

# **Spectrométrie Infrarouge-IR**

# 1. GENERALITES

## 1.1. Le rayonnement électromagnétique

Le rayonnement électromagnétique est constitué de photons dont l'énergie (E) répond à l'équation :

$$E = h.\nu$$

E = énergie (Joule)

h = constante de Planck =  $6.625 \times 10^{-34}$  J.s

$\nu$  = fréquence du rayonnement (Hz,  $s^{-1}$ )

Pour un rayonnement électromagnétique :  $\nu = \frac{C}{\lambda}$

C = vitesse du rayonnement dans le vide soit environ  $3.108 \text{ m.s}^{-1}$

$\lambda$  = longueur d'onde du rayonnement (m)

L'inverse de la longueur d'onde est défini comme étant le nombre d'onde  $\left(\bar{\nu}\right)$  :  $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$

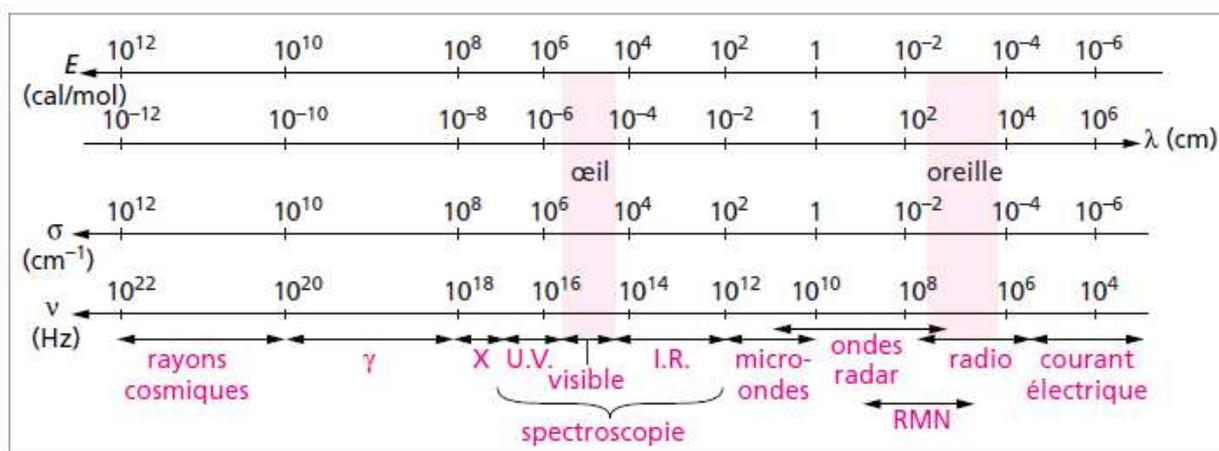
Dans ces conditions :

$$E = h.\nu \leftrightarrow E = h.\frac{C}{\lambda} \leftrightarrow E = h.c.\bar{\nu}$$

Selon le niveau énergétique du rayonnement, on distinguera plusieurs types de rayonnement

Types de rayonnement	Longueur d'onde
Rayons $\gamma$	< 1 pm
Rayons X	1 pm – 1 nm
Rayons ultraviolet (UV)	185 nm – 400 nm
Rayons visibles	400 nm – 700 nm
Rayons infrarouges (IR) très proche	700 nm – 1100 nm
Rayons infrarouges (IR) proches	1,1 $\mu\text{m}$ – 2,5 $\mu\text{m}$
Rayons infrarouges (IR) moyen	2,5 $\mu\text{m}$ – 50 $\mu\text{m}$
Micro-ondes	25 $\mu\text{m}$ – 1 mm
Ondes radios	> 1 mm

La région visible du spectre s'étend donc de 400 nm à 800 nm, soit du violet au rouge. Dans le domaine de la chimie analytique, le rayonnement visible, UV et IR seront utilisés pour identifier, caractériser et doser différentes molécules.



## 1.2. Absorption d'un rayonnement

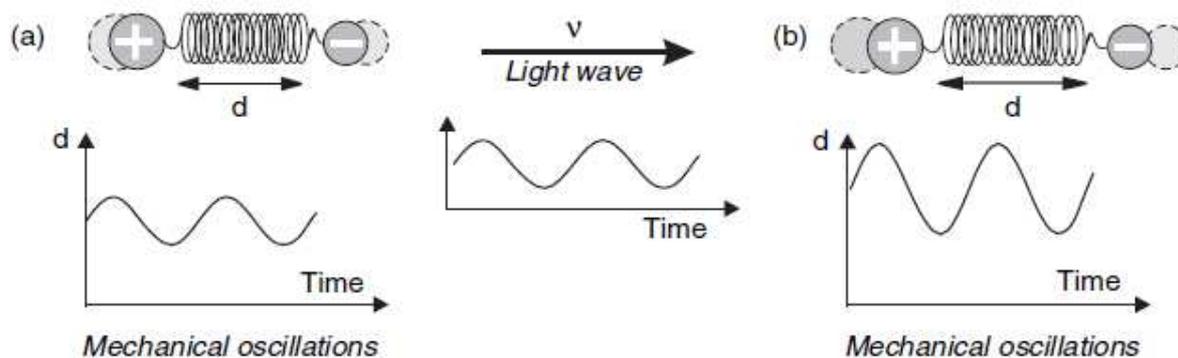
Lorsque un rayonnement entre en contact avec de la matière, une partie de son énergie est absorbée par cette matière. La molécule, l'ion ou l'atome passe alors de l'état fondamental à un niveau énergétique plus élevé, appelé état excité.

Après une période très courte ( $10^{-6}$  –  $10^{-9}$  s) ou plus longue (phénomène de phosphorescence), l'espèce excitée retourne à son état fondamental en restituant son énergie à son environnement sous forme de rayonnement et/ou de chaleur : c'est la relaxation.

## 2. Spectrométrie Infrarouge

### 2.1. Absorption lumineuse dans l'infrarouge

Dans le proche et le moyen infrarouge, l'absorption de la lumière par la matière a pour origine l'interaction entre les radiations de la source lumineuse et les liaisons chimiques. Plus précisément, on sait que les atomes situés aux deux extrémités d'une liaison sont animés d'un mouvement de vibration l'un par rapport à l'autre et que s'ils sont différents, ils forment un dipôle électrique oscillant à cette même fréquence. Si on irradie une telle liaison non symétrique par une source lumineuse monochromatique dont la fréquence est la même que la fréquence de vibration, il va naître une interaction avec le dipôle électrique de la liaison. Autrement dit la composante électrique de l'onde pourra transmettre son énergie à la liaison à condition qu'il y ait accord entre sa fréquence mécanique de vibration et la fréquence électromagnétique de la radiation (fig. 1).



**Figure.1** : Interprétation « mécanique » de l'interaction d'une onde lumineuse avec une liaison polarisée. La fréquence mécanique de l'onde n'est pas changée par absorption du photon, seule son amplitude croît.

Cette approche simplifiée explique qu'en l'absence de dipôle permanent, ce qui est le cas des molécules telles O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, aux liaisons non polaires, il n'y ait pas couplage avec l'onde électromagnétique et qu'aucune absorption d'énergie ne se produise. Ces liaisons sont dites « transparentes » dans le moyen infrarouge.

