

## TP n°19 : Spectroscopie Infrarouge et groupes caractéristiques

### Compétences travaillées :

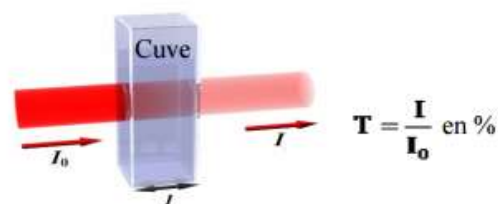
- ★ Associer un groupe caractéristique à une fonction dans le cas des alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique, ester, amine et amide ;
- ★ Utiliser le nom systématique d'une espèce chimique organique pour en déterminer les groupes caractéristiques et la chaîne carbonée ;
- ★ Exploiter un spectre IR pour déterminer des groupes caractéristiques à l'aide de tables de données ou de logiciels.

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 ?

## I. Description et origine d'un spectre infrarouge

### 1) Présentation

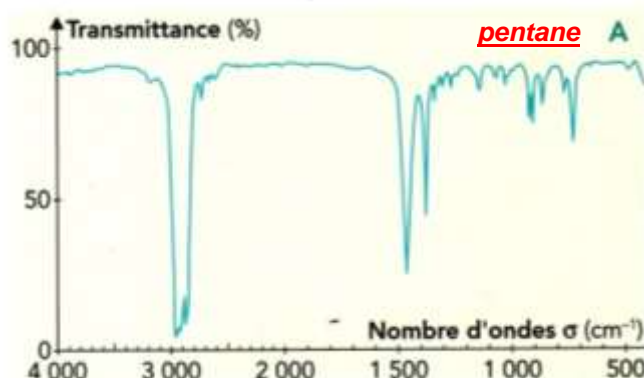
Pour réaliser le spectre infrarouge d'une espèce chimique, on fait traverser à travers un échantillon de cette espèce un faisceau infrarouge monochromatique et on mesure l'intensité lumineuse transmise par cet échantillon.



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  $\sigma$  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% ?
5. En déduire pourquoi les bandes d'absorption pointent vers le bas.

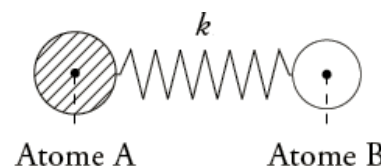


### 2) Interprétation

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  $\nu_0$  appelée « **fréquence propre de vibration** » de la liaison.



- 📖 Lire le vocabulaire disponible à la fin de l'énoncé de TP puis regarder la vidéo disponible à l'adresse <https://www.youtube.com/watch?v=DDTIJglh86E> puis répondre aux questions suivantes.

#### 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  $\nu_0$  qui est donnée par la relation :

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

Avec  $\mu$  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<sub>tét</sub>-H.
6. Cette radiation appartient-elle bien au domaine des infrarouges ?
7. Calculer, en  $cm^{-1}$ , le nombre d'onde  $\sigma_0$  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.*

### 3) Conclusion

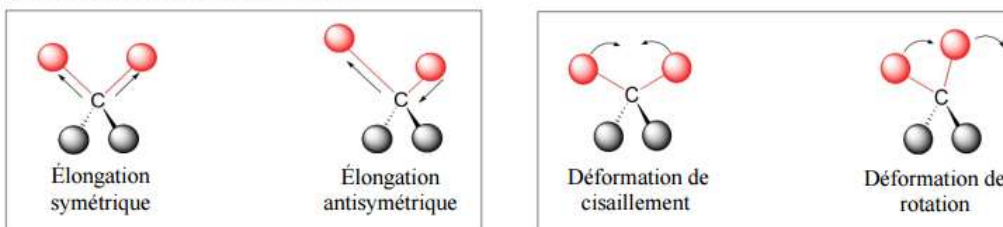
Le spectre infrarouge d'une espèce chimique est le tracé de la \_\_\_\_\_ (en \_\_\_\_\_) en fonction du \_\_\_\_\_ (en \_\_\_\_\_) de l'onde monochromatique incidente. Ce nombre d'onde est l'\_\_\_\_\_ de la \_\_\_\_\_ du rayonnement :  $\sigma =$

A chaque \_\_\_\_\_ présente dans la molécule étudiée susceptible d'entrer en \_\_\_\_\_ correspond une \_\_\_\_\_ sur le spectre qui est située à un \_\_\_\_\_ bien déterminé.

