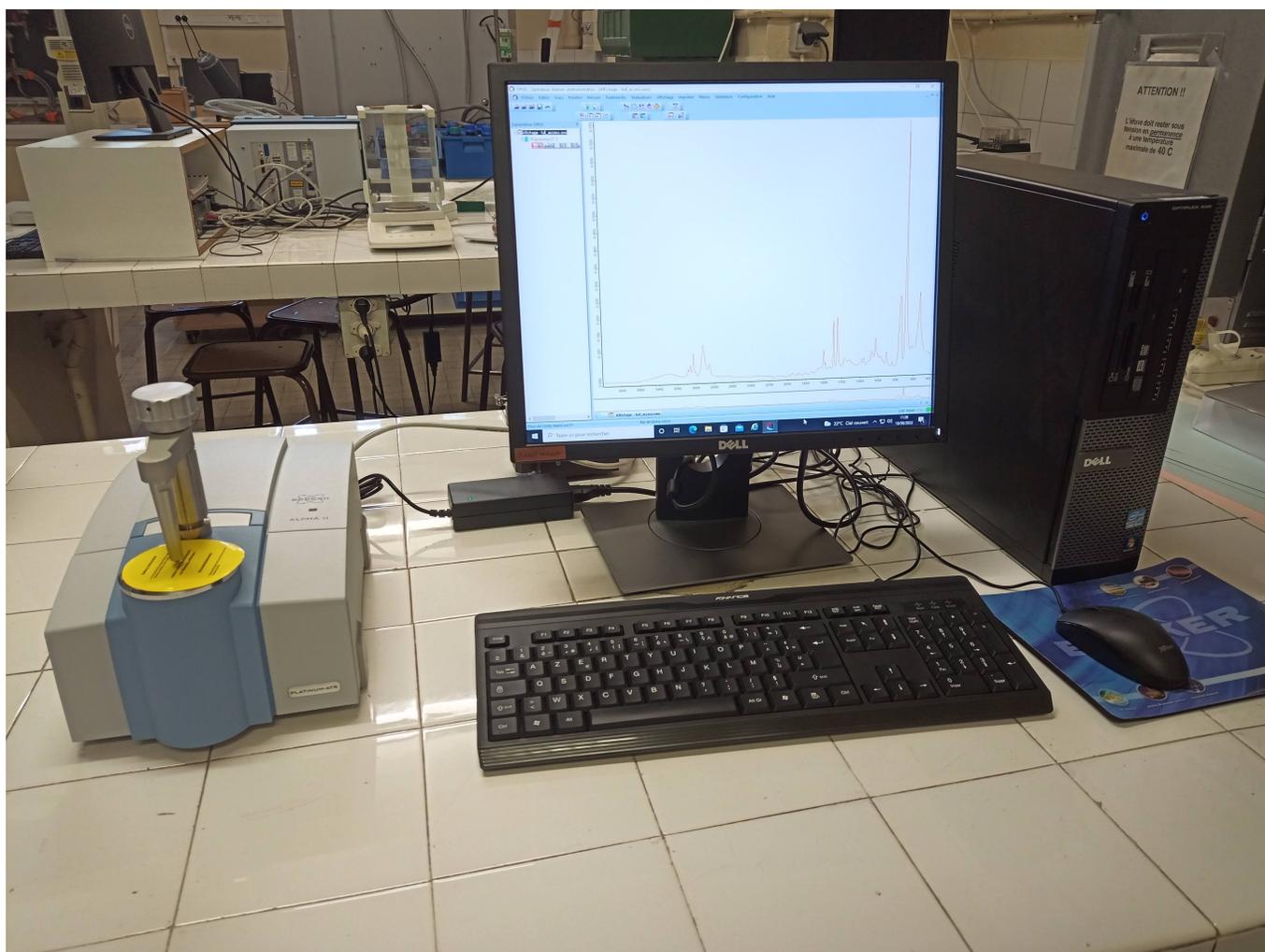


2^{ème} année BTS Bioanalyses et Contrôles

Théorie IRTF



L. GODIN
<http://ligodin.free.fr>

godin.lionel@orange.fr

TP n°3 : Dosage de la vitamine C par spectrophotométrie IRTF

4.1 ABSORPTION DES RADIATIONS ELECTROMAGNÉTIQUES	2
4.1.1. Le rayonnement e.m	2
4.1.2. Niveaux d'énergie d'une molécule	2
4.2 LA SPECTROPHOTOMÉTRIE IR	2
4.2.1. Présentation des spectres IR	2
4.2.2. Interprétation	3
4.2.2.1. Vibration des molécules diatomiques	3
4.2.2.2. Vibration des molécules polyatomiques	3
4.2.3. Bandes d'absorption caractéristiques	3
4.2.4. Exploitation d'un spectre IR	4
4.3 LA MOLÉCULE D'ACIDE ASCORBIQUE	4
4.4 LE SPECTRE IR ET L'ACIDE ASCORBIQUE	5
4.5 LA SPECTROPHOTOMÉTRIE IR À TRANSFORMÉE DE FOURIER	6
4.5.1. Principe de la spectrophotométrie IR à Transformée de Fourier (IRTF ou FTIR)	6
4.5.2. Principe de la Transformée de Fourier	8
4.5.3. Spectres obtenus en Réflexion Totale Atténuée (ATR)	9
4.5.3.1. Principe de la méthode	9
4.5.3.2. Dispositif ATR	11
4.5.3.3. Spectres de Réflexion Totale Atténuée	11
ANNEXE 1 : INTERPRÉTATION DES SPECTRES IR	12
ANNEXE 2 : BANDES CARACTÉRISTIQUES IR	15

