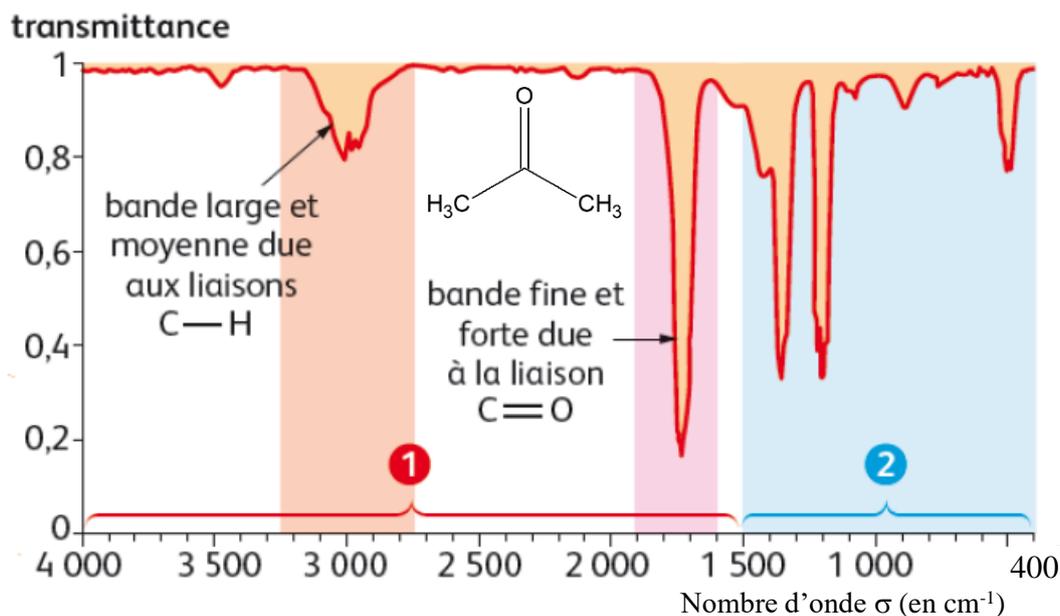


- La spectroscopie IR permet d'identifier la présence de certains types de liaison au sein d'une molécule et d'en déduire la nature des groupes caractéristiques de cette molécule.

I. Principe

- Dans la spectroscopie infrarouge, on observe l'absorption des longueurs d'onde correspondant à l'infrarouge.
- Le spectre infrarouge d'un échantillon est établi en faisant passer un faisceau de lumière infrarouge au travers de cet échantillon. L'examen de la lumière transmise indique la quantité d'énergie absorbée à chaque longueur d'onde.
- La spectroscopie infrarouge exploite le fait que les molécules possèdent des fréquences spécifiques pour lesquelles elles tournent ou vibrent. Voir : https://fr.wikipedia.org/wiki/Spectroscopie_infrarouge

II. Spectre IR de la propanone



1) Quelle est la grandeur représentée sur l'axe des ordonnées ?

Remarque : Cette grandeur s'exprime sans unité ou en %.

2) Quelle est la grandeur avec son unité représentée sur l'axe des abscisses ?

.....

3) Quelle est la particularité de l'axe des abscisses ?

.....

4) Le nombre d'onde σ correspond à l'inverse de la longueur d'onde λ .

Donner la relation mathématique entre σ et λ :

Si le nombre d'onde est exprimé en cm^{-1} , quelle est l'unité utilisée pour la longueur d'onde λ ?

5) Vérifier que le spectre concerne bien le domaine des infrarouges.

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

III. Comment utiliser un spectre IR ?

- Les spectres IR sont constitués de bandes d'absorption : chaque bande est associée à un type de liaison.
- Dans les spectres représentant la transmittance en fonction du nombre d'onde, les bandes sont orientées vers le bas :

6) A quoi correspond un grand pic orienté vers le bas en termes de transmittance et d'absorption ?

.....

- On distingue deux zones dans un spectre IR :

Zone numérotée (1) sur le spectre de la propanone : $1500 \text{ cm}^{-1} < \sigma < 4000 \text{ cm}^{-1}$

- Ne contient qu'un nombre limité de bandes caractérisant des liaisons particulières.

