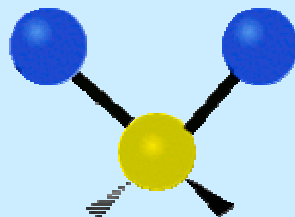


ANALYSE FONCTIONNELLE EN SPECTROSCOPIE INFRAROUGE

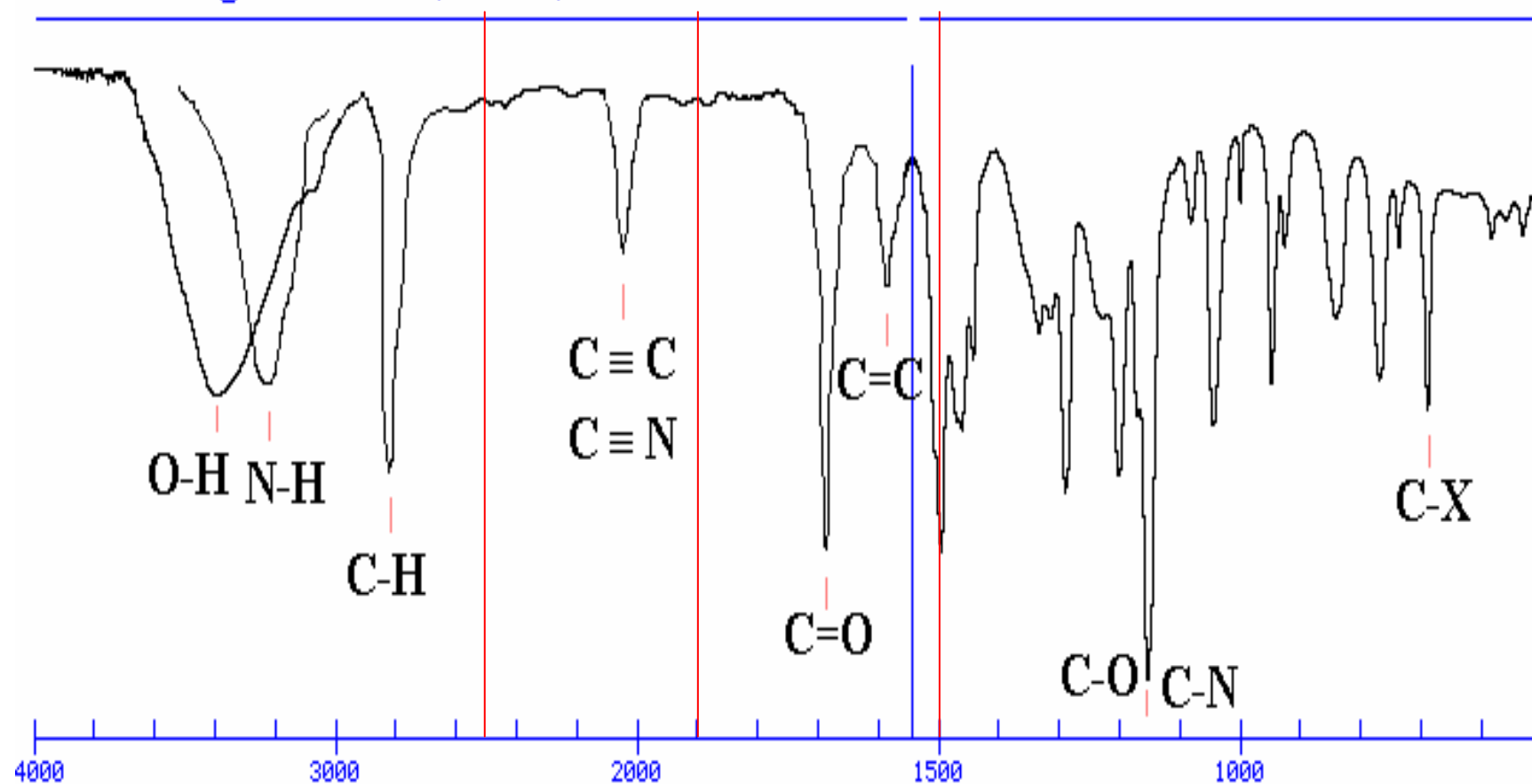


-
- Sur les spectres IR, on retrouve des bandes à des nombres d'onde caractéristiques des différents groupements chimiques de la molécule.
 - Des **tables** permettent d'attribuer ces bandes aux différents groupes chimiques présents.
 - On peut distinguer **4 régions principales**.
-

-
- 4000-2500 cm^{-1} : Elongations X-H (O-H, N-H, C-H)
 - 2500-1900- cm^{-1} : Elongations
triples liaisons $\text{C}\equiv\text{C}$ et $\text{C}\equiv\text{N}$
doubles liaisons cumulées $\text{X}=\text{Y}=\text{Z}$
 - 1900-1500 cm^{-1} : Elongations doubles liaisons
 $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{N}$, $\text{C}=\text{C}$, NO_2
 - 1500-200 cm^{-1} : Elongations simples liaisons
 $\text{C}-\text{N}$: (NO_2) forte à $\approx 1350 \text{ cm}^{-1}$
 $\text{C}-\text{O}$: forte entre 1000 et 1300 cm^{-1} ...
-

