

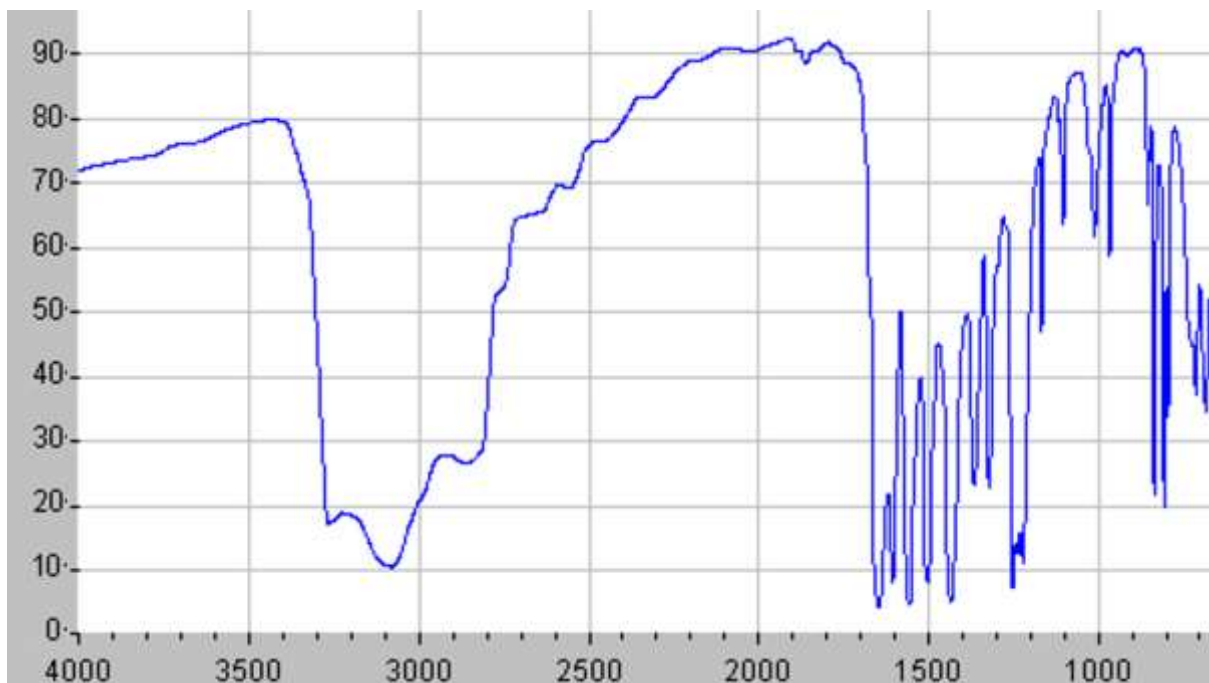
Résumé de cours : Spectres Infrarouge

I. Introduction :

Le rayonnement infrarouge (IR), invisible à l'œil nu, est situé dans domaine de longueur d'onde supérieur à 800 nm.

Lorsqu'un échantillon est traversé par un faisceau lumineux IR, une partie de la lumière est absorbée. C'est grâce à cette absorption que nous allons pouvoir détecter la présence de groupements d'atomes caractéristiques.

Les molécules, au passage du rayonnement IR, subissent des mouvements de vibration internes (d'élongation et de déformation). Ces vibrations sont à l'origine des pics et des bandes d'absorption que nous observons sur le spectre du paracétamol ci-dessous :



II. Présentation d spectre IR

- En ordonnée, la transmittance en %, qui représente le pourcentage de lumière ayant traversé l'échantillon.
- En abscisse, le nombre d'onde (l'inverse de la longueur d'onde) en cm^{-1}

Il existe deux zones principales dans un spectre IR :

Une première zone à gauche correspondant à un nombre d'onde supérieur à 1400 cm^{-1} où se trouvent les bandes caractéristiques des liaisons de la molécule

Une seconde zone à droite correspondant à un nombre d'onde inférieur à 1400 cm^{-1} , appelée « empreinte digitale » que nous ne pourrions pas analyser à cause de sa complexité.

