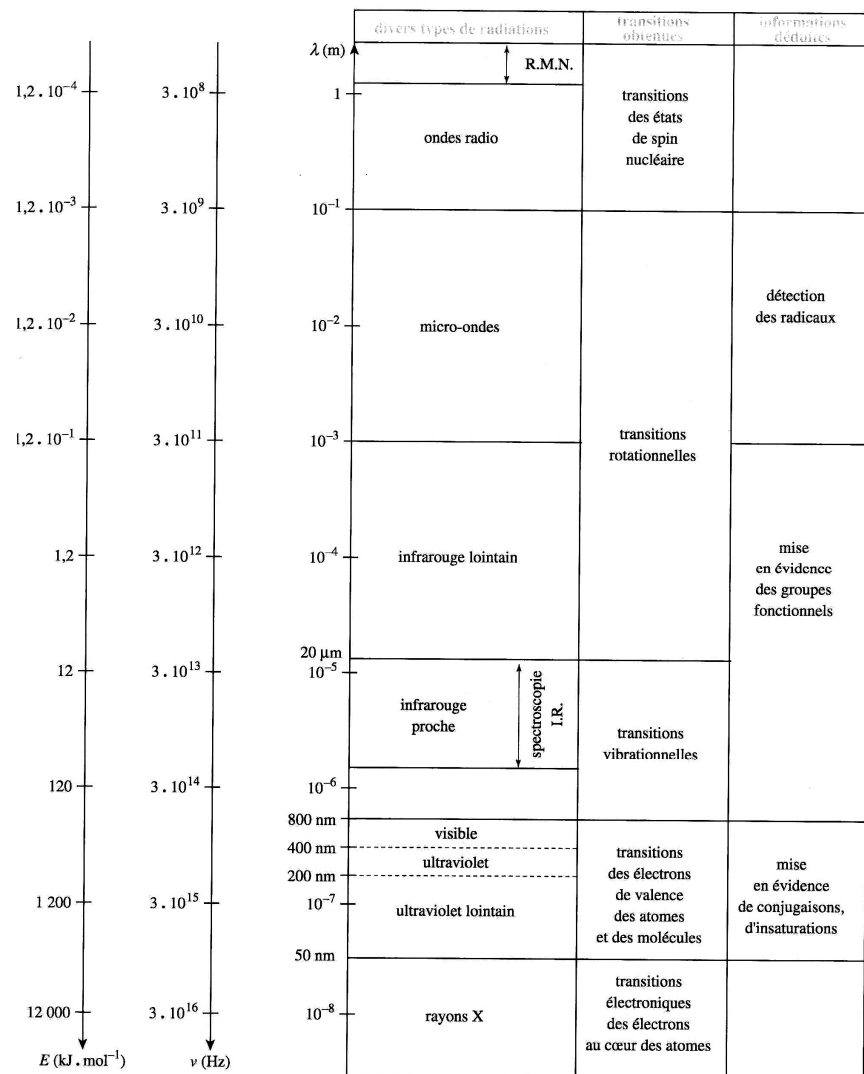
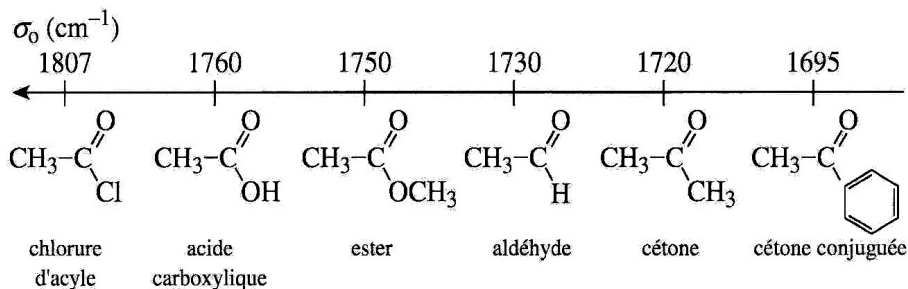


PC*



Spectre des radiations électromagnétiques, transitions occasionnées et renseignements déduits sur la molécule.