On distingue deux modes fondamentaux de vibration :

- La vibration d'\_\_\_\_\_ (stretching) : variation de la \_\_\_\_\_ des liaisons
- La vibration de \_\_\_\_\_ (bending) : variation des \_\_\_\_\_ entre les liaisons

**Exemple** : la molécule CH<sub>4</sub> (méthane)

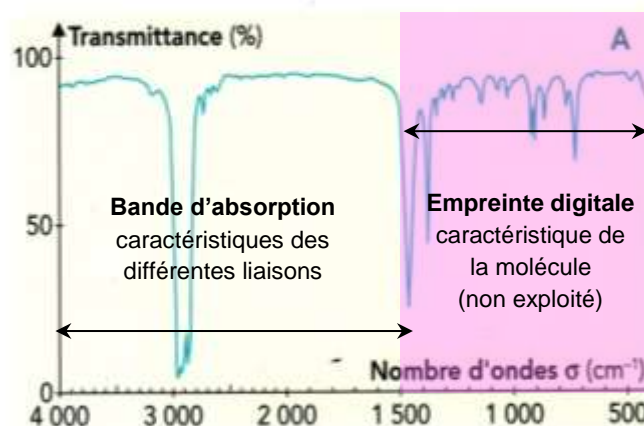


Un spectre infrarouge renseigne ainsi sur la nature des \_\_\_\_\_ présentes dans une molécule et donc sur ses \_\_\_\_\_.

La zone de balayage se fera pour  $\sigma$  compris entre \_\_\_\_\_ et \_\_\_\_\_  $cm^{-1}$  (infrarouge moyen) environ. On distingue deux domaines sur un spectre IR:

- La région qui correspond aux \_\_\_\_\_ valeurs de  $\sigma$  (\_\_\_\_\_): nous y trouvons les bandes caractéristiques des liaisons couramment rencontrée dans les molécules (C=O, C=C, C-H, O-H, N-H...). C'est la partie à étudier : elle permet \_\_\_\_\_

