

TP - Spectroscopie IR - Correction

1. Allure d'un spectre infrarouge.

Voici, ci-contre le spectre IR du : 2-méthylpropan-2-ol

1.1. Quelle est la grandeur représentée en ordonnée ? Quelle est son unité ?

La grandeur en ordonnée est la transmittance. Elle s'exprime en pourcentage.

1.2. Choisir dans la liste suivante, en argumentant, l'expression de la transmittance en fonction des intensités I et I_0 (I étant inférieure à I_0) :

$$T = I - I_0 \quad T = I/I_0 \quad T = I_0 - I \quad T = I_0/I$$

Un pourcentage correspond à un rapport et pour des valeurs inférieures à 100 %, le numérateur doit être inférieur au dénominateur.

1.3. Pourquoi le spectre présente-t-il des "pics" inversés ?

Lorsque les rayonnements sont absorbés, I est faible donc la transmittance est faible (les pics sont vers le bas contrairement au spectre UV-visible qui mesure l'absorbance).

1.4. Quelle est l'unité de la grandeur en abscisse ?

L'unité en abscisse est le cm^{-1}

1.5. Cette grandeur, notée σ , est appelée nombre d'onde (parfois wavenumber). Elle est liée à la longueur d'onde.

Choisir dans la liste suivante la relation qui les unit :

$$\sigma = \lambda \quad \text{ou} \quad \sigma = 1/\lambda$$

cm^{-1} correspond à l'inverse d'une distance.

1.6. Quelle est la particularité de l'axe des abscisses ?

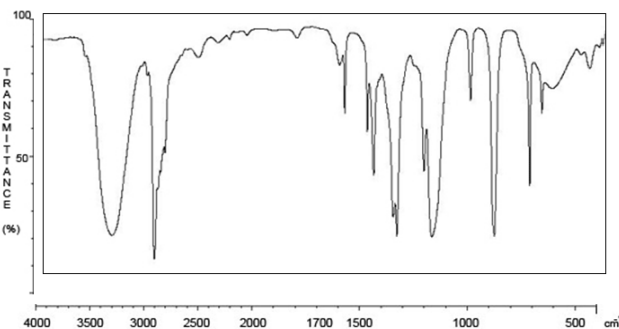
L'axe des abscisses est orienté vers la gauche

1.7. A l'aide de la relation choisie, montrer que les radiations utilisées correspondent bien à des radiations infrarouge.

500 cm^{-1} donc $\lambda = 1/\sigma$ donne $2,0 \times 10^{-3} \text{ cm}$ soit $2,0 \times 10^{-5} \text{ m}$

$4\,000 \text{ cm}^{-1}$ donc $\lambda = 1/\sigma$ donne $2,5 \times 10^{-4} \text{ cm}$ soit $2,5 \times 10^{-6} \text{ m}$

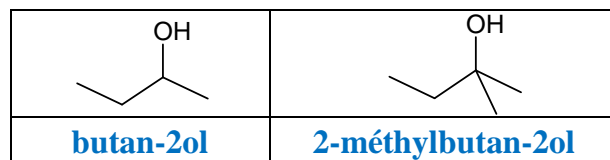
Les valeurs sont supérieures à 800 nm ($8 \times 10^{-9} \text{ m}$) ce sont bien des infrarouge)



2. Etude des spectres de deux molécules proches.

2.1. Molécules étudiées

Soit les deux molécules ci-contre dont on va étudier et comparer les spectres :



2.1.1. Associer un nom aux formules topologiques ci-contre.

2.2. Choisir les bonnes réponses :

Les formules topologiques montrent que : Les deux molécules **ont/n'ont pas** la même fonction

Les deux molécules **ont/n'ont pas** la même chaîne carbonée

2.2. Comparaison des spectres

2.2.1. Identifier, sur l'axe des abscisses, la zone des nombres d'onde (donner un encadrement des valeurs) où les spectres sont similaires et la zone où les spectres présentent plus de différences.

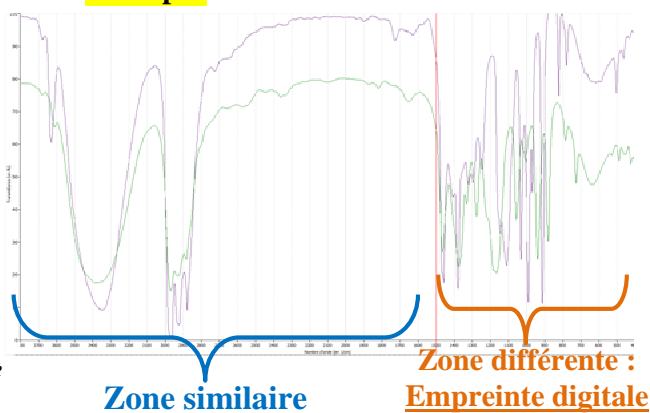
Zone similaire pour des nombres d'onde supérieurs à $1\,500 \text{ cm}^{-1}$

Zone différente pour des nombres d'onde inférieurs à $1\,500 \text{ cm}^{-1}$

2.2.2. La zone des spectres IR due à l'enchaînement carboné est appelée "empreinte digitale".

Identifier sur le spectre la zone de l'empreinte digitale et la zone due aux autres liaisons.

