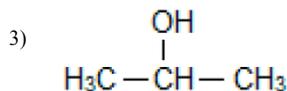
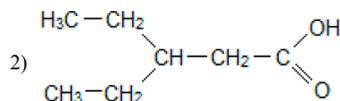
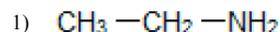


TP : ANALYSE SPECTRALE, L'INFRA ROUGE

PREMIERE PARTIE : NOMENCLATURE ET CLASSE FONCTIONNELLE

Après avoir consulté attentivement l'animation « **molécules organiques** » du site, représenter la *formule topologique* de chacune des molécules. Indiquer leur nom. Entourez les *groupes caractéristiques* et donnez la *classe fonctionnelle* qui leur correspond (leur famille).



DEUXIEME PARTIE : EXPLOITATION DE SPECTRES INFRAROUGE (IR)

Principe de la spectroscopie IR :

Les molécules peuvent subir des mouvements de vibrations qui leur sont propres. Une molécule peut ainsi être le siège d'oscillations de la longueur de liaison (vibration d'élongation) ou/et d'oscillation de l'angle de liaison (vibration de déformation).

On peut "visualiser" ces vibrations grâce au logiciel SPECAMP. Une fois le logiciel ouvert, dans le

bandeau supérieur Spectroscopie IR :  sélectionner .

Choisir alors dans le cadre en bas à gauche le type de vibration à visualiser.

Les rayonnements IR peuvent provoquer ces vibrations pour peu que leurs fréquences correspondent aux fréquences de vibration de la molécule ou d'une partie de la molécule. Les rayonnements correspondant sont alors absorbés par la molécule. L'étude d'un spectre IR permet alors de mettre en évidence les radiations absorbées. Chaque atome des molécules vibre et ces vibrations correspondent aux élongations et aux déformations qui dépendent de la nature des liaisons et donc des groupes caractéristiques présents.

Les bandes d'absorption associées à chacune des liaisons rencontrées correspondent à une intensité et un domaine de nombre d'ondes précis (voir *doc.1*).

Avant de commencer cette partie, téléchargez les fichiers du TP sur le site. Placez le fichier TS-IR.ZIP sur le bureau puis décompressez-le.

Aidez-vous du DOCUMENT 1 pour donner vos réponses.

1) Analyse du spectre IR du pentane

Choisir spectroscopie IR puis Charger un spectre IR, ouvrir le fichier *PENTANE.JDX*

- Que signifie une transmittance égale à 100 % ? Et une transmittance égale à 0 % ? Expliquez pourquoi les bandes d'absorption pointent vers le bas.
- Quelle grandeur figure sur l'axe des abscisses ? Donnez son nom et son unité.
- Quels sont les deux types de liaison que l'on trouve dans la molécule de pentane ?
- Où peut-on les identifier sur le spectre ?

2) Etude de la liaison C=O

- Donnez les formules semi développées des molécules suivantes :

BUTAN-2-ONE, ETHANOATE D'ETHYLE et ACIDE PROPANOÏQUE.

- Dans la barre d'outils supérieure, sélectionnez : *SPECTROSCOPIE IR* puis, *COMPARAISON DE SPECTRES IR* et observez les 3 spectres des molécules ci-dessus. Cliquez sur *NOM DE LA MOLECULE* et en déplaçant le curseur vertical, déterminez à quelle valeur approximative du nombre d'onde se trouve la bande d'absorption de la liaison C=O.

Cette bande d'absorption est-elle plutôt fine ou large? Est-elle de forte, moyenne ou faible intensité?

3) Un alcool

Ouvrez dans SPECAMP le spectre IR du butan-1-ol (gaz).

- Toujours à l'aide du DOCUMENT 1, identifiez les bandes d'absorption relatives aux principales liaisons de la molécule de BUTAN-1-OL.
- Comparez le spectre précédent à celui du BUTAN-1-OL (solution, donc liquide). Quelle est l'influence de l'état physique (liquide ou gaz) sur le spectre IR d'un alcool ? Quels types de liaisons de la molécule sont concernés ?
- Quelle interaction (vue en première S), présente en phase liquide mais pas en phase gazeuse, est à l'origine de ce phénomène ?

4) Identification de molécules

Dans le dossier *TP IR Spectres* sur le bureau vous avez 7 spectres nommés de A à F correspondant aux molécules du tableau en annexe (DOCUMENT 2).

A l'aide du tableau des absorptions caractéristiques des liaisons en spectroscopie IR (DOCUMENT 1), identifier méticuleusement chaque spectre et complétez le tableau (DOCUMENT 2).

Fonction	liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	intensité
alcane	C-H (C tétraédrique)	2850–3000	Forte
alcène	C-H (C trigonal)	3010–3100	moyenne
	C=C	1620–1680	variable
alcool	O-H libre	3500–3700	Forte ; fine
	O-H lié	3200–3600	F ; large
aldéhyde	C=O	1650–1730	Forte
	C-H (C trigonal)	2750–2900	moyenne ; 2 pics
cétone	C=O	1650–1730	Forte
acide carboxylique	C=O	1680–1725	Forte
	O-H	2500–3300	F à m ; large
	C-O	1210–1320	Forte
ester	C=O	1700–1740	Forte
	C-O	1000–1300	2 pics ou plus
amine	N-H	3100–3500	m
	N-H	1560–1640	F ou m
amide	N-H	3100–3500	F
	N-H	1560–1640	F ou m
	C=O	1650–1700	

DOCUMENT 1

Nom	Classe fonctionnelle	Formule topologique	Bandes caractéristiques σ	Spectre
3-méthyl pentan-2-one				
butan-2-ol				
butanamide				
3-méthyl pentanal				
acide propanoïque				
butanoate de méthyle				

DOCUMENT 2