

# COMMENT PEUT-ON IDENTIFIER UN GROUPE CARACTÉRISTIQUE ?

CHAP. 5,8



# 1. PRINCIPE DE LA SPECTROSCOPIE IR

# QUEL MONTAGE UTILISE-T-ON ?

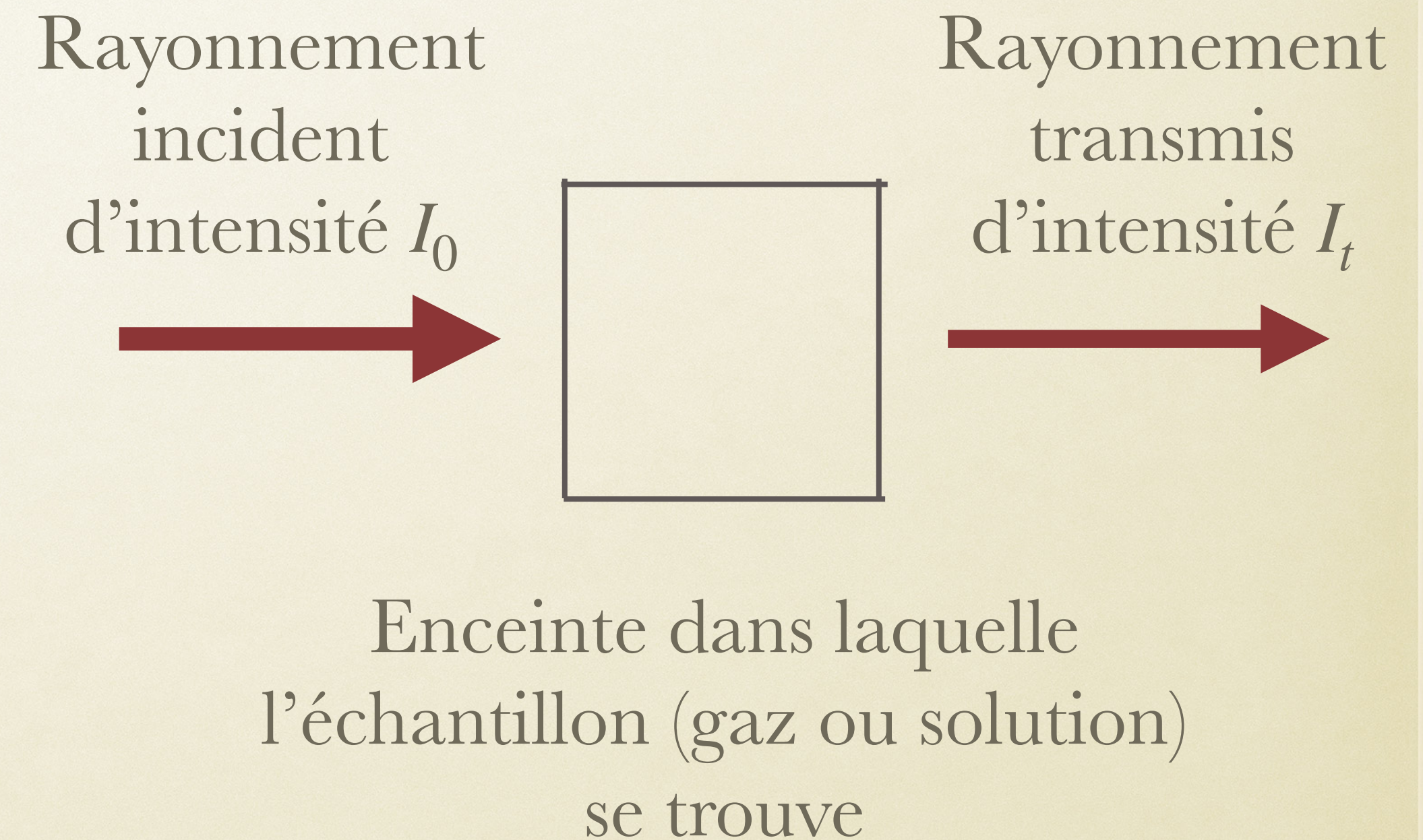
- On irradie l'espèce chimique étudiée par un rayonnement monochromatique dont la longueur d'onde se situe dans l'infrarouge (IR)

$$2,5 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 16 \mu\text{m}$$

- On compare l'intensité du rayonnement transmis  $I_t$  à celle du rayonnement incident  $I_0$  et on en déduit la **transmittance** :

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

- Si  $T < 1$ , une partie du rayonnement a été absorbée



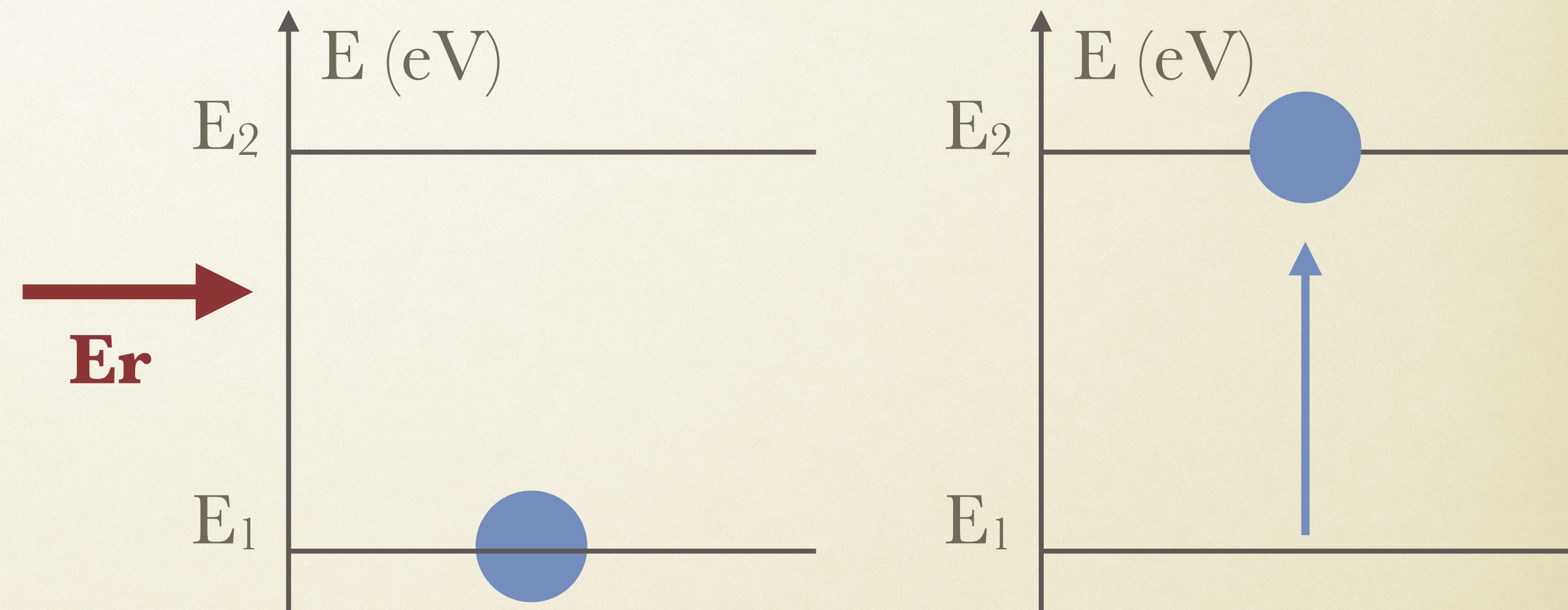
# POURQUOI LE RAYONNEMENT IR PEUT-IL ÊTRE ABSORBÉ ?

- À toute onde monochromatique (sinusoïdale) peut être associé un **photon** d'énergie

$$E_r = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

puisque  $\lambda = cT = c/\nu$

- Les **énergies des systèmes microscopiques sont quantifiées**. Ces systèmes peuvent absorber un photon *si son énergie est égale à la différence d'énergie entre deux niveaux du système*



Un photon d'énergie  $E_r = E_2 - E_1$  peut être absorbé. Le système passe alors dans un état excité

# QUELQUES ORDRES DE GRANDEURS

- Énergies transportées par les photons

- **UV (proche) :**

$$E_r = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 3,0 \cdot 10^8}{100 \cdot 10^{-9} \times 1,6 \cdot 10^{-19}} = 12,4 \text{ eV}$$

- **Visible :**

$$E_r = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 3,0 \cdot 10^8}{600 \cdot 10^{-9} \times 1,6 \cdot 10^{-19}} = 2,1 \text{ eV}$$

- **IR (proche) :**

$$E_r = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 3,0 \cdot 10^8}{2,5 \cdot 10^{-6} \times 1,6 \cdot 10^{-19}} = 5,0 \cdot 10^{-1} \text{ eV}$$

- **IR (plus lointain) :**

$$E_r = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 3,0 \cdot 10^8}{16 \cdot 10^{-6} \times 1,6 \cdot 10^{-19}} = 7,8 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$$

