

La spectroscopie infrarouge

Ce chapitre vu en chimie générale a surtout des applications en chimie organique (détermination de structure des molécules), mais il peut vous être demandé d'effectuer quelques calculs et de représenter des modes de déformation.

Rappels :

- A tout rayonnement électromagnétique, on peut associer une fréquence ν , un nombre d'onde $\sigma = \bar{\nu} = \frac{\nu}{c}$ en cm^{-1} , ainsi qu'une longueur d'onde λ .

- Ce rayonnement comporte une énergie telle que $E=h\nu$, et peut interagir avec la matière en modifiant les niveaux d'énergie des molécules (translation, vibration, rotation, niveaux électroniques).

La spectroscopie IR influe sur les vibrations et la rotation des molécules.

Le domaine de l'IR s'étend de 400 à 4000 cm^{-1} .

Modes normaux de vibration :

Une molécule composée de N atomes comporte 3N-6 degrés de liberté (3N-5 si elle est linéaire). Ils sont appelés modes normaux :

Mode normal : mode dans lequel tous les atomes vibrent à la même fréquence et passent par leur position d'équilibre en même temps. Le centre de gravité de la molécule reste fixe.

Il existe plusieurs types de déformation : élongation symétrique ou asymétrique (ν_s, ν_{as}), cisaillement dans le plan et hors plan (δ_p, δ_{hp}).

Pour qu'une vibration soit active (= visible) en IR, il faut qu'elle provoque une variation du moment dipolaire!!!

Constantes de force de liaison :

La valeur des fréquences de vibration est reliée à la force des liaisons, représentée par k, la constante de force.

Approche en mécanique classique (liaison entre deux atomes A et B):

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{avec } \mu \text{ la masse réduite définie par } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

Ce genre de calcul peut être demandé à l'examen (attention aux unités).