4.1. ABSORPTION DES RADIATIONS ELECTROMAGNETIQUES

4.1.1. Le rayonnement électromagnétique

- L'énergie E du photon s'exprime par :

$$E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} = h \cdot c \cdot \sigma$$

Pour une mole de photons, $E = N_A \cdot h \cdot \nu$ en $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

4.1.2. Niveaux d'énergie d'une molécule

- Une molécule possède une énergie cinétique de translation non quantifiée responsable de la pression exercée sur les parois d'un récipient.
- La molécule possède aussi une **énergie propre** quantifiée :

$$E = E_r + E_v + E_e$$

Avec $\Delta E_r \ll \Delta E_v \ll \Delta E_e$

- Pour un **changement de niveau d'énergie rotationnelle** : $\Delta E_r = 0,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ (IR lointain et micro-ondes)
- Pour un **changement de niveau d'énergie vibrationnelle** : $\Delta E_v = 10 \text{ à } 50 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ (IR)
- Pour un **changement de niveau d'énergie électronique** : $\Delta E_e = 500 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ (UV et Visible)
- Pour l'analyse quantitative, on utilise la **Loi de Beer-Lambert** : $I_s = I_0 \cdot 10^{-\epsilon \lambda \cdot L \cdot C}$

$$\text{On définit : } T = \frac{I_s}{I_0} = 10^{-\epsilon \lambda \cdot L \cdot C} \quad \text{et} \quad A = -\log T = \epsilon \lambda \cdot L$$

4.2. LA SPECTROPHOTOMETRIE IR

4.2.1. Présentation des spectres IR

Lors de l'étude d'un spectre IR, il faut toujours distinguer deux domaines :

- La région qui correspond aux plus grandes valeurs de σ ($\sigma > 1300 \text{ cm}^{-1}$) où apparaissent les bandes caractéristiques de certaines liaisons.
- La région pour laquelle $\sigma < 1300 \text{ cm}^{-1}$, qui est parfaitement caractéristique du composé, et non seulement des fonction présentes.

4.2.2. Interprétation

4.2.2.1. Vibration des molécules diatomiques

• **Modèle classique : modèle de l'oscillateur harmonique** : les masses oscillent autour de leur position d'équilibre avec une fréquence ν_0 , le nombre d'onde correspondant est :

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Lorsqu'une molécule diatomique est soumise à l'action d'une onde e.m caractérisée par la fréquence ν , il y a **résonance**, c'est-à-dire absorption lorsque $\nu = \nu_0$, le nombre d'onde correspondant est :

$$\sigma_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

• **Modèle quantique** : $E_\nu = h\nu_0(\nu + \frac{1}{2})$

Les transitions entre niveaux vibrationnels s'accompagnent aussi de transitions entre niveaux rotationnels, c'est la raison pour laquelle, on observe des **bandes d'absorption** plus ou moins larges.

Toutes les liaisons ne donnent pas d'absorption en IR : une étude plus complète montre qu'il faut une **variation du moment dipolaire de la molécule pour observer une absorption notable : les liaisons symétriques n'absorbent que très peu.**

4.2.2.2. Vibration des molécules polyatomiques

• Lors des **vibrations d'élongation** ou de **valence (stretching)**, la distance entre les atomes augmente et diminue, ceux-ci restant dans l'axe de la liaison.

• Lors des **vibrations de déformation angulaire (bending)**, les angles des liaisons varient.

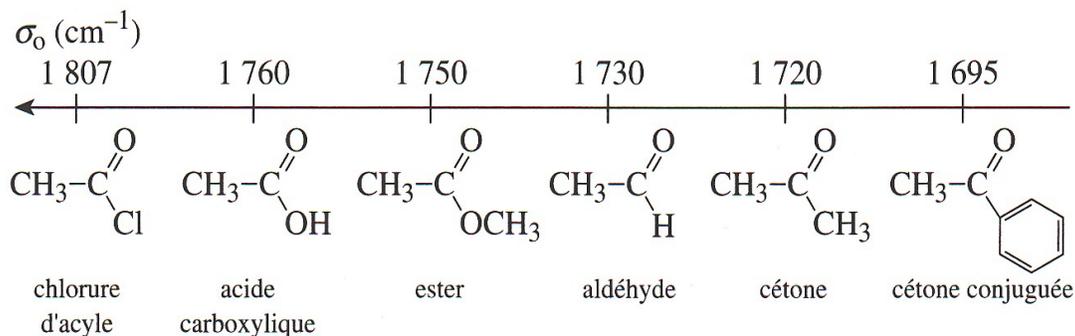
Les modes de vibrations peuvent être symétriques ou asymétriques.

Pour une molécule comportant n atomes, il y a $(3n - 6)$ modes de vibration et $(3n - 5)$ si la molécule est linéaire.

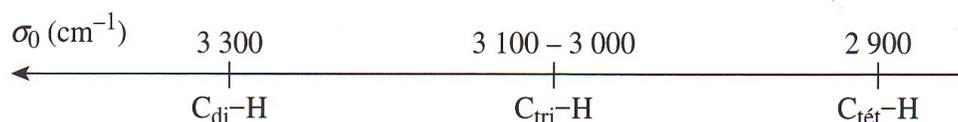
4.2.3. Bandes d'absorption caractéristiques

Liaisons	C=O	O-H	N-H	C=C	C _{tér} -H	C _{tri} -H	C _{di} -H
σ (cm ⁻¹)	1700	3550 dépendant de l'association par liaison H	3200	1650	2900	3100	3500

Cas de la liaison C=O :



Cas de la liaison C-H :



σ_0 prend des valeurs nettement différentes lorsque la liaison C-H correspond à un alcane ($\text{C}_{\text{tét}}-\text{H}$), un alcène ($\text{C}_{\text{tri}}-\text{H}$) ou un alcyne ($\text{C}_{\text{di}}-\text{H}$).