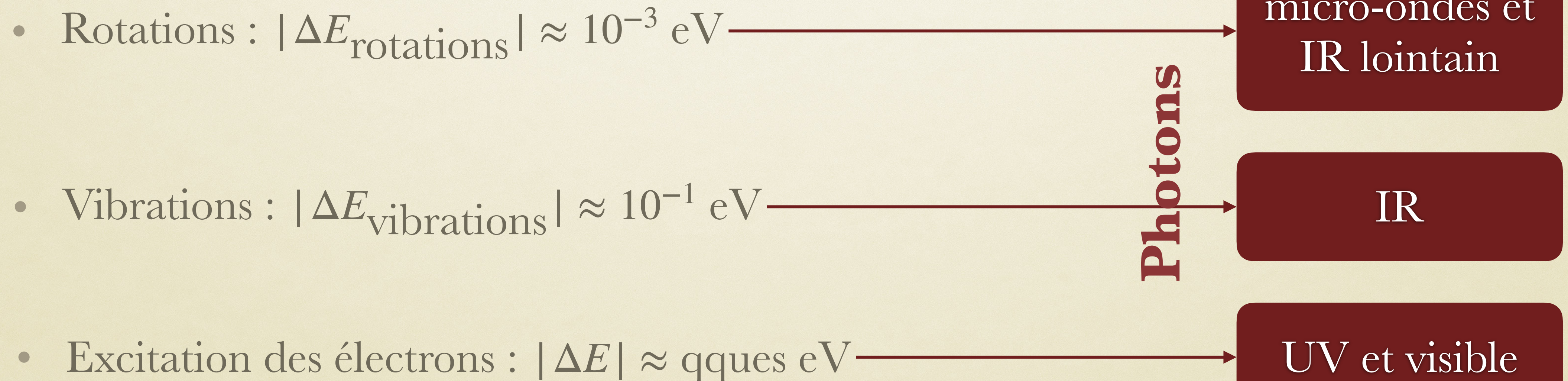
- Différence d'énergie entre les **niveaux électroniques** dans les atomes

$$|\Delta E| \approx \text{qqes eV}$$

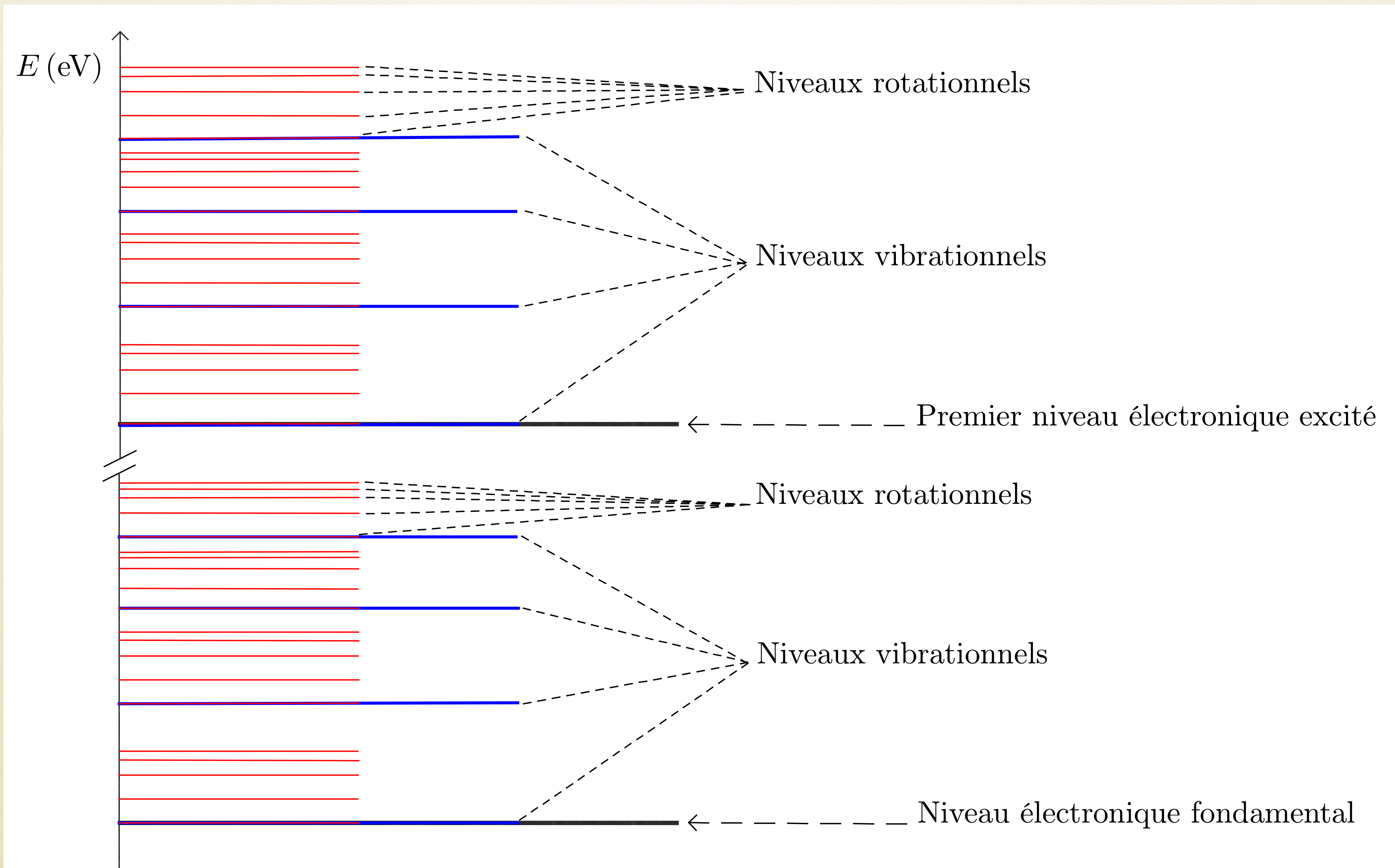
⇒ Seul un photon dont la longueur d'onde est située dans le domaine des UV (ou éventuellement le visible) transporte suffisamment d'énergie pour exciter les niveaux électroniques des atomes

# TOUTES LES ÉNERGIES DES SYSTÈMES MICROSCOPIQUES SONT QUANTIFIÉES

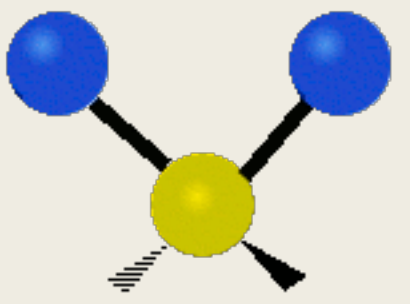
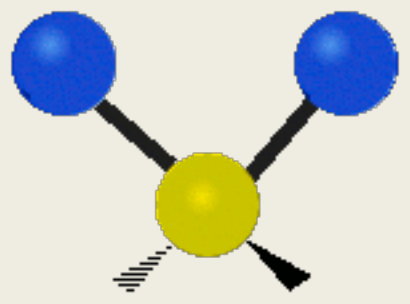
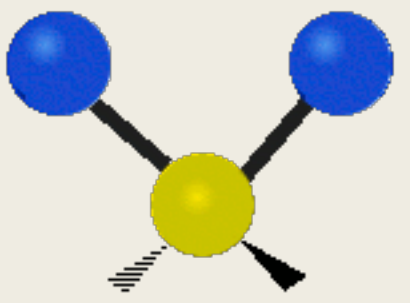
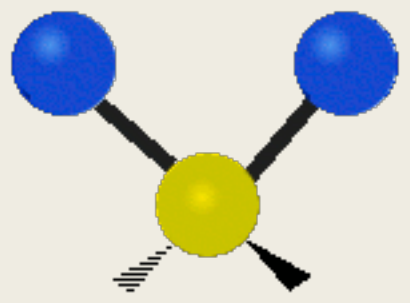
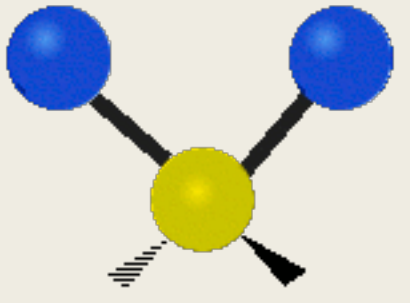
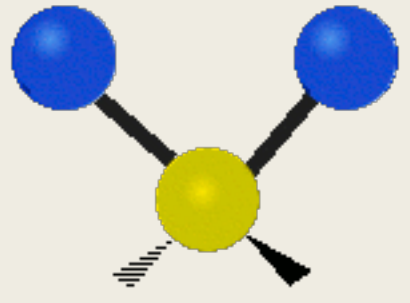
- Lorsqu'on dit que les énergies des systèmes microscopiques sont quantifiées, on ne parle pas seulement de l'énergie des atomes mais de *toutes les énergies* de ces systèmes : une molécule peut **vibrer**, se **déformer**, **s'étirer**, **tourner**, ...
- À chacune de ces déformations correspondent des énergies bien spécifiques :



# SCHÉMATISATION DES NIVEAUX D'ÉNERGIE DANS UNE MOLÉCULE



# EN RÉSUMÉ, AU SEIN D'UNE MOLÉCULE ON PEUT TROUVER...

Symétrie Direction	Symétrique	Antisymétrique
Radiale		
	Étirement symétrique	Étirement antisymétrique
Transversale		
	Cisaillement	Bascule
Longitudinale		
	Agitation	Torsion

- Mouvements possibles des atomes des fragments  $-\text{CH}_2-$  présents dans les chaînes carbonées
- Les mouvements de l'atome de carbone (en jaune) ne sont pas représentés (bien qu'il bouge) car l'amplitude de son mouvement est bien plus petite que celles des hydrogènes, plus légers

Les énergies de toutes ces déformations sont différentes et **dépendent de la liaison**



## **2. ANALYSE DE LA LUMIÈRE TRANSMISE : SPECTRE IR**

# AVANT DE COMMENCER

- Le résultat de l'analyse de la lumière n'est pas exprimé en fonction de la **longueur d'onde**  $\lambda$  mais du **nombre d'onde**  $\sigma$  :

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

- Le nombre d'onde est une **fréquence spatiale**, c'est à dire le *nombre de longueurs d'onde que l'on peut compter par mètre*
- **Unité** : « par mètre » ( $\text{m}^{-1}$ )  
En pratique, on utilise le « par centimètre » ( $\text{cm}^{-1}$ )