## 2.2. Bandes de vibration-rotation dans l'infrarouge

Excepté à la température de zéro Kelvin, les atomes des molécules sont en perpétuel mouvement. Chacun d'eux a trois degrés de liberté si l'on se réfère aux trois coordonnées cartésiennes classiques. Tous ces mouvements confèrent à chaque molécule isolée une énergie mécanique totale. La théorie pose comme postulat qu'elle résulte de la réunion de termes quantifiés indépendants nommés énergie de rotation  $E_{Rot}$ , énergie de vibration  $E_{Vib}$  et énergie électronique moléculaire  $E_{Elec}$  :

$$E_{Tot} = E_{Rot} + E_{Vib} + E_{Elec}$$

Selon l'hypothèse de Born-Oppenheimer. Les valeurs de ces énergies sont très différentes entre elles peuvent varier indépendamment les unes des autres.

Dans le moyen infrarouge, une source émettant une radiation de  $1\,000\text{ cm}^{-1}$  correspond à des photons dont l'énergie est  $E = h.c.\bar{\nu} = 0.125\text{ eV}$ . Si un tel photon est absorbé par une

molécule, son énergie totale sera augmentée de cette valeur. La théorie montre que le terme  $E_{vib}$ . Sera modifié mais que le terme  $E_{Elec}$  ne sera pas perturbé.

### 2.3. Modèle simplifié de la vibration de valence

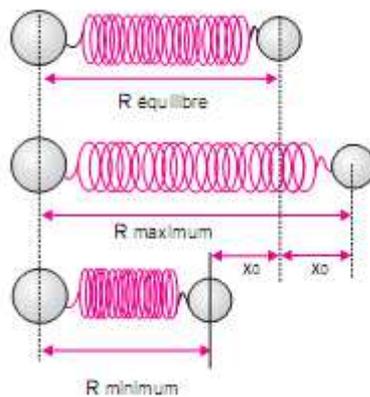
Pour modéliser les vibrations des liaisons, on se réfère à l'oscillateur harmonique, ensemble formé par deux masses pouvant glisser sans frottement sur un plan et réunies par un ressort.

Le modèle de la liaison vibrationnelle entre deux atomes peut être comparé au comportement d'un ressort obéissant à la **loi de Hooke**. Dans ce cas, on parlera de « vibration d'élongation » ou de « vibration de valence ».

Lorsque l'on écarte deux masses ( $m_1$  et  $m_2$ ) d'une distance ( $x_0$ ) par rapport à la distance d'équilibre  $R_e$  (fig 3), et qu'on relâche le système, celui-ci se met à osciller avec une période qui dépend de la constante de raideur du ressort  $k$  ( $N \cdot m^{-1}$ ) et des masses en présence. La fréquence

approchée est donnée par la loi de Hooke dans laquelle  $\mu$ (kg) représente la masse réduite du système.

$$v_{vib} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{avec :} \quad \mu = \frac{m_1 \times m_2}{m_1 + m_2}$$



**Figure 3** : Une molécule diatomique représentée sous la forme d'un oscillateur harmonique.

L'énergie mécanique de vibration de ce modèle simple  $E_{vib}$ , peut varier de manière continue. Après une élongation  $\Delta x_0$  faible (mais quelconque), par rapport à la distance d'équilibre  $R_e$ , elle vaut :

$$E_{vib} = \frac{1}{2} k \Delta x_0^2$$

Dans le cas d'une liaison entre deux atomes :  $\bar{\nu} [cm^{-1}] = \frac{1}{2\pi \cdot c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

Avec :  $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$

$m_1, m_2$  = masse atomique de chaque atome.

$k$  = constante de rappel ( $N \cdot m^{-1}$ ).

$c$  = vitesse de la lumière ( $3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

## 2.4. Énergie de vibration de l'oscillateur harmonique

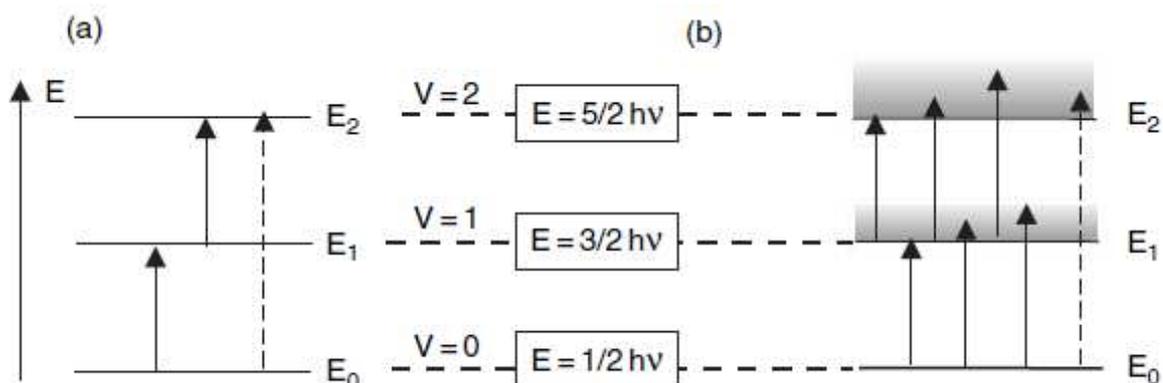
Le modèle l'oscillateur harmonique précédent est applicable à la liaison chimique qui relie deux atomes, à condition de faire intervenir l'aspect quantique qui régit les espèces aux dimensions atomiques. Une liaison, dont la fréquence de vibration est ( $\nu$ ), pourra absorber une radiation lumineuse à condition que sa fréquence soit identique. Son énergie s'accroîtra du quantum  $\Delta E = h\nu$ .

Selon cette théorie, l'expression simplifiée ci-dessous donne les valeurs possibles de  $E_{\text{vib}}$  :

$$E_{\text{vib}} = h\nu(n + \frac{1}{2})$$

$n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , est appelé nombre quantique de vibration. Il ne peut varier que d'une unité ( $\Delta n = \pm 1$ , transition dite de simple quantum).

À température ordinaire, les molécules sont encore dans l'état non excité  $n = 0$ , soit  $E_{(\text{vib})0} = 1/2 h\nu$  (énergie à 0 Kelvin) (fig. 4). À côté de la transition ordinaire  $\Delta n = +1$ , celle correspondant à  $\Delta n = +2$ , « interdite » par cette théorie, apparaît faiblement lorsque la bande d'absorption fondamentale est particulièrement intense (cas de la vibration d'élongation de la liaison C=O des cétones ou aldéhydes, par exemple).



**Figure 4** : Diagramme des énergies de vibration de l'oscillateur harmonique.

**Interprétation du diagramme des énergies de vibration :**

Pour des molécules isolées (a) et pour des molécules en phase condensée (b). La transition  $n = 0$  à  $n = 2$  correspond à une bande harmonique de faible intensité. Compte tenu des énergies des photons dans le moyen infrarouge, on peut compter que le premier état excité ( $n = 1$ ) est  $10^6$  fois moins peuplé que l'état fondamental. Les transitions harmoniques sont exploitées dans le proche infrarouge.

• **Situation réelle des molécules et potentiel de Morse :**

La forme de l'énergie potentielle d'une molécule diatomique n'est pas rigoureusement parabolique mais suit la fonction de Morse :  $E(r) = D_e (1 - e^{\beta(r-r_0)})^2$

$\beta$ : constante qui dépend de la molécule.

