

Spectroscopie IR

Groupes caractéristiques	Formule	Fonction	Bandes caractéristiques (cm ⁻¹)
hydroxyle	—OH	alcool	O—H alcool libre : 3 580 – 3 670 O—H alcool lié : 3 200 – 3 400
carbonyle (fin de chaîne)		aldéhyde	C=O : 1 650 – 1 730 C _{ald} —H : 2 750 – 2 900 (deux bandes)
carbonyle (milieu de chaîne)		cétone	C=O : 1 650 – 1 730
carboxyle (fin de chaîne)		acide carboxylique	O—H : 3 200 – 3 400 C=O : 1 680 – 1 710
carboxyle (milieu de chaîne)		ester	C=O : 1 700 – 1 740
amino	ou —NH ₂ —NH—	amine	N—H : 3 100 – 3 500 (souvent deux bandes) et 1 560 – 1 640 (large)
amide	 ou 	amide	N—H : 3 100 – 3 500 et 1 560 – 1 640 C=O : 1 640 – 1 690

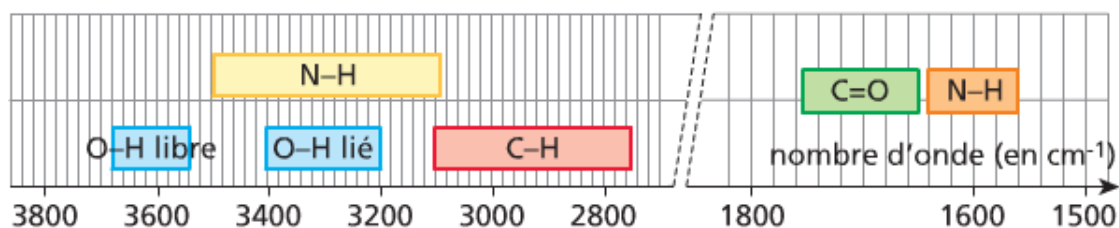
Liaison	—O—H	—N—H 	C _{tri} —H	C _{tét} —H	
σ (cm⁻¹)	3 200 à 3 650	3 100 à 3 500	3 000 à 3 100	2 800 à 3 000	1 650 à 1 750
Liaison		C _{tét} —H	—C—C— 	—C—O— 	
σ (cm⁻¹)	1 625 à 1 685	1 415 à 1 470	1 000 à 1 250	1 050 à 1 450	

Doc. 9 Nombres d'ondes associés aux liaisons.

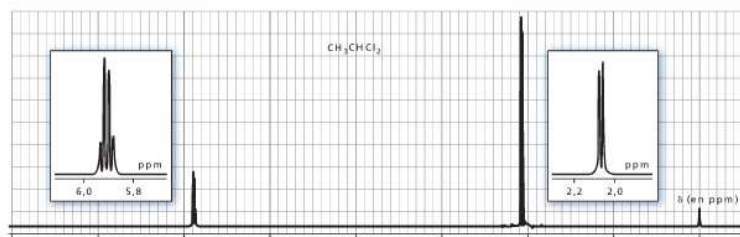
Un peu de méthode

Pour analyser un spectre IR, il faut dans l'ordre

1. Repérer les liaisons chimiques grâce à leurs nombres d'onde
2. Rechercher les groupes caractéristiques possédant ces liaisons ; certaines liaisons appartiennent à plusieurs groupes.
3. Vérifier que toutes les bandes caractéristiques des groupes retenus sont sur le spectre
4. Utiliser éventuellement les valeurs précises des nombres d'onde pour départager deux groupes



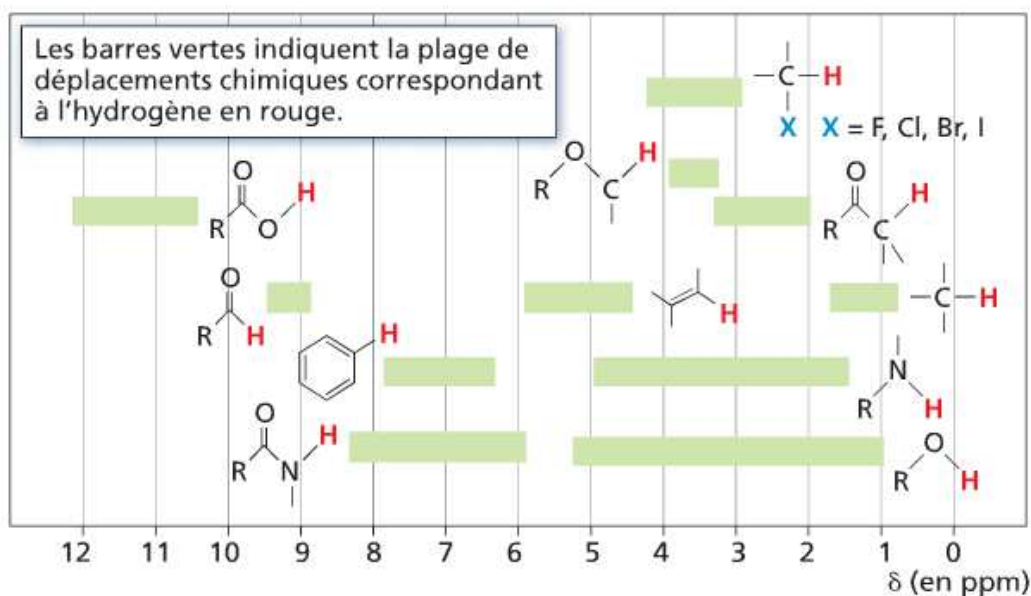
Résonance Magnétique Nucléaire



Exemple de spectre RMN du proton

enregistrement et traitement mathématique

$$\delta = \frac{f - f_{\text{réf}}}{f_{\text{travail}}} \times 10^6$$



• **Nombre de signaux** : la molécule possède deux types de protons (H_{a_1} , H_{a_2} et H_{a_3} sont équivalents et différents de H_b). Le spectre comporte donc deux signaux observés à environ 2 et à 6 ppm.

• **Aire des signaux** : le groupe de protons H_{a_1} , H_{a_2} et H_{a_3} correspond à une aire de 3, le proton H_b , à une aire de 1. Les hauteurs mesurées pour les sauts de la courbe d'intégration permettent d'attribuer le signal à 2 ppm au groupe H_{a_1} , H_{a_2} et H_{a_3} ($h = 3$ cm), et celui à 6 ppm, à H_b ($h = 1$ cm).

• **Multiplicité** : le groupe H_{a_1} , H_{a_2} et H_{a_3} possède 1 voisin donc correspond à une multiplicité $m = 1 + 1 = 2$: le signal à 2 ppm est un doublet. H_b possède 3 voisins donc correspond à une multiplicité $m = 3 + 1 = 4$: le signal à 6 ppm est un quadruplet.

• **Déplacements chimiques** : en utilisant la table de déplacement chimique (Fig. 16), le groupe H_{a_1} , H_{a_2} et H_{a_3} correspond à un signal sortant à $\delta \in [0,8 ; 1,8 \text{ ppm}]$: $\delta_{H_a} = 2 \text{ ppm}$ est cohérent. H_b correspond a priori à un signal sortant à $\delta \in [0,8 ; 1,8 \text{ ppm}]$. Le déplacement plus élevé que prévu pour H_b s'explique par les effets cumulés des deux atomes de chlore.

