

COMPLEMENTS DE SPECTROSCOPIES UV-VISIBLE ET IR A L'USAGE DU CHIMISTE

Ce document a pour objectif de vous fournir quelques clefs d'interprétation de spectres UV-visible et infra-rouge dans le cadre d'un TIPE de chimie.

- Pour aller plus loin en IR : R. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, *Spectrometric identification of organic compounds*, John Wiley & sons.
- Pour des tables très complètes en IR et en UV : E. Pretsch, P. Bühlmann, M. Badertscher, *Structure Determination of Organic Compounds*, Springer.

INTRODUCTION

La **spectroscopie** est une méthode physique non destructive qui étudie les **échanges d'énergie** mis en jeu lors de l'**interaction matière-rayonnement** pour fournir des informations sur la structure de la matière.

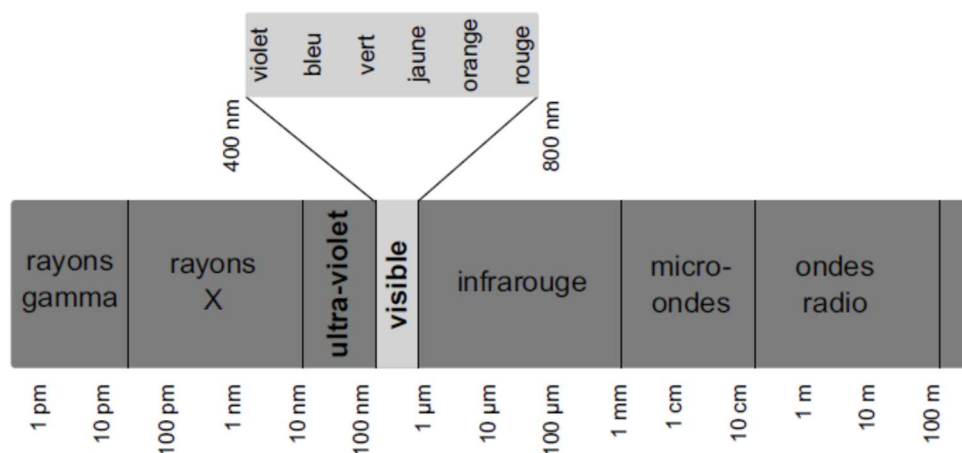
L'énergie d'une molécule se décompose en : $E_{translation} + E_{rotation} + E_{vibration} + E_{électronique}$

L'énergie de translation n'est pas quantifiée, les autres le sont. L'énergie d'une molécule étant **quantifiée**, elle ne peut prendre que des valeurs discrètes. Ainsi, la molécule, en passant d'un état énergétique à un autre, peut émettre ou absorber un photon d'énergie ΔE selon la relation de Planck-Einstein :

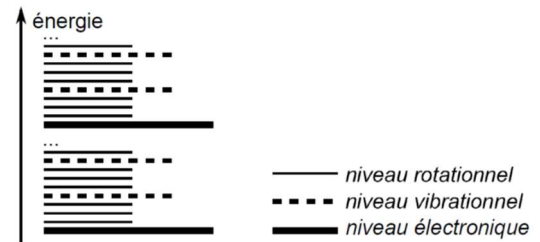
$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\sigma$$

- ν : **fréquence** (Hz) ; λ : **longueur d'onde** (m) ;
- σ : **nombre d'onde** (m^{-1}) du rayonnement électromagnétique ;
- $h = 6,63 \cdot 10^{-34} J \cdot s$: constante de Planck ;
- $c \approx 3 \cdot 10^8 m \cdot s^{-1}$: vitesse de la lumière dans le vide.

Un **rayonnement électromagnétique** est caractérisé par sa **longueur d'onde** (λ en nm) dont les différents domaines sont présentés ci-dessous :



Selon la longueur d'onde du rayonnement électromagnétique mis en jeu, on observe des **transitions énergétiques** entre **niveaux électroniques**, **vibrationnelles** ou **rotationnelles**.



En présence d'un champ magnétique, il existe aussi des **transitions entre états de spin nucléaire**.

Les différentes techniques de spectroscopie nécessitent l'utilisation d'un **spectrophotomètre** et permettent de **caractériser des molécules**, de **déterminer des concentrations** d'espèces chimiques en solution et par extension de réaliser des **suivis cinétiques**.

I. SPECTROSCOPIE UV-VISIBLE

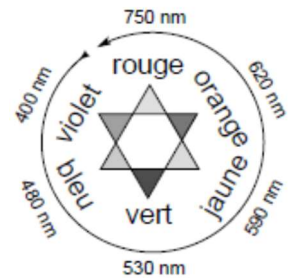
Il s'agit d'une **spectroscopie d'absorption** mettant en jeu des **transitions entre niveaux électroniques** des molécules. Le domaine d'étude pratique va de $\lambda = 200$ à 800 nm.

Ordre de grandeur pour une transition électronique : $\Delta E_{\text{élec}} \approx 1 \text{ eV} \approx 100 \text{ kJ.mol}^{-1}$

I.1 PRINCIPE DE LA TECHNIQUE

Lorsqu'une solution est traversée par un rayonnement polychromatique, elle peut atténuer l'intensité des radiations à certaines longueurs d'onde en absorbant ces radiations.

