

Spectroscopie infrarouge (IR)

La spectroscopie IR permet d'identifier la présence de certains types de liaison au sein d'une molécule et d'en déduire la nature des groupes caractéristiques de cette molécule.

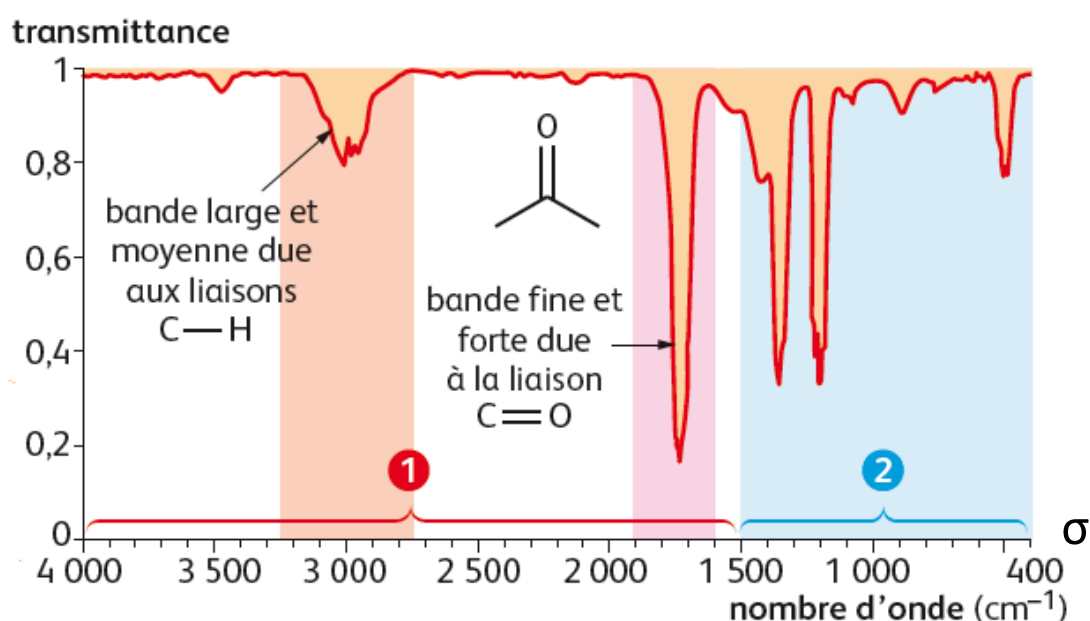
- Dans la spectroscopie infrarouge, on observe l'absorption des longueurs d'onde correspondant à l'infrarouge.

Le spectre infrarouge d'un échantillon est établi en faisant passer un faisceau de lumière infrarouge au travers de cet échantillon. L'examen de la lumière transmise indique la quantité d'énergie absorbée à chaque longueur d'onde.

La spectroscopie infrarouge exploite le fait que les molécules possèdent des fréquences spécifiques pour lesquelles elles tournent ou vibrent.

http://fr.wikipedia.org/wiki/Spectroscopie_infrarouge

- Les spectres infrarouges présentent la transmittance en fonction du nombre d'onde



- En abscisse : le nombre d'onde σ correspond à $\sigma=1/\lambda$; il s'exprime en cm^{-1}
Attention : L'échelle est orientée vers la gauche
- En ordonnée : la transmittance (parfois en absorption)

- Les spectres IR sont constitués de bandes d'absorption : chaque bande est associée à un type de liaison.

Dans les spectres représentant la transmittance en fonction du nombre d'onde, les bandes sont orientées vers le bas : un faible transmittance correspond à une absorption élevée

