



SPECTRES INFRA- ROUGES

Prof-TC

www.prof-tc.fr



Spectroscopie Infrarouge

La spectroscopie infrarouge (IR) est dans son principe identique à la spectroscopie UV-visible.

Le domaine de longueur d'onde utilisé est (2500nm, 25000nm).

Les OEM (Ondes ElectroMagnétiques) interagissent avec les liaisons covalentes de la molécule. Pour cette raison la spectroscopie IR permet de repérer la présence de certaines liaisons et d'en déduire les groupes caractéristiques présents dans la molécule.



Le spectre IR d'une molécule

Le nombre d'onde σ (m^{-1}) d'une Onde Electro Magnétique est égal à l'inverse de sa longueur d'onde λ (m):

$$\sigma = \frac{1}{\lambda}$$

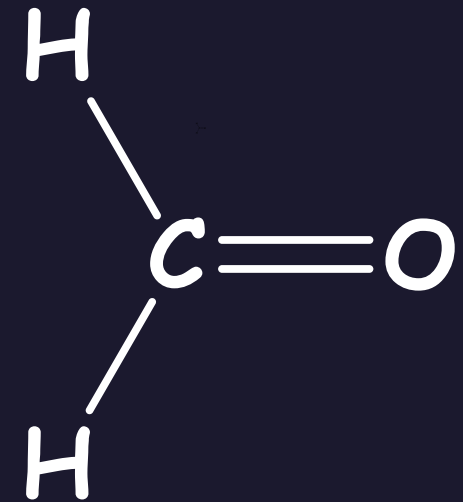
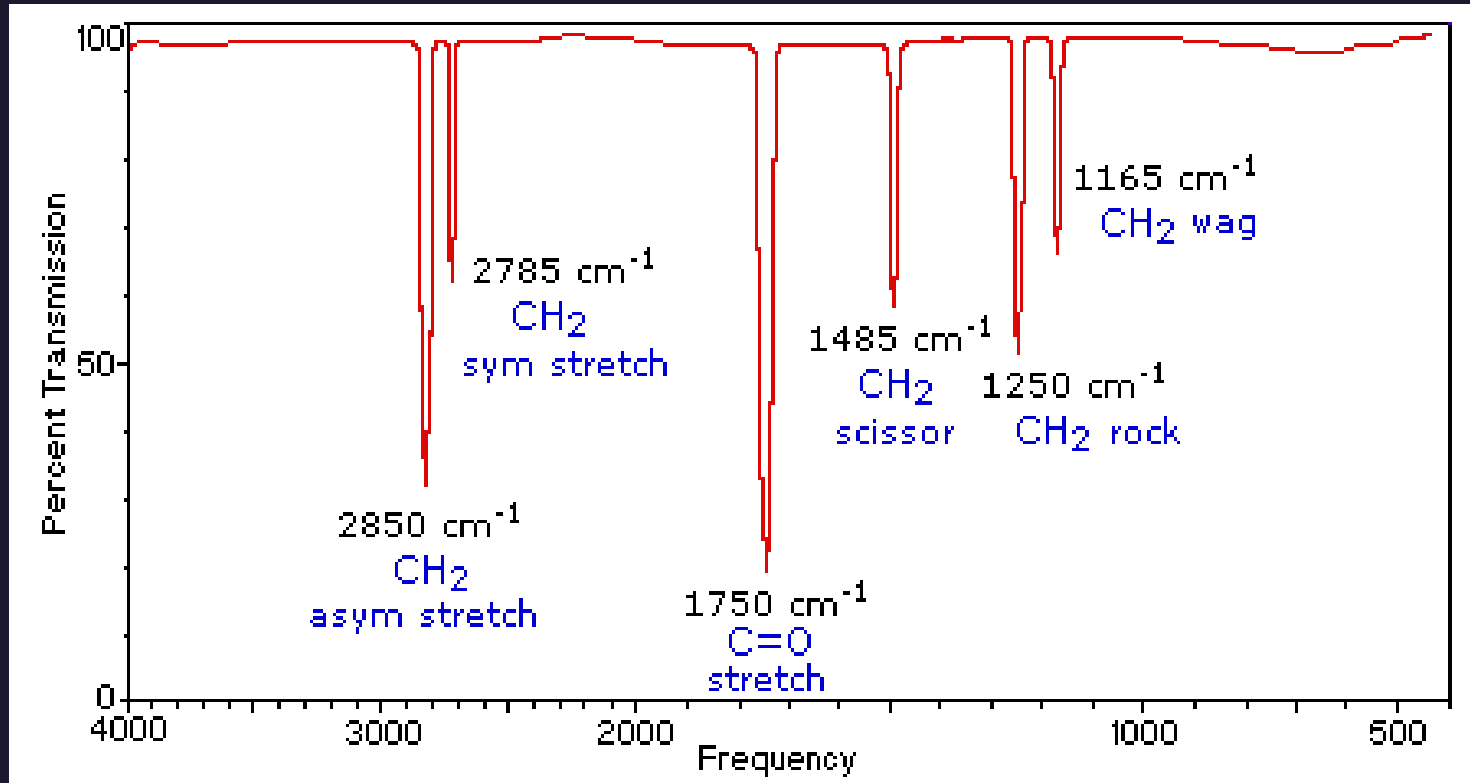
La transmittance T (sans unité) est égale au rapport de l'intensité transmise I à travers la substance à analyser sur l'intensité I_0 transmise par le solvant. La valeur de la transmittance est comprise entre 0 (0%) et 1 (100%):

$$T = \frac{I}{I_0}$$



Le spectre IR du méthanal possède plusieurs pics d'absorption:

- 5 pics correspondant à la liaison entre le carbone et les 2 hydrogènes (notée CH_2 sur le spectre)
- 1 pic correspondant à la double liaison entre le carbone et l'oxygène.

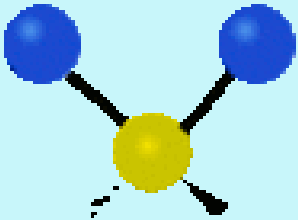
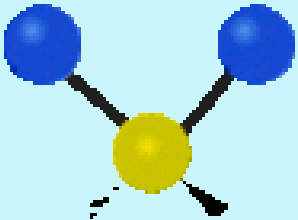
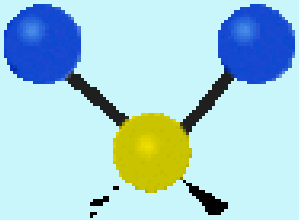
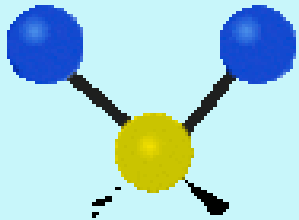
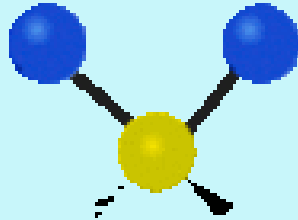
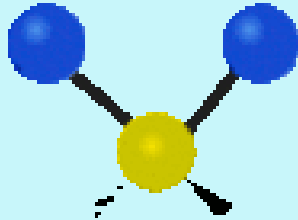


Sur le graphique sont indiqués les nombres d'onde correspondant aux absorptions les plus importantes donc aux transmittances les plus faibles.