De façon simplifiée, si une solution absorbe dans le visible, elle apparaît de la couleur complémentaire à la longueur d'onde absorbée comme illustré par le cercle chromatique suivant :



I.1.1 Absorbance et transmittance

Un faisceau de lumière monochromatique (de longueur d'onde λ) d'intensité incidente $I_{0\lambda}$ traverse une longueur ℓ de solution **limpide** placée dans une cuve.

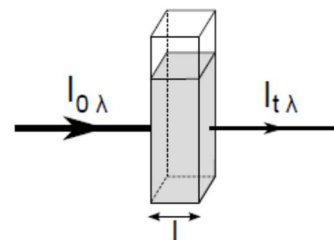


Figure 1. Représentation d'une cuve traversée par un faisceau incident d'intensité $I_{0\lambda}$. Un faisceau d'intensité $I_{t\lambda}$ en émerge.

Une partie de la radiation incidente est **absorbée** par la solution, l'autre est **transmise** et son intensité est notée $I_{t\lambda}$ avec $I_{t\lambda} < I_{0\lambda}$.

Afin de quantifier l'intensité de la radiation absorbée à une longueur d'onde λ donnée, deux grandeurs sont introduites : la **transmittance**, notée T_λ et l'**absorbance**, notée A_λ :

$$T_\lambda = \frac{I_{t\lambda}}{I_{0\lambda}} \quad \text{et} \quad A_\lambda = \log \frac{I_{0\lambda}}{I_{t\lambda}} = \log \frac{1}{T_\lambda}$$

Ces grandeurs sont sans unité ; la transmittance est souvent exprimée en % :

- si $T_\lambda = 100 \%$, le milieu est parfaitement transparent et $A_\lambda = 0$;
- si $T_\lambda = 0 \%$, le milieu est parfaitement opaque et $A_\lambda \rightarrow +\infty$.

1.1.2 Spectrophotomètre mono-faisceau

L'absorbance (ou la transmittance) peut être mesurée par un **spectrophotomètre** dont le schéma de principe est représenté ci-dessous. À partir d'une source de **lumière polychromatique**, un **système dispersif** (prisme, réseau) et un diaphragme permettent de sélectionner la longueur d'onde souhaitée.

Après absorption d'une partie des radiations par la solution, un **photodétecteur** recueille l'intensité transmise (I_t). L'afficheur du spectrophotomètre donne directement l'absorbance (ou la transmittance) de la solution.

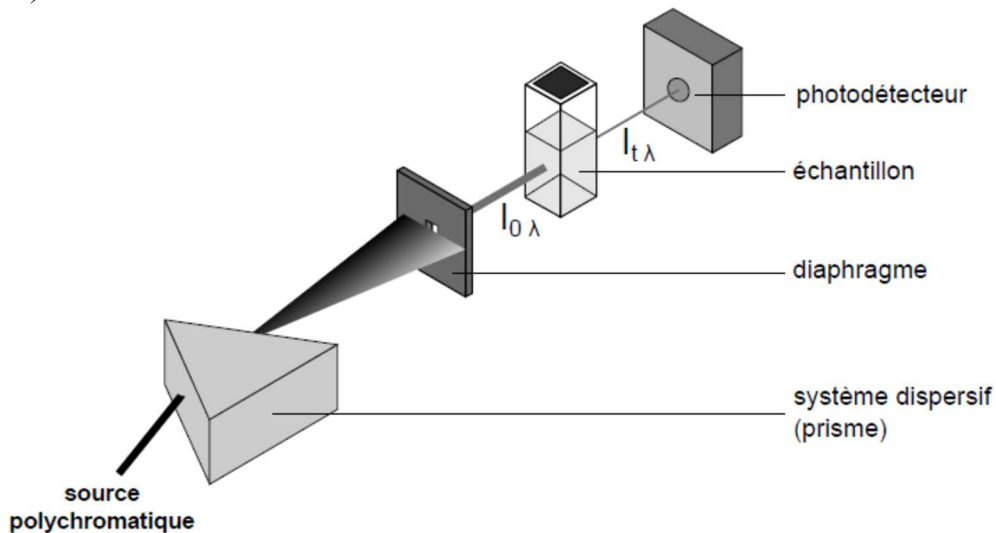
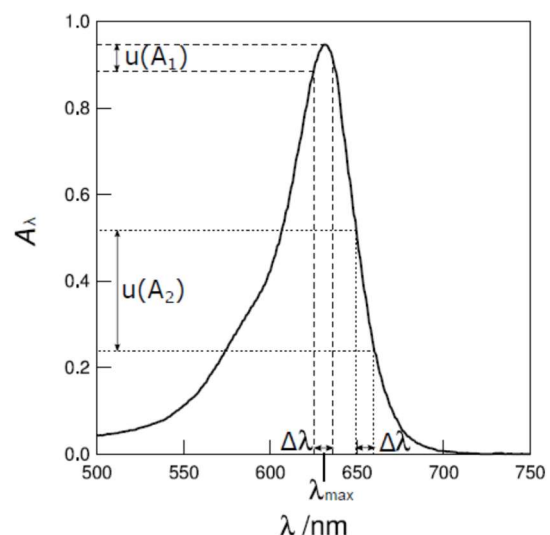


Figure 2. Principe de fonctionnement d'un spectrophotomètre monofaisceau.