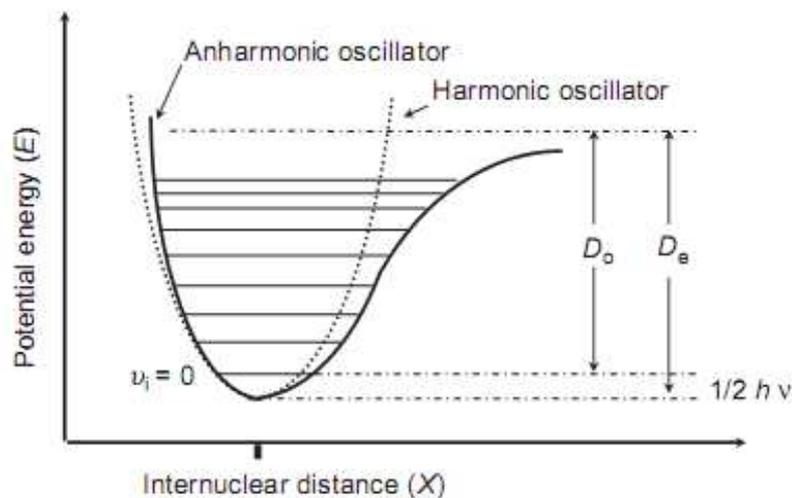
La résolution de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur anharmonique préalablement défini par la fonction de Morse aboutit à :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu - (n + \frac{1}{2})^2 h\nu X_e$$

$(n + \frac{1}{2})h\nu$  : Energie de l'oscillateur harmonique

$X_e = \frac{h\nu}{4D_e}$  : Constante d'anharmonicité

$D_0, D_e$  : Energie de rupture de liaison (oscillateur harmonique et anharmonique)



**Figure 5 :** diagramme comparatif de l'énergie potentiel des oscillateurs : Harmonique et Anharmonique.

## 2.5. Influences de divers facteurs sur les fréquences de vibrations

On se limite à la discussion de quelques facteurs concernant les bandes d'élongations, pour lesquelles une analyse peut être menée à partir de la loi de **Hooke**.

### a) influence de la constante de rappel $k$ :

Cette constante est liée au nombre des liaisons établies entre les deux atomes impliqués, mais aussi à la longueur de la liaison.

- **Liaisons multiples** : la constante de rappel est sensiblement proportionnelle au nombre des liaisons. La fréquence de vibration est proportionnelle à la constante de force  $k$ , plus la liaison qui vibre est une liaison forte plus le nombre d'onde sera grand. Les constantes de raideurs des liaisons sont donc de quelques centaines de N/m, ce qui est finalement un ordre de grandeurs macroscopique.

Liaison			
$K (10^{31} \text{ N.m}^{-1})$	9,410 - 10,899	5,600 - 6,022	2,582 - 3,388
$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1})$	2100 - 2260	1620 - 1680	1100 - 1260

- **Longueur de la liaison** : la force d'attraction, et donc de liaison, est d'autant plus grande que la distance entre les centres des atomes est plus faible.

Liaison			
$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1})$	3300	3100	2900
Longueur ( $\text{Å}^\circ$ )	1,08	1,10	1,12
Type de liaison	sp-s	sp <sup>2</sup> -s	sp <sup>3</sup> -s
$k (\text{N.m}^{-1})$	593	523	458

### b) Influence de la masse réduite :

Le nombre d'onde de la vibration de valence diminue avec l'augmentation de la masse des atomes impliqués dans la liaison. Ainsi, les liaisons impliquant des atomes de brome ou d'iode ont un nombre d'onde trop faible pour être mesuré avec les appareils conventionnels.

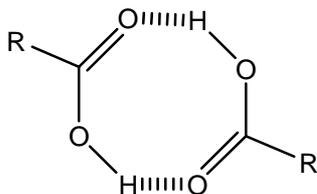
Liaison	$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1})$	$m_2$	$\mu(\text{g})$
C-H	2800 – 3300	1	0,923

C-C	1200	12	6,00
C-O	1050 – 1300	16	6,857
C-Cl	600 – 800	35,5	8,968
C-Br	550 – 650	80	10,43
C-I	500 – 600	127	10,96

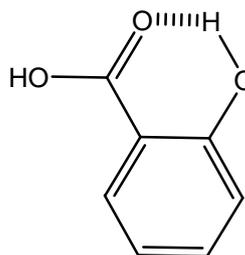
### c) Influence de l'environnement:

Il résulte de ce qui précède que tout ce qui tend à diminuer la force des liaisons, ou à allonger celles-ci, entraîne un déplacement du nombre d'ondes vers les faibles valeurs.

**Liaison hydrogène :** La liaison hydrogène réalisée entre un hydroxyle et un carbonyle, comme par exemple dans un groupement acide carboxylique entraîne un déplacement de la vibration de  $\text{-OH}$  à des nombres d'ondes de l'ordre de  $3000\text{cm}^{-1}$  ou même moins. Les liaisons hydrogène quelle soient intermoléculaire ou intramoléculaire abaissent la fréquence des vibrations d'élongation  $\text{-OH}$ . Elle élargit considérablement la bande d'absorption

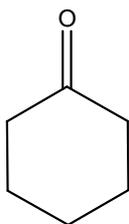


Liaison hydrogène intermoléculaire

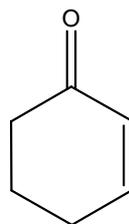


Liaison hydrogène intramoléculaire

**Conjugaison :** La conjugaison de liaison, éthyléniques par exemple, entraîne une délocalisation des électrons  $\Pi$ . La force de rappel est donc affaiblie par rapport à une double liaison, et augmentée par rapport à une simple liaison. L'exemple le plus important à citer dans ce domaine, est celui des vibrations de liaisons carbonylées. La délocalisation d'une double liaison diminue sa constante de force donc abaisse sa fréquence de vibration. Pour un carbonyle conjugué,  $\nu_{\text{C=O}}$  est abaissée de 15 à  $40\text{cm}^{-1}$ .



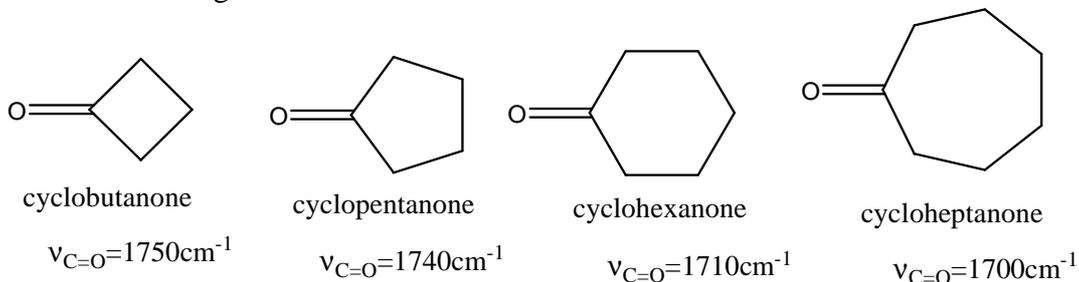
cyclohexanone  
 $\nu_{\text{C=O}}=1710\text{cm}^{-1}$



