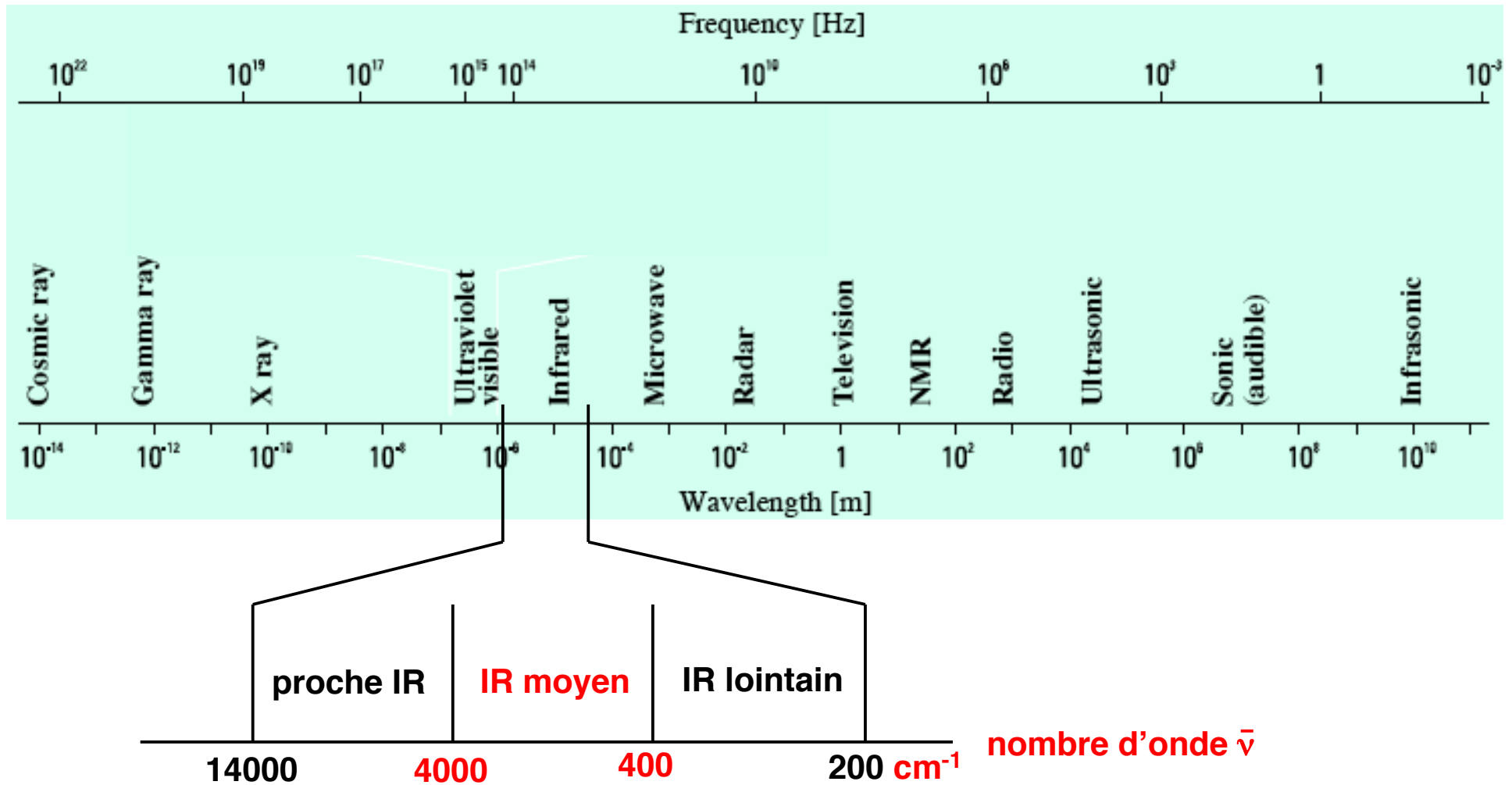


Spectroscopie Infra-Rouge

Pr. Franck DENAT
ICMUB UMR 5260
9, Av. Alain Savary
BP 47870 21078 Dijon
Franck.Denat@u-bourgogne.fr

