

Spectrométrie d'absorption moléculaire

La spectroscopie est l'étude quantitative des interactions entre la matière et la lumière.

La spectrophotométrie est la mesure de l'interaction d'une radiation avec la substance qui l'absorbe.

En fonction des propriétés que l'on souhaite observer, la lumière peut être décrite comme une radiation *électromagnétique*, c'est à dire une onde, transversale, dont les grandeurs oscillantes sont le champ électrique \vec{E} et le champ magnétique \vec{B} . Elle est caractérisée par une longueur d'onde unique λ lorsqu'on parle de lumière **monochromatique**.

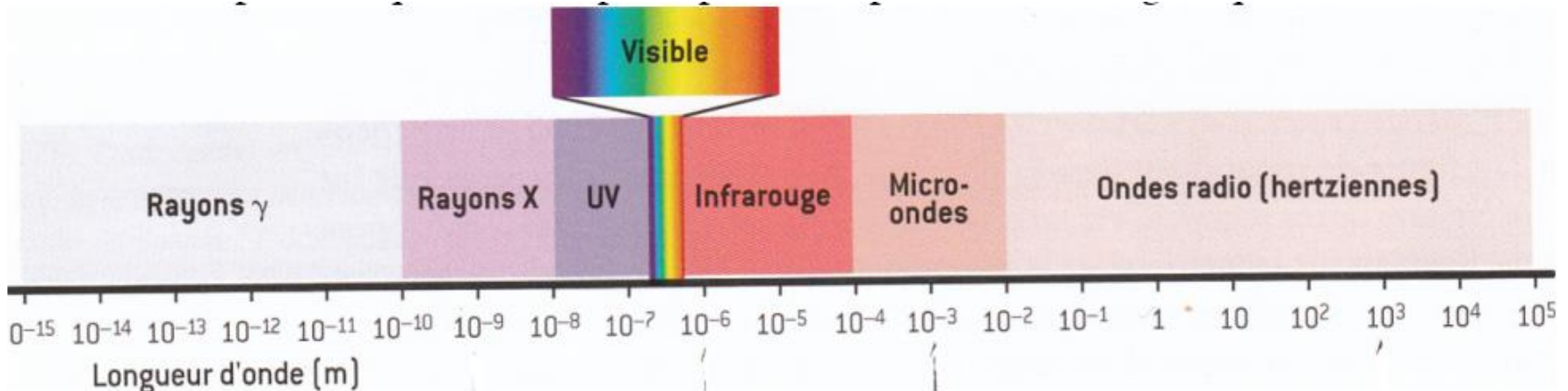
La lumière peut être décrite aussi comme un flux de particules élémentaires, les **photons**(rem : noms donné par G.L. Lewis en 1926).

Chaque photon est assimilable à un quantum d'énergie $E = h.c/\lambda$
/ h est la constante de Planck; c est la vitesse de la lumière.

$h = 6,626.10^{-34}$ J.s ; $c = 3*10^8$ m/s

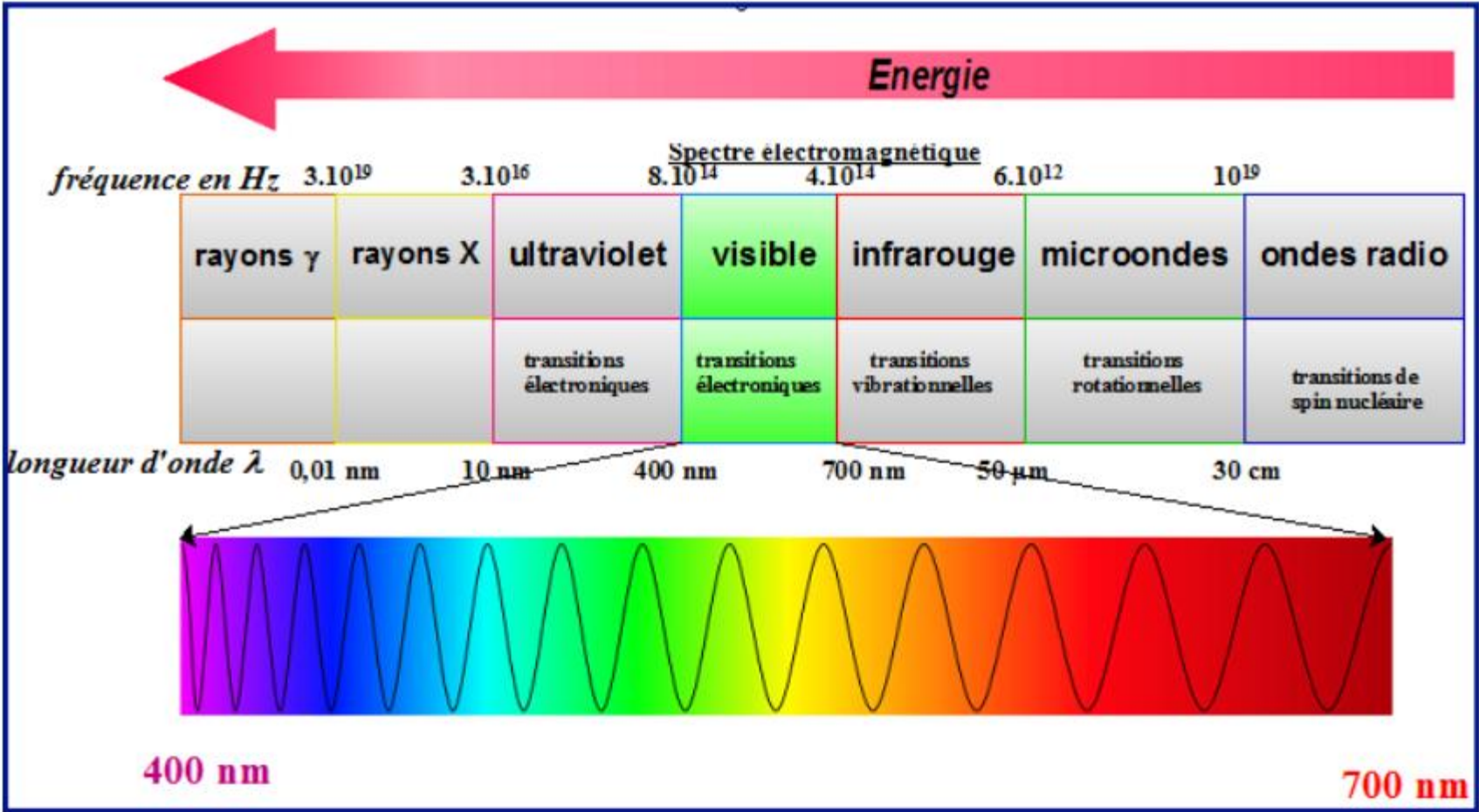
Cette « **dualité onde-corpuscule** » est un des fondements de la quantique.

Le domaine **visible**, c'est-à-dire l'ensemble des longueurs d'onde auxquelles notre œil est sensible, ne représente qu'une toute petite partie du spectre électromagnétique.



Ainsi, l'oeil humain ne perçoit que les radiations dont la longueur d'onde est comprise **entre 400 et 800 nm**.

Pour $\lambda > 800$ nm, on entre dans le domaine des rayonnements **infrarouges**, et pour $\lambda < 400$ nm, dans le domaine des **ultraviolets**.



Le nombre d'onde, couramment noté σ , désigne l'inverse de la longueur d'onde λ ; $\sigma = 1/\lambda$

Il est l'analogue dans l'espace de la fréquence (temporelle) et est d'ailleurs souvent appelé fréquence spatiale.

La perception des couleurs

a) Lumière monochromatique

Lorsqu'une lumière monochromatique de longueur d'onde λ comprise entre 400 et 800 nm est captée par l'oeil, on perçoit une lumière colorée. La sensation de couleur est directement liée à la longueur d'onde de la radiation. Ainsi, lorsque λ croît de 400 à 800 nm, on perçoit successivement les couleurs : **violet, indigo, bleu, vert, jaune, orange et rouge**. Ce sont les couleurs de l'arc-en-ciel (à connaître).

Ultraviolet	Violet	Bleu	Vert	Jaune	Orange	Rouge	Infrarouge
< 400 nm	440-450	450-500	500-570	570-590	590-630	630-760	> 760 nm

b) Lumière polychromatique

Une lumière qui renferme plusieurs radiations de longueurs d'onde différentes est appelée lumière polychromatique (lumière de soleil ou lumière blanche).

Lorsqu'une espèce chimique absorbe dans plusieurs domaines de longueur d'onde, sa couleur résulte de la synthèse additive des couleurs complémentaires des radiations absorbées.

On détermine les couleurs complémentaires grâce à l'étoile chromatique ci-dessous ou au tableau ci-après.

La couleur complémentaire est la couleur diamétralement opposée sur le disque.

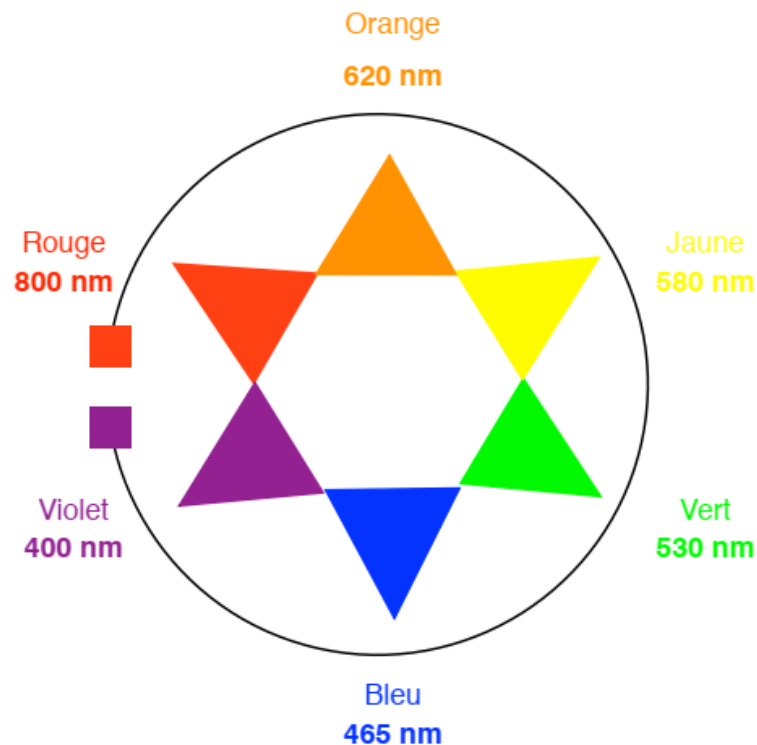


Figure : étoile chromatique

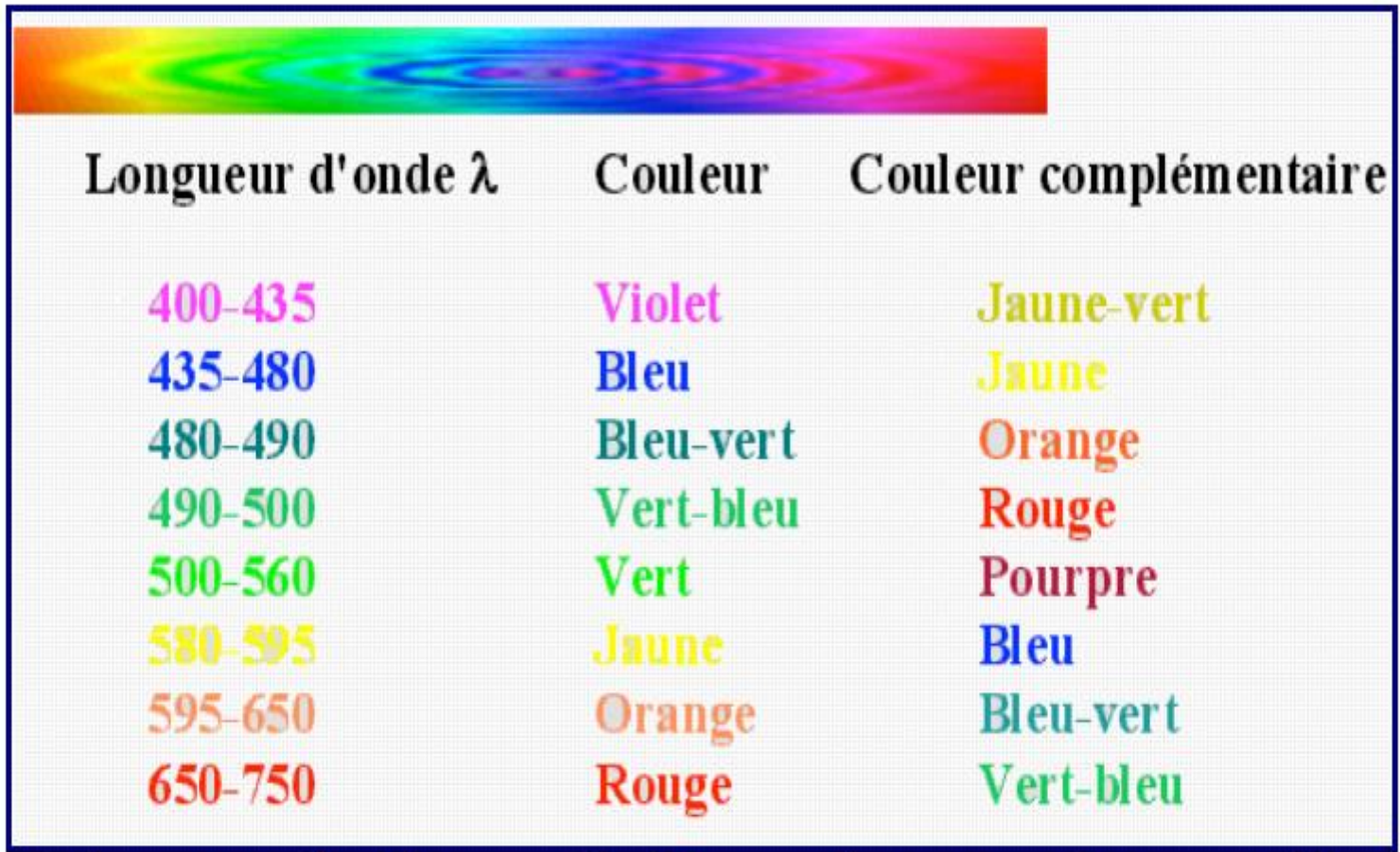
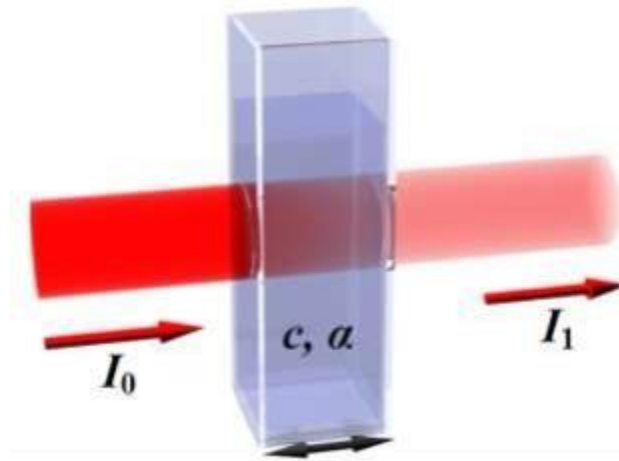


Figure longueur d'onde associée à une couleur et couleur complémentaire

La spectrophotométrie uv visible

lorsqu'un faisceau lumineux monochromatique (une longueur d'onde fixe) de longueur l et intensité I_0 traverse une solution (exp bleu de méthylène + eau) les molécules dissoutes vont absorber une quantité de la lumière incidente

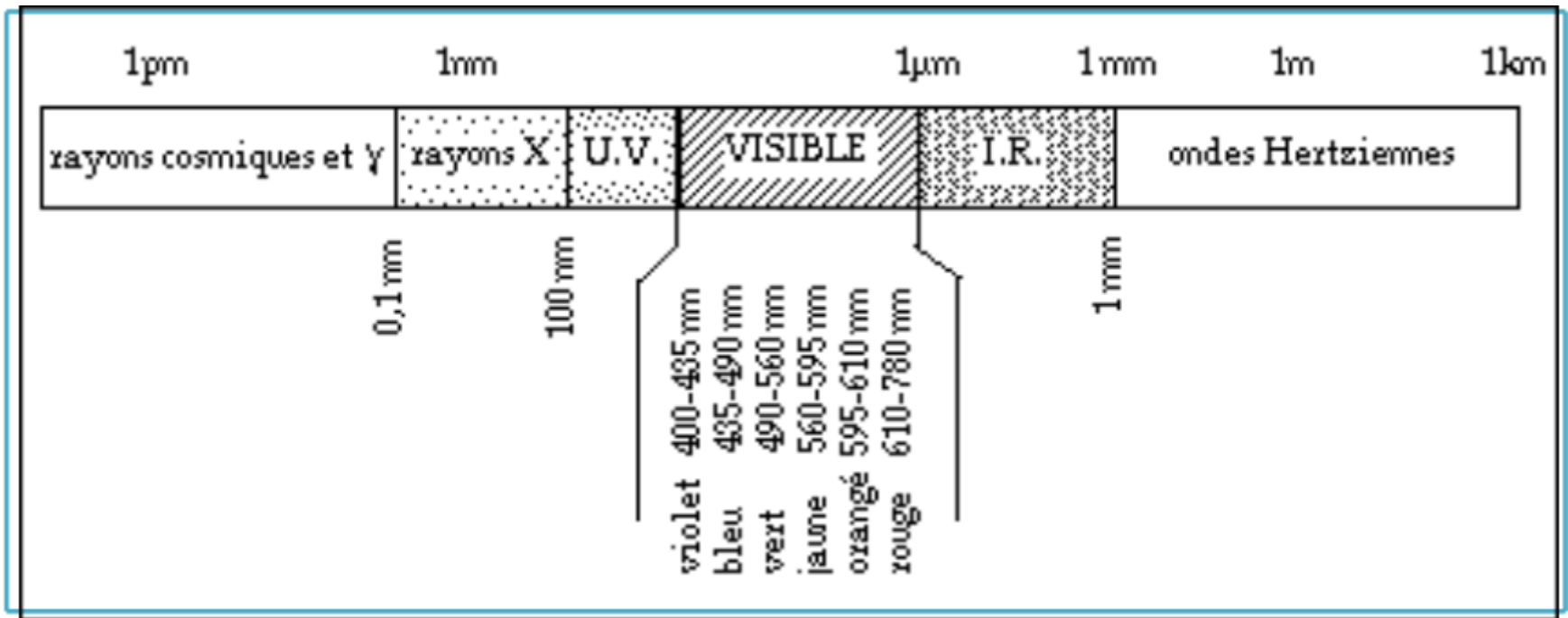
L'intensité de la lumière transmise I sera inférieure à celle de la lumière incidente I_0



Définition

- La spectrophotométrie est une méthode analytique quantitative qui consiste à mesurer l'absorbance ou la densité optique d'une substance chimique donnée en solution,
- Plus cette substance est concentrée plus elle absorbe la lumière (relation entre la concentration et l'absorbance).
- C'est la loi de Beer Lambert $A_l = \varepsilon \cdot L \cdot C$.donc on peut déterminer la concentration a partir de l'absorbance.