cyclohex-2-enone  
 $\nu_{\text{C=O}}=1680\text{cm}^{-1}$

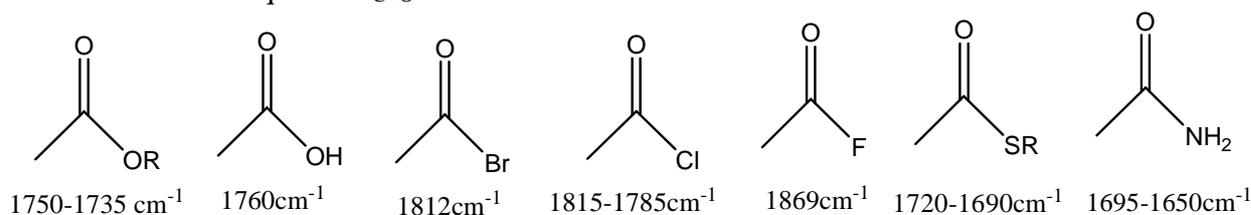
#### d) Influence de la tension cyclique :

Lorsque l'oscillateur est lié à une structure tendue stériquement, sa fréquence de vibration est augmentée. Ainsi, la fréquence de vibration du groupement carbonyle d'une cétone cyclique augmente quand la taille du cycle diminue. La fréquence de vibration est inversement proportionnelle à l'angle.



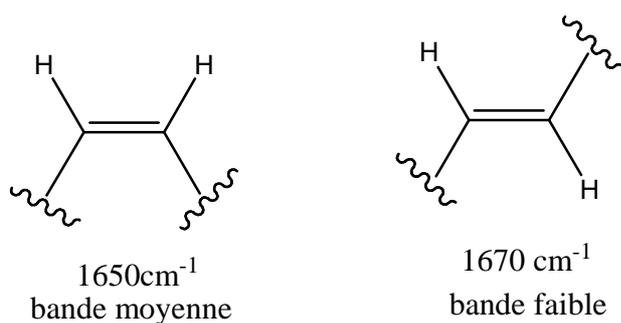
#### e) Les effets inductifs et mésomères :

Prenons le cas d'une fonction carbonyle. La vibration de valence  $\nu_{C=O}$  pour une cétone aliphatique se situe vers  $1715\text{ cm}^{-1}$ . Les effets inductifs attracteurs ont tendance à augmenter cette fréquence. Par contre, les effets mésomères induisant une résonance entraînent une diminution de la fréquence  $\nu_{C=O}$ .



#### f) Les isomères :

La spectrométrie IR permet de différencier les isomères cis et trans des oléfines en exemple.



### 2.6 Type de vibrations dans les composés organiques

On peut modéliser la molécule comme un ensemble d'oscillateurs liés les uns aux autres, donc couplés mécaniquement. L'excitation par l'infrarouge d'un des oscillateurs se traduit donc a priori par l'excitation simultanée de tous les oscillateurs, aussi bien en élévation qu'en déformation. Tous les atomes de la molécule vibrent donc avec une même fréquence  $\nu$  autour de leur position d'équilibre. Chacune de ces vibrations d'ensemble de la molécule est appelée **mode normal de vibration**.

On peut dénombrer les modes normaux de vibration du système :

La molécule possède  $N$  atomes, elle a donc  $3N$  degrés de liberté, 3 correspondent à la translation de la molécule et 3 à sa rotation autour de son centre d'inertie. Il reste  $3N - 6$  degrés de liberté correspondant aux vibrations de la molécule. Il y a donc  $3N - 6$  modes de vibrations normaux soit  $3N - 6$  fréquences de vibration possibles (au maximum).

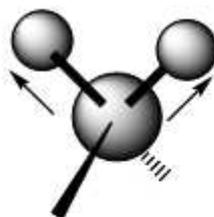
Si la molécule est linéaire, 2 angles suffisent à décrire sa rotation. Il y a donc  $3N - 5$  modes de vibrations normaux.

### Degrés de liberté des molécules poly-atomiques

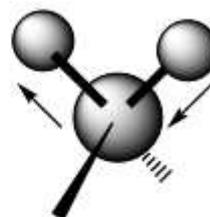
Type	Linéaire	Non-linéaire
Translation	3	3
Rotation	2	3
Vibration	$3N-5$	$3N-6$
Total	$3N$	$3N$

Il existe deux types de vibrations : Les mouvements moléculaires les plus connus sont les vibrations d'élongation (symétrique et asymétrique) et les vibrations de déformation angulaires.

- **Vibrations de valence dans le plan :  $\nu$**

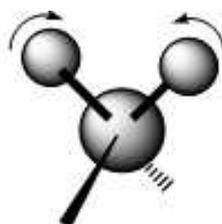


vibration d'élongation  
symétrique  
 $\nu_{\text{sym}}$   
(*stretching*)

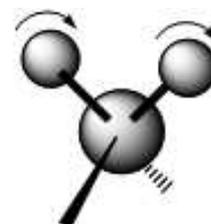


vibration d'élongation  
asymétrique  
 $\nu_{\text{asym}}$   
(*stretching*)