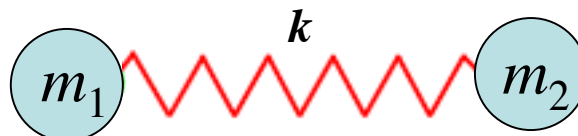
Spectroscopie infra-rouge



→ Transitions entre états vibrationnels de la molécule

I. Théorie

I.1. Modèle de l'oscillateur harmonique



Loi de Hooke :

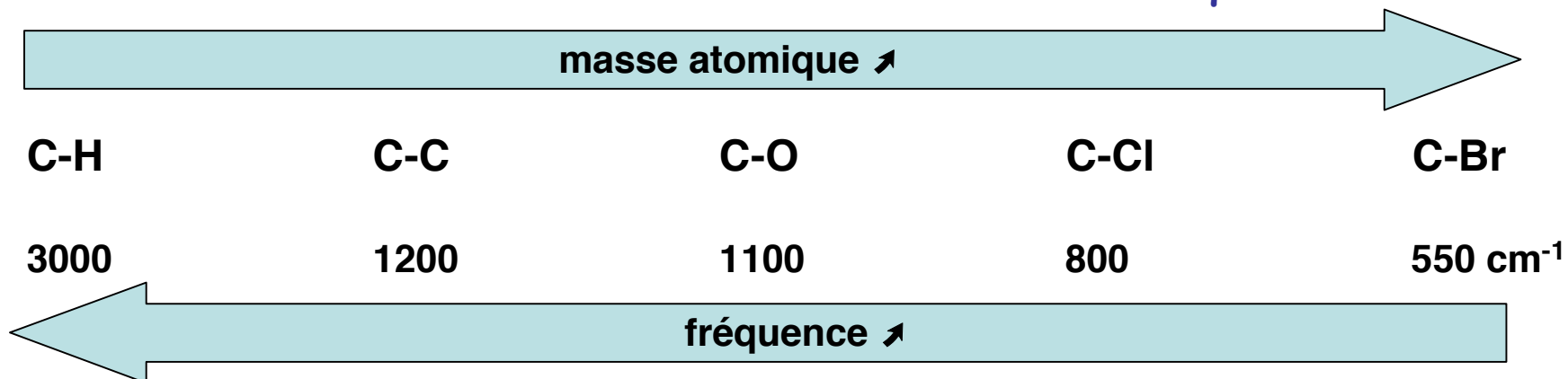
$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

avec : k constante de force de la liaison

μ masse réduite

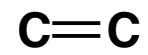
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

I.2. Effet de la masse des atomes sur la fréquence de vibration



I.3. Effet de la force de la liaison sur la fréquence de vibration

← force de liaison ↗



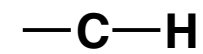
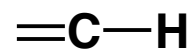
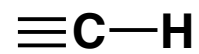
2150

