

Exploitation de spectres infrarouges

Les composés organiques absorbent des radiations dans le domaine de l'UV-visible, mais aussi dans le domaine de l'infrarouge. L'absorption suit encore la loi de Beer-Lambert. Le spectre IR est utilisé pour identifier les groupes caractéristiques présents dans les molécules.

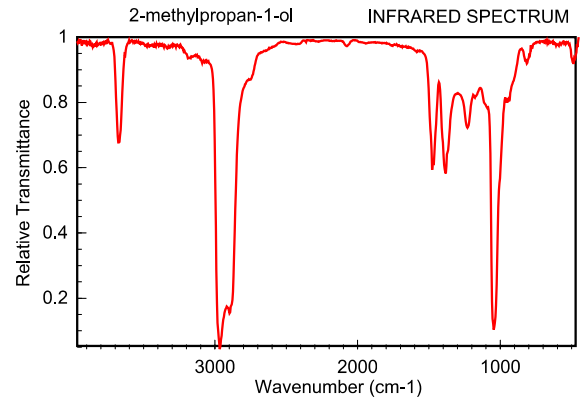
I. Généralités sur les spectres infrarouge :

Les spectres IR représentent l'intensité de l'absorption du rayonnement électromagnétique infrarouge par une molécule en fonction du **nombre d'onde** de ce rayonnement, **noté σ et exprimé en cm^{-1}** . Ce nombre d'onde est l'inverse de la longueur d'onde : $\sigma = 1/\lambda$

1. Découverte d'un spectre IR

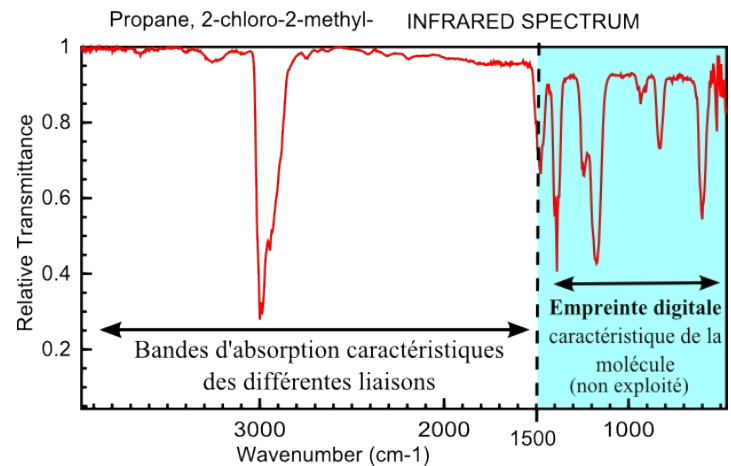
Voici ci-contre le spectre infrarouge du 2-méthylpropan-1-ol :

1. Quelle est la particularité de l'axe des abscisses ?
2. Montrer qu'il s'agit bien d'un spectre infrarouge.
3. Que signifie une transmittance égale à 100 % ? Et une transmittance égale à 0 % ? En déduire pourquoi les bandes d'absorption pointent vers le bas.

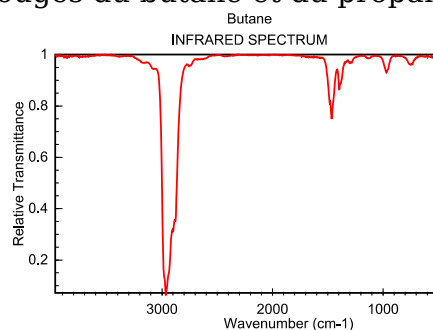
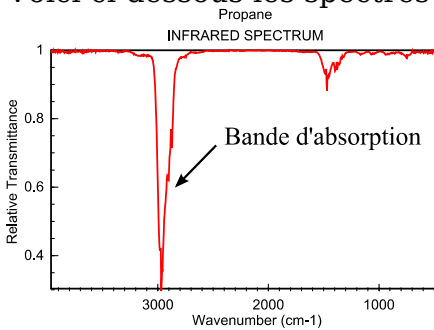
**2. Les différentes parties d'un spectre IR****DOCUMENT**

On distingue deux domaines sur un spectre IR:

- La région qui correspond aux grandes valeurs de σ ($4000-1300 \text{ cm}^{-1}$) où apparaissent les bandes caractéristiques de certaines liaisons, par exemple C=O, C=C, C-H, O-H, N-H... qui permet l'identification de groupes caractéristiques.
- La région pour faibles valeurs de σ ($<1300 \text{ cm}^{-1}$), qui est caractéristique du composé et des fonctions présentes est appelée "empreinte digitale". Dans cette zone, il est en général difficile d'attribuer les pics observés à des groupes d'atomes.