- **Vibrations de déformation dans le plan :  $\delta$**

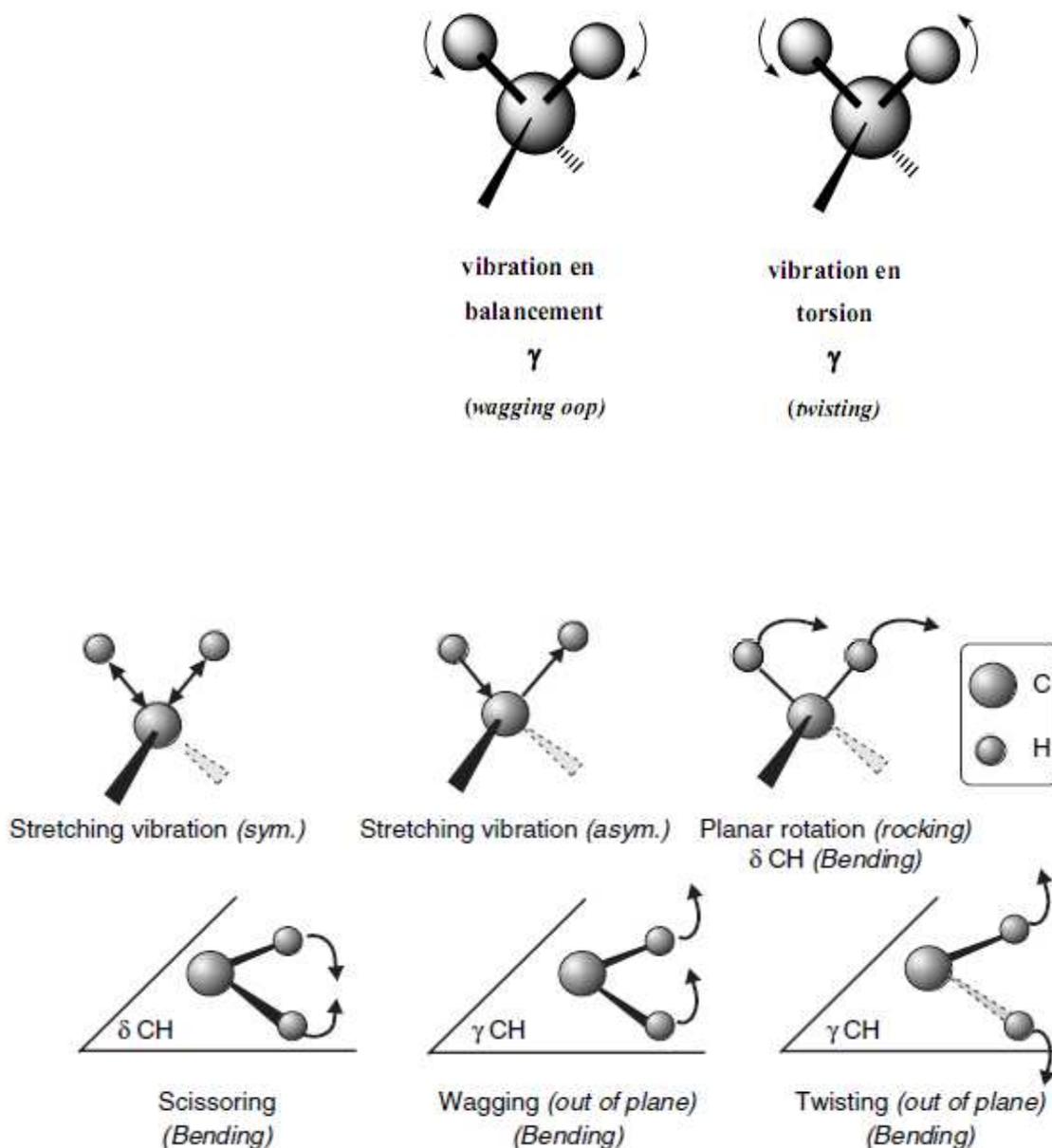


vibration en  
ciseaux  
 $\delta$   
(*scissoring*)



vibration en  
rotation plane  
 $\delta$   
(*rocking*)

- Vibrations de déformation hors du plan :  $\gamma$



**Figure 6** : Vibrations moléculaires du CH<sub>2</sub>. Vibrations caractéristiques d'élongation et de déformation, dans le plan et hors du plan (oop, « out of plane »).

## 2.7. Spectre d'absorption infrarouge

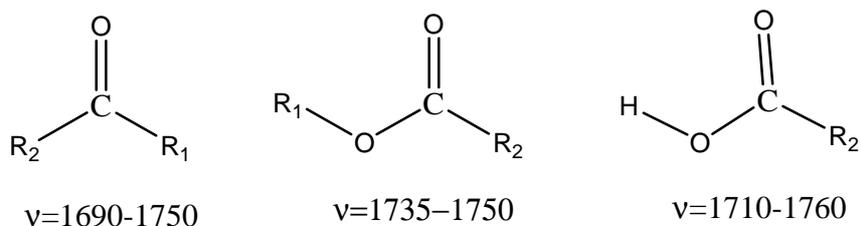
Pour une même liaison, il peut donc y avoir plusieurs types de vibrations. Chaque type de vibration correspond à un nombre d'onde déterminé :

Vibration de la liaison O-H d'un acide carboxylique :

$$\nu = 2500-3000 \text{ cm}^{-1} \quad \delta = 1380-1470 \text{ cm}^{-1} \quad \gamma = 890-940 \text{ cm}^{-1}$$

Selon l'environnement de la liaison considérée, l'énergie vibratoire, donc le nombre d'onde, peut également varier :

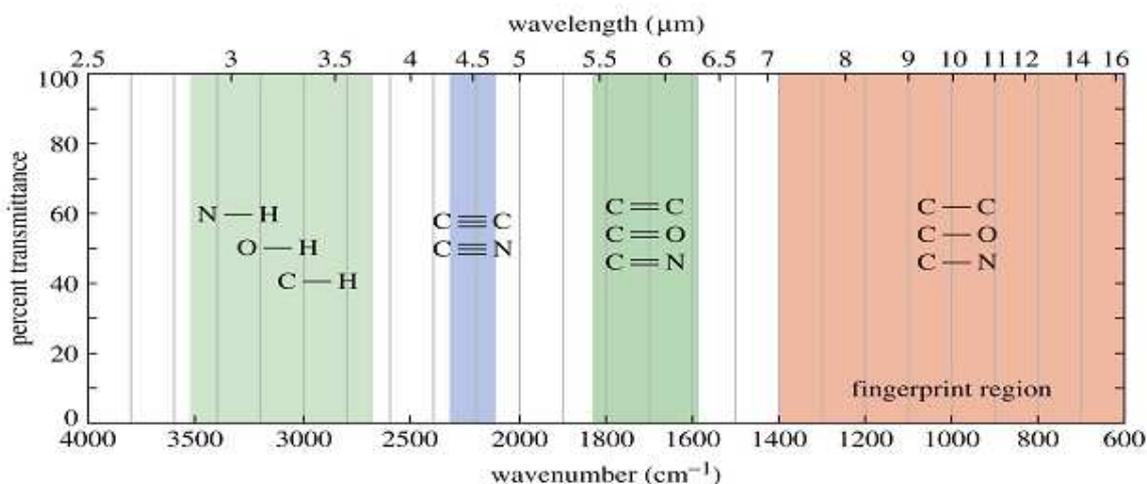
Vibration d'élongation dans le plan de la liaison C=O :



Lorsqu'une molécule est irradiée par une source polychromatique, elle va absorber ce rayonnement à des longueurs d'onde correspondant aux différents types de vibrations des liaisons interatomiques.

En spectrométrie infrarouge, chaque type de liaison au sein d'une molécule sera ainsi caractérisé par un nombre d'onde particulier ( $\nu$ ) exprimé en  $\text{cm}^{-1}$ . Classiquement, le spectre infrarouge d'une molécule organique est enregistré entre 400 et  $4000 \text{ cm}^{-1}$ , ce qui correspond à une longueur d'onde comprise entre 25 et  $2,5 \mu\text{m}$ .

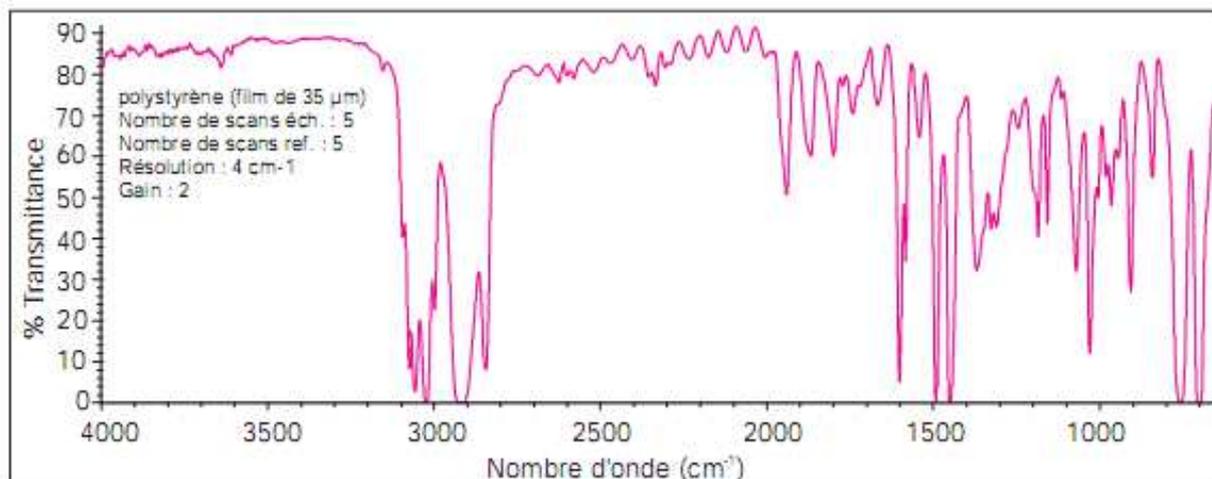
La région  $4000 - 1000 \text{ cm}^{-1}$  est la région des groupes fonctionnels, celle de  $1000 - 600 \text{ cm}^{-1}$  correspond à l'empreinte digitale de la molécule.