Remarque : le déplacement vers les nombres d'onde plus faibles s'explique par le fait que la liaison H affaiblit la liaison covalente O-H.

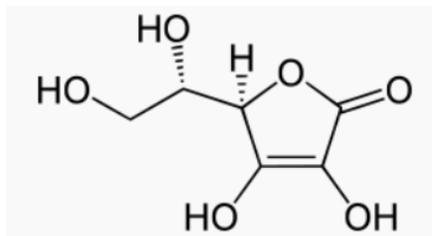
4.2.4. Exploitation d'un spectre IR (Cf annexes 1 et 2)

Région 4000 – 1300 cm^{-1} dans laquelle les bandes observées sont relativement caractéristiques du type de liaison.

Région 1300 – 600 cm^{-1} : **empreinte digitale**.

4.3. LA MOLECULE D'ACIDE ASCORBIQUE

L'**acide ascorbique**, ou acide oxo-3-gulofuranolactone (forme **énolique**), est un **acide organique** ayant des propriétés **antioxydantes**. Il est présent sous une forme **énantiomériquement** pure (acide L-ascorbique ou **vitamine C**) dans les **citrons**, les jus de fruits et les légumes frais. Le nom « ascorbique » vient du préfixe grec *a*(privatif) et de *scorbut*, signifiant littéralement « anti-scorbut » qui est une maladie due à une déficience en vitamine C.



Formule topologique de l'acide L-ascorbique

L'acide ascorbique est un diacide (pK_a de 4,1 et 11,8) et un réducteur.

L'acide ascorbique ayant deux atomes de carbone asymétriques et étant sans plan de symétrie, il se présente sous la forme de deux paires d'énantiomères, diastéréoisomères entre elles. Une paire d'énantiomères est connue sous le nom d'acide ascorbique tandis que l'autre est distinguée par le nom d'acide isoascorbique (aussi appelé acide érythorbique).



Boîte de comprimé de vitamine C effervescent

On utilise l'acide ascorbique dans l'industrie agroalimentaire en tant qu'antioxydant empêchant la prolifération de bactéries qui pourraient dégrader le produit (surtout dans la nourriture à conservation longue et non réfrigérée). Il est aussi utilisé :

- Dans certaines bières ;
- Dans le vin, pour son pouvoir réducteur ; en effet, en milieu acide, il fixe l'oxygène dissous, à la température ordinaire, en formant l'acide déhydro-ascorbique. Il permet d'une part d'économiser une petite quantité d'anhydrides sulfureux libre pour éviter l'oxydation des vins et de plus, il a des applications pratiques intéressantes en protégeant le vin de la casse ferrique lors du dernier stade, la mise en bouteille.
- Dans le traitement de certains fruits afin d'éviter leur oxydation (ex. : mirabelles) ;
- Dans certaines farines ou dans les adjuvants, afin d'améliorer la panification. Paradoxalement, il a un effet oxydant dans la pâte, augmentant le volume et donnant une croûte brillante et une mie plus blanche ;
- Dans certains jus de fruits (ex : Tropico) et sodas (ex. Orangina) ;
- Dans certaines boissons au café (ex : Starbucks).

Il est aussi utilisé par des toxicomanes comme diluant de l'héroïne brune ou du crack.

La vitamine C à hautes doses (jusqu'au seuil limite d'innocuité, de 2 000 milligrammes par jour) n'est généralement pas toxique pour les adultes en bonne santé. Parfois, des doses plus élevées provoquent des nausées ou une diarrhée et perturbent l'équilibre de l'activité antioxydante dans l'organisme.

4.4. SPECTRE IR ET ACIDE ASCORBIQUE

L'acide ascorbique possède des fonctions caractéristiques, hydroxyde OH, ester cyclique ainsi qu'une fonction énole (alcène avec fonction alcool en position vinylique), Chacune de ces fonctions vibreront à des nombres d'onde caractéristiques dans le MIR.

4.5. LA SPECTROPHOTOMETRIE IR A TRANSFORMEE DE FOURIER

La spectrométrie FTIR a connu un essor considérable au cours de ces 30 dernières années grâce à la rapide évolution de l'informatique.

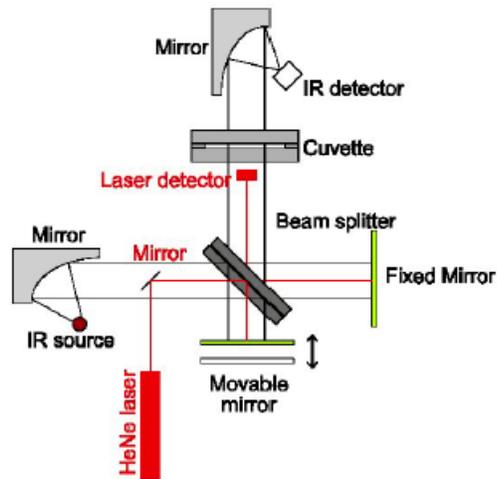
4.5.1. Principe de la spectrophotométrie IR à Transformée de Fourier (IRTF ou FTIR)

Comparée aux techniques traditionnelles, l'interférométrie est une méthode très compétitive. Toutes les fréquences de la source infrarouge sont traitées ensemble sans sélection préalable, ce qui permet de capter le spectre entier en moins d'une seconde. Contrairement aux méthodes d'analyse par réaction colorée ou enzymatique qui réagissent avec une molécule donnée, l'analyse par infrarouge est une méthode d'analyse structurale qui révèle la nature des liaisons entre atomes dans une molécule. Les composés organiques ont en effet la particularité de posséder des liaisons inter-atomiques qui entrent en vibration sous l'action d'un rayonnement infrarouge à des longueurs d'onde caractéristiques.

