

II Spectroscopie IR

1) Absorption de la lumière dans l'infrarouge

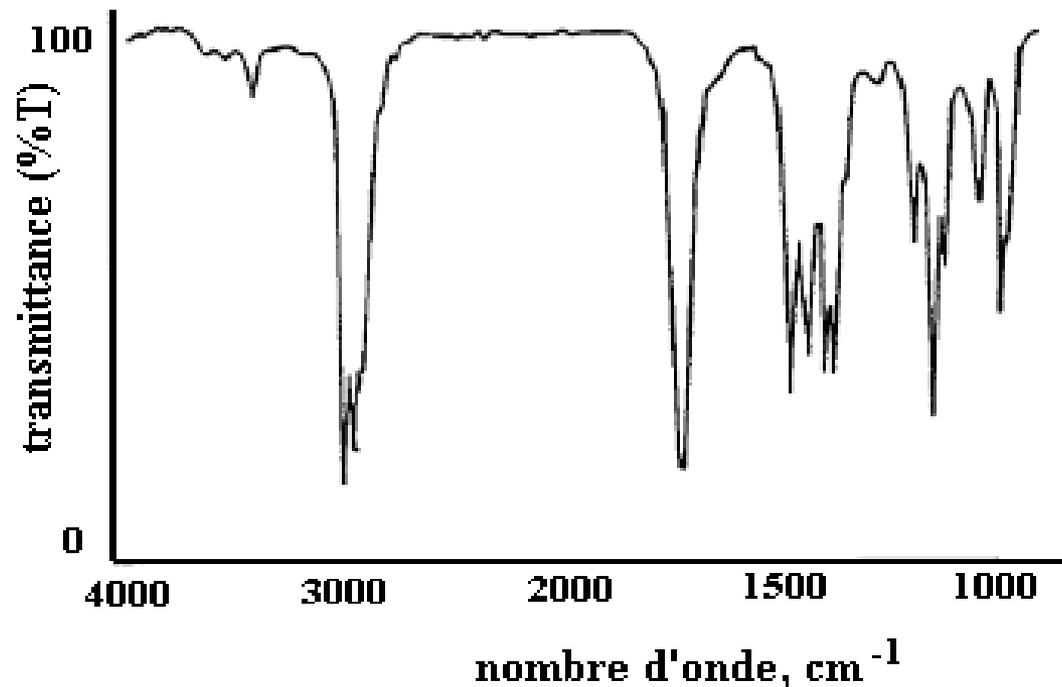
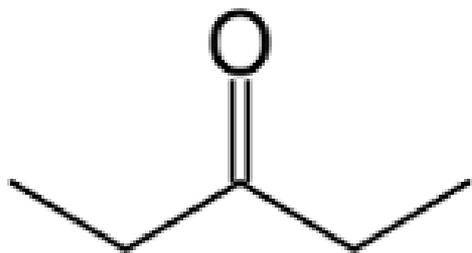
Les molécules sont capables d'absorber de la lumière dans l'infrarouge.

Chaque espèce moléculaire a ainsi un spectre infrarouge qui lui est propre.

2) Allure d'un spectre IR

Exemple :

Spectre IR de la pentan-3-one



2) Allure d'un spectre IR

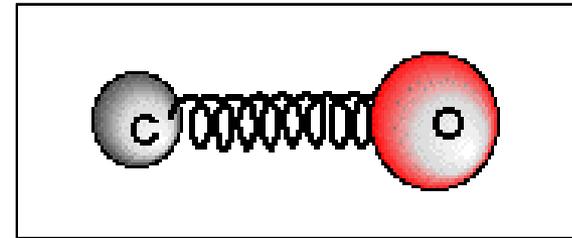
- Abcisse : **nombre d'onde σ** en cm^{-1} (c'est l'inverse de la longueur d'onde soit $1/\lambda$), souvent exprimé en cm^{-1} .
Vérifier que $\sigma = 2000 \text{ cm}^{-1}$ correspond à $\lambda = 5,0 \mu\text{m}$.
- Ordonnée : **Transmittance T** ($= I/I_0$) (en %)
Quelle est la valeur de la transmittance en l'absence d'absorption ?
Pourquoi les bandes d'absorption pointent-elles vers le bas ?

