

PRINCIPAUX DOMAINES D'ABSORPTION DES GROUPES FONCTIONNELS

| Régions | Groupes | Domaines d'absorption en cm^{-1} | Intensités |
|------------------------------|---|---|--|
| 4000 à 2000 cm^{-1} | O-H libre O-H associé N-H $\equiv\text{C}-\text{H}$ (acétylénique) $=\text{C}-\text{H}$ (éthylénique) C-H C≡N | 3650-3590 3570-3200 3500-3200 3310-3200 ≈ 3030 2926-2850 2260-2215 | variable intense moyenne intense moyenne intense variable |
| 2000 à 1500 cm^{-1} | Aldéhydes R-CO-R Cyclohexanone Cyclopentanone Cyclobutanone Ar-CO-R Ar-CO-Ar Acides Esters Anhydrides Halogénures d'acyles Amides Alcènes NO ₂ | 1740-1680 1725-1705 1725-1705 1750-1740 ≈ 1775 1700-1680 1670-1660 1725-1690 1750-1717 1860-1800 et 1800-1750 1815-1770 1680-1620 1700-1630 1560-1500 | intense intense intense intense intense intense intense intense intense intense intense intense intense intense intense variable intense |
| 1500 à 900 cm^{-1} | C-H (déformation de C-CH ₃) C-H (déformation de C-CH ₂) | 1470-1430 et 1380-1370 1485-1445 | moyenne moyenne moyenne |
| 900 à 666 cm^{-1} | R-CH=CH-R' (Z) $\begin{array}{c} > \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{C}=\text{CH}_2 \end{array}$ Noyaux aromatiques : ▪ monosubstitués ▪ disubstitués : • <i>ortho</i> • <i>méta</i> • <i>para</i> | ≈ 690 885-855 770-730 et 710-690 770-735 810-750 et 900-860 860-800 | variable intense intense intense intense intense intense intense |

TABLES DES PRINCIPALES VIBRATIONS INFRA-ROUGE

ALCANES

| Vibrations de valence C — H | | | |
|--|--|---|--|
| — CH ₄ | 2975-2950 2883-2860 2940-2915 2870-2845 — CH ₂ — (cyclopropane) | 3,36-3,39 3,47-3,50 3,40-3,45 3,49-3,52 3,25-3,29 | m m m m ▼ |
| — CH ₂ — OCH _n , NCH _n , etc. | 3080-3040 2900-2880 | 3,45-3,47 | f a.v.l. voir éthers, amines, etc. |

| Vibrations de déformation C — H | | | |
|---|------------------------|------------------------|--------------------------------------|
| C — CH ₄ | 1470-1435 1385-1370 | 6,80-6,97 7,22-7,30 | m f def. asym. def. sym. |
| C (CH ₃) ₂ | 1385-1380 | 7,22-7,25 | f me int. |
| C (CH ₃) ₃ | 1370-1365 | 7,30-7,33 | f doublet, rapport d'int. |
| C (CH ₃) ₂ — CH ₂ — | 1395-1385 | 7,17-7,22 | m doublet, rapport d'int. |
| — CH ₂ — CH — | 1165 | 7,33 | f env. 1/2 envion 1/2 |
| — CH ₂ — | 1480-1440 | 6,76-6,94 | m ciseautement de CH ₂ |
| — CH ₂ — | env. 1340 | env. 7,46 | f a.v.l. |

| Vibrations du squelette | | | |
|-------------------------------------|-----------|-------------|-------------|
| C (CH ₃) ₂ | 1175-1165 | 8,51-8,58 | f |
| C (CH ₃) ₂ | 1170-1140 | 8,55-8,77 | f |
| C (CH ₃) ₃ | 840-790 | 11,90-12,66 | m a.v.l. |
| — (CH ₂) ₄ — | 1235-1245 | 7,97-8,03 | f |
| — CH ₃ — (cyclopropane) | 1250-1200 | 8,00-8,33 | m a.v.l. |
| | 750-720 | 13,33-13,89 | f |
| | 1020-1060 | 9,80-10,00 | m a.v.l. |

ALCYNES ET ALLÈNES

| Alcynes | | | |
|------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|---|
| RC ≡ CH | 3310-3300 2140-2100 2260-2190 | 3,02-3,03 4,67-4,76 4,43-4,57 | m f v val. C — H val. C ≡ C val. C ≡ C |
| R ₁ C ≡ CR ₂ | | | |
| RC ≡ CH | 1970-1950 env. 1060 | 5,08-5,13 env. 9,43 | m m type val. C ≡ C type val. C — C |
| R ₁ C ≡ CR ₂ | | | |

