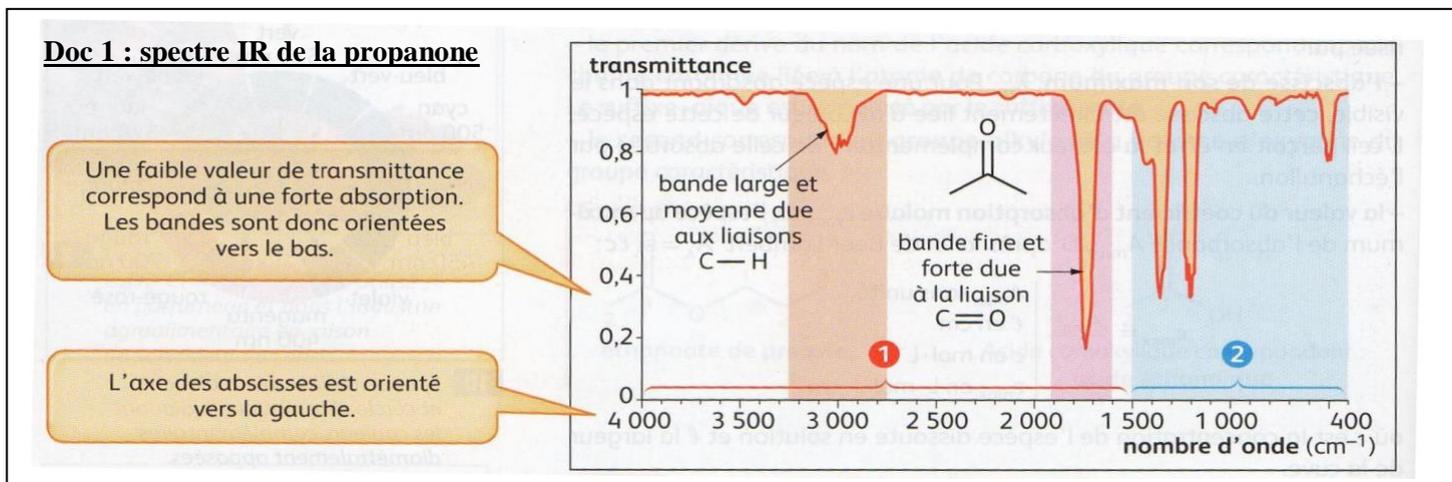


Activité : Principe de la spectrométrie Infra Rouge.

Voici un exemple de spectre infrarouge (doc.1), celui de la propanone $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$ en phase gazeuse. Un spectre infrarouge renseigne sur la nature des liaisons présentes dans la molécule.



Allure du spectre :

On représente en ordonnée la **transmittance** T , ou intensité lumineuse transmise par l'échantillon à analyser (en %) et en abscisse le **nombre d'onde** σ (exprimé en cm^{-1}), inverse de la longueur d'onde λ : $\sigma = \frac{1}{\lambda}$

On distingue deux zones

- Une première zone **1** correspondant aux plus grandes valeurs de σ ($\sigma > 1400 \text{ cm}^{-1}$) où apparaissent les bandes d'absorption caractéristiques de certaines liaisons contenues dans la molécule étudiée.
- Une seconde zone **2** pour laquelle $\sigma < 1400 \text{ cm}^{-1}$, appelée « empreinte digitale » de la molécule et très difficile à interpréter et souvent inexploitable.

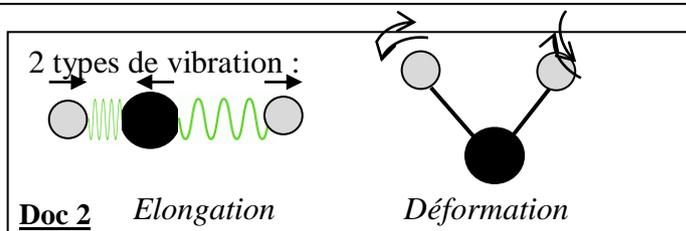
Origine du spectre :

Quand une lumière IR traverse une molécule certaines liaisons et groupes chimiques de la molécule absorbent de l'énergie et se mettent à vibrer.

