

Université ZIANE Achour-Djelfa
Faculté des Sciences exactes et informatique
Département de Chimie

Cours adressé aux étudiants de 2^{ème} Année Licence
Chimie

Module : Techniques d'Analyse Physico-chimique II

Chapitre 4 : Spectrométrie Infrarouge

Enseignant : Dr. Lahcene SOULI

IV. 1 Introduction

La spectroscopie infrarouge est une méthode d'analyse spectrale beaucoup utilisée pour :

- Caractériser où identifier des fonctions chimiques existantes dans une molécule.
- Le suivie de l'évolution d'une réaction chimique.

La partie infrarouge du rayonnement électromagnétique est divisé en trois régions :

- Le proche infrarouge, est le plus énergétique qui s'étend de 14000 à 4 000 cm^{-1}
- Le moyen infrarouge qui va de 4000 à 400 cm^{-1}
- Le lointain infrarouge dont le nombre d'onde est compris entre 400 et 10 cm^{-1}

VI. 2 Présentation du spectre du moyen infrarouge

Un spectre IR (Fig. IV. 1) est l'ensemble de toutes les vibrations d'élongation et de déformation d'une molécule sur lequel la transmittance (T%) d'une solution est tracée en fonction du nombre d'onde (cm^{-1}).

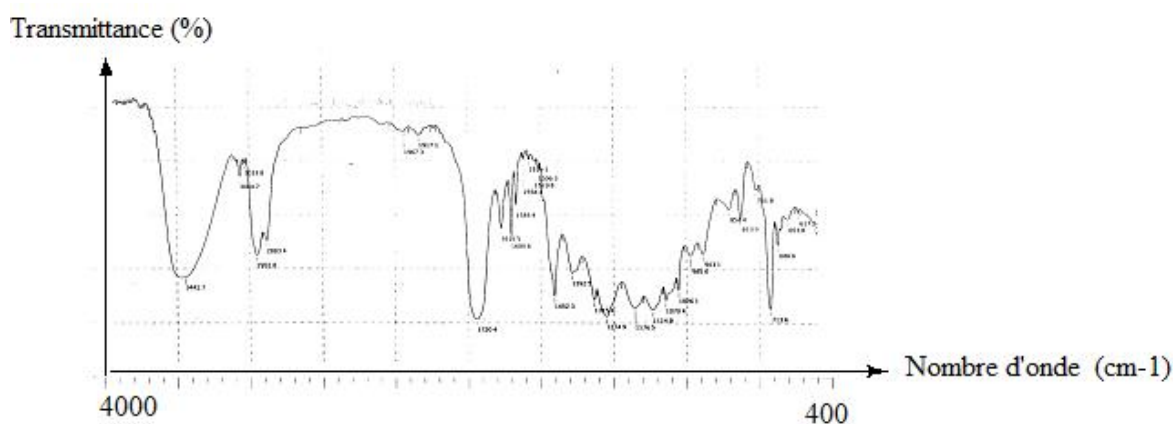


Fig. IV. 1 Spectre du moyen infrarouge

Toutes les bandes résultantes de vibrations d'élongation et de déformation d'une molécule sont sur ce spectre

VI. 3 Origine des absorptions dans le moyen infrarouge

Lorsqu'un échantillon est traversé par un faisceau lumineux IR, une partie de la lumière est absorbée par les molécules. L'énergie absorbée provoque des mouvements de vibration internes (d'élongation et de déformation). Ces vibrations sont à l'origine des bandes d'absorption que nous observons sur le spectre infrarouge.

La fréquence nécessaire à l'absorption de certaines vibrations peut effectivement prévue en appliquant la loi de HOOKE.

$$\bar{\nu} = \frac{1}{1\pi C} \sqrt{\frac{f(M_x + M_y)}{M_x M_y}}, \text{ ou } \bar{\nu} = \frac{\nu}{C}$$

$\bar{\nu}$: Nombre d'onde de vibration (cm^{-1})

C : vitesse de la lumière (cm/s)

f : constante de force de la liaison (dyne/cm).

