - ALDÉHYDES (O=C-H) : vérifiez la présence **C-H** aldéhyde : **2** bandes d'**intensité moyenne** vers **2750 et 2850 cm^{-1}** .

6 - CÉTONES (O=C-R) : si les 5 choix précédents sont éliminés.

b - Si un groupe C=O est absent :

1 - ALCOOLS (-C-OH) et **PHÉNOLS** () : recherchez bande **O-H** large dans la zone **3300-3600 cm^{-1}** ; confirmé par la présence d'une bande **C-O** entre **1000 et 1300 cm^{-1}** .

2 - AMINES primaires (**RNH₂**) et secondaires (**RNHR'**) : vérifiez l'absorption **N-H** (**intensité moyenne**) vers **3500 cm^{-1}** .

3 - **ETHERS (C-O-C)** : recherchez la présence de la bande **C-O** (et l'absence **O-H**) vers **1000 à 1300 cm⁻¹**.

4 - **Double liaison et (ou) noyau aromatique**

ALCÈNE : absorption assez faible vers **1650 cm⁻¹**. On confirme l'existence **C=C** en consultant la région des **=C-H** au delà de **3000 cm⁻¹**.

AROMATIQUE : absorptions d'intensité moyenne à forte dans la région **1450 à 1650 cm⁻¹**. On confirme l'existence **C=C** en consultant la région des **=C-H** au delà de **3000 cm⁻¹**.

5 - **Triple liaison**

NITRILES (C≡N) : absorption d'intensité moyenne, pic très fin vers **2250 cm⁻¹**.

ALCYNES (-C≡C-) : absorption fine d'intensité faible vers **2150 cm⁻¹**. Pour alcynes vraies, recherchez aussi si **C-H** est présent vers **3300 cm⁻¹** : bande assez intense et assez fine.

6 - **Fonction "NITRO"** : **NO₂** présente 2 bandes fortes vers **1500 à 1600 cm⁻¹** et **1300 à 1390 cm⁻¹**.

7 - **Hydrocarbures saturés**

Si aucune des informations ci-dessus n'a été observée.

Si les absorptions principales sont situées dans la région des **C-H** en dessous de **3000 cm⁻¹**.

Si le spectre est très simple, seulement des absorptions vers **1450, 1375** et peut-être **720 cm⁻¹**.