Pourquoi l'espèce chimique absorbe les IR

Les atomes de la molécule peuvent se déplacer dans toutes les directions.

Par exemple les atomes du groupe CH_2 peuvent vibrer de 6 manières différentes: étirements (stretching), symétrique et anti symétrique, cisaillement (scissoring), bascule (rocking), agitation hors du plan (wagging) et torsion (twisting).

Etirement symétrique	Etirement antisymétrique	Cisaillement	Bascule	Agitation	Torsion
					

A chaque vibration correspond une énergie E_n . Lorsque les IR correspondant à cette énergie interagissent avec l'espèce chimique, ils sont absorbés, leur transmittance est alors faible.

Bandes d'absorption caractéristiques

Méthode pour analyser un spectre IR

- Repérer les liaisons chimiques (C-H, N-H, C=O etc..) grâce à leurs nombres d'onde. Attention car à une liaison peut correspondre plusieurs bandes d'absorption car la liaison peut vibrer de différentes façons (symétrique, cisaillement etc..)
- Rechercher les groupes caractéristiques (hydroxyle OH, carboxyle -COOH etc..) possédant ces liaisons. Attention car certaines liaisons appartiennent à plusieurs groupes. Par exemple la liaison C=O appartient aux groupes carboxyle et carbonyle.
- Vérifier que toutes les bandes caractéristiques des groupes retenus se trouvent dans le spectre IR
- Utiliser éventuellement les valeurs précises des nombres d'onde pour départager les groupes.

Les nombres d'ondes utiles à la recherche des groupes caractéristiques sont supérieurs à 1500cm^{-1} (à part quelques exceptions comme pour la liaison C-O).

Liaison	nombre d'onde σ (cm^{-1})	Intensité ⁽¹⁾	Liaison	nombre d'onde σ (cm^{-1})	Intensité ⁽¹⁾
O-H libre ⁽²⁾	3580 - 3650	F fine	C=O _{ester}	1700 - 1740	F
O-H lié ⁽²⁾	3200 - 3400	F large	C=O _{aldéhyde-cétone}	1650 - 1730	F
N-H	3100 - 3500	M	C=O _{acide}	1680 - 1710	F
C _{tri} -H ⁽³⁾	3000 - 3100	M	C=C	1625 - 1685	M
C _{tri} -H _{aromat} ⁽⁴⁾	3030 - 3080	M	C=C _{aromat}	1450 - 1600	M
C _{tét} -H ⁽⁵⁾	2800 - 3000	F	C _{tét} -H	1415 - 1470	F
C _{tri} -H _{aldéhyde}	2750 - 2900	M	C _{tét} -O	1050 - 1450	F
O-H _{acide carboxylique}	2500 - 3200	F large	C _{tét} -C _{tét}	1000 - 1250	F

(1) L'intensité traduit l'importance de l'absorption Forte (F) ou Moyenne (M).

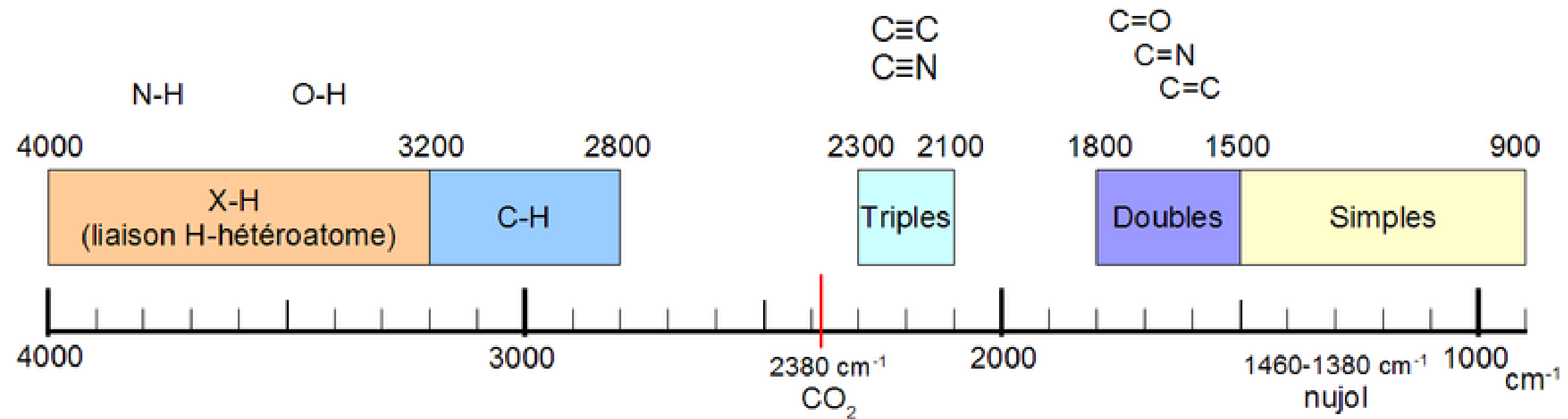
(2) O-H_{libre} sans liaison hydrogène et O-H_{lié} avec liaison hydrogène.

(3) C_{tri} correspond à un carbone trigonal (engagé dans une double liaison).

(4) Aromatique désigne un composé avec un cycle aromatique comme le benzène ou ses dérivés.

(5) C_{tét} correspond à un carbone tétragonal (engagé dans quatre liaisons simples).