Allènes

| f : faible | | | |
|--------------|--|--|--|
| m : moyen | | | |
| F : fort | | | |
| V : variable | | | |
| ALCÈNES | | | |

| Vibrations de valence C = C | | | |
|---|-----------|-----------|---|
| C = C non conj. | 1680-1620 | 5,95-6,17 | v |
| CHR ₁ = CH ₂ | 1615-1640 | 6,08-6,10 | v |
| CHR ₁ = CHR ₂ (cis) | 1665-1635 | 6,01-6,12 | v |
| CHR ₁ = CHR ₂ (trans) | 1675-1665 | 5,97-6,00 | v |
| CR ₁ R ₂ = CH ₂ | 1660-1640 | 6,02-6,10 | v |
| CR ₁ R ₂ = CHR ₃ | 1675-1665 | 5,97-6,00 | v |
| CR ₁ R ₂ = CR ₂ R ₃ | 1690-1670 | 5,92-5,99 | v |
| C = O ou C = C phényle conj. | env. 1625 | 6,16 | F int. aug. |
| C = C conj. | 1660-1580 | 6,02-6,33 | F plus forte que celle de forme <i>trans</i> |

| Vibrations de valence et de déformation C — H | | | |
|---|-----------|-------------|--|
| CHR ₁ = CH ₂ | 3040-3010 | 3,29-3,32 | m val. CH (CH ₃) |
| CHR ₁ = CHR ₂ (cis) | 3093-3075 | 3,23-3,25 | m val. CH (CH ₃) ² |
| CHR ₁ = CHR ₂ (trans) | 995-985 | 10,05-10,15 | m def. c.d.p. CH ₂ |
| CHR ₁ = CHR ₂ | 915-905 | 10,93-11,05 | F def. c.d.p. CH ₂ harmonique |
| CR ₁ R ₂ = CH ₂ | 1850-1800 | 5,41-5,56 | m det. d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CHR ₃ | 1420-1410 | 7,04-7,09 | F det. d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₂ R ₃ | 1300-1290 | 7,69-7,75 | v det. d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 3040-3010 | 3,29-3,32 | m val. CH |
| CR ₁ R ₂ = CR ₂ R ₃ | 1420-1400 | 7,04-7,14 | m def. d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 720-665 | 13,70-15,04 | F det. c.d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ (cis) | 980-960 | 10,20-10,42 | F def. c.d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ (trans) | 1310-1290 | 7,63-7,75 | F def. c.d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 3095-3075 | 3,23-3,25 | m val. CH |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 895-885 | 11,17-11,30 | F det. c.d.p. |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 1800-1780 | 5,26-5,62 | m harmonique |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 1420-1410 | 7,04-7,09 | m det. d.p. CH ₂ |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 3010-3010 | 3,29-3,32 | m val. CH |
| CR ₁ R ₂ = CR ₃ R ₄ | 850-790 | 11,76-11,66 | m det. c.d.p. CH ₂ |

COMPOSÉS HOMOCYCLIQUES AROMATIQUES

Harmoniques et bandes de combinaisons caractéristiques des substitutions sur le noyau benzénique

| Vibrations de valence | |
|------------------------|------------------------|
| val. = C—H | vib. d.p. C = C |
| 3080-3030 1625-1575 | 3,25-3,30 6,16-6,35 |
| 1525-1475 | 6,36-6,78 |
| 1590-1575 1465-1440 | 6,29-6,36 6,38-6,94 |

Deformations C—H dans le plan et substitutions sur le noyau benzénique

| monosubstitution | 1173-1123 1110-1070 1070-1000 1225-1175 1125-1090 1070-1000 1000-960 1175-1125 1110-1070 1070-1000 1225-1175 1125-1090 1125-1090 1070-1000 | 8,51- 8,89 9,01- 9,35 9,35-10,00 8,51- 8,89 9,01- 9,33 9,35-10,00 8,17- 8,51 8,89- 9,17 9,35-10,00 8,51- 8,89 9,01- 9,35 9,35-10,00 8,89- 9,17 9,35-10,00 8,51- 8,89 | pluriel nrs possibles généralement proche de 1600 cm ⁻¹ généralement proche de 1500 cm ⁻¹ forte bande pour les cycles conj. | 1,0 m v v | 1657 cm ⁻¹ Mono- O- |
|--------------------------|--|--|---|------------------|--------------------------------------|
| disubstitution en 1:2 | | | | m | |
| disubstitution en 1:3 | | | | m | |
| disubstitution en 1:4 | | | | p- | |
| trisubstitution en 1:2:3 | 1173-1123 1110-1070 1070-1000 1225-1175 1125-1125 1125-1090 1070-1000 1000-960 1225-1175 1173-1125 1125-1090 1125-1090 1070-1000 1000-960 1173-1125 1070-1000 | 8,51- 8,89 9,01- 9,35 9,35-10,00 8,17- 8,51 8,89- 9,17 9,35-10,00 8,51- 8,89 9,01- 9,35 9,35-10,00 8,51- 8,89 9,01- 9,35 9,35-10,00 8,89- 9,17 9,35-10,00 8,51- 8,89 9,35-10,00 | 2 bandes dans cet inter- valle | 1,3,5- 1,2,3- | |
| trisubstitution en 1:2:4 | | | | | |
| trisubstitution en 1:3:5 | | | | | |

