



Spectroscopie infrarouge

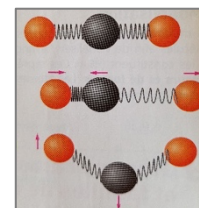
La spectroscopie infrarouge (IR) est une technique d'analyse d'échantillons et d'identification d'espèces chimiques.

Principe

1. Modélisation d'une liaison covalente

D'un point de vue mécanique, une molécule n'est pas figée, mais soumise à des mouvements de vibrations internes. On peut alors modéliser une liaison covalente par un ressort, susceptible de subir des vibrations d'élongation (A) ou des vibrations de déformation (B).

Ces mouvements de vibration se font à des fréquences caractéristiques, qui dépendent des groupes caractéristiques présents au sein de la molécule.



2. Spectroscopie infrarouge



Lorsqu'on soumet un échantillon organique (solide, liquide ou gazeux) à un rayonnement infrarouge (λ : $2,5 \cdot 10^{-4}$ cm à $2,5 \cdot 10^{-3}$ cm), celui-ci est susceptible d'exciter certains modes de vibration de la molécule : Certaines énergies apportées par le rayonnement (ou longueurs d'onde) sont absorbées par la molécule et converties en vibrations.

La comparaison de l'intensité du rayonnement transmis avec l'intensité du rayonnement incident permet d'accéder à une grandeur sans unité, la transmittance T.

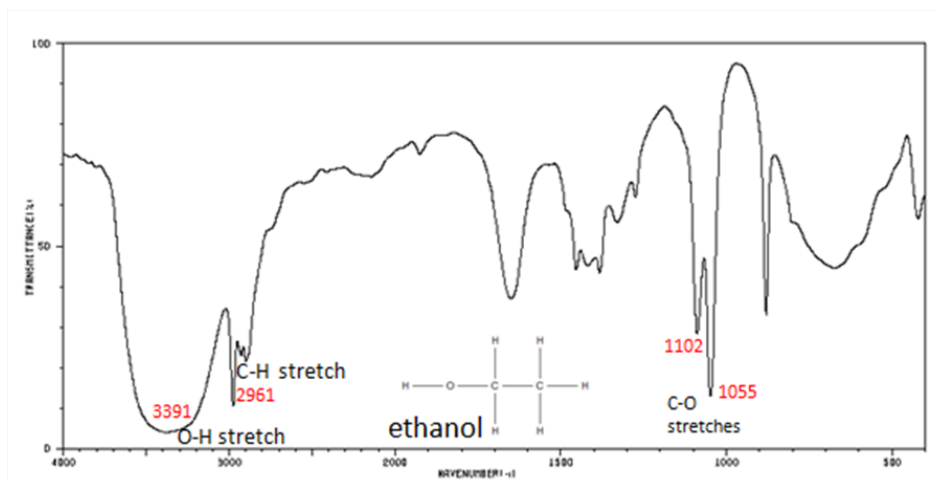
Rq : Transmittance et absorbance sont deux grandeurs complémentaires : $T + A = 1$.
La transmittance T peut aussi s'exprimer en pourcentage (%).

Allure d'un spectre

Généralement, le spectre IR d'une molécule donne sa transmittance T en fonction du nombre d'onde $\tilde{\nu}$ du rayonnement incident tel que

$$\tilde{\nu}_{\text{en cm}^{-1}} = \frac{1}{\lambda_{\text{en cm}}}$$

Pour λ variant de $2,5 \cdot 10^{-4}$ cm à $2,5 \cdot 10^{-3}$ cm, $\tilde{\nu}$ varie entre 4000 cm^{-1} et 400 cm^{-1} .
Un « creux » de transmittance équivaut à un pic ou à une bande d'absorbance.



Rq : *Bandes caractéristiques*
Certains groupes d'atomes donnent des bandes caractéristiques dont la position dépend peu du reste de la molécule. Les positions des bandes permettent de repérer les groupes caractéristiques d'une molécule.

Bandes d'absorption de quelques groupes caractéristiques

Famille	Liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)
alcane	C-H (élongation)	2850 – 3000
	C-H (déformation)	1370 – 1470
alcène	C=C	1650
	C-H	3000 – 3080
cétone	C=O	1705 – 1725
aldéhyde	C-H	2650 – 2830
	C=O	1720 – 1740
acide carboxylique	O-H	3450 – 3550
	C=O	1740 – 1800
	C-O	1080 – 1190
ester	C=O	1730 – 1750
	C-O	1050 – 1300
alcool	O-H lié (par une liaison H)	3200 – 3450
	O-H libre	3600 – 3700
amine	C-N	1030 – 1230
	N-H	1640 – 1560
amide	N-H	3300 – 3500
	C=O	1620 – 1700