

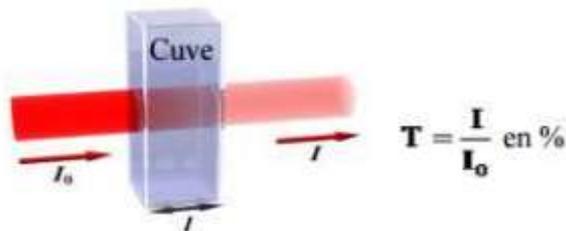
Spectroscopie Infrarouge et groupes caractéristiques

TP N° 04 : Description et origine d'un spectre infrarouge

Les composés organiques absorbent des radiations dans le domaine de l'UV-visible, mais aussi dans le domaine de l'infrarouge. Quelles informations peut-on obtenir à partir d'un spectre infrarouge ?

1- Présentation :

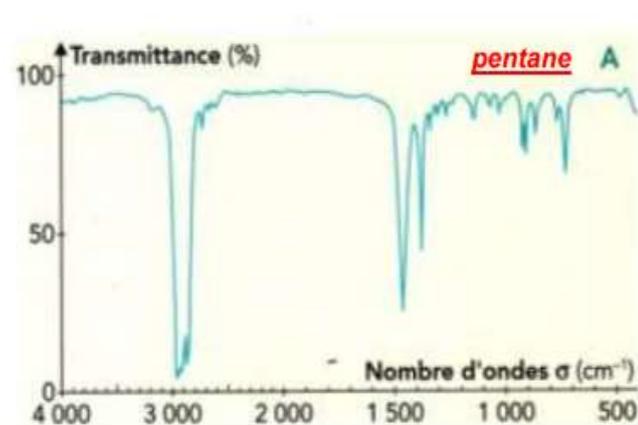
Pour réaliser le spectre infrarouge d'une espèce chimique, on fait traverser à travers un échantillon de cette espèce un faisceau infrarouge monochromatique et on mesure l'intensité lumineuse transmise par cet échantillon.



Voici, par exemple, le spectre infrarouge du pentane :

Questions :

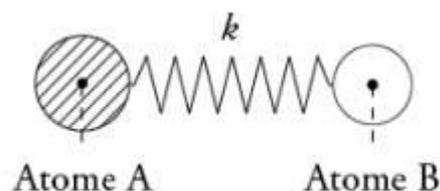
1. Sur un spectre infrarouge, que porte-t-on en ordonnée ? Que porte-t-on en abscisse ?
2. Retrouver la définition du nombre d'onde σ par une analyse dimensionnelle.
3. Quelle est la particularité de l'axe des abscisses ?
4. Que signifie une transmittance égale à 100 % ? Que signifie une transmittance égale à 0% ?



2- Interprétation

Lorsqu'une onde électromagnétique infrarouge traverse une molécule, celle-ci peut être absorbée de façon intense par certaines liaisons chimiques.

Pour expliquer cela, on se réfère au modèle classique de l'oscillateur harmonique. On assimile alors les deux atomes **A** et **B** unis par la liaison covalente à deux masses m_A et m_B qui seraient reliées par un ressort de constante de raideur k . Les masses oscillent autour de leur position d'équilibre avec une fréquence ν_0 appelée « fréquence propre de vibration » de la liaison.



Questions :

1. Comment varie la fréquence de vibration de la liaison si les atomes qu'elle relie sont plus massifs ?
2. Comment varie la fréquence de vibration de la molécule lorsque la liaison entre les atomes est plus forte, autrement dit si la multiplicité de la liaison augmente ?
3. Que se passe-t-il lorsque la molécule est soumise à l'action d'une onde électromagnétique ?

Ce phénomène d'absorption, appelé résonance, ne se produit que si la fréquence de l'onde électromagnétique est égale à la fréquence propre de vibration ν_0 qui est donnée par la relation :

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Avec μ la masse réduite du système telle que :

$$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$$

4. Cette relation est-elle en accord avec les observations précédentes ?
5. Calculer la valeur de la fréquence propre de vibration pour la liaison C_{tét}-H.
6. Cette radiation appartient-elle bien au domaine des infrarouges ?
7. Calculer, en cm^{-1} , le nombre d'onde σ_0 correspondant à cette radiation. Après avoir écrit la formule développée du pentane ; Indiquer si ce résultat est cohérent avec l'allure du spectre de la molécule.