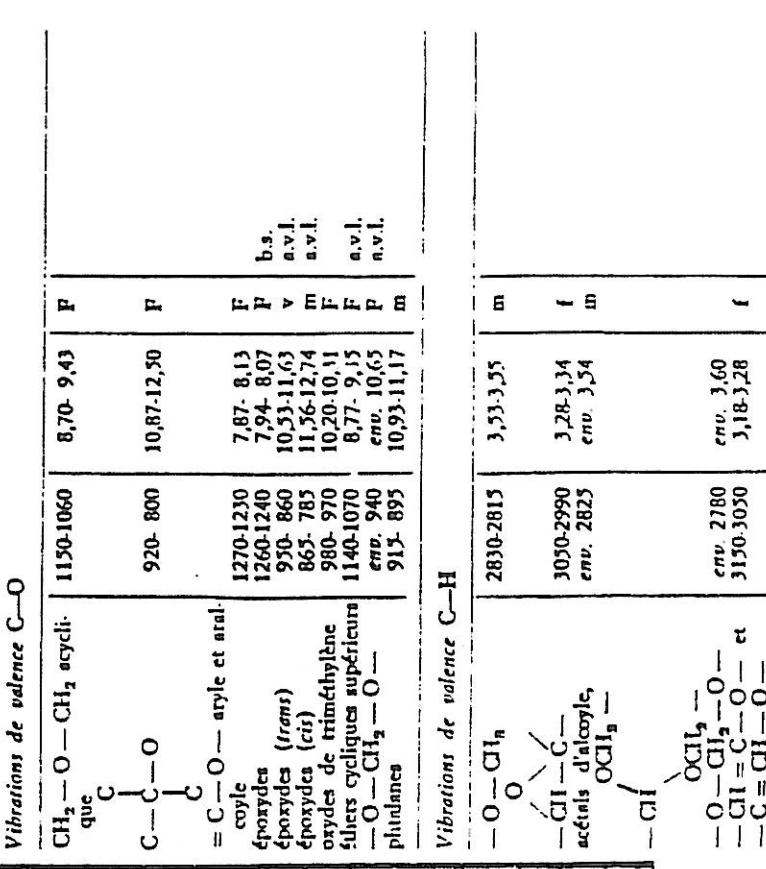
Deformations C—H en dehors du plan et substitutions sur le noyau benzénique

| monosubstitution | 770-730 710-690 | 12,99-13,70 14,08-14,49 | F F | 3 atomes II all. libres | Penfor- |
|---|-------------------------------|---|-------------|-------------------------|--|
| disubstitution en 1:2 | 770-735 | 12,99-13,61 | F m | 1 atome II libre | —O—CII ₂ |
| disubstitution en 1:3 | 900-860 810-750 725-680 | 11,11-11,63 12,35-13,33 13,74-14,71 | m F m | 3 atomes II all. libres | O |
| substitution en 1:4 et en 1:2:3:4 | 860-800 | 11,63-12,50 | F 2 | a.v.l.; 3 2 | —CH ₂ —C— |
| trisubstitution en 1:2:3 | 800-770 720-685 | 12,50-12,99 13,89-14,60 | F m | 1 atome II libre | acétals d'alcyle, OCII ₂ — |
| trisubstitution en 1:2:4 | 860-800 900-860 | 11,63-12,50 11,11-11,63 | F m | 1 atome II libre | —Cl |
| trisubstitution en 1:3:5 | 900-860 865-810 730-675 | 11,11-11,63 13,70-14,81 11,11-11,63 | m F m | 1 atome II libre | OCII ₂ — —O—CII ₂ —O— —C=CH—O— |
| substitutions 1:2:1:5, 1:2:4:5 et 1:2:2:4:5 | 900-860 | | | | —Cl |

Dans la région 5-6 μ (de 2 000 à 1 670 cm⁻¹), on trouve des harmoniques ou des bandes de combinaison. Leur nombre et leur position relative dépend du type de substitution du noyau benzénique. La représentation graphique en est donnée par la figure 3-32. Comme elles sont de faible intensité on doit opérer en solution concentrée pour les observer.

Convenablement étudiées et en absence d'autre absorption gênante comme par exemple celle d'un groupement carbonylique, elles donnent le meilleur diagnostic sur le type de substitution en présence.

ETHERS



ALCOOLS ET PHÉNOLES

Vibrations de valence O — H

| | | | | |
|---|-----------|------------|---|--|
| OH libres | 3670-3580 | 2,73-2,79 | v | bande fine |
| OH liés : liaison H | | | | |
| (a) intermoléculaire association en dimères | 3550-3450 | 2,82-2,90 | v | bande fine |
| association en polymé- res | 3400-3230 | 2,94-3,10 | F | changements d'int. et déplacements de fréquence par dilution |
| (b) intramoléculaire | 3590-3420 | 2,79-2,92 | v | bande fine |
| (c) chelates | 3200-1700 | 3,13-3,88 | f | pas de changements par dilution |
| tropolones | env. 3100 | env. 3,23 | | |
| —OD | 2780-2400 | 3,60-4,17 | v | val. O — D |
| <i>Valence C — O et déformations O — H dans le plan</i> | | | | |
| alcools primaires | 1075-1090 | 9,30-10,00 | F | a.v.l. |
| | 1350-1260 | 7,40-7,94 | F | a.v.l. |
| alcools secondaires | 1120-1030 | 8,93-9,71 | F | a.v.l. |
| | 1350-1260 | 7,41-7,94 | F | a.v.l. |
| alcools tertiaires | 1170-1100 | 8,25-9,09 | F | a.v.l. |
| | 1410-1310 | 7,09-7,63 | F | a.v.l. |
| phénols | 1230-1140 | 8,13-8,77 | F | a.v.l. |
| | 1410-1310 | 7,09-7,63 | F | a.v.l. |