Elongation A-H, X=Y, X $\equiv$ Y

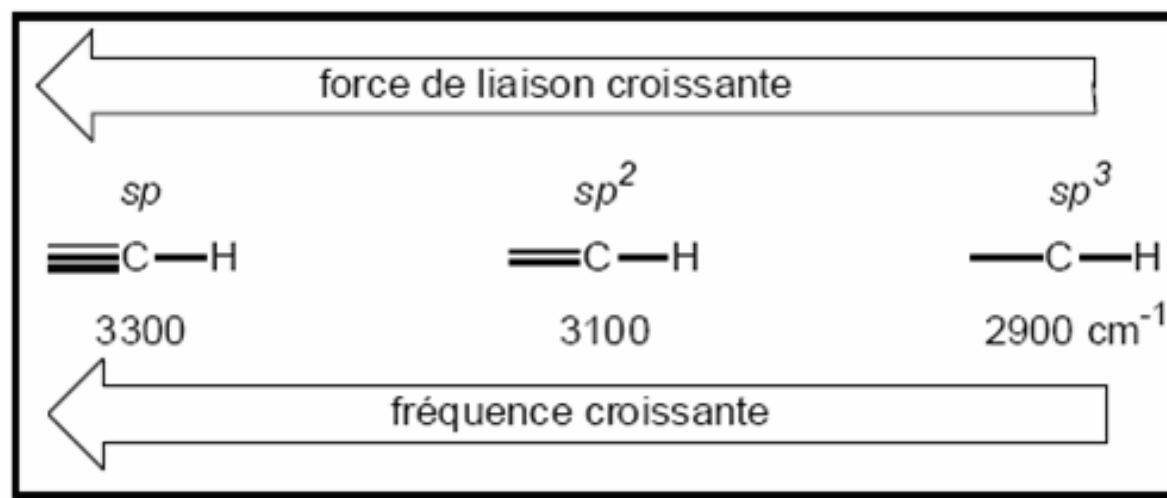
Elongation atomes lourds
déformations



Exemple 1 : Liaisons C-H

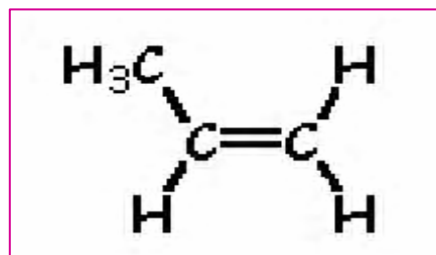
Les vibrations des liaisons C-H dépendent de l'hybridation du carbone :

- carbone saturé : bandes C-H $< 3000 \text{ cm}^{-1}$
- carbone insaturé : bandes C-H $> 3000 \text{ cm}^{-1}$



Exercice :

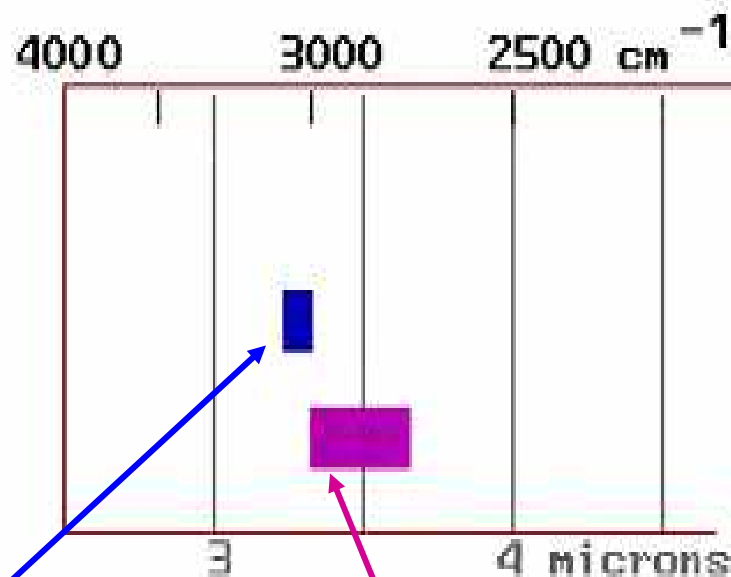
Prévoir les plages de fréquence des vibrations de valence des liaisons C-H (ν_{CH}) du composé :



Alcène :

