

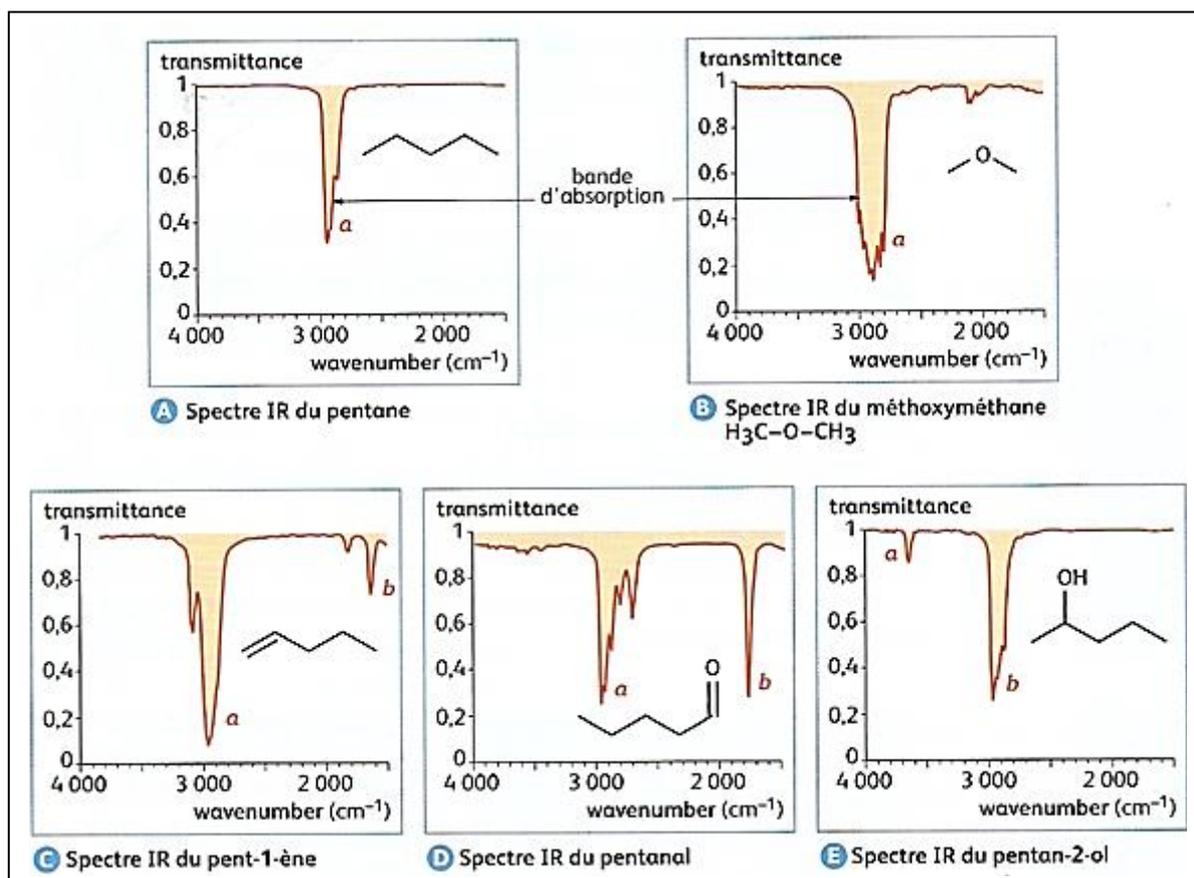
SPECTROSCOPIE INFRAROUGE

Les rayonnements infrarouges ont été découverts en 1800 par l'astronome William Herschel. Au 19^{ème} siècle, de nombreux physiciens se sont intéressés à leur interaction avec la matière mais ce n'est qu'à la fin des années 1930 que l'intérêt de cette technique d'analyse pour la chimie organique fut perçu pour l'amélioration des carburants, des caoutchoucs de pneus et la synthèse de médicaments comme la pénicilline . . .

Cette technique qui permet l'analyse aussi bien des solides, des liquides que des gaz trouve aujourd'hui des applications dans l'industrie : contrôle de qualité dans l'agroalimentaire, recherche de polluants dans l'atmosphère, identification d'espèces chimiques synthétisées en laboratoire . . .

I) REPRÉSENTATION D'UN SPECTRE IR :

Tout comme la spectroscopie UV-visible, la spectroscopie IR est une spectroscopie d'absorption (voir annexe 1). Voici quelques exemples simplifiés de spectres IR :



- Q1.** Que représentent ces graphiques ?
Q2. En quoi diffèrent-ils des spectres UV - visibles ?
Q3. Quelle est la particularité de l'axe des abscisses ?

