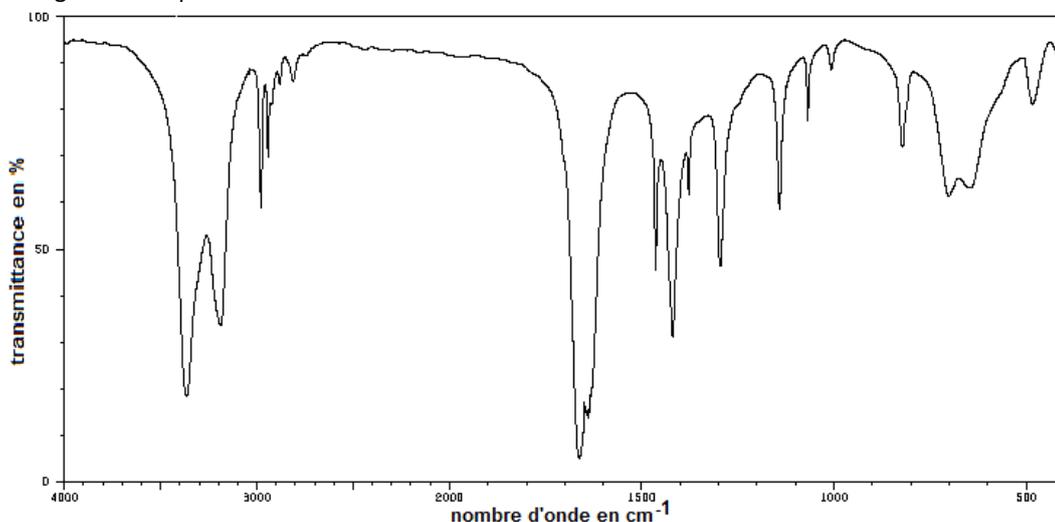


Activité réalisée à l'aide de l'ouvrage *Entraînement TS (Hachette)*

I) Etude d'un spectre IR :

Le spectre infrarouge d'une espèce moléculaire est donné ci-dessous :



1) Présentation du spectre :

▪ Un spectre IR représente **en ordonnées la transmittance** ou **pourcentage** de radiations **transmis** par l'échantillon analysé **en fonction** du **nombre d'onde σ** .

σ se calcule par la relation :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} \text{ avec } \sigma \text{ en cm}^{-1} \text{ et la longueur d'onde } \lambda \text{ en cm.}$$

L'axe des abscisses est orienté de droite à gauche.

1.1 Que signifie une transmittance de 100 % ? Une transmittance de 0% ? Justifier alors pourquoi **les bandes d'absorption** pointent vers le bas.

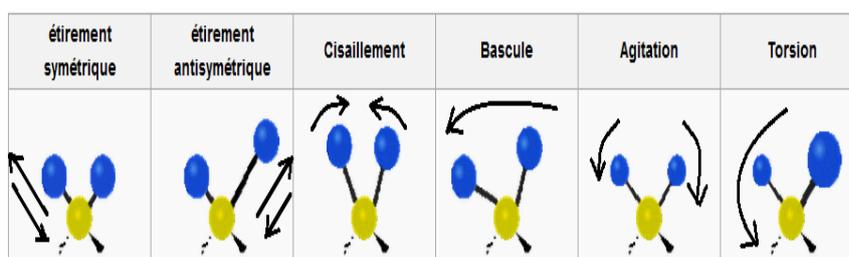
▪ Le domaine infra-rouge du spectre des radiations électromagnétiques correspond à des longueurs d'onde comprises entre 750 nm et 1 mm environ. Seules celles comprises entre 2,5 μm et 20 μm sont utilisées pour le tracé des spectres IR.

1.2 Vérifier que le domaine de nombre d'onde représenté sur le spectre est bien inclus dans celui utilisé pour le tracé des spectres IR.

2) Origine du spectre :

▪ **L'absorption des radiations IR par une molécule** provoque des **vibrations des atomes** autour des liaisons (vibrations d'élongation ou de déformation de la liaison).

[Animation wikipédia.](#)



▪ **Un spectre IR renseigne ainsi sur la nature des liaisons présentes dans une molécule.**

Il permet donc **d'identifier les groupes caractéristiques présents dans la molécule**, en comparant les bandes d'absorption présentes dans le spectre à celles d'une table de données.

3) Analyse du spectre :

3.1 En se reportant à la table IR fournie et/ou à la table de données du livre page 594, déterminer si cette espèce peut contenir les groupes ou liaisons :



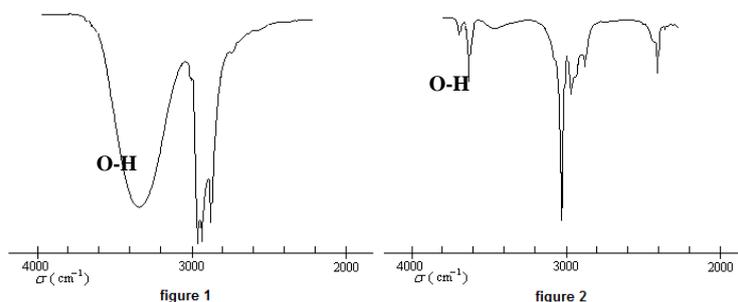
Remarque : on notera les atomes de carbone C_{tet} pour un carbone tétraédrique (4 liaisons simples), C_{tri} pour un carbone trigonal (1 liaison double), et C_{di} pour un carbone digonal (1 liaison triple ou deux liaisons doubles).