1.1.3 Spectre d'absorption

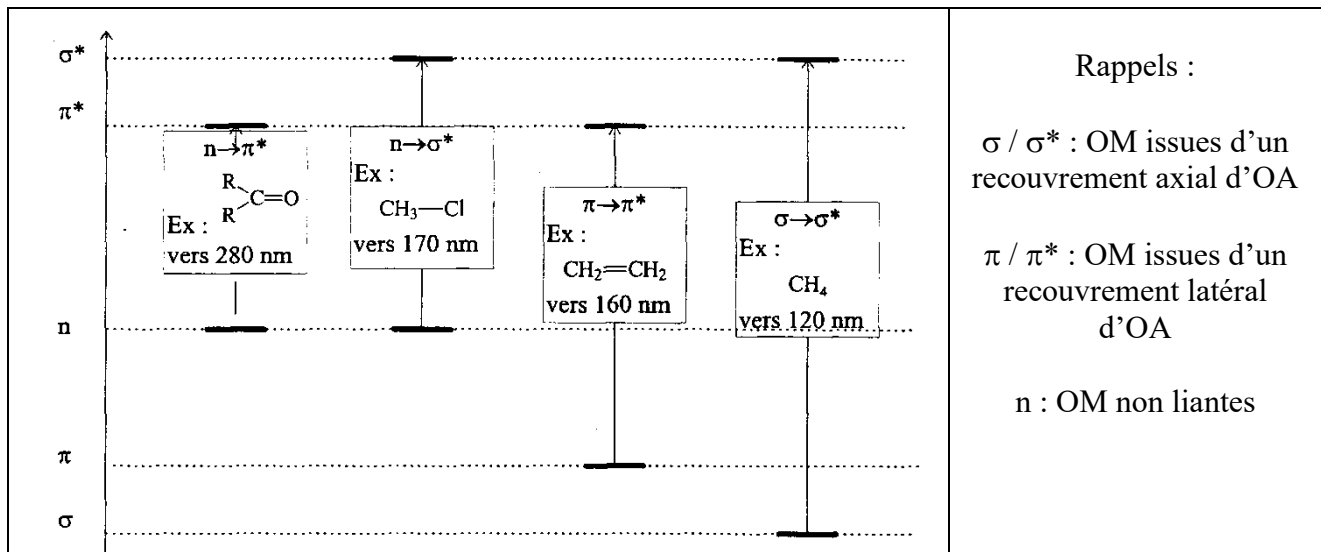
Le graphe donnant l'absorbance en fonction de la longueur d'onde est appelé **spectre d'absorption**. À titre d'exemple, le spectre d'absorption d'une solution aqueuse de bleu brillant (colorant alimentaire E133) de concentration $1,0 \cdot 10^{-5} \text{ mol.L}^{-1}$ est reproduit sur la figure suivante :

La **bande d'absorption** observée ($\lambda_{\text{max}} = 631 \text{ nm}$) correspond à un rayonnement orange. La solution est de couleur bleue, couleur complémentaire de l'orange.



Remarque : la largeur des bandes observées est due, entre autres, à l'ensemble des transitions vibrationnelles et rotationnelles associées à une transition électronique donnée.

I.1.4 Types de transition et longueurs d'ondes associées



Les liaisons σ étant en général très fortes, la séparation entre les niveaux σ et σ^* est très grande et l'énergie de la transition $\sigma \rightarrow \sigma^*$ est très élevée.

Effet bathochrome

Plus une entité chimique est **conjuguée**, plus la longueur d'onde de son maximum d'absorption est élevée et se **rapproche du visible** en se décalant **vers le rouge**.

En effet, plus la conjugaison est grande, plus les niveaux π et π^* sont proches, plus grande est la longueur d'onde associée à la transition. Les molécules très conjuguées correspondent à des molécules colorées car l'absorption se produit désormais dans le domaine visible. Leur couleur correspond à la couleur complémentaire de celle absorbée (cercle chromatique).

Ex :

Entité chimique	$\lambda_{\text{max}} / \text{nm}$	Couleur
	519	rouge
	625	bleu
	735	vert

L'opacité de l'air aux courtes longueurs d'ondes impose de ne pas descendre au-dessous de 200 nm.

La **spectroscopie UV-visible** ne permet de détecter que les **transitions $n \rightarrow \pi^*$** (ex : carbonyle) et les **transitions $\pi \rightarrow \pi^*$** des **systèmes conjugués**.

La position de ces bandes (λ_{max}) et leur intensité (ϵ_{max}) traduisent la présence de groupes d'atomes particuliers, appelés **chromophores**.

I.1.5 Loi de Beer-Lambert

La **loi de Beer-Lambert** permet de relier l'absorbance A_λ à la concentration c_i des espèces chimiques présentes en solution. Elle n'est valable que pour des **solutions diluées**.

$$A_\lambda = \sum_i \varepsilon_i(\lambda) \ell c_i$$

- ℓ : longueur de solution traversée par le rayonnement (cm). Généralement on utilise des cuves de 1 cm ;
 - c_i : concentration molaire de l'espèce i en solution ($\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) ;
 - $\varepsilon_i(\lambda)$: **coefficient d'absorption molaire** de l'espèce i ($\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$). C'est une grandeur qui dépend de l'**espèce chimique considérée**, de la **longueur d'onde d'analyse**, du **solvant** et de la **température**.
- Limitations de la loi de Beer-Lambert :

La loi de Beer-Lambert n'est valable que pour des **solutions diluées**. Deux problèmes peuvent se poser à des concentrations élevées :