# ALLURE D'UN SPECTRE IR

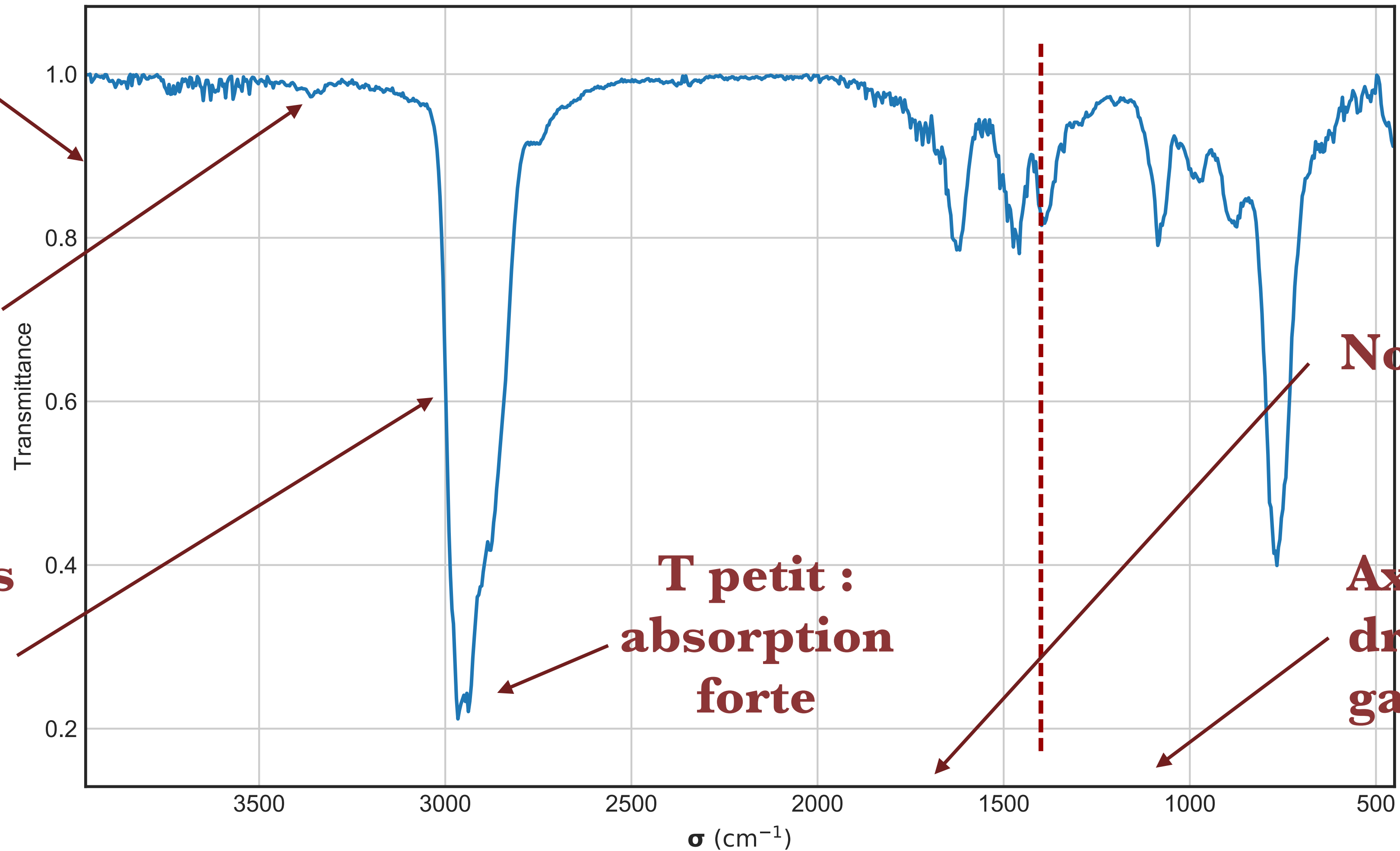
**Transmittance**

**T**

**pas  
d'absorption**

$T < 1 \implies$   
**absorption des  
photons et  
déformation  
spécifique**

Infrared spectrum : 1-propanamine : gas



**Nombre d'onde  $\sigma$**

**T petit :  
absorption  
forte**

**Axe orienté de la  
droite vers la  
gauche**

# DEUX ZONES DANS LE SPECTRE

- On identifie deux zones dans le spectre :
  - **$600 < \sigma < 1400 \text{ cm}^{-1}$**  : on trouve une multitude de petites bandes correspondant à des couplages entre déformations. C'est l'**empreinte digitale** de la molécule

L'empreinte digitale permet de distinguer (si l'on est un expert) deux molécules différentes appartenant à la même famille. Elle n'est donc, *la plupart du temps*, pas utilisée pour reconnaître un groupe caractéristique

- **$1400 < \sigma < 4000 \text{ cm}^{-1}$**  : On trouve les bandes correspondant aux vibrations d'élongation

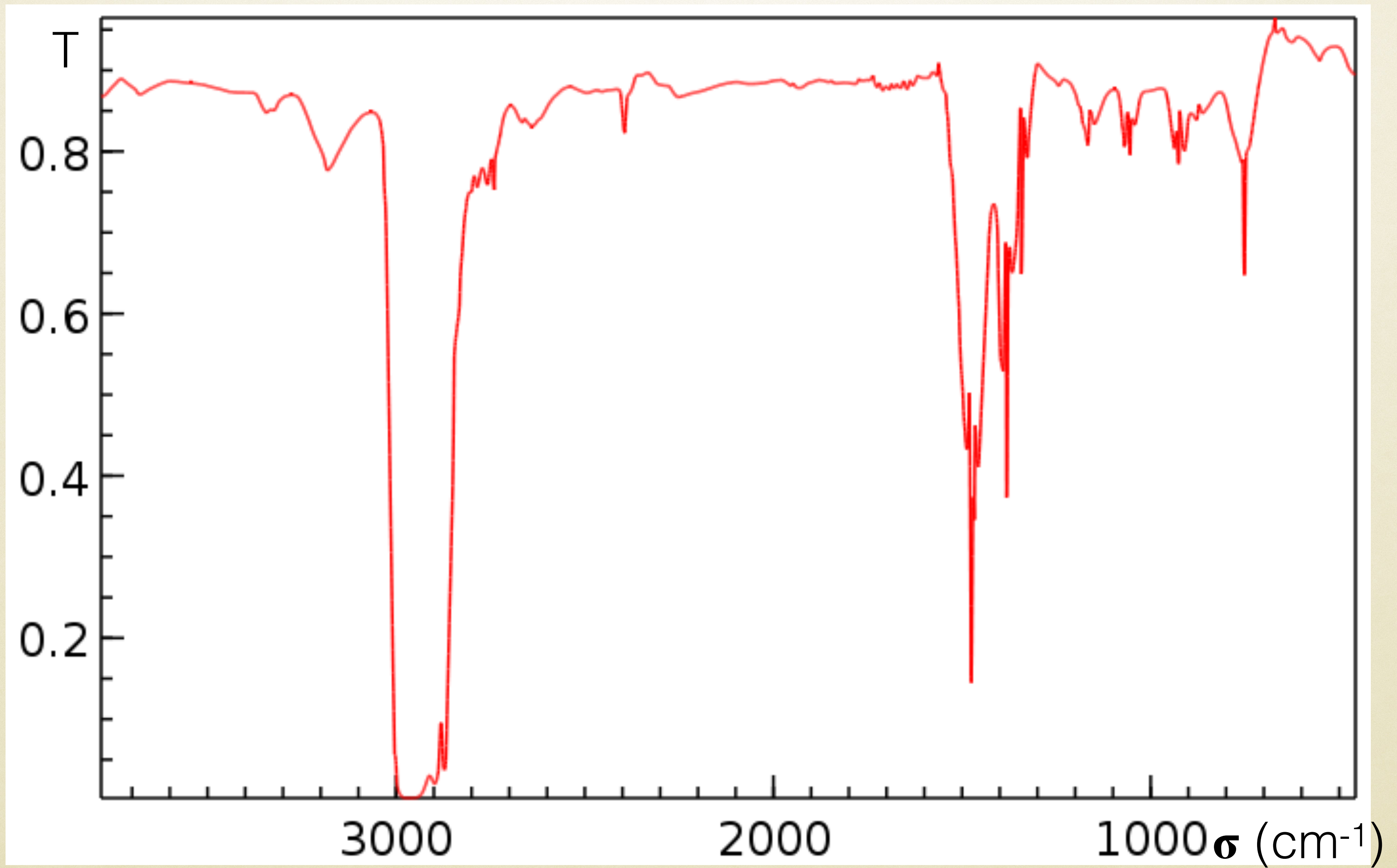
*Les vibrations d'élongation permettent d'identifier les liaisons des groupes caractéristiques*

