

## T.P : T.S.

## SPECTRES I.R ET RMN.

### 1°) EXPLOITATION DE QUELQUES SPECTRES INFRA ROUGE.

#### 1.1. INTRODUCTION AUX SPECTRES IR.

|                              |             |                     |                     |                     |             |
|------------------------------|-------------|---------------------|---------------------|---------------------|-------------|
| Liaison                      | -O-H        | -N-H                | C <sub>tri</sub> -H | C <sub>tét</sub> -H | C=O         |
| $\sigma$ (cm <sup>-1</sup> ) | 3200 à 3650 | 3100 à 3500         | 3000 à 3100         | 2800 à 3000         | 1650 à 1750 |
| Liaison                      | C=C         | C <sub>tét</sub> -H | -C-C-               | -C-O-               |             |
| $\sigma$ (cm <sup>-1</sup> ) |             | 1415 à 1470         | 1000 à 1250         | 1050 à 1450         |             |

1°) La grandeur représentée en ordonnée est la transmittance dont l'unité est le %.

2°) Une transmittance de 100% signifie que l'onde électromagnétique incidente est entièrement transmise (elle n'est pas absorbée par la solution). Une transmittance de 0% correspond à une absorbance de 100% : l'OEM est entièrement absorbée. La référence est la transmittance de 100%, les pics vers le bas indique que les OEM sont partiellement absorbée.

3°) La grandeur représentée en abscisse est le nombre d'onde dont l'unité est le cm<sup>-1</sup> (Le nombre d'onde  $\sigma$  est égale à l'inverse de la longueur d'onde de l'OEM). Cet axe est gradué de manière décroissante.

4°) Les spectres ont été réalisés à des longueurs d'onde appartenant au domaine de l'infrarouge car.

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} \Rightarrow \lambda_{\min} = \frac{1}{\sigma_{\max}} = \frac{1}{4000} = 2,5 \times 10^{-4} \text{ cm} = 2,5 \times 10^{-6} \text{ m} > 800 \text{ nm}$$

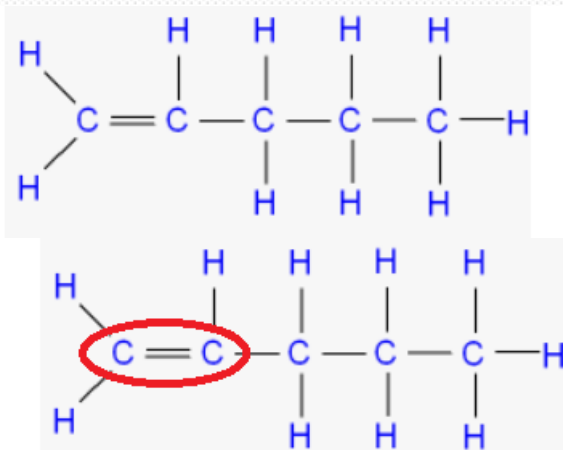
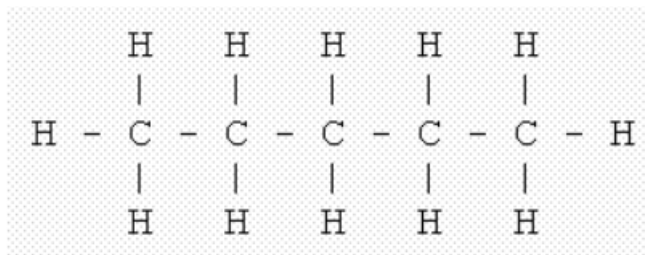
5°) Quelle information peut-on extraire de la partie du spectre comprenant les plus grandes valeurs de nombres d'onde (supérieures à 1 500 cm<sup>-1</sup>) ? Le type de liaison présent dans l'espèce chimique inconnue !

6°) Pourquoi n'exploite-t-on généralement pas la partie du spectre relative aux «petits» nombres d'onde (valeurs inférieures à 1 500 cm<sup>-1</sup>) ? Les valeurs des transmittances sont trop faibles.