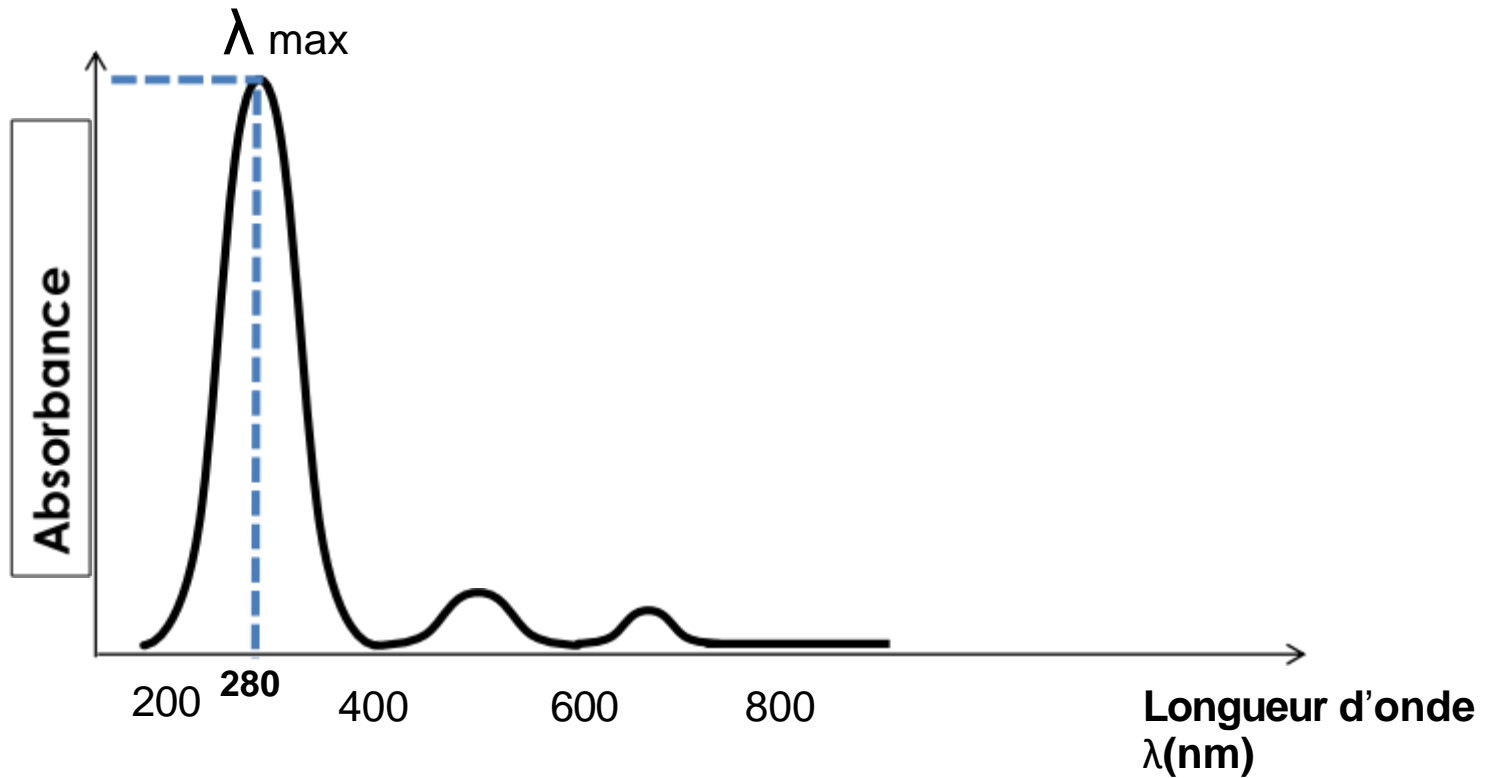
- La spectrophotométrie UV visible utilise des longueurs d'onde incluse dans le domaine UV et le domaine du visible.
- Les mesures sont réalisées dans:
 - l'UV ($180\text{nm} < \lambda < 400\text{nm}$)
 - le visible ($400 < \lambda < 800\text{nm}$)



Les radiations détectées par l'œil humain sont appelées lumière visible

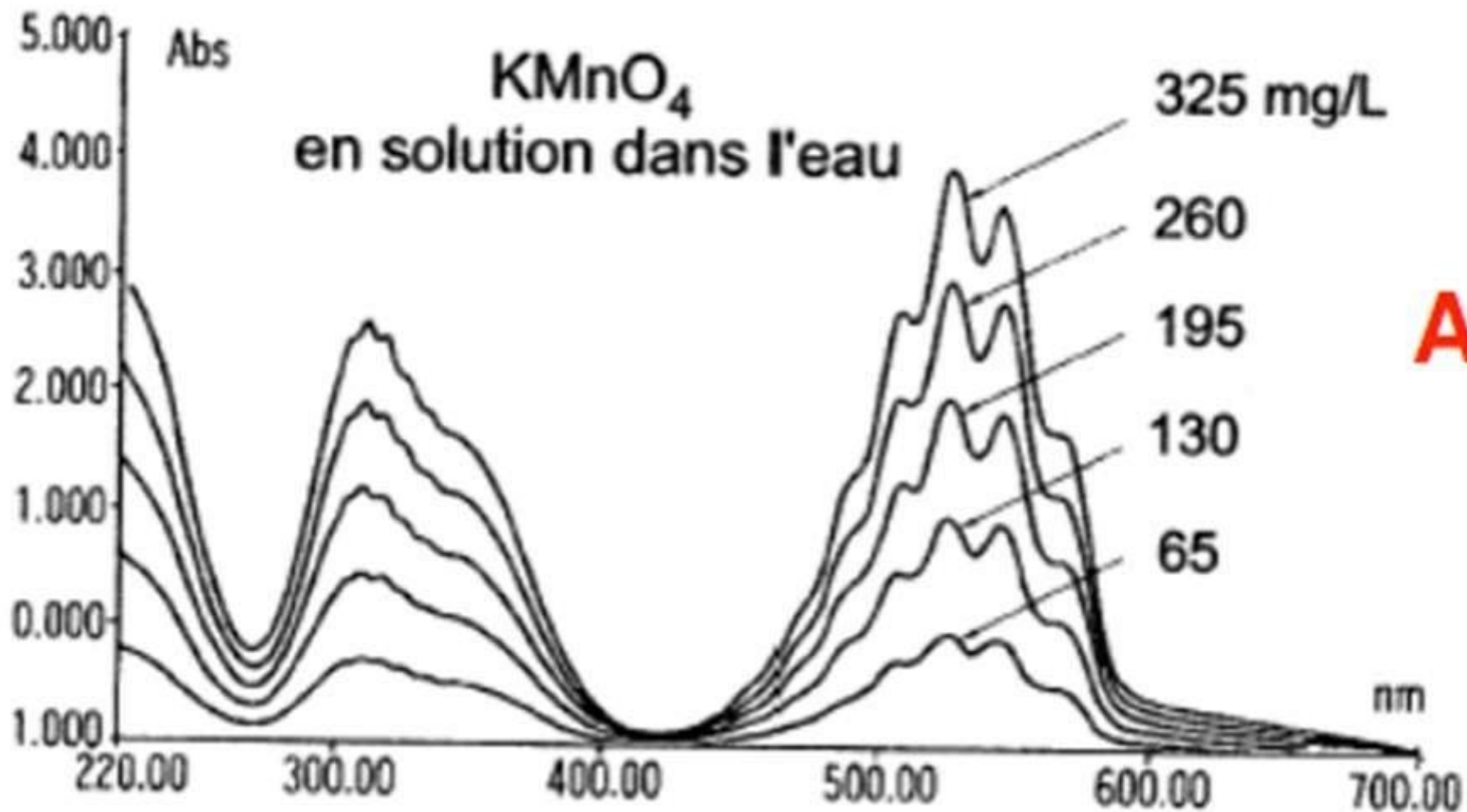
Spectre d'absorption d'une substance en solution

- ⊙ Obtenue en mesurant l'absorbance (DO) d'une solution de concentration fixe d'une substance X, en modifiant la longueur d'onde dans l'intervalle de L'UV-visible, on trace ensuite la courbe de l'absorbance (DO) en fonction de la longueur d'onde.
- ⊙ La valeur maximale d'absorbance correspond à une longueur d'onde appelée λ_{max} .
- ⊙ Cette valeur est caractéristique de la substance X



**Spectre d'absorption d'un
substance x en solution**

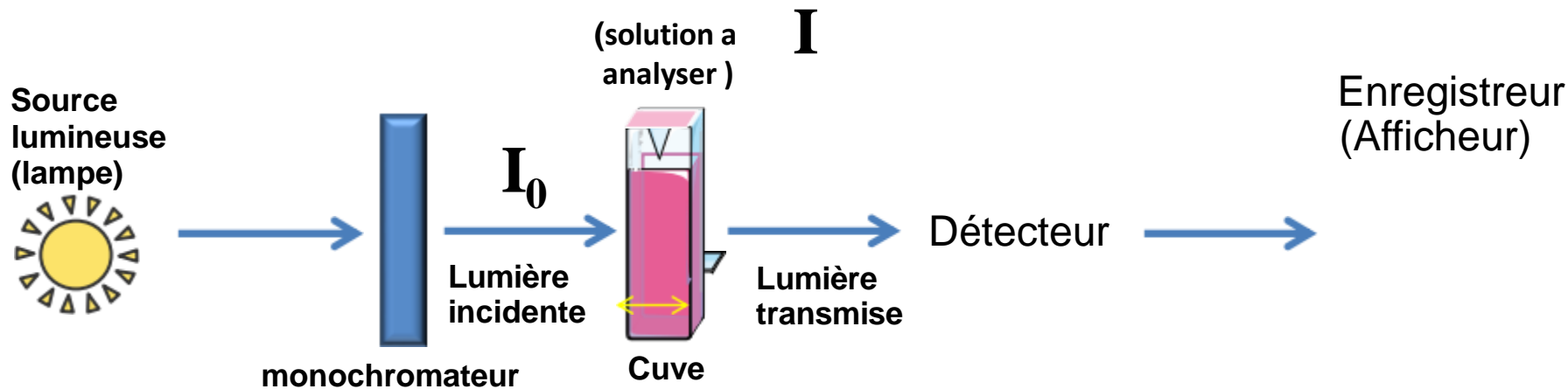
- ⊙ La valeur maximale d'absorbance correspond à une longueur d'onde appelée λ_{max} .
- ⊙ Cette valeur est caractéristique de la substance X



Spectre d'absorption du KMnO_4 dans l'UV-visible

Loi de Beer Lambert

- lorsqu'un faisceau lumineux monochromatique (une longueur d'onde fixe) de longueur l et intensité I_0 traverse une solution (ex bleu de méthylène + eau) les molécules dissoutes vont absorber une quantité de la lumière incidente
- L'intensité de la lumière transmise I sera inférieure à celle de la lumière incidente I_0



Si : $I_0 = I$, milieu transparent

Si : $I_0 > I$, milieu partiellement absorbant

Si : $I = 0$, milieu opaque (absorption totale)

La transmittance (T) de la solution est le pourcentage de lumière transmise $T\% = I/I_0 \cdot 100$

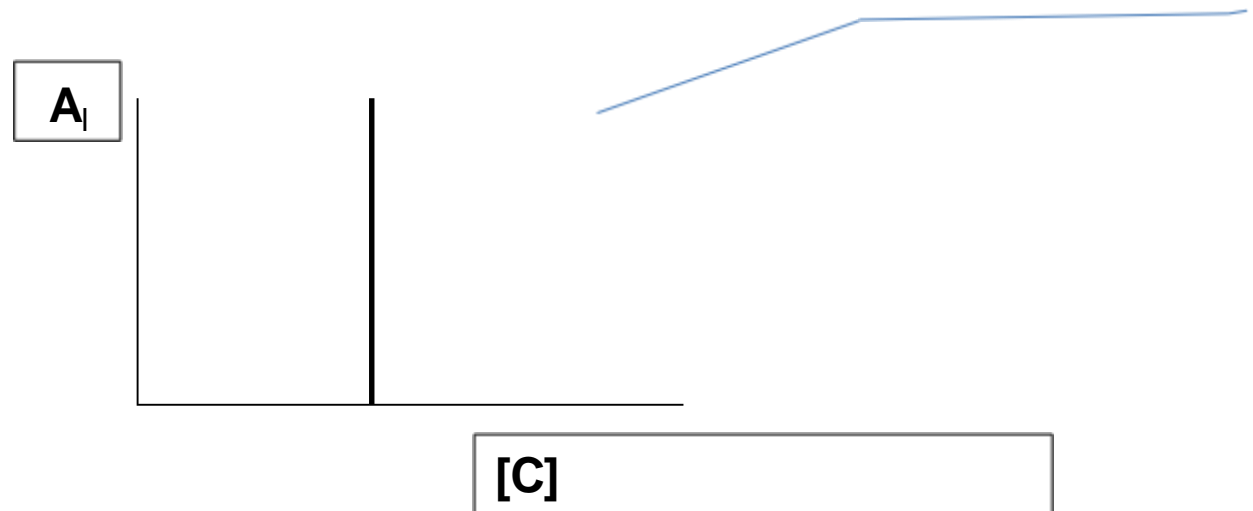
- Selon la loi de Beer Lambert, L'absorbance (A) de la solution ou densité optique (DO) représente la valeur du logarithme décimale de l'inverse de T: $A_l = \log(1/T) = \log(I_0/I) = \varepsilon \cdot L \cdot C$

- $$A_l = \varepsilon \cdot L \cdot C$$

- $A_l =$ l'absorbance a une longueur λ
- $\varepsilon =$ coefficient d'absorption molaire ($M^{-1} cm^{-1}$) de la substance a la longueur d'onde l définie
- $L =$ trajet optique (cm)
- $C =$ concentration de la solution (M)
- NB: l'absorbance n'a pas d'unité

Relation absorbance concentration

- Loi de Beer-Lambert
- $A_l = \varepsilon \cdot L \cdot C$ = l'absorbance est en fonction de la concentration (droite linéaire)

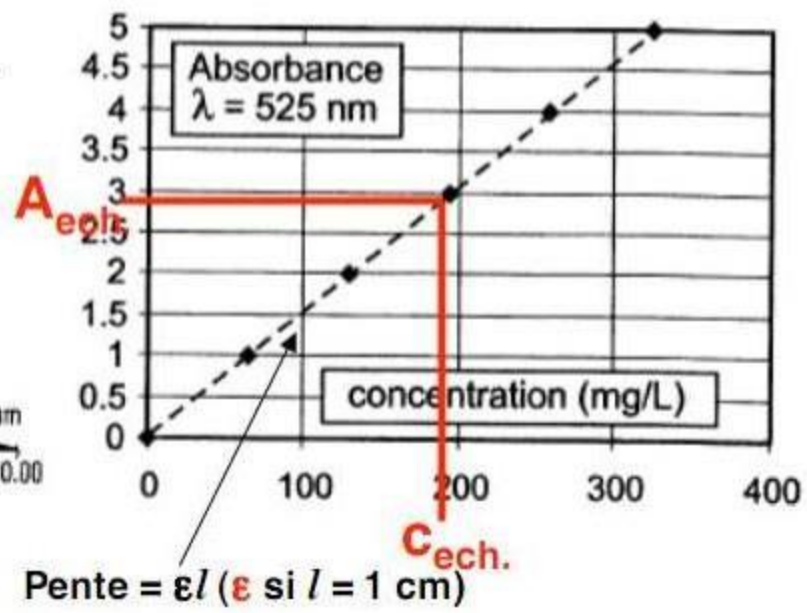
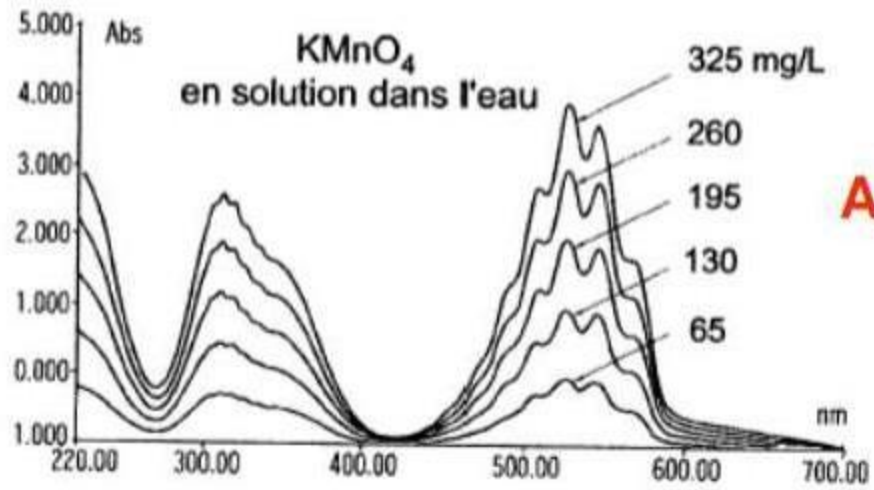


Remarque

Une substance peut avoir plusieurs pics d'absorption maximales et peut donc avoir plusieurs valeurs ϵ

VI. Analyses quantitatives

Loi de Beer-Lambert :
$$A = \epsilon l c = \log\left(\frac{I_0}{I}\right) = \log\left(\frac{1}{T}\right)$$



- **Additivité** de la loi de Beer-Lambert :

Ex: mélange de 2 constituants

$$A = A_1 + A_2 = \epsilon_1 l c_1 + \epsilon_2 l c_2 = l(\epsilon_1 c_1 + \epsilon_2 c_2)$$

- Analyse multicomposants :

mesure de A à autant de $\lambda \neq$ que de constituants dans le mélange

Condition de validité de la loi de Beer Lambert

- Cette loi n'est pas valable que si les conditions suivantes sont remplies :
 1. le monochromatisme (une seule longueur d'onde λ_{\max})
 2. Les faibles concentrations (diluées)
 3. Température stable (e dépend de la Température)
 4. pH stable
 5. Clarté du milieu
 6. Pas de réflexion ou de fluorescence.

les transitions électroniques dans la molécule sont à l'origine de l'absorption du faisceau incident lors de l'analyse dans le domaine UV-visible effectué à l'aide du spectrophotomètre

Transition $\sigma \rightarrow \sigma^*$

Elle correspond au passage d'un électron d'une orbitale moléculaire (OM) liante σ à un OM antiliante σ^* . Domaine spectral: UV lointain

Transition $n \rightarrow \sigma^*$

Elle correspond au passage d'un électron d'un doublet à un OM antiliante σ^* . Domaine spectral: de l'ordre de 180 nm