3) Origine d'un spectre IR

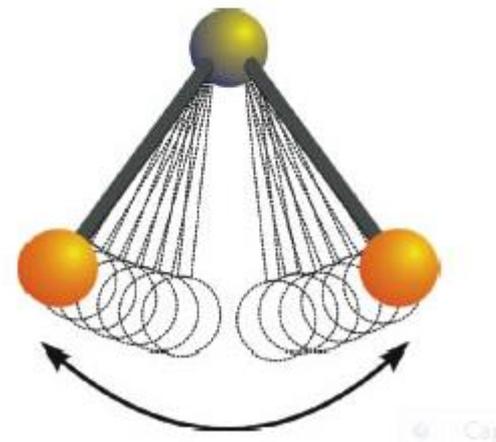
Quel que soit l'état physique de l'espèce chimique, les atomes d'une molécule ne sont pas fixes : ils vibrent.

Les vibrations peuvent correspondre :

- à une élongation longitudinale (comme un ressort) :



- à une élongation transversale (déformation angulaire) :



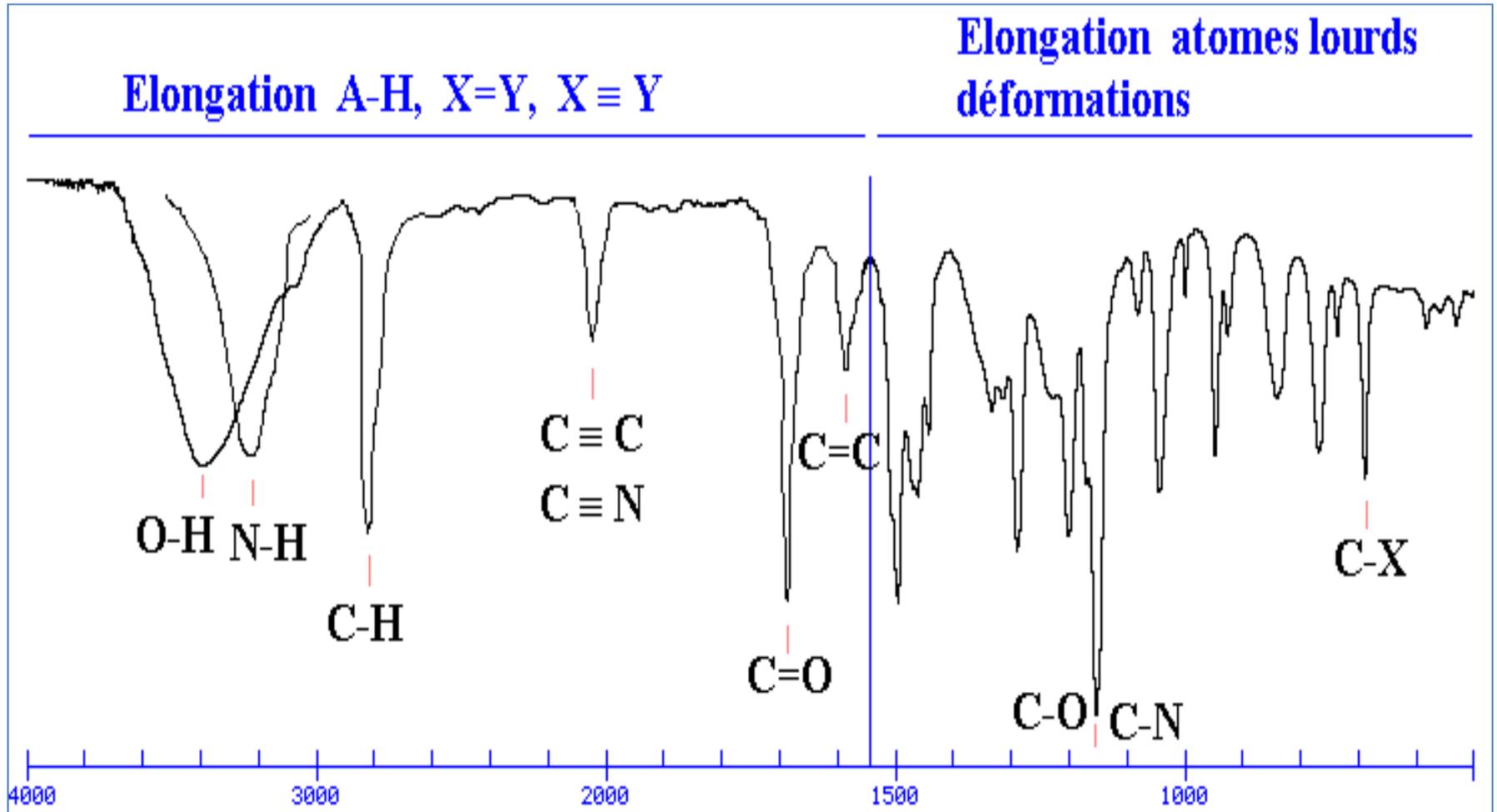
4) Bandes d'absorption caractéristiques

a) Généralités

Quand une lumière IR traverse un échantillon, certaines liaisons absorbent de l'énergie et changent alors de fréquences de vibration. **La longueur d'onde des rayonnements absorbés caractérise chaque liaison**

b) Bandes d'absorption et liaisons

Le domaine d'absorption en IR s'étend de 4000 à 600 cm^{-1} , soit de 2,5 à 17 μm (voir rabat de couverture dans le livre).



c) Influence de l'environnement

Etude du tableau sur le rabat de couverture du livre :
