

Partie 3 - Spectroscopie IR et RMN

I. Spectroscopie IR

1. Principe de la spectroscopie IR

- Lors d'une spectroscopie IR, le rayonnement IR, en traversant la matière, interagit avec les liaisons covalentes de la molécule en les faisant vibrer (vibration d'élongation ou vibration de déformation).
- Ainsi la spectroscopie infrarouge renseigne sur la nature des liaisons covalentes et sur les groupes caractéristiques de la molécule.
- La spectroscopie IR est complétée par la spectroscopie RMN, technique renseignant sur le squelette carboné de la molécule.

Ces deux techniques complémentaires sont utilisées, notamment,

- dans l'industrie pharmaceutique, pour contrôler la pureté des médicaments synthétisés
- dans l'agroalimentaire, pour les contrôles de qualité
- dans la recherche des polluants de l'atmosphère...

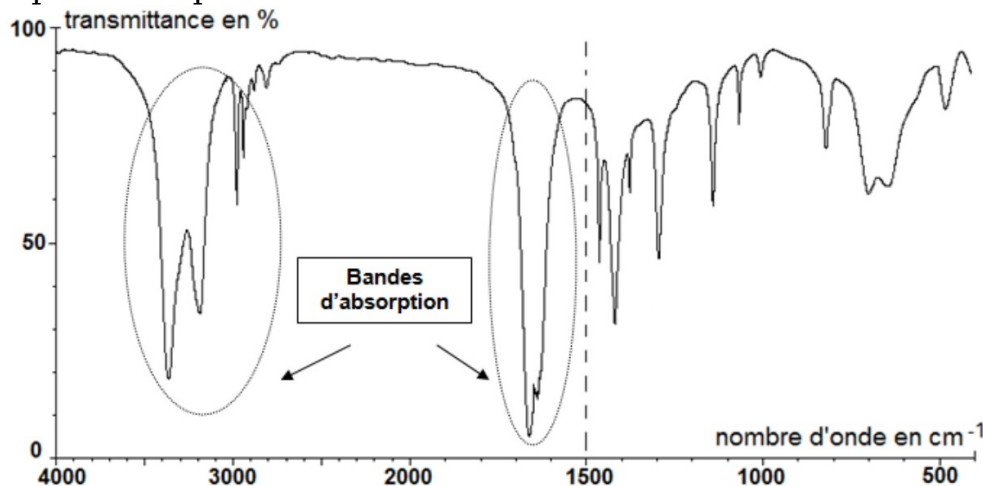
2. Le spectre IR

La transmittance

- Lorsqu'une radiation lumineuse monochromatique de longueur d'onde λ traverse une cuve contenant une espèce chimique une partie du rayonnement est absorbée, et l'autre partie est transmise

- En mesurant l'intensité du rayonnement incident I_0 et l'intensité du rayonnement transmis I , on définit une grandeur notée T et appelée **transmittance** : $T = \frac{I}{I_0}$

Description du spectre



Le spectre IR indique :

- en abscisse : le nombre d'onde en cm^{-1} définit comme étant $\sigma = \frac{1}{\lambda}$

L'axe des abscisses est gradué selon des valeurs décroissantes de σ (donc croissantes de λ) ; la graduation n'est pas régulière

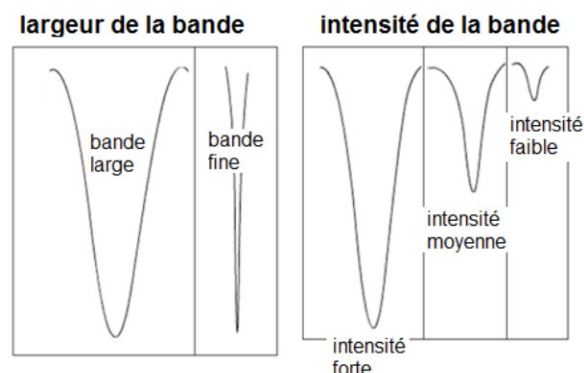
- en ordonnée : la transmittance exprimée en %

On distingue 2 zones principales dans un spectre IR :

(1) **pour les nombres d'onde compris entre 1500 et 4000 cm^{-1}**

Cette zone ne contient qu'un nombre limité de bandes, correspondant à des types de liaisons particuliers. Chaque bande est caractérisée par :

- sa **position** dans le spectre, c'est-à-dire par la valeur du nombre d'onde du minimum de sa transmittance
- sa **largeur** (bande large ou fine)
- son **intensité** (faible, moyenne ou forte)



(2) **pour les nombres d'onde compris entre 400 et 1500 cm^{-1}**

Les bandes d'absorption sont extrêmement nombreuses pour les molécules possédant plusieurs atomes de carbone. Cette zone est appelée **empreinte digitale** de la molécule. Elle est exploitée qu'en comparaison avec un spectre de référence. On ne l'exploitera pas cette année.

3. Exploitation des spectres IR

Voir activité 3 du chapitre

II. Spectroscopie RMN

1. Principe de la spectroscopie RMN

La spectroscopie infrarouge renseigne sur la **nature des liaisons covalentes** et sur les **groupes caractéristiques** de la molécule.

Pour avoir plus d'informations sur la **structure de la chaîne carbonée**, les chimistes utilisent couramment, depuis les années 1960, la spectroscopie de **Résonance Magnétique Nucléaire (RMN)**.

Lors d'une « spectroscopie par RMN », la matière, placée dans un champ magnétique de très forte intensité, est soumise à une onde radio. Les noyaux des atomes d'hydrogène sont alors capables d'absorber l'énergie apportée par l'onde radio électromagnétique.

Une fois que cesse l'action de l'onde radio, les noyaux d'hydrogène restituent l'énergie emmagasinée. Lors de cette restitution, ils émettent des signaux qui dépendent de l'**environnement précis** (magnétique et chimique) des noyaux dans la molécule.

Ces signaux permettent ainsi de connaître la position des noyaux dans l'édifice polyatomique. Cette technique, utilisée aussi bien en laboratoire qu'en industrie, permet la détermination des structures moléculaires.

La grandeur en abscisse d'un spectre de RMN est le déplacement chimique δ dont l'unité est le ppm (partie par million).

Le spectre RMN est constitué de signaux, amas d'un ou plusieurs pics fins de différentes hauteurs

2. Les protons de la molécule organique

Les protons équivalents

Des protons sont dits « équivalents » s'ils ont le même environnement chimique

Les protons voisins

Deux protons sont dits « voisins » s'ils sont portés par des atomes de carbone voisins

Nombres de pics dans un signal

Un proton (ou groupe de protons) possédant n voisins forme un signal de $n+1$ pics

La courbe d'intégration

Sur certains spectres apparaît une courbe en « escalier » : la courbe d'intégration ; elle permet de connaître le nombre de protons qui émettent le même signal

Cette courbe augmente d'une hauteur proportionnelle au nombre de protons associés au signal correspondant

3. Exploitation des spectres RMN

Voir activité 4 du chapitre