Pour chaque nombre d'onde, le spectromètre calcule le rapport de l'intensité transmise avec ou sans échantillon. Ce rapport est appelé « transmittance » (T). Il peut être remplacé par son pourcentage %T ou par l'absorbance (A), sachant que  $A = \log(1/T)$ .

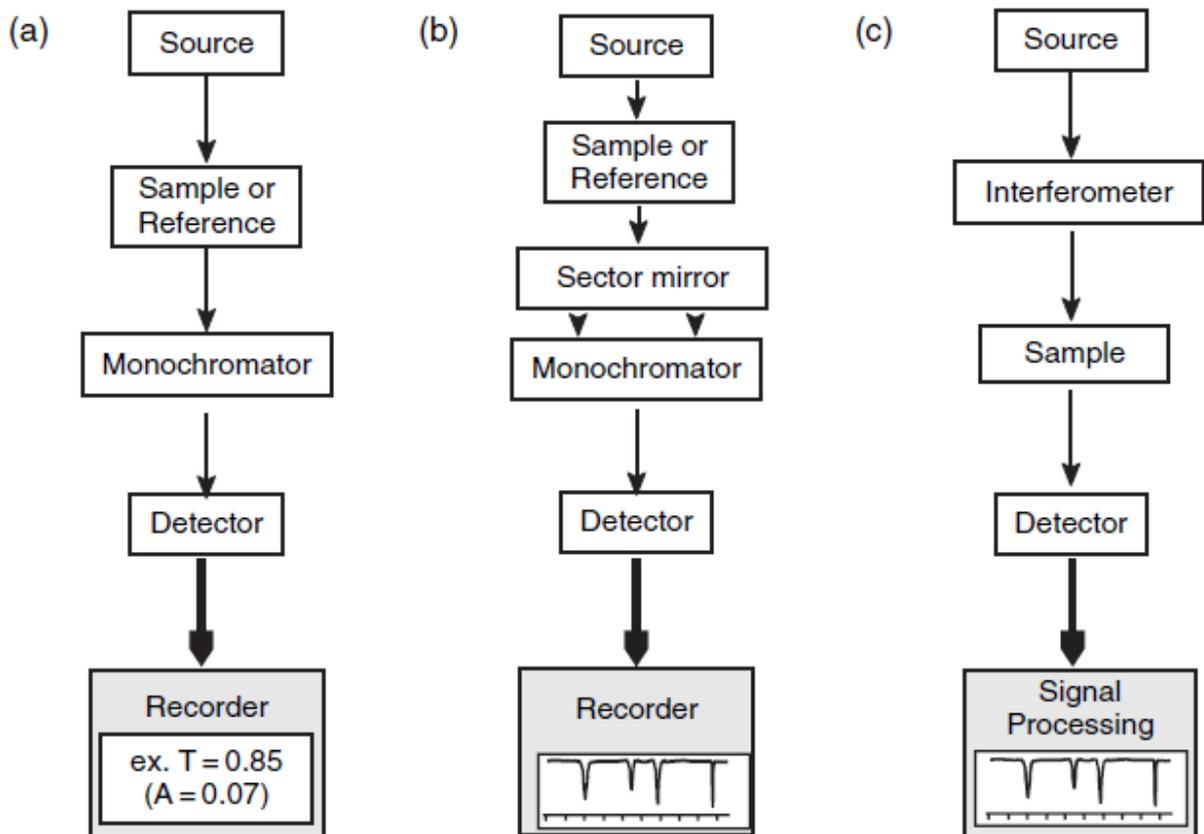
L'analyte est sous forme solide ou liquide, dispersé ou dissous dans une matrice « transparente ». Il y a donc de très nombreuses interactions qui perturbent les niveaux d'énergie, et donc les longueurs d'onde d'absorption qui s'étalent sur plusieurs dizaines de  $\text{cm}^{-1}$ . Le spectre IR d'une molécule organique se présente sous forme de bandes plus ou moins élargies :

Exemple de spectre infrarouge du polystyrène :



## 2.8. Spectromètres et analyseurs infrarouges

Les instruments se répartissent en deux catégories : les spectromètres à transformée de Fourier qui réalisent une analyse simultanée de toute la bande spectrale à partir de mesures interférométriques et les nombreux analyseurs spécialisés. Dans le proche infrarouge on trouve également encore quelques spectromètres de type dispersif.



**Figure 7** : Diagramme des spectromètres et analyseurs dans l'infrarouge.

- a) **Analyseur simple faisceau** : comportant un monochromateur fixe ou un filtre, utilisé lorsqu'une mesure à longueur d'onde unique suffit.
- b) **Spectromètre double faisceau** : de type dispersif. Contrairement aux spectrophotomètres de l'UV/Visible, l'échantillon, placé avant le monochromateur, est soumis en permanence à tout le rayonnement de la source. L'énergie des photons dans ce domaine est insuffisante pour briser les liaisons et, par cela même, dégrader l'échantillon.
- c) **Modèle simple faisceau à transformée de Fourier** : Les spectromètres infrarouges à transformée de Fourier (FTIR) correspondent à un montage optique à simple faisceau qui comporte comme pièce essentielle un interféromètre souvent de type Michelson placé entre la source et l'échantillon.

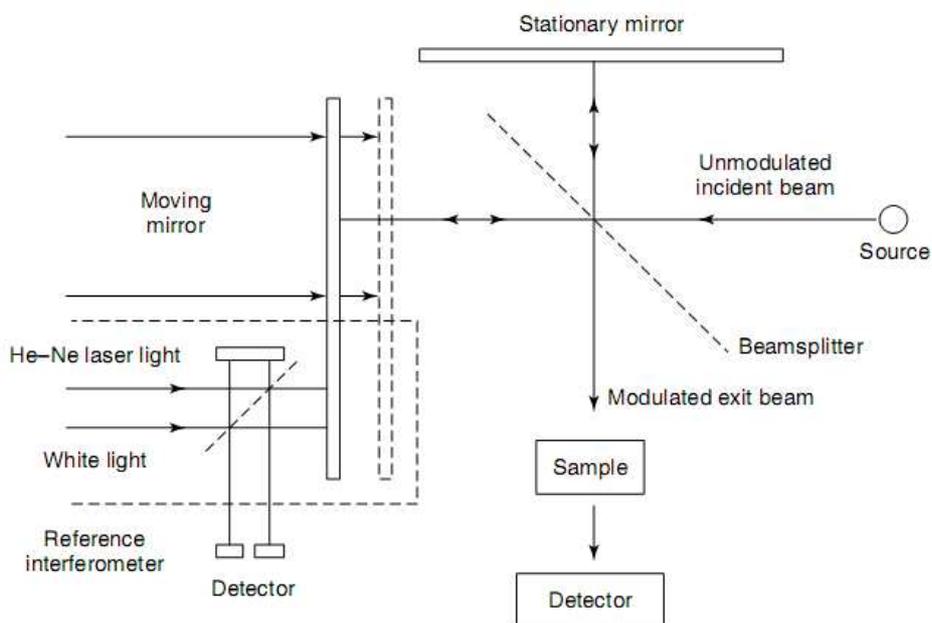
### La source :