rechercher les différentes bandes d'absorption
correspondant à la liaison C = O et préciser l'origine
de leurs différences

Conclure.

Famille	Liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)
alcane	C-H (élongation) C-H (déformation)	2 850-3 000 1 370-1 470
alcène	C=C C-H	1 650 3 000-3 080
cétone	C=O	1 705-1 725
aldéhyde	C-H C=O	2 650-2 830 1 720-1 740
acide carboxylique	O-H C=O C-O	3 450-3 550 1 740-1 800 1 080-1 190
ester	C=O C-O	1 730-1 750 1 050-1 300
alcool	O-H lié O-H libre	3 200-3 450 3 600-3 700
amine	C-N N-H	1 030-1 230 1 640-1 560
amide	N-H C=O	3 300-3 500 1 620-1 700
	C≡N	2 200-2 260

c) Influence de l'environnement

Etude du tableau sur le rabat de couverture du livre :

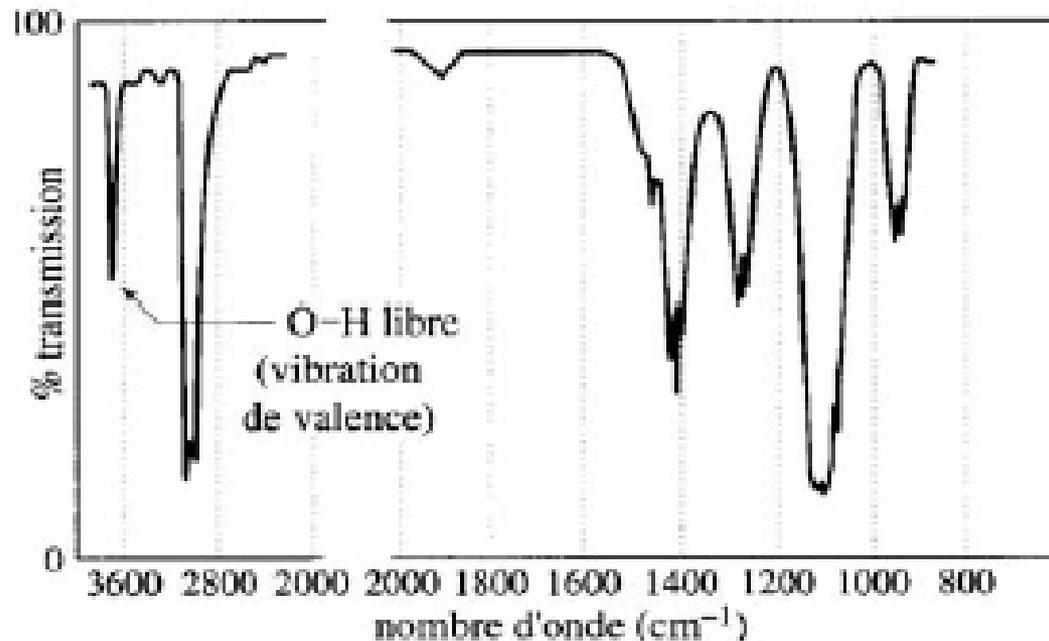
On remarque qu'il y a cinq bandes d'absorption correspondant à la liaison C = O, selon que cette liaison appartienne à une cétone, un aldéhyde, un acide carboxylique, un ester ou une amide.