Il existe des **vibrations d'élongation** et des **vibrations de déformation** (voir doc.2)

Les vibrations des liaisons sont donc à l'origine des bandes d'absorption dans le spectre.

La position des bandes d'absorption dans le spectre va dépendre de la nature de la liaison mise en jeu.



Doc.3 : Bandes d'absorption caractéristiques de quelques liaisons chimiques (+rabat du livre)

Liaison	Nombre d'ondes σ (cm^{-1})	Intensité ⁽¹⁾	Liaison	Nombre d'ondes σ (cm^{-1})	Intensité ⁽¹⁾
O—H _{libre} ⁽²⁾	3580-3650	F; fine	C=O _{ester}	1700-1740	F
O—H _{lié} ⁽²⁾	3200-3400	F; large	C=O _{aldéh. cétone}	1650-1730	F
N—H	3100-3500	M	C=O _{acide}	1680-1710	F
C _{tri} —H ⁽³⁾	3000-3100	M	C=C	1625-1685	M
C _{tri} —H _{aromat.} ⁽⁴⁾	3030-3080	M	C=C _{aromat.}	1450-1600	M
C _{tét} —H ⁽⁵⁾ élongation	2800-3000	F	C _{tét} —H déformation	1415-1470	F
C _{tri} —H _{aldéhyde}	2750-2900	M	C _{tét} —O	1050-1450	F
O—H _{acide carb.}	2500-3200	F; large	C _{tét} —C _{tét}	1000-1250	F

(1) L'intensité traduit l'importance de l'absorption : F : forte ; M : moyenne.

(2) O—H_{libre} : sans liaison hydrogène ; O—H_{lié} : avec liaison hydrogène.

(3) C_{tri} : correspond à un carbone trigonal (engagé dans une double liaison).

(4) **aromat.** : désigne un composé avec un cycle aromatique comme le benzène ou ses dérivés.

(5) C_{tét} : correspond à un carbone tétragonal (engagé dans quatre liaisons simples).

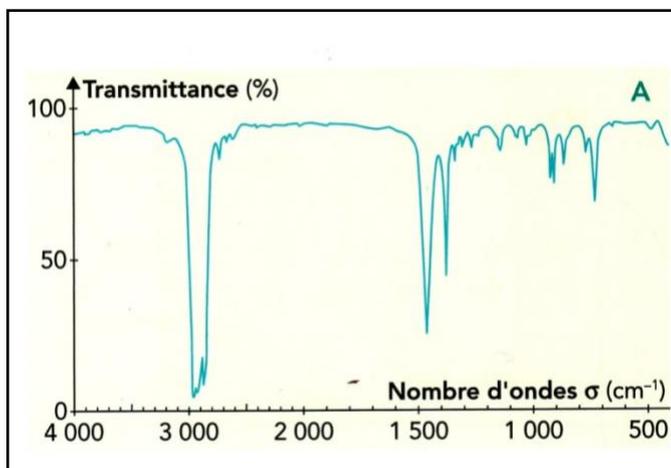
I. Analyse du spectre du pentane :

Le doc.4 ci-contre représente le spectre IR du pentane.

1. A partir de l'observation de ce spectre, justifier l'appellation spectre « infrarouge ». (On rappelle que le domaine IR correspond à des longueurs d'onde comprises entre 800 nm et 1 mm).

Dans la suite de cette activité, on se limitera à l'étude des spectres IR dans la zone $\sigma > 1300 \text{ cm}^{-1}$.

2. Que signifie une transmittance de 100 % ? Une transmittance de 0 % ? Justifier alors pourquoi les bandes d'absorption d'un spectre IR pointent vers le bas.