Transition $n \rightarrow \pi^*$

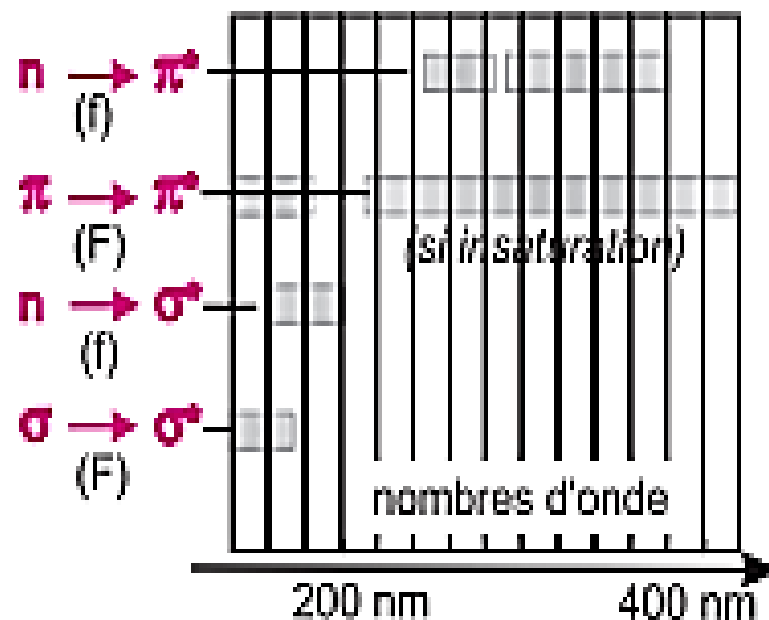
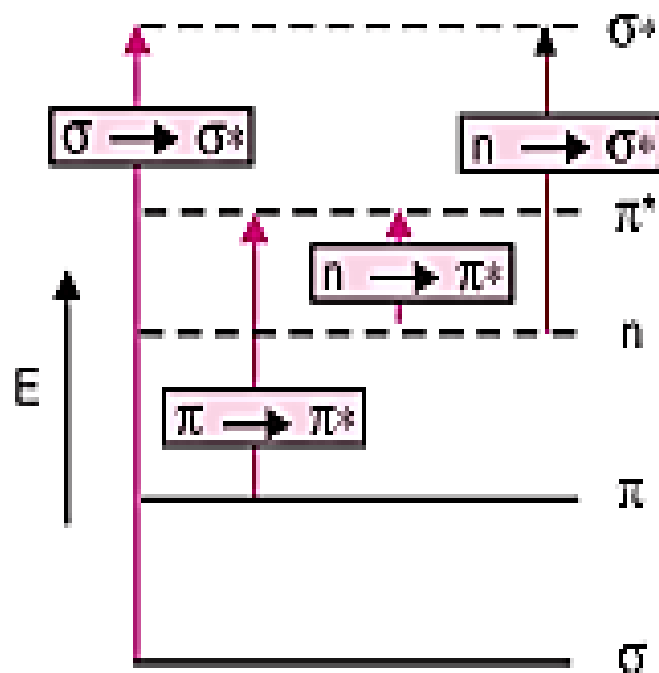
Elle correspond au passage d'un électron d'un doublet à un OM antiliante π^* . Elle se produit dans le cas d'un doublet d'un hétéroatome dans un système insaturé. Exemple: le groupement carbonyle $>C=O$ (270-280 nm)

Transition $\pi \rightarrow \pi^*$

Correspond aux composés éthyléniques. Forte bande d'absorption vers 170nm

Transition $d \rightarrow d$

Elle concerne les métaux de transition ayant des électrons dans les OM d. Elles sont à l'origine de la couleur de nombreux sels inorganiques.



F = transition Forte f = transition faible

Figure 1 Comparatif des transitions les plus souvent rencontrées dans les composés organiques simples.

Groupements chromophores

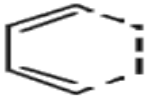
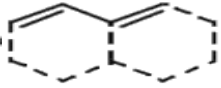
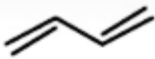
Les groupements chromophores sont les groupements fonctionnels des composés organiques (tableau I) (cétones, alcènes, amines....etc.) responsables de l'absorption en UV-Visible. Une espèce formée d'un squelette carboné transparent dans le proche UV et porteur d'un ou de plusieurs chromophores constitue un chromogène.

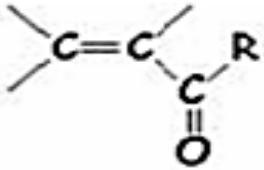
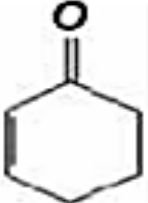
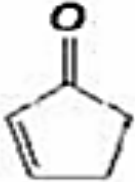
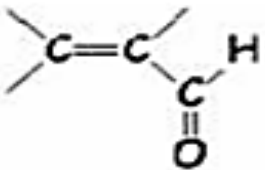
Tableau I : Quelques exemples de groupements chromophores.

Chromophore	Exemple	λ_{\max}	ξ (L.mol ⁻¹ .cm ⁻¹)
C=C	Ethylène	170	15000
C≡C	1-Hexyne	180	10000
C=O	Ethanal	293	1210000
N=O	nitroso	300	100
C-X	Bromure de méthyle	205	200

Règles de Woodward-Fieser et Scott :

Ces règles permettent d'estimer λ_{max} pour des diènes conjugués et également pour les aldéhydes et cétones conjugués.

Structure de base	Parent homoannulaire	Parent hétéroannulaire	Diène acyclique
Valeur de base	253 nm 	214 nm 	217 nm 
			incrément à ajouter (nm)
Double liaison conjuguée supplémentaire			30
Double liaison exocyclique			5
Alkyle ou reste de cycle			5
— O — R			6
— S — R			30
— Cl , — Br			5
— NR ₂			60
— O — CO — R			0

Structure de base		 		
Valeur de base (dans l'éthanol)	215 nm	215 nm 202 nm	207 nm	
Incréments à ajouter (en nm)				
Conjugaison supplémentaire				
• Hétéroannulaire			30	
• Homoannulaire			68	
Double liaison exocyclique			5	
<u>Substituants :</u>		α β γ δ		
-R	10	12	18	18
-O-R	35	30	17	31
-O-CO-CH ₃ ou O-CO-C ₆ H ₅	6	6	6	6
-OH	35	30		50
-Br	25	30		

Le solvant: Le choix du solvant est important dans cette technique. Il doit être:

- Inerte vis-vis du soluté.
- Transparent à la longueur d'onde utilisée.

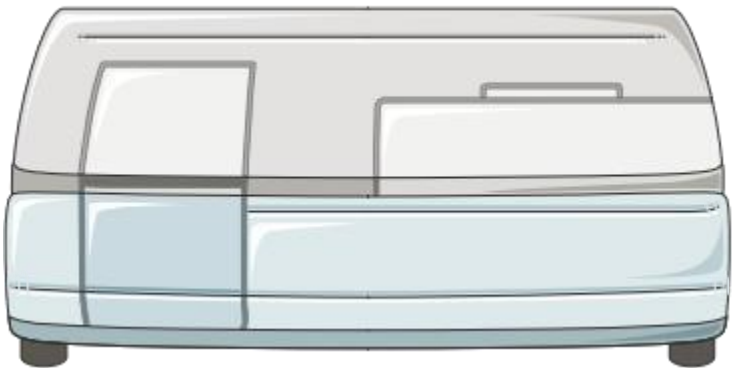
Quelques exemples de solvant:

- Cyclohexane: Transparent au delà de 210 nm.
- Hexane: Transparent au delà de 210 nm.
- Eau distillée: Transparent au delà de 200 nm.
- Chloroforme: Transparent au delà de 230 nm.

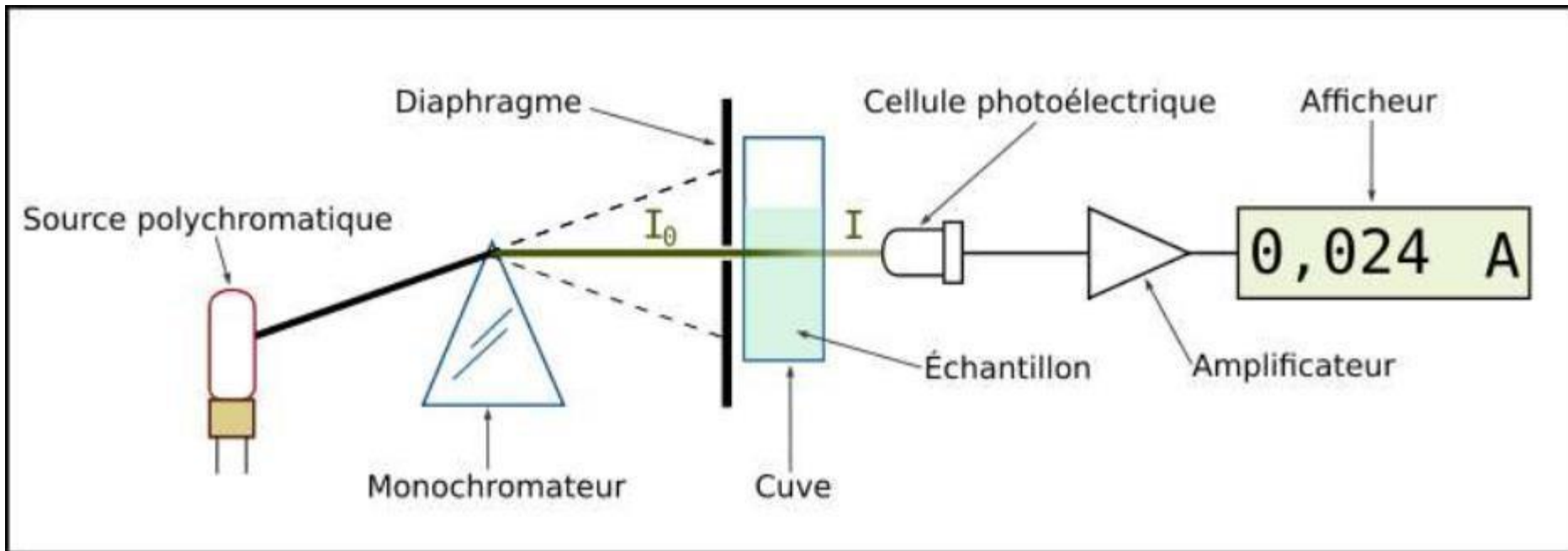
Le solvant doit être débarrassé de toutes ses impuretés avant d'être utilisé.

Le spectrophotomètre

- Un **spectrophotomètre UV-visible** est **un appareil** qui permet de mesurer l'absorbance d'une solution homogène à une longueur d'onde donnée ou sur une région spectrale donnée.
- Le spectrophotomètre comprend :



Composants de base d'un spectrophotometre



Une source lumineuse



Décharge dans les gaz
rares

Lampes à hydrogène ou deutérium,
elle fournissent des radiations
lumineuses dans le domaine du UV



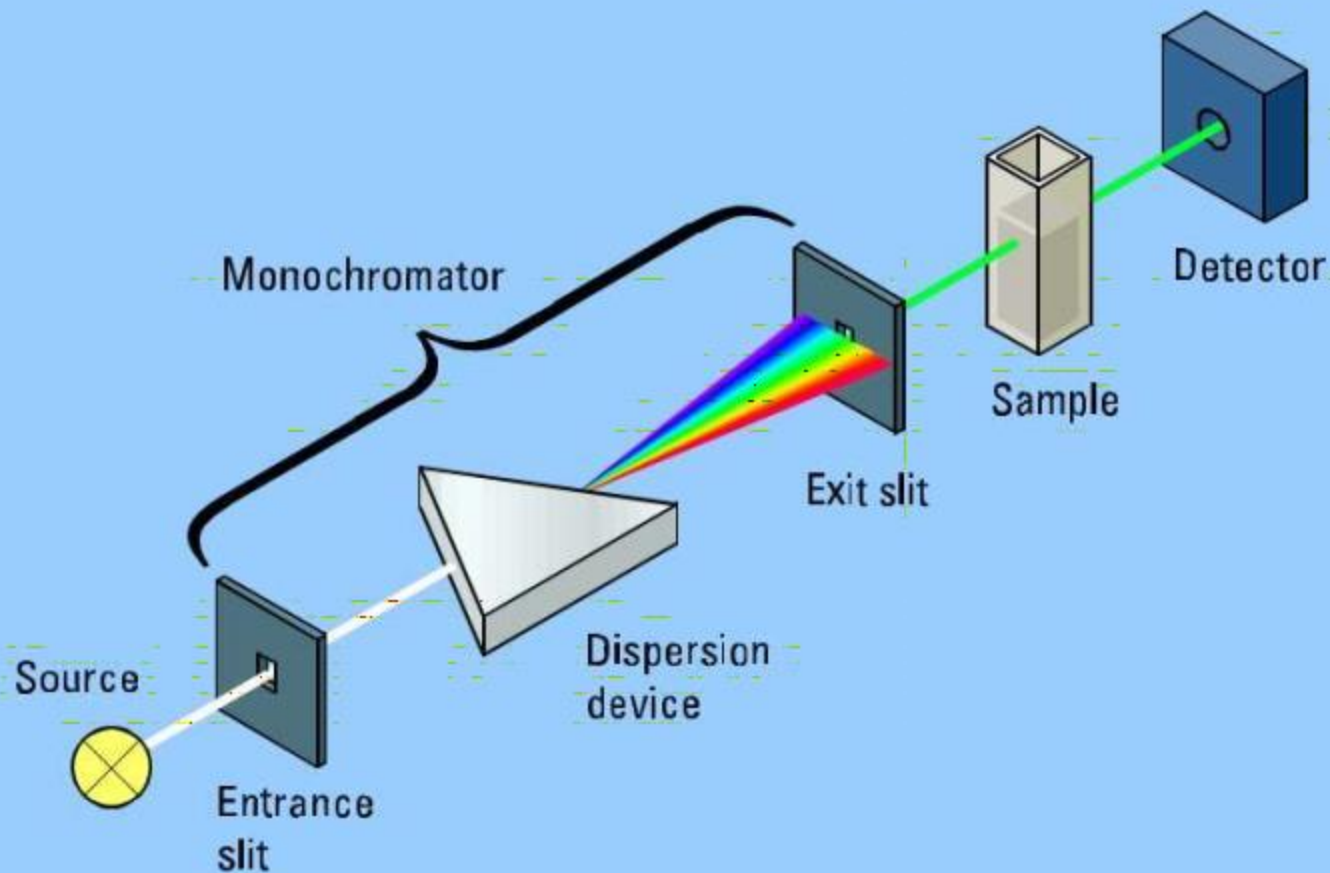
Solide chauffé

ce sont des lampes utilisant un
filament tungstène, elle fournissent
des radiations lumineuses dans le
domaine du visible.



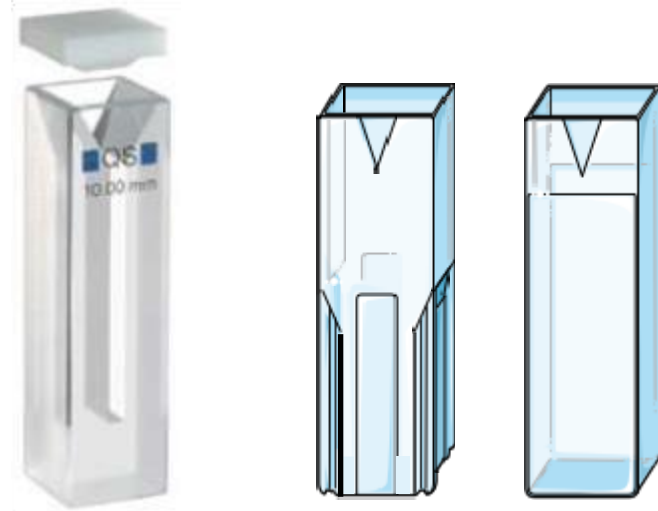
Le monochromateur

Il permet de sélectionner la longueur d'onde de la lumière qui traversera la solution à doser.



La cuve

- une cuve transparente dans laquelle on place la solution à étudier. Suivant la qualité et la quantité d'échantillon, il existe différentes cuves, généralement en plastique ou en verre (spectre visible) ou en quartz (UV).



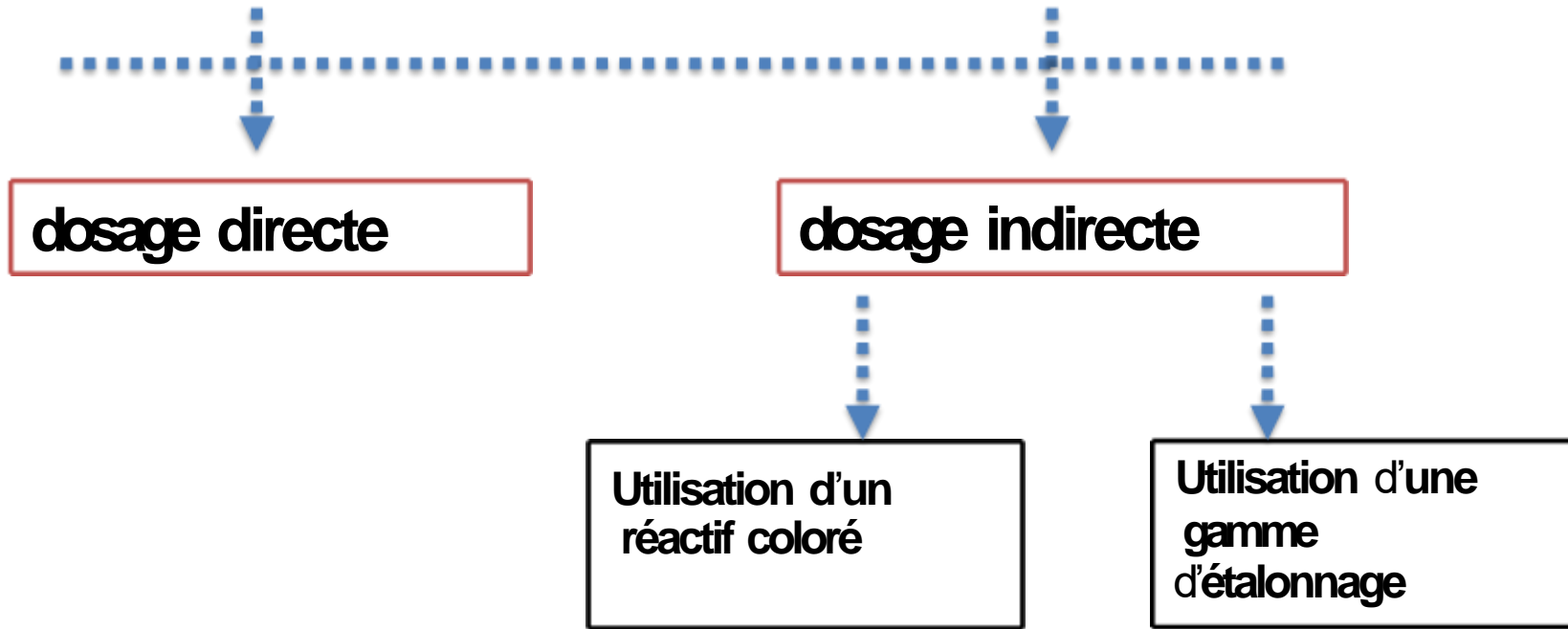
La cellule photoélectrique

- une cellule photoélectrique, permet la transformation de l'énergie lumineuse en énergie électrique, le courant produit est très faible et sera amplifié ultérieurement
 - L'amplificateur
- un système électronique amplifie le courant fourni par la cellule photoélectrique.

L'enregistreur

- Permet de mesurer le courant fourni par l'amplificateur, il est généralement relié a un microordinateur qui permet d'afficher les résultats en pic (balayage de spectre) ou des valeurs fixes des absorbances.