Pour interpréter chaque bande, il faut relever :

- Sa position : valeur du nombre d'onde correspondant au minimum de transmittance
- Sa largeur : large ou fine
- Son intensité (d'absorption) : faible, moyenne, forte (forte = faible transmittance)

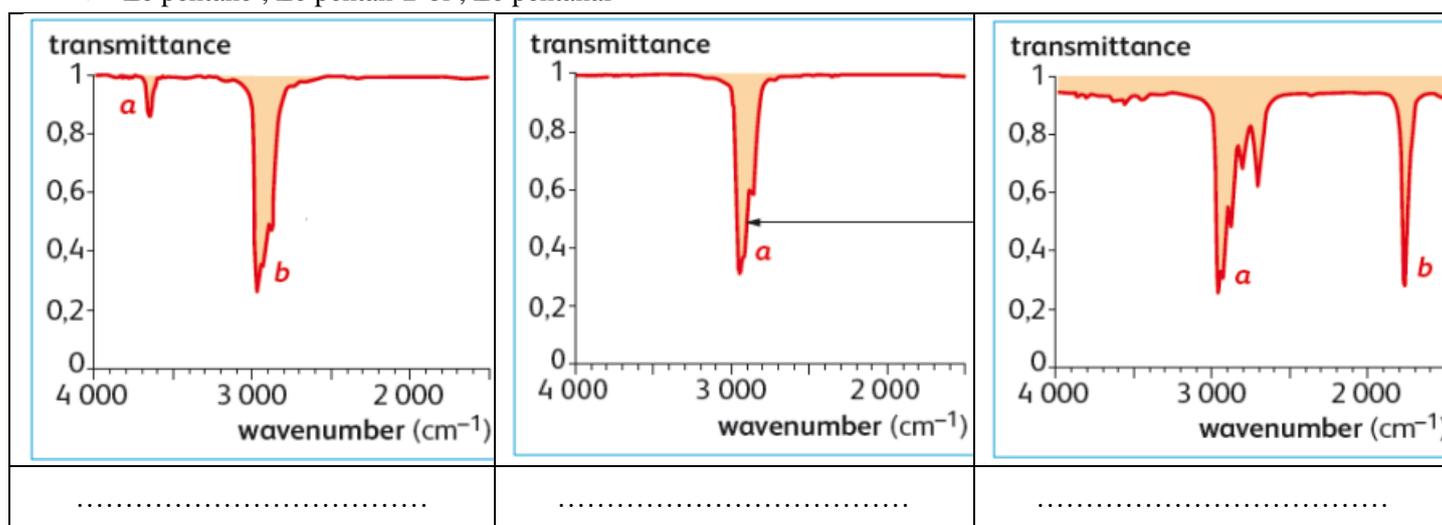
Annexe : table spectroscopique IR simplifiée

Famille	Type de liaison	Nombre d'onde (cm^{-1})	Largeur de bande	Intensité
alcool	-OH en phase gazeuse	3580-3670	fine	Forte
	-OH en phase condensée	3200-3400	large	Moyenne
alcane	C-H	2850-2980	Variables bandes multiples	Forte
aldéhyde	C-H	2750-2900	Fine	Forte
	C=O	1650-1730	Fine	Forte
cétone	>C=O	1650-1730	Fine	Forte
acide carboxylique	-OH	2600-3200	Large	Forte
	C=O	1680-1710	Fine	Moyenne

Phase condensée : liquide ou en solution, solide

- Voici les spectres de 3 espèces chimiques en phase gazeuse. Les 3 espèces chimiques sont :

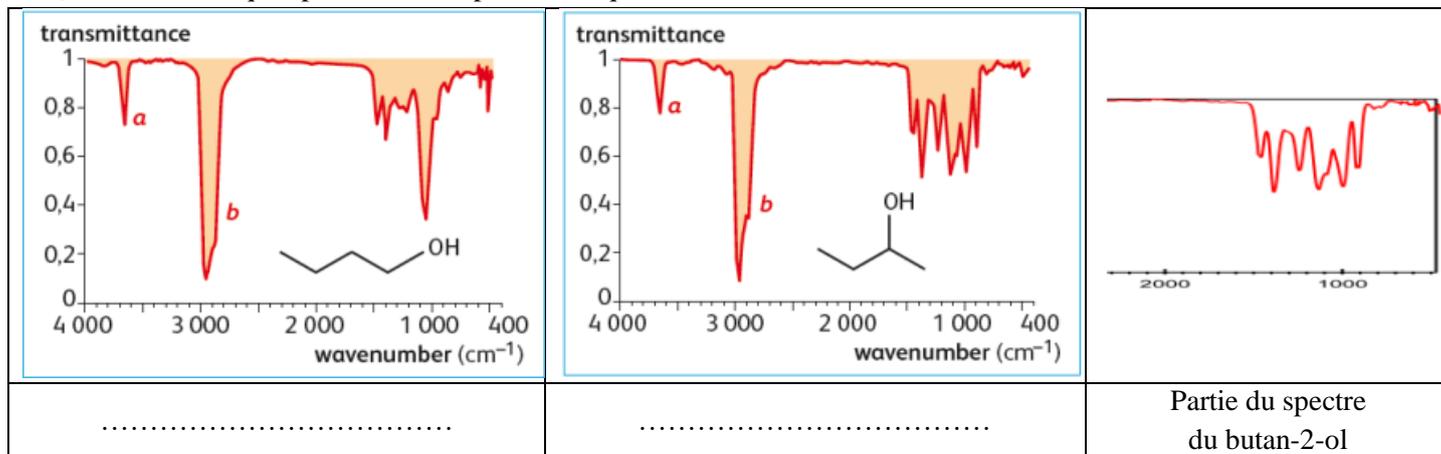
➤ Le pentane ; Le pentan-2-ol ; Le pentanal