#### 1.2. DETERMINATION DU NOMBRE D'ONDE D'UNE FONCTION.

7°)

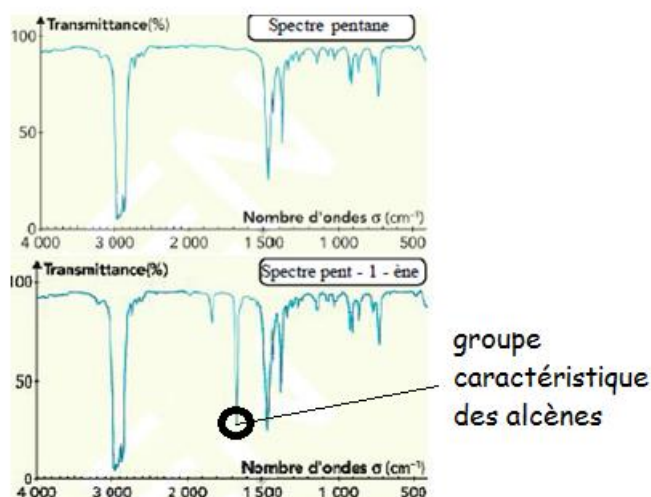
Pentane



groupe caractéristique alcène

8°) Comparer le spectre du pentane à celui du pent - 1 - ène et compléter le tableau des nombres d'onde en retrouvant la nombre d'onde caractéristique de la double liaison C = C.

$$\sigma \approx 1700 \text{ cm}^{-1}$$



### 1.3. RECONNAISSANCE DE GROUPES CARACTERISTIQUES.

Le document en annexe présente les spectres infrarouge:

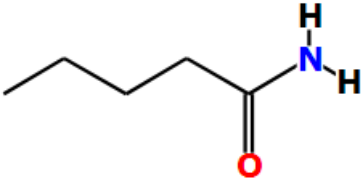
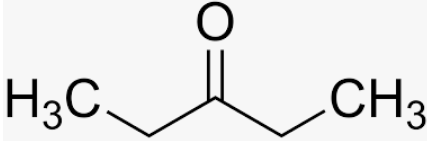
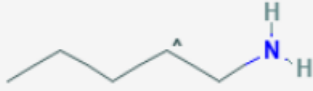
- pentanal
- pentanamide
- acide pentanoïque
- pentan - 3 -one
- propanoate d'éthyl
- pentan - 1 - amine

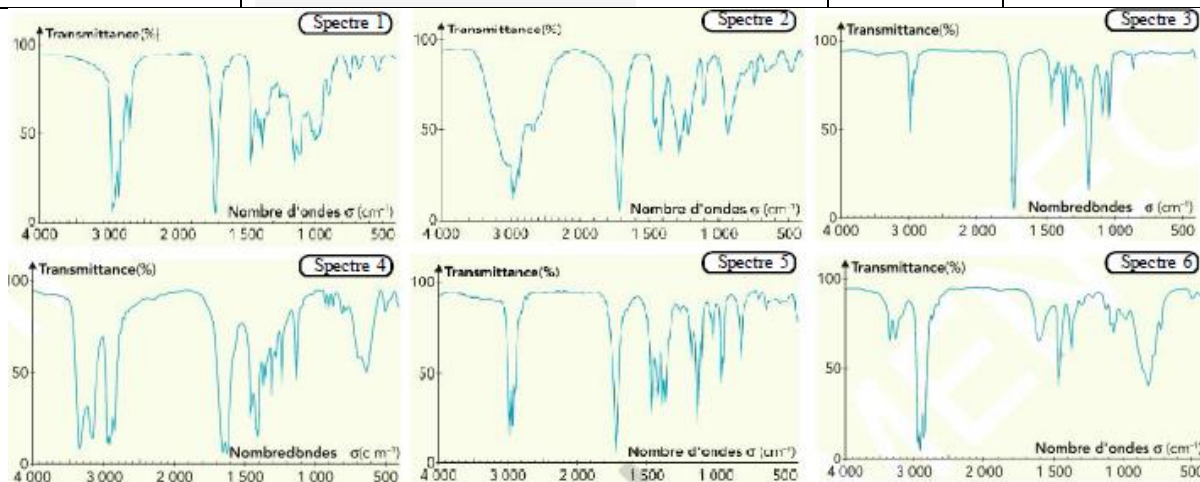
|                               |                |                                  |                                  |                                  |               |
|-------------------------------|----------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|---------------|
| Liaison                       | $\text{—O—H}$  | $\text{—N—H}$                    | $\text{C}_{\text{tri}}\text{—H}$ | $\text{C}_{\text{tét}}\text{—H}$ | $\text{>C=O}$ |
| $\sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ ) | 3 200 à 3 650  | 3 100 à 3 500                    | 3 000 à 3 100                    | 2 800 à 3 000                    | 1 650 à 1 750 |
| Liaison                       | $\text{>C=C<}$ | $\text{C}_{\text{tét}}\text{—H}$ | $\text{—C—C—}$                   | $\text{—C—O—}$                   |               |
| $\sigma$ ( $\text{cm}^{-1}$ ) |                | 1 415 à 1 470                    | 1 000 à 1 250                    | 1 050 à 1 450                    |               |