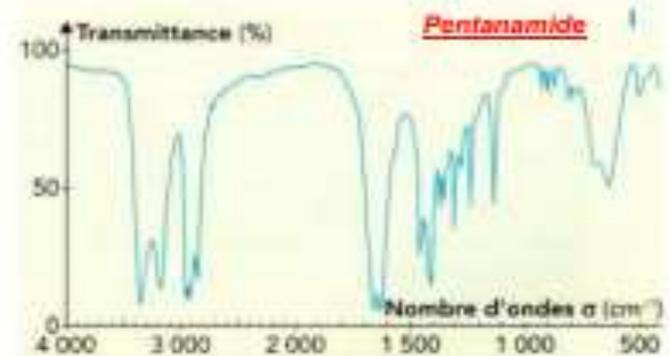
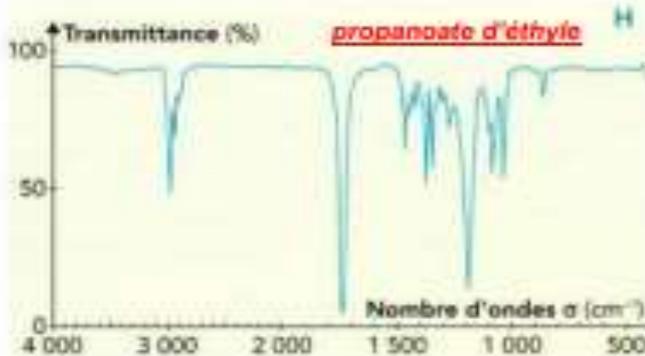
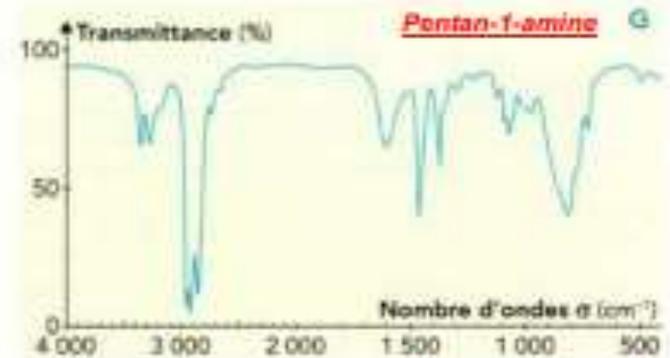
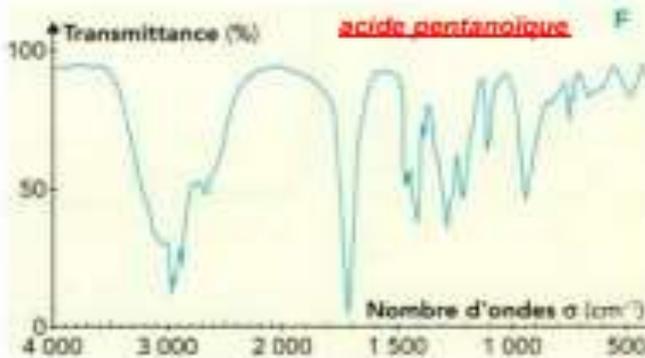
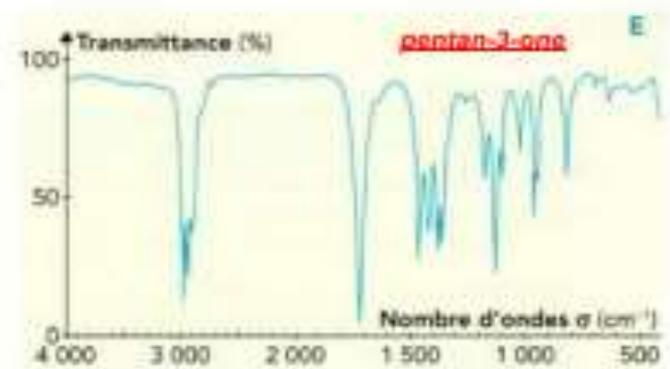
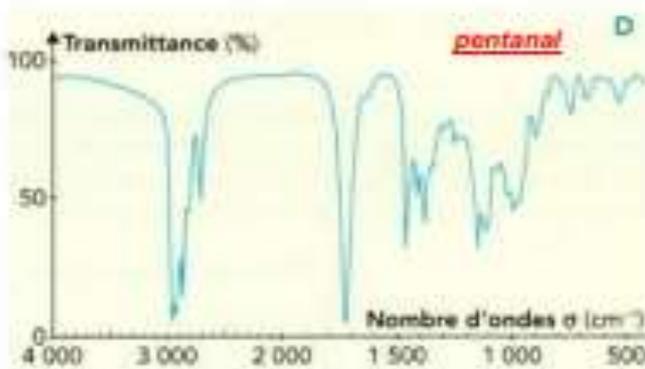
