

## 1 Aspect général du spectre

La spectroscopie infrarouge sert à identifier les groupes fonctionnels d'une molécule. Les longueurs d'onde explorées s'étendent de 2,5 à 16  $\mu m$ . Sur le spectre, on représente :

- en abscisse : le nombre d'onde  $\sigma$  ( $cm^{-1}$ ).
- en ordonnée : la transmittance  $T$

Le nombre d'onde  $\sigma$  est lié à la longueur d'onde par la relation suivante :

Relation entre la longueur d'onde et le nombre d'onde

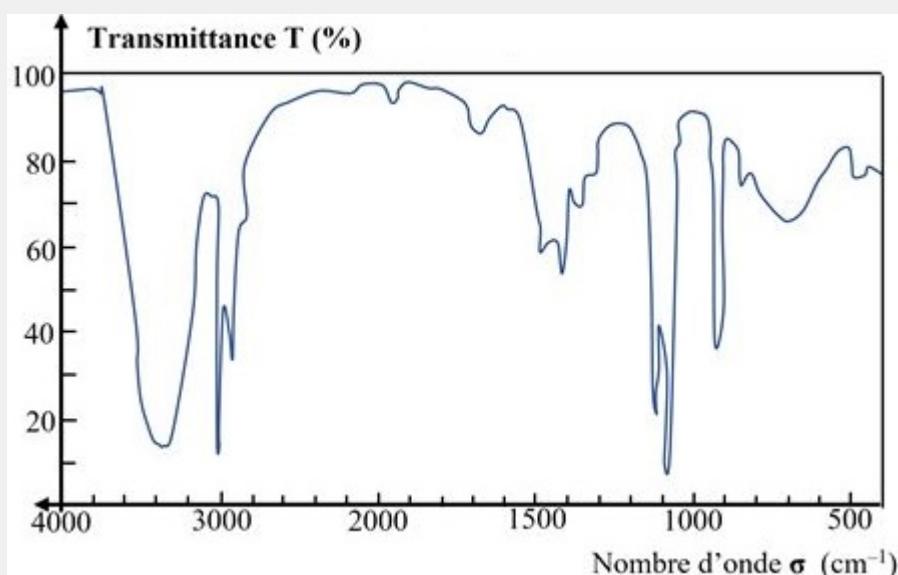
$$\sigma = \frac{1}{\lambda}$$

- $\sigma$  : nombre d'onde ( $m^{-1}$ )
- $\lambda$  : longueur d'onde (m)

Le spectre IR est constitué de bandes d'absorption plus ou moins larges et intenses, mais généralement plus fines que celles observées en UV.

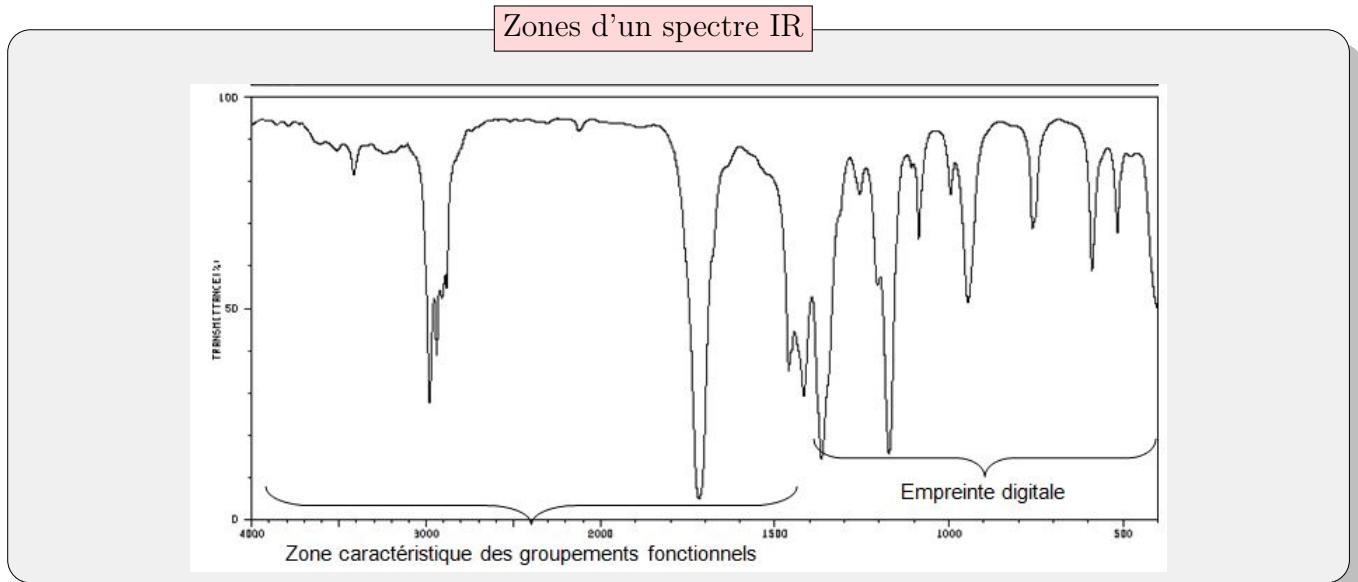
Contrairement aux spectres UV-visible où les pics sont dirigés vers le haut (car on trace l'absorbance), en IR les bandes apparaissent comme des creux dirigés vers le bas. Cela s'explique par le fait que l'ordonnée représente la transmittance : plus la molécule absorbe, moins la lumière est transmise, et donc la valeur de  $T$  diminue.