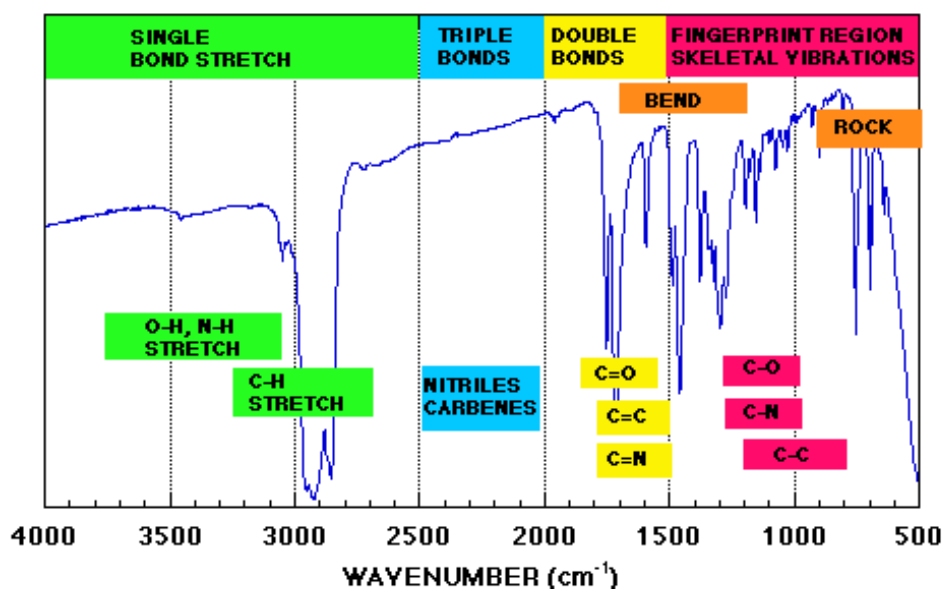
On distingue deux zones dans un spectre IR :

- Zone numérotée (1) sur le spectre ci-dessus : $1500 \text{ cm}^{-1} < \sigma < 4000 \text{ cm}^{-1}$
Ne contient qu'un nombre limité de bandes caractérisant des liaisons particulières.
Pour interpréter chaque bande, il faut relever :
 - Sa position : valeur du nombre d'onde correspondant au minimum de transmittance (pic d'absorption)
 - Sa largeur : large ou fine
 - Son intensité (d'absorption) : faible, moyenne, forte (forte = faible transmittance)

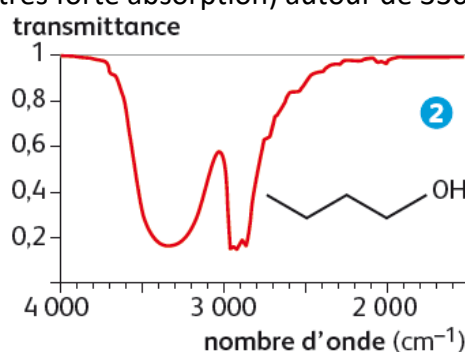
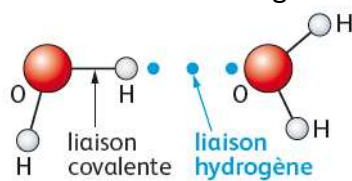
Type de liaison	Nombre d'onde σ (cm^{-1})	Largeur de bande	Intensité d'absorption
O – H en phase gazeuse	3590 - 3650	fine	Moyenne
O – H en phase condensée	3200 – 3400	large	Forte
N – H en phase gazeuse	3300 – 3500	fine	(très) Faible
N – H en phase condensée	3100 – 3300	large	Forte
C – H	2900 – 3100 (jusqu'à 2700 pour un aldéhyde)	Variables (bandes multiples)	Moyenne à forte
O – H du groupe carboxyle	2500 – 3200 (se superpose à C – H)	large	Moyenne à forte
C = O d'un groupe carbonyle	1700 – 1740 (-20 cm^{-1} si liaison conjuguée)	fine	forte
C = O d'un ester	1735 - 1750	fine	Forte
C = O d'un acide carboxylique	1700 - 1725	fine	Forte
C = O d'un amide	1650 - 1700	fine	Forte
C = C	1620 – 1690 (-20 cm^{-1} si liaison conjuguée)	fine	Moyenne
N - H	1560 – 1640 (se superpose à C = O pour un amide)	fine	Forte