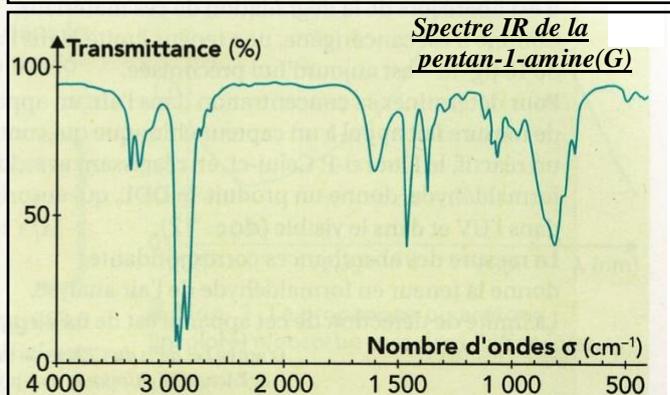
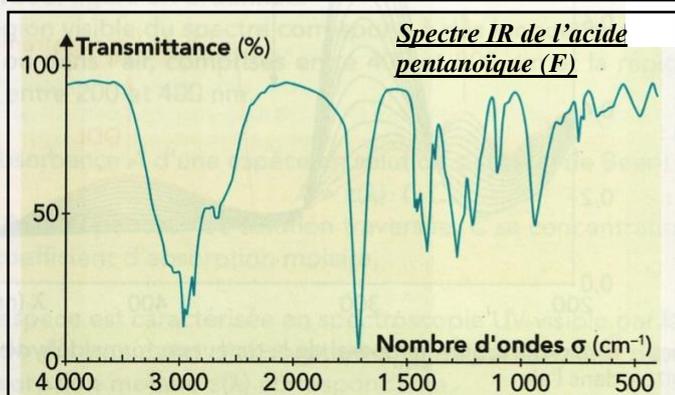
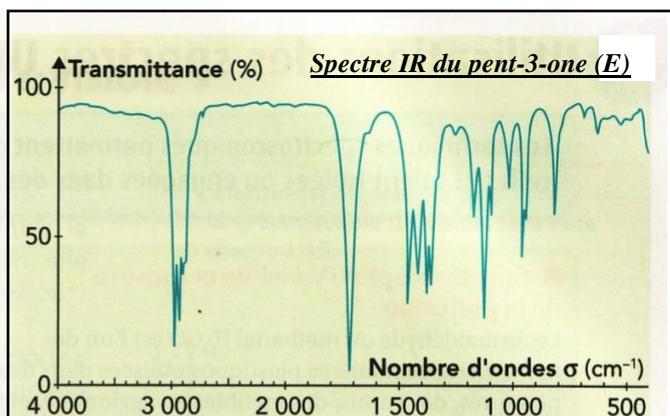
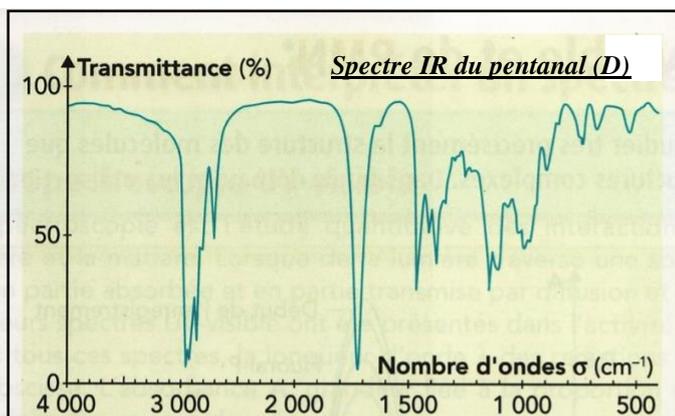
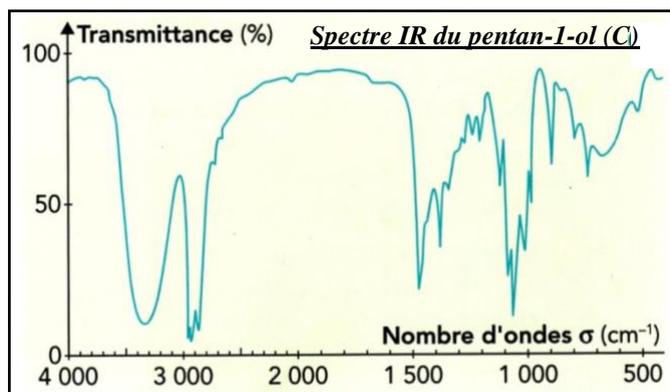
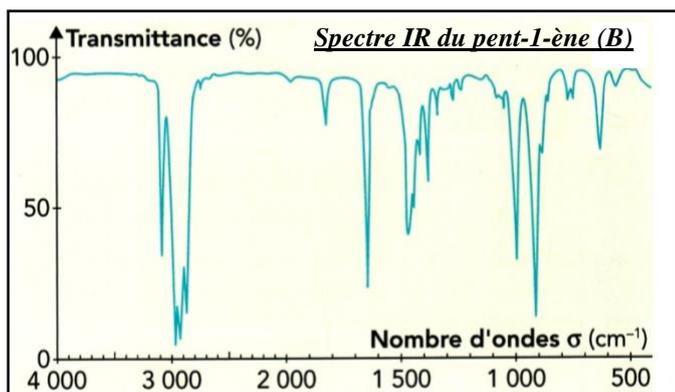
Doc 4 : spectre IR du pentane (A)

