

COMMENT EXPLOITER UN SPECTRE IR POUR DETERMINER DES GROUPES FONCTIONNELS?

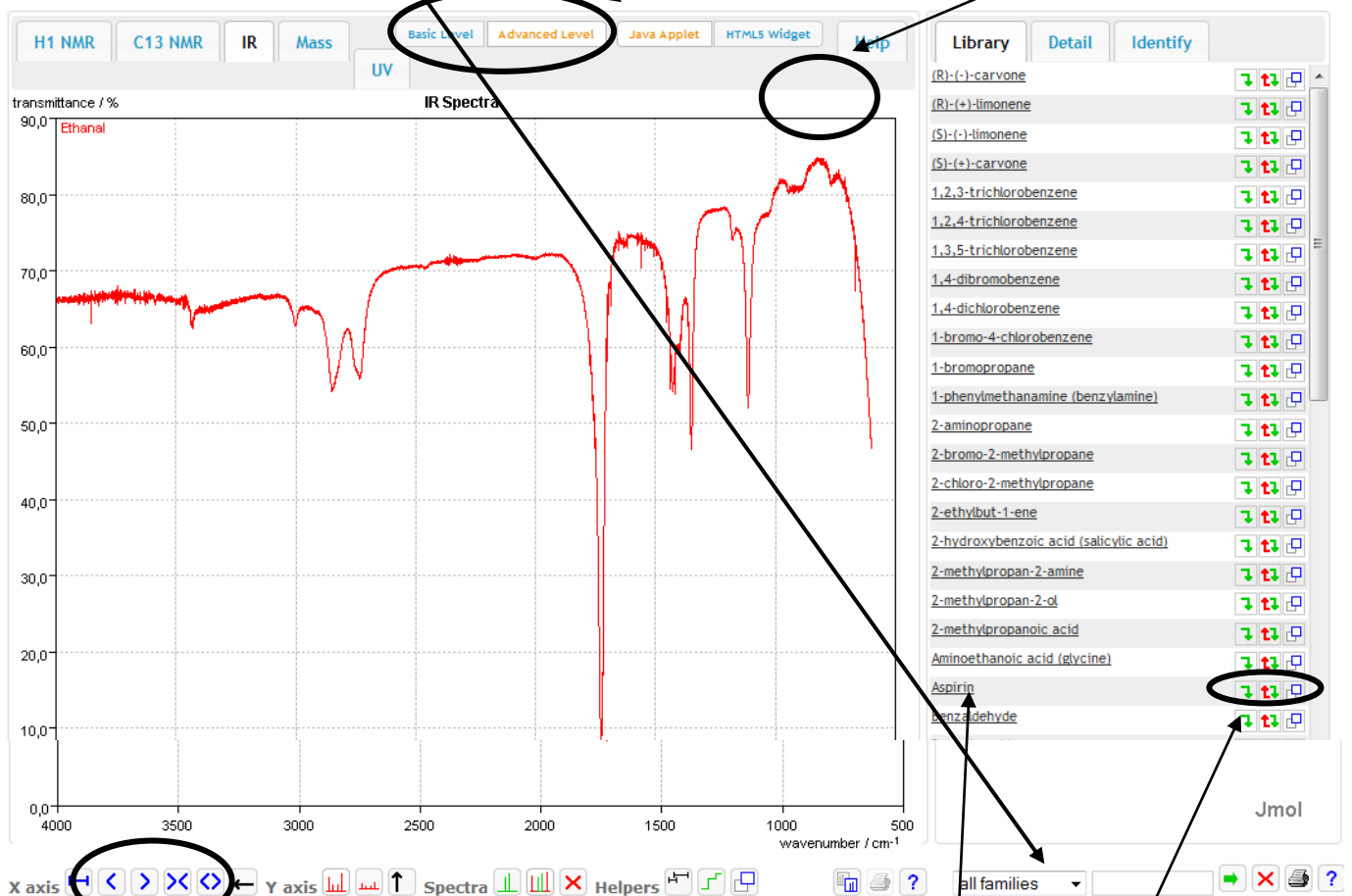
Objectif: se familiariser avec les spectres IR et mettre au point une méthode de repérage des groupes fonctionnels des molécules grâce à leur spectre IR

Les spectres seront visualisés sur ordinateur à partir du lien suivant: <http://spectraschool.rsc.org/> (ou <http://www.le.ac.uk/spectraschool/> pour des informations plus générales) Ce site permet d'accéder à une banque de spectres simulés.