| Vibrations de valence C — O | | Vibrations de valence C = O | |
|---|-----------|------------------------------------|--------|
| anhydrides cycliques | 1310-1210 | 7,63-8,21 | F |
| * acycliques | 1175-1045 | 8,31-9,57 | F |
| <i>Vibrations de valence C = O</i> | | <i>Vibrations de valence C = O</i> | |
| anhydrides à cycle — 3 | 1870-1830 | 5,35-5,46 | F |
| | 1800-1760 | 5,36-5,68 | F |
| anhydrides conj. à cycle — 3 | 1850-1810 | 5,41-5,51 | F |
| anhydrides acycliques | 1795-1740 | 5,57-5,73 | F |
| | 1840-1800 | 5,44-5,56 | F |
| anhydrides acycliques conj. | 1780-1740 | 5,62-5,73 | F |
| <i>Vibration — O — O —</i> | | <i>Vibration — O — O —</i> | |
| peroxydes d'acylés, (R — CO — O —) ₂ | 1820-1780 | 5,68-5,81 | F |
| peroxydes d'aroylés, (R — CO — O —) ₂ | 1800-1780 | 5,50-5,53 | F |
| halogénures d'acides | 1785-1755 | 5,60-5,70 | F |
| halogénures d'acides conj. | 1815-1785 | 5,51-5,60 | F |
| | 1800-1770 | 5,56-5,65 | F |
| peroxydes | 890-830 | 11,24-12,03 | f |
| | | | a.v.l. |

CÉTONES

Vibrations de valence C = O

| | | | |
|--|-----------|-----------|---|
| $\text{—CH}_3\text{—CO—CH}_3\text{—}$ | 1725-1700 | 5,00-5,28 | P |
| acrylique | | | |
| Id. acrylique a; b non sat. de cétone à cycle — 6 | 1693-1660 | 5,90-6,02 | P |
| détones conj. en croix | 1670-1660 | 5,99-6,02 | P |
| quinones : | | | |
| 2 CO dans le même cycle | 1690-1655 | 5,92-6,04 | P |
| 2 CO dans 2 cycles | 1655-1635 | 6,04-6,12 | P |
| cétone à cycle — 4 | 1780-1760 | 5,62-5,68 | P |
| cétone à cycle — 5 | 1750-1740 | 5,71-5,75 | P |
| cétone à cycle — 6 | 1720-1700 | 5,81-5,88 | P |
| cétone à cycle — 7 | 1715-1700 | 5,83-5,88 | P |
| cétone halogénées | | | |
| en a; b | | | |
| cétone d'aryle | 1700-1680 | 5,88-5,95 | P |
| cétone de diaryle | 1670-1660 | 5,99-6,02 | P |
| —CO—CO— | 1730-1710 | 5,78-5,85 | P |
| —CO—CH ₃ —CO— | | | |
| (enérique) | 1640-1535 | 6,10-6,32 | P |
| —CO—C = C—OH | 1640-1535 | 6,10-6,32 | P |
| (ou NH ₂) | 1640-1535 | 6,10-6,32 | P |
| ortho, | | | |
| —CO—C ₆ H ₄ —OH | 1655-1610 | 6,04-6,21 | P |
| (ou NH ₂) | 1655-1610 | 6,04-6,21 | P |
| —CO—CH ₃ — | | | |
| CH ₃ —CO— | 1725-1705 | 5,80-5,87 | P |
| —CO—O— | | | |
| CH ₃ —CO— | 1745-1725 | 5,71-5,80 | P |
| tropolones | 1620-1600 | 6,17-6,25 | P |

Autres vibrations

| | | | | |
|----------------------------------|---|---|---|--|
| $\text{CH}_3\text{—CO—}$ | 1360-1355 | 7,35-7,38 | P | def. CH ₃ def. CH ₂ |
| —CH ₃ —CO— | 1435-1405 | 6,97-7,12 | P | a.v.i. |
| cétone d'acyle | 1325-1215 | 7,55-8,23 | m | a.v.i. |
| cétone d'aryle | 1225-1075 | 8,17-9,30 | m | a.v.i. |
| C = O | 3550-3200 | 2,82-3,13 | f | harmoniques val. C = O |
| | | | | |
| substituent en a | displacement de fréquence (cm ⁻¹) | displacement de longueur d'onde (Å) | | displacement de longueur d'onde (Å) |
| a; b man. sort. cycle propyle | + 30 | + 0,11 | | a.v.i. |
| halogène en a | + 20 | + 0,07 | | Dans les cétones cycliques seul l'halogène équatorial entraîne un déplacement. |
| halogènes en a; a' | + 40 | + 0,07 | | |
| halogènes en a; a' | + 20 | + 0,13 | | |
| | | + 0,07 | | |

* Pour l'influence de l'état physique et du milieu sur la fréquence des bandes extorques,
(voir première partie, p. 37).