Ce phénomène s'accompagne d'une consommation d'énergie lumineuse à la longueur d'onde considérée. L'IRTF permet de mesurer les absorbances d'énergie des liaisons chimiques (fonctions alcool, acides, méthyles, méthylène...) de tous les composants présents dans les produits analysés et de les corréler à leurs concentrations, puisque l'intensité de l'absorption est directement proportionnelle à la concentration de la molécule considérée.

La longueur d'onde d'absorption va dépendre de la liaison elle-même (C-H, C-O, C-C,...) mais aussi de l'environnement moléculaire dans lequel elle se trouve. Ainsi, une molécule donnée va présenter plusieurs longueurs d'onde d'absorption caractéristiques dans le spectre infrarouge.

En se basant sur le principe des interférences lumineuses, qui modulent l'amplitude d'un signal comme une fonction de la différence de trajet entre deux sources interférentes, un interféromètre enregistre l'intensité de la lumière captée par le détecteur comme une fonction de la différence de trajet générée par le déplacement d'un miroir mobile. La mesure du déplacement minimale de ce miroir est effectuée au moyen d'un rayon laser qui suit le même trajet que le rayon infrarouge.



Cependant, à ce niveau, l'interférogramme se réfère à la position du miroir mobile et non à la longueur d'onde qui est intéressante.

Le faisceau infrarouge de la source I.R. frappe le séparateur de faisceaux qui envoie la moitié du faisceau à un miroir fixe et l'autre moitié à un miroir mobile. De ces miroirs, les faisceaux I.R. se reflètent et se recombinent avant d'atteindre le détecteur.

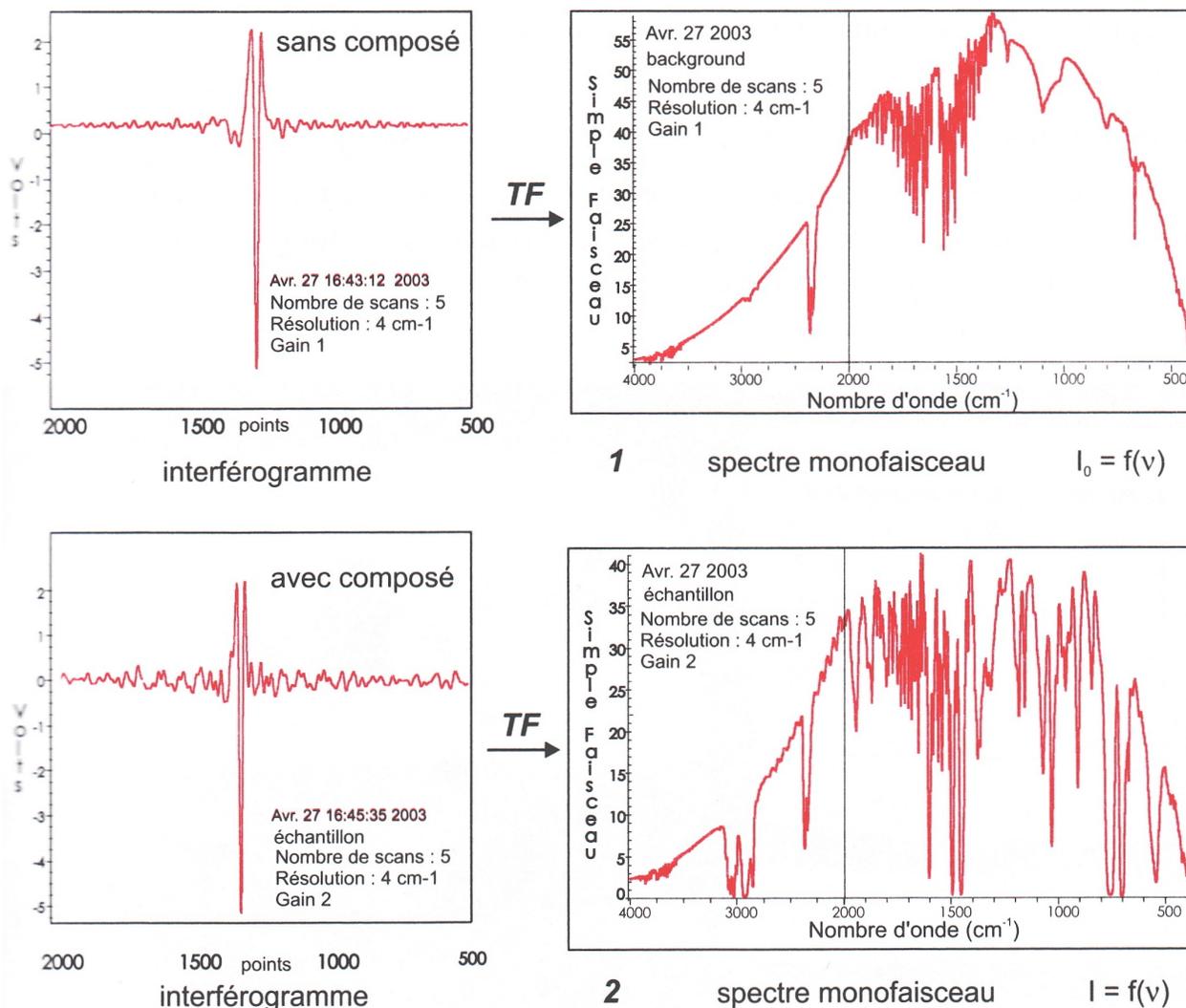
Toutes les fréquences I.R. voyagent en même temps dans l'interféromètre et des déplacements rapides de courte distance du miroir permettent la formation simultanée de la totalité du spectre I.R.