Se connecter au site. Cliquer sur l'onglet IR.

Choisir la molécule dont on désire observer le spectre dans la colonne de droite. (choisir dans *Basic Level* ou *Advanced Level*) ou faire une recherche sur le *nom* ou la *famille*. Le spectre s'affiche sur l'écran.

En déplaçant la souris sur le spectre, un curseur apparaît dont les coordonnées sont indiquées à droite en haut du spectre.



On peut réaliser des zooms sur le spectre grâce aux boutons bleus en bas à gauche.

Pour superposer deux spectres, choisir une nouvelle molécule et cliquer sur la flèche verte.

Un clic sur la flèche rouge permet d'effacer le spectre de la molécule.

Rappel:

Les spectres IR sont principalement utilisés pour déterminer la présence ou non de certaines liaisons, notamment celles présentes dans les groupes caractéristiques. Les bandes et pics d'absorption associés à ces liaisons se situent à des nombres d'onde supérieurs à 1300 ou 1500 cm^{-1} . La région 1300 – 600 cm^{-1} est plus complexe: elle est appelée empreinte digitale. Cette zone est caractéristique de la molécule mais il est en général difficile d'attribuer les pics observés à des groupes d'atomes précis. Elle ne sera pas prise en compte en Terminale.

**COMMENT EXPLOITER UN SPECTRE IR
POUR DETERMINER DES GROUPES FONCTIONNELS?**

1- ALDEHYDE OU CETONE?

1°) a) Donner les formules semi-développées du propanal et de l'éthanal. Préciser à quelle famille ces molécules appartiennent.

b) Faire afficher les spectres superposés du propanal et de l'éthanal.

Le pic intense que les deux spectres ont en commun est le pic caractéristique de la liaison C = O. Préciser son nombre d'onde:

c) Décrire avec précision (nombre de pics et nombre d'onde) le "massif" caractéristique des aldéhydes que les deux spectres ont en commun.

2°) Effacer le spectre de l'éthanal et superposer le spectre de la propanone à celui du propanal..

Indiquer les différences et les similitudes entre les deux spectres pour l'intervalle $[1500 \text{ cm}^{-1}; 3000 \text{ cm}^{-1}]$. Interpréter.

2- MISE EN EVIDENCE DE LA LIAISON HYDROGENE

a) Rappeler ce qu'est une liaison hydrogène.

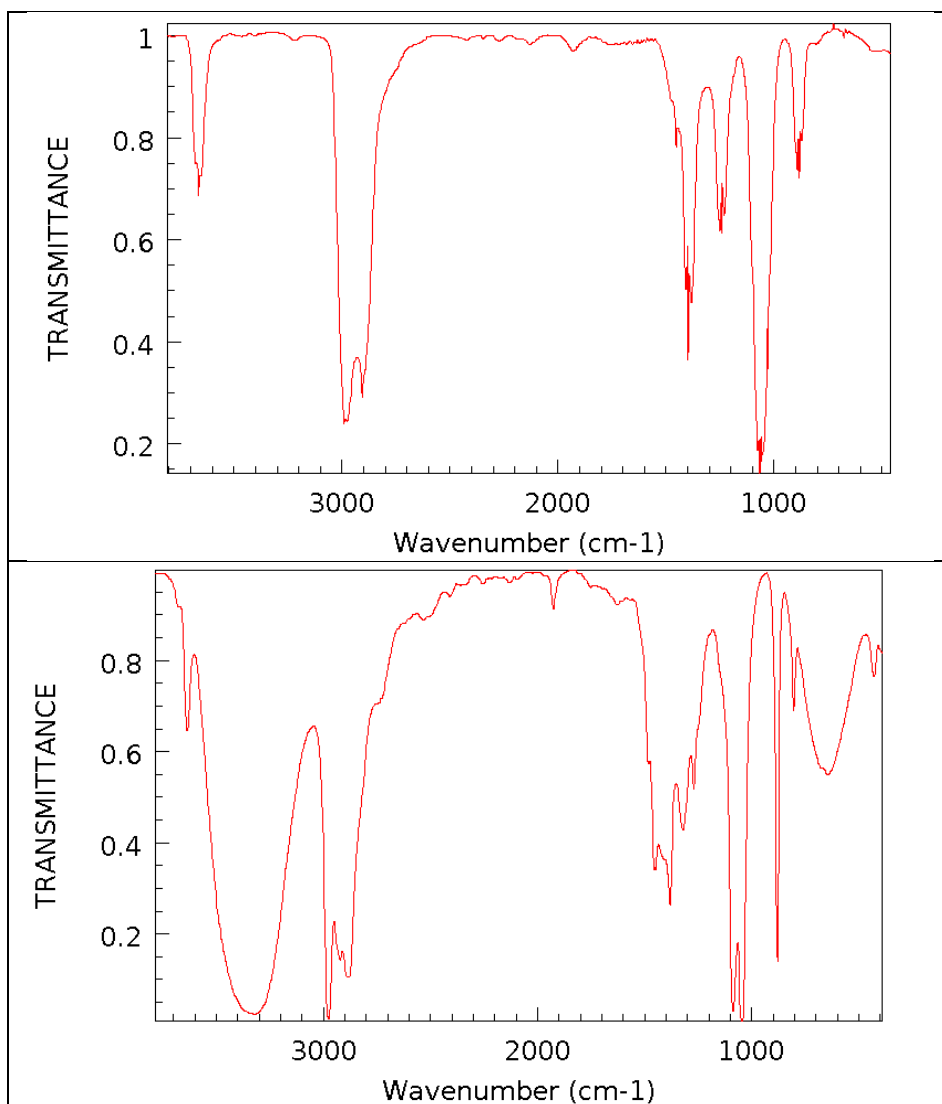
b) Donner la formule semi-développée de l'éthanol.