** Pour les cétones substituées en a, à l'exception de celles portant une liaison H,
on observe des déplacements des fréquences de valence C = O, comme suit :

ALDÉHYDES

Vibrations de valence C = O

| | | | | |
|--------------------------|-----------|------------|---|--|
| aldehydes aliphatiques | 1740-1720 | 1,73-5,81 | P | |
| sat. | 1705-1655 | 2,78-3,93 | P | |
| aldehydes polyènes conj. | 1680-1650 | 2,95-4,02 | F | |
| aldehydes d'aryle | 1715-1693 | 2,83-3,90 | P | |
| —C(OH) = C(OH) | 1670-1645 | 2,92-6,08 | P | |
| | | | liaison H latérales | |
| | | | orientales | |
| | | | | |
| | | | Vibrations de valence et de déformation C — H | |
| | | | | |
| CHO | 2880-2650 | 3,47-3,77 | f m | val. C — H |
| | 973-780 | 10,2-12,82 | f | 2 bandes possibles a.v.i.; d.d. C — H |
| | | | | |
| | | | | Autres vibrations |
| | | | | |
| aldehydes aliphatiques | 1440-1323 | 6,94-7,55 | m | a.v.i. |
| aldehydes d'aryle | 1415-1390 | 7,07-7,11 | m | a.v.i. |
| | 1320-1280 | 7,58-7,74 | m | a.v.i. |
| | 1290-1160 | 8,13-8,62 | m | a.v.i. |

ESTERS ET LACTONES *

Vibrations de valence C = O

ACIDES CARBOXYLIQUES

| | | | | | |
|-------------------------|---|-----------------------------------|---------------------------------------|-------------|--|
| Vibrations O — H | OH libres OH liés OH (libres et liés) | 3550-3500 3300-2500 955-890 | 2,82-2,86 3,00-4,00 10,47-11,24 | m f v | val. O — H val. O — H, bande large déf. e.d.p. |
|-------------------------|---|-----------------------------------|---------------------------------------|-------------|--|

Vibrations de valence C = O

| | | | | |
|--------------------------------------|-----------|-----------|---|---|
| Acides alphatiques sat. | 1725-1700 | 5,80-5,88 | F | étude sous forme de dimères en ph. sol. et en ph. liqu. |
| acides α:β non sat. | 1715-1680 | 5,88-5,95 | F | |
| acides d'axyle | 1700-1680 | 5,88-5,95 | F | |
| acides à liaison II intramoléculaire | 1680-1620 | 5,95-6,06 | F | |

Autres vibrations

| | | | | |
|--|-------------------------------------|-------------------------------------|--------|---|
| acides gras solides | 1350-1180 | 7,40-8,48 | f | vib. CII ₂ , types de bandes caractéristiques bande de combinaison de val. C—O et de déf. de OII d.p. |
| CO ₂ H | 1440-1395 | 6,94-7,17 | f | |
| ion carboxylate CO ₂ ⁻ | 1320-1210 1610-1550 1420-1300 | 7,58-8,26 6,21-6,45 7,04-7,69 | F m | |

* Pour les esters α-substitués et les lactones, à l'exception de ceux présentant des liaisons H, on observe des déplacements de la fréquence de valence C = O, dont les valeurs approximatives sont indiquées dans le tableau suivant :

| double liaison α:β halogénée en α α halogénées en α α | déplacement de fréquence (cm ⁻¹) | déplacement de longueur d'onde (μ) | 2 bandes pour les spectres de sol. |
|---|--|------------------------------------|------------------------------------|
| | -20 + 20 | + 0,07 - 0,07 | |

AMIDES

Vibrations de valence NH

| | | | | |
|---------------------------------|-----------|-----------|---|--|
| amides primaires : | | | | |
| NH libres | 3590-3480 | 2,83-2,88 | F | |
| NH liés | 3420-3180 | 2,92-2,96 | F | |
| | 3360-3120 | 2,97-3,01 | m | |
| | 3220-3180 | 3,11-3,15 | m | |
| amides secondaires : | | | | |
| NH libres (<i>cis</i>) | 3440-3420 | 2,91-2,93 | F | |
| NH libres (<i>trans</i>) | 3460-3440 | 2,89-2,91 | F | |
| NH liés (<i>cis et trans</i>) | 3100-3070 | 3,23-3,26 | f | |
| NH liés (<i>cis</i>) | 3180-3140 | 3,15-3,19 | m | |
| NH liés (<i>trans</i>) | 3330-3270 | 3,00-3,06 | m | |

Vibrations de déformation de NH

| | | | |
|--|------------------|------------------|--|
| amides secondaires à liaison H—N | env. 700 | env. 14,3 | déf. c.d.p., int. décroissant avec la dilution. |
| Hanche amide V. | | | |
| Vibrations de valence C = O (Bande amide-I) | | | |
| amides primaires | env. 1620 | env. 5,92 | F |
| | env. 1650 | env. 6,06 | spec. soln. dil. |
| amides secondaires | 1700-1665 | 5,88-6,01 | f |
| | 1680-1630 | 5,95-6,14 | spec. soln. dil. |
| amides tertiaires | 1670-1630 | 5,99-6,14 | F |
| β-lactames simples | 1760-1730 | 5,68-5,78 | spec. soln. dil. ou ph. so. |
| β-lactames à noyau con- | 1780-1770 | 5,62-5,65 | F |
| dense | env. 1700 | env. 5,88 | a.v.l. |
| γ-lactames à noyau con- | 1750-1700 | 5,71-5,88 | F |
| dense | | | |
| lactames cycliques à plus | | | |
| grand noyau | | | |
| urées, | | | |
| —NH—CO—NH— | env. 1660 | env. 6,02 | F |
| —CO—NH—CO— | 1790-1720 | 5,59-5,81 | F |
| uréthanes | 1710-1670 | 5,85-5,99 | F |
| carbamates | 1735-1700 | 5,76-5,88 | F |
| | 1710-1690 | 5,85-5,92 | F |
| a.v.l., combinaison d.p., Amide III | | | |