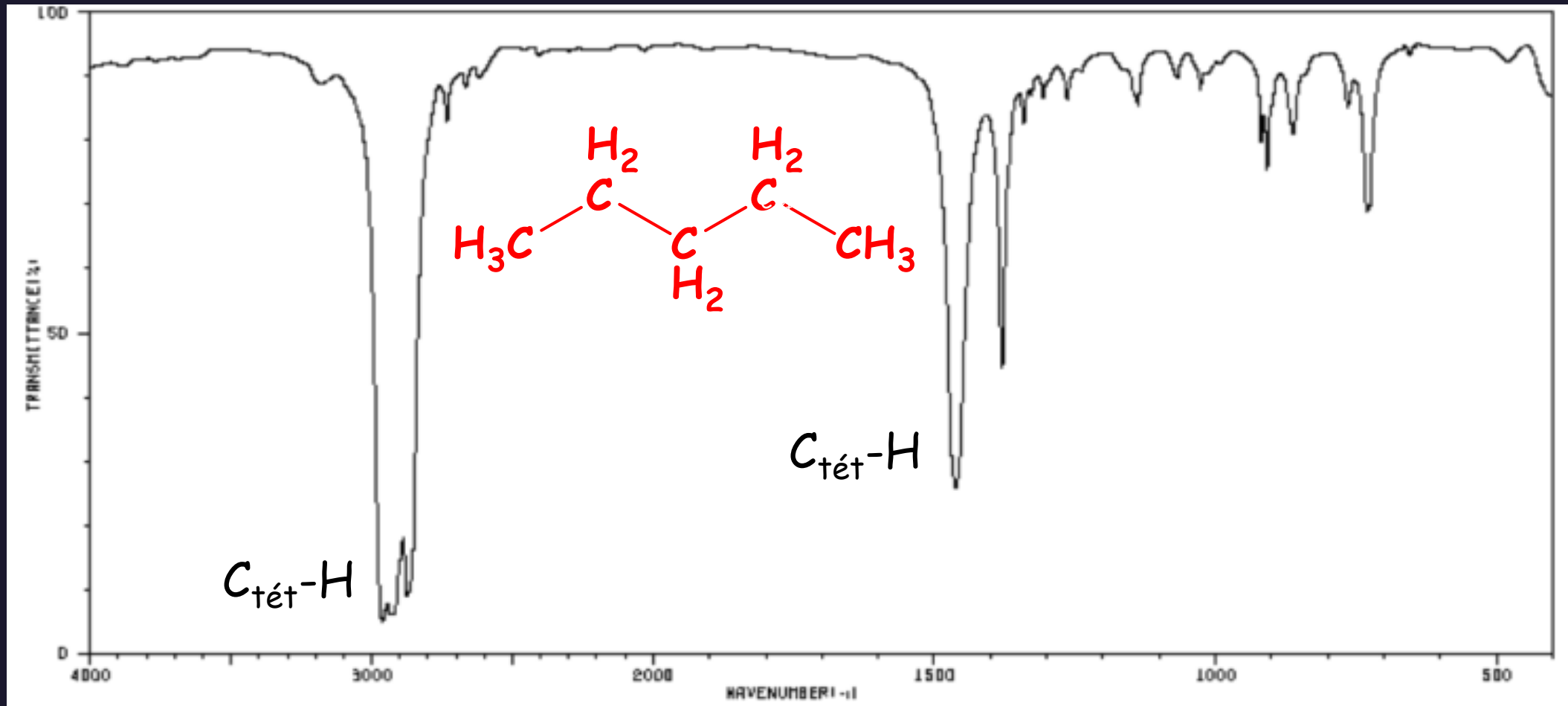
Plus la liaison est forte, plus le nombre d'onde σ d'absorption est élevé



Bandes C-H

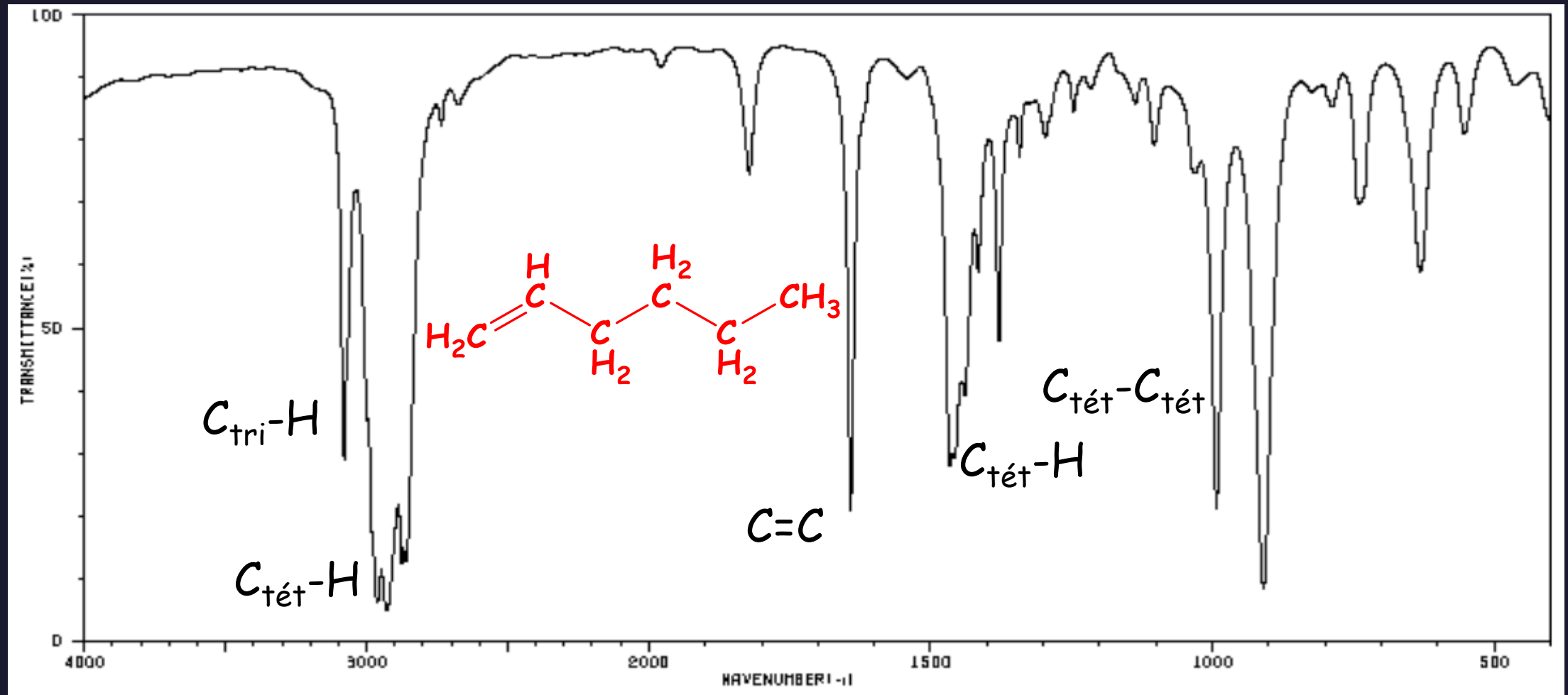
Un alcane, tel le pentane, présentera deux bandes d'absorption due à la liaison $C_{\text{tét}}-H$:

- Entre 2800 et 3000cm^{-1} d'intensité forte.
- Entre 1415 et 1470cm^{-1} d'intensité forte (déformation angulaire des liaisons $C_{\text{tét}}-H$).