M_x et M_y sont les masses en (g) des atomes x et y respectivement.

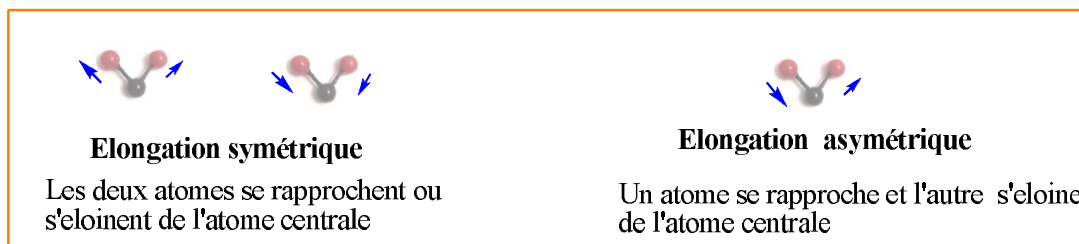
Tableau IV. 1 : Constante de force de liaison

Type de liaison	C-O	C-C	C-N	C=C	C=O	C \equiv C	C-H	O-H
f(dyne/cm)	$5 \cdot 10^5$	$4,5 \cdot 10^5$	$4,9 \cdot 10^5$	$9,7 \cdot 10^5$	$12,1 \cdot 10^5$	$15,6 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^5$	$7 \cdot 10^5$

IV. 4 Bandes de vibration-rotation du moyen infrarouge

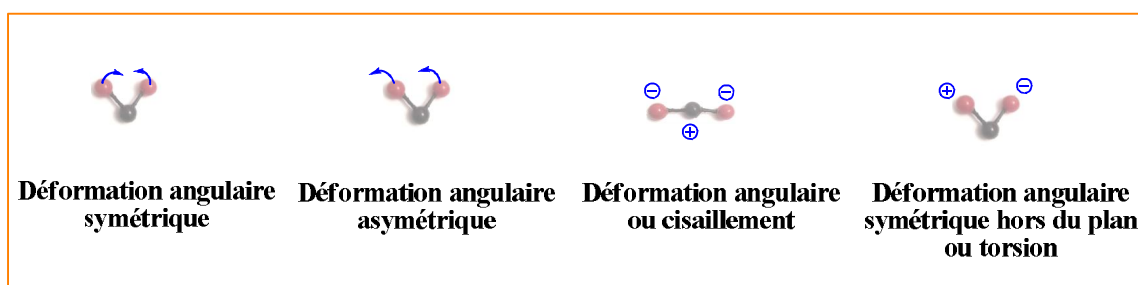
IV. 4. 1 Vibration d'élongation ou d'allongement

Une vibration d'élongation est un mouvement des atomes dans la même molécule qui se rapprochent ou s'éloignent périodiquement le long de leur axe c.-à-d variation de la distance interatomique.



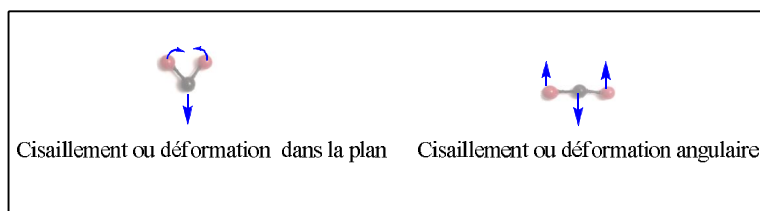
IV. 4. 2 vibrations de déformation

Différentes vibrations de déformation



IV. 4. 3 vibrations de cisaillement

Différentes vibrations de cisaillement



- Une molécule non linéaire constituée de (**n**) atomes possède $(3n-6)$ de vibration possible
- Une molécule non linéaire constituée de (**n**) atomes possède $(3n-5)$ de vibration possible.