Principes des dosages



Méthode de dosage directe

- Si la substance a doser possède un pic d'absorption caractéristique, on mesure l'absorbance à λ_{\max} et on calcule directement la concentration par la loi de Beer Lambert(e doit être connue) ou bien on Etablis une gamme d'etalonnage
- Exp: dosage des protéine a une longueur de 280nm

Méthode de dosage indirecte

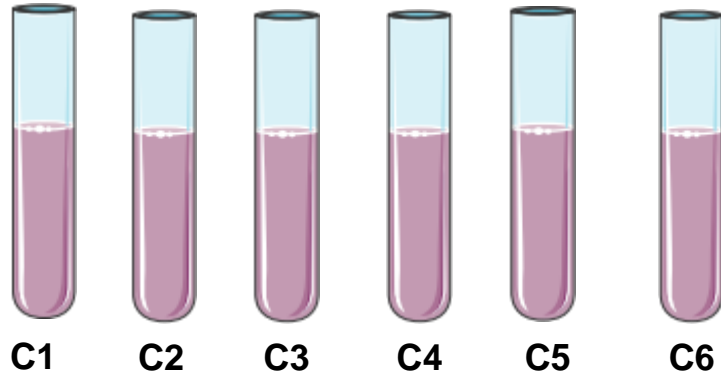
- Cette méthode est utilisée dans le cas où la substance à doser ne possède pas un pic d'absorbance caractéristique (I_{max}):
 - Utilisation d'un réactif coloré

Exemple d'utilisation d'un réactif coloré

- L'utilisation d'un colorant chimique qui en réagissant avec la substance à doser développe une coloration
- Exp. L'urée sanguin ne possède pas un pic caractéristique, elle forme un produit coloré avec le réactif diacétyl monoamine qui absorbe à 440nm.

L'urée+ diacétyl monoamine  produit coloré absorbe à 440nm

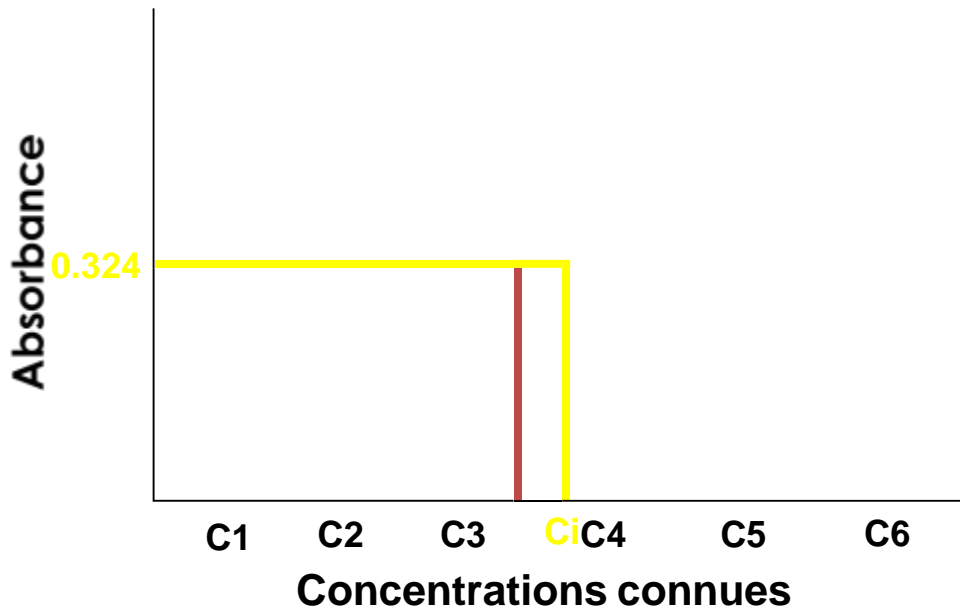
Etablissement d'une gamme d'etalonnage



Solution a doser (concentration inconnue) C_i



Voir l'absorbance de cette solution. Exp. $A=0.324$



NB: Le blanc ou témoin

- La lecture au niveau du spectrophotomètre est effectuée contre une solution qu'on appelle blanc, (sur laquelle on règle le zéro) qui contient tout les constituants du milieu sauf la substance à doser (échantillon),
- l'absorbance enregistrée sera donc celle de la substance à doser uniquement.

Applications

- Permet de déterminer la concentration d'une substance en solution dans un milieu simple ou complexe.
- Suivie de la cinétique d'une réaction chimique
- Dosage des protéines exp hémoglobine dans le sang à 540nm.
- Suivie en continue de l'élution des protéine au cours d'une chromatographie
- Vérifier la pureté d'une molécule en solution
- Identifier une molécule en solution
- *Remarque: l'opacimétrie est une méthode qui utilise le spectrophotomètre a 625 nm pour quantifier le nombre de particules dans une suspension (exp: suspension bactérienne ou de globules rouges)*

Spectroscopie Infrarouge

La spectroscopie d'absorption infrarouge étudie les vibrations et les rotations des molécules lorsqu'elles sont irradiées par une onde électromagnétique de fréquence comprise dans le domaine de l'infrarouge. Cette technique d'identification s'utilise principalement pour l'analyse qualitative d'une molécule en mettant en évidence la présence de liaisons entre les atomes (fonctions et groupements).

Le rayonnement infrarouge (IR) fut découvert en 1800 par Frédéric Wilhelm Hershel. Ces radiations sont situées entre la région du spectre visible et des microondes..

Le domaine infrarouge s'étend de 12500 cm^{-1} et 10 cm^{-1} .
Il est divisé en 3 catégories:

Le proche infrarouge : 12500-4000 cm^{-1} .

Le moyen infrarouge : 4000-400 cm^{-1} .

Le lointain infrarouge : 400-10 cm^{-1}

La spectroscopie IR est basée sur l'interaction de la lumière IR avec le nuage électronique des liaisons chimiques.

Généralement dans la majorité des spectroscopies optiques comme la spectroscopie de l'UV/visible, l'absorption d'énergie permet à un électron d'une liaison chimique de passer d'un état fondamental à un état excité.

Dans le cas de la spectroscopie d'absorption IR, le rayonnement émis par la source polychromatique n'est généralement pas assez énergétique pour provoquer des transitions électroniques, mais il induit des transitions entre les niveaux d'énergie vibrationnelle et rotationnelle. Ce qui va donc conduire à des mouvements de vibration et de rotation au sein de la molécule

Donc à chaque groupe d'atomes subissant ces mouvements il correspondra une bande d'absorption caractérisé par un nombre d'onde ν bien déterminé.

Seules les vibrations qui font varier le moment dipolaire de la molécule absorbent les radiations infrarouges.

Les transitions vibrationnelles nécessitent plus d'énergie que les transitions rotationnelles.

Aussi la lumière 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.

La majorité des applications se situe entre 4000 cm^{-1} et 400 cm^{-1} (IR moyen). Ce domaine correspond aux transitions moléculaires de type vibration et rotation, lesquelles conduiront à des absorptions. Les transitions entre niveaux de rotation apparaissent dans l'IR lointain

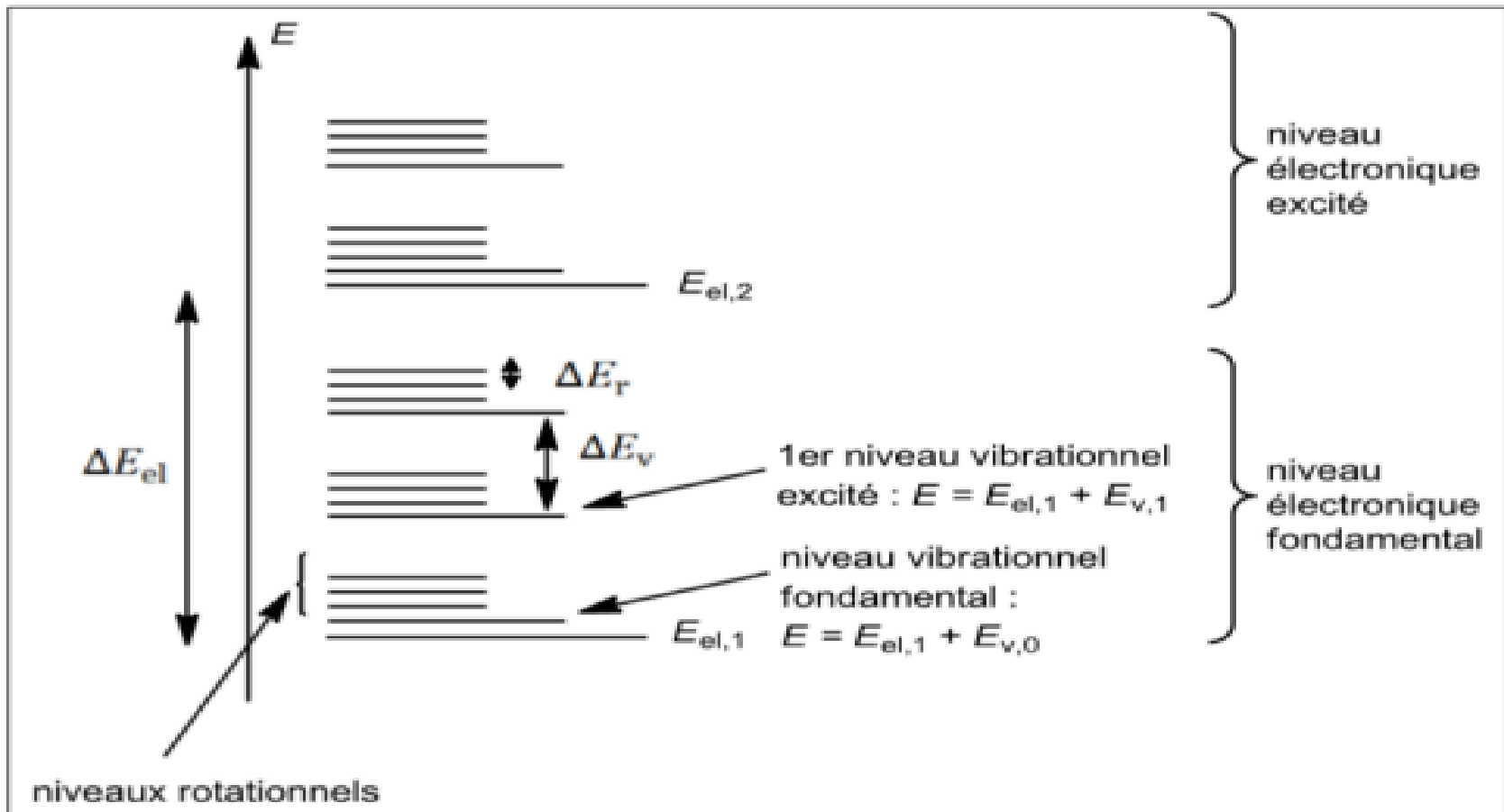


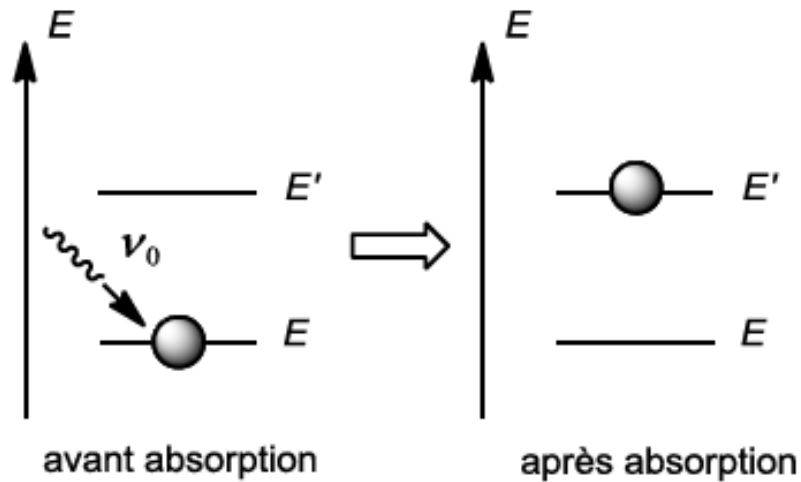
Figure : Niveaux énergétiques

Transitions électroniques : ont lieu dans le domaine de l'UV-visible (spectroscopie UVvisible).

Transitions vibrationnelles : ont lieu dans le domaine du proche et du moyen infrarouge.

Transitions rotationnelles : ont lieu dans le domaine de l'infrarouge lointain et microonde.

Une onde électromagnétique de fréquence ν_0 peut être absorbée par une molécule qui va passer d'un niveau énergétique à un autre.



L'absorption n'est possible que si l'énergie de l'onde correspond à la différence d'énergie entre les deux niveaux énergétiques:

$$E' - E = h\nu_0 = \frac{hc}{\lambda_0}$$

Les transitions électroniques ont lieu dans le domaine de l'UV-visible.

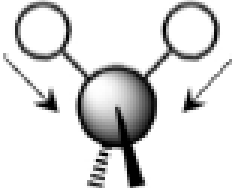
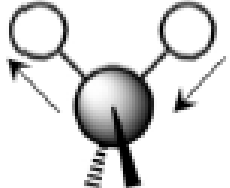
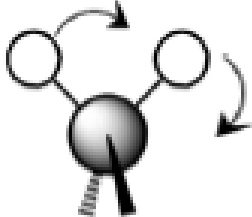
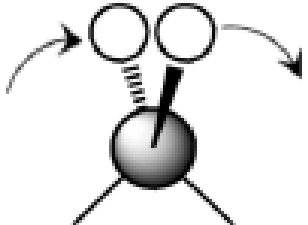
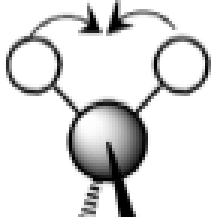
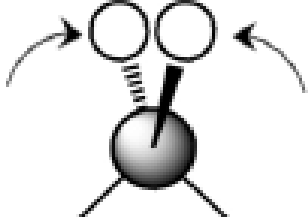
Les transitions vibrationnelles ont lieu dans le domaine du proche infrarouge

Rayonnement UV-visible → transition électronique

Rayonnement IR → vibration des liaisons

Deux types de vibration:

- vibration d'élongation correspondant à l'étirement d'une liaison A - B.
- vibration de déformation (ou flexion) correspondant à la variation d'un angle de valence.

Vibration d'élongation (de valence)	
 <p>symétrique</p>	 <p>asymétrique</p>
Vibration de déformation	
Dans le plan	Hors du plan
 <p>asymétrique (rotation plane)</p>	 <p>asymétrique (balancement)</p>
 <p>symétrique (cisaillement)</p>	 <p>symétrique (torsion)</p>

exemples des modes de vibration d'un groupement CH_2

Spectroscopie IR (Infrarouge)

Principe (obtention d'un spectre)

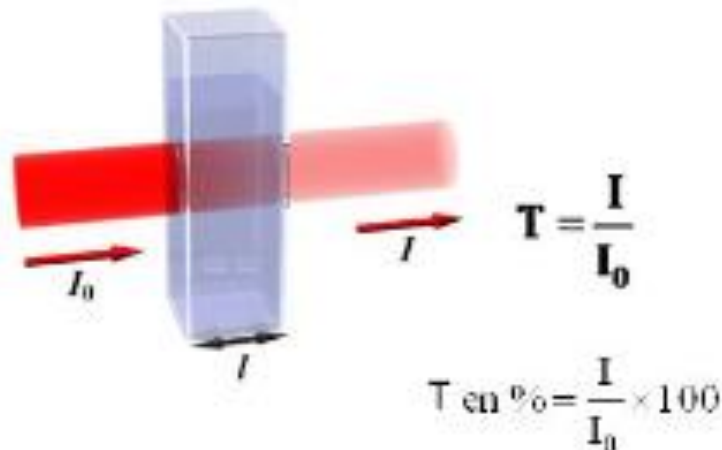
On envoie une onde électromagnétique à travers l'échantillon à analyser.
Si cette onde à une fréquence correspondant à un mode vibration possible d'une liaison, alors elle est absorbée.

On mesure alors la transmittance T :

Une transmittance de 100 % signifie que l'onde n'est pas absorbée.

Une transmittance de 0 % signifie absorption totale de l'onde.

De ce fait, les spectres possèdent des **bandes d'absorption orientées vers le bas.**



Spectroscopie IR (Infrarouge)

Principe (obtention d'un spectre)

Un spectre IR représente la transmittance en fonction du **nombre d'onde σ** des radiations envoyées.

Le nombre d'onde à l'avantage d'être à la fois proportionnel à la fréquence et à l'énergie de l'onde envoyée :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E}{hc}$$

Rappel : l'énergie d'une onde électromagnétique (ou du photon associé) :

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

L'unité utilisée en IR pour le nombre d'onde est le **cm⁻¹** (ce n'est pas l'unité SI)

Principe de fonctionnement d'un spectrophotomètre IR

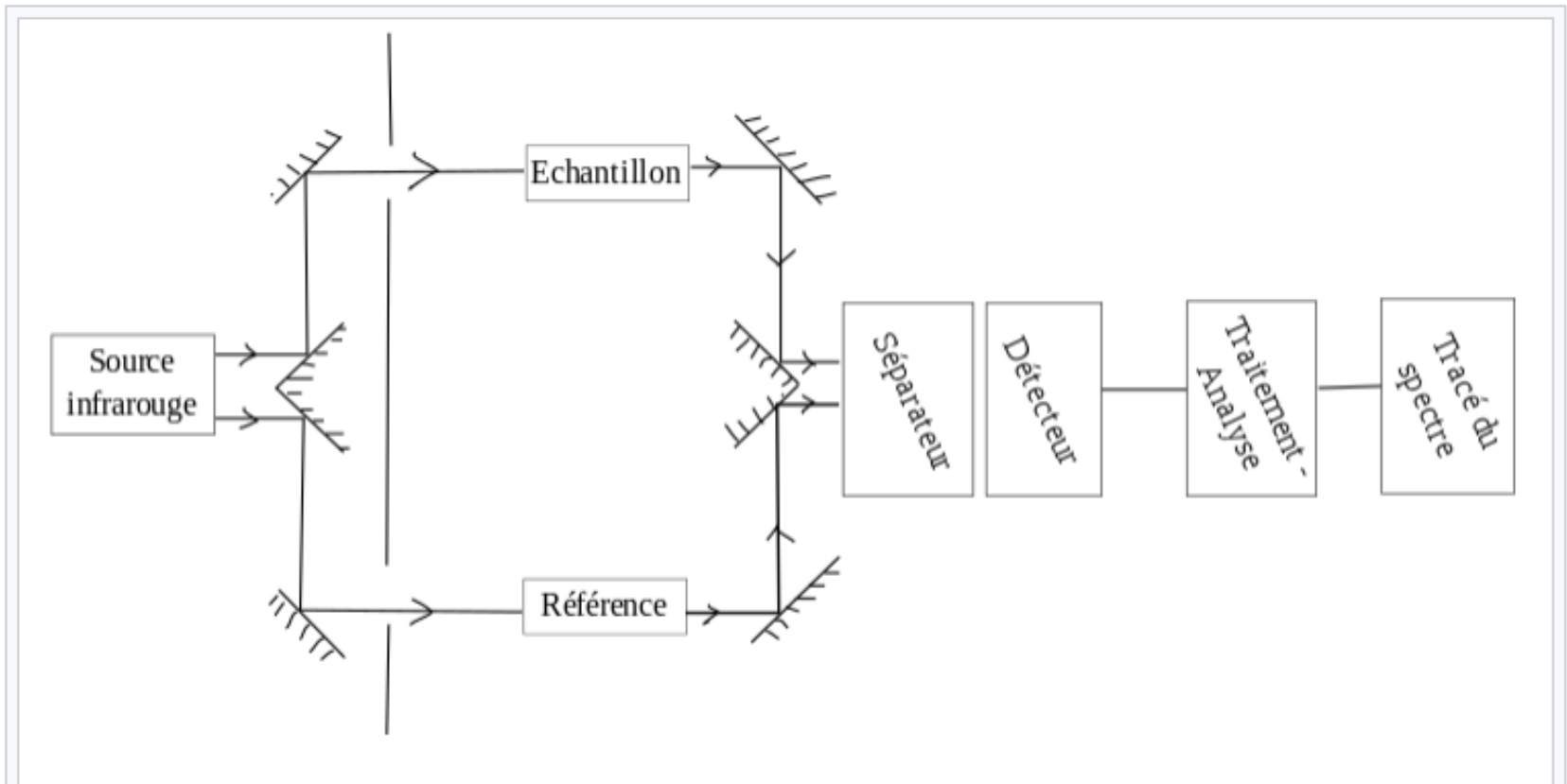


Schéma de fonctionnement d'un spectromètre infrarouge « classique ».