• La liaison C=O

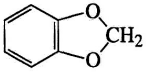






Tables spectroscopiques


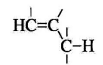

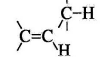

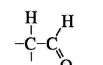

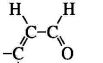

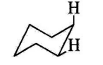

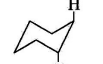



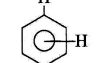
liaison	nature	nombre d'onde (cm^{-1})	intensité
O-H alcool libre	valence	3580 – 3670	F ; large
O-H alcool lié	valence	3200 – 3400	F ; large
N-H amine	valence	3100 – 3500	m
imine			
N-H amide	valence	3100 – 3500	F
C _{di} -H	valence	3300 – 3310	m ou f
C _{tri} -H	valence	3000 – 3100	m
C _{tri} -H aromatique	valence	3030 – 3080	m
C _{tét} -H	valence	2800 – 3000	F
C _{tri} -H aldéhyde	valence	2750 – 2900	m
O-H acide carboxylique	valence	2500 – 3200	F à m ; large
C≡C	valence	2100 – 2250	f
C≡N	valence	2120 – 2260	F ou m
C=O anhydride	valence	1700 – 1840	F ; 2 bandes
C=O chlorure d'acyle	valence	1770 – 1820	F
C=O ester	valence	1700 – 1740	F
C=O aldéhyde et cétone	valence	1650 – 1730	F
abaissement de 20 à 30 cm^{-1} si conjugaison			
C=O acide	valence	1680 – 1710	F
C=C	valence	1625 – 1685	m
C=C aromatique	valence	1450 – 1600	variable ; 3 ou 4 bandes
N=O	valence	1510 – 1580	F ; 2 bandes
C=N	valence	1325 – 1365	F
1600 – 1680			F
N-H amine ou amide	déformation	1560 – 1640	F ou m
C _{tét} -H	déformation	1415 – 1470	F
C _{tét} -H (CH ₃)	déformation	1365 – 1385	F ; 2 bandes
C-O	valence	1050 – 1450	F
C-C	valence	1000 – 1250	F
C-F	valence	1000 – 1040	F
C _{tri} -H aromatique monosubstitué	déformation	730 – 770	F ; 2 bandes
690 – 770			
C _{tri} -H aromatique o-disubstitué	déformation	735 – 770	F
750 – 810			F et m ; 2 bandes
C _{tri} -H aromatique m-disubstitué	déformation	680 – 725	
800 – 860			F
p-disubstitué	déformation	800 – 860	
C _{tri} -H aromatique trisubstitué	déformation	770 – 800	F et m ; 2 bandes
1,2,3		685 – 720	
1,2,4		860 – 900	F et m ; 2 bandes
		800 – 860	
1,3,5		810 – 865	F ; 2 bandes
		675 – 730	
C-Cl	valence	700 – 800	F
C-Br	valence	600 – 750	F
C-I	valence	500 – 600	F

F : fort ; m : moyen ; f : faible

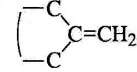
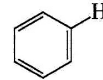
Table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation de quelques groupes fonctionnels. On distingue les atomes de carbone tétraogonaux (notés C_{tét}), trigonaux (notés C_{tri}) et digonaux (notés C_{di}).