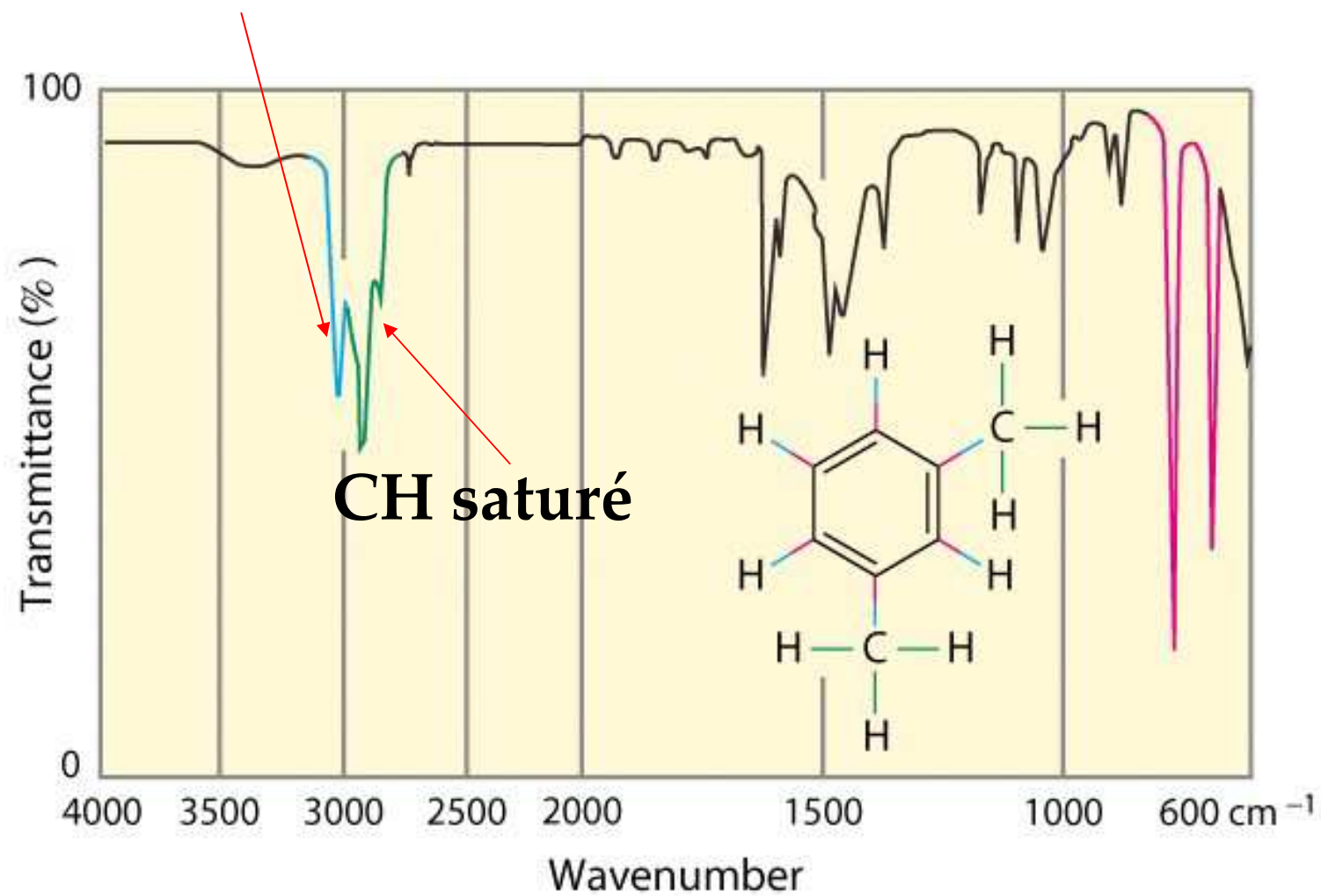
liaisons =C-H (sp²)

liaisons C-H du CH₃ (sp³)