- les molécules en solution forment des **agrégats** qui n'absorbent pas de la même façon que la molécule isolée. En particulier, des phénomènes de diffusion peuvent apparaître selon la taille des agrégats.
 - la sensibilité du détecteur étant limitée, pour des solutions concentrées, le photodétecteur ne reçoit pas assez de lumière (l'intensité transmise devient trop faible) pour donner une valeur fiable de l'absorbance. On dit que le spectrophotomètre « sature ». On considère que la sensibilité du photodétecteur des spectrophotomètres utilisés dans les classes ne permet pas d'obtenir des valeurs fiables pour des absorbances **supérieures à 2**.
- Choix de la longueur d'onde de travail

Lors d'une mesure d'absorbance, il est préférable de se placer à la longueur d'onde (λ_{max}) correspondant au **maximum d'absorption** du composé (A_{max}).

Ce choix de longueur d'onde permet :

- **d'augmenter la sensibilité**. Définie comme dA_λ/dc , elle vaut $\varepsilon_\lambda \ell$ d'après la loi de Beer-Lambert et est maximale à λ_{max} .
- **de minimiser l'incertitude-type $u(A)$ sur A_λ** . Le monochromateur n'étant pas idéal, il laisse passer un ensemble de longueurs d'onde $\Delta\lambda$ appelée **bande passante du monochromateur**. L'incertitude-type sur l'absorbance $u(A)$ est minimale au maximum d'absorption comme illustré sur le spectre du bleu brillant : $u(A_1) < u(A_2)$.

I.2. MISE EN ŒUVRE PRATIQUE

La mesure de l'absorbance d'une solution grâce à un **spectrophotomètre mono-faisceau** nécessite de suivre les étapes suivantes :

- 1) Régler l'appareil à la longueur d'onde choisie.
- 2) Remplir à l'aide d'une pipette Pasteur, une cuve avec le « **blanc** » qui contient le **solvant** et **toutes les espèces présentes** en solution excepté le composé d'intérêt.
- 3) Placer la cuve dans le logement prévu à cet effet. Le faisceau doit traverser les faces transparentes de la cuve. Fermer le capot.
- 4) Régler l'appareil de sorte que l'absorbance indiquée soit égale à zéro.

On s'affranchit de l'absorbance du solvant et de toutes les espèces chimiques présentes dans le « blanc » ainsi que de la réflexion due à la cuve.

- 5) Sortir la cuve, la vider et la **rincer avec la solution à analyser**.
- 6) Répéter les opérations 2 et 3 avec la solution à analyser.
- 7) Lire l'absorbance de la solution à analyser à la longueur d'onde choisie.
- 8) Vider et nettoyer la cuve.

- Précaution à prendre lors du remplissage des cuves :

- la cuve **ne doit pas contenir de bulles d'air** ;
- la solution doit être limpide : **sans particules en suspension**, pour minimiser les phénomènes de diffusion et de diffraction ;
- les parois de la cuve doivent être **propres** (en particulier exemptes de traces de doigts sur les faces optiques) et **non rayées**. Pour les nettoyer, il faut les essuyer délicatement avec un papier doux (idéalement un **papier optique**).

- Quel matériau de cuve choisir ?

Plusieurs matériaux sont disponibles :

- le **plastique** : ce sont des cuves jetables qui sont adaptées pour les solutions aqueuses seulement ; les solvants organiques (acétone, dichlorométhane...) altèrent en effet le polymère. De plus, le plastique absorbe les rayonnements de longueur d'onde inférieure à environ 380 nm. Ces cuves ne peuvent donc pas être utilisées pour faire des mesures dans l'UV.
- le **verre** : ce matériau est utilisé pour étudier des solutions en solvant organique dans le domaine visible car il absorbe aussi en dessous de 380 nm.
- le **quartz** : ce matériau (coûteux) est utilisé pour étudier des solutions en solvant organique ou aqueux dans le domaine visible ou dans l'UV jusqu'à environ 220 nm.

Les cuves en verre et en quartz doivent être nettoyées à l'acétone et séchées après chaque utilisation.

II. SPECTROSCOPIE INFRAROUGE

Il s'agit d'une **spectroscopie d'absorption** mettant en jeu des **transitions entre niveaux vibrationnels** des molécules. Le domaine d'étude pratique va de $\lambda = 2,5$ à $16 \mu\text{m}$ soit $\sigma = 1/\lambda = 4000$ à 600 cm^{-1} . σ est appelé **nombre d'onde**.

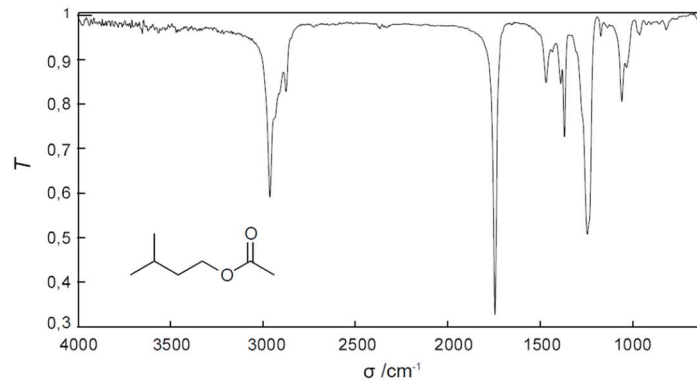
Ordre de grandeur pour une transition vibrationnelle : $\Delta E_{\text{vib}} \approx 0,1 \text{ eV} \approx 10 \text{ kJ.mol}^{-1}$

Ordre de grandeur pour une transition rotationnelle : $\Delta E_{\text{vib}} \approx 0,001 \text{ eV} \approx 0,1 \text{ kJ.mol}^{-1}$

II.1 ALLURE D'UN SPECTRE

On a l'habitude de porter le % de **transmittance** $T = I/I_0$ en fonction du nombre d'onde σ .

