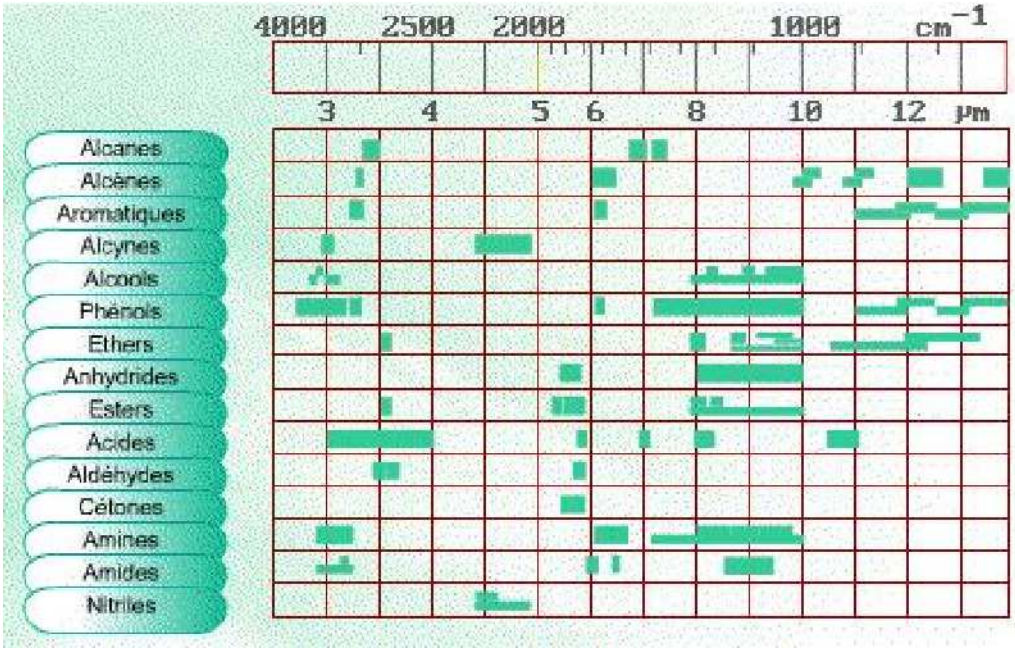
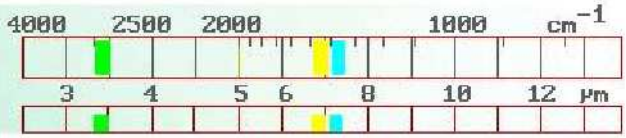
Module sur les spectroscopies.

Infra Rouge.
Cahier des ressources.





- Alcanes
- Alcènes
- Aromatiques
- Alcynes
- Alcools
- Phénols
- Ethers
- Anhydrides
- Esters
- Acides
- Aldéhydes
- Cétones
- Amines
- Amides
- Nitriles

Alcanes :

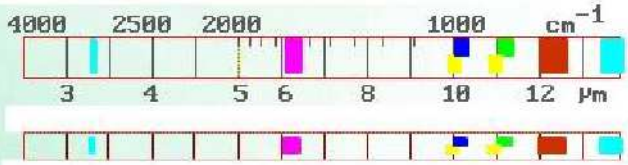
Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

2850-2980 cm^{-1} → élongations symétrique et asymétrique des C-H.

vers 1450 cm^{-1} → déformation (cisaillement), bande peu exploitable !

vers 1380 cm^{-1} → déformation correspondant au groupe $-CH_3$;
doublet de même intensité, gemdiméthyle $>C(CH_3)_2$
doublet d'intensité différente, tertiobutyle $-C(CH_3)_3$.

vers 720 cm^{-1} → balancement (rocking) des $-CH_2-$,
dont l'intensité qui dépend du nombre de $-CH_2-$ liés, est parfois notable quand il y a plus de 4-5 méthylènes .



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Alcènes :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

3000-3110 cm^{-1} → élongation =C-H parfois noyée dans les élongations C-H.

1580-1660 cm^{-1} → élongation >C=C< parfois absente ou de faible intensité, cas des alcènes (E) ou symétriques.

Le nombre et la position des bandes de déformation permet souvent de déduire des informations sur les substituants de la double liaison....

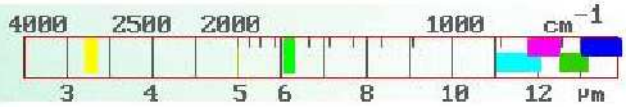
R-CH=CH_2 → 2 bandes de déformation vers 910 et 990 cm^{-1}.

RR'C=CH_2 → 1 bande de déformation vers 890 cm^{-1}.

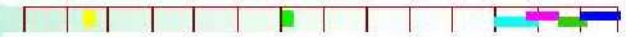
R-CH=CH-R' (E) → 1 bande de déformation vers 970 cm^{-1}.