c) Représenter la liaison hydrogène entre deux molécules d'éthanol à l'état liquide.

d) Au niveau microscopique, quelle est la différence entre l'état liquide et l'état gazeux? Des liaisons hydrogène pourront-elles s'établir entre des molécules d'éthanol en phase gazeuse?

Terminale S

e) A partir des deux spectres ci-dessous, indiquer comment la présence de liaisons hydrogène modifie le spectre IR de l'éthanol.



f) Dans les tables spectroscopiques on trouve:

Liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité
O – H libre	3580 - 3670	F; fine
O – H lié	3200 - 3400	F: large

Expliquer ce que signifie " O – H libre" et " O – H lié".

3- CARACTERISATION DES ACIDES CARBOXYLIQUES

1°) Rappeler le nom et la formule du groupe fonctionnel des acides carboxyliques.

2°) Si on ne considère que les vibrations d'élongation, de combien de bandes ou pics d'absorption va être responsable ce groupe fonctionnel? Justifier.

3°) A l'aide du logiciel *SpectraSchool*, faire apparaître les spectres superposés de l'acide éthanoïque et de l'acide butanoïque (*Basic Level*). Quel pic intense et fin est commun aux deux spectres. Quelle est la liaison à l'origine de ce pic?

4°) Préciser le nombre d'onde moyen de la large bande commune aux deux spectres. Cette bande est due à la liaison O – H du groupe carboxyle. Superposer le spectre d'un alcool et identifier les différences (position, largeur et intensité) avec la bande O – H lié.

5°) En raisonnant sur les "forces" de liaison, montrer que le nombre d'onde associé à la liaison C – O du groupe carboxyle est inférieur à celui associé à la liaison C = O.

Remarque: la liaison C – O est responsable d'un pic autour de 1300 cm^{-1} qui est souvent mélangé avec l'empreinte digitale de la molécule. Observer tout de même que l'on voit ce pic sur les deux spectres précédents.