3. Les groupes fonctionnels

Les groupements d'atomes (appelés aussi groupes fonctionnels) les plus courants et détectables par spectre IR sont :

- Les alcools
- Les acides carboxyliques
- Les aldéhydes
- Les cétones
- Les esters
- Les amines
- Les amides

Au-delà de la détection de ces groupes, il est difficile d'obtenir suffisamment d'informations d'un spectre IR pour pouvoir en déduire l'intégralité de la structure de la molécule, mais on peut proposer en connaissant la formule brute, des molécules candidates possibles.

IV. Lecture du spectre :

Afin d'identifier les groupes fonctionnels présents dans une molécule, on dispose de tables suivantes :

Fonction	liaison	Nombre d'onde	intensité
Alcool	O-H alcool libre	De 3580 à 3670	Forte (fin)
	O-H alcool lié	De 3200 à 3400	Forte (large)
Acide carboxylique	O-H alcool lié	De 3200 à 3400	Forte (large)
	C=O acide	De 1680 à 1720	Forte
Aldéhyde	C ^{trigonal} -H aldéhyde	De 2750 à 2900	Moyenne
	C=O aldéhyde	De 1650 à 1730	Forte
Amide	C=O	De 1650 à 1700	Forte
	N-H amide	De 3100 à 3500	Moyenne
	N-H amide	De 1560 à 1640	Forte / Moyenne
Amine	N-H amine	De 3100 à 3500	Moyenne
	N-H amine	De 1560 à 1640	Forte / Moyenne
Anhydrides	C=O	1760 et 1810	2 absorptions
Ester	C=O ester	De 1700 à 1750	Forte
	C-O ester	1000 et 1300	2 absorptions
Cétone	C=O cétone	De 1650 à 1730	Forte

V. La liaison hydrogène :

La liaison hydrogène est une interaction d'origine électrique entre molécules. Sans liaison hydrogène, il n'y a par exemple pas d'eau à l'état solide ou liquide. A cause des électronégativités différentes des atomes composant la molécule d'eau (H₂O), il y a aura un surplus d'électrons au niveau de l'atome d'oxygène (le plus électronégatif) et un déficit

d'électrons au niveau des deux atomes d'hydrogène (les moins électronégatifs). Le pourcentage de transmittance du spectre IR et la forme des bandes d'absorption va être modifié par la présence de cette liaison hydrogène.

VI. OH libre :

À l'état gazeux, une bande d'absorption forte et fine vers 3620cm^{-1} est caractéristique de liaison O-H. il n'existe pas, dans cet état physique, de liaison hydrogène entre les molécules d'éthanol, la liaison O-H est appelée « O-H libre ». Le même comportement sera observé lorsque l'alcool est très dilué.



VII. OH lié :

À l'état liquide, une bande d'absorption forte et large de 3200cm^{-1} à 3400cm^{-1} est caractéristique de la liaison O-H. Les liaisons hydrogène établies entre les molécules d'alcool affaiblissent les liaisons O-H. Cela implique alors un élargissement de la bande. La liaison O-H est dans ce cas dite « O-H liée ».



VIII. Ce qu'il faut retenir

Si le groupe carbonyle C=O **est présent**, c'est-à-dire présence d'un pic d'intensité forte autour de 1700 cm^{-1} , alors chercher les indices suivants :

- Aldéhyde : Chercher la présence de la liaison C-H entre 2750 et 2900 cm^{-1}
- Ester : Chercher dans la partie d'empreinte digitale le groupement C-O entre 1000 et 1300 cm^{-1}
- Acide : Chercher une bande large caractéristique du groupement –O-H entre 3200 et 3400 cm^{-1}
- Amides : Chercher la présence de deux pics N-H dans la bande 3500 cm^{-1} (intensité moyenne à forte)
- Anhydrides : Chercher 2 absorptions C=O à 1760 et 1810 cm^{-1}
- Cétone : Si aucune autre absorption caractéristique

Sinon le groupe carbonyle **n'est pas présent** alors chercher les indices suivants :

- Alcools : Chercher une bande large caractéristique du groupement –O-H entre 3200 et 3400 cm^{-1} (Attention à l'état physique)
- Amines : Chercher la présence de deux pics N-H dans la bande 3500 cm^{-1}