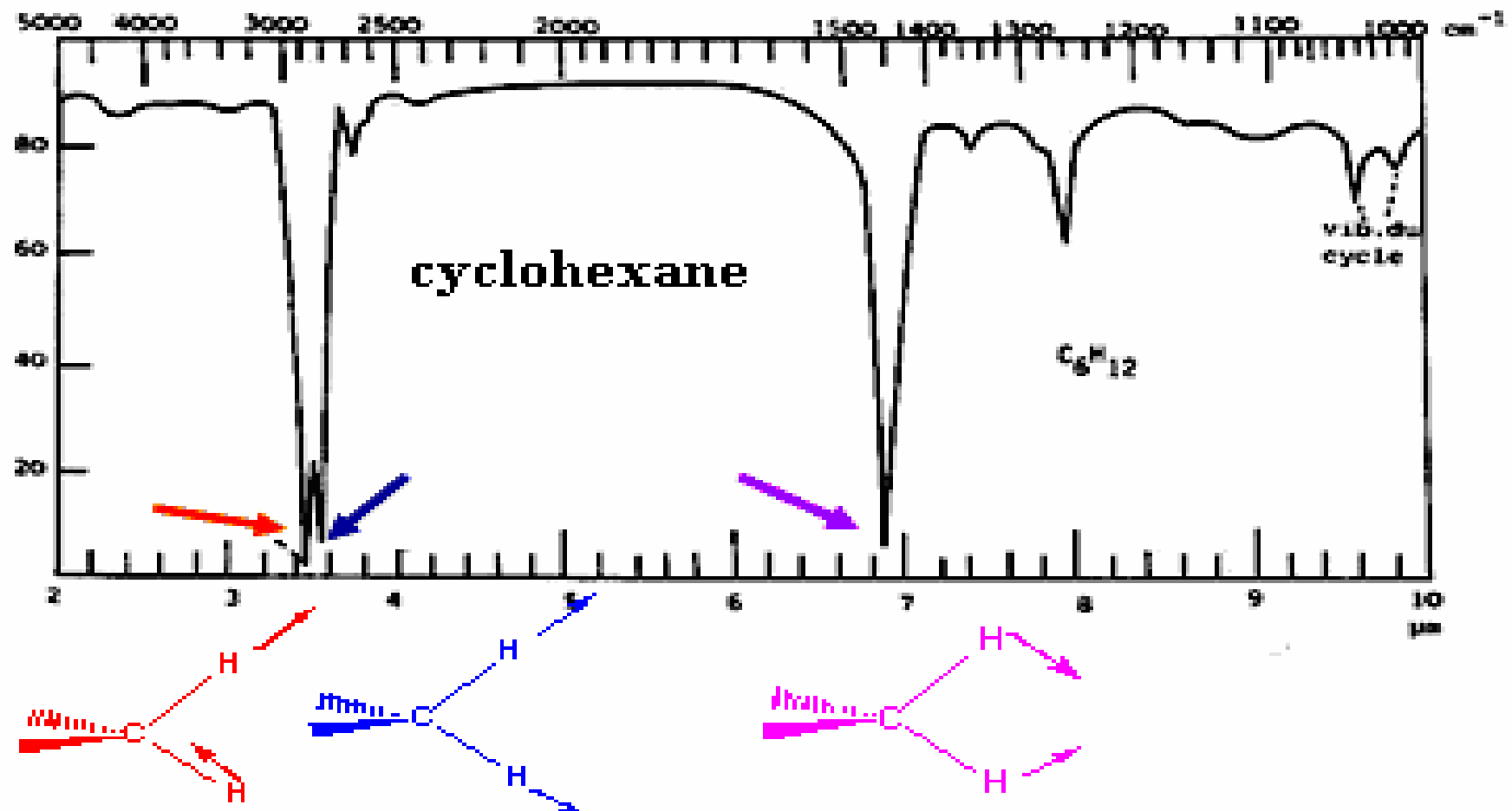


- Liaisons =C-H : plage bleue entre 3100 et 3000 cm⁻¹
- Groupe CH₃ (liaisons C-H aliphatiques) : plage violette entre 3000 et 2800 cm⁻¹