4.5.2. Principe de la Transformée de Fourier

Le Principe de Transformation de Fourier (TF) se base sur le fait que chaque fonction peut être décomposée en une somme de fonctions sinusoïdales, chaque fonction sinusoïdale étant définie par deux valeurs : sa fréquence (longueur d'ondes) et son amplitude (intensité).

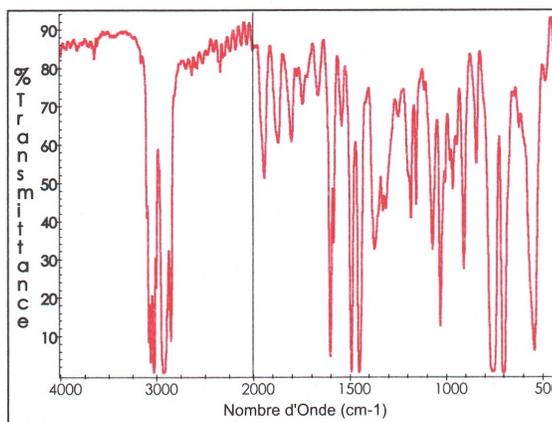
La Transformation de Fourier est une procédure mathématique qui permet de décomposer un interférogramme en une somme de fonctions sinusoïdales, représentant chacune une onde donnée. La fréquence et l'amplitude de ces ondes sont calculées à partir des données de l'interférogramme.

En quelques secondes, l'interférogramme est recueilli par le spectromètre, traité par le calcul de transformation de Fourier et converti pour donner le spectre entier de l'échantillon.



A partir de là, nous revenons à la théorie générale de la spectrométrie, de l'intensité lumineuse, de la transmission, de l'absorption et de leur relation avec les éléments constitutifs d'un échantillon spécifique.

le principe de cet enregistrement correspond à une méthode simultanée en ce sens qu'elle traite le signal de manière globale. Chaque point du spectre a été calculé à partir de toutes les données.



Spectre après calcul du rapport des émittances de (2) et de (1).

Séquence d'obtention d'un spectre pseudodouble-faisceau avec un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier.

L'appareil enregistre et met en mémoire deux spectres qui représentent les variations de I_0 (le blanc) et de I (l'échantillon) en fonction du nombre d'onde (ce sont les spectres en émittance 1 et 2); puis il calcule le spectre conventionnel, identique à celui que donne n appareil de type double faisceau, en effectuant le rapport $T = I/I_0$, pour chaque nombre d'onde. L'absorption atmosphérique (CO_2 et H_2O) se trouve ainsi éliminée. Les illustrations correspondent à la réalisation d'un spectre d'un film de polystyrène.

4.5.3. Spectres obtenus en ATR (Attenuated Total Reflexion)

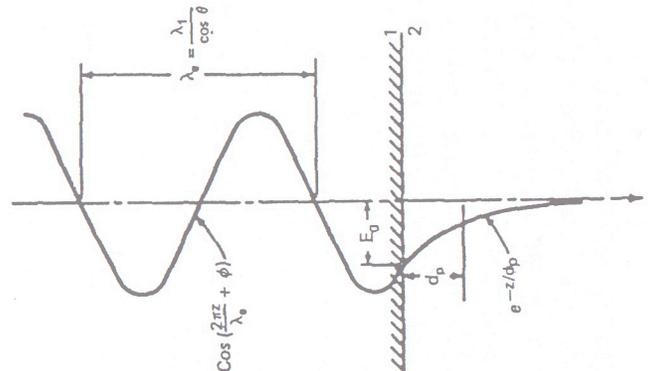
La spectroscopie en moyen-infrarouge par la méthode ATR permet une analyse rapide et facile des échantillons, et assure une bonne reproductibilité des mesures.

C'est une technique qui permet d'obtenir le spectre IR d'échantillons difficiles à manipuler tels que des solides à faible solubilité, des films, des pâtes, des adhésifs et des poudres et des composés contenant de l'eau.

4.5.3.1. Principe de la méthode

Quand un rayonnement passe d'un milieu dense vers un milieu moins dense, l'intensité de l'onde réfléchie \nearrow lorsque l'angle d'incidence \nearrow . Au-delà d'un certain angle critique, **la réflexion est totale**. On a montré en théorie et expérimentalement qu'au cours du phénomène de réflexion, le rayonnement pénètre légèrement dans le milieu moins dense avant que la réflexion ne se produise.

La profondeur de pénétration qui peut varier entre une fraction de la longueur d'onde et plusieurs fois la longueur d'onde dépend de l'indice de réfraction des deux milieux en présence, de l'angle d'incidence et de la longueur d'onde.



Ce rayonnement est appelé **onde évanescente**. Si le milieu moins dense absorbe l'onde évanescente, on observe une atténuation du faisceau aux longueurs d'onde des pics d'absorption. Ce phénomène est connu sous le nom de **réflexion totale atténuée (ATR, Attenuated Total Reflexion)**.