IV. 5 Bandes caractéristiques des composés organiques

Sur un spectre du moyen infrarouge, on distingue habituellement trois régions :

- La région **4000-1500 cm^{-1}** contient les bandes d'élongation des principaux groupements comme la bande de O-H, N-H, C=O, C=C-H, C-H,
- La région **1500-1000 cm^{-1}** appelée l'empreinte digitale du composé ou se trouve les vibrations de déformations et les bandes d'élongation de C-O (Alcool, esters, éthers,).
- La région **1000-600 cm^{-1}** contient les bandes de déformation en dehors du plan de la liaison C-H (éthyléniques et aromatiques) et à des déformations des cycles. On donne ci-dessous un spectre IR.

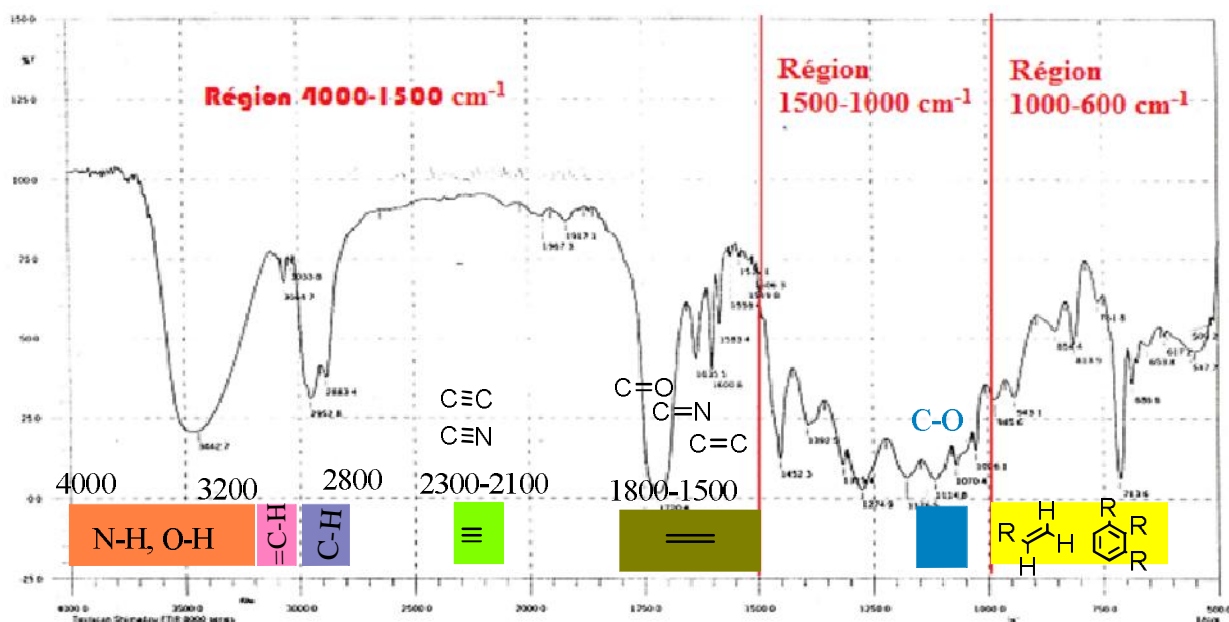


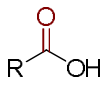


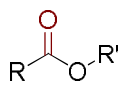
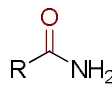
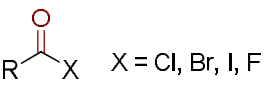


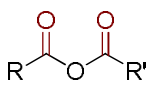
Fig IV. 2 Les différentes régions d'un spectre IR