Le **nombre d'onde**, noté σ , est l'inverse de la longueur d'onde λ .

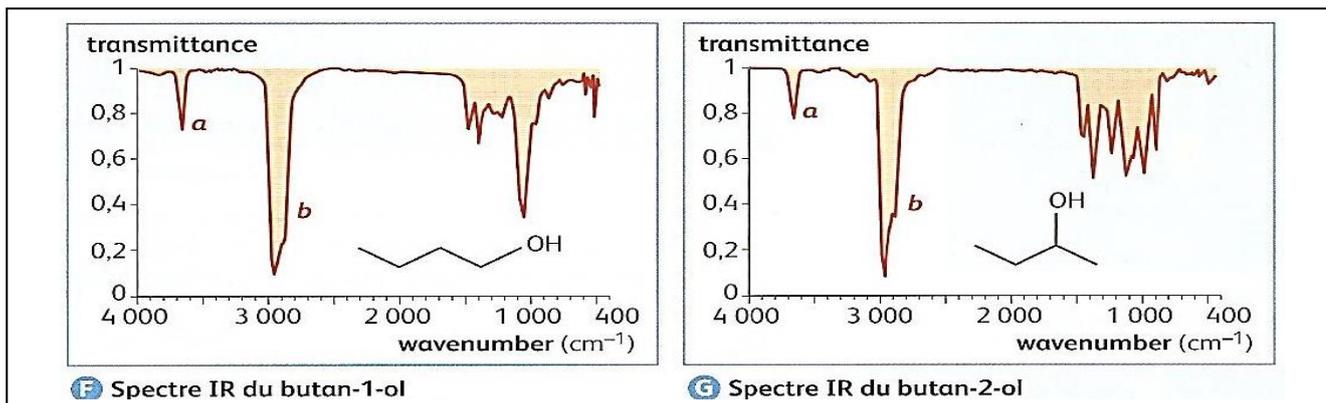
- Q4.** Vérifier que les spectres ont bien été réalisés à des longueurs d'onde appartenant au domaine de l'infrarouge.
Q5. Dans quel sens est orientée la bande d'absorption sur le spectre IR ?

En spectroscopie IR, chaque bande d'absorption est caractéristique d'une liaison particulière .

Q6. Identifier la nature de la liaison responsable de la bande d'absorption commune à tous les spectre précédents ? Expliquer votre raisonnement.

Q7. Dédurre de la comparaison des spectres les valeurs approchées des nombre d'onde caractéristiques des absorptions relatives aux liaisons C = O, C = C et O—H. Vérifier vos valeurs en vous aidant du document 2.

2) SPECTRES IR DE DEUX ALCOOLS ISOMÈRES (EN PHASE GAZEUSE) :



Q8. Rappeler la définition de l'isométrie. De quel type d'isométrie s'agit-il ici ?

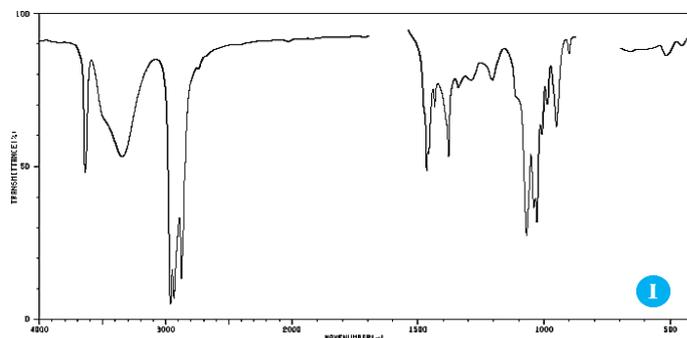
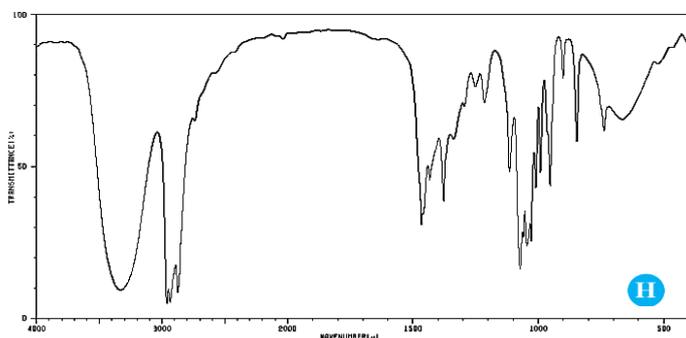
Q9. Comparer les spectres F et G. Quelles sont leurs points communs et leurs différences.

Q10. Comparer les avec le spectre simplifié E. Qu'observez-vous ?