# BANDES D'ABSORPTION CARACTÉRISTIQUES

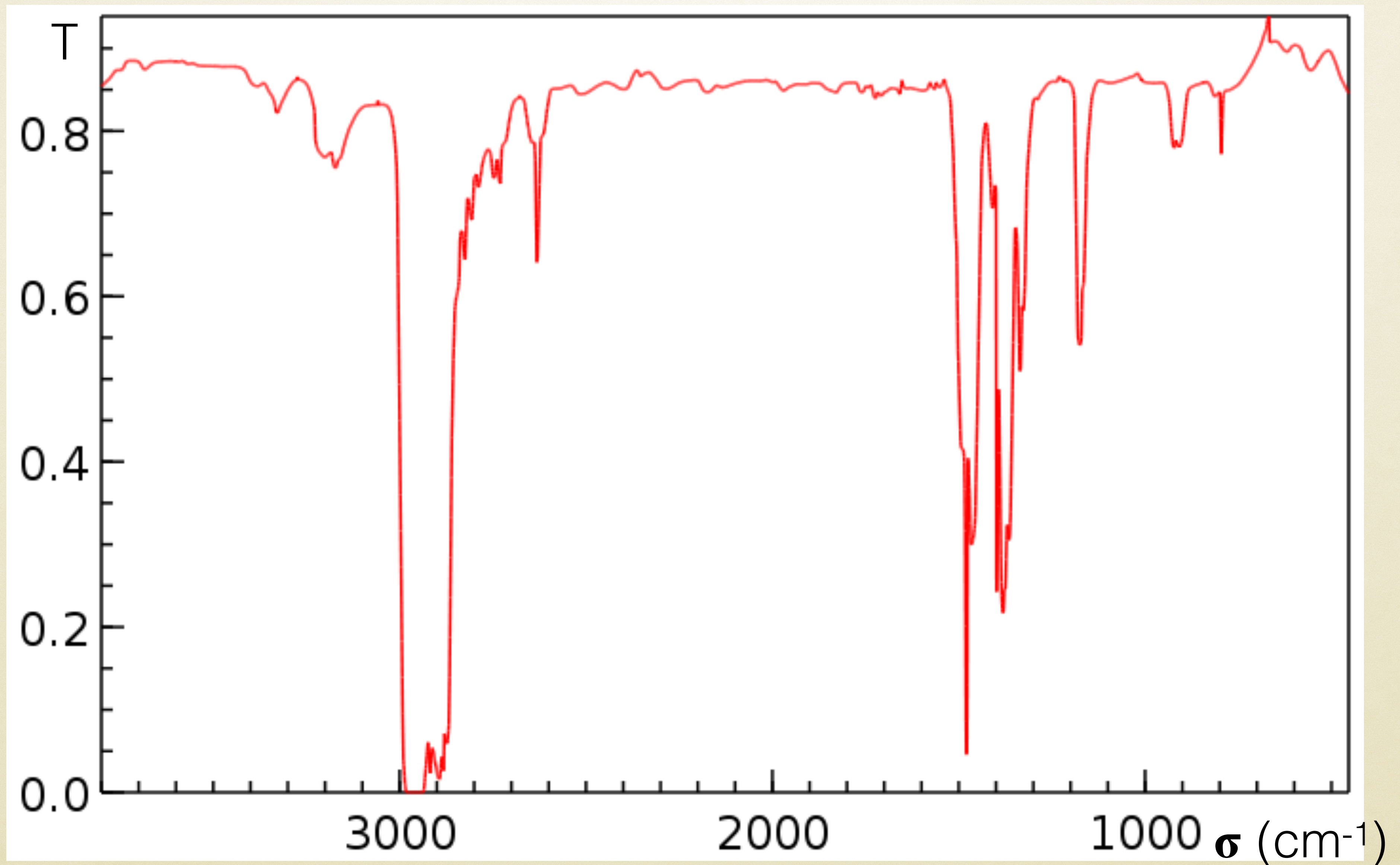
Liaison	Nombre d'ondes (cm <sup>-1</sup> )	Intensité
O—H	3200 à 3650	Forte
N—H	3100 à 3500	Moyenne
C <sub>tri</sub> —H	3000 à 3100	Moyenne
C <sub>tét</sub> —H	2800 à 3000	Forte
C=O	1650 à 1750	Forte
C=C	1625 à 1685	Moyenne
N—H	1600	Moyenne
C <sub>tét</sub> —H	1415 à 1470	Forte
C—O	1050 à 1450	Forte