IV. 5. 1 La région $4000-1500\text{cm}^{-1}$

a. Vibration d'élongation de la liaison C=O

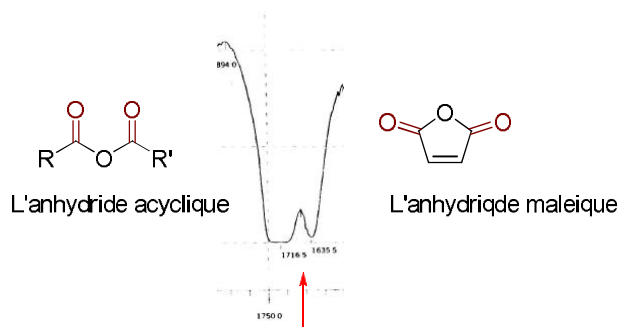
Le groupe carbonyle génère une bande intense (forte) dans la région $1870-1540\text{cm}^{-1}$, elle est variée d'un composé à l'autre. Ce groupe est rencontré dans les composés ci-dessous :

Tableau IV. 1 Composés chimiques comportant un groupe carbonyle

				
Acide carboxylique	Aldéhyde	Cétone	Esters carboxyliques	Amide
				
Halogénure d'acide	Lactone	Lactame	Anhydride	

Remarques

- Les anhydrides montrent deux bandes de la vibration d'élongation symétrique et asymétrique de la liaison C=O, les anhydrides acycliques saturés absorbent vers 1818 et 1750cm^{-1} .


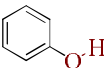

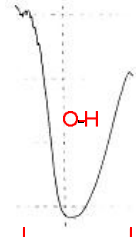


Bandes de vibrations d'élongation de la liaison C=O d'un anhydride

b. Vibration d'élongation de la liaison O-H

L'hydroxyde se rencontre dans les alcools, les acides et les phénols

Tableau IV. 4 Composés chimiques comportant un groupe hydroxyde (O-H)

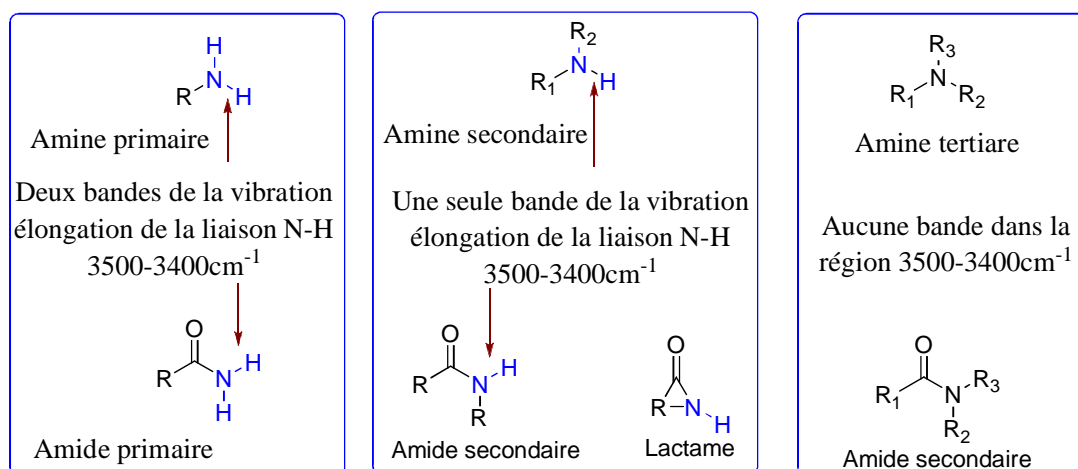
			
Alcool	Phénol	Acide	

Une bande large

c. Vibration d'élongation de la liaison N-H

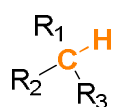
La fonction (N-H) est rencontrée dans les amines, les amides et les lactames.