$$\sigma(\text{alcène}) \approx 1650 \text{ cm}^{-1}$$

10°) A l'aide du tableau récapitulatif des nombres d'ondes et du spectre du pentane, associer le spectre à chaque molécule.

|                   | formule semi-développée   |                         |   |
|-------------------|---|-------------------------|---|
| pentanal          | $\begin{array}{ccccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{O} & & & \\ &   &   &   &   &    & & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{H} & & \\ &   &   &   &   & & & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & & \end{array}$ | <b>groupe carbonyle</b> | <b>spectre 3</b> présence des liaisons $\text{C}_{\text{tét}}\text{—H}$ et $\text{C=O}$   |
| acide pentanoïque | $\begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{O} & & \\ &   &   &   &    & & \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & & \\ &   &   &   & \diagdown & & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{O—H} & & \end{array}$  | <b>groupe carboxyle</b> | <b>spectre 2</b> (bande large $\text{C}_{\text{tét}}\text{—H}$ se chevauche avec $\text{OH}_{\text{lié}}$ pour un nombre d'onde compris entre 2800 et 3200 $\text{cm}^{-1}$ ) |

|                     |  |                  |  |
|---------------------|--|------------------|--|
| pentanamide         |                   | groupe amide     | spectre 4 : C=O, C <sub>tet</sub> -H ; N-H (2 fois car 2 pics)                         |
| propanoate d'éthyle | $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ | groupe ester     | spectre 5 : C=O ; C-O ; C <sub>tet</sub> -H  |
| pentan-3-one        |                   | groupe carbonyle | spectre 1 : C <sub>tet</sub> -H ; C-C ; C=O  |
| pentan-1-amine      |                   | groupe amine     | spectre 6 : C <sub>tet</sub> -H et N-H avec 2 pics car 2 liaisons N-H dans la molécule |



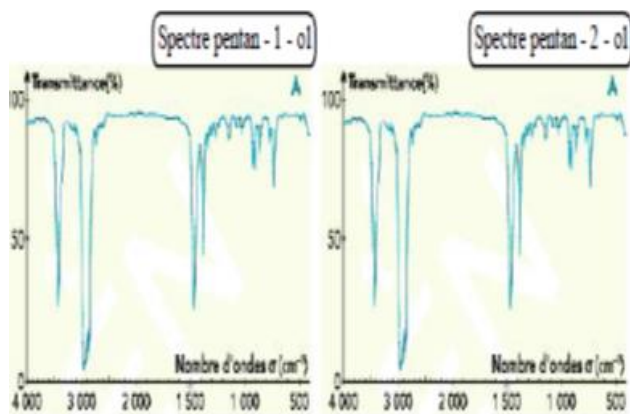
#### 1.4. SPECTRE IR D'ALCOOLS ISOMERES.