Q11. Un spectre IR peut-il suffire à déterminer la structure d'une molécule ?

3) INFLUENCE DE L'ÉTAT PHYSIQUE SUR LE SPECTRES IR D'UN ALCOOL :

Voici les spectres infrarouges du butan-1-ol en phase liquide (H) et dans le solvant apolaire CCl₄ (I) :



Q12. Les transmittances sont exprimées en pourcentage. Que signifie une transmittance de 100% ? De 0% ?

Q13. En comparant les spectres F, H et I, dire quelle est l'influence de l'état physique de l'échantillon sur la bande d'absorption attribuée à la liaison O—H.

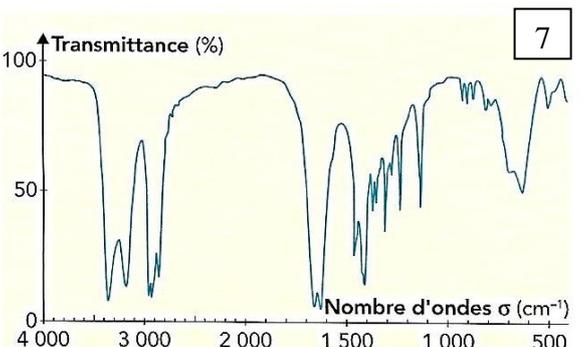
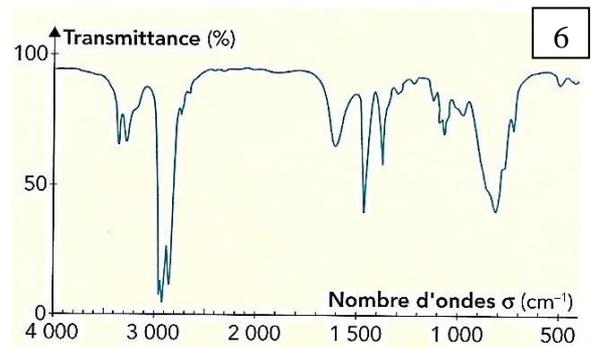
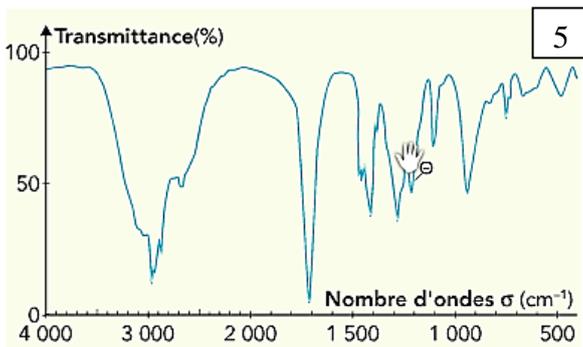
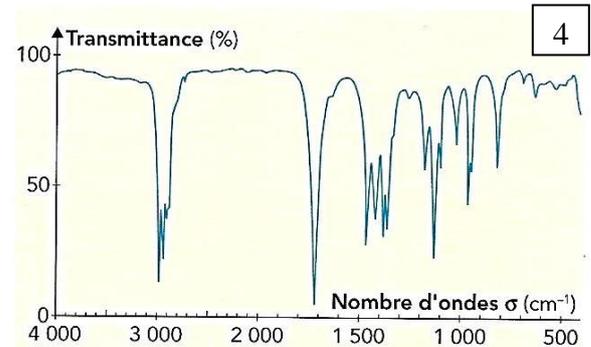
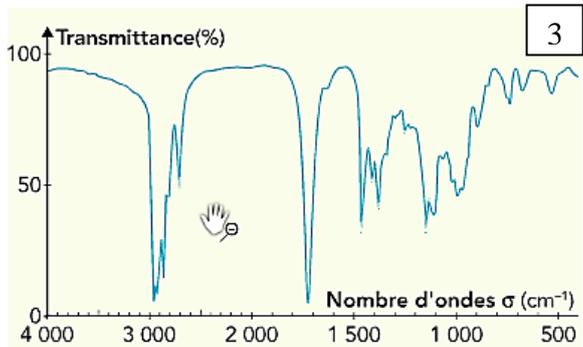
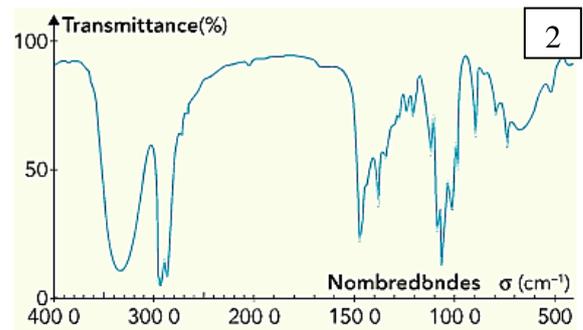
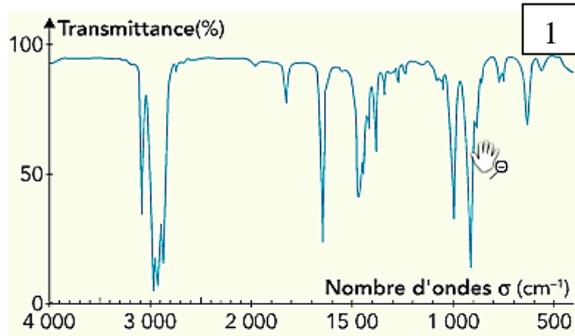
Q14. Quelle interaction, présente en phase condensée mais pas en phase gazeuse, pourrait être à l'origine de ce phénomène ?