La source peut se présenter (i) soit sous la forme d'un filament chauffé à 800°C, (ii) soit d'un filament renfermé dans un tube creux en présence d'un mélange d'oxydes de zirconium, d'yttrium et de thorium (source de Nernst :  $L = 3-4 \text{ cm}$  ;  $\phi = 3 \text{ mm}$ ) chauffé à 1900°C ( $E_{\text{max}} = 7100 \text{ cm}^{-1}$ ), (iii) soit d'un barreau de carbure de silicium (Globar<sup>®</sup>) porté à 1300°C ( $E_{\text{max}} = 5300 \text{ cm}^{-1}$ ). Ces sources sont mises sous une tension de quelques volts et chauffées. Elles émettent un spectre allant du visible à l'infrarouge thermique avec un maximum ( $\lambda_{\text{max}}$ ) correspondant à 3000 K (K = température en Kelvin).



### L'interféromètre de Michelson :

Le rayonnement provenant la source atteint une « séparatrice » (diviseur de faisceau ou beam splitter) semi-transparente constitué de germanium déposé sur une lame de KBr. Le faisceau divisé en deux va frapper respectivement un miroir fixe et un miroir mobile. Les deux faisceaux sont renvoyés vers la séparatrice, combinés, puis viennent frapper l'échantillon.



**Schéma de L'interféromètre de Michelson.**

Lorsque la position du miroir mobile (qui effectue un mouvement de va-et-vient) est telle que le chemin des deux faisceaux à la même longueur, la composition de la lumière sortant de l'interféromètre est la même que celle entrante. Par contre, lorsque cette distance parcourue

est différente ( $\delta$ ), la lumière a une composition variable suite au déphasage : le signal transmis au cours du temps par le détecteur est traduit sous forme d'un « interférogramme ».

## Les matériaux optiques

Anciennement, les spectromètres utilisaient des prismes constitués de NaCl (transparent jusqu'à  $650\text{ cm}^{-1}$ ) ou de KBr (transparent jusqu'à  $400\text{ cm}^{-1}$ ). Le verre est en effet inutilisable. Outre ces éléments (solubles dans l'eau) citons  $\text{CsCl}_2$  (transparent jusqu'à  $200\text{ cm}^{-1}$ ), AgCl, le diamant, le KRS-5 (bromiodure de thallium) et les APTIR, matériaux renfermant du germanium, de l'arsenic et du sélénium comme  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{12}\text{Se}_{55}$  par exemple

## L'échantillon :

La préparation des échantillons solides ou liquide est différente.

- Echantillon solide : l'analyte est broyé et dispersé à une concentration d'environ 1-2% dans du KBr anhydre (200 mg). Le mélange est comprimé à l'aide d'une presse (800 kPa) pour former une pastille translucide. Le KBr doit être exempt d'eau sous peine d'avoir une bande très large située aux environs de  $3300\text{ cm}^{-1}$ . Plus l'échantillon est broyé fin, plus les pertes par diffusion seront limitées.
- Plus rarement, l'échantillon solide est dispersé dans une huile de paraffine (Nujol®) qui présente cependant trois bandes d'absorption où le spectre est alors inexploitable ( $3000$ ,  $1500$  et  $1400\text{ cm}^{-1}$ ). Dans ces conditions, un second spectre est enregistré dans l'hexachlorobutadiène, solvant transparent dans les régions où le Nujol® absorbe.
- Echantillon liquide : l'analyte est placé avec un solvant ( $\text{CHCl}_3$ ) ou du Nujol® dans une microcuvette en quartz (1 mm de trajet optique), ou encore déposé entre deux pastilles de KBr ou de KCl.

## 3. Interprétation de spectres

La spectrométrie infrarouge est essentiellement utilisée pour identifier au sein d'un échantillon des groupements ou des fonctions chimiques. Plus rarement, elle est utilisée pour quantifier un analyte. On utilise [une table](#) donnant les nombres d'ondes des vibrations de valence (vibrations se produisant le long des liaisons) ou de déformation des principales fonctions chimiques.

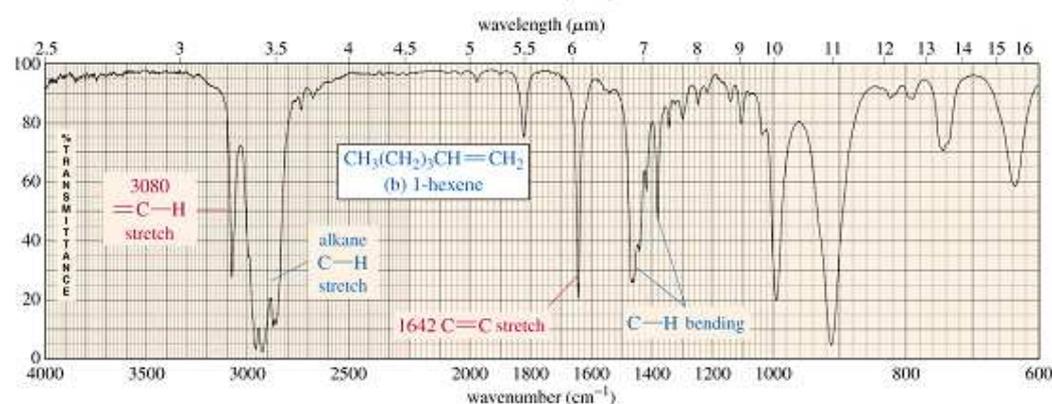
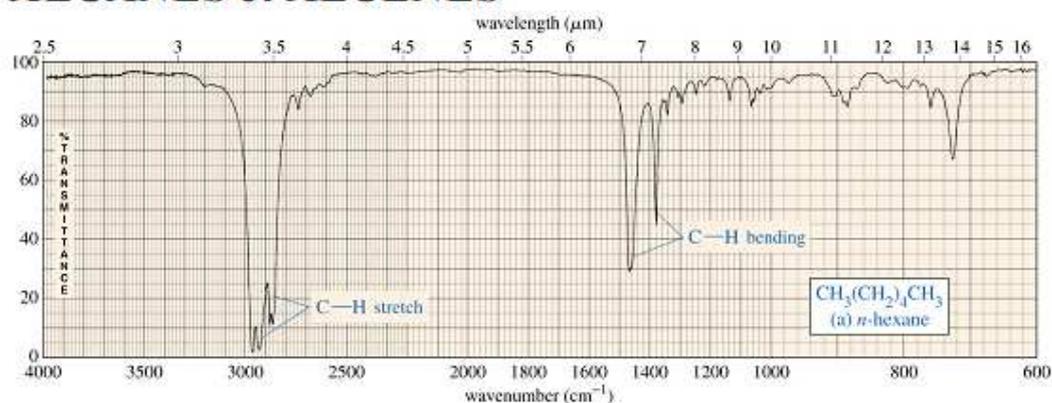
## 4. Méthode d'étude

- On commence d'abord par dépouiller le spectre en partant des hautes fréquences et en notant pour chaque bande semblant caractéristique la fréquence en  $\text{cm}^{-1}$  et l'intensité (TF : très forte ; F : forte ; M : Moyenne à forte ; m : moyenne à faible ; f : faible ; tf : très faible).

