

Cette séquence s'appuie sur la notion de **groupe caractéristique** (1^{ère}STL.PCM)

Objectifs :

- Relier la structure moléculaire au type de rayonnement absorbé : UV, visible ou IR.
- Utiliser des banques de données pour identifier ou confirmer des structures à partir de spectres.

1. Au-delà du visible

- En plus des radiations électromagnétiques auxquelles l'œil humain est sensible, d'autres radiations peuvent être absorbées par un échantillon de matière.

↳ Ainsi, dans le cas de la spectroscopie Infrarouge, les longueurs d'onde absorbées par un échantillon de matière sont comprises entre 800 nm et $1 \cdot 10^{-3}$ m.

Spectroscopie UV-visible	Spectroscopie Infrarouge	Spectroscopie RMN
$50 \text{ nm} < \lambda_{\text{UV-lointains}} < 200 \text{ nm}$ $200 \text{ nm} < \lambda_{\text{UV-visible}} < 800 \text{ nm}$	$800 \text{ nm} < \lambda_{\text{Infrarouge}} < 1 \cdot 10^{-3} \text{ m}$	$\lambda_{\text{RMN}} > 1 \cdot 10^{-1} \text{ m}$
Transitions des électrons de valence	Transitions vibrationnelles et rotationnelles	Transitions entre états de spin du noyau
⇒ Conjugaisons et insaturations	⇒ Groupes fonctionnels	⇒ Squelette carboné et groupes fonctionnels
1 ^{ère} STL.C2D TE16	1 ^{ère} STL.C2D TE17	T ^{le} STL.C2D TE14

2. Rappel : groupes caractéristiques

- Dans une molécule organique, un groupe caractéristique est un ensemble d'atome dont au moins l'un d'entre eux n'est, ni un atome de carbone, ni un atome d'hydrogène.

↳ Groupes caractéristiques à connaître :

Fonction chimique	Alcène	Alcool	Aldéhyde	Cétone	Acide carboxylique	Ester	Amine	Amide
Groupe caractéristique	$\text{C}=\text{C}$	$\begin{array}{c} \\ -\text{C}-\text{OH} \\ \end{array}$ hydroxyle	$\begin{array}{c} -\text{C}=\text{O} \\ \\ \text{H} \end{array}$ carbonyle	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}=\text{O} \\ \\ \text{C} \end{array}$ carbonyle	$\begin{array}{c} -\text{C}=\text{O} \\ \\ \text{OH} \end{array}$ carboxyle	$\begin{array}{c} -\text{C}=\text{O} \\ \\ \text{O}-\text{C} \end{array}$ ester	$\begin{array}{c} -\text{N}- \\ \end{array}$ amine	$\begin{array}{c} -\text{C}=\text{O} \\ \\ -\text{N}- \end{array}$ amide

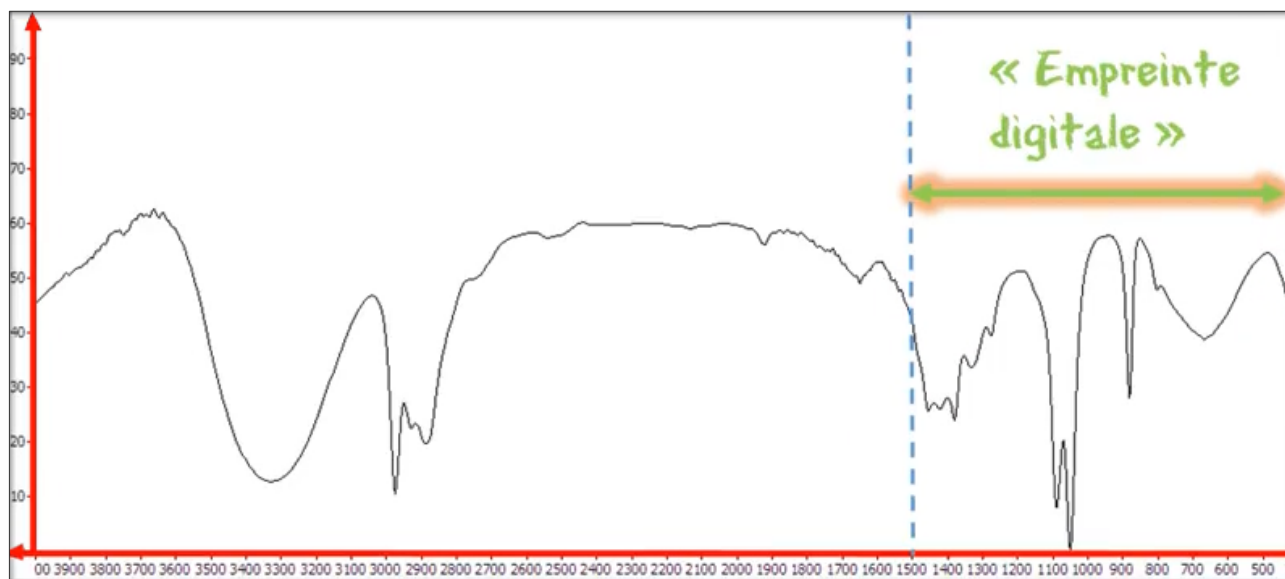
3. Les liaisons entre atomes des groupes caractéristique absorbent dans l'infrarouge

• Un spectroscope infrarouge émet des ondes électromagnétiques infra-rouge en direction d'un échantillon de matière. Le spectre produit renseigne sur les liaisons entre atomes présents, et donc sur les groupes caractéristiques des entités chimiques de l'échantillon.

↳ Axe des ordonnées : les spectres IR sont tracés en transmittance plutôt qu'en absorbance comme pour les spectres UV-visibles.

↳ Axe des abscisses : ce n'est pas la longueur d'onde λ qui est portée sur l'axe des abscisses, mais le nombre d'onde σ qui est l'inverse de la longueur d'onde : $\sigma = \frac{1}{\lambda}$.

De plus, l'axe des abscisses croit vers la gauche.



• La partie du spectre en-deçà de $\sigma = 1500 \text{ cm}^{-1}$ n'est pas étudiée.

• L'interprétation des spectres se fait à l'aide de tables de données qui répertorient les nombres d'onde, intensité et largeur des différents pics, en fonction des liaisons mises en jeu.

Nbre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité	Liaison	
3590-3650	F ; fine	O-H	alcool libre
3200-3600	F ; large	O-H	alcool lié
3300-3500	m	N-H	amine primaire : 2 bandes amine secondaire : 1 bande imine
3100-3500	F	N-H	amide
~ 3300	m ou f	C _{di} -H	
3030-3100	m	C _{ar} -H	
3000-3100	m	C _{ar} -H	aromatique
2850-2970	F	C _{al} -H	
2700-2900	m	C _{al} -H	aldéhyde
2500-3200	F à m ; large	O-H	acide carboxylique
2100-2260	f	C≡C	
2200-2260	F ou m	C≡N	nitriles
1800-1850	F ; 2 bandes	C=O	anhydride
1740-1790		C=O	chlorure d'acide
1735-1750	F	C=O	ester
1700-1740	F	C=O	aldéhyde et cétone
1700-1725	F	C=O	acide carboxylique
1650-1700	F	C=O	amide
1620-1690	m	C=C	
1450-1600	Variable ; 3 ou 4 bandes	C=C	aromatique
1500-1550	F ; 2 bandes	N=O	de NO ₂
1290-1360			conjugué