La largeur des **bandes** observées s'explique, entre autres, par l'ensemble des transitions rotationnelles (d'énergie environ 100 fois plus faibles) associées à une transition vibrationnelle donnée.



II.2 MODELISATION

II.2.1 Molécules diatomiques : modèle de l'oscillateur harmonique

Tout oscillateur se comporte comme un oscillateur harmonique au voisinage de sa position d'équilibre.

- Approche classique

La vibration au sein d'une molécule A-B est décrite par un modèle « masses - ressort ». Les atomes sont modélisés par les masses m_A et m_B et la liaison par un ressort de **constante de raideur k** , d'autant plus grande que la liaison A-B est forte. Le nombre d'onde de vibration est donné par la **loi de Hooke**.

$$\sigma_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{où } \mu \text{ est la masse réduite telle que } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

Quand le nombre d'onde du rayonnement incident s correspond au nombre d'onde de vibration de la liaison σ_0 , il y a absorption. Une **bande de vibration** correspondant à une transmittance inférieure à 1 apparaît pour ce nombre d'onde.

- Approche quantique

L'énergie de vibration est **quantifiée**. Les niveaux d'énergie accessibles sont associée à une valeur d'**énergie E_n** telle que :

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) hc\sigma_0 \quad \text{où } n \in \mathbb{N}$$

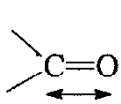
En outre, les transitions ne sont « autorisées » donc **observées** sur un spectre IR que si la vibration entraîne une **modification du moment dipolaire** de la molécule.

Ex : les molécules diatomiques homonucléaires comme O_2 , N_2 ou H_2 n'absorbent pas en IR.

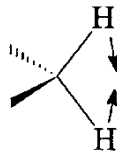
II.2.2 Molécules polyatomiques

Pour une molécule diatomique, la seule vibration possible est l'élongation de la liaison. Pour une molécule polyatomique, les longueurs et les angles peuvent varier lors de sa déformation. La molécule possède plusieurs **modes de vibration** pouvant conduire à plusieurs bandes de vibration.

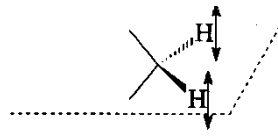
Ex :



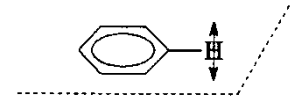
Élongation ou
vibration de valence



Déformation
« dans le plan »
(cisaillement)



Déformations « hors du plan »



Remarque : les bandes de déformation sont toujours à **plus faible nombre d'onde** que les bandes de valence.

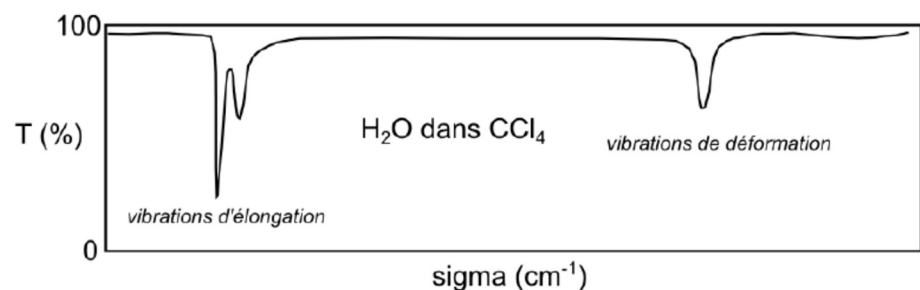
Par exemple l'eau possède trois modes de vibration :

→ 2 modes qui modifient les longueurs de liaison (vibrations « d'élongation » ou « de valence ») ;

→ 1 mode qui modifie les angles (vibration « de déformation »).

<i>Élongation antisymétrique</i> $\sigma = 3756 \text{ cm}^{-1}$	<i>Élongation symétrique</i> $\sigma = 3652 \text{ cm}^{-1}$	<i>Déformation</i> $\sigma = 1595 \text{ cm}^{-1}$

Chacun de ces modes conduit à une absorption différente : le spectre IR de l'eau contient **trois bandes**.



II.3 NOMBRES D'ONDE CARACTERISTIQUES

II.3.1 Région $4000 \text{ cm}^{-1} - 1400 \text{ cm}^{-1}$

Cette région correspond globalement aux **vibrations d'élongation des liaisons**.

Son analyse est souvent aisée car elle contient relativement peu de signaux et l'attribution des bandes d'élongation permet souvent **d'identifier les groupes fonctionnels d'une molécule**.