Bandes de combinaison des vibrations de déformation NH et de valence C—N

| | | | | |
|--------------------------------------|------------------|--------------------|---|--|
| amides primaires | 1670-1620 | 6,05-6,17 | F | spec. ph. so. |
| amides acycliques secondaires | 1620-1590 | 6,17-6,31 | F | spec. soln. dil. / |
| | 1570-1515 | 6,37-6,60 | F | spec. ph. so. |
| | 1520-1510 | 6,45-6,62 | f | spec. soln. dil. \ |
| amides secondaires | 1305-1200 | 7,67-8,33 | m | a.v.l., combinaison d.p., Amide III |
| Autres vibrations | | | | |
| amides primaires | 1420-1400 | 7,04-7,14 | m | a.v.l. |
| amides secondaires | 770-620 | 13,00-16,13 | m | bande amide IV |
| | 630-530 | 15,87-18,87 | F | a.v.l., bande amide VI |

AMINES ET IMINES

Vibrations de valence N—H

| | | | | |
|---------------------------|--|--|------------------|------------------|
| amines primaires | | | 3500-3390 | 2,86-3,03 |
| amines secondaires | | | 3500-3380 | 2,86-3,01 |
| imines | | | 3400-3390 | 2,94-3,03 |
| N—H associés | | | 3400-3100 | 2,94-3,23 |
| N—D libres | | | 2600-2400 | 3,85-4,15 |

Vibrations de valence N—H

| | | | |
|---------------------------|--|------------------|------------------|
| amines primaires | | 1650-1580 | 6,06-6,33 |
| amines secondaires | | 1650-1550 | 6,06-6,45 |
| | | | a.v.l. |

Vibrations de valence C—N

| | | | |
|-----------------------------|--|------------------|------------------|
| amines aliphatiques | | 1220-1020 | 8,20-9,80 |
| amines aromatiques : | | 1340-1250 | 7,46-8,00 |
| primaires | | 1350-1280 | 7,41-7,81 |
| secondaires | | 1360-1310 | 7,35-7,63 |
| tertiaries | | | |

Autres vibrations

| | | | |
|--------------------|--|------------------|------------------|
| N méthyle : | | 2820-2760 | 3,55-3,62 |
| | | | |

COMPOSÉS AZOTÉS NON SATURÉS,
NON AROMATIQUES

COMPOSÉS ORGANIQUES DIS HALOGÉNÉS

| | | | |
|---|-------------|-----------------------|---------------|
| <i>Vibrations de valence C = N</i> | | | |
| C = N acyclique | 1690-1635 | 5,92-6,12 | v |
| C = N cyclique $\alpha:\beta$ non sat. | 1665-1630 | 6,01-6,14 | v |
| C = N cyclique $\alpha:\beta$ non sat. | 1660-1480 | 6,02-6,76 | v |
| <i>Vibrations de valence A = B = N type allénique</i> | | | |
| N = C = N | 2155-2130 | 4,64-4,70 | TF |
| N = C = O | 2275-2240 | 4,40-4,46 | TF |
| (R - C = N = N) + | 2250-2260 | 4,39-4,43 | F |
| - N = N = N | 2160-2120 | 4,63-4,72 | F |
| | 1350-1180 | 7,41-8,48 | f |
| <i>Vibrations de valence C \equiv N</i> | | | |
| nitriles sat. | 2260-2240 | 4,43-4,46 | f-m |
| nitrilesacycliques $\alpha:\beta$ non sat. | 2235-2215 | 4,47-4,52 | f |
| nitriles d'aryle | 2240-2220 | 4,46-4,51 | m-f |
| isomitriles | 2185-2120 | 4,58-4,72 | n.v.l. |
| nitriles d'aryle | env. 2145 | 4,66 | a.v.l. |
| <i>Vibrations de valence N = N</i> | | | |
| nitro-composés variés | 1630-1575 | 6,14-6,35 | v |
| <i>Vibrations de valence C — X</i> | | | |
| C — F, composés monofluorés | 1110-1000 | 9,01-10,00 | F |
| C — F, composés difluorés | 1250-1050 | 8,00-9,50 | TF |
| C — F, composés polyfluorés | 1400-1100 | 7,14-9,10 | TF |
| CF _n — CF ₂ | 1365-1325 | 7,33-7,55 | F |
| C — Cl, composés monochlorés | 13,33-14,3 | spec. soln. seulement | |
| C — Cl équatorial | env. 650 | env. 15,4 | F |
| C — Cl axial | 780-750 | 12,80-13,33 | F |
| C — Cl, composés polychlorés | 13,70-17,25 | F | |
| C — Br | 800-700 | 12,50-14,30 | TF, F, a.v.l. |
| C — Br équatorial | env. 620 | env. 15,4 | F |
| C — Br axial | env. 560 | env. 17,85 | F |
| C — I | 750-700 | 13,33-14,29 | F |
| | 690-550 | 14,50-18,20 | F |
| | 600-500 | 16,67-20,00 | F |
| <i>Vibrations de déformation C — X</i> | | | |
| CF _n atyle | 1330-1310 | 7,52-7,62 | diff. sym. |
| | 1185-1170 | 8,44-8,55 | diff. asym. |
| CF _n — CF ₂ | 1150-1130 | 8,70-8,85 | diff. asym. |
| | 745-730 | 13,42-13,70 | F |