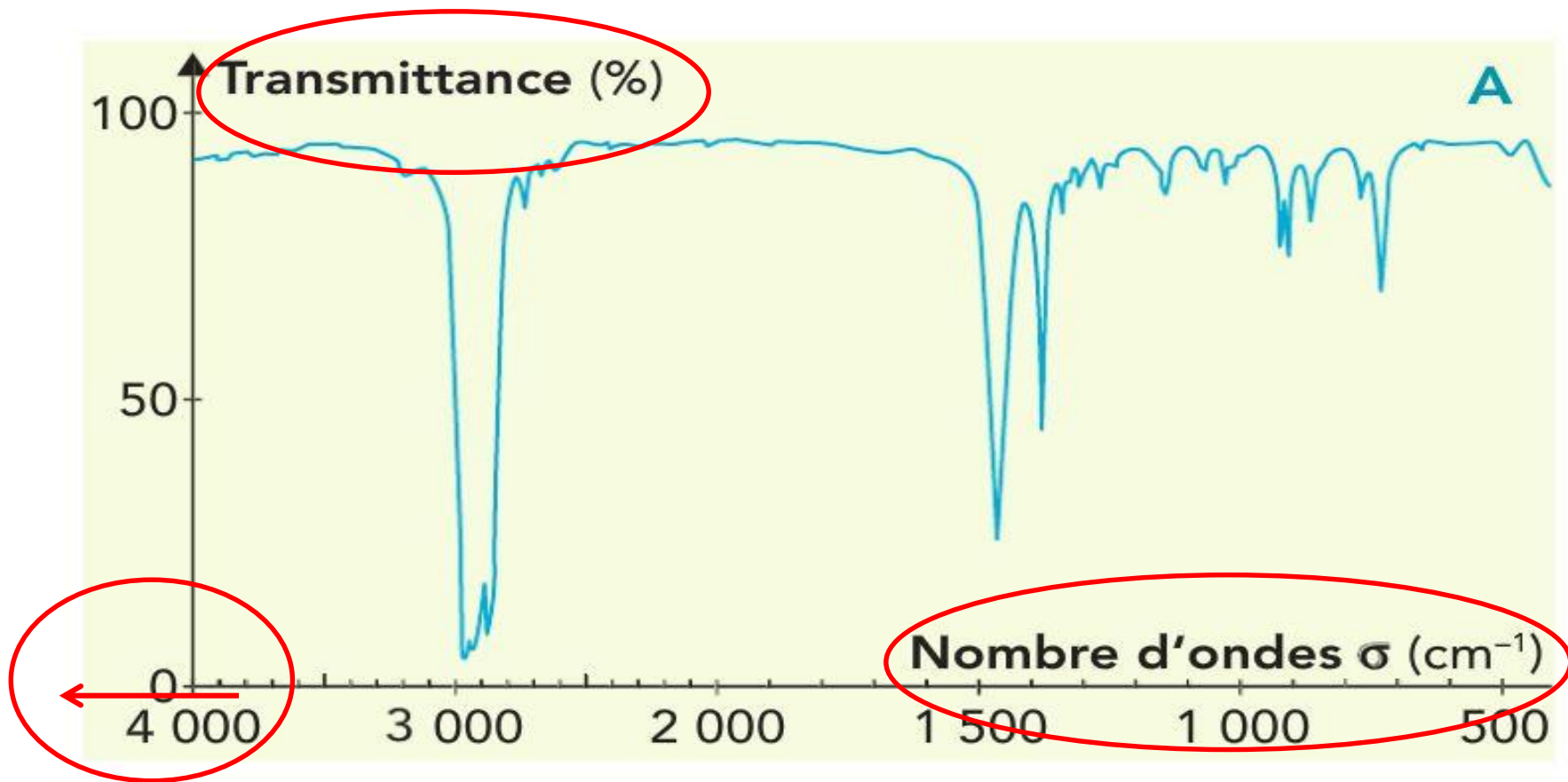


Dans un spectromètre infrarouge « classique » (il existe des montages spéciaux dépendants des activités poursuivies), un rayon de lumière infrarouge est produit et séparé en deux faisceaux. L'un passe au travers de l'échantillon, l'autre au travers d'une référence qui est parfois le composé dans lequel l'échantillon a été dissous.

Les faisceaux sont ensuite réfléchis jusqu'à un détecteur, après être passés par un séparateur qui alterne rapidement les faisceaux entrant dans le détecteur. Les deux signaux sont comparés et le spectre ainsi obtenu tracé.

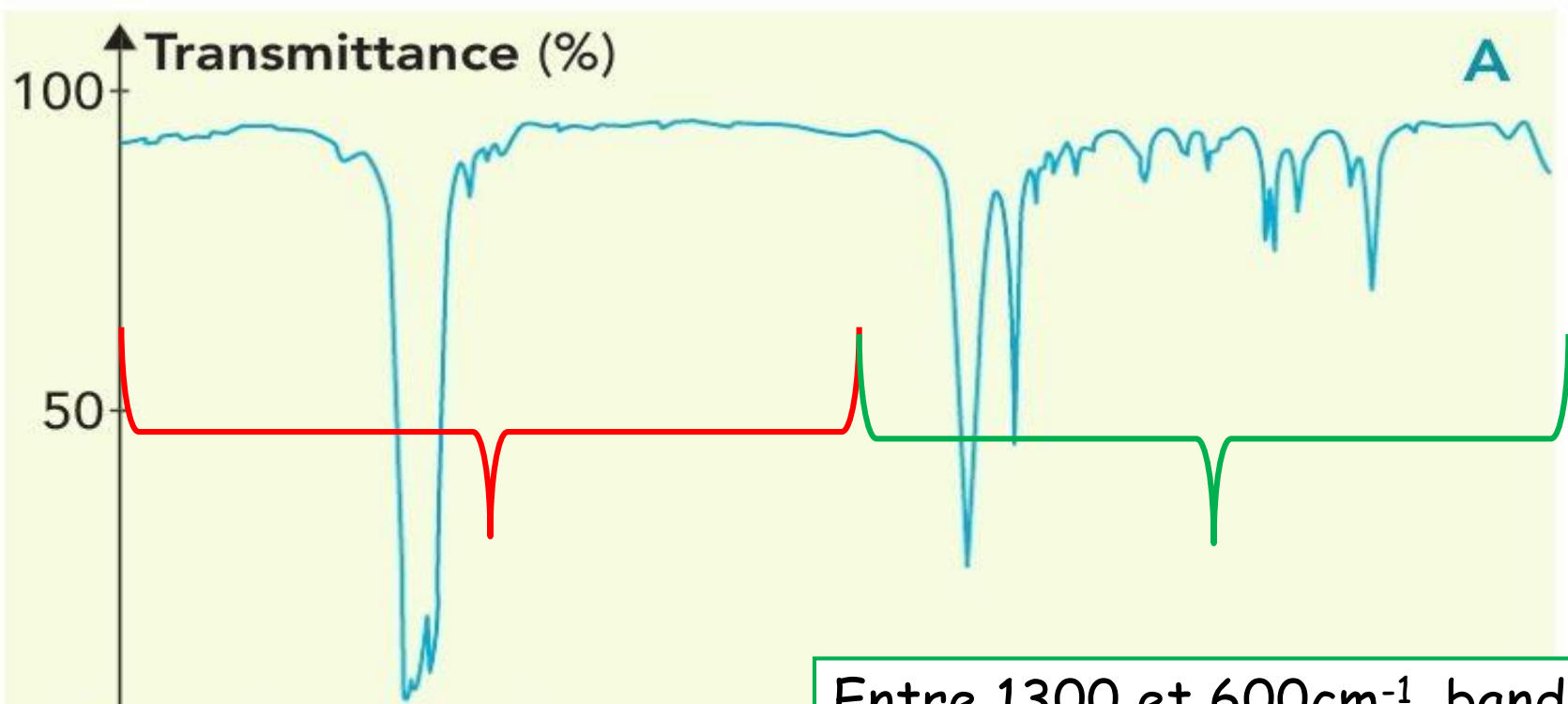
L'utilisation d'une référence permet :

- d'éviter les fluctuations de sortie de source qui peuvent affecter les données. Ces fluctuations ont des origines diverses, comme le vieillissement.
- d'éviter la prise en compte des effets de solvant (la référence est habituellement le solvant pur correspondant à celui dans lequel l'échantillon est dissous).



Le nombre d'onde σ a l'avantage d'être directement proportionnel à la fréquence (donc à l'énergie) du rayonnement absorbé.

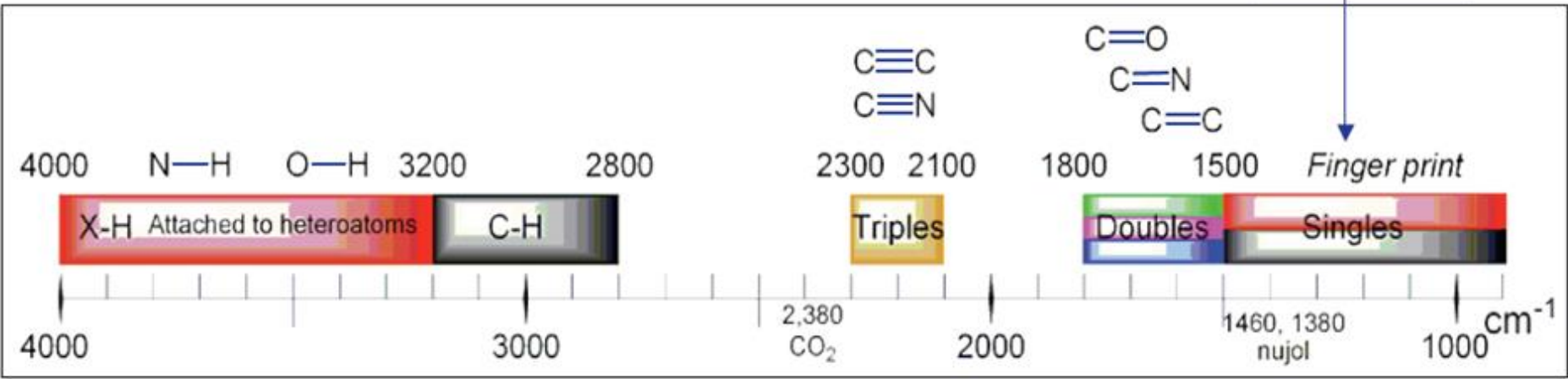
$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E}{hc}$$



Entre 4000 et 1300 cm^{-1} , bandes de vibration d'élongation: caractéristiques des fonctions.

Entre 1300 et 600 cm^{-1} , bandes de vibration de déformation: zone difficile à analyser, appelée zone des empreintes digitales.

Empreintes
digitales



L'exploitation d'un spectre se fait par :

- Repérage des bandes caractéristiques des groupes fonctionnels, grâce *aux tables existantes*.

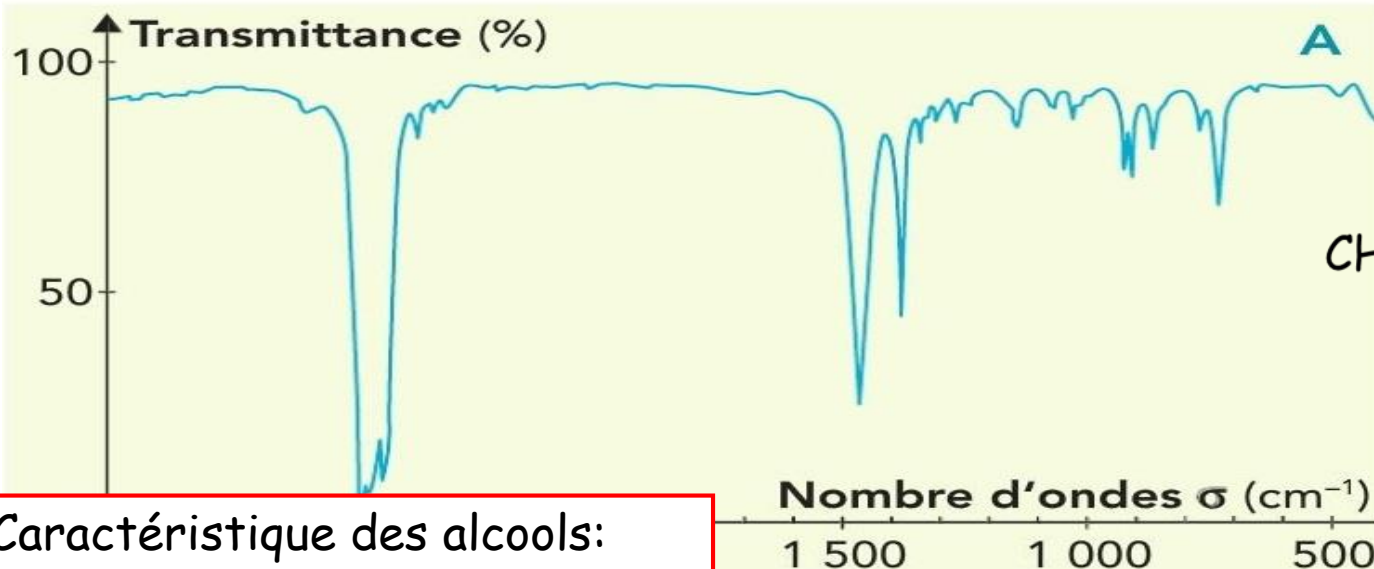
Les bandes seront analysées selon leurs :

- Position (cm^{-1}),
 - Intensité (faible, moyenne, forte)
 - Forme (large ou étroite).
- Comparaison du spectre étudié et, en particulier, de la région « empreinte digitale » à un spectre de référence.

A	Pentane	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$	alcane
B	Pent-1-ène	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-HC}=\text{CH}_2$	groupe alcène
C	Pentan-1-ol	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-H}_2\text{C-OH}$	groupe hydroxyle
D	Pentanal	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-HC=O}$	groupe carbonyle (aldéhyde)
E	Pentan-3-one	$\text{CH}_3\text{-H}_2\text{C-CO-CH}_2\text{-CH}_3$	groupe carbonyle (cétone)
F	Acide pentanoïque	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{H}$	groupe carboxyle
G	Pentan-1-amine	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$	groupe amine
H	Propanoate d'éthyle	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-O-CH}_2\text{-CH}_3$	groupe ester
I	pentanamide	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO-NH}_2$	groupe amide

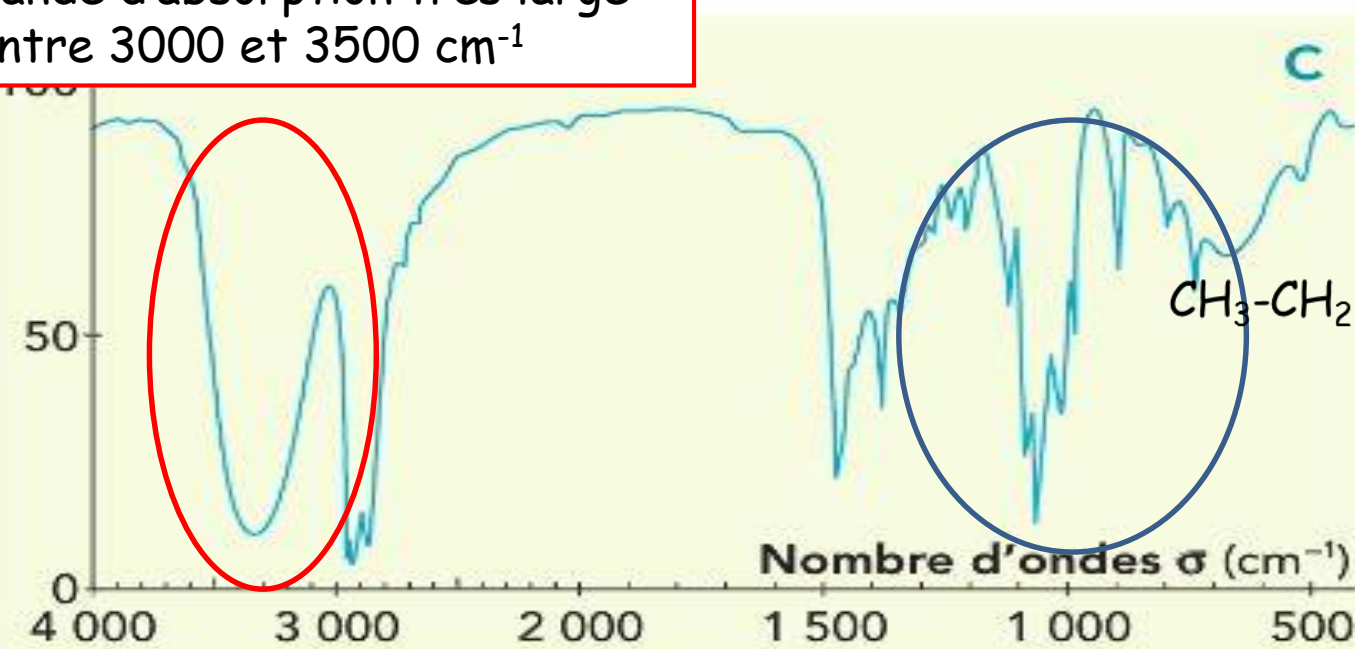
Liaison	Nature de la vibration	Nombre d'onde (cm^{-1})	Intensité
C(tétraédrique) – H	élongation	2800 – 3000	Forte, multiple (correspondant à différents modes de vibration, symétriques et antisymétriques des groupes CH_2 et CH_3)
C(tétraédrique) – H	déformation	1425 – 1470	Forte
C(tétraédrique) – H (CH_3)	déformation	1365 – 1385	Forte, 2 bandes
C – C	élongation	1000 – 1250	Forte

alcane et alcool



CH3-CH2-CH2-CH2-CH3
pentane

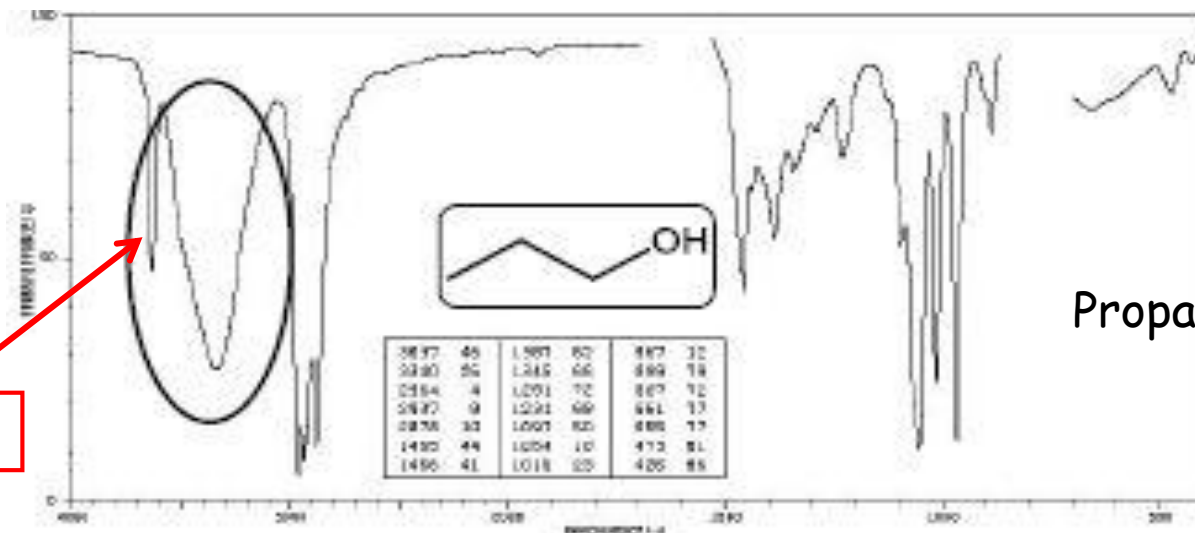
Caractéristique des alcools:
Bande d'absorption très large
entre 3000 et 3500 cm⁻¹