La profondeur de pénétration d_p peut être définie comme la profondeur atteinte pour la mi-valeur de l'amplitude de l'onde évanescente (soit approximativement 37 % de l'intensité de l'énergie d'origine)

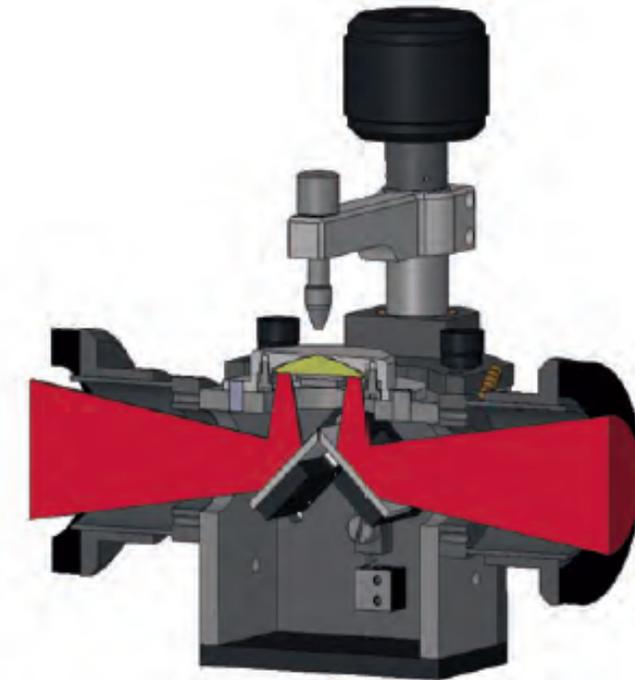
$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi \cdot n_1 \sqrt{\sin^2 \theta - n_{2/1}^2}}$$

- λ : longueur d'onde de la radiation incidente ;
- θ : angle d'incidence $> \theta_c$;
- $n_{2/1}$: indice relatif.

La profondeur de pénétration \nearrow très rapidement lorsque l'angle d'incidence se rapproche de l'angle critique. Elle \nearrow également avec l' \nearrow de la longueur d'onde, ce qui a pour effet d'observer des bandes plus faibles qu'elles ne devraient vers les faibles longueurs d'onde. Cependant ce phénomène n'est vrai que pour des échantillons épais ($e > d_p$), mais ne s'applique plus pour des échantillons minces ($e < d_p$). La profondeur d_p est aussi dépendante de l'indice relatif $n_{2/1}$. Par conséquent, elle sera améliorée avec un milieu d'incidence de réfraction élevé par rapport à celui du milieu extérieur.

4.5.3.2. Dispositif ATR

La figure représente le schéma du dispositif ATR PIKE :



MIRacle – High Throughput and Efficient Optical Design

L'échantillon (ici un liquide) est placé sur la face opposée d'un matériau transparent cristallin d'indice de réfraction élevée. On utilise ici un cristal diamant ($n = 2,41$).

Un réglage judicieux de l'angle d'incidence force le rayonnement à subir de nombreuses réflexions internes lors de sa traversée du cristal avant d'atteindre le détecteur. Une absorption et une atténuation se produisent à chacune de ces réflexions.

4.5.3.3. Spectres de réflexion totale atténuée

Les spectres ATR sont semblables, mais non identiques aux spectres classiques d'absorption. En général, on observe les mêmes bandes, dont les hauteurs relatives sont toutefois différentes. Les absorbances dépendent de l'angle d'incidence, de l'indice de réfraction de l'efficacité de recouvrement du cristal et de la longueur d'onde.

La profondeur de pénétration d_p est une fonction \nearrow de la longueur d'onde. Par conséquent, on observe une \searrow de d_p quand $\bar{\nu} \nearrow$. Cela se traduit par une \searrow relative des bandes d'absorption pour un spectre ATR quand $\bar{\nu} \nearrow$.

La plupart des spectrophotomètres IRTF sont équipés d'un **programme de correction ATR** qui permet de compenser ce phénomène et de donner un aspect très proche de ceux obtenus par transmission.

L'un des avantages le plus important de l'ATR réside dans le fait qu'elle permet d'obtenir des spectres d'absorption de nombreux types d'échantillons avec un minimum de préparation. Les fils, laines, les tissus, et les fibres peuvent être étudiés par simple pression sur un cristal dense.

Les pâtes, les poudres ou les suspensions peuvent être traitées de la même façon.

On peut aussi analyser les solutions aqueuses, le liquide est simplement déposé à la surface du cristal.

ANNEXE 1 :

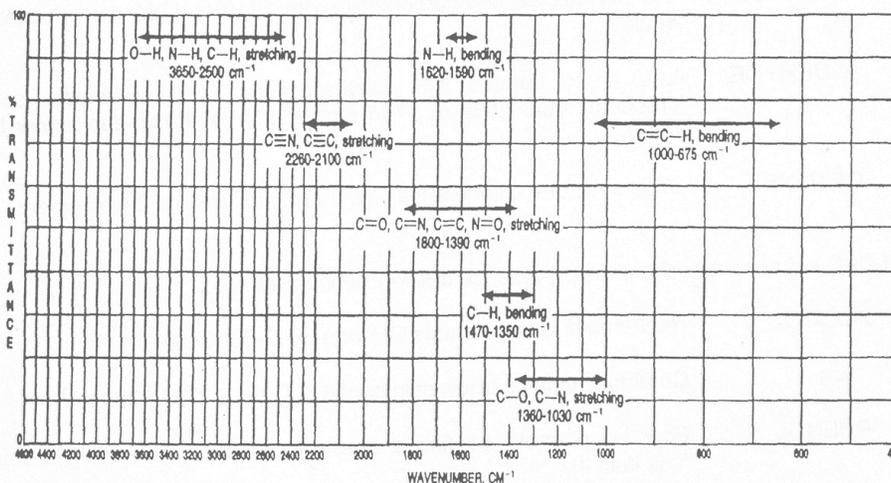
INTERPRÉTATION DES SPECTRES IR

INTERPRÉTATION DES SPECTRES

COMMENT FAIRE L'ANALYSE D'UN SPECTRE INFRAROUGE:

Il est utile de savoir sur quoi se concentrer lorsqu'on doit faire l'analyse d'un spectre infrarouge. Généralement, vous pouvez diviser le spectre en deux sections. La **section de droite** ($<1500\text{ cm}^{-1}$) est appelée "**empreinte digitale**" parce qu'elle comprend un très grand nombre de bandes aux formes variées. Si toutes les bandes de cette région se retrouvent dans deux spectres IR (aux même positions et intensités relatives), vous pouvez conclure avec confiance qu'il s'agit de spectres du même composé. Le nombre important de bandes rend cependant l'analyse de cette section passablement ardue. De plus la nature des bandes qui se retrouvent dans cette région du spectre révèle peu d'information structurale. Vous pouvez donc, initialement, ignorer le côté droit du spectre et concentrer votre analyse sur le côté gauche.