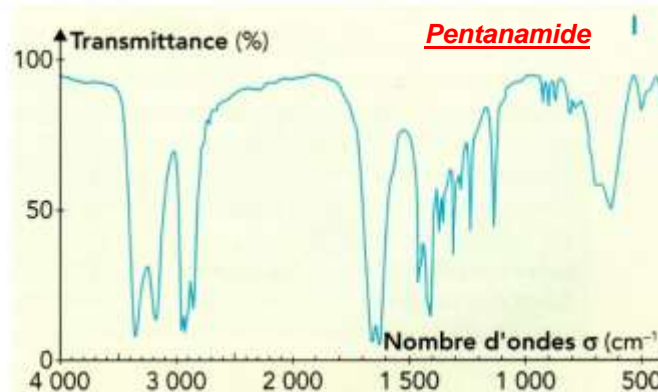
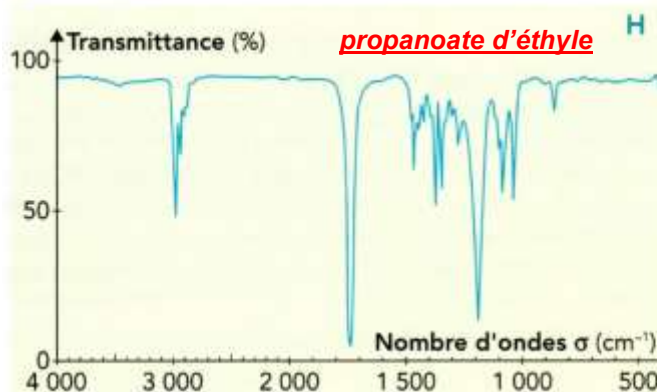
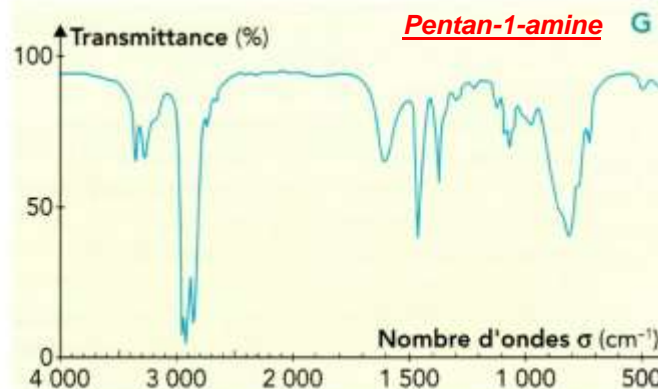
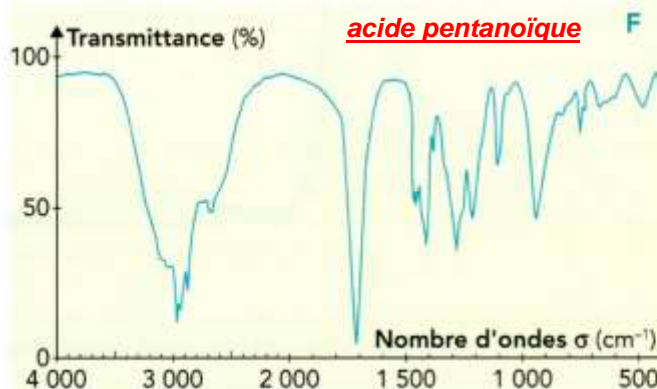
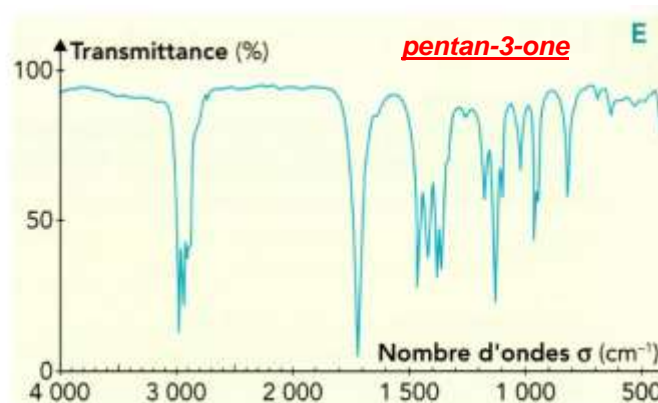
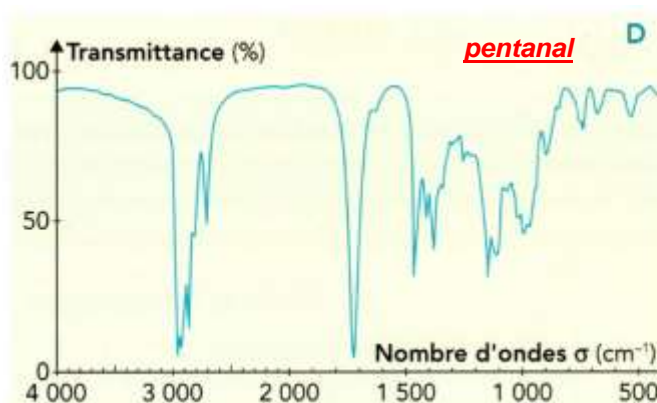
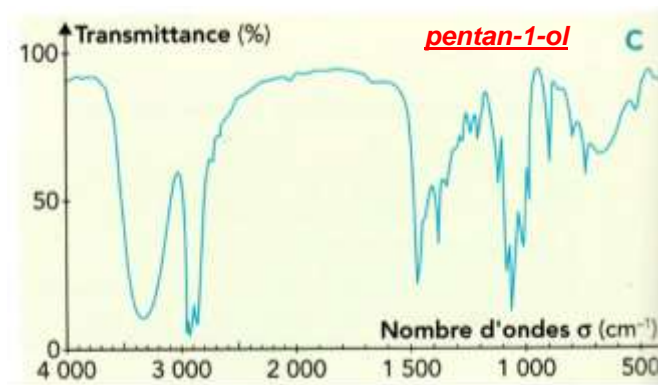
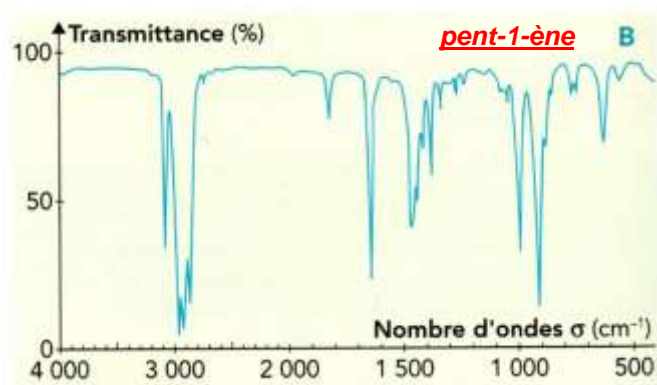
- La région qui correspond aux \_\_\_\_\_ valeurs de  $\sigma$  (\_\_\_\_\_), qui est caractéristique du composé et non seulement des fonctions présentes. Cette partie du spectre est très difficile à analyser, elle est appelée \_\_\_\_\_