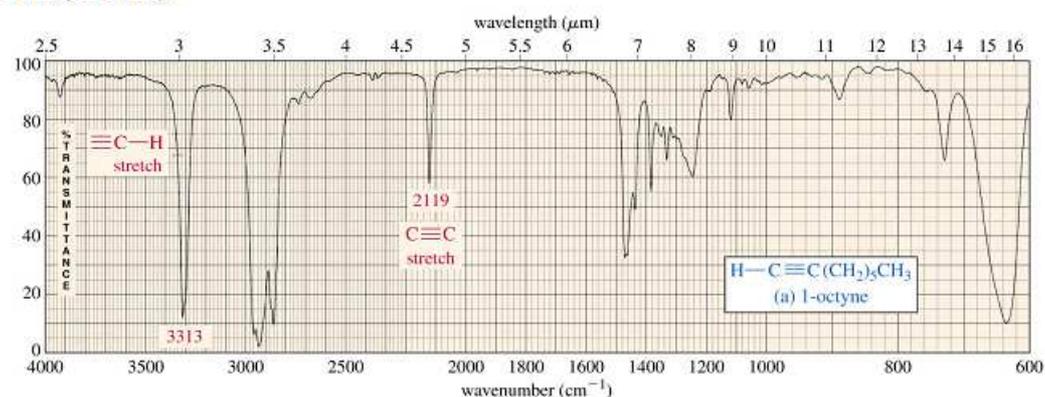
- On prendra garde à ne noter pour la zone inférieure à  $1400\text{cm}^{-1}$  que les bandes ressortant très nettement de l’empreinte digitale.
- La consultation des tables de fréquences caractéristiques et le croisement des résultats permettent à ce stade une attribution probable des bandes et une identification des groupes correspondants.
- On peut ensuite rechercher des renseignements complémentaires dans le reste du spectre et préciser les attributions proposées.

## 1. Spectre infrarouge des principaux groupements fonctionnels

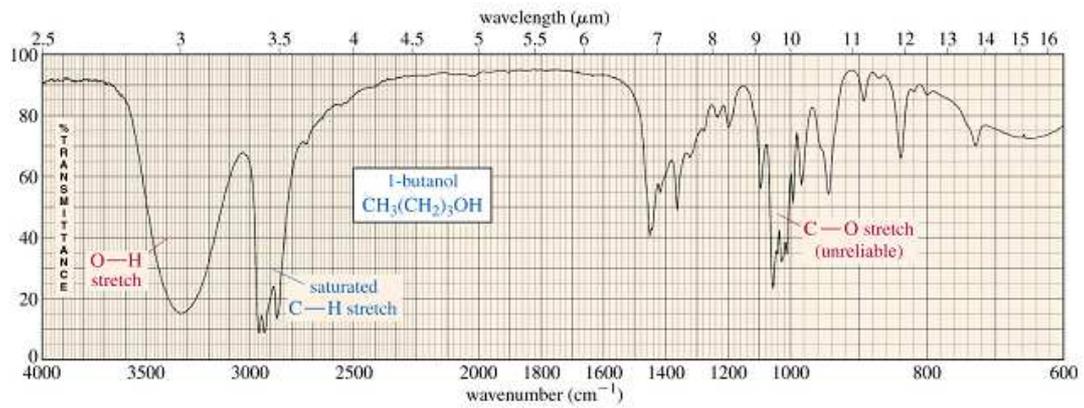
### ALCANES et ALCENES



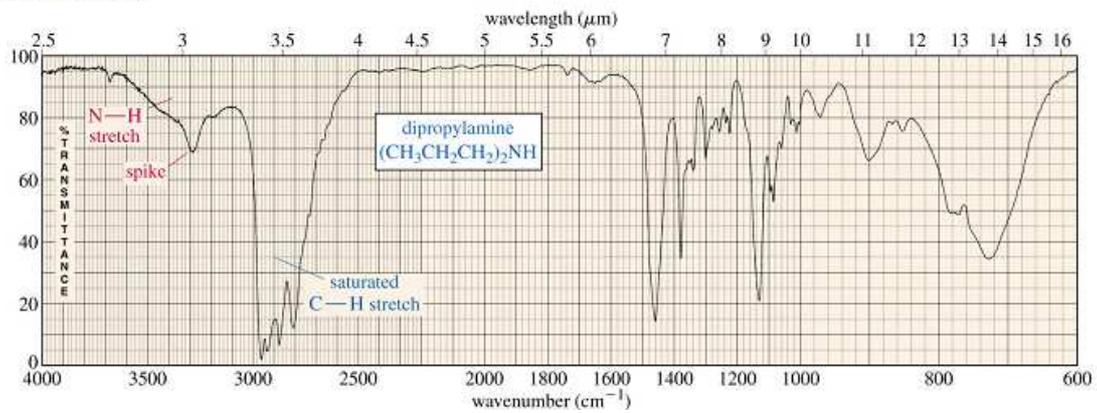
### ALCYNES



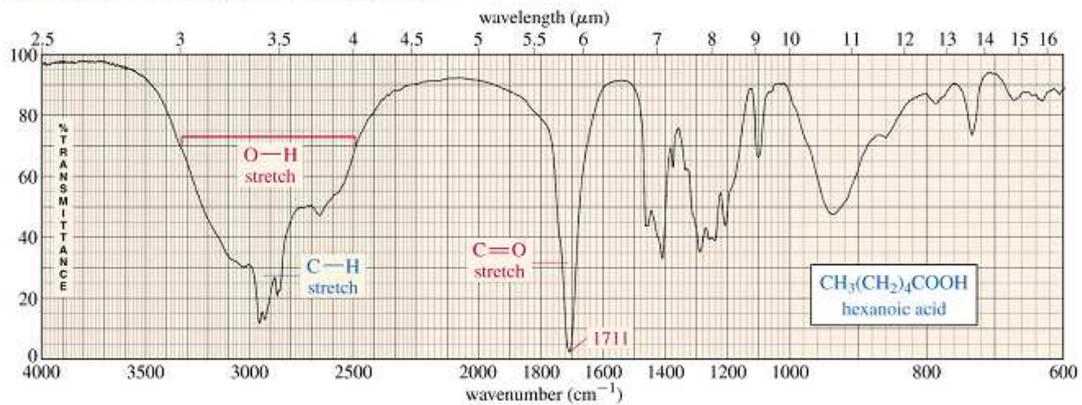
## ALCOOLS



## AMINES



## ACIDES CARBOXYLIQUES



## CETONES et ALDEHYDES

