

Infrarouge

<https://fr.khanacademy.org/science/chemistry/electronic-structure-of-atoms/bohr-model-hydrogen/a/spectroscopy-interaction-of-light-and-matter>

Spectroscopie infrarouge (IR) : les vibrations moléculaires

Jusqu'ici on a étudié les transitions électroniques qui ont lieu lorsque les atomes absorbent des photons dont la fréquence est située dans le domaine du visible ou de l'UV du spectre électromagnétique. Cependant, des rayonnements de plus faible énergie, dans le domaine de l'infrarouge (IR), peuvent également interagir avec les atomes et les molécules. Ce type de rayonnement n'est en général pas suffisamment énergétique pour exciter des électrons, mais **il peut faire vibrer de différentes façons les liaisons entre les atomes d'une molécule**. Tout comme l'énergie requise pour exciter un électron dans un atome est fixe, l'énergie nécessaire pour modifier la vibration d'une liaison chimique donnée est aussi fixe. Grâce à des équipements de laboratoire adaptés, les chimistes peuvent déterminer le spectre d'absorption IR d'une molécule et l'utiliser pour déterminer quels types de liaisons chimiques se trouvent dans cette molécule. Par exemple, en étudiant le spectre IR d'une molécule, le chimiste peut déterminer si elle contient des liaisons simples carbone-carbone, des liaisons doubles carbone-carbone, des liaisons simples carbone-azote, ou des liaisons doubles carbone-oxygène, pour n'en citer que quelques-unes. Comme chacune de ces liaisons est différente, chacune va vibrer d'une manière différente, et va absorber un rayonnement IR d'une fréquence différente. Ainsi, le chimiste est capable, en regardant un spectre d'absorption IR, d'en apprendre beaucoup sur la structure chimique d'une molécule.

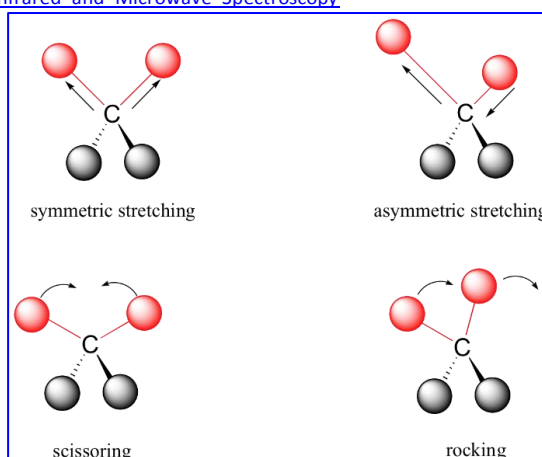
<https://www.sciencesalecole.org/wp-content/uploads/2016/06/table-spectro-12.pdf>

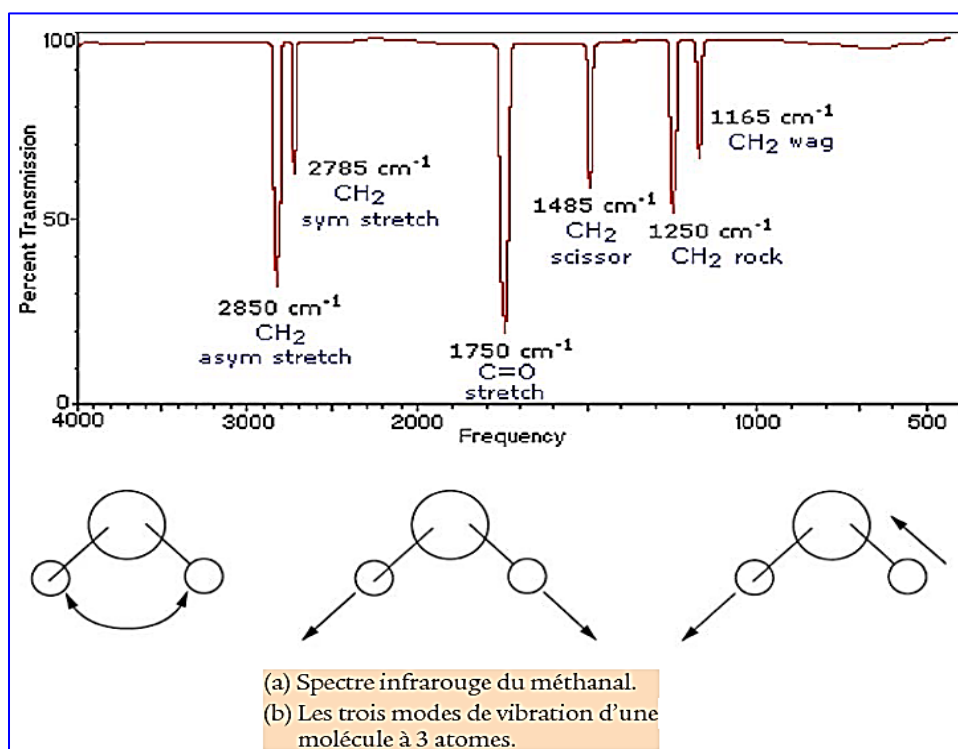
Table des nombres d'onde des vibration de valence et de déformation