1650

1200 cm^{-1}

← fréquence ↗

← force de liaison ↗



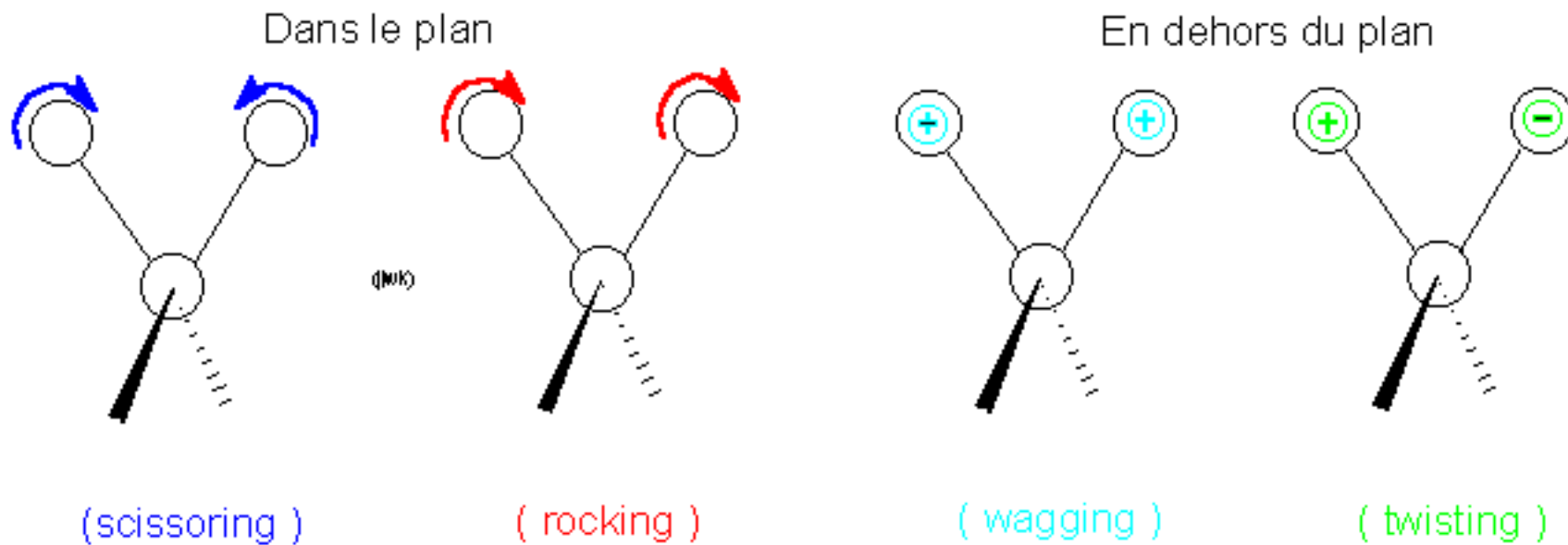
3300

3100

2900 cm^{-1}

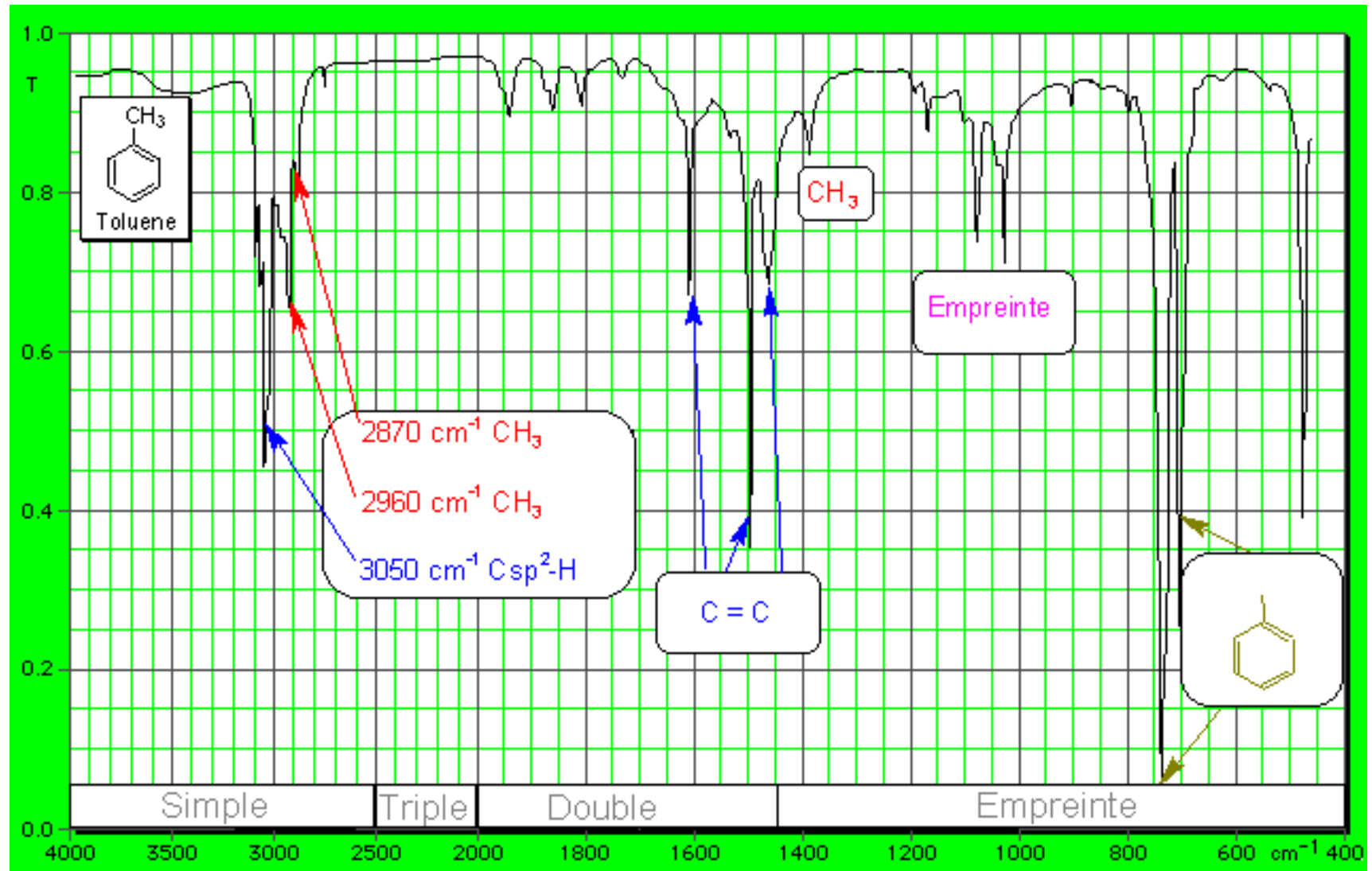
← fréquence ↗

Déformation angulaire (bending) δ