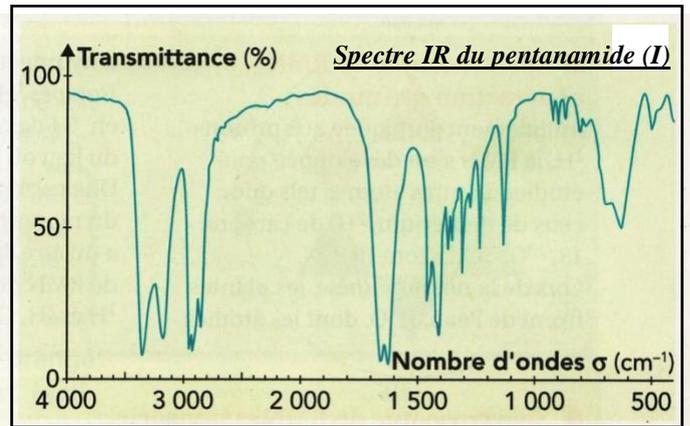
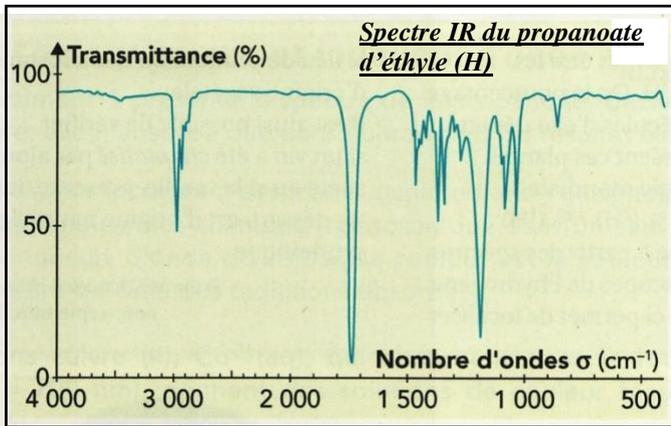
3. Étude de la molécule de pentane :

- a) Donner la formule semi-développée du pentane. Combien de type de liaisons différentes sont présentes dans la molécule ?
- b) La bande d'absorption relative à la liaison C–C est pour une valeur de σ comprise entre 1000 à 1250 cm^{-1} . Cette bande est-elle visible sur le spectre du pentane ? Pour quelle raison ?
- c) En utilisant les doc.2 et 3., expliquer finalement la présence de deux bandes caractéristiques dans le spectre du pentane (doc.4) pour un seul type de liaison.