La **section de gauche** ($>1500\text{ cm}^{-1}$) comporte la plupart des bandes qui sont caractéristiques de **groupes fonctionnels**. La présence ou l'absence de bandes pour les liens C=O, O-H, N-H, C=C, C C, C N et NO₂ est généralement évidente et procure de l'information structurale importante. Il est aussi souvent inutile d'analyser de façon très détaillée les absorptions CH vers 3000 cm^{-1} puisque presque tous les composés organiques ont des absorptions dans cette région.



RÉGION DES
GROUPES FONCTIONNELS

RÉGION DE
L'EMPREINTE DIGITALE

Vous trouverez à la page suivante un protocole à suivre pour déterminer la présence de différents groupes fonctionnels communs à l'aide d'un spectre infrarouge.

4. INTERPRÉTATION DES SPECTRES

PROTOCOLE À SUIVRE POUR DÉTERMINER LA PRÉSENCE DE GROUPES FONCTIONNELS:

1. Un groupe carbonyle est-il présent?

Le groupe C=O génère une bande intense dans la région entre 1820 et 1660 cm^{-1} . Cette bande est souvent la plus intense du spectre et de largeur moyenne. Elle est généralement très évidente!

2. Si C=O est présent, déterminez quel type en recherchant les bandes suivantes:

ACIDE Un groupe OH est-il aussi présent? Recherchez une bande large vers 3400-2400 cm^{-1} .

AMIDE Un groupe NH est-il aussi présent? Recherchez une bande d'intensité moyenne vers 3500 cm^{-1} . Si présent, le pic est-il simple (NH) ou double (NH_2)?

ESTER Un lien C-O est-il présent? Recherchez une bande intense vers 1300-1000 cm^{-1} .

ANHYDRIDE Y-a-t-il deux bandes carbonyles (vers 1810 et 1760 cm^{-1}), plutôt qu'une seule?

ALDÉHYDE Les deux bandes CH caractéristique d'un aldéhyde sont-elles présentes vers 2850 et 2750 cm^{-1} (i.e. à la droite des autres bandes CH)?

CÉTONES Vous avez une cétone si les cinq autres options ont été éliminées.

3. Si C=O est absent, recherchez la présence des fonctions suivantes:

ALCOOL Recherchez la large bande OH vers 3600-3300 cm^{-1} .

ou Confirmez cela en trouvant la bande C-O vers 1300-100 cm^{-1} .

PHÉNOL Pour les phénols, confirmez aussi la présence d'un cycle aromatique (voir item 4).

4. Des DOUBLES LIAISONS ou des CYCLES AROMATIQUES sont-ils présents?

Les liens C=C génèrent une bande faible vers 1650 cm^{-1} .

Des bandes moyennes à fortes dans la région de 1650 à 1450 cm^{-1} indiquent souvent la présence d'un cycle aromatique.

La présence de bandes CH à la gauche de 3000 cm^{-1} (=C-H) confirme la présence d'une ou plusieurs insaturations.

4. INTERPRÉTATION DES SPECTRES

PROTOCOLE À SUIVRE POUR DÉTERMINER LA PRÉSENCE DE GROUPES FONCTIONNELS (suite):

5. Des TRIPLES LIAISONS sont-elles présentes?

Les NITRILES ont une bande fine d'intensité moyenne (C N) vers 2250 cm^{-1} .

Les ALCYNES ont une bande fine de faible intensité (C C) vers 2150 cm^{-1} . Recherchez aussi la présence de la bande C-H vers 3300 cm^{-1} afin de déterminer si l'alcyne est terminal ou pas.

6. Le groupe NITRO est-il présent?

Recherchez la présence de deux bandes NO_2 intenses vers $1600\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$ et $1390\text{-}1300\text{ cm}^{-1}$.

7. Si votre analyse n'a révélé la présence d'aucun de ces groupes fonctionnels, vous avez probablement un ALCANE.

Vous devriez avoir un spectre assez simple avec des bandes CH à la droite de 3000 cm^{-1} , ainsi que quelques autres bandes vers 1450 cm^{-1} et 1375 cm^{-1} .