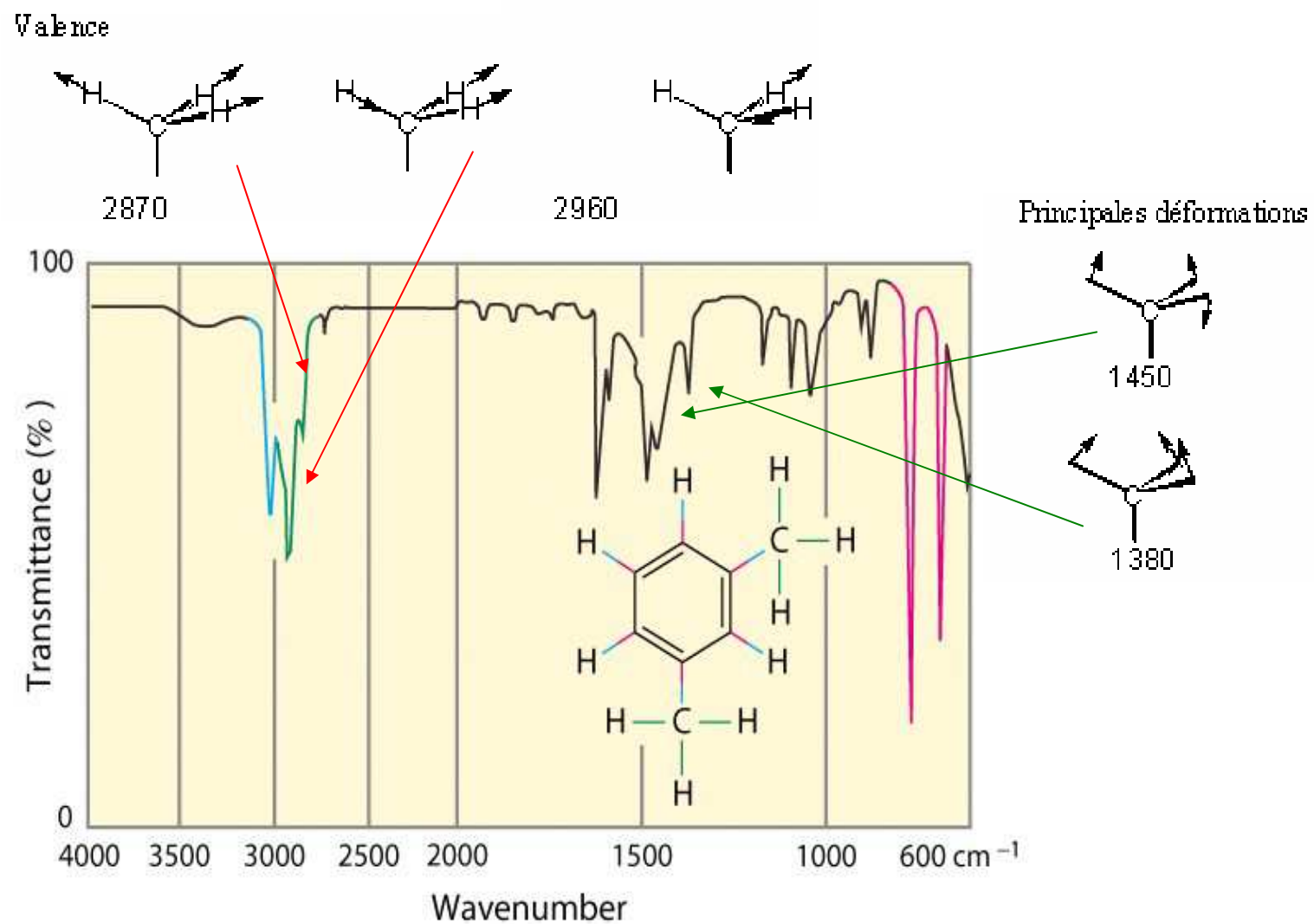
CH insaturé



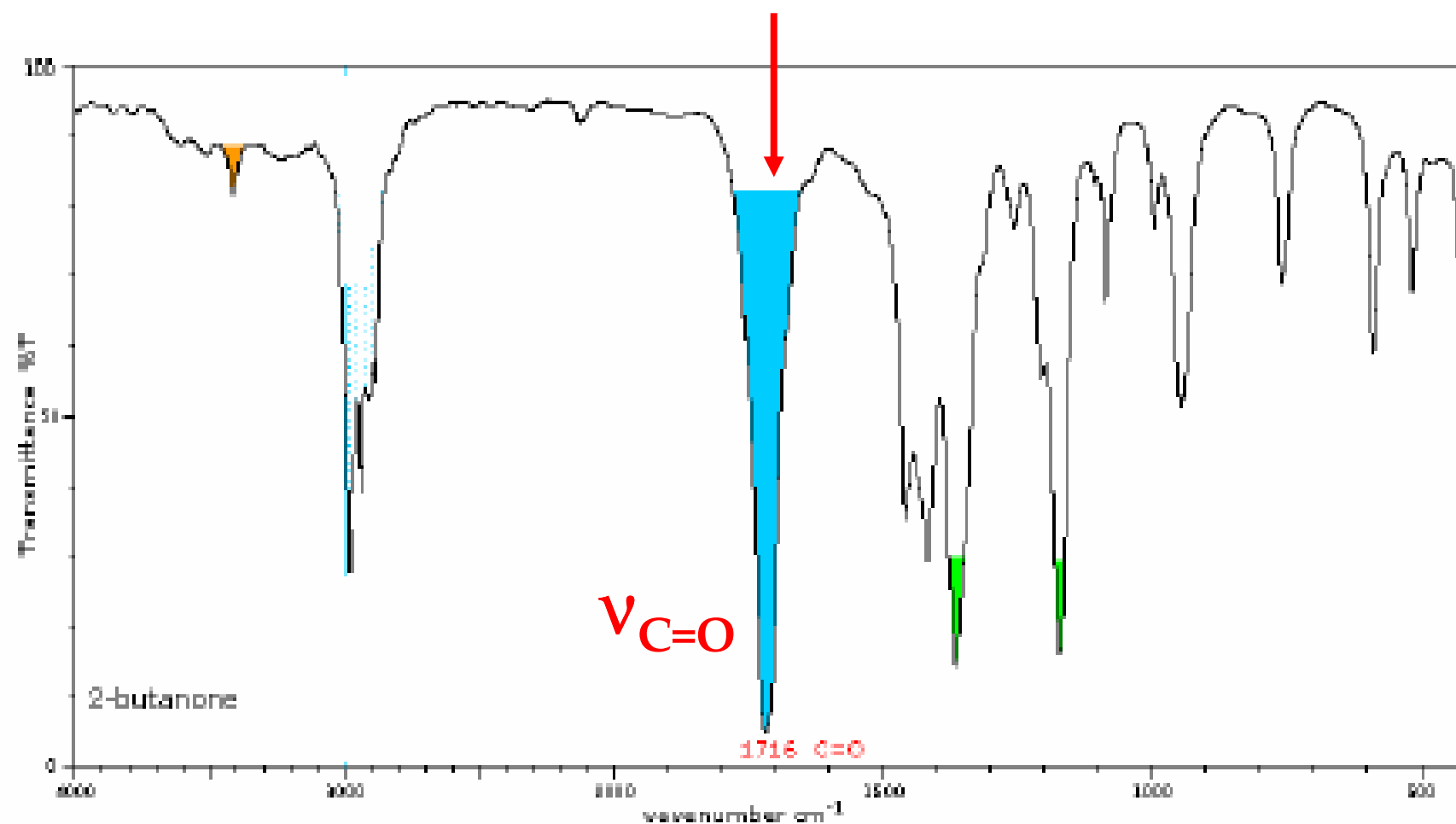
■ Groupe ment CH₂



■ Groupe ment CH₃ :