4/ ENTRAÎNEZ-VOUS :

Associez chacune des molécules suivantes à son spectre IR (justifier) :

Molécules : - pentan-1-ol - acide pentanoïque - pentan-3-one - pent-1-ène
 - pentanal - pentan-1-amine - pentanamide

Spectres :

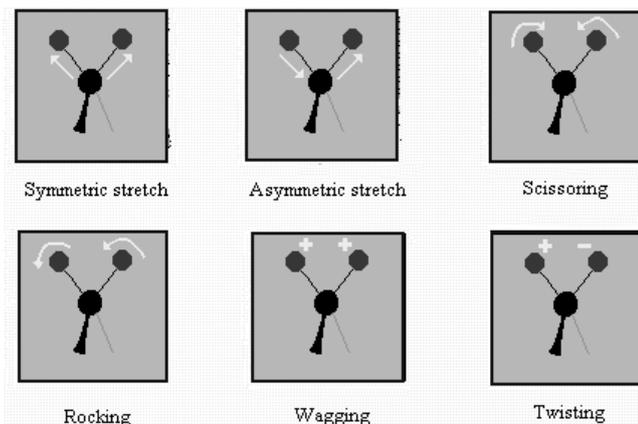


Document 1 : Fonctionnement simplifié de la spectroscopie IR

Les ondes électromagnétiques interagissent avec les liaisons covalentes de la molécule. Pour cette raison la spectroscopie IR permet de repérer la présence de certaines liaisons et d'en déduire les groupes caractéristiques présents dans la molécule.

Pourquoi l'espèce chimique absorbe les IR? Les atomes de la molécule peuvent se déplacer dans toutes les directions. Par exemple les atomes du groupe CH₂ peuvent vibrer de 6 manières différentes : étirements (stretching), symétrique et anti symétrique, cisaillement (scissoring), bascule (rocking), agitation hors du plan (wagging) et torsion (twisting).

A chaque vibration correspond une énergie. Lorsque les IR correspondant à cette énergie interagissent avec l'espèce chimique, ils sont absorbés, leur transmittance est alors faible.



Document 2 : table de données spectroscopiques IR

Type de liaison	Nombre d'onde en cm ⁻¹	Largeur de la bande	Intensité de l'absorption	Remarques
O-H d'un groupe hydroxyle en phase gazeuse	3 590 – 3 650	fine	moyenne	
O-H d'un groupe hydroxyle en phase condensée	3 200 – 3 400	large	forte	se superpose à la précédente
N-H en phase gazeuse	3 300 – 3 500	fine	(très) faible	double bande si l'atome d'azote est lié à deux atomes d'hydrogène
N-H en phase condensée	3 100 – 3 300	large	forte	
C-H	2 900 – 3 100	variable (bandes multiples)	moyenne à forte	jusqu'à 2 700 cm ⁻¹ pour le C(=O)-H d'un aldéhyde
O-H du groupe carboxyle	2 500 – 3 200	large	moyenne à forte	se superpose aux C-H
C=O d'un ester	1 735 – 1 750	fine	forte	
C=O d'un groupe carbonyle	1 700 – 1 740	fine	forte	bande abaissée d'environ 20 cm ⁻¹ si la double liaison C=O est conjuguée à une autre double liaison
C=O d'un acide carboxylique	1 700 – 1 725	fine	forte	
C=O d'un amide	1 650 – 1 700	fine	forte	
C=C	1 620 – 1 690	fine	moyenne	bande abaissée d'environ 20 cm ⁻¹ si la double liaison C=C est conjuguée à une autre double liaison
N-H	1 560 – 1 640	fine	forte	pour un amide, cette bande se superpose presque à celle de la liaison C=O
empreinte de la molécule	< 1500			nombreuses bandes dont l'interprétation est complexe