L'environnement de la liaison a donc une influence sur la longueur d'onde (ou nombre d'onde) des rayonnements absorbés.

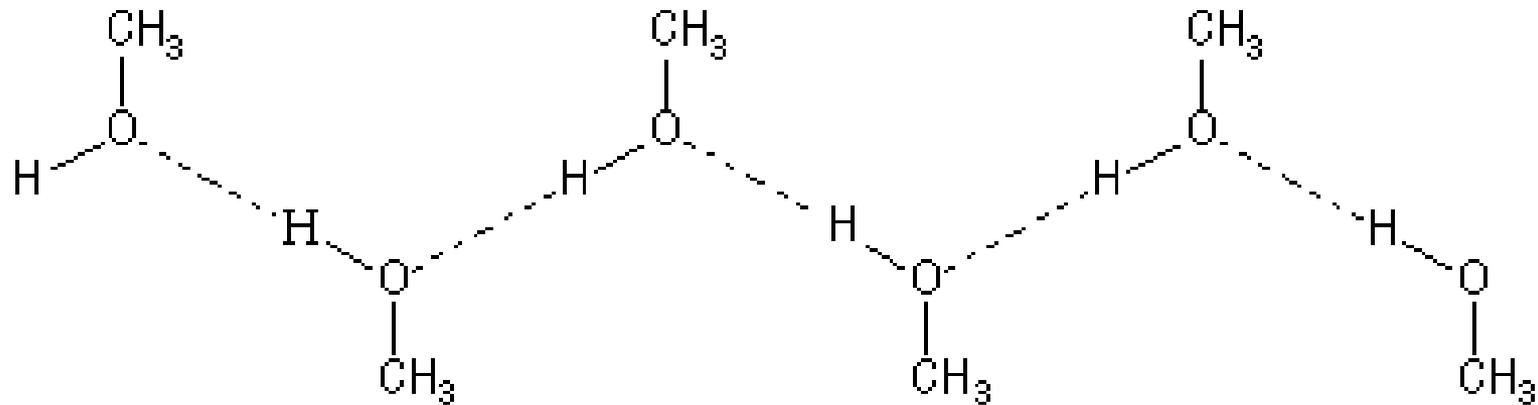
Conclusion : un spectre IR permet de connaître les groupes caractéristiques présents dans une molécule.

d) Cas de la liaison O–H, influence d'une liaison hydrogène

A l'état gazeux ou en solution très peu concentrée, il n'y a pas de liaisons hydrogène intermoléculaires et on obtient une bande forte et fine vers 3620 cm^{-1} .

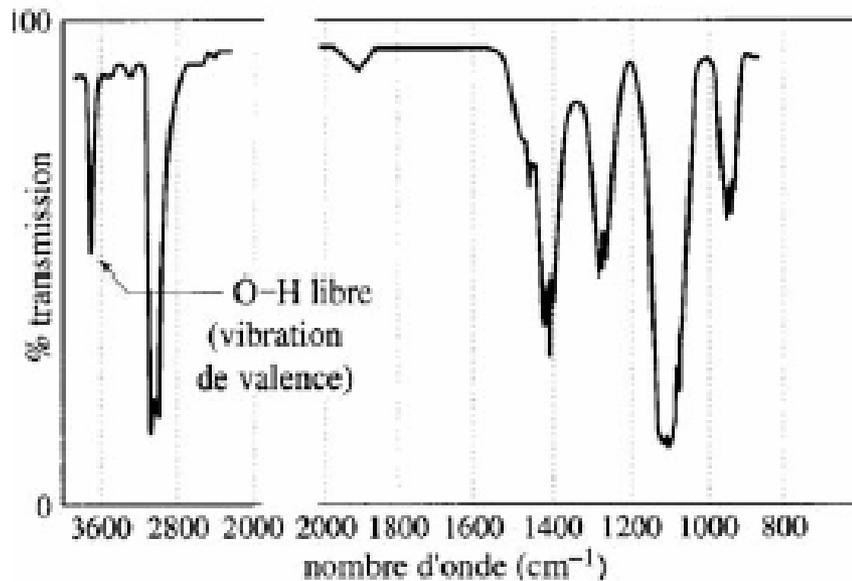


A l'état pur ou en solution concentrée, il existe des liaisons hydrogène intermoléculaires et la liaison O-H est affaiblie