R-CH=CH-R' (Z) → 1 bande de déformation vers 730 cm^{-1}.

RR'C=CH-R" → 1 bande de déformation entre 790-840 cm^{-1}.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

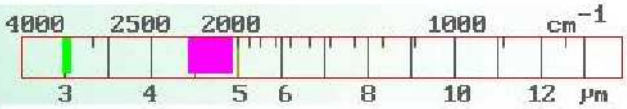


Aromatiques :

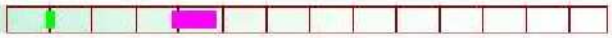
Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

3000-3100 cm^{-1}	élongation =C-H parfois noyée dans les élongation C-H.
1600-1640 cm^{-1}	élongation >C=C<, fréquence faible à cause de la conjugaison.
740- 770 cm^{-1}	déformation correspondant à 4 ou 5 H adjacents sur le noyau.
835- 910 cm^{-1}	déformation correspondant à 1 H entouré de 2 groupements.
800- 855 cm^{-1}	déformation correspondant à 2 H adjacents sur le noyau.
765- 800 cm^{-1}	déformation correspondant à 3 H adjacents sur le noyau.



- Alcanes
- Alcènes
- Aromatiques
- Alcynes
- Alcools
- Phénols
- Ethers
- Anhydrides
- Esters
- Acides
- Aldéhydes
- Cétones
- Amines
- Amides
- Nitriles



Alcynes :

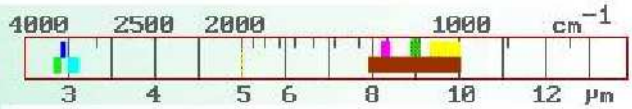
Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

3250-3300 cm^{-1} → élongation ≡C-H caractéristique des alcynes vrais, bande absente pour les alcynes disubstitués.

2050-2300 cm^{-1} → élongation -C≡C- , absente pour les alcynes disubstitués symétriquement. Bande très sensible au moment dipolaire elle peut être d'intensité très faible.

Attention : Compte tenu d'une disubstitution possible de la liaison -C≡C- et des effets des substituants, on peut n'observer aucune bande !...



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Alcools :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

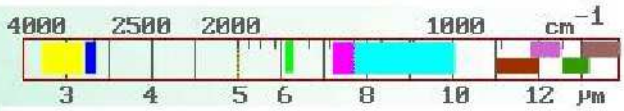
Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

3600-3645 cm^{-1} → O-H libre (en cas de dilution de l'alcool).

3450-3600 cm^{-1} → O-H intra-moléculaire

3200-3400 cm^{-1} → O-H inter-moléculaire.
Bande caractéristique (forme symétrique), différente de celle du OH des acides carboxyliques (patate) et qui diminue en cas de dilution.

1000-1260 cm^{-1} → élongation C-O- intense dont la position permet souvent de trouver la classe de l'alcool : → C-OH 1100-1210 cm^{-1},
→ >CH-OH 1090-1130 cm^{-1},
et → $-CH_2-OH$ 1000-1075 cm^{-1}.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Phénols :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

3125-3700 cm^{-1} — O-H, bande large et intense due à la liaison hydrogène fine (3700 cm^{-1}) si gêne stérique des groupes voisins.

3000-3100 cm^{-1} — =C-H parfois noyée dans les élongation C-H.

1600-1640 cm^{-1} — élongation >C=C<, fréquence faible à cause de la conjugaison.

1315-1390 cm^{-1} — déformation O-H, déformation =C-O est en-dessous de 700 cm^{-1}.

1000-1300 cm^{-1} — élongation =C-O-.

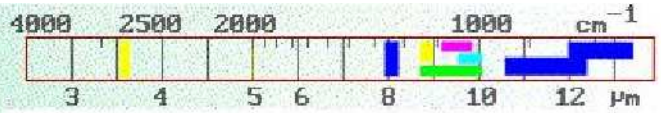
700- 900 cm^{-1} — déformations =C-H des aromatiques
Le nombre et la position des bandes de déformation permet souvent de déduire des informations sur les substituants du noyau aromatique.

740- 770 cm^{-1} — déformation correspondant à 4 ou 5 H adjacents sur le noyau.

835- 910 cm^{-1} — déformation correspondant à 1 H entouré de 2 groupements.

800- 855 cm^{-1} — déformation correspondant à 2 H adjacents sur le noyau.

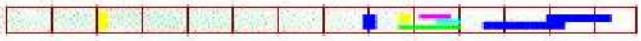
765- 800 cm^{-1} — déformation correspondant à 3 H adjacents sur le noyau.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Ethers :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.



Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

2820-2850 cm^{-1} → groupe CH_3-O-, éthers méthyliques CH_3-O- aromatiques.