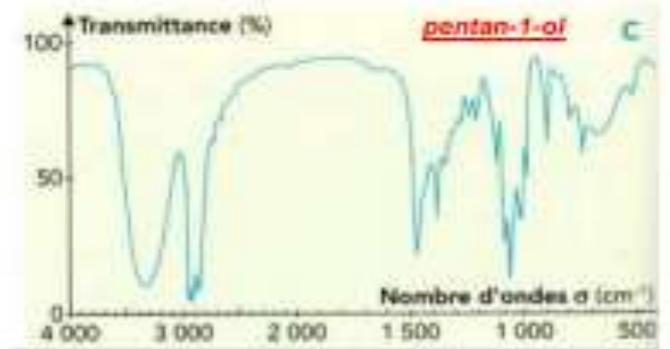
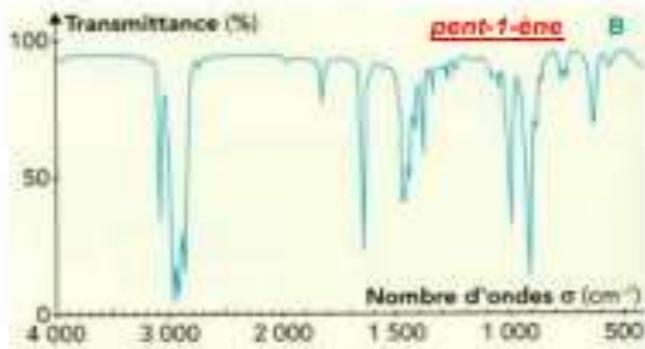
Données : $m_C = 2,00 \times 10^{-26} kg$; $m_H = 1,67 \times 10^{-27} kg$; $k = 490 N \cdot m^{-1}$; $c = 3,00 \times 10^8 m \cdot s^{-1}$