Les élongations requièrent en général plus d'énergie que les déformations (\vec{v} ↗)

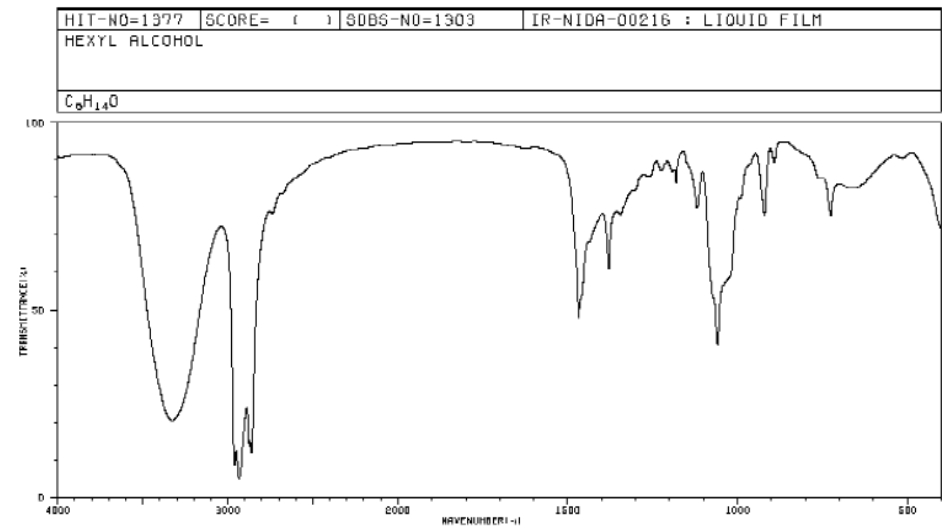
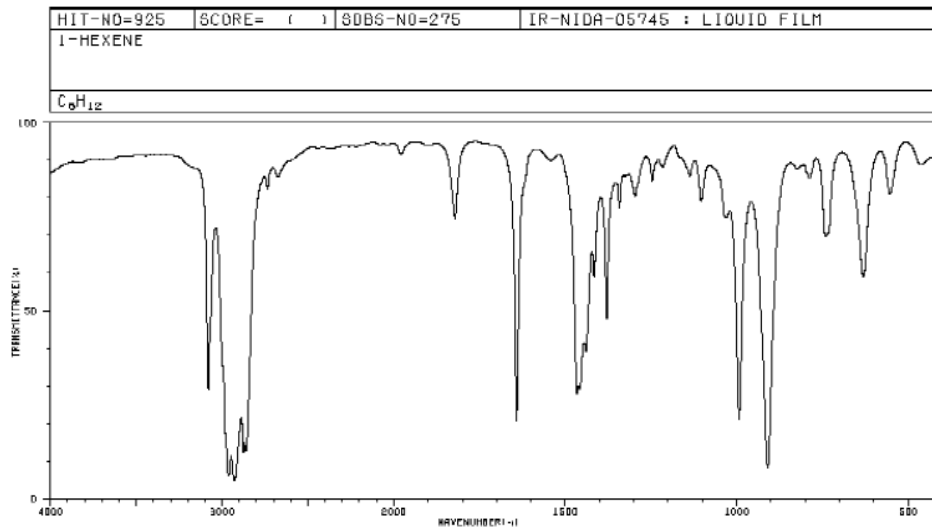
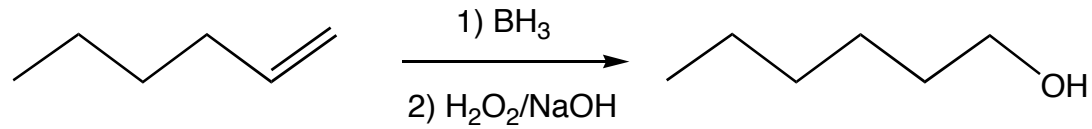
II. Le spectre infrarouge