ANNEXE 2 :

BANDES CARACTÉRISTIQUES IR

Classes fonctionnelles	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité	Attribution
Alcanes (vibrations d'élongation)	2850-3000	forte	CH ₃ , CH ₂ & CH ; 2 ou 3 bandes
Alcanes (vibrations de déformation)	1350-1470	moyenne	CH ₂ & CH ₃ déformation
Alcanes (vibrations de déformation)	1370-1390	moyenne	CH ₃ déformation
Alcanes (vibrations de déformation)	720-725	faible	CH ₂ balancement
Alcanes (vibrations de déformation)	880-995	forte	=C-H & =CH ₂
Alcènes (vibrations d'élongation)	3020-3100	moyenne	=C-H & =CH ₂ (bande généralement fine)
Alcènes (vibrations d'élongation)	1630-1680	variable	C=C (la symétrie réduit l'intensité)
Alcènes (vibrations d'élongation)	1900-2000	forte	C=C vibration d'élongation asymétrique
Alcènes (vibrations de déformation)	780-850	moyenne	(déformation hors du plan)
Alcènes (vibrations de déformation)	675-730	moyenne	cis-RCH=CHR
Alcynes (vibrations d'élongation)	3300	forte	C-H (généralement fine)
Alcynes (vibrations d'élongation)	2100-2250	variable	C=C (la symétrie réduit l'intensité)
Alcynes (vibrations de déformation)	600-700	forte	C-H déformation
Arènes (vibrations d'élongation)	3030	variable	C-H (cela peut être plusieurs bandes)
Arènes (vibrations d'élongation)	1600 & 1500	moyenne-faible	C=C (dans un cycle) (2 bandes, 3 si conjugué)
Arènes (vibrations de déformation)	690-900	forte-moyenne	déformation C-H, gauchissement de cycle
Alcools & Phénols (vibrations d'élongation)	3580-3650	variable	O-H (libre), bande généralement fine
Alcools & Phénols (vibrations d'élongation)	3200-3550	forte	O-H (avec liaison H), bande généralement large
Alcools & Phénols (vibrations d'élongation)	970-1250	forte	C-O
Alcools & Phénols (vibrations de déformation)	1330-1430	moyenne	O-H déformation dans le plan
Alcools & Phénols (vibrations de déformation)	650-770	variable-faible	O-H déformation hors du plan
Amines (vibrations d'élongation)	3400-3500 (Solution diluée)	faible	N-H (1°-amines), 2 bandes
Amines (vibrations d'élongation)	3300-3400 (Solution diluée)	faible	N-H (2°-amines)

Amines (vibrations d'élongation)	1000-1250	moyenne	C-N
Amines (vibrations de déformation)	1550-1650	moyenne-forte	NH ₂ cisaillement (1°-amines)
Amines (vibrations de déformation)	660-900	variable	NH ₂ & N-H oscillation (déplacement sur les liaisons H)
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	2690-2840 (2 bandes)	moyenne	C-H (aldéhyde C-H)
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	1720-1740	forte	C=O (aldéhyde saturé)
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	1710-1720	forte	C=O (cétone saturée)
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	1690	forte	aryl cétone
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	1675	forte	α, β -insaturation
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	1745	forte	cyclopentanone
Aldéhydes & cétones (vibrations d'élongation)	1780	forte	cyclobutanone
Aldéhydes & cétones (vibrations de déformation)	1350-1360	forte	α -CH ₃ déformation
Aldéhydes & cétones (vibrations de déformation)	1400-1450	forte	α -CH ₂ déformation
Aldéhydes & cétones (vibrations de déformation)	1100	moyenne	C-C-C déformation
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	2500-3300 (acides) superposition avec les C-H	forte	O-H (bande très large)
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1705-1720 (acides)	forte	C=O (avec liaison H)
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1210-1320 (acides)	moyenne-forte	O-C (quelquefois 2 pics)
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1785-1815 (halogénures d'acides)	forte	C=O
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1750 & 1820 (anhydrides)	forte	C=O (2-bandes)
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1040-1100	forte	O-C
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1735-1750 (esters)	forte	C=O
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1000-1300	forte	O-C (2-bandes)
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations d'élongation)	1630-1695 (amides)	forte	C=O (amide I bande)
Acides carboxyliques & dérivés (vibrations de déformation)	1395-1440	moyenne	C-O-H déformation

Nitriles (vibrations d'élongation)	2240-2260	moyenne	C=N (bande fine)
Isocyanates, Isothiocyanates Diimides, Azides & cétènes (vibrations d'élongation)	2100-2270	moyenne	-N=C=O, -N=C=S, -N=C=N-, -N ₃ , C=C=O
Amide	1590-1650	moyenne	N-H (1 ^o -amide) II bande
Amide	1500-1560	moyenne	N-H (2 ^o -amide) II bande
Thiols	2550-2600	faible & fine	S-H
Esters	700-900	forte	S-ou
Disulfure	500-540	faible	S-S
Thiocarbonyle	1050-1200	forte	C=S
Sulfoxyde	1030-1060	forte	S=O
Sulfone	1325± 25 (assymétrique) & 1140± 20 (symétrique) (fortes)		S=O
Acide sulfonique	1345 (forte)	forte	S=O
Chlorure de sulfonyle	1365± 5 (assymétrique) & 1180± 10 (symétrique) (fortes)		S=O
Sulfate	1350-1450 (forte)	forte	S=O
Phosphine	2280-2440 (moyenne & fine) 950-1250 (faible) P-H déformation		P-H
Acide phosphonique	2550-2700	moyenne	(O=)PO-H
Esters	900-1050	forte	P-OR
Oxyde de phosphine	1100-1200	forte	P-OR
Phosphonate	1230-1260	forte	P-OR
Phosphate	1100-1200	forte	P-OR
Phosphonamide	1200-1275	forte	P-OR
Silane	2100-2360	forte	Si-H
Alkoxysilane	1000-1100	forte & large	Si-OR
Méthylsilane	1250± 10	forte & fine	Si-CH ₃
Oxime O-H	3550-3600	forte	O-H
Oxime C=N	1665± 15		C=N
Oxime N-O	945± 15		N-O
Oxyde d'amine aliphatique	960± 20		N-O
Oxyde d'amine aromatique	1250± 50		N-O
Nitroso	1550± 50	forte	N=O
Nitro	1530± 20 (assymétrique) & 1350± 30 (symétrique)		N=O