7) Attribuer chaque espèce à son spectre.

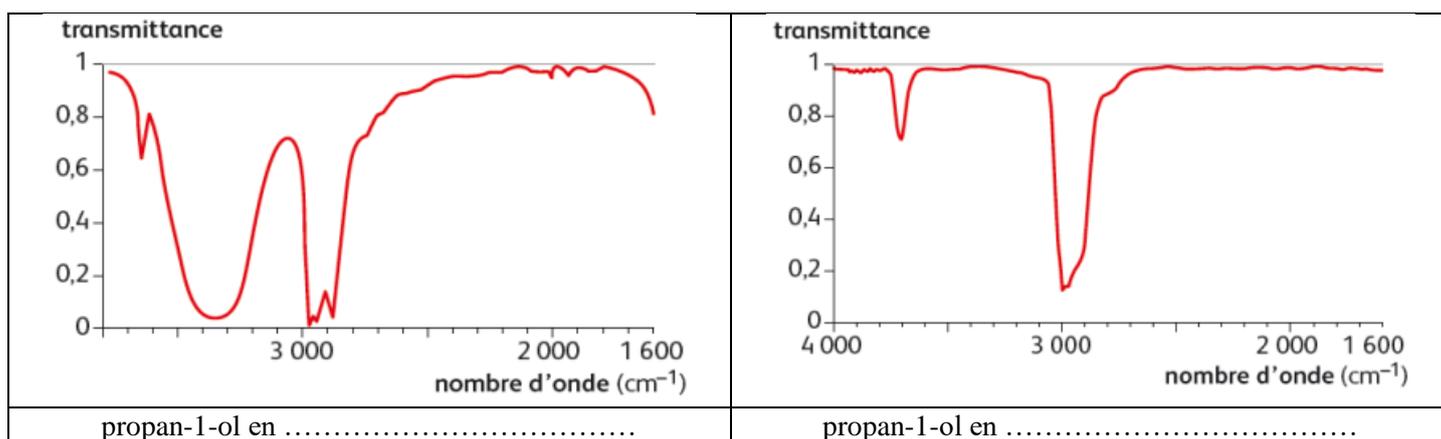
Zone numérotée (2) dans le spectre de la propanone: $400\text{ cm}^{-1} < \sigma < 1500\text{ cm}^{-1}$

- Empreinte digitale de la molécule : Présente de nombreuses bandes d'absorption pour les molécules organiques possédant plusieurs atomes de carbone.
 - N'est généralement exploitée qu'en comparaison avec un spectre de référence.
 - Voici les spectres du butan-1-ol et du butan-2-ol en phase gazeuse.
- 8) Attribuer chaque spectre à son espèce chimique.



Influence de la liaison hydrogène en phase condensée :

- Voici les spectres du propan-1-ol. L'un est réalisé avec du propanol-1 en solution, l'autre en phase gazeuse.



9) Identifier les bandes communes aux deux spectres. Que nous apprennent ces bandes au sujet des molécules ?

.....

10) Quelle différence présentent les deux spectres ? A quoi peut-on attribuer cette différence ?

.....

.....

11) Indiquer dans le tableau précédent le spectre réalisé en phase gazeuse et celui en solution.

Généralisation

- La présence de liaisons hydrogène au sein d'un échantillon est mise en évidence sur un spectre IR par la présence d'une bande très large et très intense (très forte absorption) autour de 3300 cm^{-1} .
- Ces liaisons hydrogène ne peuvent s'établir que lorsque les molécules sont assez proches les unes des autres, en phase condensée et non en phase gazeuse.