Bande C=C

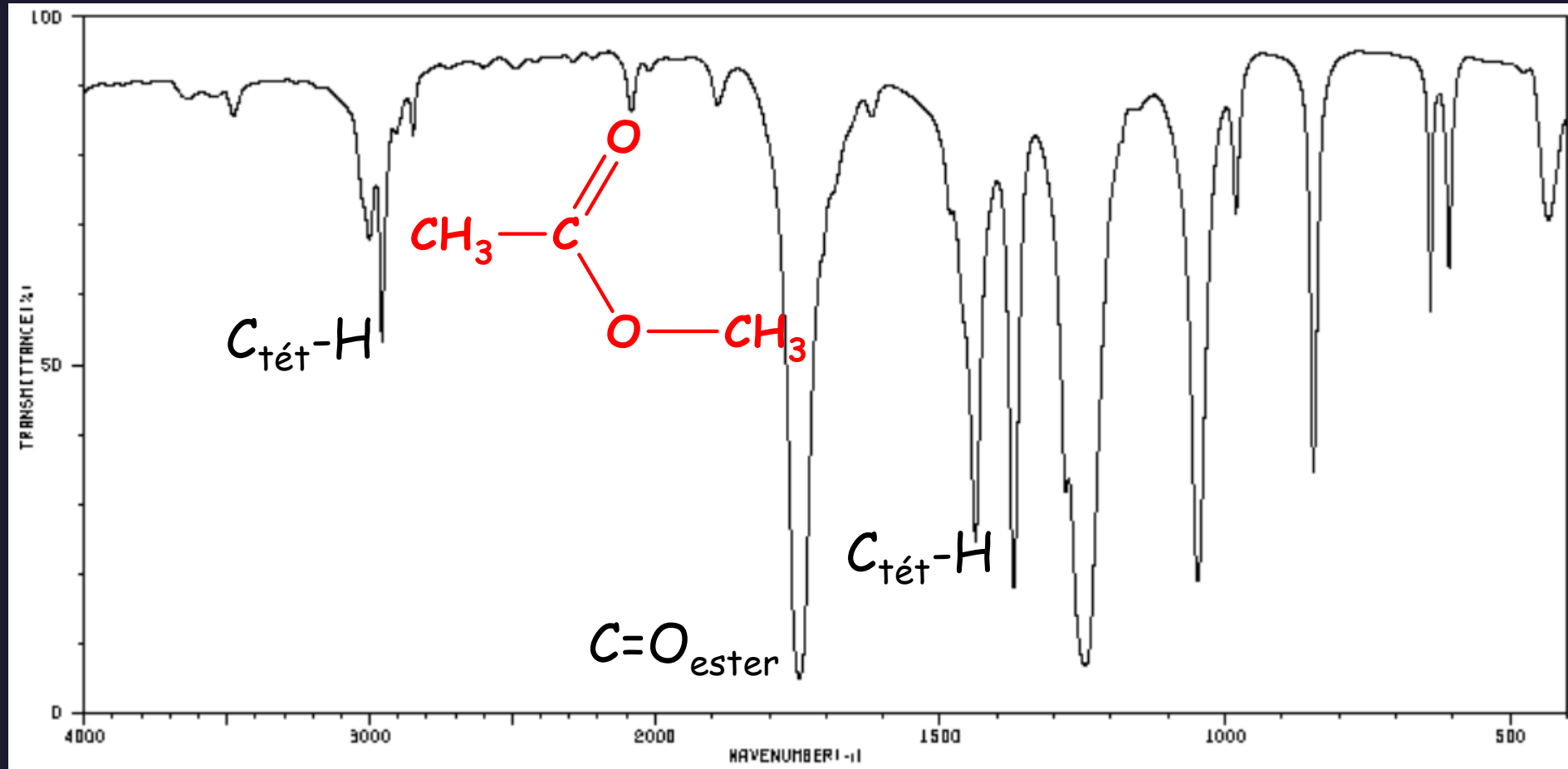
Un alcène, tel que l'hex-1-ène, présentera une bande d'absorption de moyenne intensité due à la liaison $C_{\text{tri}}-H$ comprise entre 3000 et 3100 cm^{-1} .