## II. Interprétation d'un spectre infrarouge

### 1) Reconnaissance des groupes caractéristiques

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



#### Questions :

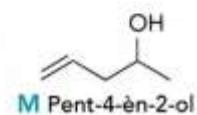
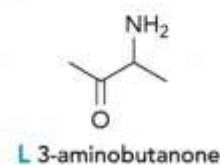
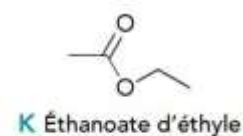
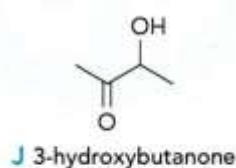
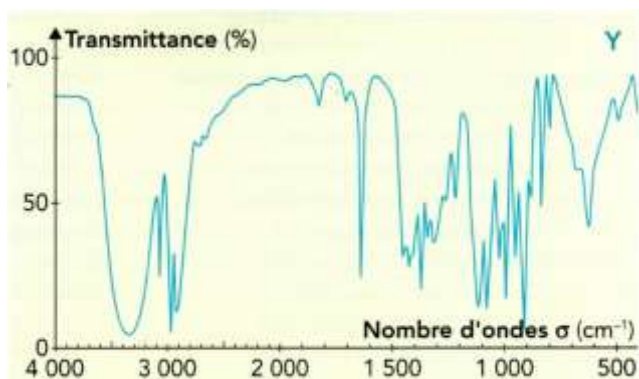
1. Ecrire la **formule développée** de ces huit molécules. Nommer la famille organique à laquelle elles appartiennent et entourer leur groupe caractéristique.

- Repérer, dans le spectre de chaque composé, la bande d'absorption relative à la liaison C<sub>tét</sub>-H. Entourer la bande et légénder. On pourra utiliser un code couleur.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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 ?
- 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 <sub>tét</sub> -H	C <sub>tri</sub> -H (alcène)	C <sub>tri</sub> -H (aldéhyde)
$\sigma$ (cm <sup>-1</sup> )									

## 2) Identification d'un composé

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



### Question :

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

## VOCABULAIRE

Bond : liaison

Spring : ressort

Sample : échantillon

Compound : composé

Chemists : chimistes

Infrared : Infrarouge

Wavenumbers : nombres d'onde

Beam : rayon

Splitter : séparateur

Holder : support

Fingerprint : empreinte digitale