Allure du spectre IR du méthanol

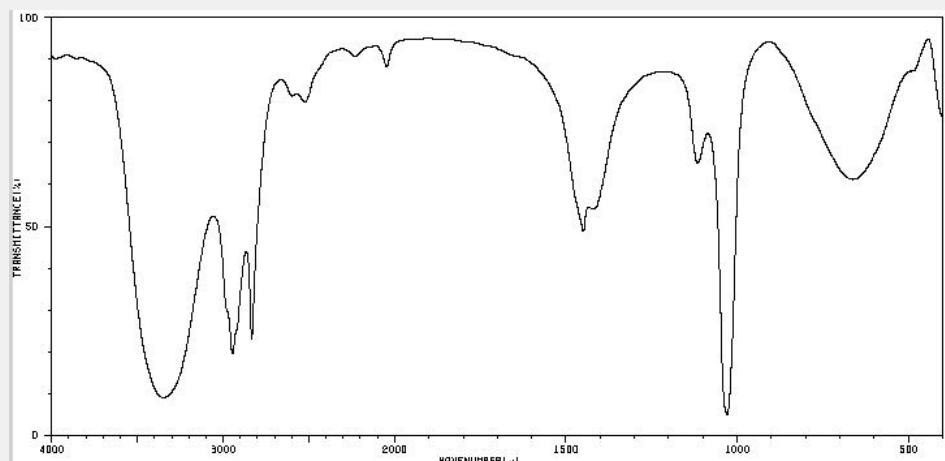


Le spectre IR se divise en deux zones :

- 4000 - 1400  $cm^{-1}$  : zone caractéristique des groupes fonctionnels (zone exploitable).
- 1400 - 400  $cm^{-1}$  : zone propre à chaque molécule, appelée empreinte digitale, difficile à interpréter mais unique pour chaque composé.



### Exemple : Spectre IR du méthanol



Dans la zone caractéristique des groupes fonctionnels de ce spectre entre 4000 - 1400  $cm^{-1}$ , on peut observer une large bande vers 3300  $cm^{-1}$  correspondant au groupement hydroxyle (-OH) du méthanol.

## 2 Origine des spectres IR

Lorsque des molécules sont éclairées en lumière infrarouge, certaines liaisons chimiques absorbent de l'énergie et se mettent à vibrer. Les atomes de certaines liaisons chimiques d'une molécule ne sont donc pas immobiles : ils vibrent autour de leur position d'équilibre. Ces vibrations peuvent être de deux types :

- Élongation (valence) : modification de la longueur de liaison.
- Déformation angulaire : variation de l'angle de liaison.

## Vibration d'élargissement et déformation des molécules



Vibration d'élargissement (valence)      Vibration de déformation

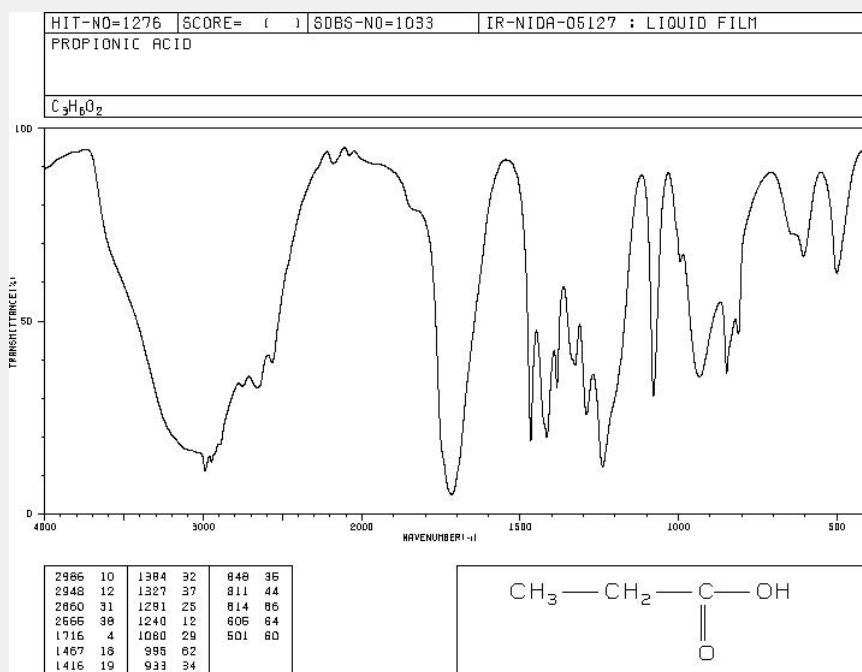
Ce sont ces vibrations qui génèrent les bandes observées dans un spectre IR.