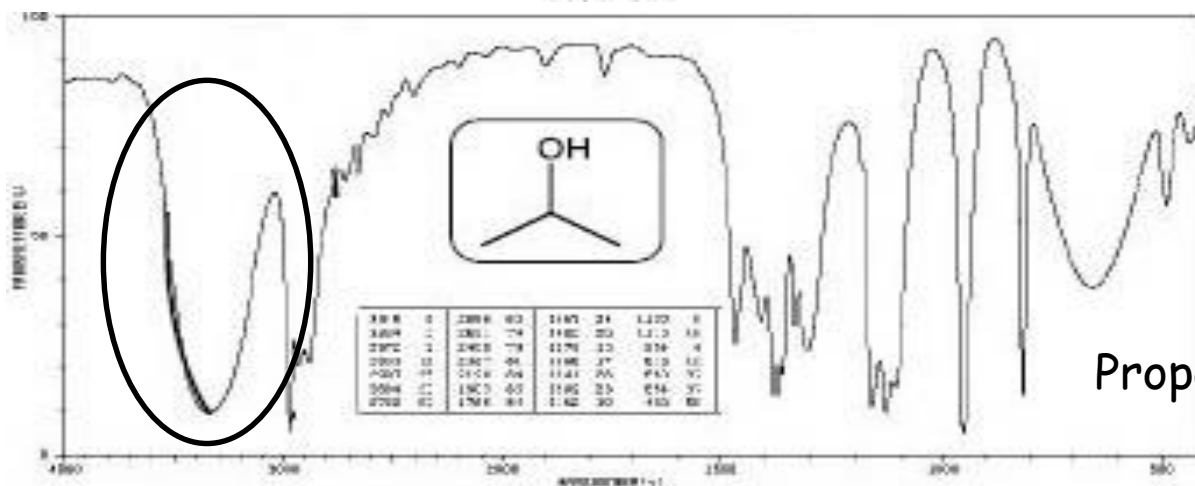
CH3-CH2-CH2-CH2-H2C-OH
pentan-1-ol

Cette bande large caractéristique des alcools ne permet pas toujours de savoir de quel isomère il s'agit.

OH libre



Propan-1-ol

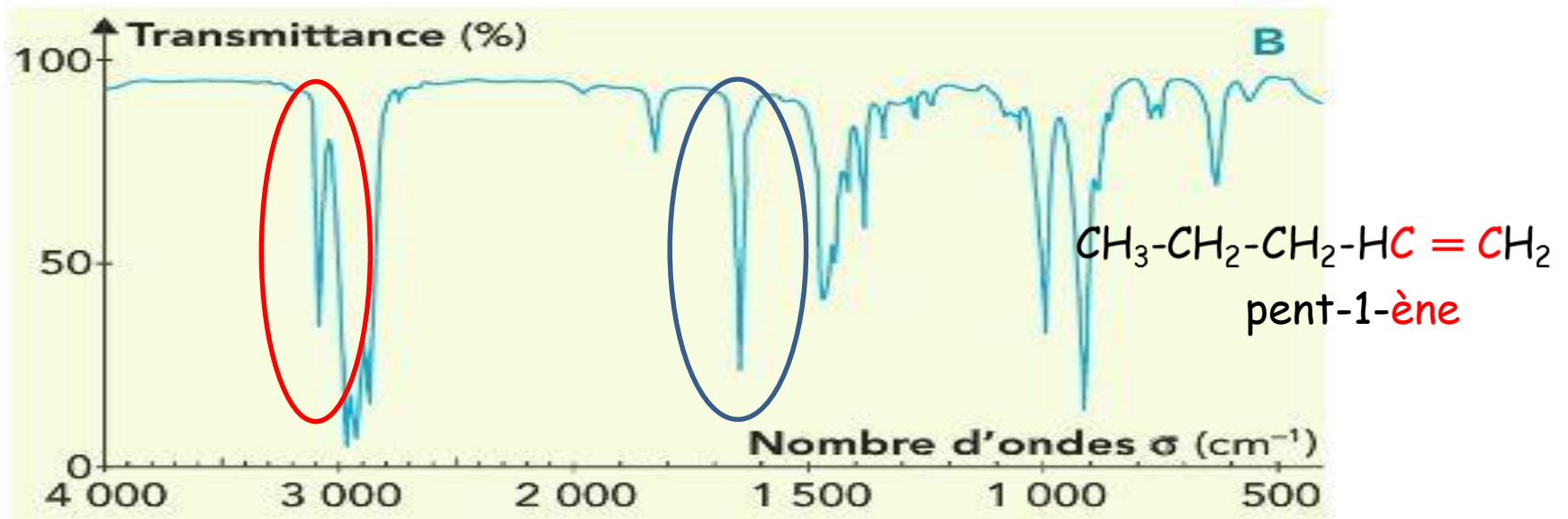
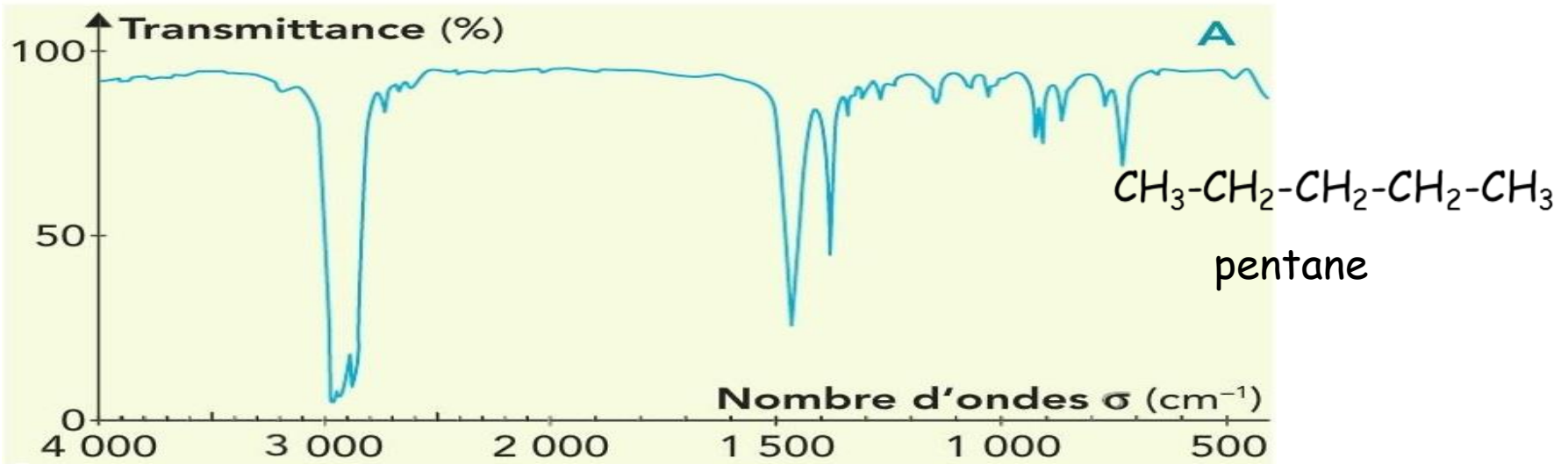


Propan-2-ol

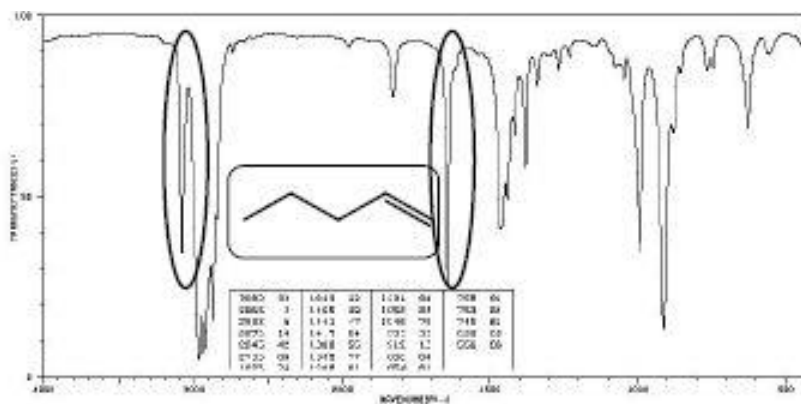
En présence de liaisons hydrogène, la liaison OH est affaiblie , ce qui diminue la constante de raideur de la liaison .
Cela provoque la diminution de σ et l'élargissement de la bande d'absorption

Liaison	Nature de la vibration	Nombre d'onde (cm^{-1})	Intensité
O – H (alcool libre)	élongation	3580 – 3670	Forte, fine
O – H (alcool lié)	élongation	3200 – 3400	Forte, large
C – O	élongation	1050 – 1450	Forte

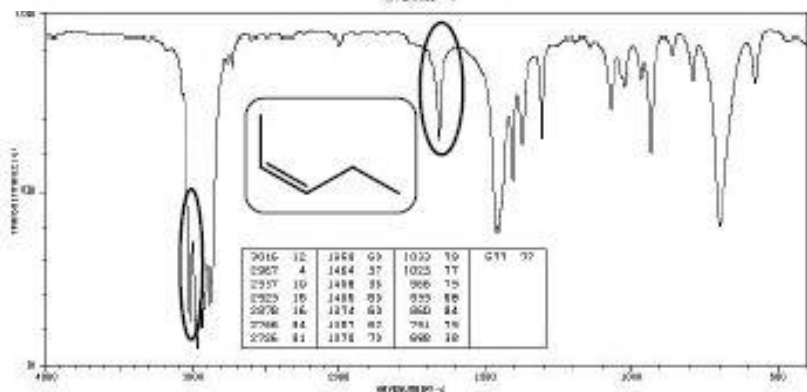
Alcanes et alcènes



Liaison	Nature de la vibration	Nombre d'onde (cm^{-1})	Intensité
C(trigonal) - H (alcène)	élongation	3000 - 3100	moyenne
C = C (alcène)	élongation	1625 - 1685	moyenne
C(trigonal) - H (alcène)	déformation	1250 - 1450	moyenne

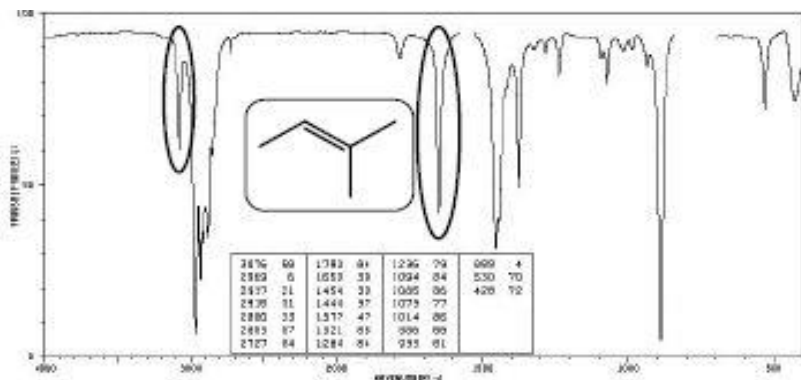


Pent-1-ène



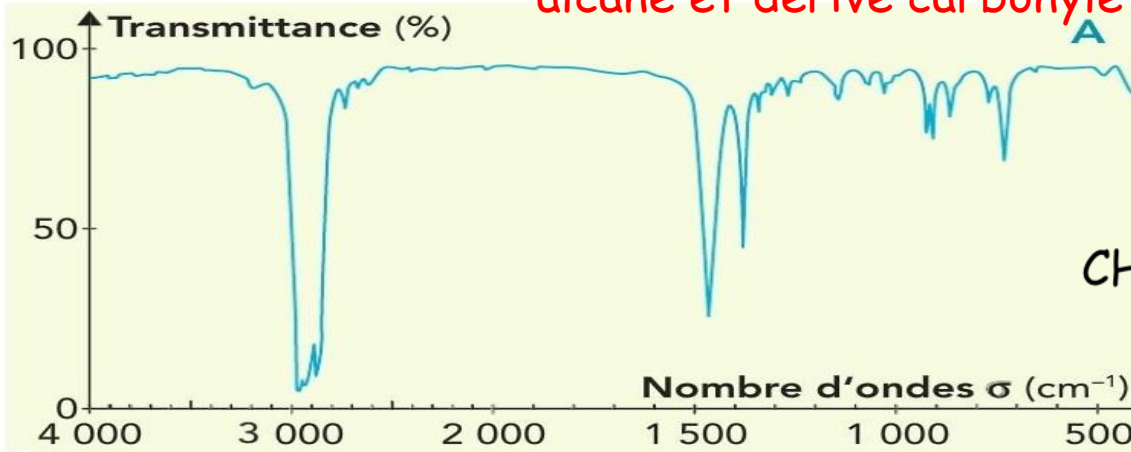
(Z)-pent-2-ène

Difficulté à différencier les isomères
=> nécessité d'un autre type de spectre : RMN

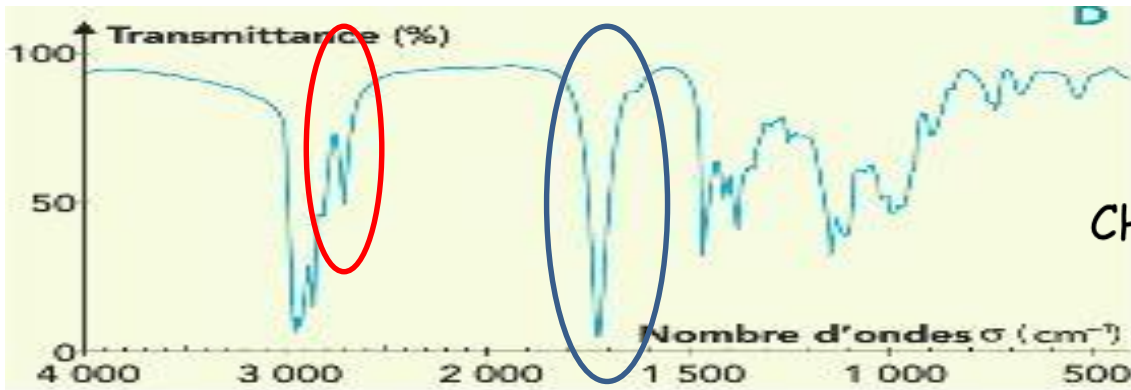
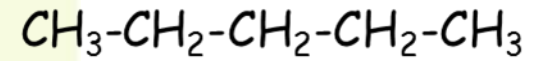


