

## 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  $\nu$ , un nombre d'onde  $\sigma = \bar{\nu} = \frac{\nu}{c}$  en  $\text{cm}^{-1}$ , ainsi qu'une longueur d'onde  $\lambda$ .

- 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  $\text{cm}^{-1}$ .

### 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 ( $\nu_s, \nu_{as}$ ), cisaillement dans le plan et hors plan ( $\delta_p, \delta_{hp}$ ).

*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).