Voici ci-dessous les spectres infrarouges du butane et du propane gazeux.

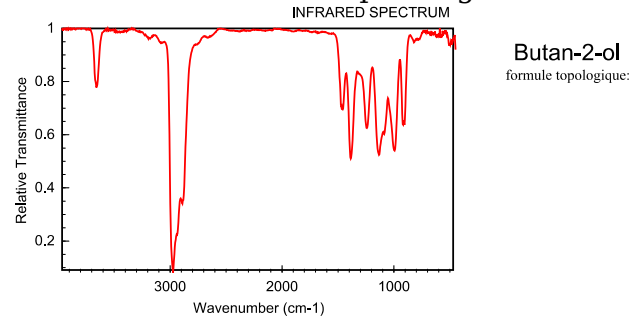
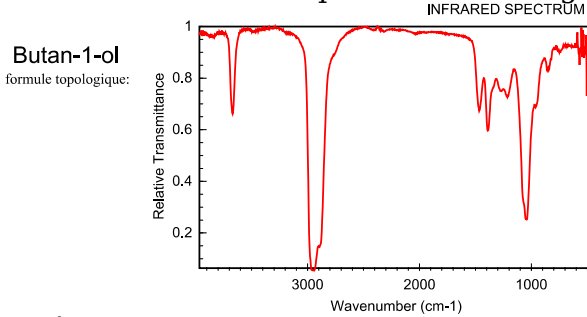


NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

4. Quels sont les analogies et différences entre ces deux spectres ?
5. Sachant que la signature de la liaison C-C se trouve dans l'empreinte, à quelle liaison est due la bande d'absorption vers 3000 cm^{-1} ?

3. Les liaisons oxygénées en phase gazeuse dans les spectres IR

Voici ci-dessous les spectres infrarouges du butan-1-ol et du butan-2-ol en phase gazeuse.



6. Écrire les formules topologiques de ces 2 alcools.

7. Comparer ces 2 spectres à celui du butane. Identifier les deux parties principales et la bande due à la liaison C_{tétra}-H.

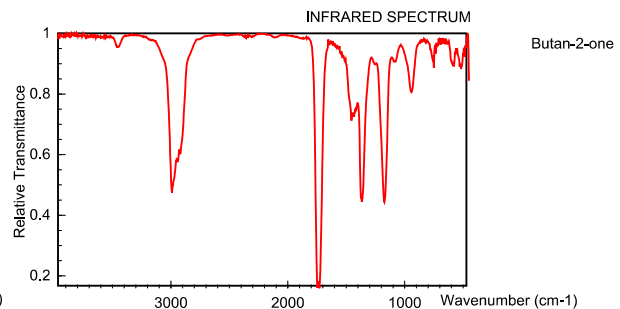
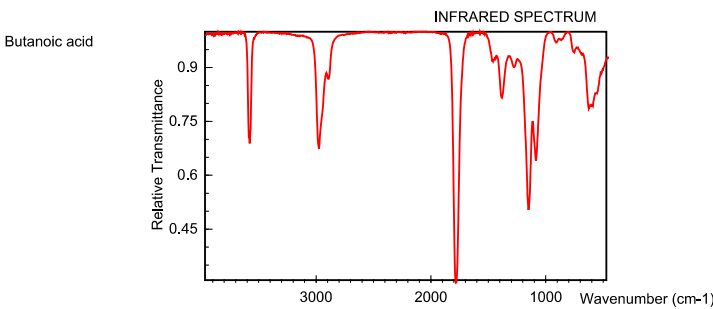
8. A quelle liaison est due la bande vers 3700 cm⁻¹? (La liaison C-O se trouve dans l'empreinte)

9. Peut-on distinguer deux isomères de fonction (isomère dont seule la position de la fonction change) à l'aide d'un spectre infrarouge ?

10. Qualifier les deux bandes à 3000 cm⁻¹ et 3700 cm⁻¹ en terme de « fine » ou « large »

11. Qualifier les deux bandes en terme d'intense (forte absorption) ou peu intense ou moyennement intense.

Voici ci-dessous les spectres infrarouges de l'acide butanoïque et du butan-2-one en phase gazeuse.