CH ₃ -		-CH ₂ -		-CH<	
proton	δ	proton	δ	proton	δ
CH ₃ -C	0,9	-C-CH ₂ -C (cyclique)	1,3 1,5	-C-CHC (en tête de pont)	1,5 2,2
CH ₃ C-C-C=C	1,1	-C-CH ₂ -C-C=C	1,7		
CH ₃ -C-O	1,4	-C-CH ₂ -C-O	1,9	-C-CH-C-O	2,0
CH ₃ -C=C	1,6	-C-CH ₂ -C=C	2,3		
CH ₃ -Ar	2,3	-C-CH ₂ -Ar	2,7	-CH-Ar	3,0
CH ₃ -CO-R	2,2	-C-CH ₂ -CO-R	2,4	-C-CH-CO-R	2,7
CH ₃ -CO-Ar	2,6	-C-CH ₂ -CO-O-R	2,2		
CH ₃ -CO-O-R	2,0	-C-CH ₂ -O-R	3,4		
CH ₃ -CO-O-Ar	2,4	-C-CH ₂ -O-H	3,6		
CH ₃ -CO-N-R	2,0	-C-CH ₂ -O-Ar	4,3		
CH ₃ -O-R	3,3	-C-CH ₂ -O-CO-R	4,1	-C-CH-O-R	3,7
CH ₃ -OH	3,4	-C-CH ₂ -N	2,5	-C-CH-O-H	3,9
CH ₃ -O-Ar	3,8	-C-CH ₂ -S	2,4		
CH ₃ -O-CO-R	3,7	-C-CH ₂ -NO ₂	4,4	-C-CH-O-CO-R	4,8
CH ₃ -N	2,3	-C-CH ₂ -C-NO ₂	2,1	-C-CH-N	2,8
CH ₃ N [⊕]	3,3	-C-CH ₂ -C=C-CO	2,4		
CH ₃ S	2,1	-C=C(CH ₂)-CO	2,4		
			5,9		
CH ₃ -C-NO ₂	1,6			-C-CH-NO ₂	4,7
CH ₃ -C=C-CO	2,0	-C-CH ₂ -Cl	3,4	-C-CH-Cl	4,0
-C=C(CH ₃)-CO	1,8	-C-CH ₂ -C-Cl	1,7	-C-CH-C-Cl	1,6
		-C-CH ₂ -Br	3,3	-C-CH-Br	3,6
		-C-CH ₂ -C-Br	1,7	-C-CH-C-Br	1,7
CH ₃ -Cl	3,0	-C-CH ₂ -I	3,1	-C-CH-I	4,2
CH ₃ -C-Cl	1,5	-C-CH ₂ -C-I	1,8	-C-CH-C-I	1,9
		-C-CH ₂ -CN	2,3	-C-CH-CN	2,7
CH ₃ -Br	2,7	-CO-CH ₂ -Ar	3,8		
CH ₃ -C-Br	1,7		0,3		0,7
CH ₃ -I	2,2		2,6		3,1
CH ₃ -C-I	1,9				
CH ₃ -CN	2,0				

Déplacement chimique des protons des groupes méthyle, méthylène et méthyne, dans l'échelle δ (en ppm), le T.M.S. (Me₄Si) étant pris comme référence.

molécule	J _{AB}	molécule	J _{AB}
	12 - 15 Hz		0 - 2 Hz
	2 - 10 Hz		4 - 10 Hz
	5 - 7 Hz (M: O, S, N)		1 - 3 Hz
	0 Hz		6 - 8 Hz
	0 Hz (M: O, S, N)		2 - 7 Hz
	6 - 14 Hz		5 - 14 Hz
	13 - 18 Hz		3 - 5 Hz
	1 - 3 Hz		J _{ortho} : 7 - 10 Hz J _{méta} : 2 - 3 Hz J _{para} : 1 Hz

Quelques valeurs de constantes de couplage J_{AB}.

proton	δ	proton	δ
	4,6	-CO-OH	8,5 ~ 13
-C=CH ₂	5,3	C=C-OH	11 ~ 17
-C=CH-	5,1		7,2
-C=CH- (cyclique)	5,3	R-OH	0,7 ~ 5,5
R-C≡C-H	3,1	Ar-OH	4,2 ~ 7,1
Ar-H	9,0 ~ 7,0	R-NH-	0,6 ~ 5
-C=CH-CO	5,9	Ar-NH-	2,9 ~ 4,7
-CH=C-CO	6,8	R-CO-NH-	5 ~ 8,5
R-CHO	9,9		
Ar-CHO	9,9		
H-CO-O-	8,0	CHCl ₃	7,2
H-CO-N	8,0	H ₂ O	≈ 5,0