Empreinte digitale pour des nombres d'onde inférieurs à $1\,500 \text{ cm}^{-1}$



3. Etude de différents spectres

3.1. Spectre IR du propane

3.1.1. Donner la formule semi-développée de la molécule de propane.

Propane : $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$

3.1.2. Quelles liaisons trouve-t-on dans une molécule de propane.

On trouve des liaisons C-H et des liaisons C-C

3.1.3. Sachant que la zone en-dessous de 1500 cm^{-1} est liée à l'enchaînement carboné, à quelle liaison est associé le pic situé entre 1500 et 4000 cm^{-1} ?

Il est associé à la liaison C-H

3.1.4. Déterminer la valeur (ou l'intervalle) du nombre d'onde associé à ce pic.

Il est situé dans l'intervalle 2850–3000

3.2. Autres spectres

3.2. En utilisant ces spectres, associer valeurs de pics (ou encadrement de valeurs) et liaisons chimiques (on pourra préciser la fonction dont est issue la liaison). Présenter sous forme d'un tableau. Indiquer si le pic est fort, moyen ou faible et préciser également s'il est fin ou large.

liaison	Fonction	Nombre d'onde (cm^{-1})	intensité
C-H	alcane	2850–3000	Forte
O-H	alcool	3100–3500	F ; large
C=O	aldéhyde	1700–1800	Forte ; fine
C-H		2700–3000	moyenne ; +sieurs pics
C=O	cétone	1650–1750	Forte; très fine
C=O	acide carboxylique	1650–1800	Forte ; fine
O-H		2500–3500	moyenne ; très large
N-H	amine	1550–1650	faible
C=O	ester	1750–1800	Forte ; fine
N-H	amide	3100–3400	Forte ; large ; +sieurs pics
C=O		1600–1700	Forte

3.3. Cas de la liaison O-H

3.3.1. Quelle molécule contient la liaison O-H libre ? O-H lié ?

C'est le butan-1-ol gaz qui contient le O-H libre et le butan-1-ol solution qui contient le O-H lié.

3.3.2. Qu'est-ce qui peut être à l'origine du O-H lié ? (il faudra se souvenir du programme de 1^{ère} S !)

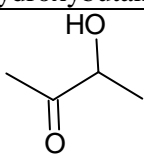
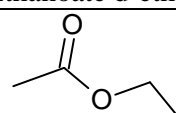
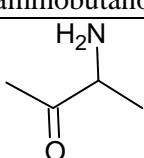
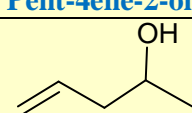
C'est la liaison hydrogène qui peut lier les molécules entre elles

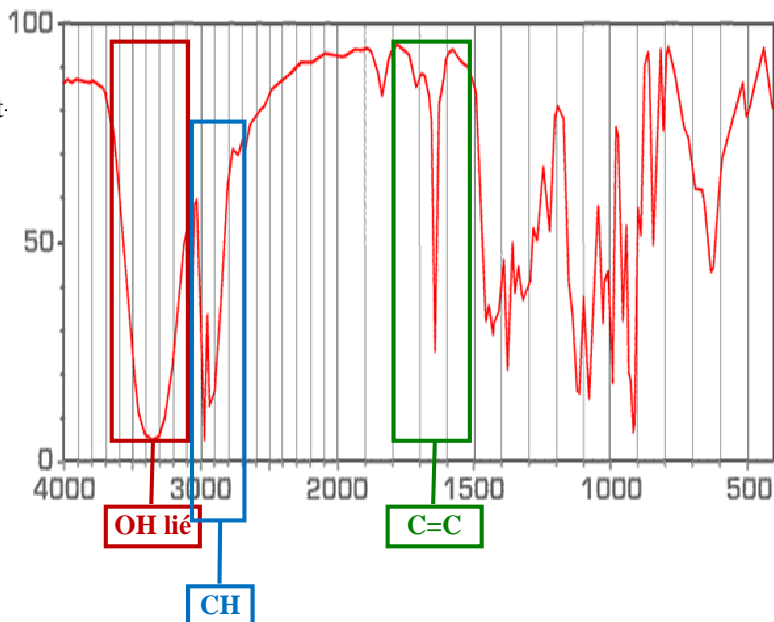
3.3.3. Le spectre du 2-méthylpropan-2-ol présenté au paragraphe 1 a-t-il été obtenu en phase gazeuse ou en solution ? Argumenter.

Le spectre montre une large bande vers $3\ 200\text{ cm}^{-1}$ cela correspond à O-H lié, il était donc en solution.

4. Identification d'une molécule.

On doit identifier une espèce chimique qui peut.

3-hydroxybutanone 	Ethanoate d'éthyle 
3-aminobutanone 	Pent-4ène-2-ol 



Le document ci-dessus présente le spectre de l'espèce inconnue.

4. Identifier la molécule inconnue puis rédiger un court paragraphe mettant en évidence les étapes de la résolution.