Bande d'élongation	Allure	Ordre de grandeur de σ / cm^{-1}
C-H	fine	3000
O-H (alcool)	large	centrée sur 3300
N-H (amine)	variable	centrée sur 3300
O-H (acide carboxylique)	très large	centrée sur 2950
C=O	fine et intense	1725
C=C	fine et peu intense	1650

- Cas des élongations C-H

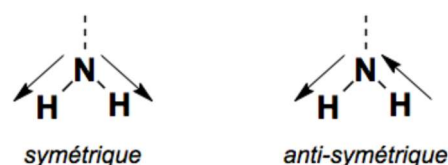
La faible masse de H entraîne une masse réduite μ faible. Ainsi, les bandes de vibration d'élongation C-H apparaissent à haut nombre d'onde (environ 3000 cm^{-1}). Elles sont généralement **peu utiles** car toutes les molécules organiques contiennent des liaisons C-H...

2750-2900 cm^{-1}	2810-3000 cm^{-1}	3000-3100 cm^{-1}	3300-3310 cm^{-1}

- Cas des élongations N-H

Comme la bande d'élongation O-H, la N-H est située à hauts nombres d'onde (environ 3300 cm^{-1}) et est large (liaisons intermoléculaires, voir plus loin).

Pour une amine primaire, elle présente **deux bandes** dues aux modes de vibration **symétrique** et **antisymétrique** du NH_2 :



Une amine secondaire $\text{RR}'\text{NH}$ ne présente qu'une seule bande.

II.3.2 Région $1400\text{ cm}^{-1} - 1000\text{ cm}^{-1}$ « empreinte digitale » des molécules

Cette région est difficile à exploiter directement car elle contient beaucoup de bandes, en particulier des bandes de déformation mais aussi les bandes d'élongation C-O des alcools, éthers, esters, acides, anhydrides etc. Elle peut néanmoins être analysée à l'aide de logiciels qui comparent ses bandes à celles des produits d'une **base de données**. Cela peut permettre d'identifier la molécule.

II.3.3 Région $1000 - 600\text{ cm}^{-1}$

Cette région est utile pour l'étude des **composés éthyléniques** et **aromatiques** à partir des bandes de **déformation « hors du plan » des liaisons C-H** et de certaines déformations du cycle. Son étude permettra, par exemple, de distinguer les dérivés ortho, méta et para disubstitués du benzène ou encore un alcène Z de son isomère E. On trouve aussi dans cette région les vibrations de valence des liaisons C-Cl, C-Br et C-I.

II.4 LES DIVERS PARAMETRES

Le nombre d'onde σ est proportionnel à la fréquence propre ν_0 ($\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu_0}{c}$) donc à $\sqrt{\frac{k}{\mu}}$.

- la multiplicité des liaisons augmente la force de la liaison k :

$$\sigma_{\text{C-C}} \text{ entre } 1000 \text{ et } 1250\text{ cm}^{-1} \quad \sigma_{\text{C=C}} \text{ entre } 1625 \text{ et } 1680\text{ cm}^{-1} \quad \sigma_{\text{C}\equiv\text{C}} \text{ entre } 2120 \text{ et } 2250\text{ cm}^{-1}$$

Ex :

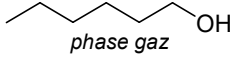
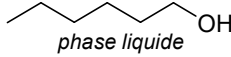
$\sigma_{\text{C=C}} = 1645\text{ cm}^{-1}$	$\sigma_{\text{C}\equiv\text{C}} = 2126\text{ cm}^{-1}$

$$\sigma_{\text{C-O}} \text{ entre } 1050 \text{ et } 1450\text{ cm}^{-1} \quad \sigma_{\text{C=O}} \text{ entre } 1650 \text{ et } 1840\text{ cm}^{-1}$$

- **la formation de liaisons hydrogène diminue la force de la liaison étudiée.**

$\sigma_{\text{O-H}}$ libre	(alcool, solvant aprotique)	entre 3580 et 3670 cm^{-1}
$\sigma_{\text{O-H}}$ avec liaison H	(alcool pur ou dans un solvant protique)	entre 3200 et 3400 cm^{-1}

Ex :

	
$\sigma_{\text{O-H}} = 3670 \text{ cm}^{-1}$ bande fine	$\sigma_{\text{O-H}} = 3324 \text{ cm}^{-1}$ bande large
Pas de liaison hydrogène	Nombreuses liaisons hydrogène d'intensités diverses

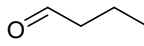
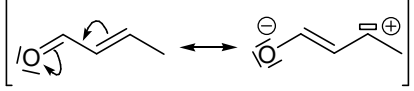
- **l'état géométrique du carbone modifie la force de la liaison.**

$\sigma_{\text{Ctétra-H}}$	(alcane)	entre 2810 et 3000 cm^{-1}
$\sigma_{\text{Ctri-H}}$	(alcène)	entre 3000 et 3100 cm^{-1}
$\sigma_{\text{Cdi-H}}$	(alcyne)	entre 3300 et 3310 cm^{-1}

- **la conjugaison affaiblit la force de la liaison.**

$\sigma_{\text{C=C}}$	(alcène)	entre 1625 et 1680 cm^{-1}
$\sigma_{\text{C=C}}$	(arènes, diènes conjugués)	entre 1450 et 1600 cm^{-1}
$\sigma_{\text{C=O}}$	(non conjuguée)	entre 1650 et 1840 cm^{-1}
$\sigma_{\text{C=C}}$	(conjuguée)	entre 1600 et 1690 cm^{-1}

Ex :

	
$\sigma_{\text{C=O}} = 1731 \text{ cm}^{-1}$	$\sigma_{\text{C=O}} = 1687 \text{ cm}^{-1}$

II.5 APPAREILLAGE

II.5.1 Spectromètre IR « classique », en transmission.