II. Reconnaissance de groupes caractéristiques :

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

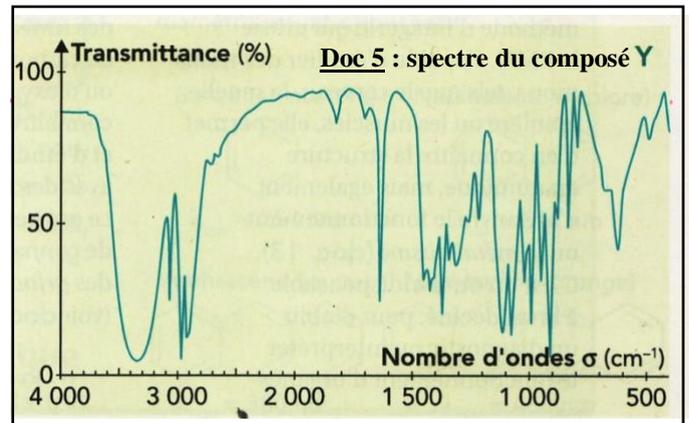
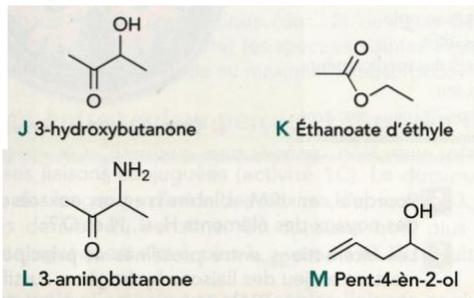




- Écrire la formule semi-développée de chacun de ces huit composés, nommer la famille de la molécule et entourer le groupe caractéristique.
- A l'aide du document 3, repérer dans le spectre de chaque composé les bandes d'absorption relatives aux principales liaisons. Écrire sur la bande la liaison responsable de l'absorption.

III. Identification d'un composé :

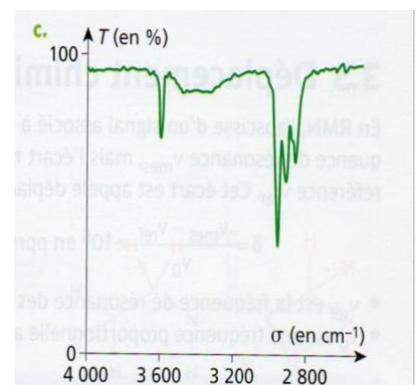
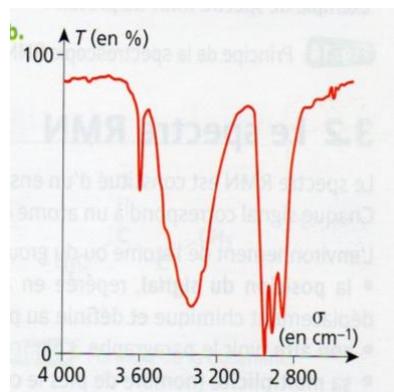
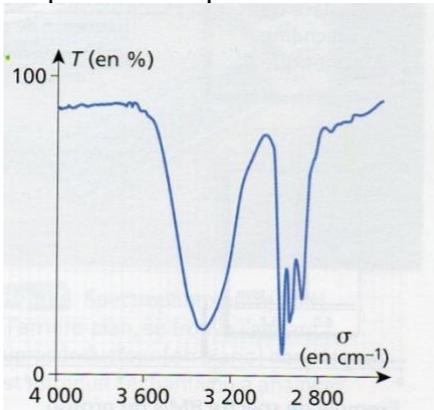
Le document 5 fournit le spectre de l'un des quatre composés suivants :



- A quel composé le spectre Y correspond-il ?

IV. Cas de la liaison O – H ; liaison hydrogène :

On présente le spectre de l'hexan-1-ol dans 3 conditions différentes :



- Lorsque l'alcool est pur en solution ou légèrement dilué, des liaisons hydrogène se forment. Rappeler ce que sont les liaisons hydrogène.
- Identifier les différentes bandes d'absorption de ces trois spectres, puis expliquer leurs différents aspects. Comment détecter la présence de liaisons intermoléculaires hydrogène O – H (appelé OH lié) dans un liquide contenant des molécules d'alcool ?