Activité

Etude de spectres IR-RMN

Analyse spectrale

Observer

1°) EXPLOITATION DE QUELQUES SPECTRES INFRA ROUGE.

Un spectre infrarouge renseigne sur la nature des liaisons présentes dans une molécule et ainsi identifier les groupes caractéristiques présents dans les molécules de ce composé.

Les bandes d'absorption associées à chacune des liaisons rencontrées en chimie organique correspondent à un domaine de nombre d'ondes bien précis.

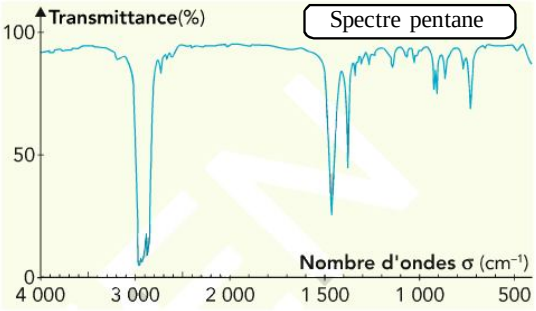
Liaison	–O–H	–N–H	C–H tri	C–H tét	C=O
σ (cm⁻¹)	3 200 à 3 650	3 100 à 3 500	3 000 à 3 100	2 800 à 3 000	1 650 à 1 750

Liaison	C=C	C–H tét	–C–C–	–C–O–
σ (cm⁻¹)	5 35	1 415 à 1 470	1 000 à 1 250	1 050 à 1 450

1.1. INTRODUCTION AUX SPECTRES IR.

1°) Ecrire la formule développée du pentane

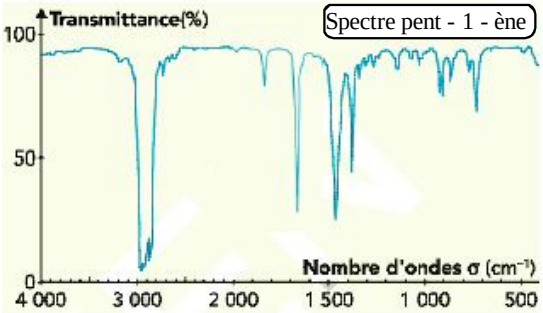
2°) Le spectre du pentane est donné ci-contre. En vous aidant du tableau récapitulatif des valeurs du nombre d'onde en fonction de la nature de la liaison, montrer que ce spectre est en accord avec la structure de la molécule



1.2. DETERMINATION DU NOMBRE D'ONDE D'UNE FONCTION.

3°) Ecrire la formule développée du du pent - 1 - ène. A quelle famille appartient-il ? Pour ce dernier, repérer son groupe caractéristique.

4°) Comparer le spectre du pentane à celui du pent - 1 - ène et compléter le tableau des nombres d'onde en retrouvant le nombre d'onde caractéristique de la double liaison C = C.



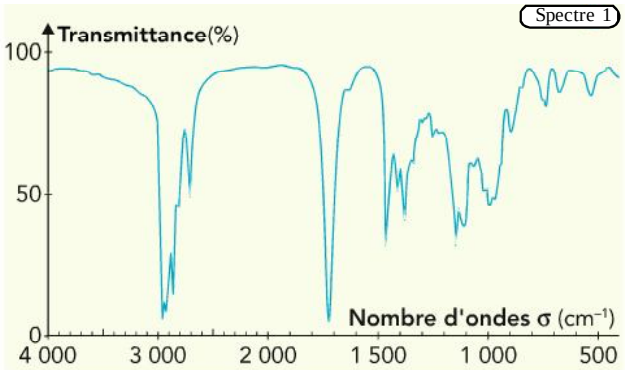
1.3. RECONNAISSANCE DE GROUPES CARACTERISTIQUES.

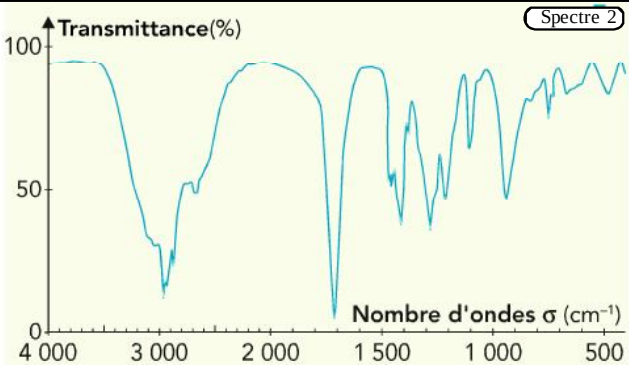
Le document en annexe présente les spectres infrarouge:

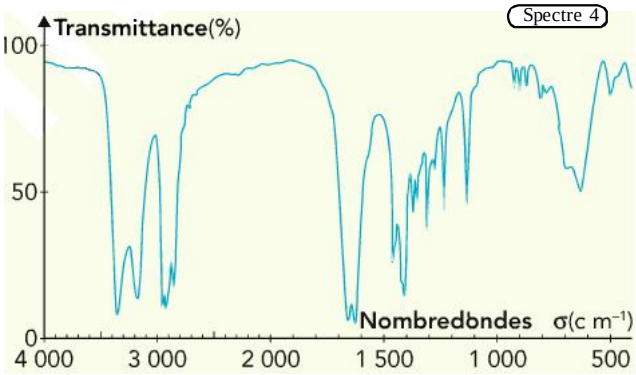
- ❑ pentan - 3 -one
- ❑ pentanal
- ❑ acide pentanoïque
- ❑ propanoate d'éthyl
- ❑ pentanamide
- ❑ pentan - 1 - amine

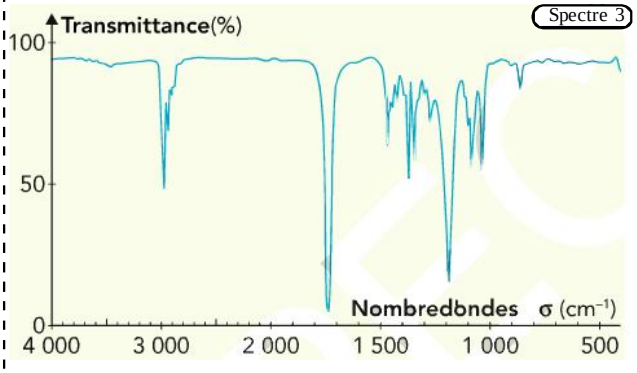
5°) Ecrire la formule développée de chacun de ces six composés et repérer son groupe caractéristique.

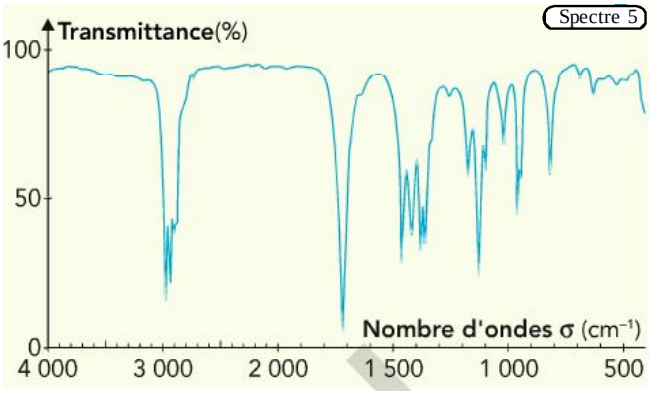
6°) A l'aide du tableau récapitulatif des nombres d'ondes et du spectre du pentane, associer le spectre à chaque molécule.

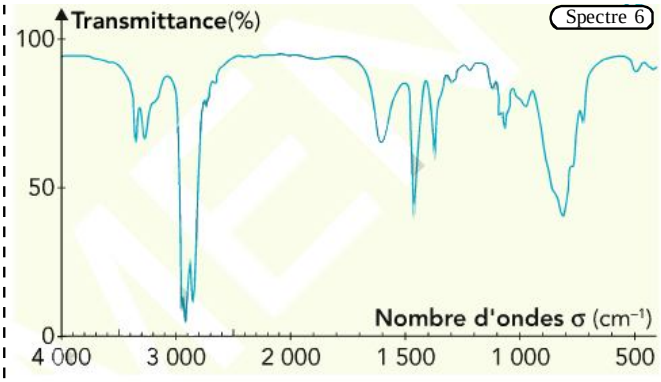










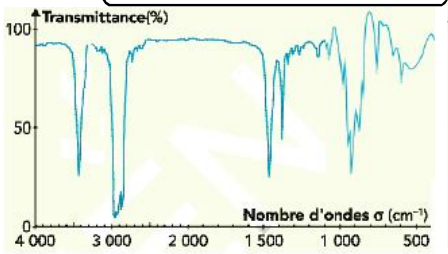


1.4. SPECTRE IR D'ALCOOLS ISOMERES.

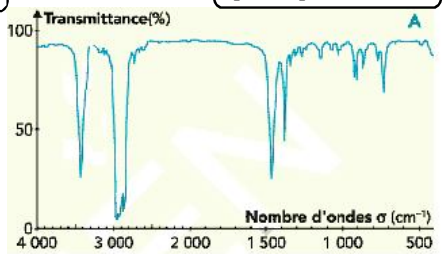
7°) Ecrire la formule développée du 2 - methylbutan - 1 - ol, du pentan - 1 - ol et du pentan - 2 - ol. Quel type d'isomérie lie ces trois molécules ?