1000-1150 cm^{-1} → bande C-O-C. De même que pour les alcools, la fréquence des bandes d'élongation C-O-C dépend du nombre de susbtituants du carbone porteur de l'oxygène,

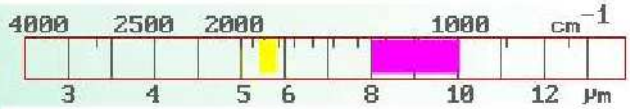
- C-O-C 1110-1150 cm^{-1},
- >CH-O-C 1020-1080 cm^{-1},
- -CH_2-O-C 1000-1050 cm^{-1}.

Cet effet est réellement exploitable uniquement quand on compare des spectres d'éthers isomères.

Bandes déplacées par couplage dans les éthers symétriques.

Pour les époxydes,
on observe 3 bandes dont les deux premières sont souvent noyées parmi d'autres bandes.

- Elongation symétrique du cycle vers 1250 cm^{-1} "the 8 µm band",
- élongation asymétrique 810-950 cm^{-1} "the 11 µm band" et
- la plus typique, vers 750-840 cm^{-1}, "the 12 µm band".



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

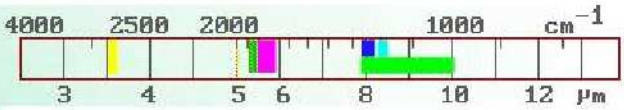
Anhydrides :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

1725-1850 cm^{-1} → 2 élongations >C=O séparées par environ 65 cm-1 (0,2 µm).
La conjugaison du >C=O (anhydrides aromatiques) entraîne un glissement des bandes vers des fréquences plus basses.
Des deux bandes >C=O, la bande de fréquence basse est moins intense pour les anhydrides linéaires.
C'est l'inverse pour les anhydrides cycliques.

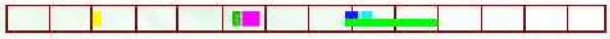
1000-1250 cm^{-1} → élongation =C-O-C=, bande intense.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Esters :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.



Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

vers 2850 cm^{-1} → bande fine caractéristique du groupe méthoxy CH_3-O.

vers 1740 cm^{-1} → élongation >C=O, plus basse s'il y a conjugaison.

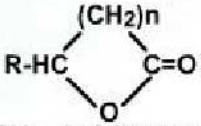
1000-1250 cm^{-1} → élongations =C-O et O-C.

Notez que : → vers 1180 cm^{-1} : bande caractéristique des formiates, H-COO-R,

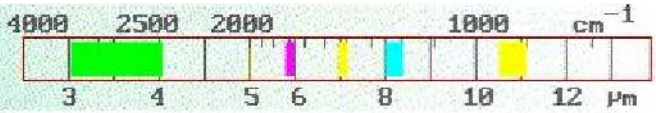
→ vers 1250 cm^{-1} : bande caractéristique des acétates, CH_3-COO-R.

Cas des lactones

1820-1885 cm^{-1} → élongation >C=O,



Selon le nombre n de -CH_2-, la fréquence sera élevée pour n = 1, 2 (le cycle est tendu) puis redeviendra "normale" à partir de n = 6.

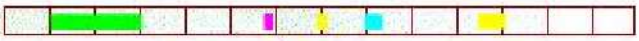


Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

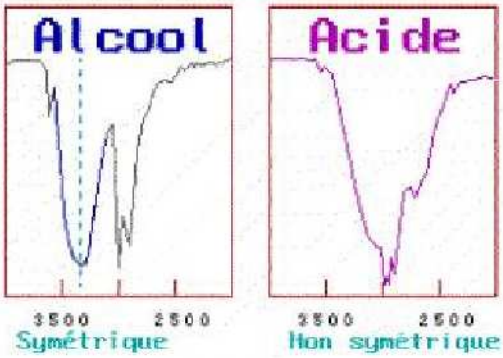
Ces plages sont données à titre indicatif.
Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

Acides :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.



IMPOSSIBLE de confondre le OH d'un acide avec la bande OH d'un alcool.



2500-3340 cm^{-1} → "Patate" OH due aux liaisons hydrogènes.

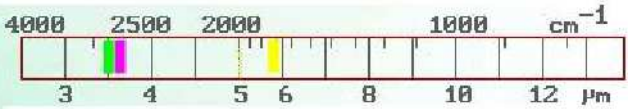
vers 1760 cm^{-1} → élongation >C=O pour la forme monomère, intense.

vers 1710 cm^{-1} → élongation >C=O pour la forme dimère (acides en solution).
C'est la forme dimère qui est le plus souvent rencontrée.

vers 1250 cm^{-1} → élongation =C-O.