**COMPOSÉS COVALENTS CONTENANT
DES LIAISONS AZOTE-OXYGÈNE**

**COMPOSÉS COVALENTS CONTENANT
DES LIAISONS AZOTE-OXYGÈNE (Suite)**

Oximes (R.C = NOH)

| | | | | |
|---|--|---|-----------------------|--|
| — NOH | 3650-3500 | 2,74-2,86 | v | val. O—H |
| <i>Vibrations de NO₂, etc. - Nitro-composés (R.NO₂)</i> | | | | |
| nitro composés d'alkyle | 920-830 | 10,88-12,03 | m-f | vib. C—N, a.v.l. |
| groupes nitros primaires et secondaires | 1565-1545 1885-1360 1380 | 6,39-6,47 7,22-7,35 7,25 | f f m | val. NO ₂ asym. val. NO ₂ sym. déf. CH ₂ dans —CH ₂ —NO ₂ |
| groupes nitros tertiaries | 1515-1530 1360-1340 | 6,47-6,54 7,35-7,46 | f f | val. NO ₂ asym. val. NO ₂ sym. |
| groupes nitros α:β non ass. | 1510-1510 | 6,54-6,62 | f | val. NO ₂ asym. |
| groupes nitros α:β halogénés | 1362-1335 1380-1570 | 7,35-7,49 6,33-6,37 | f f | val. NO ₂ sym. val. NO ₂ asym. |
| groupes nitros α:α dihydrologénés | 1360-1575 | 7,38-7,46 | f | val. NO ₂ sym. |
| groupes nitros aromatiques | 1340-1325 1510-1510 1365-1335 860-840 env. 750 | 6,25-6,35 7,46-7,55 6,45-6,62 7,33-7,49 11,63-11,90 env. 13,33 | f f f f f | val. NO ₂ asym. val. NO ₂ sym. val. NO ₂ asym. val. NO ₂ sym. vib. C—N, a.v.l. b.s., a.v.l. |

Vibrations de NO₂ - Nitrates courants (R.ONO₂)

| | | | | |
|--|------------------------|--------------------------|--------|--|
| NO ₂ | 1655-1610 1300-1255 | 6,04-6,21 7,69-7,97 | P | val. NO ₂ asym. val. NO ₂ sym. |
| <i>Vibrations de NO₂ - Nitramines (R.NNO₂)</i> | | | | |
| nitramines sat. | 1585-1530 | 6,31-6,54 | P | val. NO ₂ asym. |
| nitroguanidines d'alkyle | 1640-1605 1590-1575 | 6,10-6,23 6,29-6,35 | P f | val. NO ₂ asym. val. NO ₂ asym. |
| et nitroureas | 1300-1260 790-770 | 7,69-7,94 12,66-12,99 | f m | val. NO ₂ sym. a.v.l. |

Vibrations de NO - Nitrates d'amine (R.CN → O)

| | | | | |
|--|---|---|-----|--|
| N—N = O | 1500-1480 1460-1440 env. 1030 env. 660 | 6,67-6,76 6,85-6,94 env. 9,52 env. 15,15 | P | val. N = O, spec. ph. vap. val. N = O, spec. soln. val. N—N, a.v.l. def. N—N = O, a.v.l. |
| <i>Vibrations de NO - Oxydes d'amine</i> | | | | |
| N—oxydes de pyridine et pyrimidine | 1300-1250 | 7,69-8,00 | m-f | val. N—O, fréquence variant fortement sur le cycle |
| N—oxydes tert. aliphatisques | 970-950 | 10,31-10,33 | F | val. N—O, a.v.l. |
| N—oxydes nitriles d'alphaïde | env. 1370 | env. 7,30 | F | val. N—O, a.v.l. |

| | | | | |
|--|-----------|-----------|-----|---|
| Vibrations de NO - Azoxy-compounds (R.N.N → O) | 1310-1250 | 7,63-8,00 | m-p | val. N—O, a.v.l. |
| Groupes nitroso atomiques | env. 1500 | 6,67 | P | val. N = O, spec. ph. vap. val. N = O |
| groupes nitroso aliphatiques | env. 1550 | 6,45 | P | val. N = O |
| groupes nitroso aliphatico-halogénés | 1620-1560 | 6,17-6,41 | P | spec. ph. vap. ou soln. |