Ce type d'appareil fonctionne selon un schéma de principe analogue à celui du **spectrophotomètre UV-visible mono-faisceau** présenté plus haut.

Cet appareil historique, est de moins en moins utilisé car **l'acquisition des spectres**, qui nécessite un balayage en longueur d'onde, **est très longue**.

- Préparation de l'échantillon

Pour les cellules contenant l'échantillon, il faut choisir un matériau n'absorbant pas en IR, ce qui **exclut le verre**.

- Pour un composé **liquide**, ou en **solution** dans un solvant, on dépose **une goutte entre deux pastilles de chlorure de sodium** pour constituer un film de liquide.

- Pour un composé **solide**, on incorpore le **composé à du bromure de potassium anhydre**. La poudre obtenue est soumise à très forte pression (presse hydraulique) pour obtenir une pastille.

II.5.2 Spectromètre IR à transformée de Fourier (FTIR) avec ATR

C'est le type d'appareil le plus courant de nos jours et c'est celui dont nous disposons à Ginette.

Sans rentrer dans le détail technique et théorique, l'appareil met en jeu successivement les composantes suivantes :

- **source de lumière** contenant l'ensemble du spectre des longueurs d'onde à étudier.
- un **interféromètre de Michelson** permettant de **générer un faisceau incident** ;
- un **dispositif ATR (réflectance totale atténuée)** constitué d'un diamant sur lequel est déposé l'échantillon à étudier. Lors de la pénétration du faisceau incident dans le diamant, celui-ci subit une réflexion totale atténuée (à cause d'une onde évanescente créée dans l'échantillon) à l'interface entre le diamant et l'échantillon ;
- un **détecteur** permettant de **mesurer l'intensité du faisceau émergent** ;
- un **ordinateur** permettant, *via* une **transformation de Fourier**, de convertir les données brutes en **spectre $T = f(\sigma)$** .

- Préparation de l'échantillon

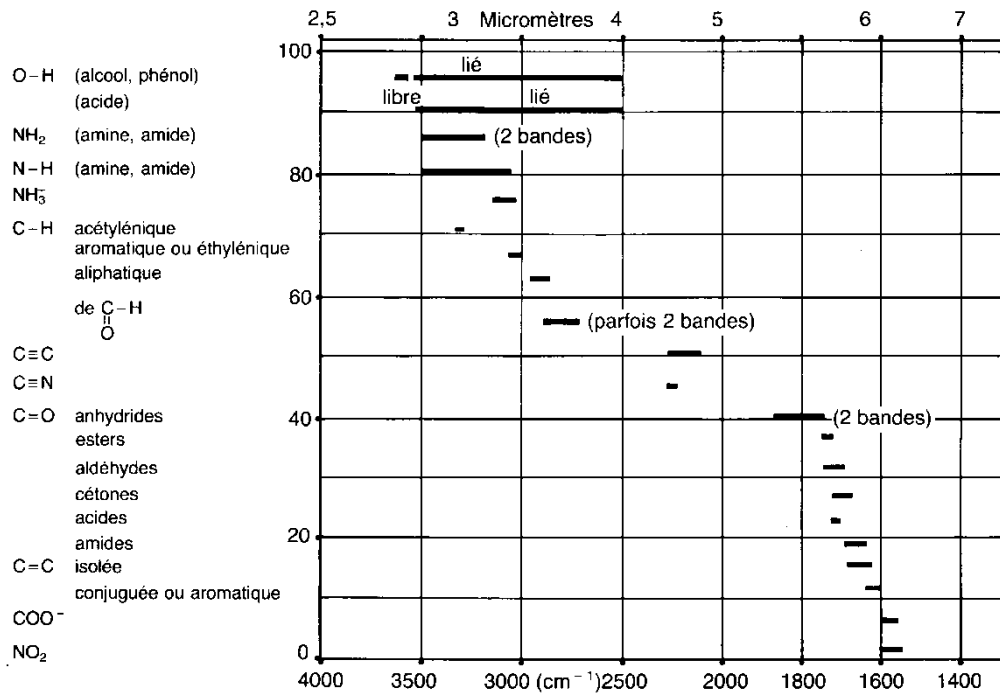
- Pour un composé **liquide**, on en dépose **une goutte sur le diamant** présent au centre du dispositif ATR.

- Pour un composé **solide**, on dépose **une pointe de spatule** du composé **sur le diamant** présent au centre du dispositif ATR. On l'**écrase** ensuite avec le bras de pression de façon à assurer un **bon contact** avec le diamant.