# 3. LECTURE DE QUELQUES SPECTRES IR

# PROPANE

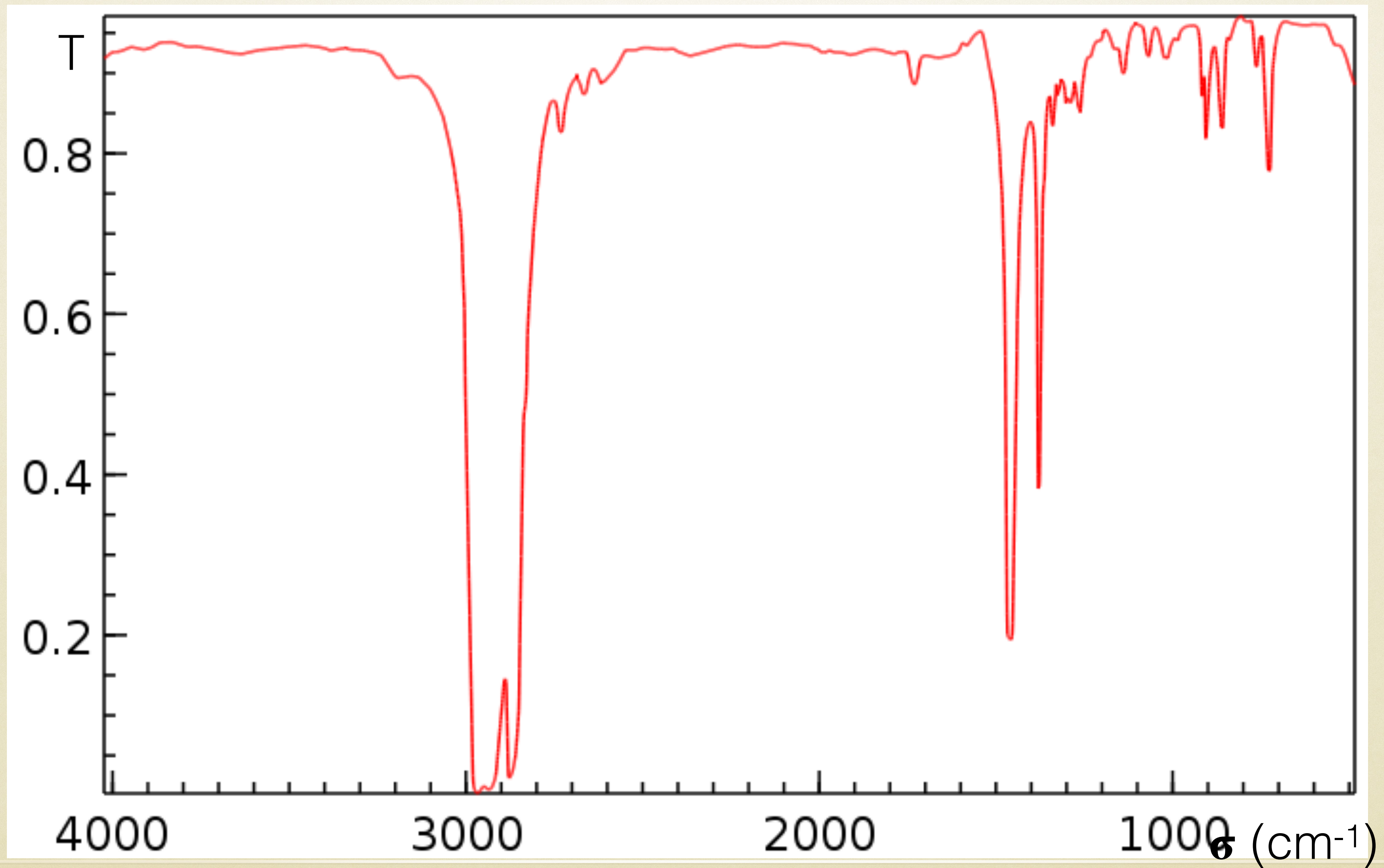


# 2-MÉTHYLPROPANE

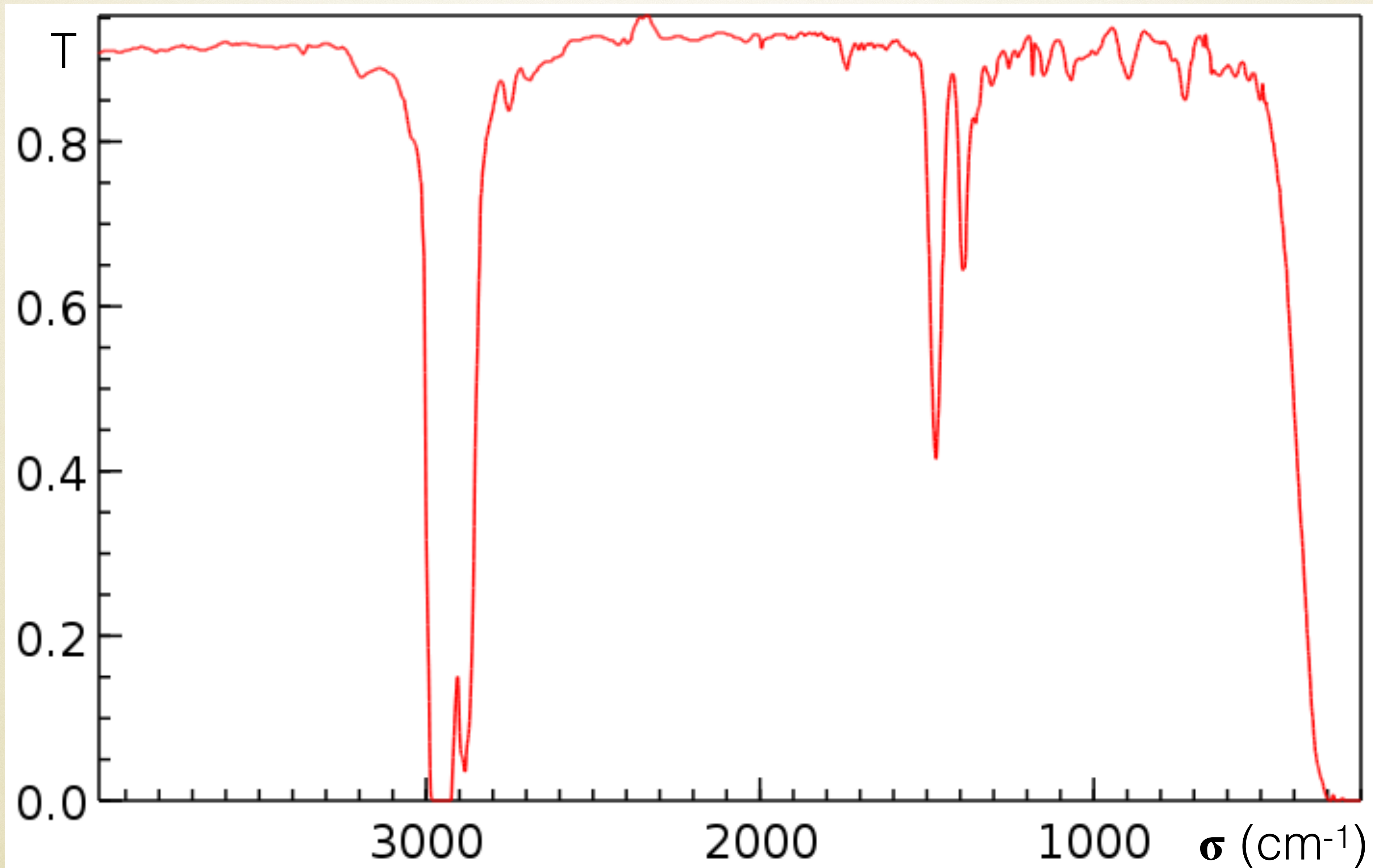




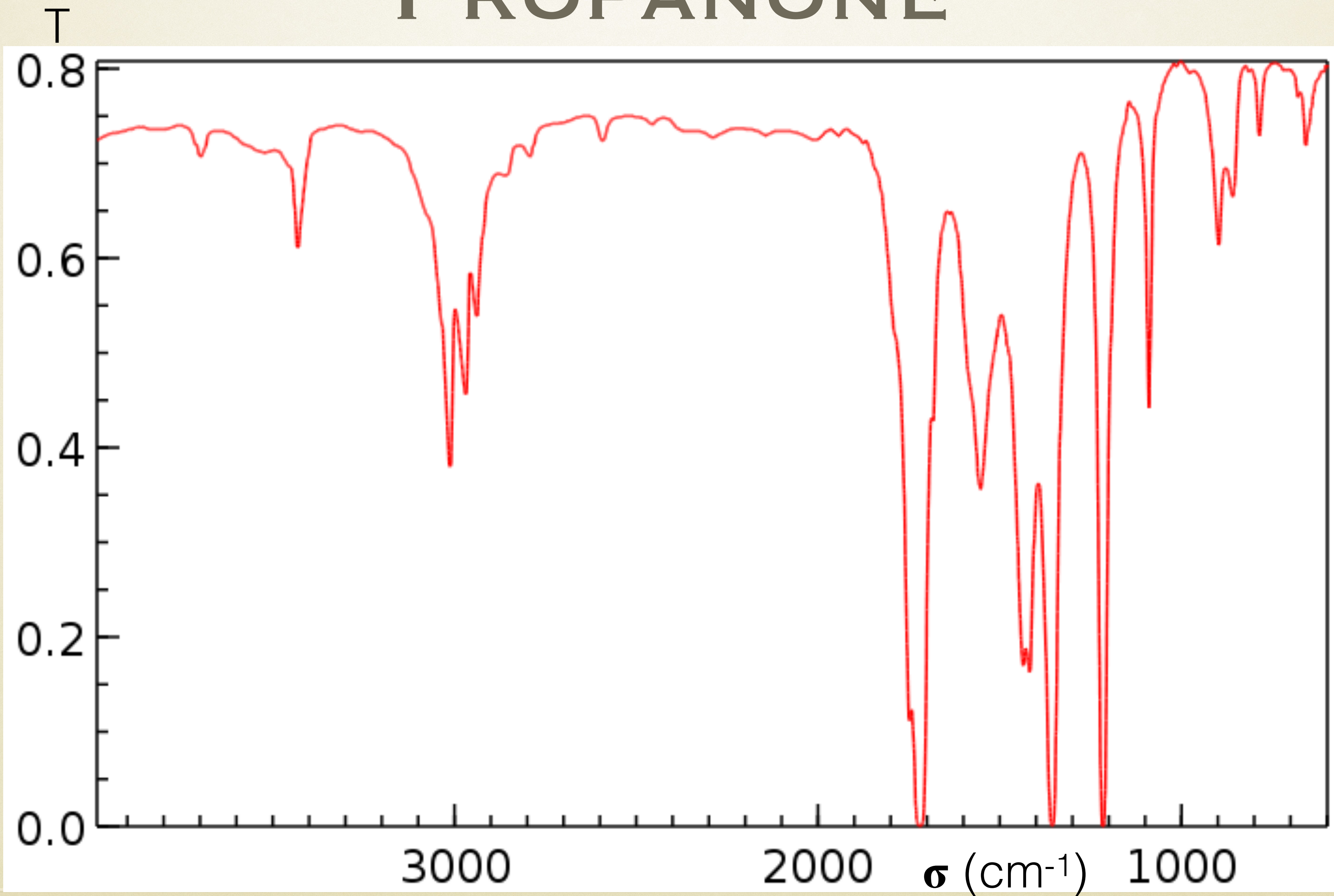