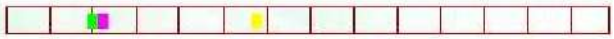
vers 1430 cm^{-1} → déformation OH d'intensité moyenne

910- 950 cm^{-1} → autre déformation OH.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Ces plages sont données à titre indicatif.
Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.



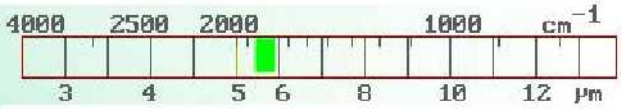
Aldéhydes :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

2800-2900 cm^{-1} → élongation =C-H souvent noyée dans les élongations C-H. mais parfois très distincte pour les aldéhydes benzéniques.

2700-2800 cm^{-1} → élongation =C-H, toujours visible.

vers 1725 cm^{-1} → élongation >C=O, plus basse s'il y a conjugaison.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

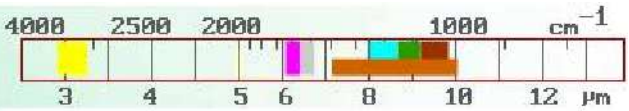
Ces plages sont données à titre indicatif.
Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

Cétones :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

vers 1710 cm^{-1} → élongation >C=O.
Cette fréquence diminue par effet de conjugaison alors qu'elle augmente pour les cétones à petits cycles de taille inférieure à 6 chaînons.

De tous les composés carbonylés, les cétones sont les moins faciles à détecter.
Ce n'est qu'en ayant éliminé les autres fonctions carbonylées telles que les aldéhydes, acides, esters, anhydrides, etc, que le choix de l'attribution du carbonyle à une cétone pourra être arrêté.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Ces plages sont données à titre indicatif.
Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

Amines :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

3250-3450 cm^{-1} → DEUX élongations N-H pour les amines primaires,
UNE élongation N-H pour les amines secondaires,
PAS d'élongation N-H pour les amines tertiaires, évidemment !

1580-1650 cm^{-1} → $R\text{-}NH_2$, déformation due au mouvement de ciseau,

1490-1580 cm^{-1} → RR'NH , idem, mais plus difficile à détecter.

1000-1400 cm^{-1} → élongation C-N<,

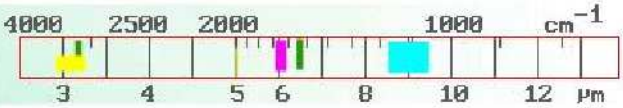
fréquence augmentant avec la substitution du carbone en α :

→ $RCH_2\text{-}NH_2$,

→ $RR'CH\text{-}NH_2$,

→ $RR'R''C\text{-}NH_2$

vers 900 cm^{-1} → déformation >N-H, "patate" caractéristique des amines I et II.
Se trouve à fréquence nettement plus basse pour les amides.



Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Ces plages sont données à titre indicatif.
Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.

Amides :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

3250-3450 cm^{-1} → DEUX élongations N-H pour les amides primaires,
UNE N-H pour les secondaires,
PAS de N-H pour les tertiaires.

vers 3100 cm^{-1} → harmonique de la déformation N-H des amides II, trans.
Différente d'une élongation >N-H (pas la même intensité).

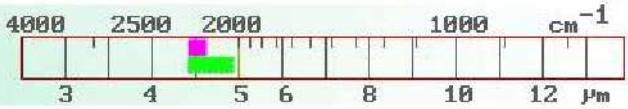
1640-1690 cm^{-1} → élongation >C=O.

1530-1550 cm^{-1} → déformation N-H caractéristique des amides II, trans.

1055-1175 cm^{-1} → élongation C-N<.

< à 700 cm^{-1} → déformation >N-H, "patate" typique des amides I et II.

Les amides sont les composés les plus délicats à identifier en Infra Rouge !

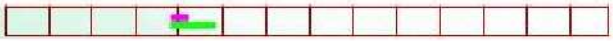


Alcanes
Alcènes
Aromatiques
Alcynes
Alcools
Phénols
Ethers
Anhydrides
Esters
Acides
Aldéhydes
Cétones
Amines
Amides
Nitriles

Nitriles :

Leurs spectres présentent bien entendu les bandes attribuables aux autres groupes qui peuvent les substituer.

Ces plages sont données à titre indicatif. Les effets inductifs et/ou de conjugaison peuvent déplacer les bandes.



2050-2300 cm^{-1} → pour mémoire, l'élongation -C≡C-

2200-2300 cm^{-1} → élongation -C≡N

Bien qu'elle apparaîsse dans la région des triples liaisons, on peut la différencier facilement de l'élongation -C≡C- car le moment dipolaire de la liaison -C≡N étant important, elle a une intensité beaucoup plus importante que celle de la triple liaison -C≡C- qui apparaît quand l'alcyne n'est pas disubstitué symétriquement.