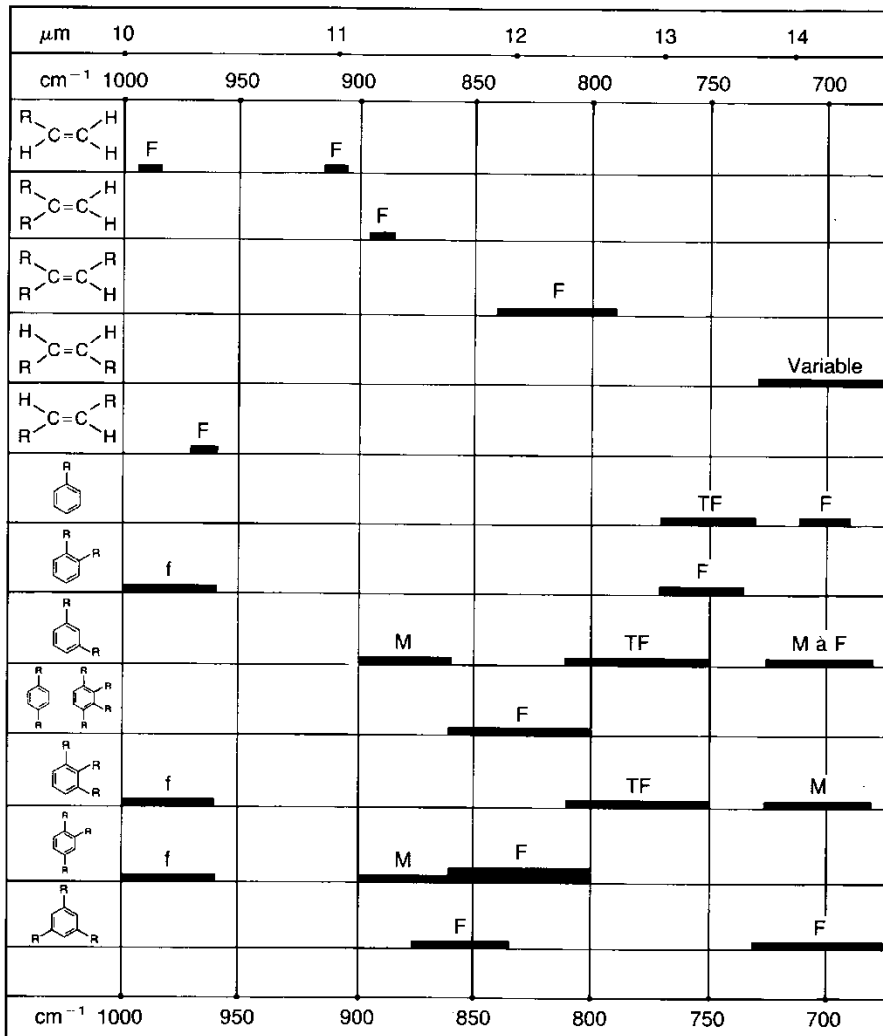
TABLES DE DONNEES IR

Liaison + environnement	Nature	Nbre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité
C _{tétra} -H	Valence	2810 – 3000	F
C _{tétra} -H (CH ₃)	Déformation	1365 – 1385	F
C _{tri} -H	Valence	3000 – 3100	m
C _{tri} -H	Déformation	790 – 960	F
C _{tri} -H (aromatique)	Valence	3030 – 3080	m
C _{tri} -H (aromatique) monosubstitué	Déformation hors du plan	690 – 770	F
		730 – 770	F
C _{tri} -H (aromatique) o-disubstitué	Déformation hors du plan	735 – 770	F
C _{tri} -H (aromatique) m-disubstitué	Déformation hors du plan	680 – 725	m
		750 – 810	F
C _{tri} -H (aromatique) p-disubstitué	Déformation hors du plan	800 – 860	F
C _{tri} -H (aromatique) 1,2,3-trisubstitué ...	Déformation hors du plan	685 – 720	m
		770 – 800	F
C _{tri} -H (aromatique) 1,2,4-trisubstitué ...	Déformation hors du plan	800 – 860	F
		860 – 900	m
C _{tri} -H (aromatique) 1,3,5-trisubstitué ...	Déformation hors du plan	675 – 730	F
		810 – 865	F
C _{tri} -H	Valence	2750 – 2900	m
C _{di} -H	Valence	3300 – 3310	m
O-H libre	Valence	3580 – 3670	F
O-H (alcools avec liaison H)	Valence	3200 – 3400	F
O-H (acides carboxyliques)	Valence	2500 – 3200	F
N-H (amines + imines)	Valence	3100 – 3500	m
N-H (amides)	Valence	3100 – 3500	F
C-C	Valence	1000 – 1250	F
C=C	Valence	1625 – 1680	m
C≡C	Valence	2100 – 2250	f
C=C (aromatique)	Valence	vers 1600	m
		vers 1500	m
Si le cycle est conjugué ces deux bandes sont déplacées vers les bas nombres d'onde (- 20 à - 40 cm ⁻¹) et elles deviennent F			
C-O	Valence	1050 – 1450	F
C=O (aldéhydes + cétones)	Valence	1650 – 1730	F
C=O (acides)	Valence	1680 – 1710	F
C=O (esters)	Valence	1700 – 1740	F
C=O (anhydrides)	Valence	1700 – 1840	F
		(2 bandes)	
C=O (amides)	Valence	1650 – 1700	F
C-N	Valence	1000 – 1400	F
C=N	Valence	1600 – 1680	F
C≡N	Valence	2120 – 2260	m.F
C - F	Valence	1000 – 1400	F
C - Cl	Valence	700 – 800	F
C - Br	Valence	600 – 750	F
C - I	Valence	500 – 600	F
N=O	Valence	1510 – 1580	F
		1325 - 1365	F
F = Forte ; m = moyenne ; f = faible			

Document 1. Table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation.



Document 2. Principales absorptions dans la zone 4000 - 1500 cm^{-1}



Document 3. Principales absorptions dans la zone 600 - 1000 cm^{-1}