Tableau IV. 2 Composés chimiques comportant N-H

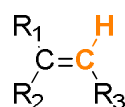


Bande II due à la vibration de déformation de la liaison (N-H)
 (ν N-H entre 1650 et 1515cm^{-1})

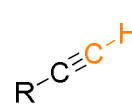
d. Vibration d'élongation des liaisons C-H dans les :



Alcanes



Alcènes



Alcynes

Les alcanes présentent des bandes d'absorption de vibration d'élongation de la liaison (C-H) au dessous de 3000cm^{-1} donc entre **3000 et 2850cm^{-1}** (voir la fig. IV. 1)

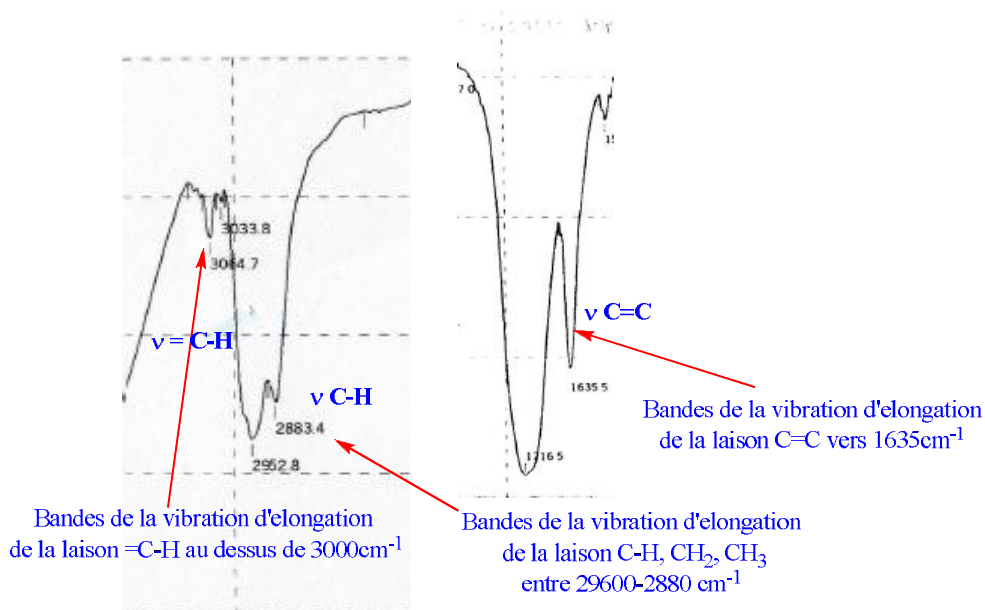


Fig IV. 3 Bandes de vibrations d'élongations de la liaison C=C, =C-H.

- La majorité des aldéhydes présentent une absorption due à l'élongation de la liaison C-H aldéhyde entre **2830-2695** cm^{-1} .
- Les alcènes (C=C) ont une absorption moyenne vers **1667 et 1640** cm^{-1} . Une bande apparaît vers **3080 et 3140** cm^{-1} due à la vibration d'élongation de la liaison =C-H.
- Les alcynes montrent une bande moyenne apparaît dans la région allant de **2140 et 2100** cm^{-1} . Une bande forte doit être remarquée à **3300** cm^{-1} si on a un alcyne vrai, il s'agit de la vibration d'élongation de la liaison C-H

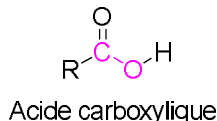
IV. 5. 1 La région 1500-1000 cm^{-1}

a. Vibration d'élongation de la liaison C-O

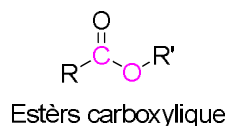
La fonction (C-O) rencontré dans les alcools, les acides, les anhydrides, les éthers, les esters.