12. Ecrire les formules topologiques de ces deux molécules et entourer les liaisons autres que C-C, C-H et C-O.

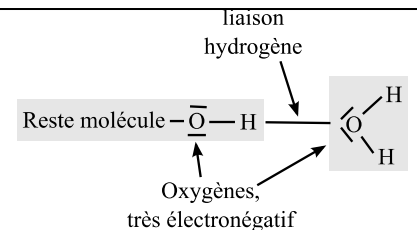
13. Identifier à quelle liaison correspond chaque bande située hors de l'empreinte digitale.

14. En conclusion, une fonction acide carboxylique en phase gazeuse sera caractérisée par combien de bandes et situées à quel niveau ?

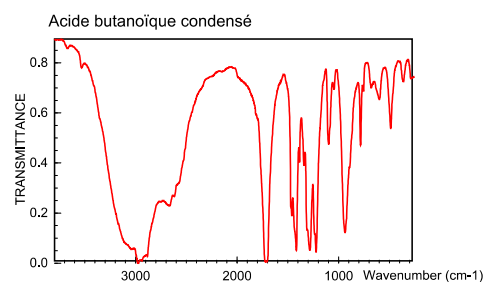
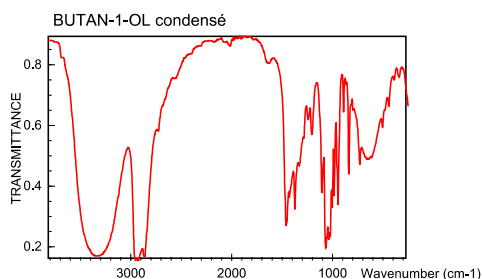
4. Les liaisons oxygénées en phase condensées dans les spectres IR

DOCUMENT

La **liaison hydrogène** est une liaison électrostatique, toujours attractive, qui s'établit entre un atome d'hydrogène lié à un atome de forte électronégativité (O,N par exple) et un autre atome de forte électronégativité. Ceci est particulièrement vrai lorsqu'une liaison OH ou NH se trouve proche d'une molécule d'eau. La présence d'une **liaison hydrogène** au niveau d'une liaison diminue le nombre d'onde de la bande caractéristique et élargit cette bande.



Voici le spectre du butan-1-ol et de l'acide butanoïque en phase condensée (c'est à dire liquide ou solide)






15. Comparer ces spectres à celui du butan-1-ol et de l'acide butanoïque en phase gazeuse (paragraphe 1.3. ci-dessus). Justifier la modification de certaines bandes.

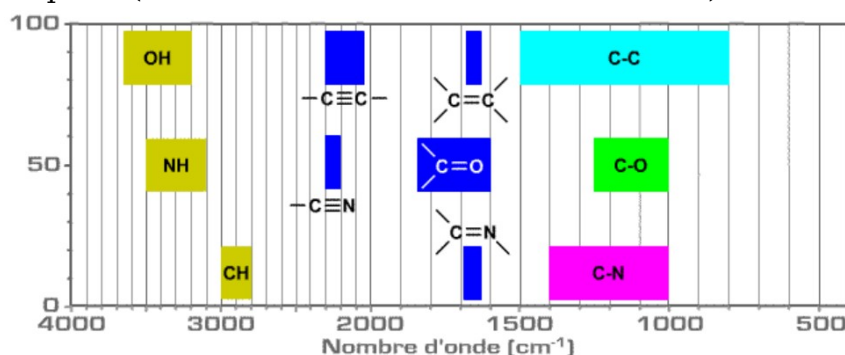
5. Résumé

Il existe d'autres bandes pour les autres liaisons rencontrées dans les composés organiques. Ces bandes sont répertoriées dans des tables **que vous n'avez pas à connaître mais que vous devez savoir utiliser.**

Voici une table simple que vous pouvez compléter en vous appuyant sur les parties précédentes

Liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Largeur de la bande	Intensité
C _{tétra} -H			Moyenne à forte
O-H en phase gazeuse			
O-H en phase condensée			
C=O			
N-H en phase gazeuse	Entre 3300 et 3500	fine	Faible à Moyenne
N-H en phase condensée	Entre 3100 et 3300	large	Forte
<i>alcène</i> 	Autour de 3000	fine	Moyenne
<i>aldéhyde</i> 	Autour de 2800	variable	Moyenne
	Autour de 1650	variable	Moyenne
C-O des esters	Autour de 1200(dans l'empreinte)	fine	Forte

Autre résumé très simplifié (mieux vaut utiliser la table ci-dessus !) :