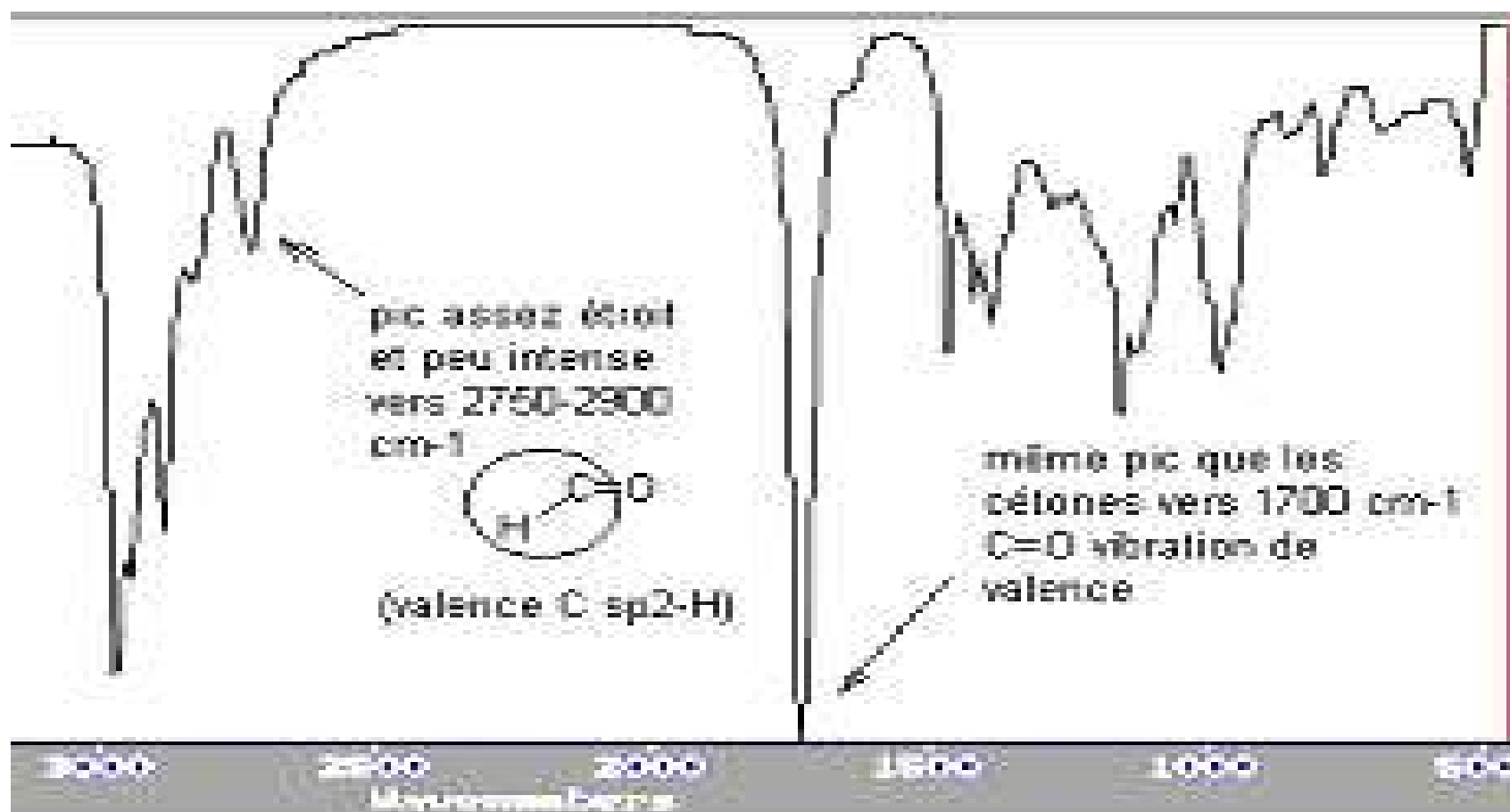
Exemple 2 : Liaison C=O cétonique



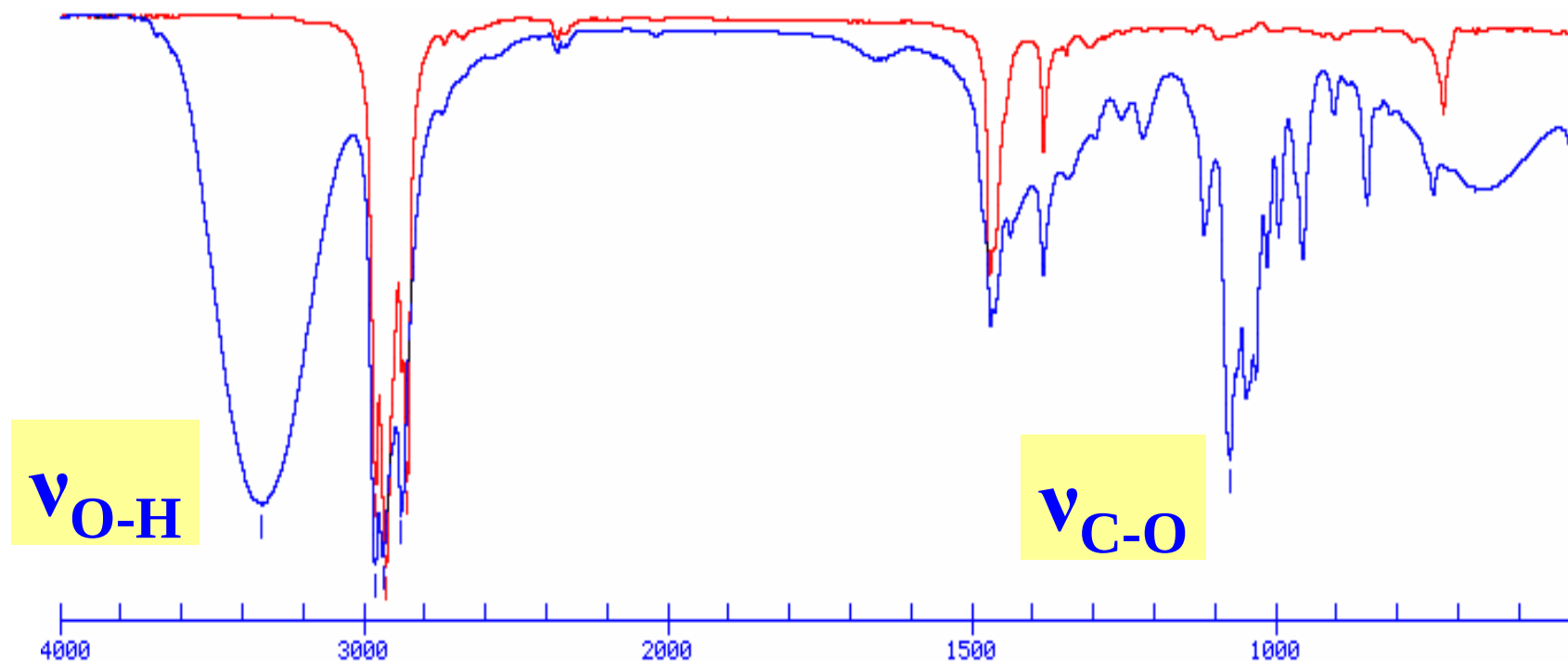
Exemple 3 : Aldéhyde

$\nu_{\text{C=O}}$