III. Intérêts de la spectroscopie Infrarouge

- Information sur la présence de groupements fonctionnels

Ex:

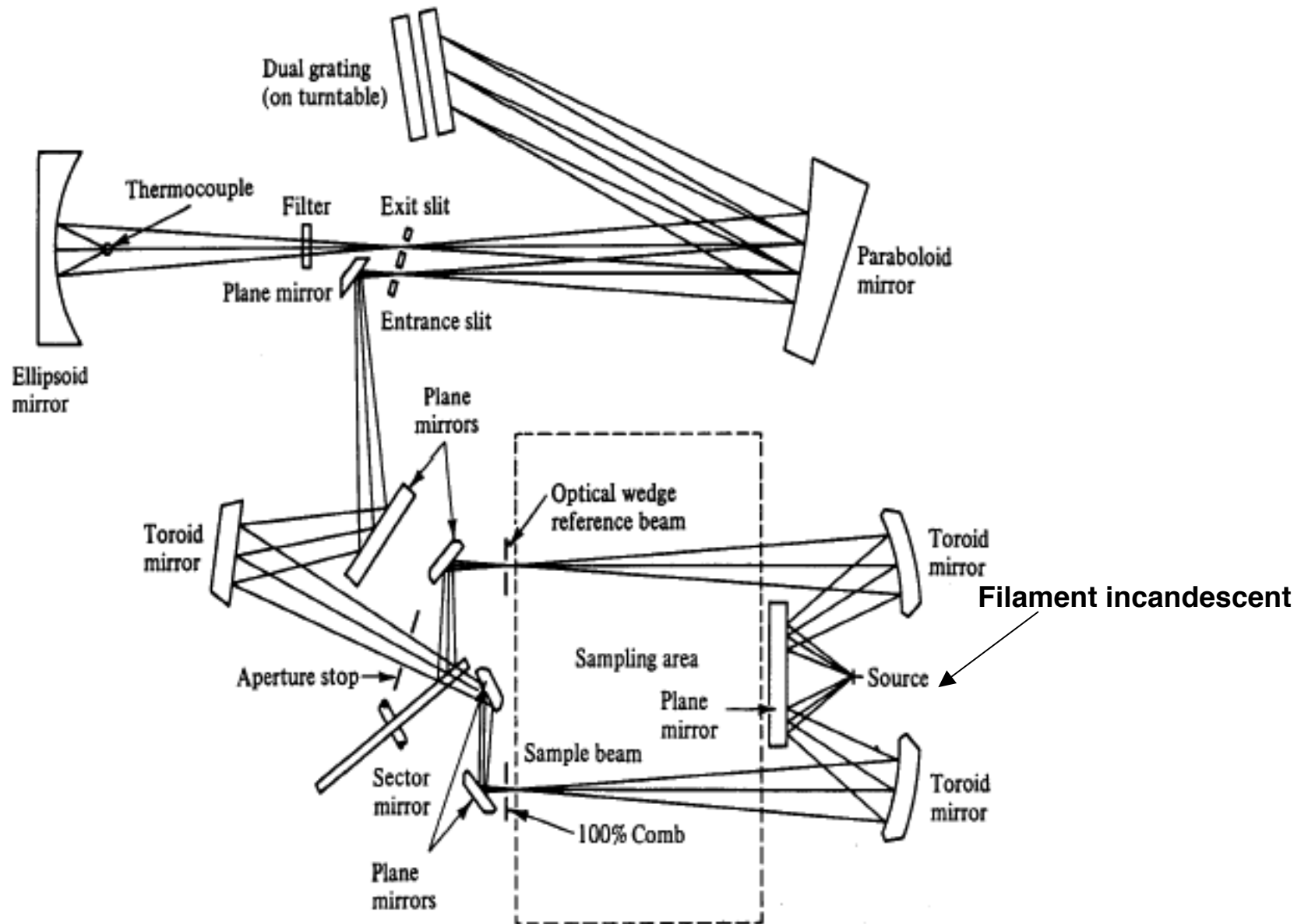


<http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/menu-e.html>