# PENTANE



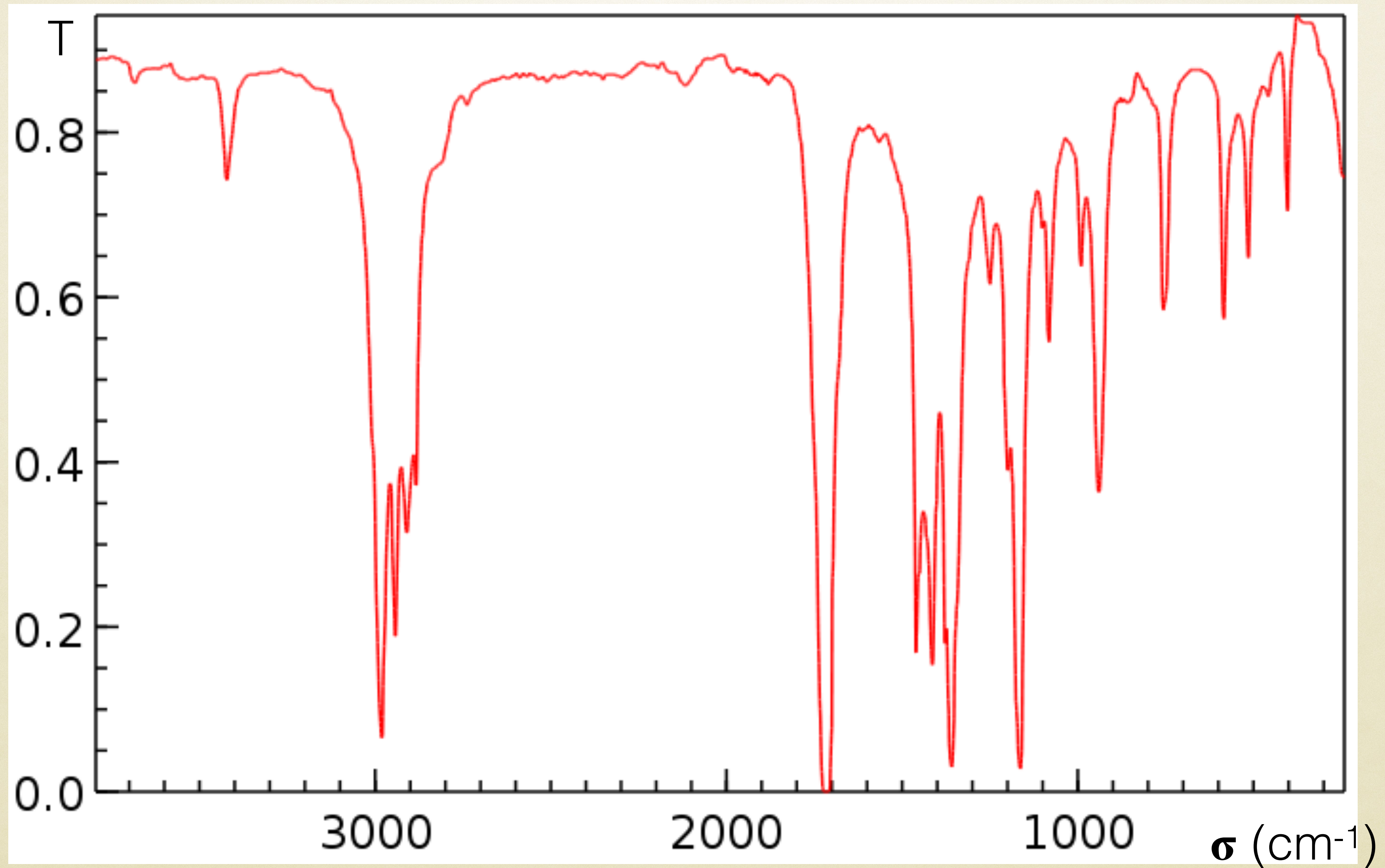
# HEXANE



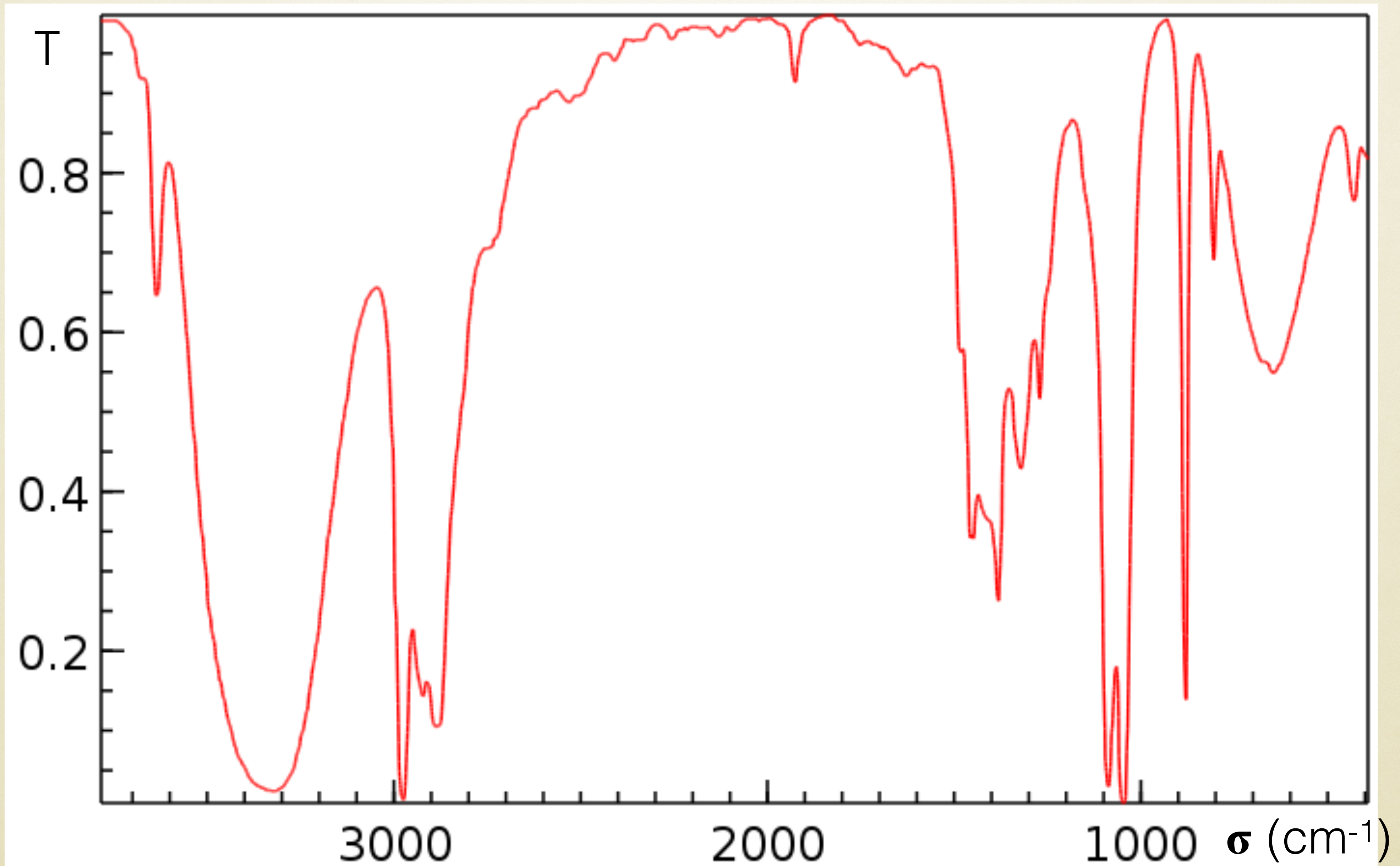
# PROPANONE



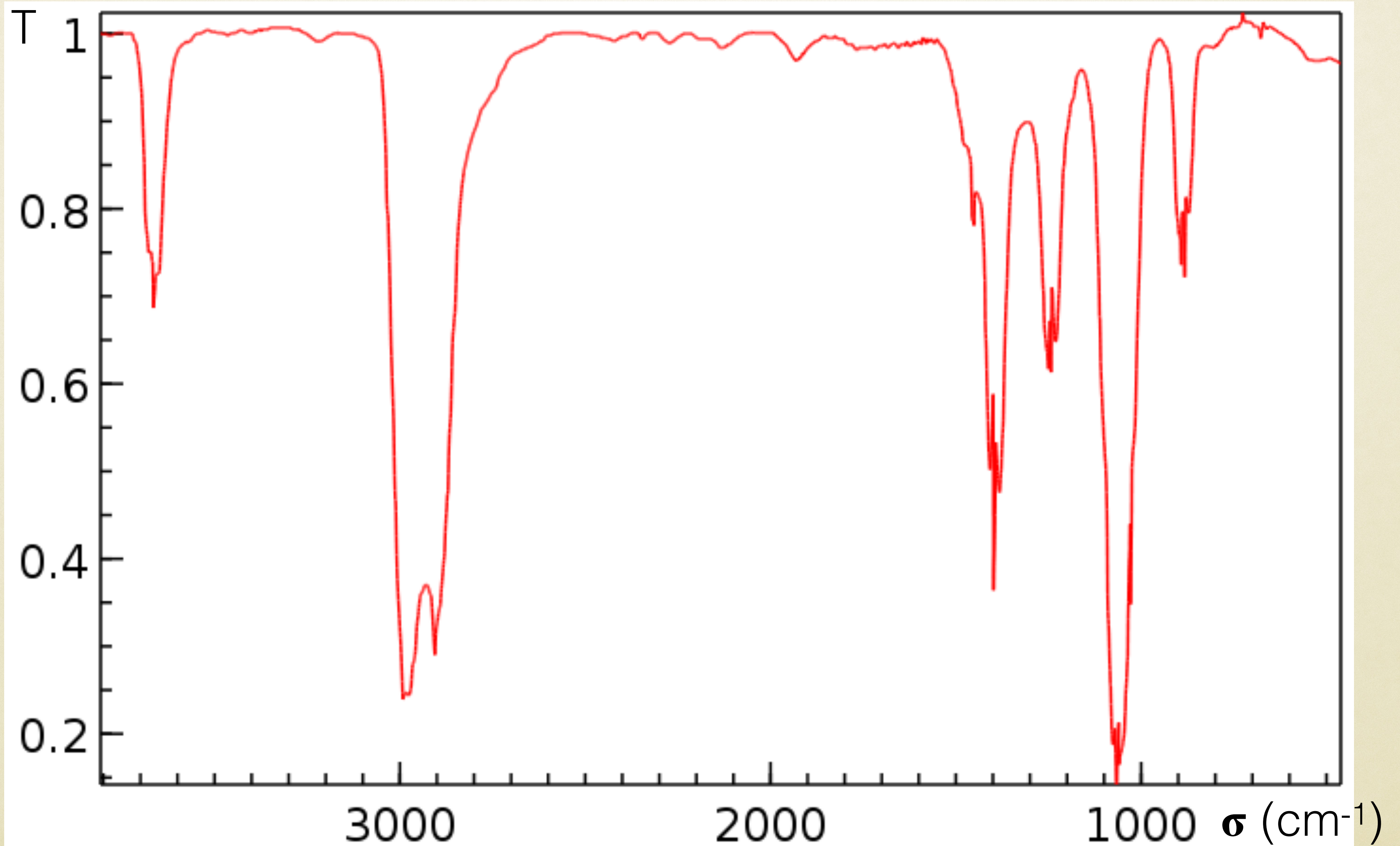
# BUTANONE



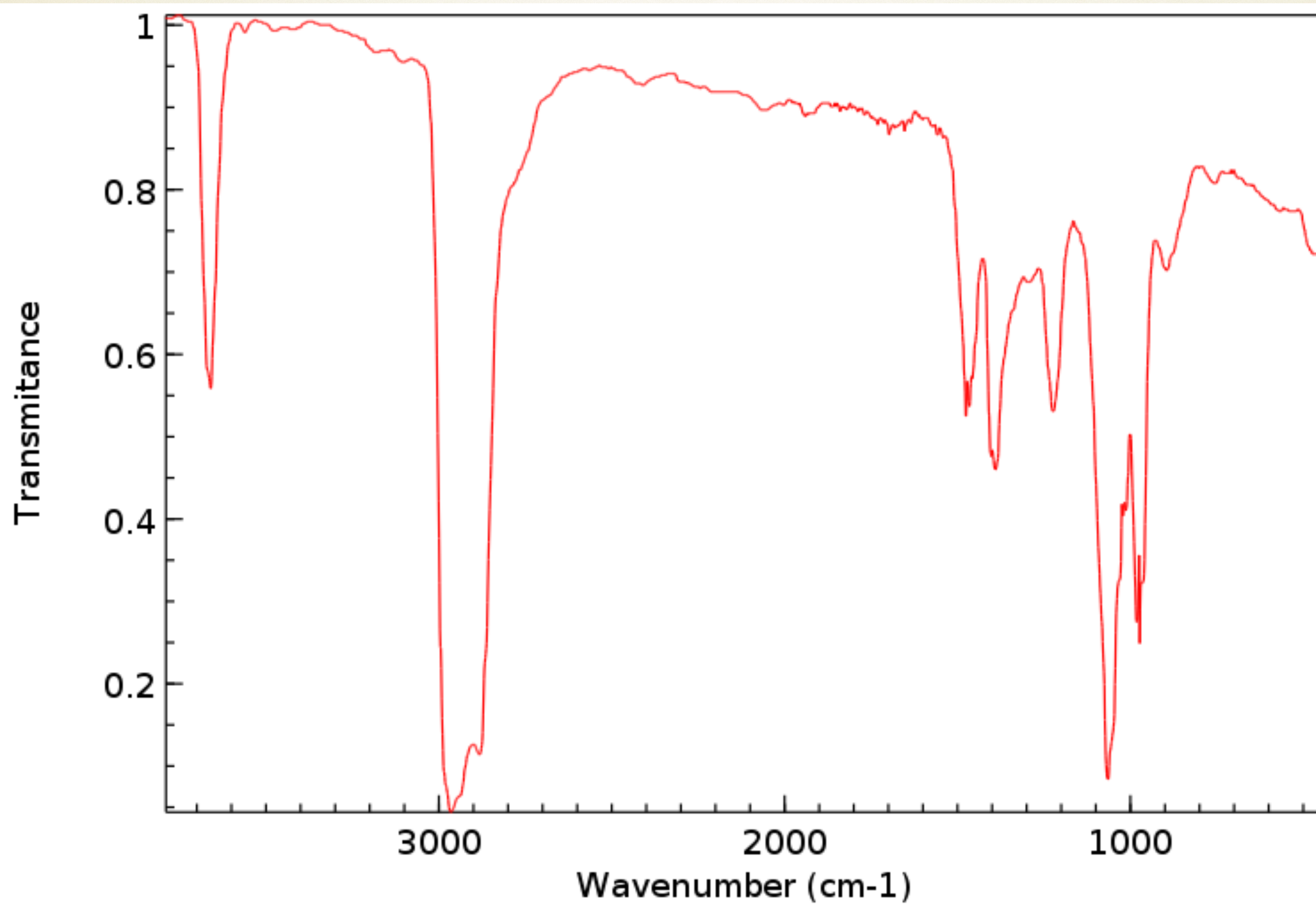
# ÉTHANOL (DANS SOLVANT)