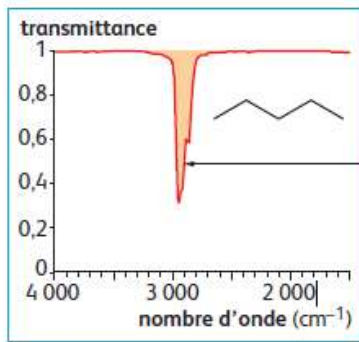
Rq : phase condensée : liquide ou en solution, solide

- Zone numérotée (2) dans le spectre ci-dessus : $400\text{cm}^{-1} < \sigma < 1500\text{cm}^{-1}$; empreinte digitale de la molécule
Présente de nombreuses bandes d'absorption pour les molécules organiques possédant plusieurs atomes de carbone.
N'est généralement exploitée qu'en comparaison avec un spectre de référence.

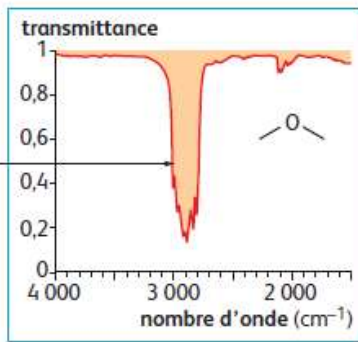


- La présence de liaisons hydrogène au sein d'un échantillon est mise en évidence sur un spectre IR par la présence d'une bande très large et très intense (très forte absorption) autour de 3300 cm^{-1} .



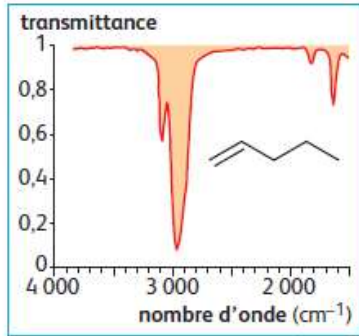


A Spectre IR du pentane

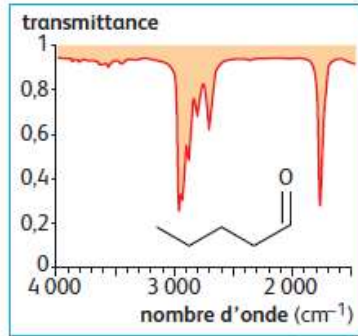


B Spectre IR du méthoxyméthane

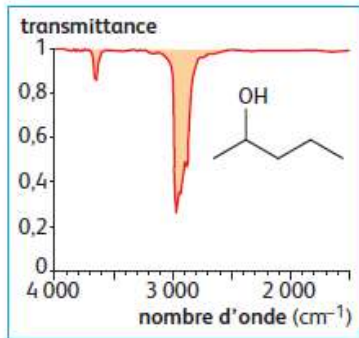
bande d'absorption



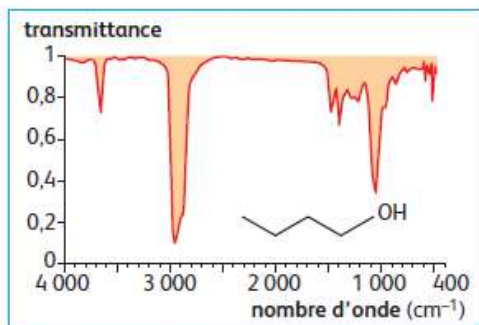
C Spectre IR du pent-1-ène



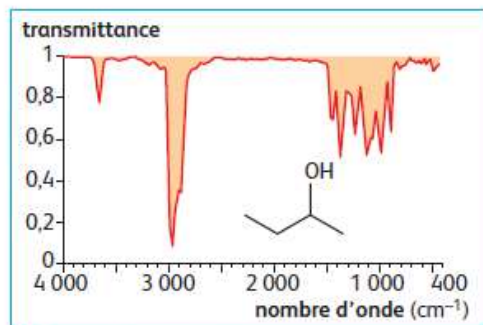
D Spectre IR du pentanal



E Spectre IR du pentan-2-ol



F Spectre IR du butan-1-ol



G Spectre IR du butan-2-ol

Remarque. Les abscisses de ces deux spectres IR d'alcools isomères en phase gazeuse sont comprises entre 400 et 4000 cm^{-1} .

Doc. 3 Spectre IR complet du butan-1-ol en phase liquide