- Comparaison de spectres (/ spectrothèques)
- Analyse quantitative (loi de Beer-Lambert)

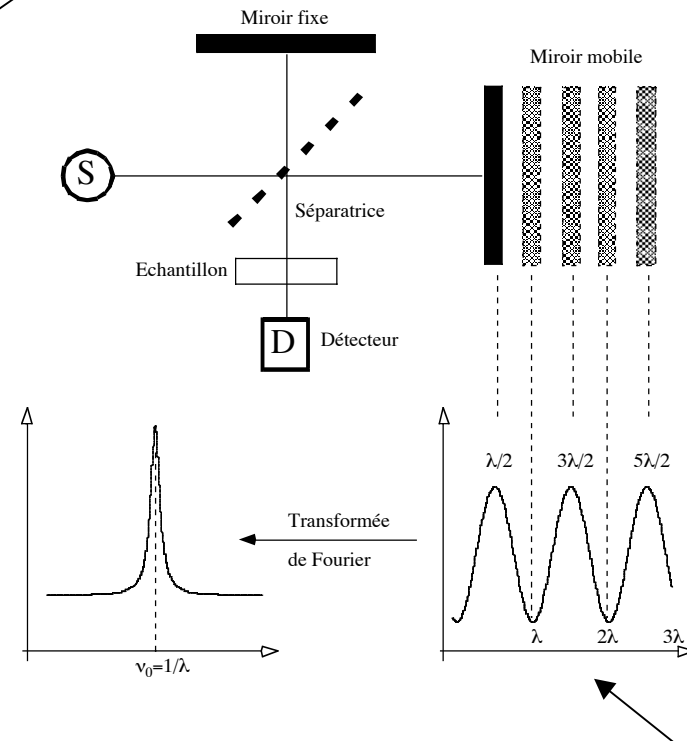
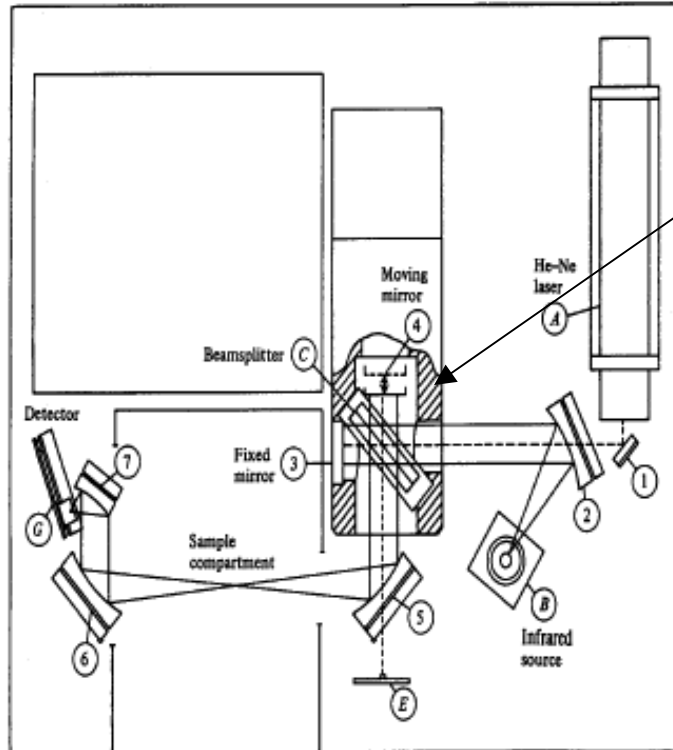
IV. Appareillage