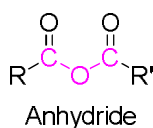
Sur un spectre IR d'un alcool, on observe une bande forte de vibration d'élongation de la liaison C-O entre **1200 et 1050** cm^{-1}



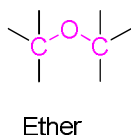
Sur un spectre IR d'un acide, on observe une bande forte de vibration d'élongation de la liaison C-O entre **1320 et 1210** cm^{-1}



Sur un spectre IR d'un ester, on observe une bande forte de vibration d'élongation de la liaison C-O Une bande forte entre **1300 et 1000** cm^{-1}



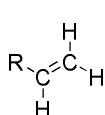
Sur un spectre IR d'anhydride, on observe une bande forte de vibration d'élongation de la liaison C-O Une bande forte entre **1300 et 900** cm^{-1}



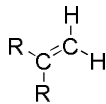
Sur un spectre IR d'un ether, on observe une bande forte de vibration d'élongation de la liaison C-O Une bande forte entre **1150 et 1070** cm^{-1}

IV. 5. 1 La région 1000-600cm⁻¹

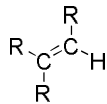
La région de 1000-650cm⁻¹ est très utile pour l'étude structurale des composés éthyléniques et aromatiques non conjugués à partir des bandes de déformation de la liaison C-H.



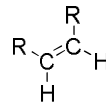
Deux bandes faibles
entre 1000 et 900cm⁻¹



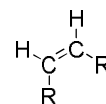
Une bande faible
entre 900 et 850cm⁻¹



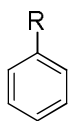
Une bande faible
entre 840 et 780cm⁻¹



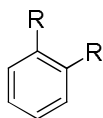
Une bande variable
vers 700cm⁻¹



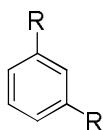
Une bande faible
vers 960cm⁻¹



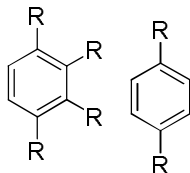
Deux bandes: une très faibles
vers 750 et l'autre faible vers 700cm⁻¹



Deux bandes faibles, une entre 1000 et
950 et l'autre vers 750cm⁻¹



Trois bandes faibles: Une moyenne entre 900 et 850 et l'autre très faible
entre 820 et 750, la troisième se située entre 720 et 650cm⁻¹



Une bande faible entre 870 et 800cm⁻¹

On trouve aussi la vibration d'élongation des liaisons :

- C-Cl (800-700cm⁻¹)
- C-Br (750-600cm⁻¹)
- C-I (600-500cm⁻¹)

IV. 6 Instrumentation

Un spectrophotomètre se compose de quatre parties essentielles :

1. La source de rayonnement électromagnétique
2. Le compartiment à l'échantillon
3. Système optique
4. Système d'enregistrement

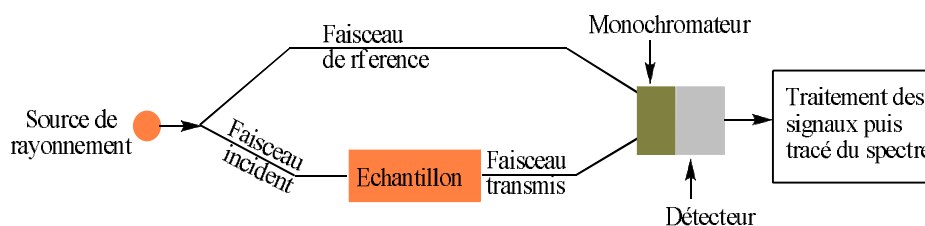


Fig.IV. 4 Spectromètre IR à double faisceau

Références bibliographiques

1. Skoog West, Holler, Chimie analytique, traduction de la 7^e édition américaine par Claudine Buess- Herman et Josette Dauchot- Weymeers et Treddy Dumont, De boeck université.
2. MASSON ET Cie, ÉDITEURS. Spectrométrie d'absorption atomique, Tome 1, **1971**.
3. Skoog West, Holler, Crouch. Chimie analytique, traduction de la 8^e édition américaine par Claudine Buess- Herman et Josette Dauchot.
4. M. Chavanne, A. Jullien, G.J. Beaudoin, E. Flamand, Chimie organique expérimentale, 2^e édition.
5. Silverstein Basler Morillo. Identification spectrométriques de composés organiques. 5^e Edition. DeBoeck Université, Paris Bruxelles **1998**.