Table des principaux ions observés en Masse

| m/e | Ions | m/e | Ions |
|-----|--|-----|---|
| 14 | CH ₂ | 72 | CH ₂ COC ₂ H ₅ , C ₄ H ₁₀ N isomers, (CH ₃) ₂ NCO |
| 15 | CH ₃ | 73 | Homologs (+CH ₂ units) of 59 |
| 16 | O | 74 | CH ₂ CO ₂ CH ₃ +H |
| 17 | OH | 75 | C ₂ H ₅ OCO+2H, CH ₂ SC ₂ H ₅ , CH(OCH ₃) ₂ , (CH ₃) ₂ CSH |
| 18 | H ₂ O, NH ₄ | 77 | C ₆ H ₅ |
| 19 | F, H ₃ O | 78 | C ₆ H ₅ +H |
| 26 | CN, C ₂ H ₂ | 79 | C ₆ H ₅ +2H, Br |
| 27 | C ₂ H ₃ | 80 | Pyrrolyl-2-CH ₂ |
| 28 | CO, N ₂ , C ₂ H ₄ , CHNH | 81 | Furanyl-2-CH ₂ , C ₆ H ₉ |
| 29 | C ₂ H ₅ , CHO | 82 | CCl ₂ , C ₆ H ₁₀ , (CH ₂) ₄ CN |
| 30 | NO, CH ₂ NH ₂ | 83 | C ₆ H ₁₁ , CHCl ₂ , thiophenyl |
| 31 | CH ₃ O, CH ₂ OH | 85 | C ₆ H ₁₃ , C ₄ H ₉ CO, CClF ₂ |
| 32 | O ₂ | 86 | C ₃ H ₇ COCH ₂ +H, C ₅ H ₁₂ N isomers |
| 33 | SH, CH ₂ F | 87 | C ₃ H ₇ CO ₂ , homologs of 73, CH ₃ OCOCH ₂ CH ₂ |
| 34 | H ₂ S | 88 | H+CH ₂ CO ₂ C ₂ H ₅ |
| 35 | Cl | 89 | C ₃ H ₇ OCO+2H, C ₆ H ₅ C |
| 36 | HCl | 90 | C ₆ H ₅ CH |
| 39 | C ₃ H ₃ | 91 | C ₆ H ₅ CH ₂ (C ₇ H ₇), C ₆ H ₅ N, (CH ₂) ₄ Cl |
| 40 | CH ₂ CN, Ar | 92 | C ₅ H ₄ NCH ₂ (pyridinyl CH ₂) |
| 41 | C ₃ H ₅ , C ₂ H ₂ NH, CH ₂ CN+H | 93 | CH ₂ Br, C ₆ H ₅ O (or C ₆ H ₄ OH), C ₇ H ₉ |
| 42 | C ₃ H ₆ | 94 | 2-Pyrroloyl (C ₄ H ₄ NCO), C ₆ H ₅ O+H |
| 43 | CH ₃ CO, C ₂ H ₅ N, C ₃ H ₇ | 95 | 2-Furanoyl (C ₄ H ₃ OCO) |
| 44 | CH ₂ CHO+H, CO ₂ , CH ₃ CHNH ₂ , NH ₂ CO, (CH ₃) ₂ N | 96 | (CH ₂) ₅ CN |
| 45 | CH ₃ CHOH, CH ₂ CH ₂ OH, CH ₂ OCH ₃ , CO ₂ H | 97 | C ₇ H ₁₃ , C ₄ H ₃ S-CH ₂ (thiophenyl- 2-CH ₂) |
| 46 | NO ₂ | 99 | C ₇ H ₁₅ , C ₆ H ₁₁ O |
| 47 | CH ₃ S, CH ₂ SH | 100 | C ₄ H ₉ COCH ₂ +H, C ₆ H ₁₄ N isomers |
| 48 | CH ₃ S+H | 101 | C ₄ H ₉ OCO |
| 49 | CH ₂ Cl | 102 | C ₃ H ₇ OCOCH ₂ +H |
| 51 | CHF ₂ | 103 | C ₄ H ₉ OCO+2H, C ₅ H ₁₁ S, (CH ₃ CH ₂ O) ₂ CH |
| 53 | C ₄ H ₅ | 104 | C ₂ H ₅ CHONO ₂ |
| 54 | CH ₂ CH ₂ CN | 105 | C ₆ H ₅ CO, C ₆ H ₅ C ₂ H ₄ |
| 55 | C ₄ H ₇ , CH ₂ CHCO | 106 | C ₆ H ₅ CHCH ₂ |
| 56 | C ₄ H ₈ | 107 | C ₆ H ₅ CH ₂ O, HOCH ₂ -C ₆ H ₄ -CH ₂ (o- and p-) |
| 57 | C ₄ H ₉ , C ₂ H ₅ CO, CH ₃ COCH ₂ | 108 | N-methyl-2-pyrroloyl |
| 58 | CH ₃ COCH ₂ +H, C ₂ H ₅ CHNH ₂ , (CH ₃) ₂ NCH ₂ , C ₂ H ₅ NHCH ₂ , C ₂ H ₂ S | 111 | 2-Thiophenoyl |
| 59 | CH ₃ OCO, CH ₂ OC ₂ H ₅ , (CH ₃) ₂ COH, CH ₃ OCHCH ₃ , CH ₃ CHCH ₂ OH | 119 | CF ₃ CF ₂ , C ₆ H ₅ C ₃ H ₆ , CH ₃ C ₆ H ₄ C ₂ H ₄ , CH ₃ C ₆ H ₄ CO |
| 60 | CH ₂ CO ₂ H+H, CH ₂ ONO | 120 | |
| 61 | CH ₃ OCO+2H, CH ₂ CH ₂ SH, CH ₂ SCH ₃ | | |
| 65 | Cyclopentadienyl cation | | |
| 67 | C ₅ H ₇ | | |
| 68 | (CH ₂) ₃ CN | | |
| 69 | C ₅ H ₉ , CF ₃ , CH ₃ CHCHCHO, CH ₂ C(CH ₃)CO | | |
| 70 | C ₅ H ₁₀ | | |
| 71 | C ₅ H ₁₁ , C ₃ H ₇ CO | | |