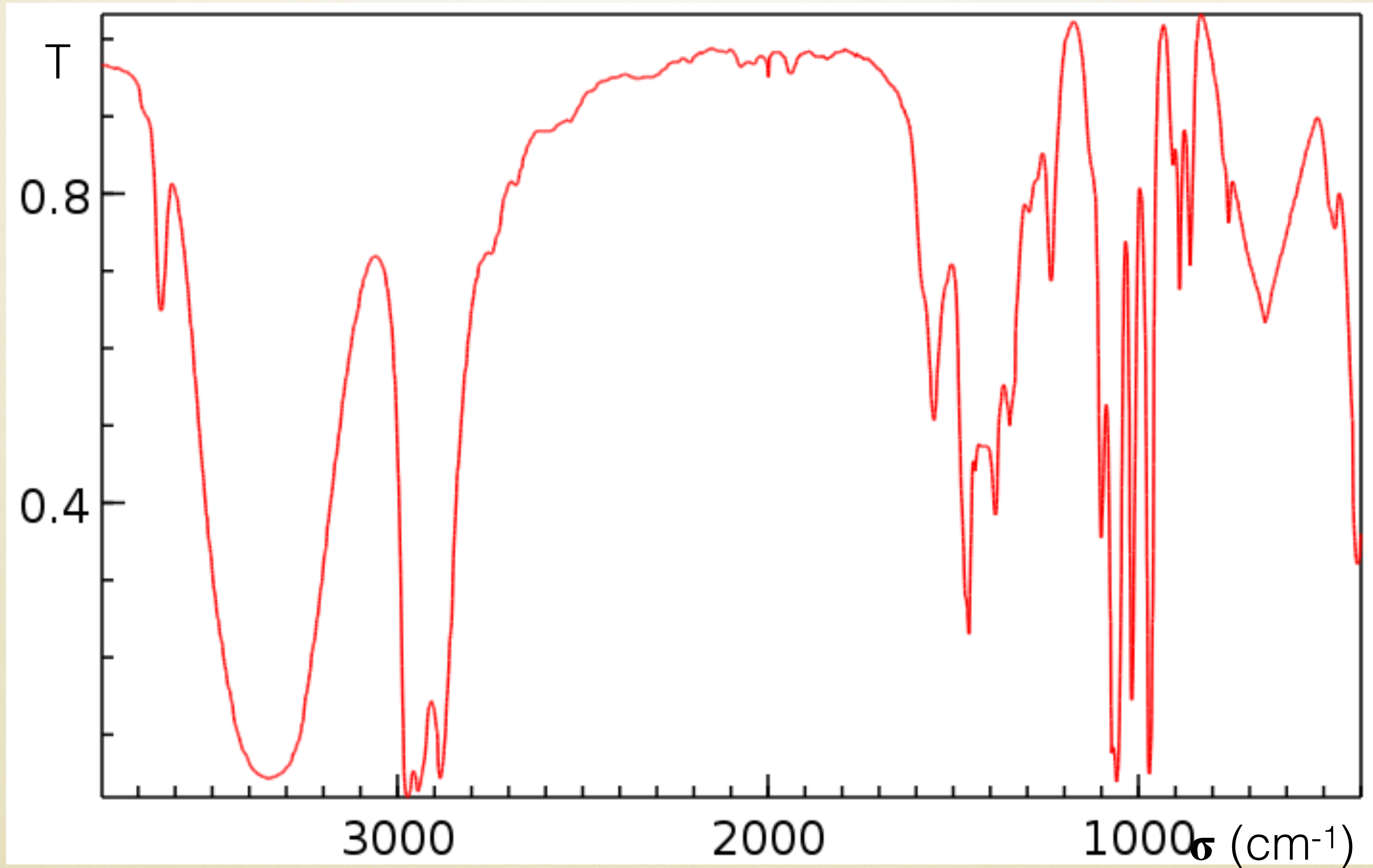
# ÉTHANOL (PHASE GAZEUSE)