II. Exemples d'exploitation de spectres infrarouge :

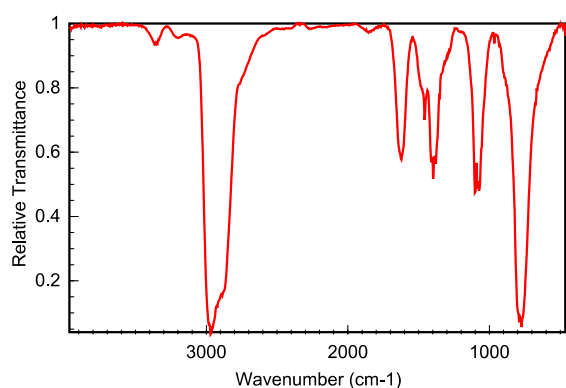
- Pour chaque molécule inconnue du tableau ci dessus, en vous aidant de la table ci-dessus, identifier les bandes et les associer à des liaisons.
- Après avoir dessiné la formule topologique des molécules proposées, choisir celle à qui appartient le spectre.

Molécule inconnue	Molécules proposées correspondantes à celle inconnue (toutes en phase gazeuse sauf mention contraire)		
A	2-methylpropan-2-ol	Butan-2-one	Ethanamine
B	Pentan-2-ol en phase condensée	Acide propanoïque en phase condensée	Butan-2-ol
C	3-hydroxybutanone	Pentan-2-ol	Pentan-3-one
D	3-hydroxypentan-2-one	3-méthylpentan-2-one	2-méthylpentan-2-ol
E	Acide Butanoïque	Butan-2-one	Butanoate d'éthyle
F	3-méthylpentanal	Acide 2-méthylpropanoïque	Ethanoate de méthyle

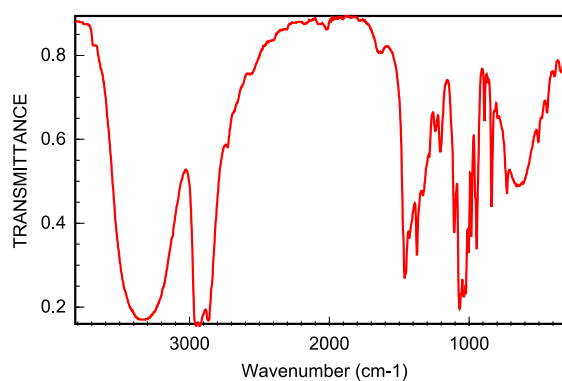
SPECTRES des molécules inconnues

Issus de NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

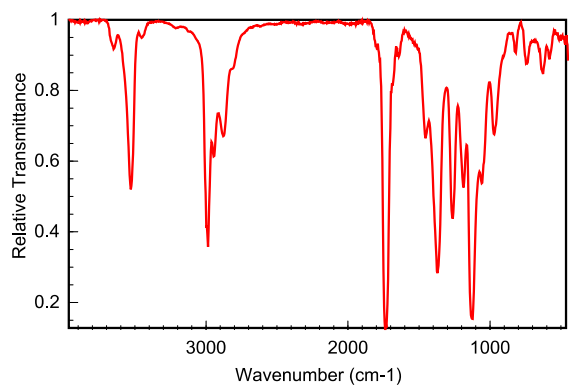
MOLECULE A



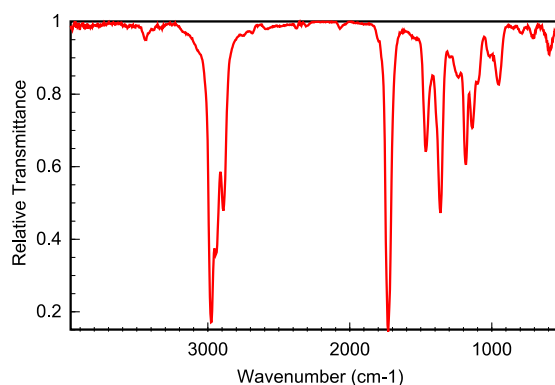
MOLECULE B



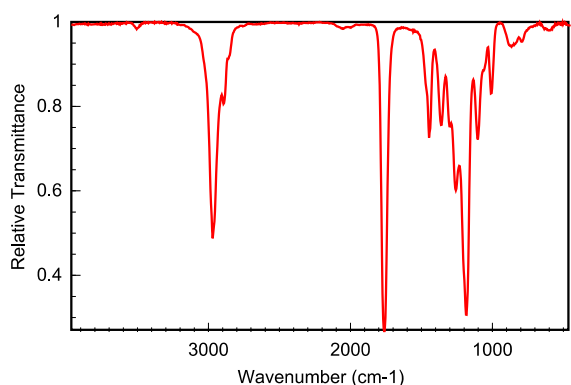
MOLECULE C



MOLECULE D



MOLECULE E



MOLECULE F