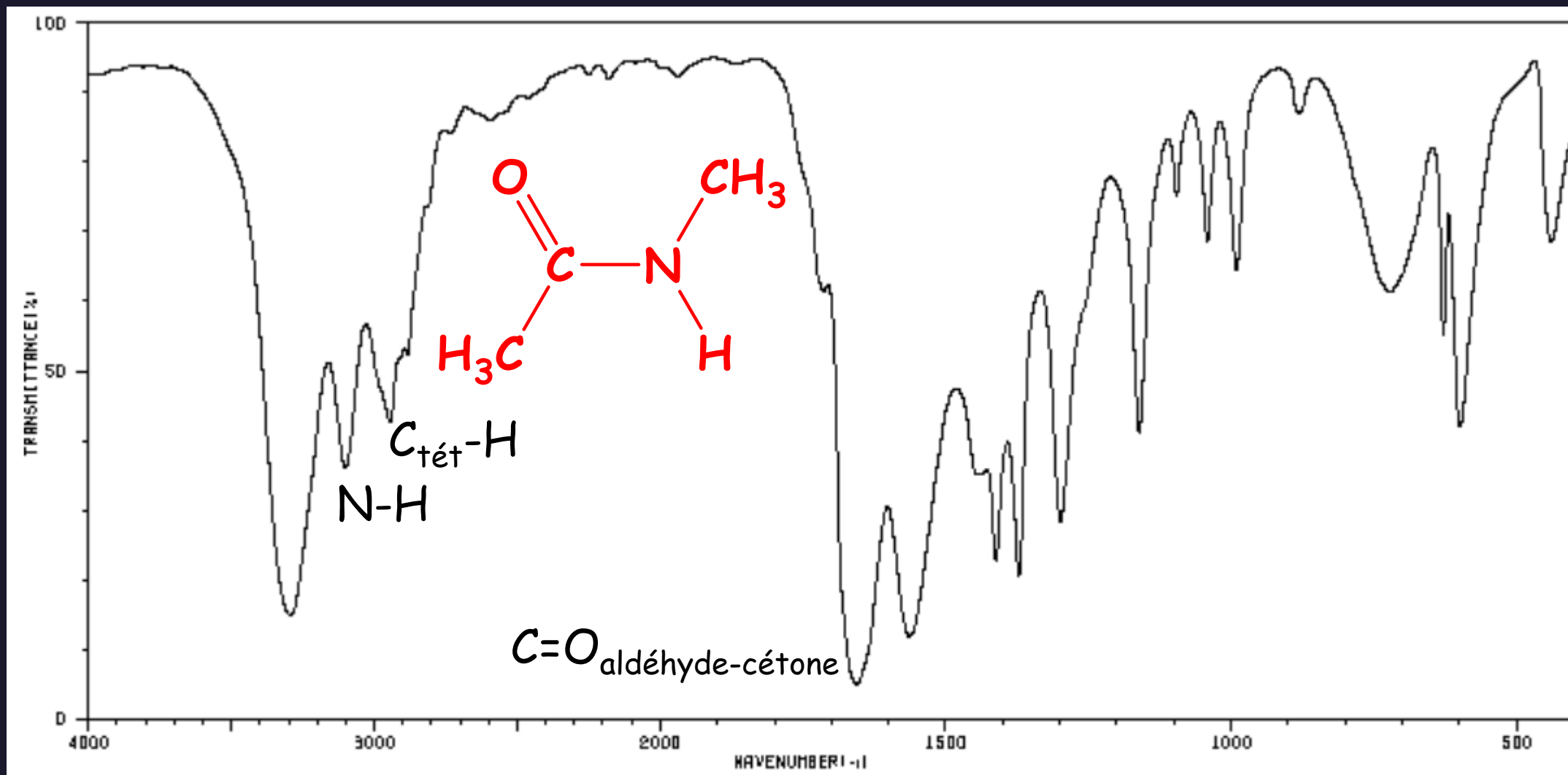
Bande C=O

La liaison C=O est présente dans les aldéhydes, cétones, esters, amides etc.

La position de la bande d'absorption dépend du type de fonction. Elle se situe entre 1650 et 1740cm⁻¹ environ.



Ethanoate de méthyle

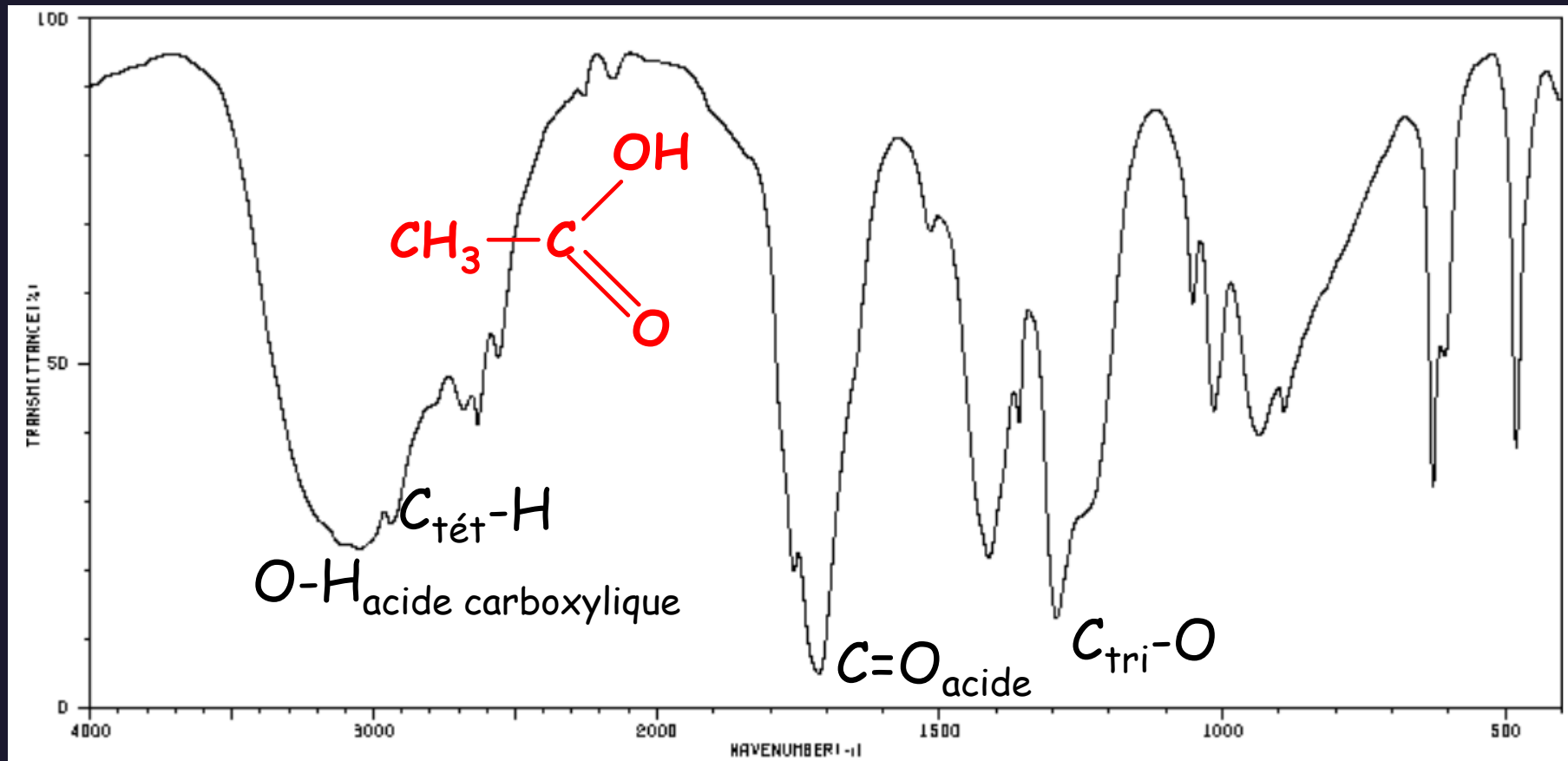


N-Méthyléthananamide

Bande C-O

La liaison C-O est présente dans les acides carboxyliques, alcools etc.

La position de la bande d'absorption dépend du type de fonction. Sa bande se situe entre 1050 et 1450 cm^{-1} .