2-méthylbut-2-ène

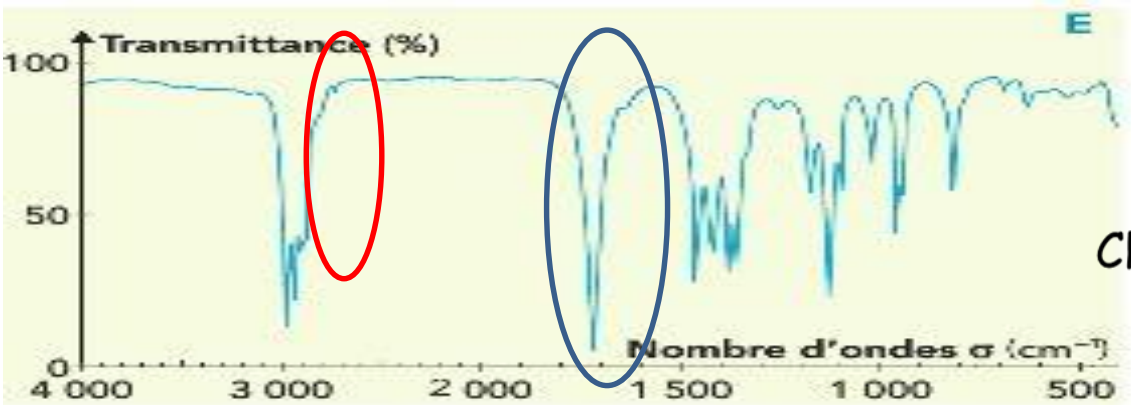
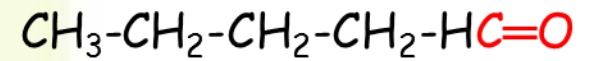
alcane et dérivé carbonylé



pentane



pentanal

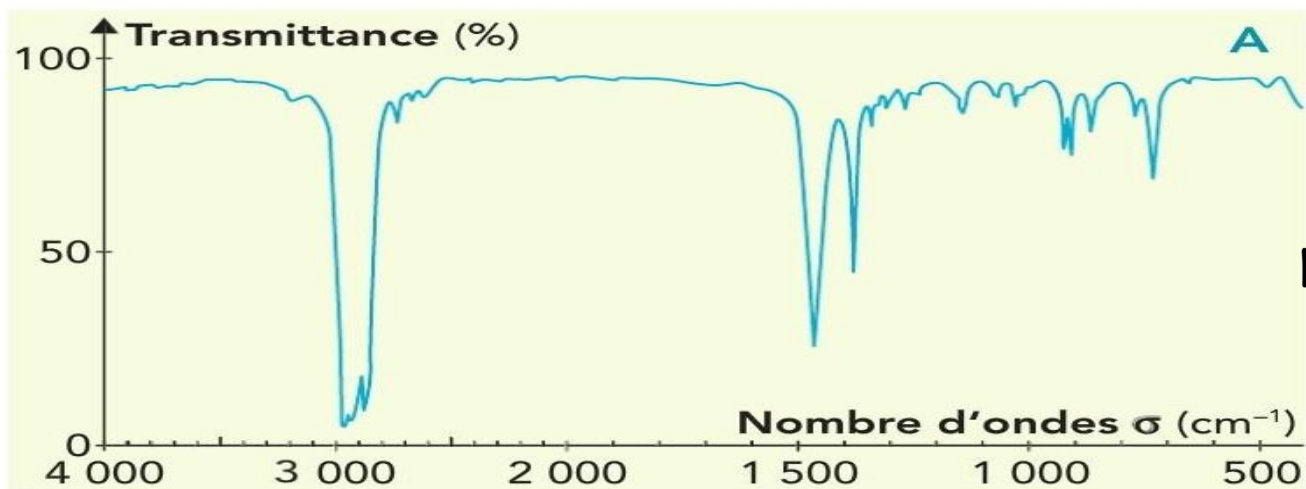


Pentan-3-one

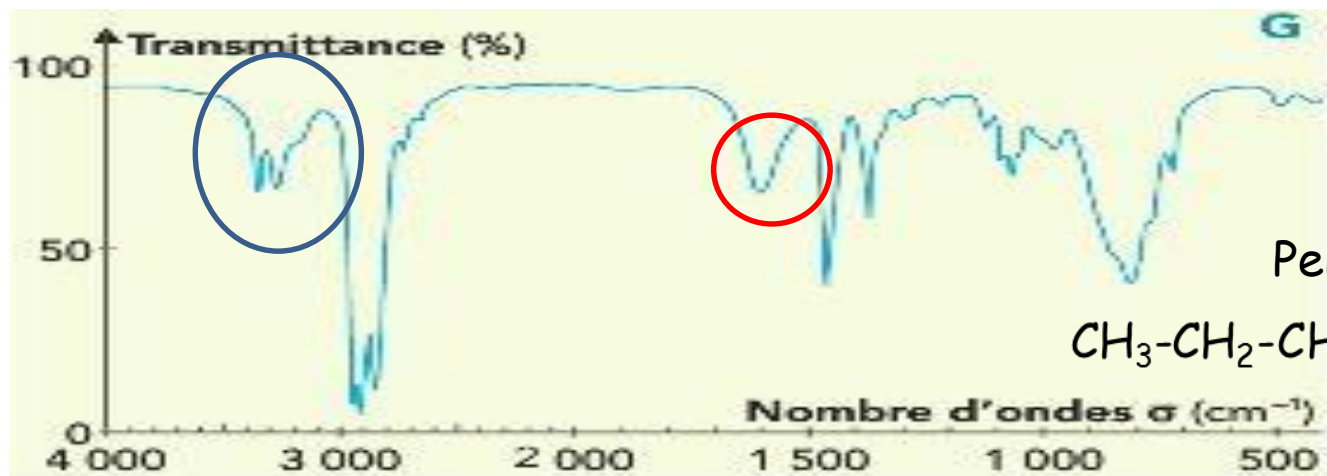


Liaison	Nature de la vibration	Nombre d'onde (cm^{-1})	Intensité
C – H (aldéhyde)	élongation	2700 – 2800 2800 – 2900	Moyenne, 2 pics
C = O (aldéhyde et cétone)	élongation	1650 – 1730	Forte
C – O	élongation	1050 – 1450	Forte

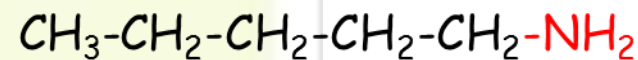
Alcanes et Amines

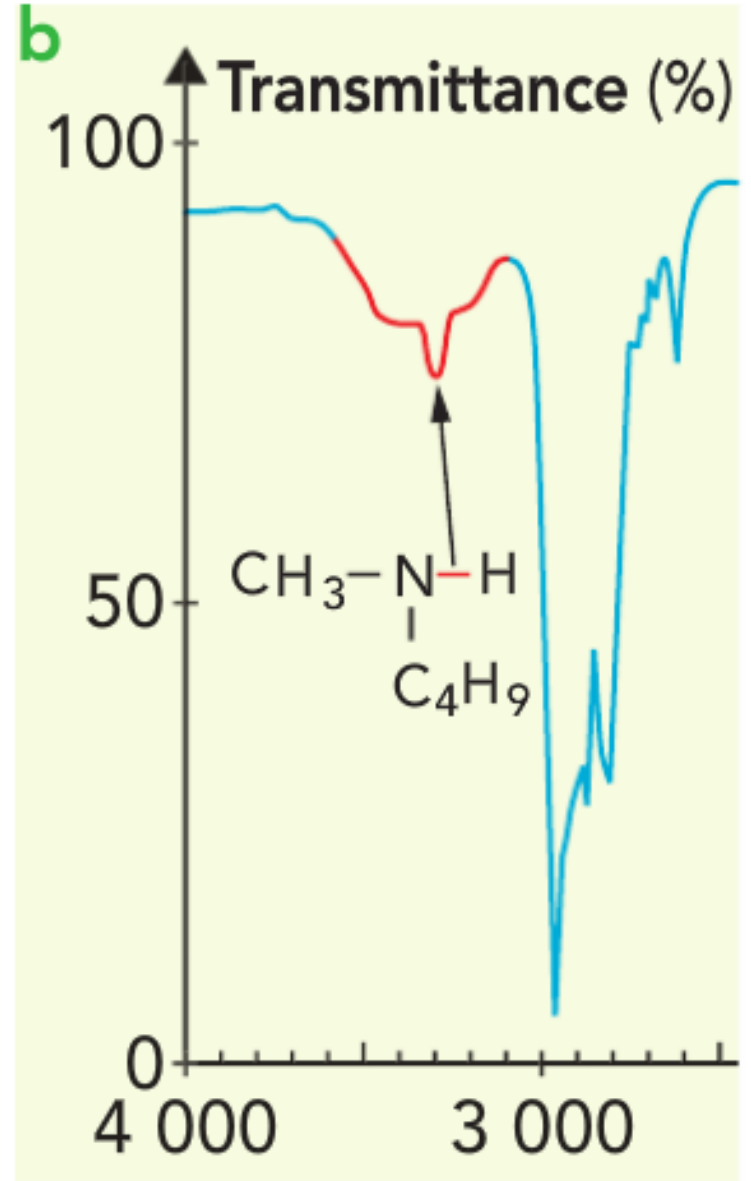
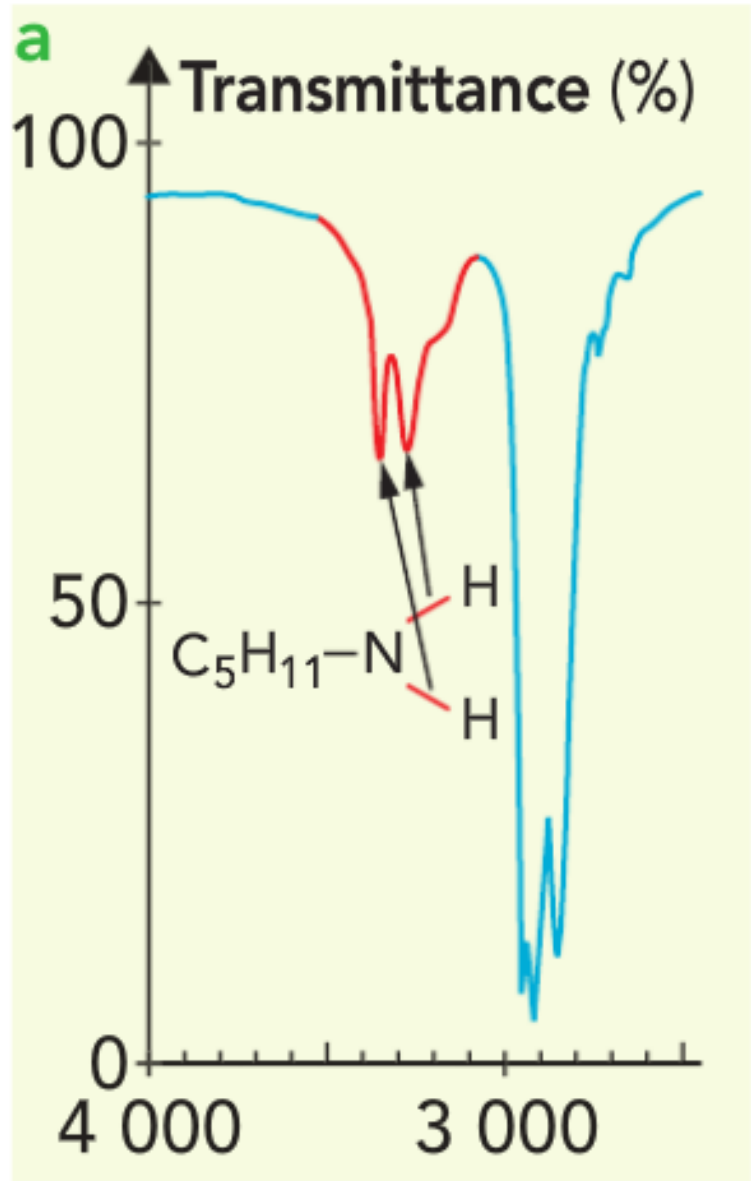


pentane

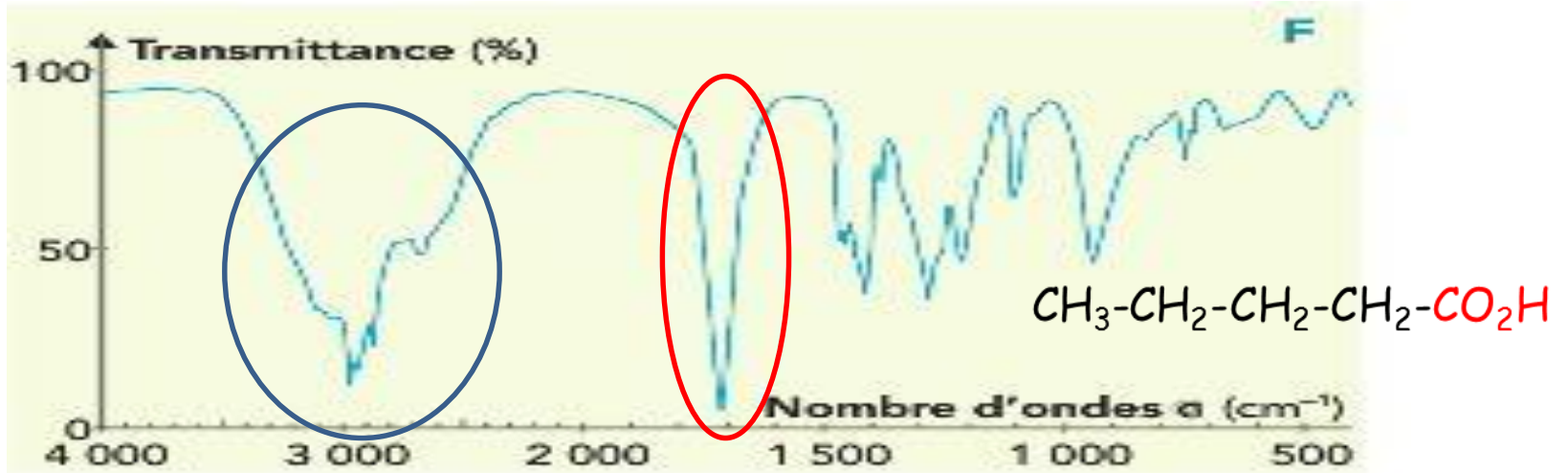
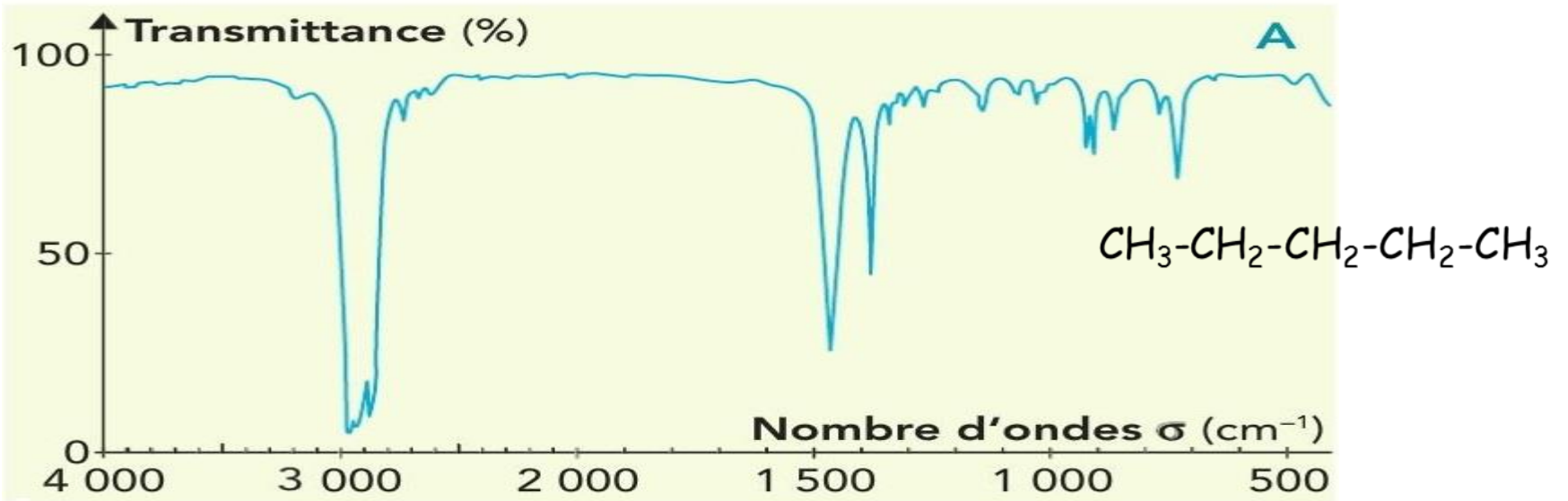


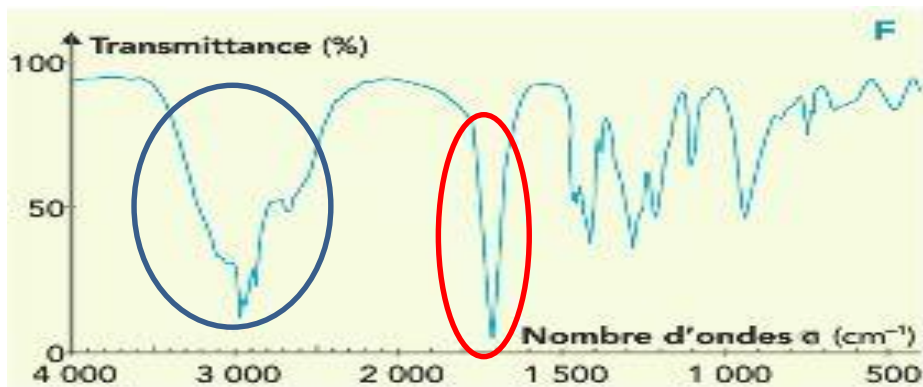
Pentan-1-amine



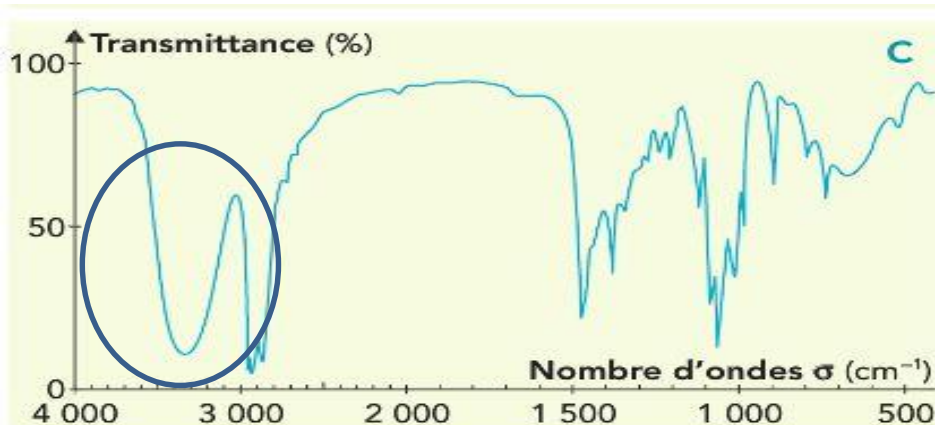
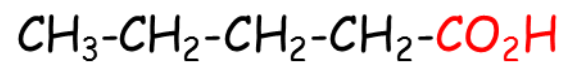


Acides carboxyliques

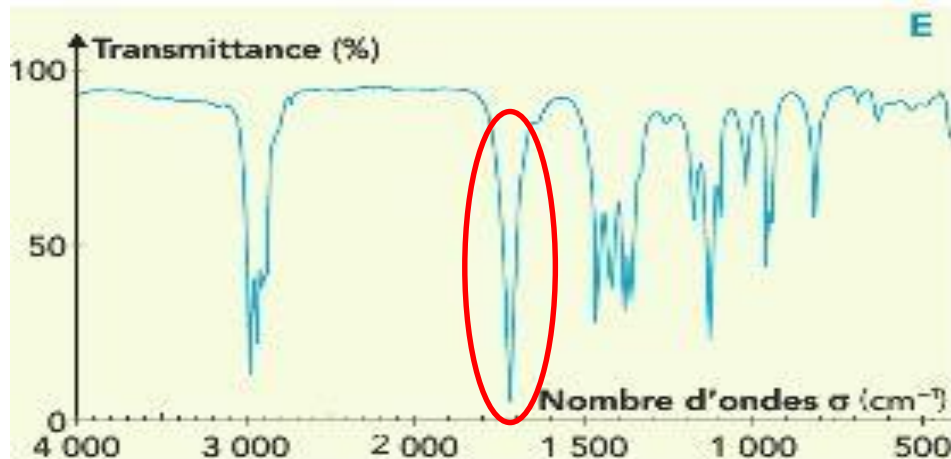
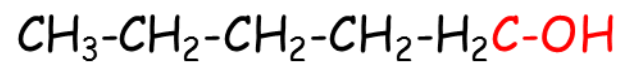