# PROPAN-1-OL (PHASE GAZEUSE)

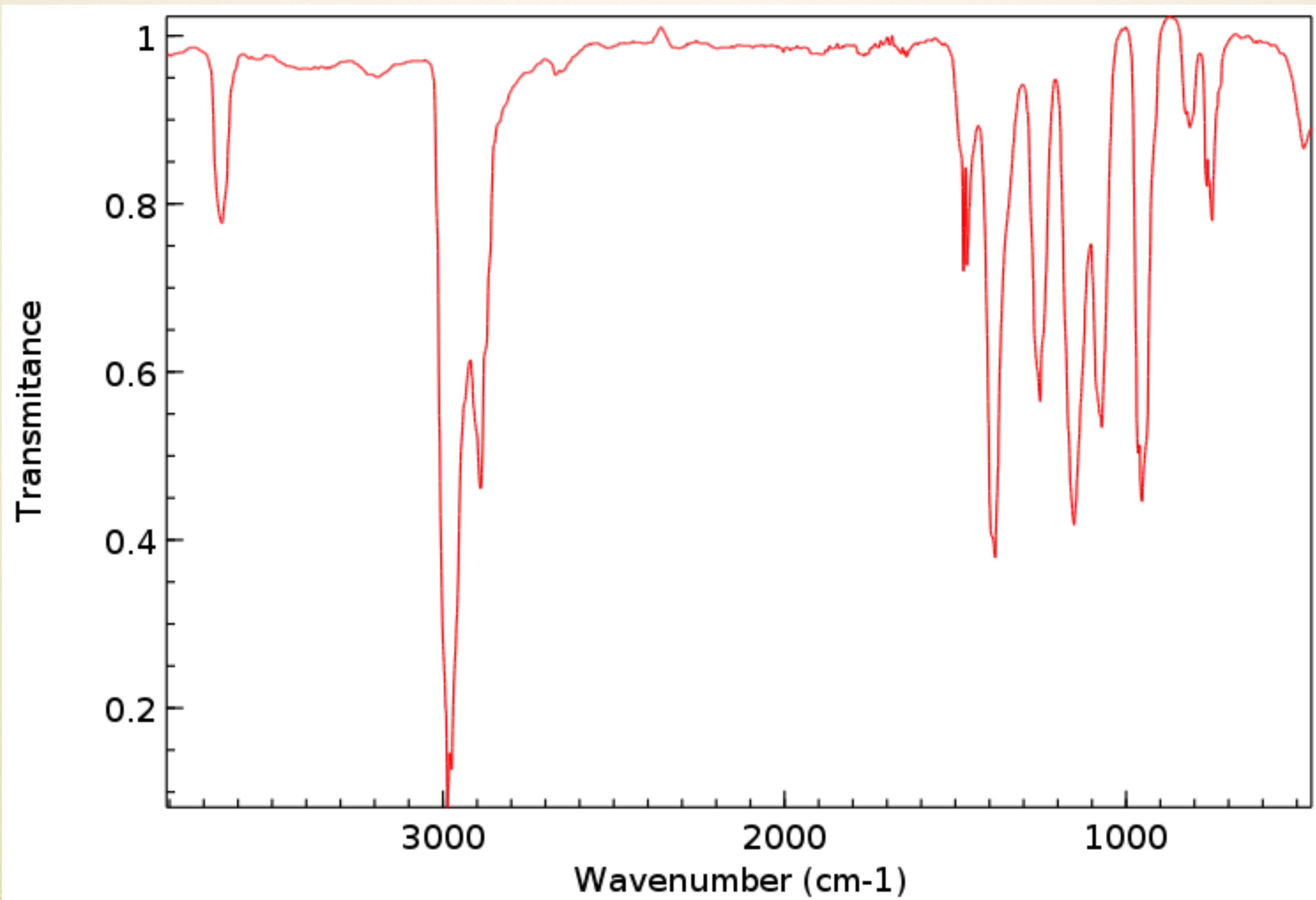


# PROPAN-1-OL (DANS SOLVANT)

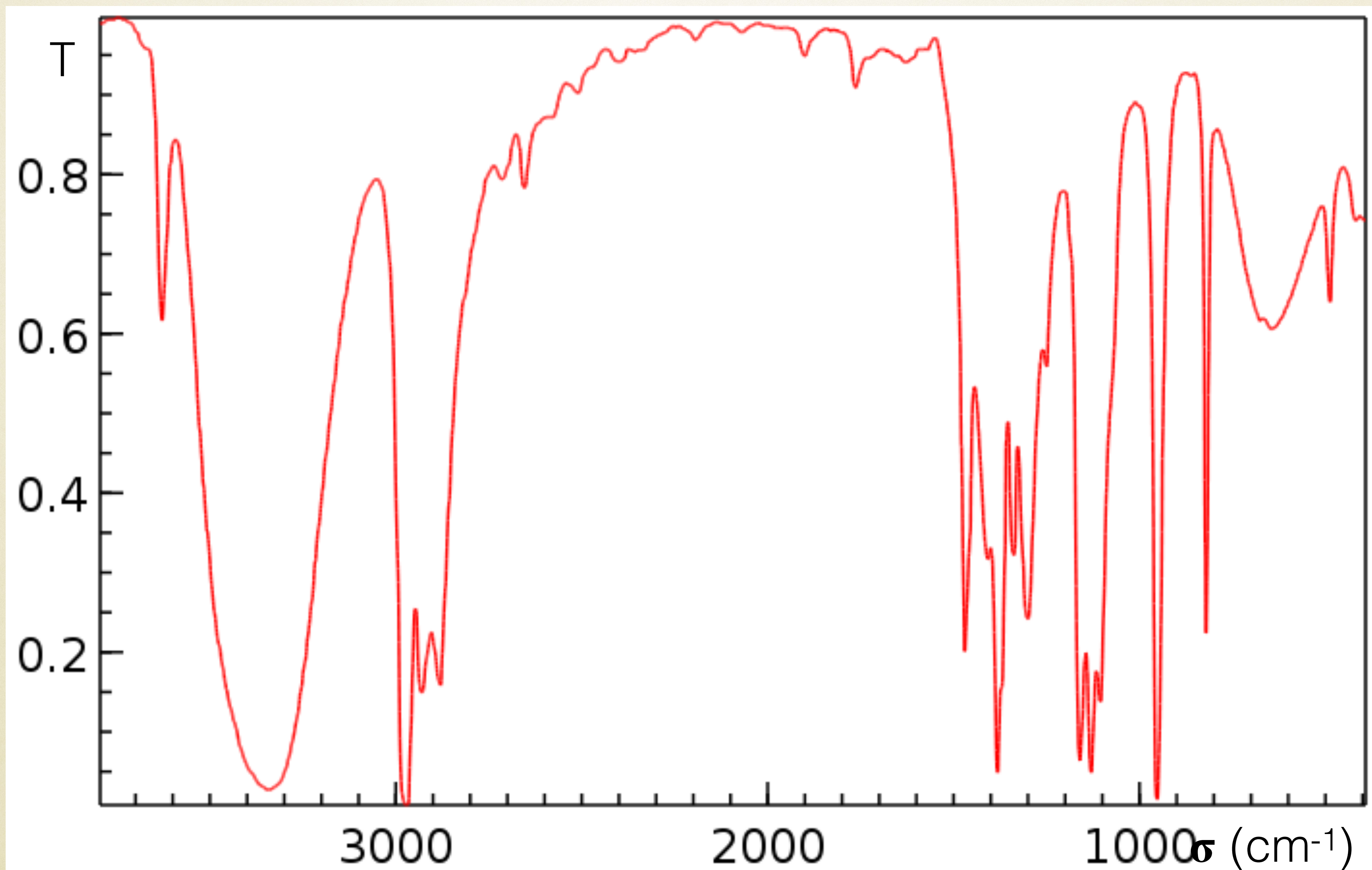




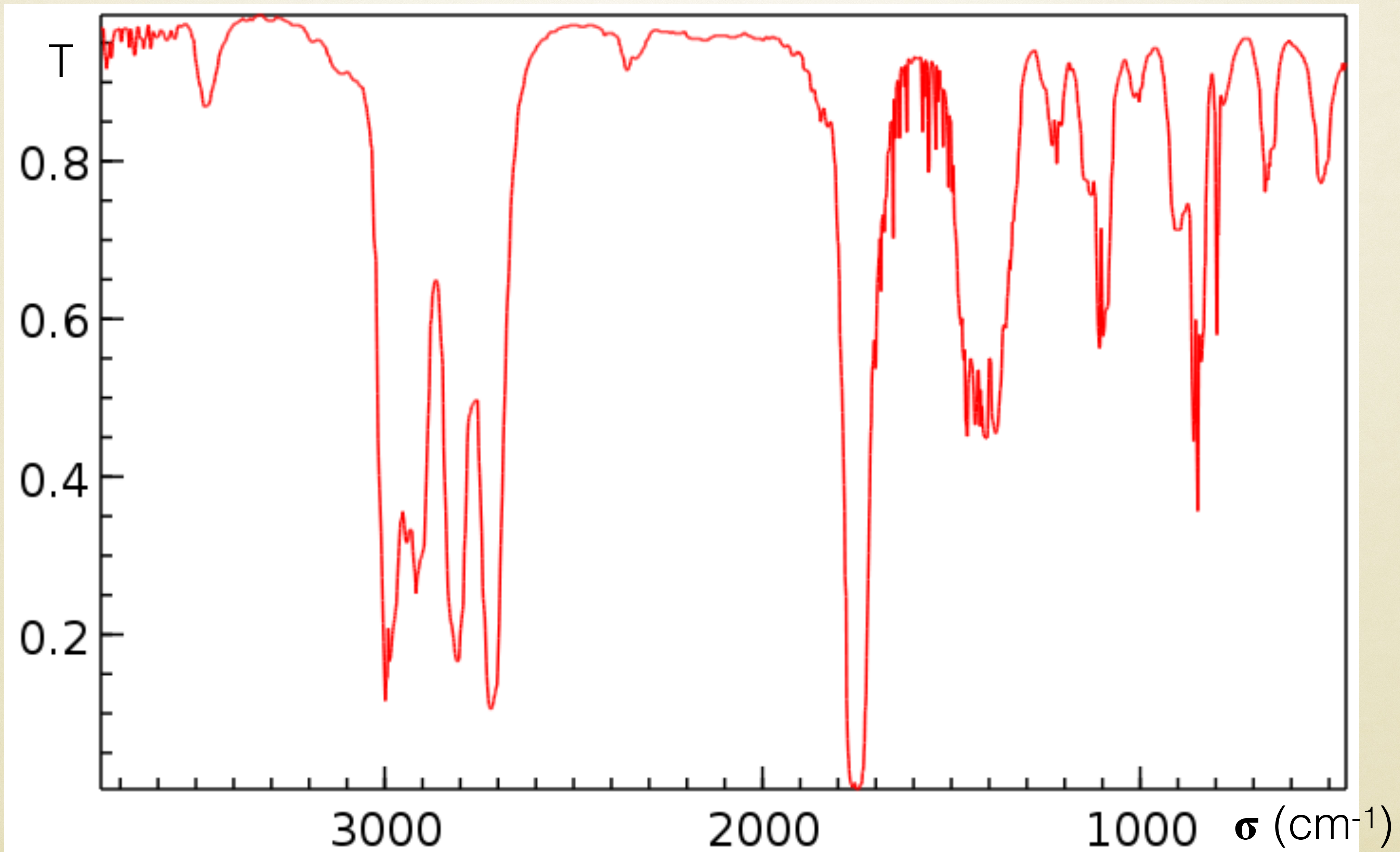
# PROPAN-2-OL (PHASE GAZEUSE)



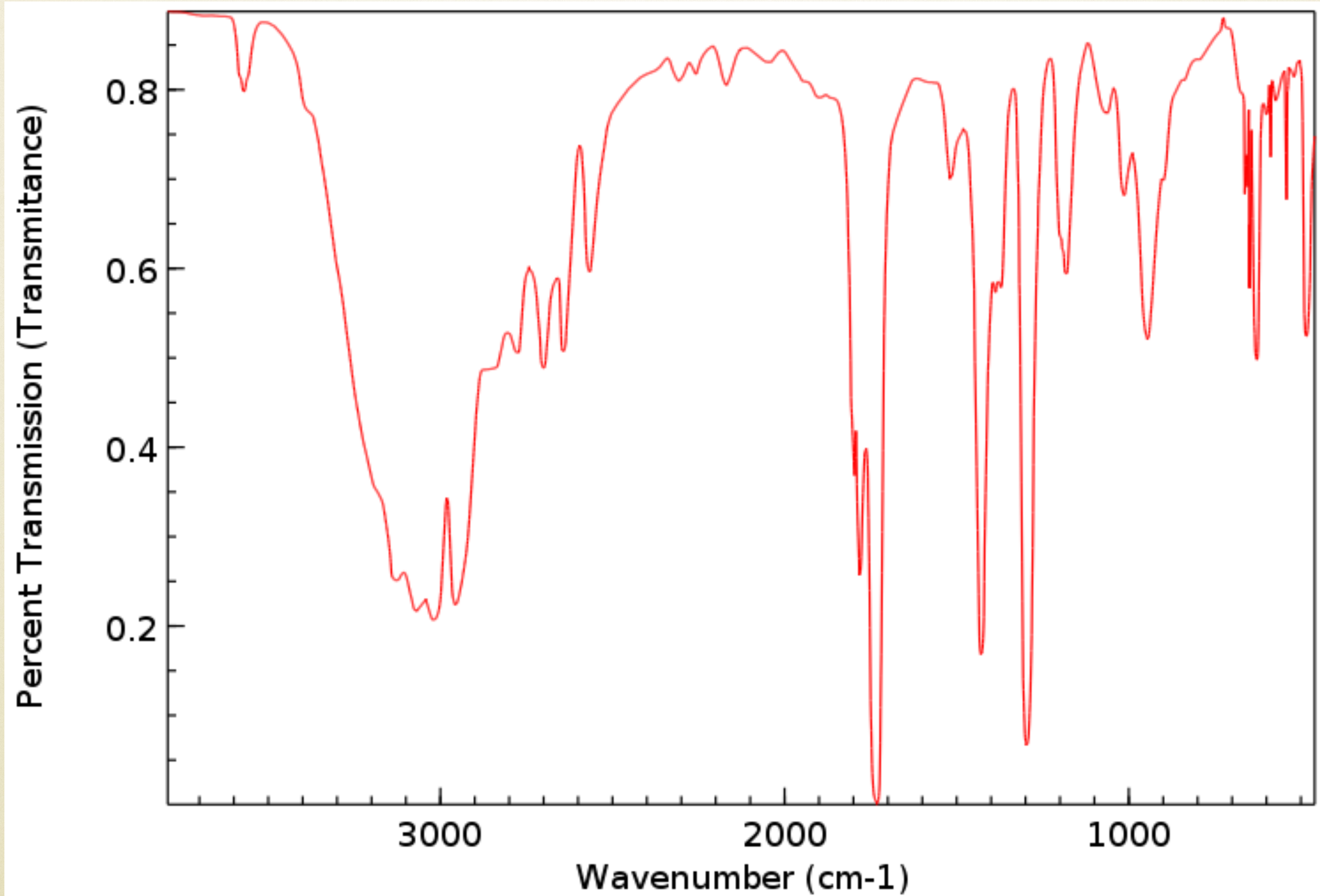
# PROPAN-2-OL (DANS SOLVANT)



# PROPANAL



# ACIDE ÉTHANOÏQUE (PHASE GAZEUSE)



# ACIDE ÉTHANOÏQUE (DANS SOLVANT)

