

AD 3 Identification d'une molécule par spectroscopie IR

1. Les spectres représentent l'intensité de l'absorption du rayonnement électromagnétique par une molécule en fonction du nombre d'onde de ce rayonnement.

Décrire les points communs et les différences notables entre les deux spectres (grandeurs représentées en abscisse et en ordonnée, unités, orientation des bandes d'absorption...).

Points communs : **Abscisse :** nombre d'onde σ en cm^{-1} entre 1500 et 4000 cm^{-1}

Ordonnée : transmittance T en %

Un pic vers le bas qui correspond à une absorption à 2900 cm^{-1}

Différence : Un deuxième pic d'absorption pour le deuxième spectre à 1600 cm^{-1} avec une molécule qui présente une double liaison C=C

Nombre d'onde : $\sigma = \frac{1}{\lambda}$ avec $\left\{ \begin{array}{l} \sigma: \text{nombre d'onde (m}^{-1}\text{)} \\ \lambda: \text{longueur d'onde (m)} \end{array} \right.$

Exemple : $\sigma = 2000 \text{ cm}^{-1}$ $\lambda = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{2000} = 5,0 \cdot 10^{-4} \text{ cm} = 5000 \text{ nm}$

5000 nm appartient au domaine de l'IR moyen.

2. En déduire le nombre d'onde caractéristique de la liaison C = C : $\sigma = 1600 \text{ cm}^{-1}$

3. De quoi chaque bande d'absorption est-elle caractéristique ?

Un pic ou une bande d'absorption est caractéristique d'une liaison.

4. Identifier la nature de la liaison responsable de la bande d'absorption commune à tous les

Spectres : La liaison C-H que l'on va retrouver dans toutes les molécules organiques.

La bande est plus intense dans un cycle que dans une liaison linéaire.

5. Compléter le tableau des nombres d'ondes caractéristiques des différentes liaisons chimiques :

Type de liaison	C = C	O - H	C = O	C - H
Nombre d'onde (.....)	1600	3200-3400	1700	2700-3100

6. Montrer que le spectre IR 6 est compatible avec la butanone :
 - Une bande à 3000 cm^{-1} : C-H
 - Une bande à 1700 cm^{-1} : C=O

7. Comparons les spectres IR de deux alcools :

a. A quelle liaison correspond la bande d'absorption a ? La bande a correspond à la liaison O-H.

b. Quelle est l'influence de l'état physique de l'échantillon sur cette bande d'absorption ?

Lorsque l'alcool est en phase gazeuse, la bande est fine et peu intense.

Lorsque l'alcool est en phase liquide, la bande est large et intense.

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

Lorsque l'alcool est à l'état liquide, il existe des liaisons hydrogène. La présence de ces liaisons hydrogène rend la bande caractéristique d'autant plus large et intense.

Synthèse : Un spectre IR possède des bandes d'absorptions associées à un type de liaison.

Chaque bande et caractérisée par :

- Sa position dans le spectre (valeur du nombre d'onde au minimum de transmittance)
- Sa largeur (bande fine ou large)

A l'aide de la description du spectre, on peut en déduire les liaisons présentes dans la molécule.