### 3 Bandes d'absorption caractéristiques

Chaque type de liaison chimique absorbe dans une zone bien déterminée du spectre IR. Ainsi, il est possible d'associer un intervalle de nombres d'ondes à un groupe fonctionnel particulier.

L'analyse d'un spectre IR permet de reconnaître rapidement la présence de fonctions chimiques comme les alcools, amines, carbonyles, aromatiques, halogénures, etc. Pour cela, on utilise une table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation. (Voir page 4)

#### Exemple : Spectre IR d'un composé de formule brute $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$



On utilise la table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation (page 4). Dans la zone caractéristique des groupes fonctionnels de ce spectre entre  $4000 - 1400 \text{ cm}^{-1}$ , on peut observer que le composé possède le groupement caractéristique  $\text{C}=\text{O}$  (bande intense à  $1716 \text{ cm}^{-1}$ ) et le groupement caractéristique  $\text{OH}$  dans un acide carboxylique (large bande entre  $2700$  et  $3300 \text{ cm}^{-1}$ ). Le composé est donc l'acide propanoïque. ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$ )

Table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation

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

Liaison	Espèce	Nature des vibrations	Nombre d'onde $\text{cm}^{-1}$	Intensité F : fort ; m : moyen ; f : faible
O-H	Alcool ou phénol libre	Valence	3590-3650	F (fine)
O-H	Alcool ou phénol lié	Valence	3200-3600	F (large)
N-H	Amine primaire	Valence	3300-3500	m (2 bandes)
N-H	Amine secondaire	Valence		m (1 bande)
N-H	Amide	Valence	3100-3500	F
C <sub>di</sub> -H	Alcyne	Valence	~ 3300	m ou f
C <sub>tri</sub> -H	Alcène	Valence	3030-3100	m
C <sub>tri</sub> -H	Aromatique	Valence	3000-3100	m
C <sub>al</sub> -H	Alcane	Valence	2850-3000	F
C <sub>al</sub> -H	Aldéhyde	Valence	2700-2900	m (2 bandes)
OH	Acide carboxylique	Valence	2500-3200	F à m (large)
C=C	Alcyne	Valence	2100-2260	f
C <sub>tri</sub> =O	Aldéhyde et cétone	Valence	1650-1730 abaissement de 20 à 30 $\text{cm}^{-1}$ si conjugaison	F
C <sub>tri</sub> =O	Acide carboxylique	Valence	1700-1725	F
C <sub>tri</sub> =O	Ester	Valence	1735-1750	F
C <sub>tri</sub> =O	Amide	Valence	1630-1700	F
C <sub>tri</sub> =C <sub>tri</sub>	Alcène	Valence	1620-1690	m
C <sub>tri</sub> =C <sub>tri</sub>	Aromatique	Valence	1450-1600	Variable (3 ou 4 bandes)
N-H amine	Amine	Déformation	1560-1640	F ou m
-NO <sub>2</sub>	Groupe nitro	Valence	1540-1570 et 1340-1390	F (2 bandes)
C <sub>al</sub> -H	Alcane	Déformation	1430-1480	F
C <sub>al</sub> -H (CH <sub>3</sub> )	Alcane	Déformation	1370-1390	F (2 bandes)
C <sub>al</sub> -O	Alcool	Valence	1010-1200	F
C <sub>al</sub> -N	Amine	Valence	1020-1250	m
C <sub>tri</sub> -H de -HC=CH- (E)	Alcène	Déformation	960-970	F
C <sub>tri</sub> -H de -HC=CH- (E)	Alcène	Déformation	670-730	m
C <sub>tri</sub> -H	Aromatique monosubstitué	Déformation	730-770 et 680-720	F (2 bandes)
C <sub>tri</sub> -H	Aromatique 1,2-disubstitué	Déformation	735-770 750-800 et 680-720	F et m (2 bandes)
C-Cl	Chlorure d'alkyle ou d'aryle	Valence	600-800	F
C-Br	Bromure d'alkyle ou d'aryle	Valence	500-750	F
C-I	Iodure d'alkyle ou d'aryle	Valence	~ 500	F