IV.1. Spectromètres à double faisceaux (balayage)



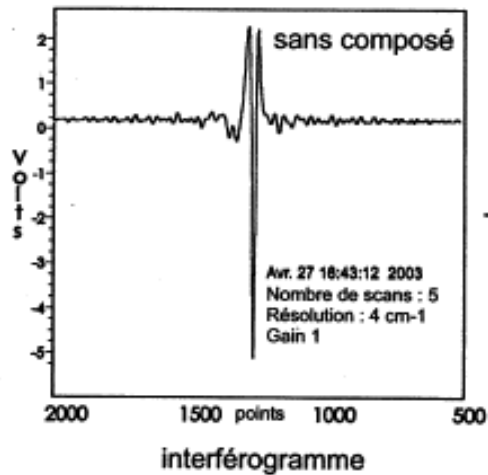
IV.2. Spectromètre à transformée de Fourier (FT-IR)

Détail de l'interféromètre de Michelson

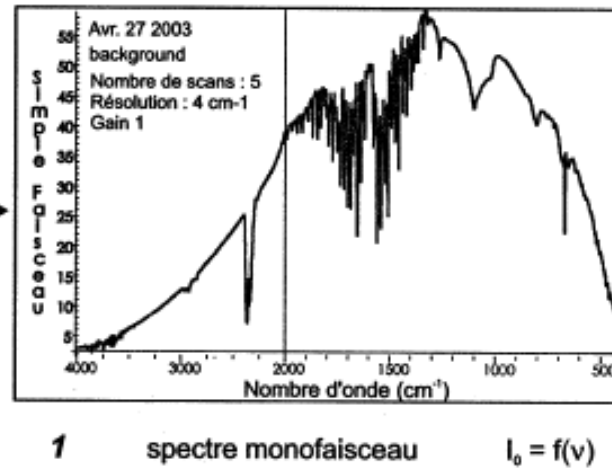


Cas d'une lumière monochromatique

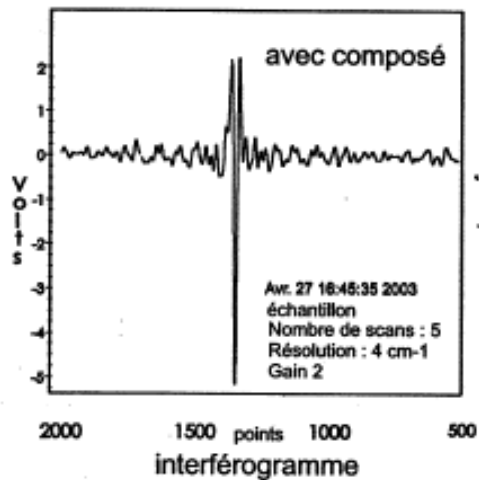
source polychromatique → interférogramme



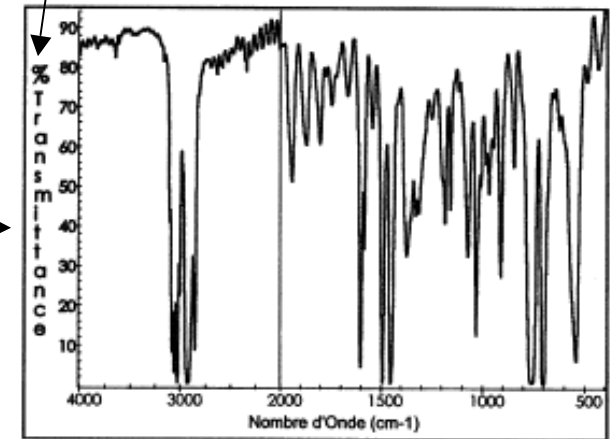
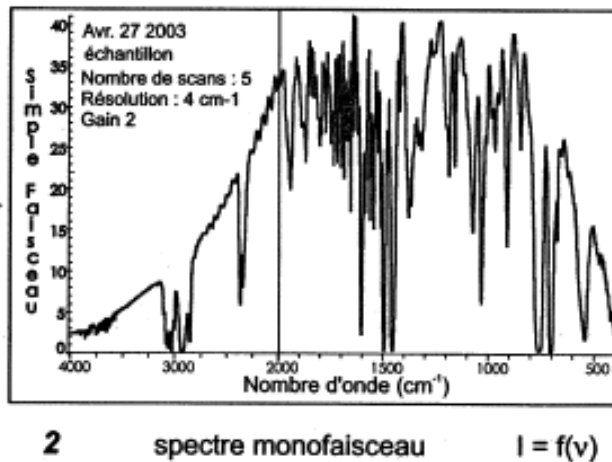
TF