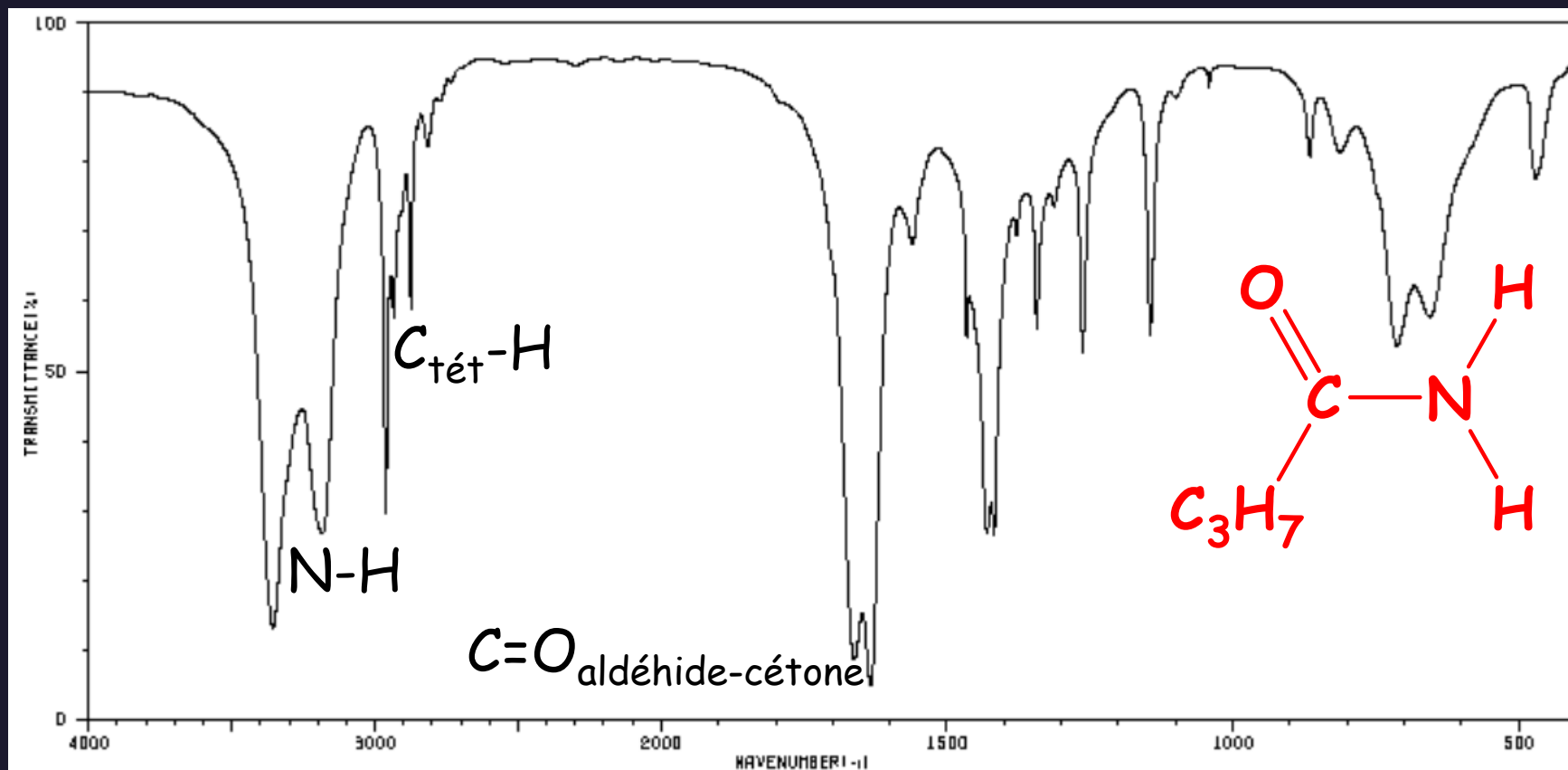


Acide éthanoïque

Bande N-H

La liaison N-H est présente dans les amines et amides etc. La position de la bande d'absorption dépend du type de fonction. Sa bande se situe entre 3100 et 3500cm^{-1} .

Le spectre IR d'une amine RNH_2 donne 2 bandes alors que celui d'une amine $\text{RNR}'\text{H}$ ne donne qu'une bande (1 seule liaison N-H).



Butanamide

Bande O-H

La liaison O-H se trouve dans les alcools, les acides carboxyliques. Dans le cas des alcools, la liaison hydrogène affaiblie la liaison O-H. Elle a tendance à la rompre.

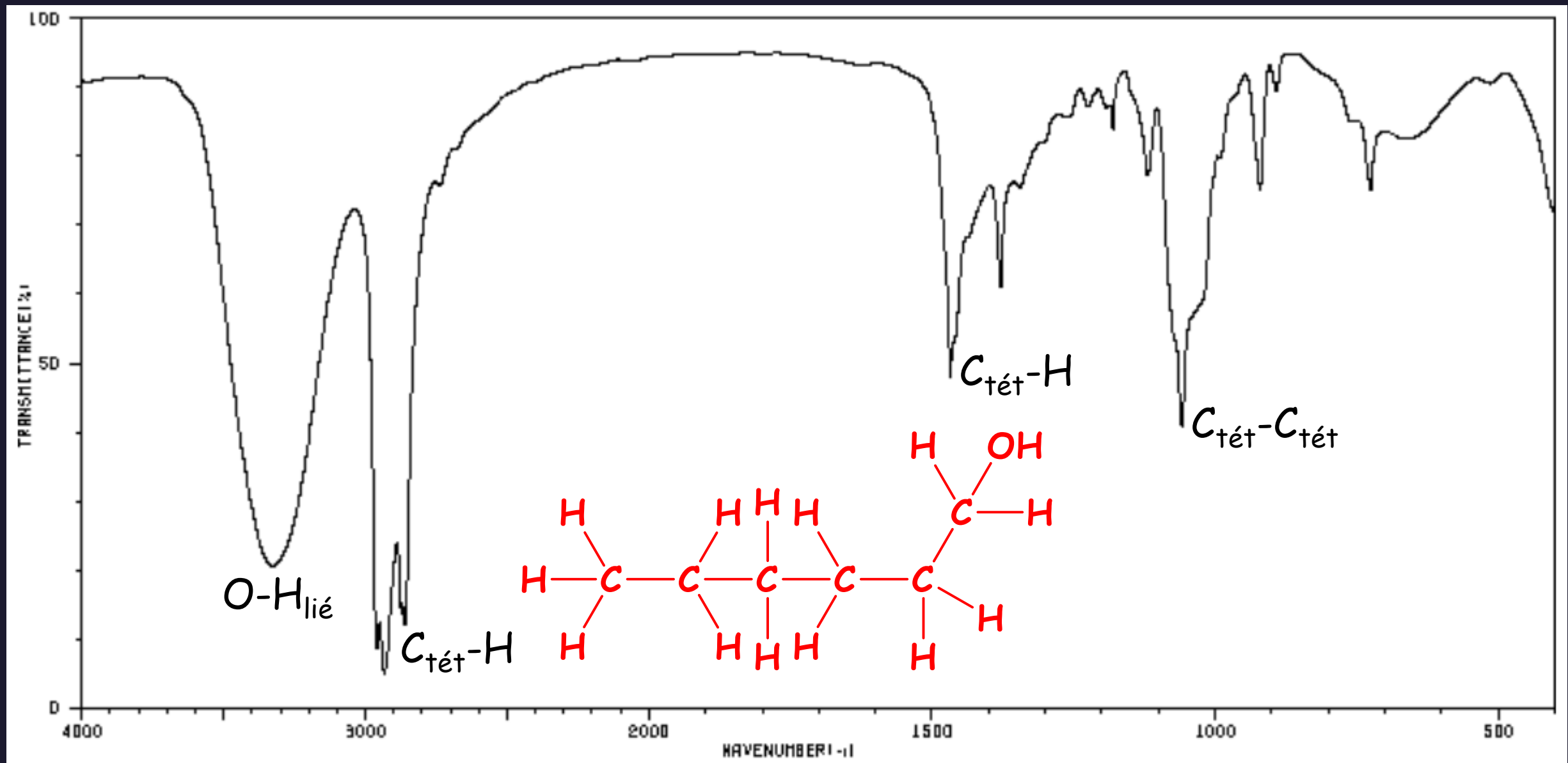
A l'état liquide la liaison hydrogène existe, la liaison O-H est alors notée $O-H_{lié}$. Elle est affaiblie par conséquent le nombre d'onde est plus faible et la bande plus large. Elle est comprise entre 3200 et 3400cm^{-1} .