Acide pentanoïque



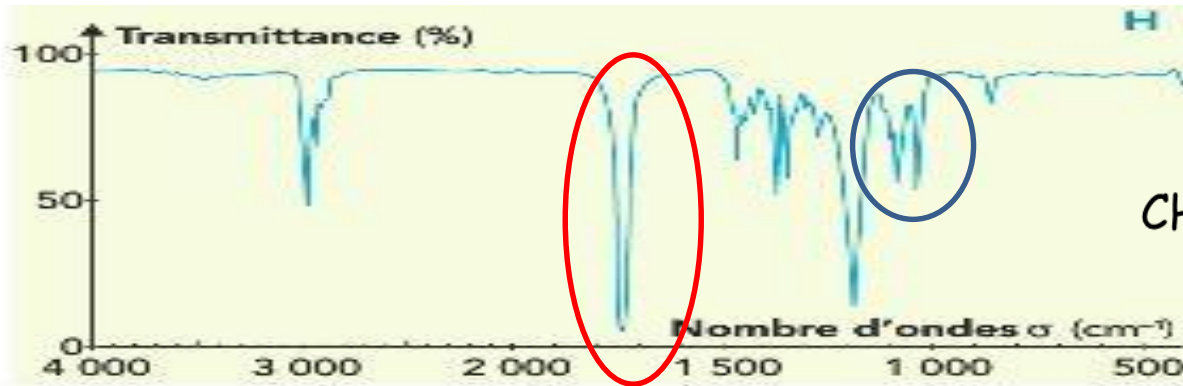
Pentan-1-ol



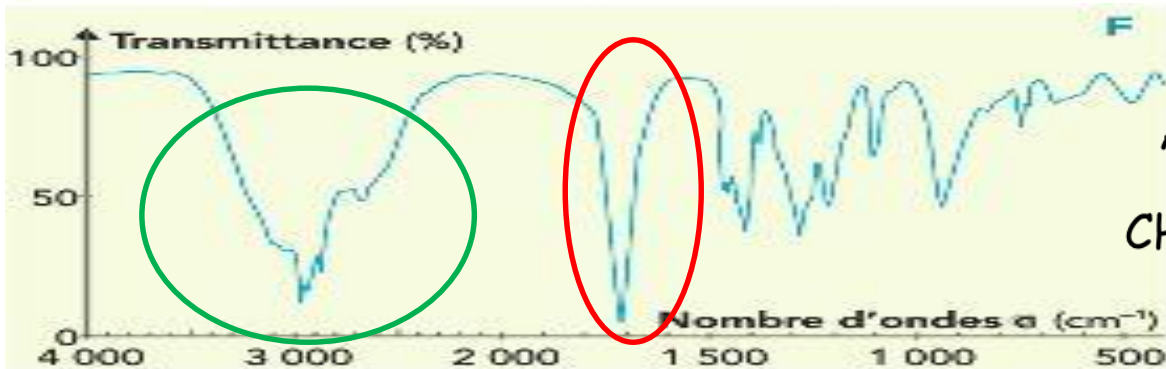
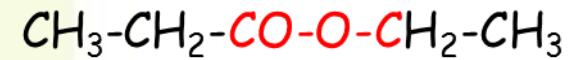
Pentan-3-one



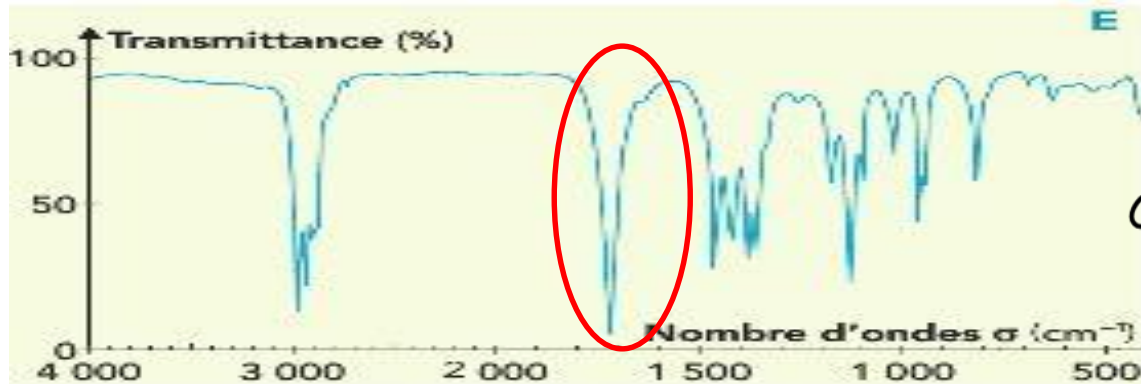
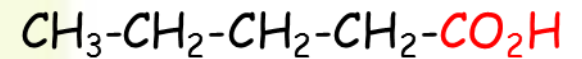
Esters



Propanoate d'éthyle



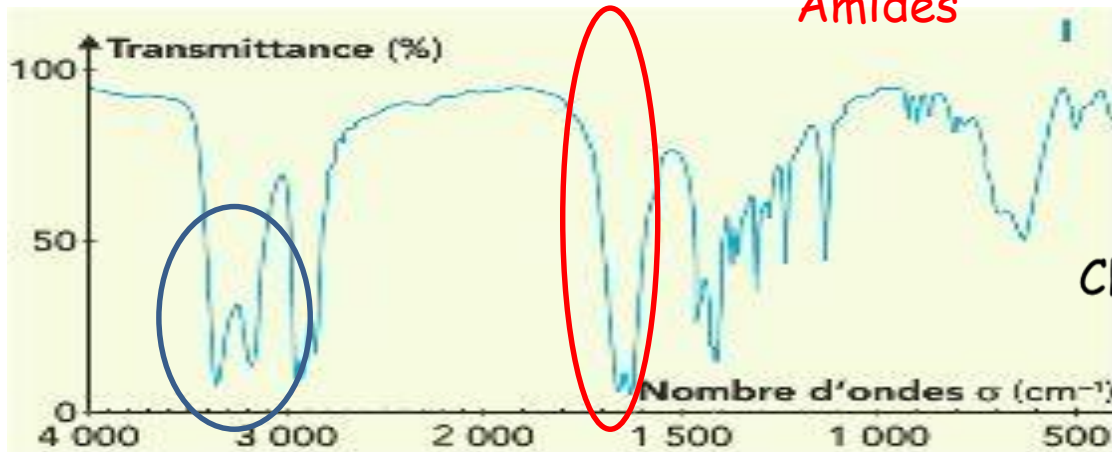
Acide pentanoïque



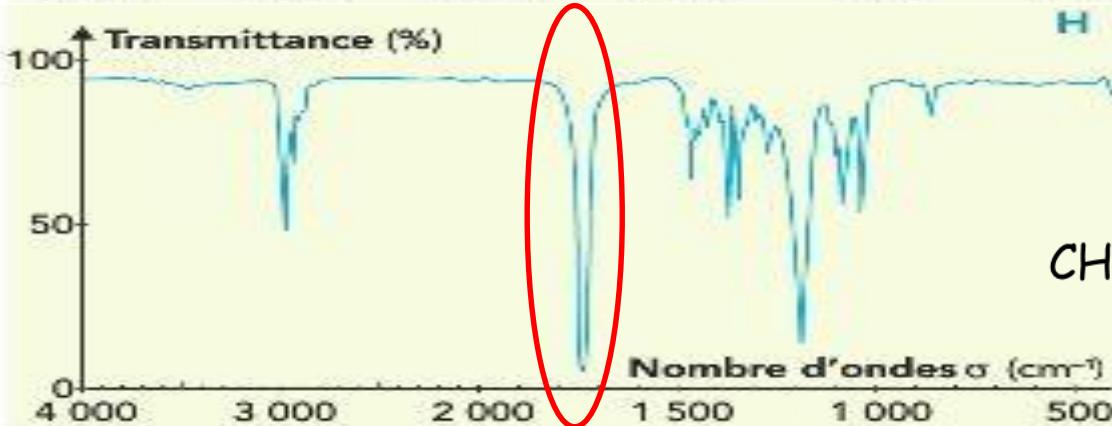
Pentan-3-one



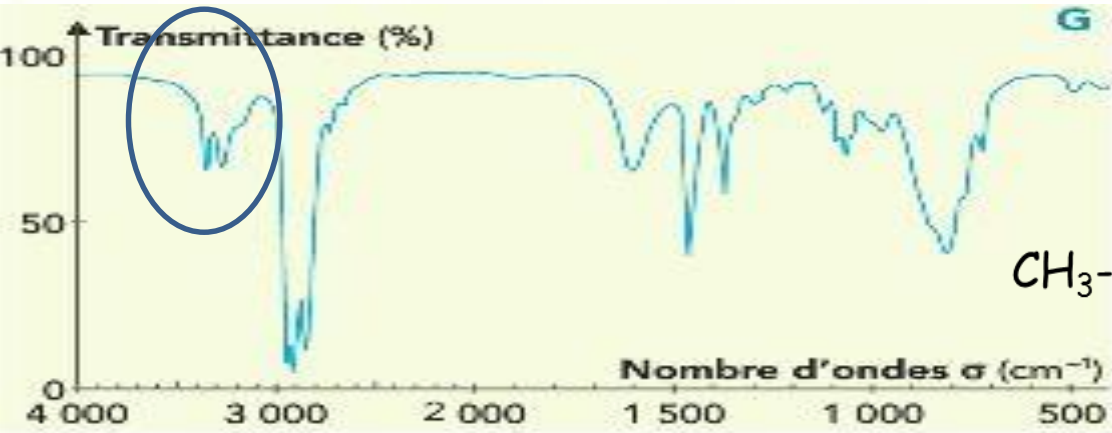
Amides



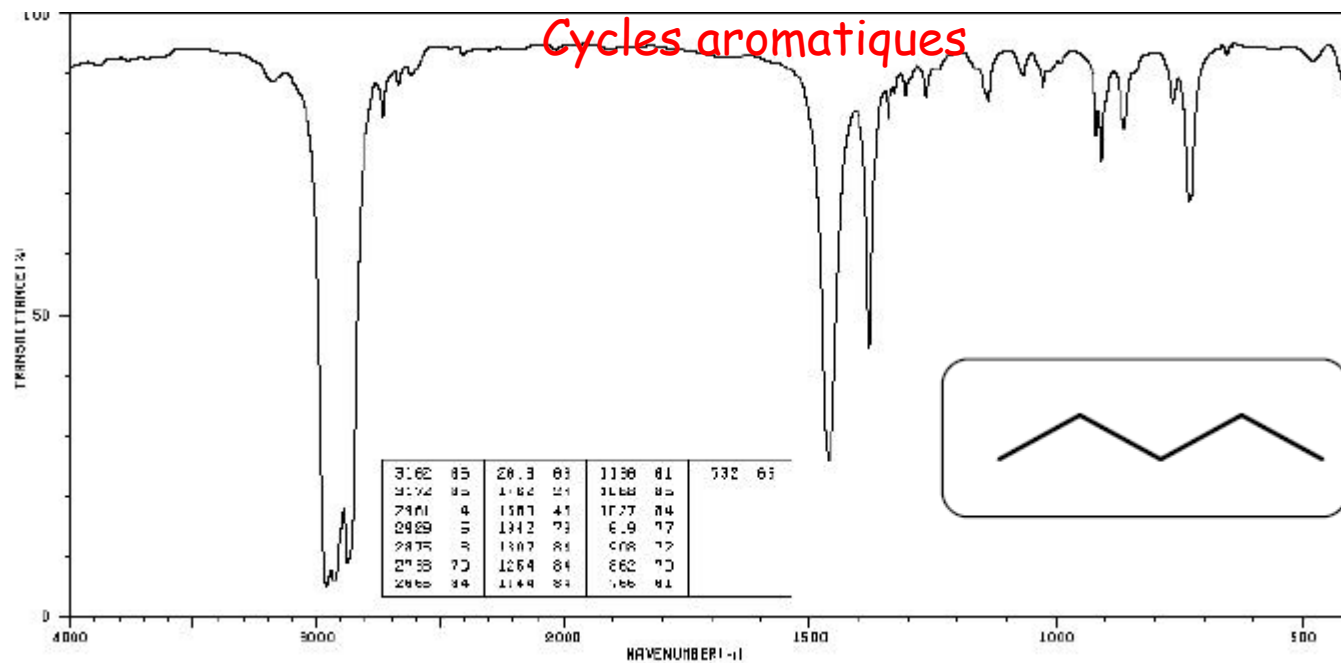
pentanamide
CH3-CH2-CH2-CH2-CO-NH2



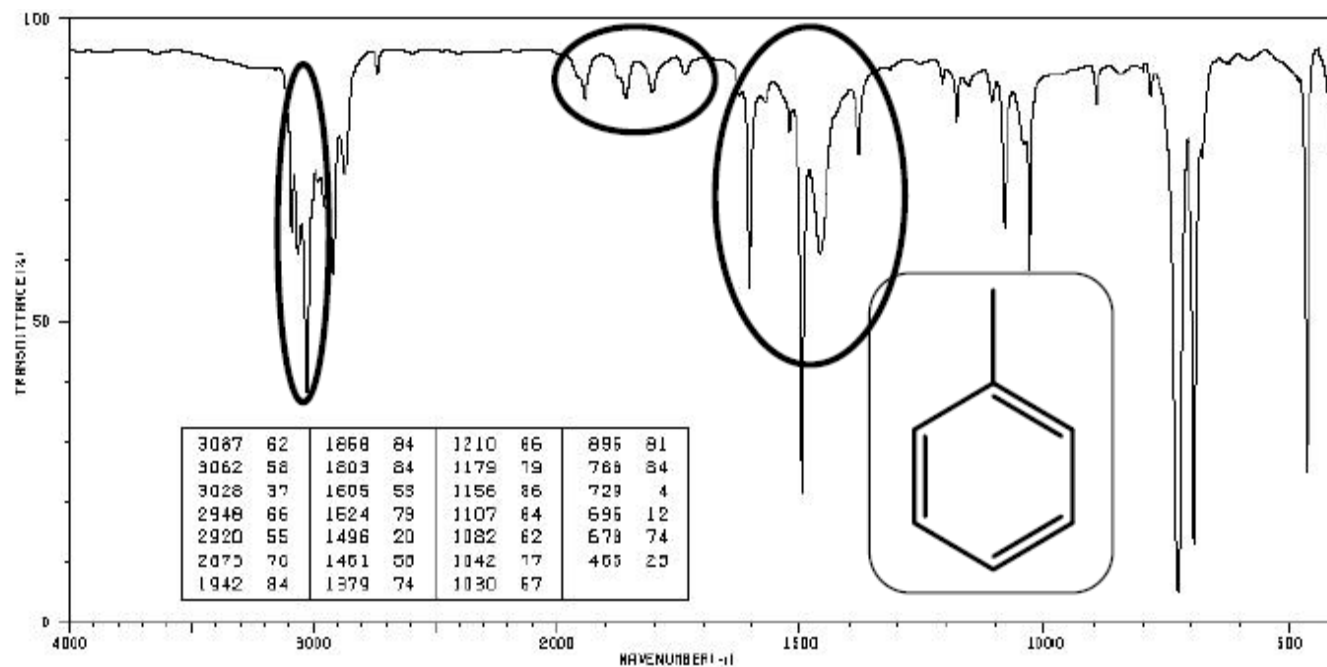
Propanoate d'éthyle
CH3-CH2-CO-O-CH2-CH3



Pentan-1-amine
CH3-CH2-CH2-CH2-CH2-NH2



pentane

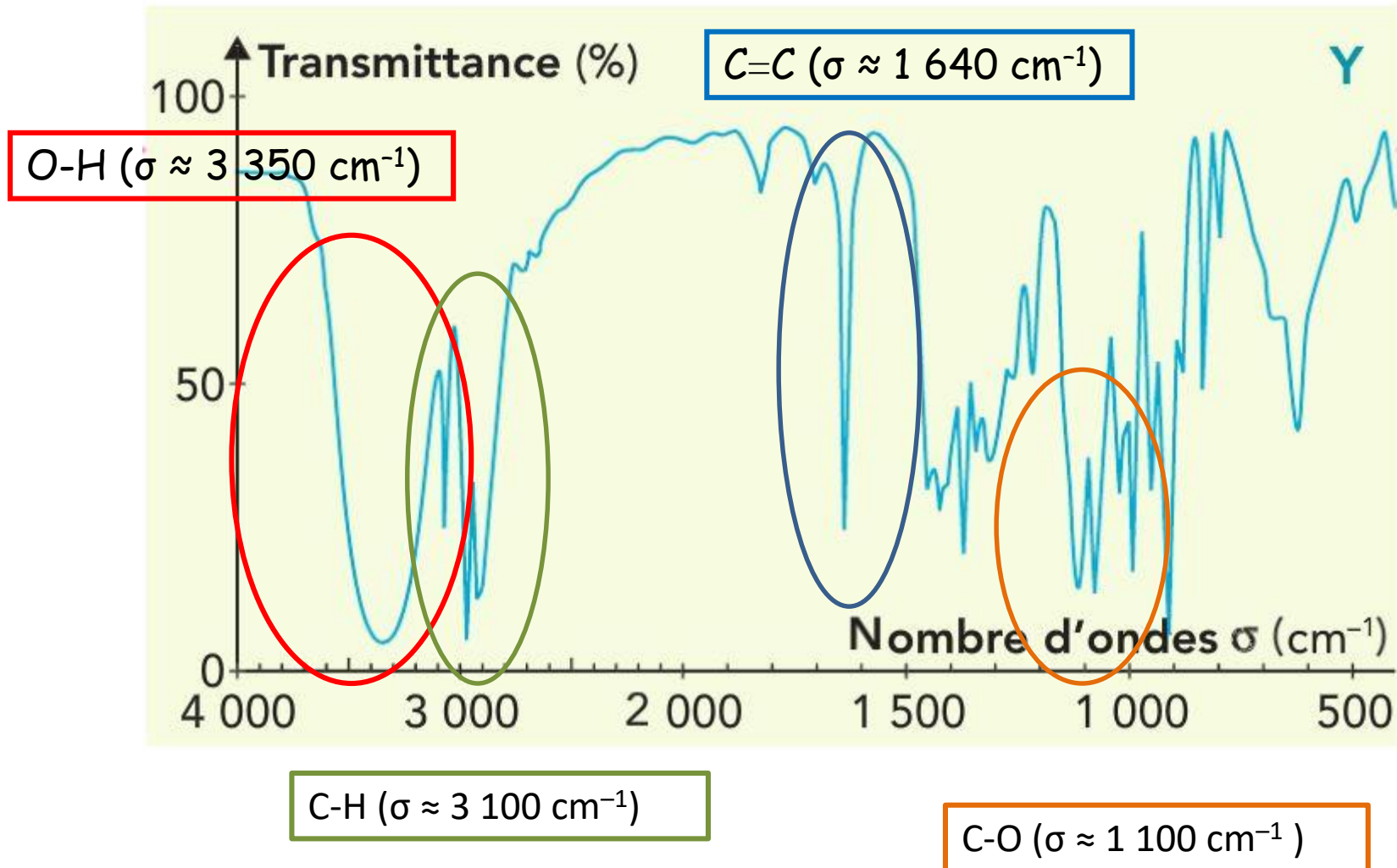


Toluène

Nombre d'onde (cm^{-1})	Liaison	Nature de la vibration
3000 – 3200	C(tri) – H (aromatique et alcène)	élongation
2700 – 2800	C – H (aldéhyde)	élongation
1700 – 2000	Harmoniques des vibrations du cycle aromatique	
1677	C = O (carbonyle) abaissé car conjugué	élongation
1627	C = C (alcène)	élongation
1400 – 1600	C = C (aromatique)	élongation

Identification d'un composé

la molécule M, soit le pent-4-èn-2-ol.



Les spectres IR ci-dessous sont ceux de l'éthanoate de méthyle et de la benzamide
 Retrouvez-les en justifiant.