$$T = I / I_0$$



TF



☺ Toutes les λ sont traitées simultanément :

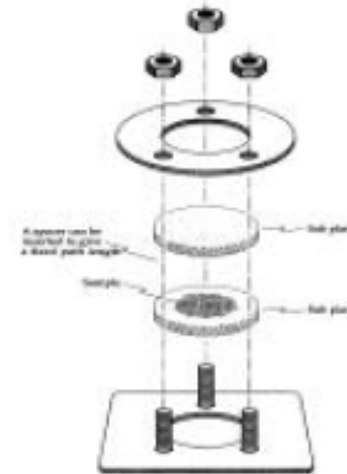
- rapidité
- meilleur rapport signal/bruit

V. Préparation et examen des échantillons

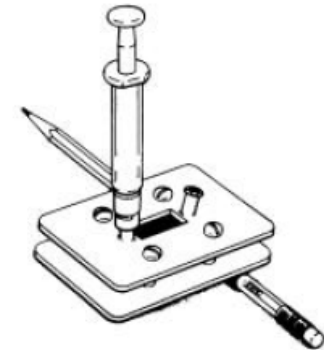
V.1. Par transmission

- échantillons liquides:

Pur : **film** entre 2 lames **NaCl**



En solution dans un solvant transparent dans la zone d'intérêt
→ Cellules ($l = 0,1$ mm à 1 cm) : études quantitatives



- échantillons solides:

En solution

En suspension dans le nujol → film entre 2 lames NaCl

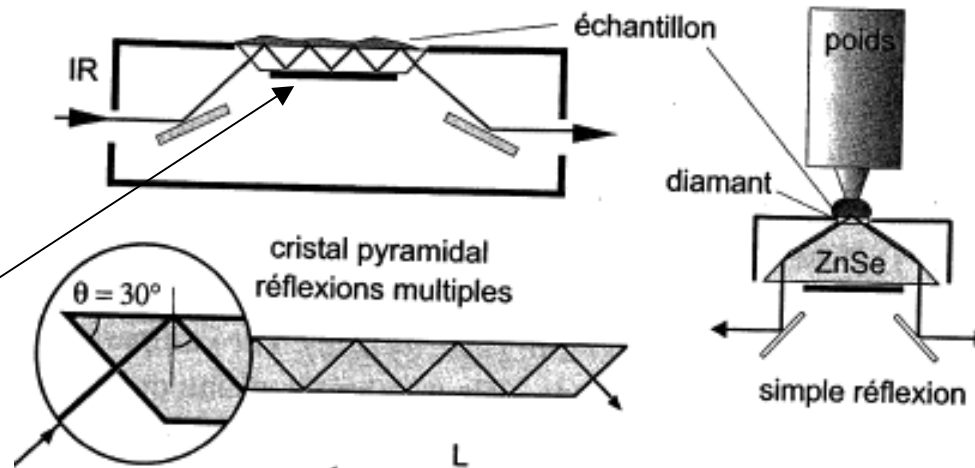
Sous forme de **pastille** (dilution dans **KBr** ≈ 1 mg / 300 mg pour $M \approx 200$ g/mol)

- échantillons gazeux : cellules à gaz

V.2. Par réflexion (solides)

- réflexion totale atténuée (ATR) : réflexions multiples ou unique

Matériau transparent dans l'IR
indice de réfraction n élevé :
Ge, KRS-5, diamant,...



- réflexion diffuse (DRIFT)