A l'état gazeux il n'existe pas de liaison hydrogène entre les molécules car elles se trouvent à de grandes distances les unes des autres.

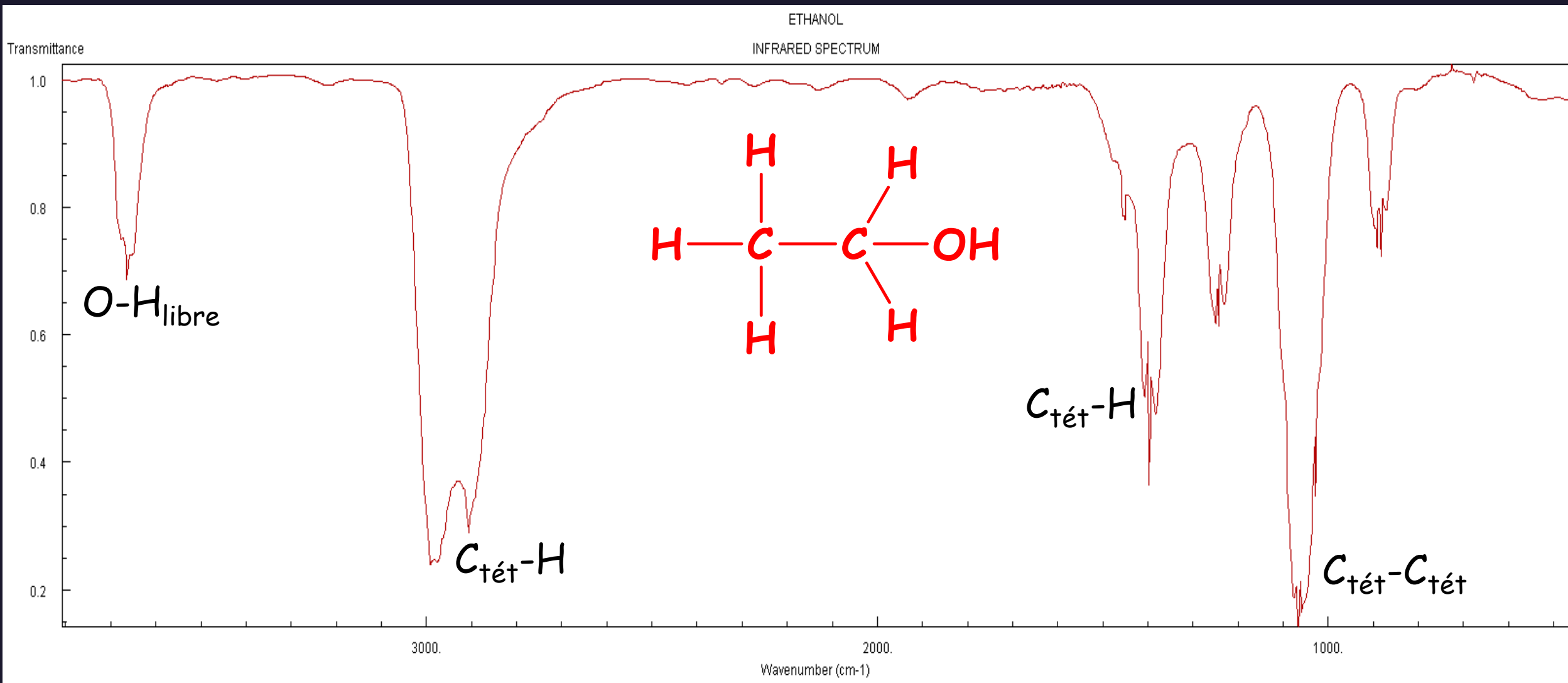
La liaison O-H est alors appelée $O-H_{libre}$.

A l'état gazeux la liaison $O-H_{libre}$ donne une bande d'absorption forte et fine située à environ 3620cm^{-1} .