Liaison	Nature	Nombre d'onde cm^{-1}	Intensité
O-H alcool libre	élongation	3580-3670	F, large
O-H alcool lié	élongation	3200-3400	F, large
N-H amine	élongation	3100-3500	m
C-H (C_{digonal})	élongation	3300-3310	m ou f
C-H (C_{trigonal})	élongation	3000-3100	m
C-H aromatique	élongation	3030-3080	m
C-H ($C_{\text{tétraonal}}$)	élongation	2800-3000	m
C-H aldéhyde	élongation	2750-2900	F
O-H acide carboxylique	élongation	2500-3200	M
$C \equiv C$; $C \equiv N$	élongation	2100-2250	F à m; large
$C=O$ (anhydride)	élongation	1700-1840	F ou m
$C=O$ (chlorure d'acyle)	élongation	1770-1820	F ; 2 bandes
$C=O$ (ester)(*)	élongation	1700-1740	F
$C=O$ (aldéhyde et cétone)(*)	élongation	1650-1730	F
$C=O$ (acide)(*)	élongation	1680-1710	F
$C=C$	élongation	1625-1685	F
$C=C$ aromatique	élongation	1450-1600	m (3 ou 4 bandes)
$N=O$	élongation	1510-1580 et 1325-1365	F ; 2 bandes
N-H amine ou amide	déformation	1560-1640	F ou m

F : fort, m : moyen; f : faible ;
 (*) : abaissement de 20 à 30 cm^{-1} si conjugaison

https://chem.libretexts.org/Courses/University_of_California_Davis/UCD_Chem_002CH/Text/UNIT_IV%3A_MOLECULAR_SPECTROSCOPY/20.2%3A_Vibrations_and_Rotations_of_Molecules%3A_Infrared_and_Microwave_Spectroscopy

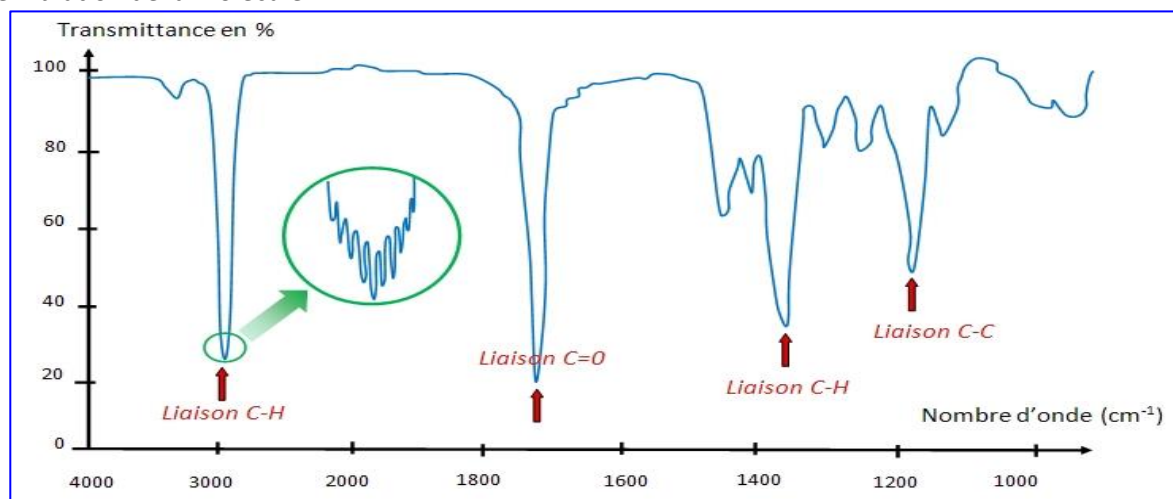




http://acces.ens-lyon.fr/acces/thematiques/limites/eau/comprendre/eau_univers/rappels-physiques/la-spectroscopie-infrarouge-i-r

Excitation d'une molécule : allure du spectre

Un spectre infrarouge représente l'évolution de la transmittance de l'échantillon (c'est la fraction de l'intensité transmise par rapport à l'intensité incidente en pourcentage) en fonction du nombre d'onde (inverse de la longueur d'onde) ou de la longueur d'onde. Le spectre d'absorption résultant de l'excitation de la molécule par une onde EM [électromagnétique], présente des raies situées autour des longueurs d'onde caractéristiques des modes de vibration de la molécule.



Exemple : le spectre IR d'une cétone

En observant le spectre de plus près, on remarque que les raies se subdivisent en un grand nombre de raies très rapprochées. On parle alors de spectre de bandes. Cela est dû au fait qu'aux transitions de vibration se superposent les transitions de rotation. En effet, une molécule possède des axes normaux de rotation. Or une transition vibrationnelle nécessite plus d'énergie qu'une transition rotationnelle. Se produisant, elle va modifier la longueur de la liaison ce qui entraîne une modification de la vitesse de la rotation de la molécule. Aussi l'onde EM excitatrice provoquera-t-elle, **pour chaque transition vibrationnelle, une multitude de transitions rotationnelles, qui vont donner au pic de transition vibrationnelle l'allure d'une bande d'absorption** : on parle alors de spectre de **vibration-rotation**.