Le domaine des infrarouges correspond à des longueurs d'onde comprises entre 800 nm et 1 mm.

Spectroscopie Infrarouge et groupes caractéristiques

TP N° 05 : Reconnaissance des groupes caractéristiques

Les documents ci-dessous présentent les spectres infrarouges de diverses molécules :



Questions :

1. Ecrire la formule développée de ces huit molécules. Nommer la famille organique à laquelle elles appartiennent et entourer leur groupe caractéristique.

2. Repérer, dans le spectre de chaque composé, la bande d'absorption relative à la liaison $C_{tét}-H$.

Entourer la bande et légénder. On pourra utiliser un code couleur.

3. Dans quels spectres doit-on retrouver une bande d'absorption relative :

- à la liaison $C=O$? La repérer dans chacun des spectres sélectionnés.

- à la liaison $O-H$? La repérer dans chacun des spectres sélectionnés.

- à la liaison $N-H$? La repérer dans chacun des spectres sélectionnés.

4. Dans le spectre du pentanal, une autre bande d'absorption est repérable. A quel nombre d'onde est-elle située ? A quelle liaison correspond-elle, sachant que la signature de la liaison $C-C$ se trouve dans la zone de l'empreinte digitale ? La repérer dans le spectre.

5. Dans le spectre du pent-1-ène, deux autres bandes d'absorption sont repérables. A quel nombre d'onde sont-elles situées ? A quelles liaisons correspondent-elles ? Les repérer dans le spectre.

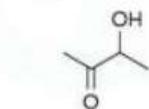
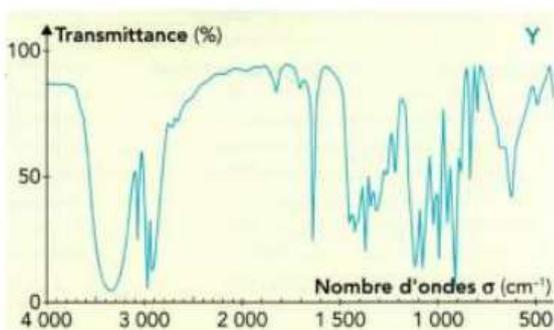
6. Dans le spectre du propanoate d'éthyle, une fine bande est également visible dans la zone de l'empreinte digitale. La repérer dans le spectre. A quelle liaison correspond-elle ?

7. Compléter le tableau ci-dessous en indiquant le nombre d'onde des bandes d'absorption relatives aux liaisons que vous venez de repérer.

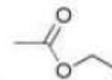
Liaison	$C=O$	$O-H$ (alcool)	$O-H$ (acide carboxylique)	$N-H$	$C-O$ (Ester)	$C=C$	$C_{tét}-H$	$C_{tri}-H$ (alcène)	$C_{tri}-H$ (aldéhyde)
σ (cm^{-1})									

Identification d'un composé

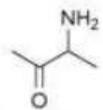
Le spectre ci-dessous correspond à l'un des quatre composés suivants :



J 3-hydroxybutanone



K Éthanoate d'éthyle



L 3-aminobutanone



M Pent-4-èn-2-ol

Question :

A quel composé le spectre Y correspond-il ? Justifier soigneusement la réponse.

Spectroscopie Infrarouge et groupes caractéristiques

TP N° 06 : Application

A l'aide d'un spectrophotomètre-ATR, obtenir des spectres Infrarouge de Transformée de Fourier (IRTF) des composés suivant :

- Acide carboxylique, Alcool, Ester, Composé aromatique.

Types de vibration

L'absorption d'une radiation IR aura pour effet de faire vibrer la molécule en modifiant les angles et les longueurs des liaisons. On distingue deux modes de vibrations : vibrations d'élongation (ou allongement) et vibration de déformation.

1) Vibration d'élongation ν (Stretching)

Elles ont lieu lorsque deux atomes se rapprochent ou s'éloignent périodiquement le long de leur axe commun.

On a deux possibilités de vibration d'élongation : symétrique et asymétrique.

2) Vibration de déformation δ (bending)

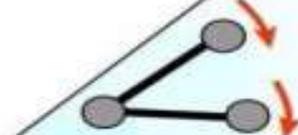
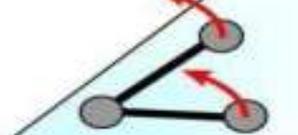
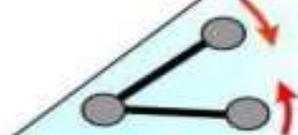
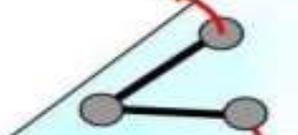
Elles correspondent à des modifications de l'angle de liaison. Différents types de vibration sont possibles : dans le plan et hors du plan.

Remarque :

Les vibrations d'élongation se produisent à des nombres d'onde élevés.

Les vibrations de déformation sont observées vers les faibles nombre d'onde.

Différents types de vibrations :

vibrations d'allongement (stretching)	vibrations de déformation (bending)	
	dans le plan	hors du plan
 symétrique	 bascule (rocking)	 balancement (wagging)
 asymétrique	 cisaillement (scissoring)	 torsion (twisting)

Questions :

- 1- Décrire le montage et le principe de fonctionnement de spectrophotomètre infrarouge utilisé.
- 2- Interpréter les spectres soigneusement en se référant aux connaissances pris lors du TP 04 et 05.