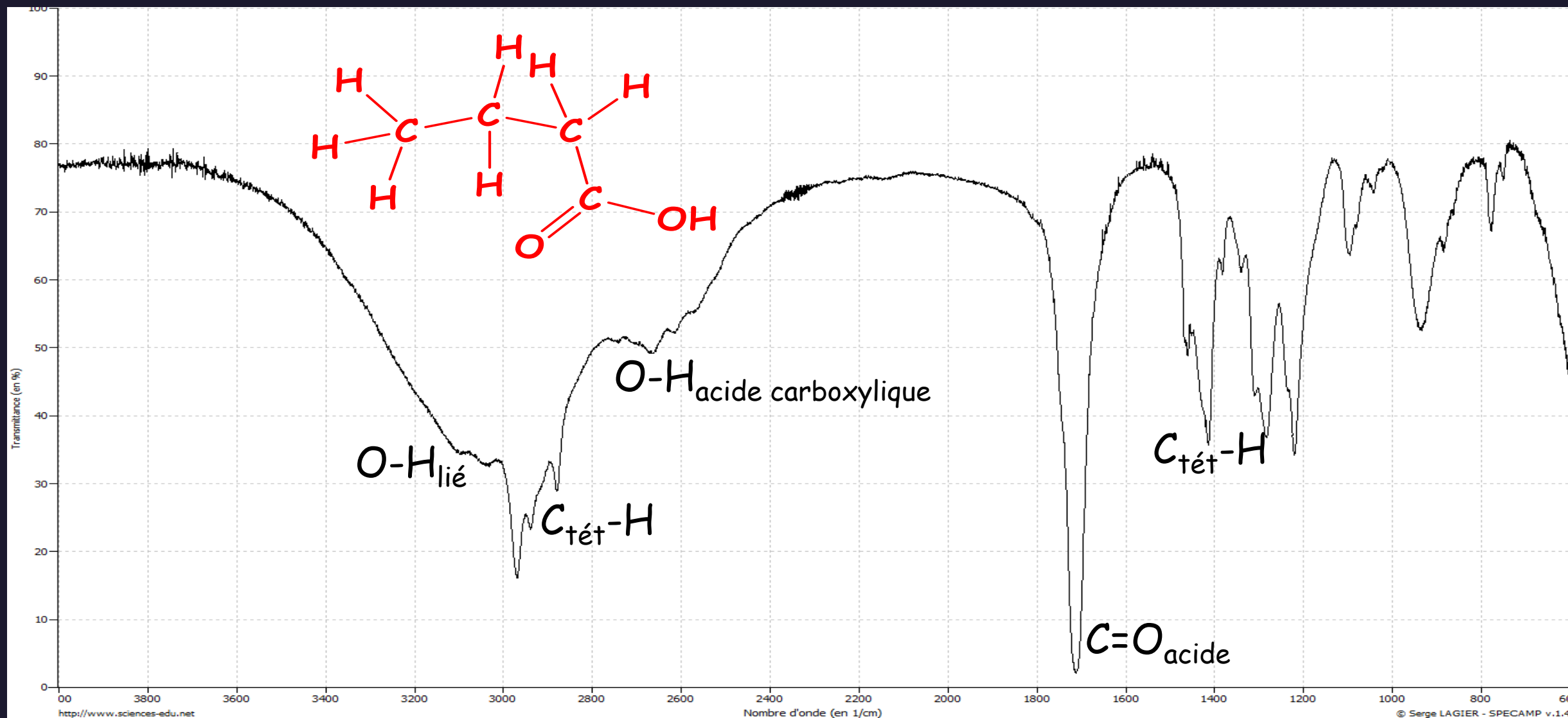
Pour les acides carboxyliques sous forme liquide, l'élargissement de la bande correspondant à la liaison $O-H_{lié}$ provoque un chevauchement avec la bande d'absorption $C_{\text{tet}}-H$.



Hexan-1-ol (bande O-H_{lié})

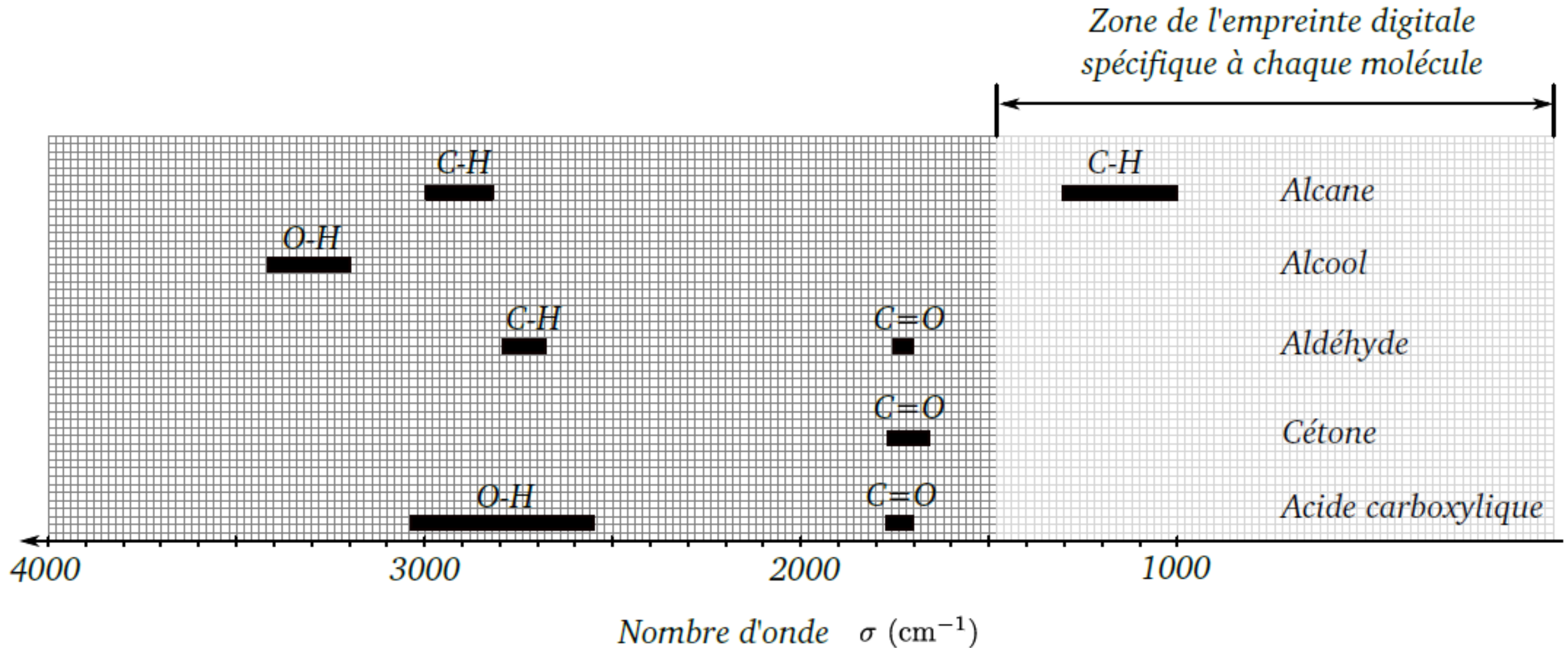


Ethanol (bande $O-H_{\text{libre}}$)



Acide butanoïque

Carte simplifiée des bandes d'absorption Infra Rouge de quelques groupes



SPECTRES INFRA-ROUGES

Prof-TC

www.prof-tc.fr