On obtient les spectres suivants:

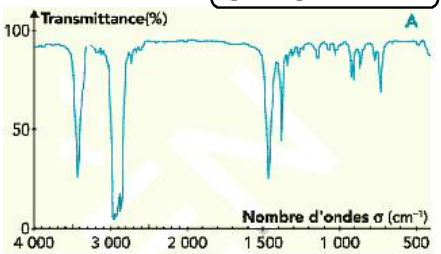
Spectre du 2 - methylbutan - 1 - ol



Spectre pentan - 1 - ol



Spectre pentan - 2 - ol

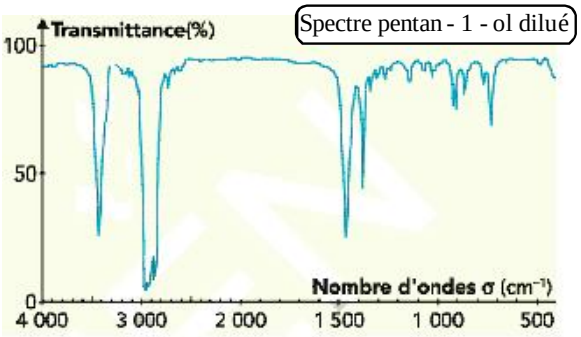


8°) Quels sont leurs points communs et leurs différences ? Par ces 3 exemples, montrer les limites de la spectroscopie par IR.

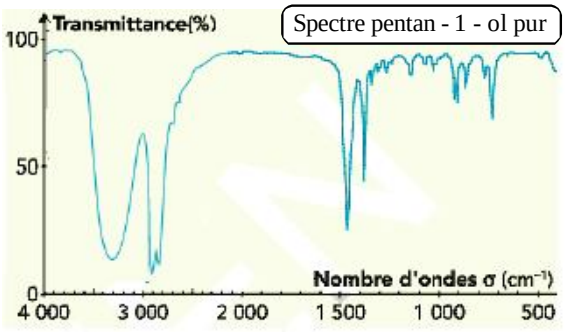
1.5. MISE EN EVIDENCE DE LA LIAISON HYDROGENE

En solution très diluée, c'est-à-dire lorsqu'on dilue l'alcool dans un solvant organique comme le tétrachlorure de carbone CCl_4 (ou bien en phase gazeuse), on obtient le premier spectre. Par contre, en l'absence de solvant, le pentan - 1 -ol pur possède le second spectre.

Spectre pentan - 1 - ol dilué



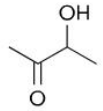
Spectre pentan - 1 - ol pur



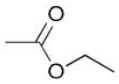
9°) En comparant les deux spectres, dire quelle est l'influence de l'état physique ou de l'état de dilution de l'échantillon sur la bande d'absorption attribuée à la liaison O - H. Quelle interation, présente en phase condensée mais pas en phase gazeuse ou diluée, pourrait être à l'origine de ce phénomène ?

1.6. IDENTIFICATION D'UN COMPOSE

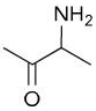
Le document fournit le spectre de l'un des quatre composés suivants:



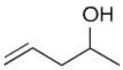
3-hydroxybutanone



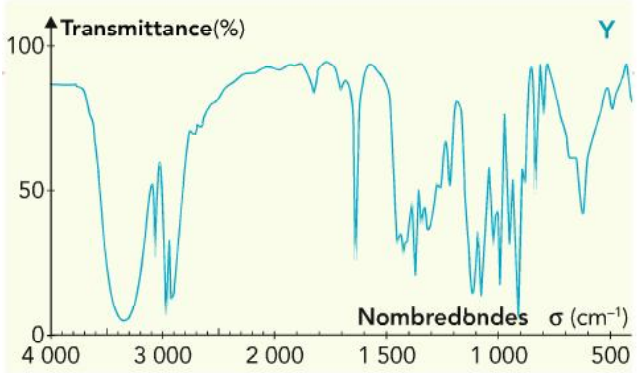
Éthanoate d'éthyle



3-aminobutanone



Pent-4-èn-2-ol



10°) A quel composé le spectre correspond-il ?