

Fe^{IV} est attendue dans la zone UV du spectre d'absorption. A cette énergie, les transitions $\pi \rightarrow \pi^*$ très intenses des cycles pyridines du ligand ont aussi lieu. Le rayonnement incident de RR est alors absorbé par ces transitions.

Lors de sa thèse au laboratoire, Véronique Balland a réalisé des études par raman de résonance sur l'espèce $[(\text{L}_5^3)\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$ avec une longueur d'onde excitatrice de 752.5 et 647.1 nm.^[25] Une bande de vibration à 750 cm^{-1} a été observée mais cette bande n'était pas modifiée après marquage isotopique en présence de H_2^{18}O .

Très récemment, Sastri et al.^[26] ont étudié la vibration de la liaison $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ des complexes $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{NCS})]^+$ et $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{N}_3)]^+$ par RR. Les spectres d'absorption de ces complexes montrent des transitions dans le proche UV à 387 et 407 nm respectivement. Ces bandes d'absorption sont attribuées au transfert de charge de $\text{O}^{2-} \rightarrow \text{Fe}^{\text{IV}}$. Après excitation à 406,7 nm, des bandes de vibration sont observées à 820 et 812 cm^{-1} pour les complexes $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{NCS})]^+$ et $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{N}_3)]^+$ respectivement. Elles sont de fortes intensités car elles sont exaltées par l'excitation. Ces bandes sont déplacées lors du marquage isotopique en présence H_2^{18}O (Tableau II-2).

Complexe	$\nu (\text{Fe} = ^{16}\text{O}) (\text{cm}^{-1})$	$\nu (\text{Fe} = ^{18}\text{O}) (\text{cm}^{-1})$	Références
$[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{NCCH}_3)]^{2+}$	834	800	[9]
$[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{NCS})]^+$	820	786	[26]
$[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TMC})(\text{N}_3)]^+$	812	779	[26]
$[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{TPEN})]^{2+}$	819	794	[18]

Tableau II-2. Caractérisations vibrationnelles de quelques intermédiaires $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ décrits dans la littérature.

L'étude par spectroscopie vibrationnelle de RR du complexe $[(\text{TPEN})\text{Fe}(\text{O})]^{2+}$ par excitation à une longueur d'onde centrée sur cette bande à 730 nm ne permet pas l'accès au transfert de charge $\text{O}^{2-} \rightarrow \text{Fe}^{\text{IV}}$ puisque la bande d'absorption a été attribuée à une transition d-d.

Le complexe $[(\text{TPEN})\text{Fe}(\text{O})]^{2+}$ étant stable à -30°C et à 0°C , nous avons voulu l'étudier par spectroscopie d'absorption infra-rouge à transformée de Fourier (FT-IR) en