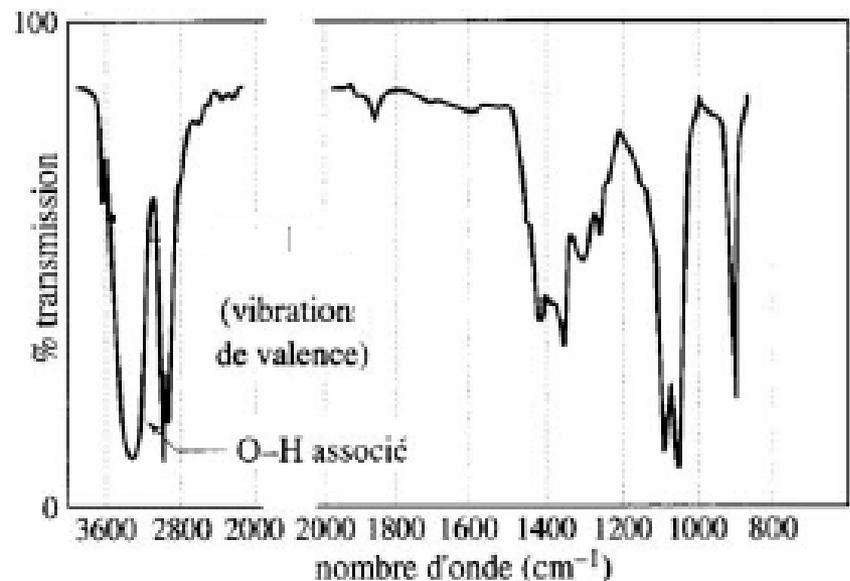


Quelles sont les différences qui apparaissent ?