11°)

|  |   |
|--|---|
| pentan - 1 - ol  | pentan - 2 - ol   |
| $\begin{array}{cccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ &   &   &   &   &   \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{OH} \\ &   &   &   &   &   \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$ | $\begin{array}{cccccc} & & & & \text{H} & \\ & & & &   & \\ & & & & \text{O} & \\ & & & &   & \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{C} & \text{H} \\ &   &   &   &   &   \\ \text{H} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ &   &   &   &   &   \\ & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$ |

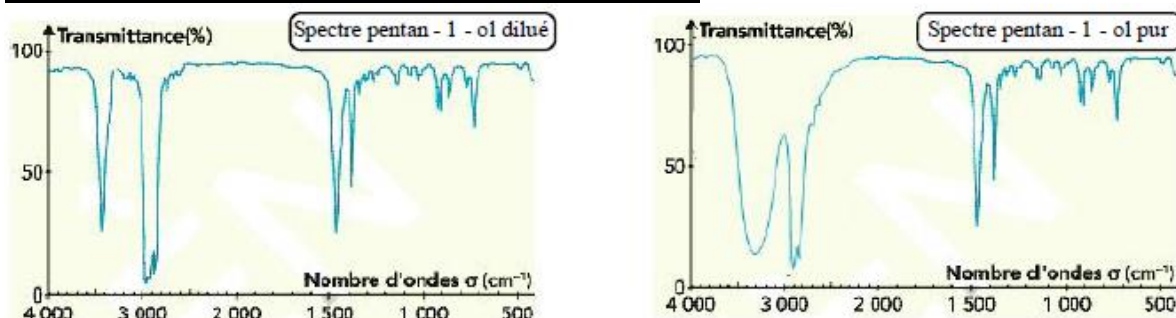
Ils sont isomères de constitution car ils ont même formule brute mais une formule développée différente.

12°) Quels sont leurs points communs et leurs différences ?



Les spectres sont quasi identique, impossible de savoir de quelle molécule il s'agit. Il faut utiliser la RMN

### 1.5. MISE EN EVIDENCE DE LA LIAISON HYDROGENE



14°) Montrer que le spectre obtenu avec l'alcool pur est en accord avec la structure du pentan - 1 - ol.

Le spectre présente des bandes correspondant aux liaisons :

O-H (lié) :  $3200\text{ cm}^{-1} < \sigma < 3600\text{ cm}^{-1}$

C<sub>ter</sub>-H :  $2800\text{ cm}^{-1} < \sigma < 3000\text{ cm}^{-1}$

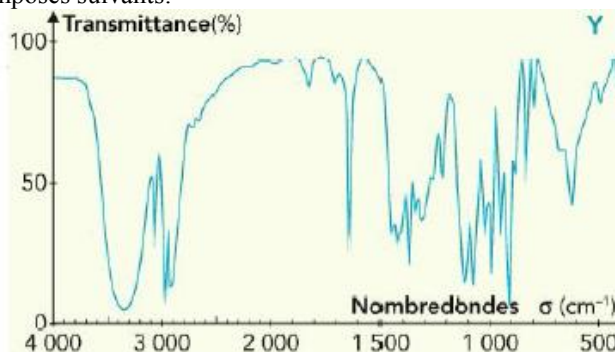
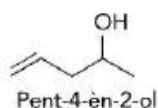
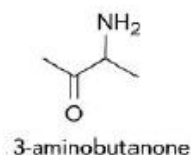
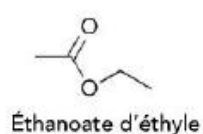
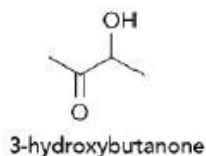
C-O :  $1050\text{ cm}^{-1} < \sigma < 1450\text{ cm}^{-1}$

15°) Pour le pentan-1-ol dilué, la liaison hydrogène est libre car les molécules sont très éloignées les unes des autres : le pic correspondant à O-H libre se trouve aux alentours du nombre d'onde  $\sigma = 3600\text{ cm}^{-1}$

Les liaisons hydrogène sont moins fortes.

### 1.6. IDENTIFICATION D'UN COMPOSE

Le document fournit le spectre de l'un des quatre composés suivants:



16°) A quel composé le spectre correspond-il ?

Le spectre correspond au 3-hydroxybutanone il contient des bandes correspondant aux liaisons :

- C=O
- O-H
- C-O
- C<sub>ter</sub>-H