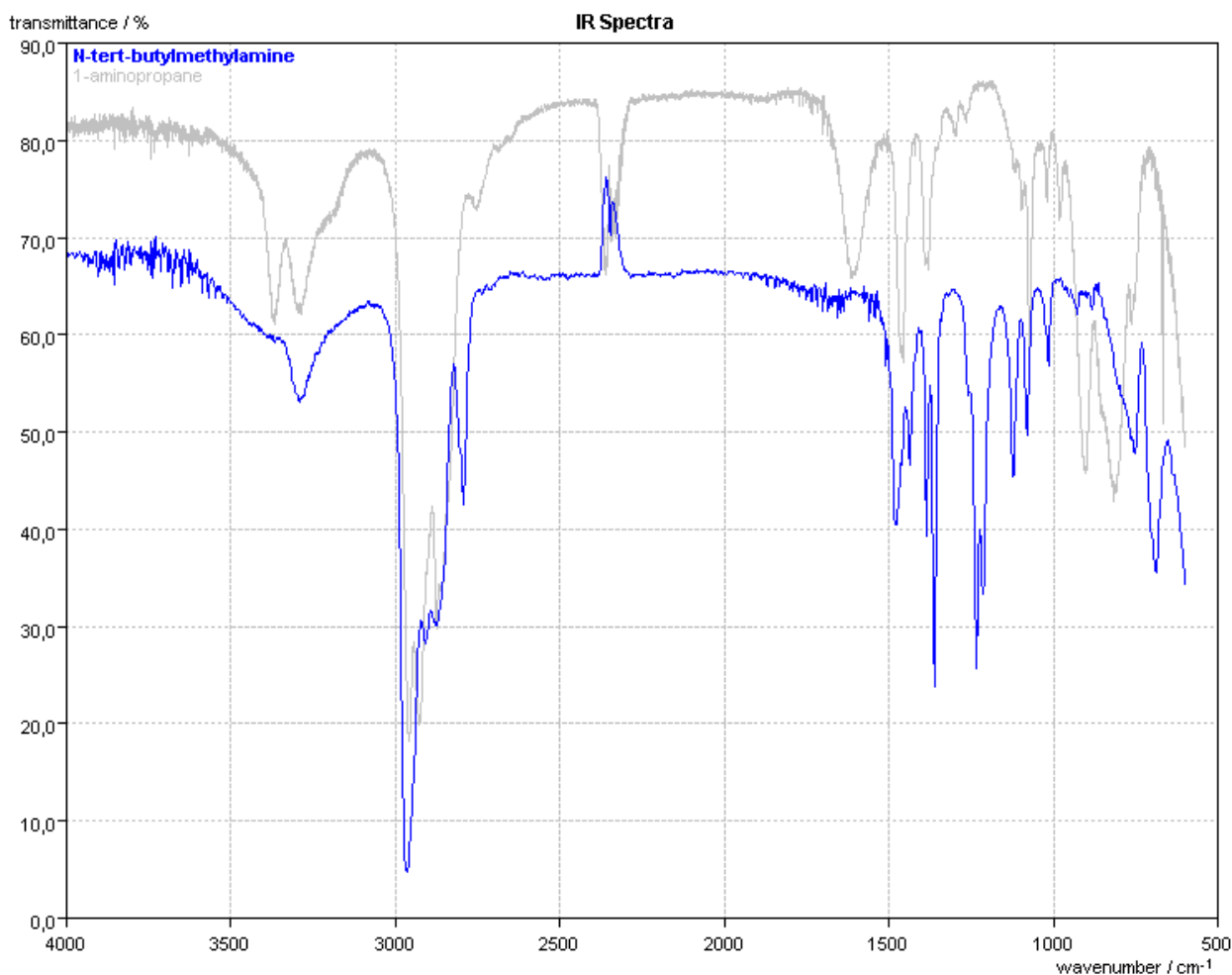
4- AMINE OU AMIDE?

1°) Rappeler les formules générales d'une amine et d'un amide.

2°) A l'aide du logiciel *SpectraSchool*, faire apparaître le spectre du propan-1-amine (ou 1-aminopropane)

Ci après, en superposition les deux spectres du 1-aminopropane et du N-tert-butylméthylamine (*non accessible dans SpectraSchool*)

- i) Donner le nom de cette molécule dans la nomenclature officielle du N-tert-butylméthylamine. Préciser la classe de cette amine.
- ii) Le nombre d'onde associé à la vibration d'élongation de la liaison N – H est supérieur à 3000 cm^{-1} . Indiquer les caractéristiques (intensité et nombre d'onde) du pic d'absorption de la liaison N – H.
- iii) Quelle peut être l'origine du pic intense autour de 3000 cm^{-1} ?



3°) Indiquer les différences entre les deux spectres quant au pic d'absorption de la liaison N – H. Relier ces différences à la classe de l'amine.

Remarque: la liaison N – H possède une vibration de déformation autour de 1600 cm^{-1} . Remarquer que ce pic est bien visible sur le spectre du 1-aminopropane.

4°) Dans *SpectraSchool*, superposer au spectre du propan-1-amine (ou 1-aminopropane) celui du propanamide.

- i) Indiquer et justifier les similitudes entre les deux spectres pour les nombres d'onde supérieurs à 3000 cm^{-1} .

- ii) Les deux spectres présentent un pic autour de 1600 cm^{-1} . Expliquer pourquoi dans le cas du propanamide ce pic ne peut être attribué à une liaison déterminée.

- iii) Conclure quant à la possibilité de différencier des amines et des amides par spectroscopie infrarouge.