O—H libre : 3 600 cm^{-1}
alcool dans solvant aprotique

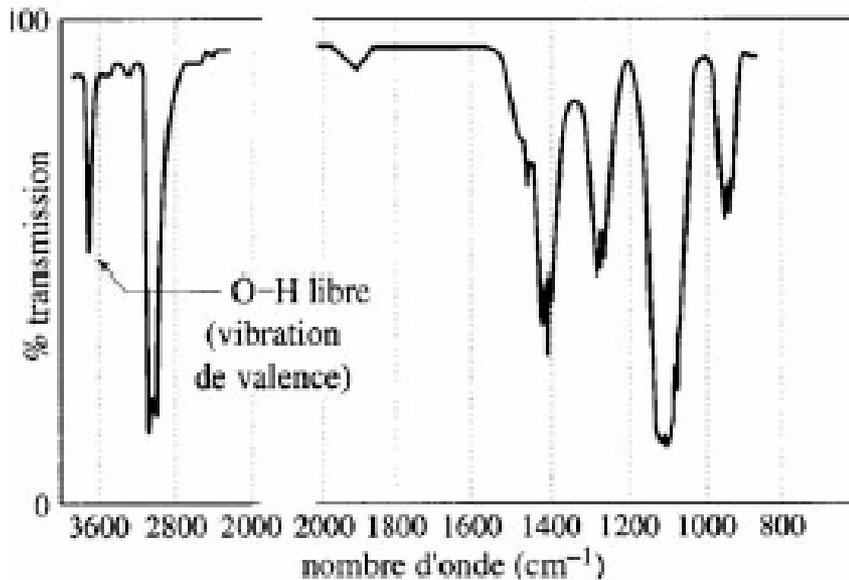


O—H...O : 3 300 cm^{-1}
alcool pur

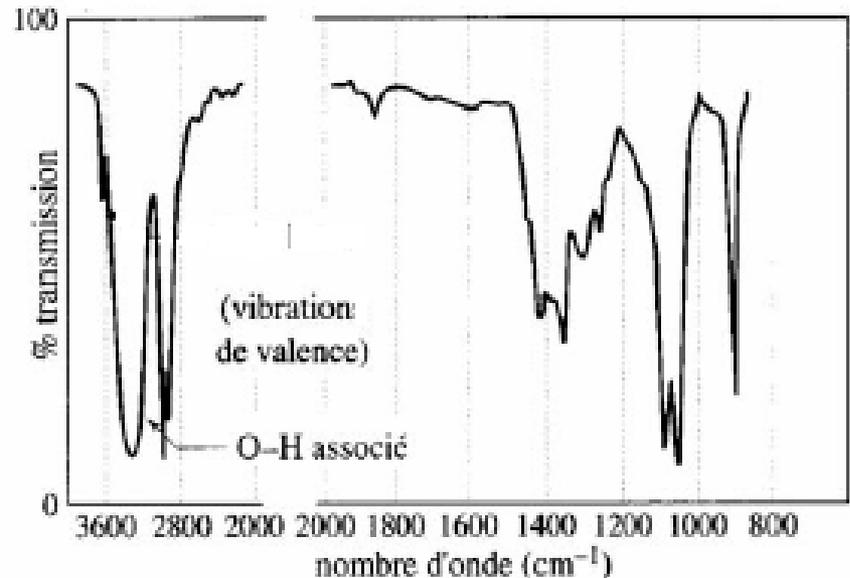


Quand il y a des liaisons hydrogène intermoléculaires, la bande d'absorption s'élargit et le nombre d'onde correspondant à son maximum diminue.

O—H libre : 3 600 cm^{-1}
alcool dans solvant aprotique

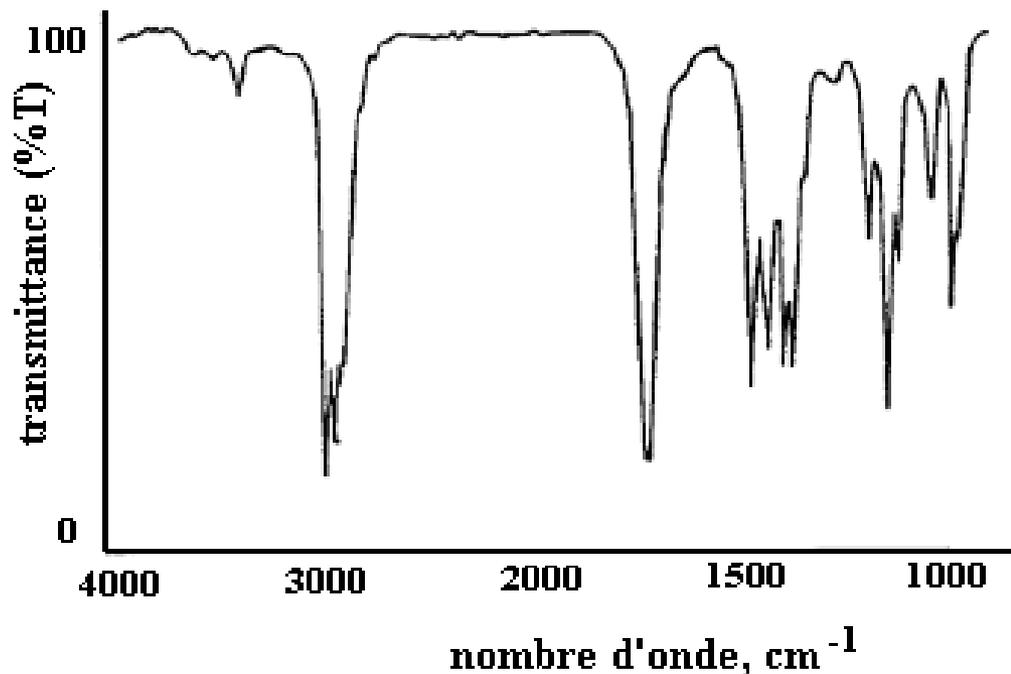
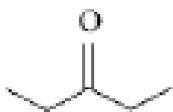


O—H...O : 3 300 cm^{-1}
alcool pur



5) Application : étude du spectre de la pentan-3-one

Spectre IR de la pentan-3-one



- Identifier les pics d'absorbance de la molécule.
- Y a-t-il d'autres molécules qui pourraient avoir le même spectre IR ?