$\nu_{\text{C(sp}^2\text{)-H}}$



Exemple 4 : O-H alcool $\nu_{\text{O-H}}$ $\nu_{\text{C-O}}$

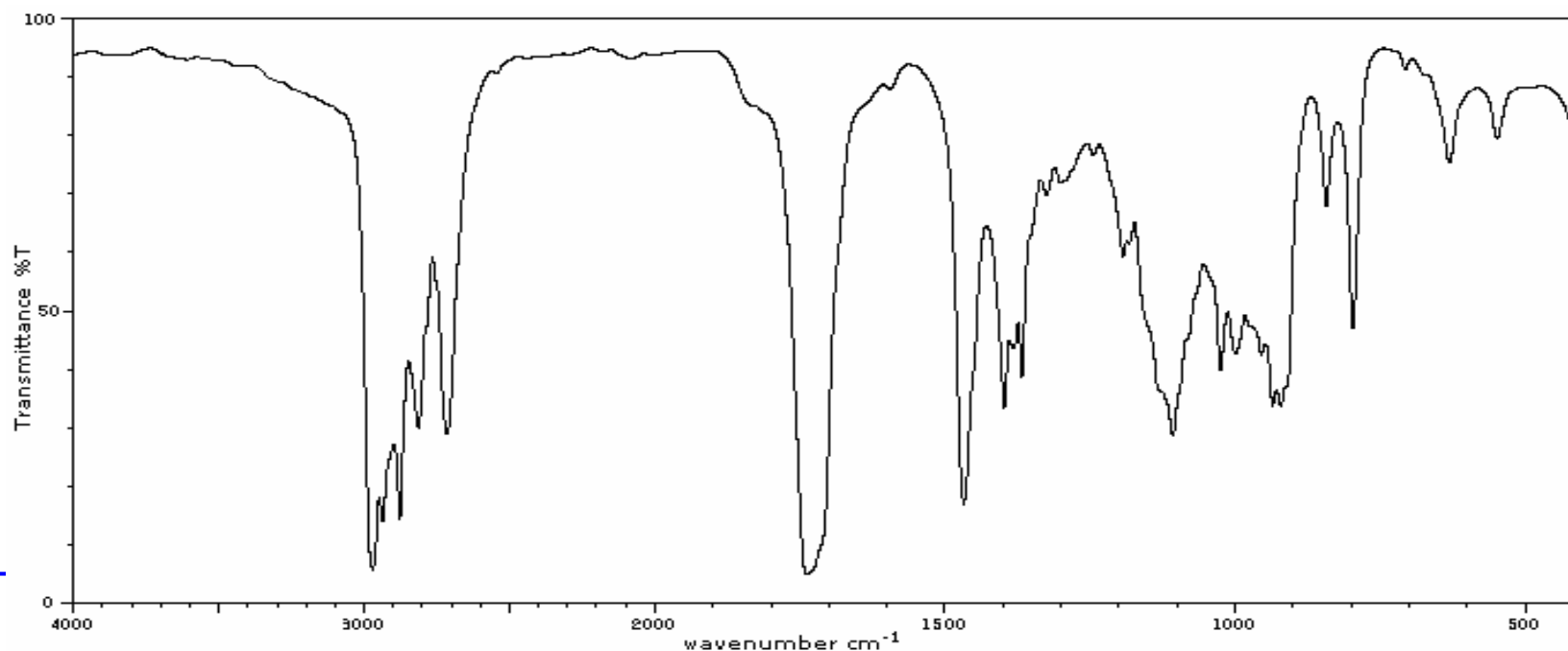
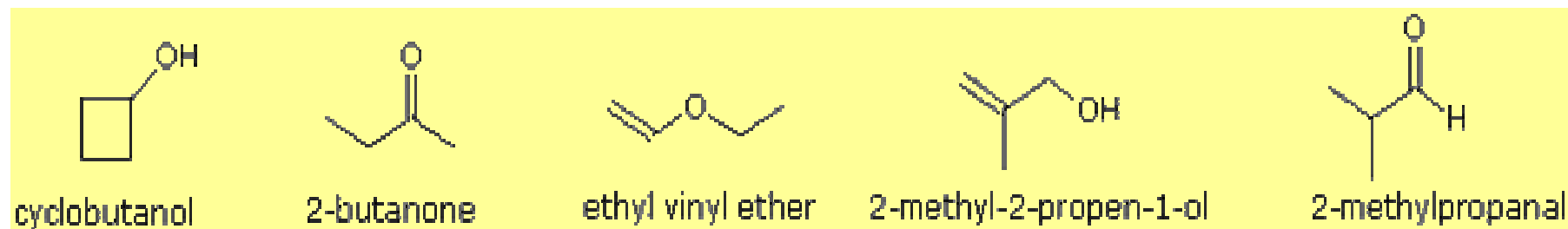


n-decane $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$ **t-butanol** $(\text{CH}_3)_3\text{COH}$

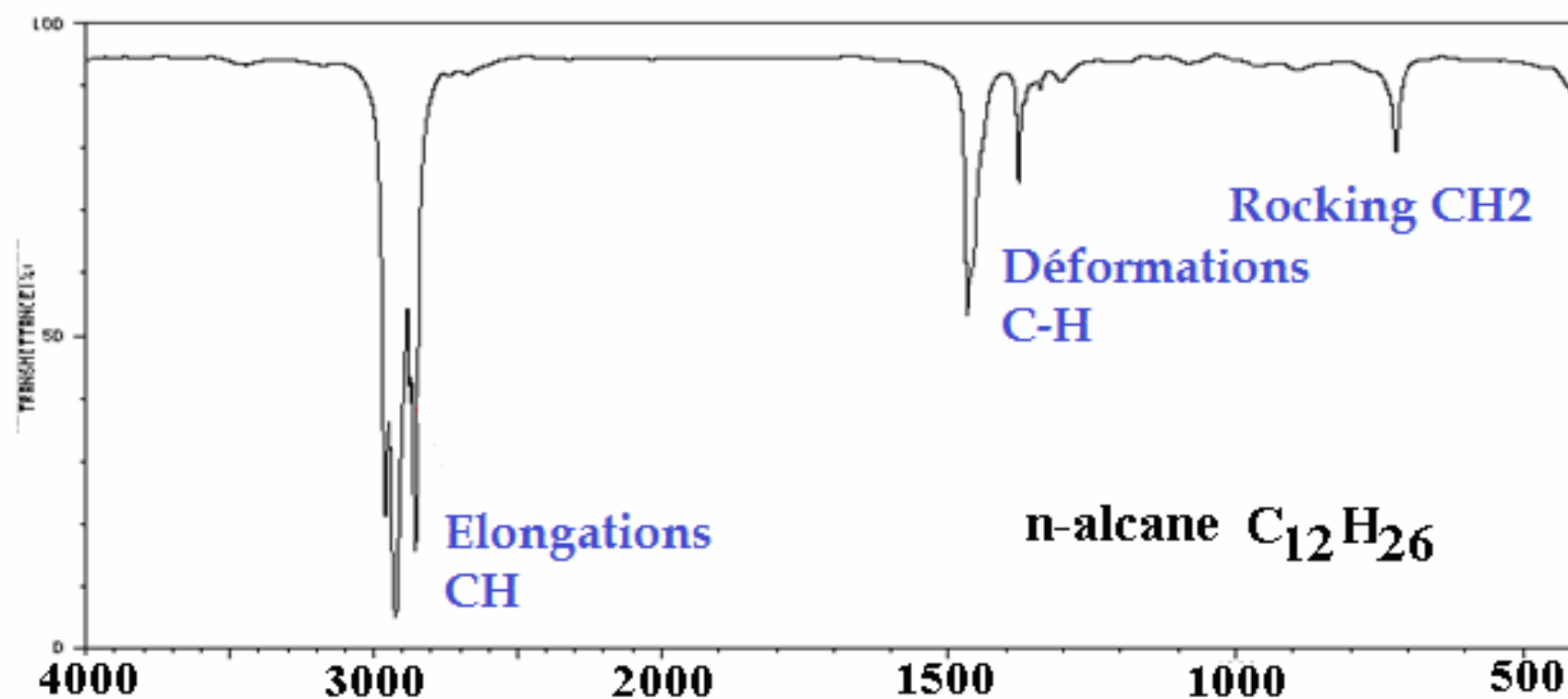
Exemple d'application

Soit un composé de formule brute $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$.

Parmi les cinq isomères donnés ci-dessous, préciser celui qui correspond au spectre IR présenté.



Exemples de spectres IR



Doubles liaisons conjuguées