3.2 Cette molécule peut-elle être : le propène, le propane, le propanamide, le N-méthyléthananamide ? Justifier.

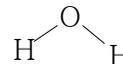
II) Cas particulier des liaisons hydrogène :

Les figures 1 et 2 ci-dessous sont des extraits de spectres IR de l'éthanol.

Le spectre de la figure 2 a été réalisé avec de l'éthanol en solution dans le tétrachlorure de carbone (CCl_4), le spectre de la figure 1 avec de l'éthanol en solution dans l'eau. Les solutions sont diluées.



Données : - représentation spatiale de la molécule d'eau



- la molécule de tétrachlorure de carbone est apolaire et n'établit pas de liaison hydrogène avec l'éthanol

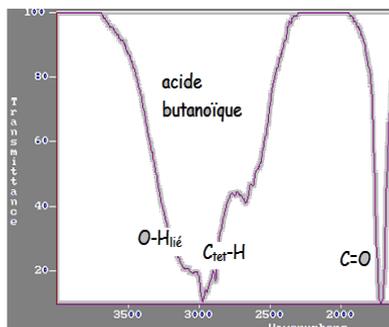
1. Ecrire la formule semi-développée de l'éthanol.

2. La figure 1 et la figure 2 signalent toutes deux la présence de la liaison covalente O-H dans la molécule d'éthanol :

- Déterminer les nombres d'ondes correspondants.
- Quelles autres différences relève-t-on en comparant les deux liaisons O-H signalées ?
- Justifier la présence de ces différences d'après l'énoncé et les données.

3. Conclure sur l'influence de la formation de liaisons hydrogène.

Remarque :



Pour les acides carboxyliques en solution relativement concentrée, le déplacement de la bande O-H dû aux liaisons hydrogène provoque **un chevauchement des bandes d'absorption des liaisons O-H avec la bande d'absorption $\text{C}_{\text{tet}}\text{-H}$.**

III) Bandes d'absorption caractéristiques :

Pour les généralités concernant les bandes C-H, C=C, C=O, C-O et N-H/N-H₂, se référer au paragraphe 3.3 p. 96 du livre. On retiendra également :

En général, plus la liaison est forte, plus le nombre d'onde σ d'absorption est élevé.

I) Etude d'un spectre IR :

3) Analyse du spectre :

3.1

- $1650\text{ cm}^{-1} < \sigma_{\text{C=O}} < 1840\text{ cm}^{-1}$: le spectre présente une **bande d'absorption large et intense** à 1680 cm^{-1} , la molécule **possède un groupe C=O**. Pour $\sigma_{\text{C=O}} = 1680\text{ cm}^{-1}$, il s'agit d'un amide ou d'un acide carboxylique.
- $3100\text{ cm}^{-1} < \sigma_{\text{N-H}} < 3500\text{ cm}^{-1}$: le spectre présente une bande d'absorption intense qui se dédouble en deux pics à 3100 cm^{-1} et 3400 cm^{-1} , la molécule **possède donc d'un groupe N-H₂**. Il ne s'agit **pas d'un groupe N-H** car il y aurait un simple pic non dédoublé.
- $1000\text{ cm}^{-1} < \sigma_{\text{C-C}} < 1250\text{ cm}^{-1}$: le spectre présente deux pics à 1100 cm^{-1} et 1250 cm^{-1} ; la molécule **possède des liaisons C-C**.
- $1625\text{ cm}^{-1} < \sigma_{\text{C=C}} < 1685\text{ cm}^{-1}$: la molécule **ne possède pas de liaison C=C**.
- $1000\text{ cm}^{-1} < \sigma_{\text{C-N}} < 1400\text{ cm}^{-1}$: le spectre présente plusieurs pics entre 1400 cm^{-1} et 1500 cm^{-1} , la molécule **possède des liaisons C-N**.
- $2800\text{ cm}^{-1} < \sigma_{\text{C}_{\text{tet}}\text{-H}} < 3000\text{ cm}^{-1}$: le spectre présente deux pics entre 2800 cm^{-1} et 3000 cm^{-1} ; la molécule **possède des liaisons C_{tet}-H**.

3.2

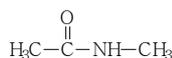
- **Il ne peut pas s'agir du propène** car c'est un alcène or la molécule ne possède pas de liaison C=C.
- **Il ne peut pas s'agir du propane** car c'est un alcane, or la molécule possède des groupes caractéristiques C=O et NH₂.

Le propanamide a pour formule semi-développée :

Il **peut s'agir de cette molécule**.



Le N-méthyléthanamide a pour formule semi-développée :



Il ne peut pas s'agir de cette molécule car c'est un amide secondaire (groupe NH et non NH₂)

II) Cas particulier des liaisons hydrogène :

2. a) et b)

La liaison O-H de l'éthanol n'établit pas de liaisons hydrogène lorsque l'éthanol est en solution dans le tétrachlorure de carbone car ce solvant n'en établit pas et la solution est diluée, ce qui empêche les molécules d'éthanol d'établir entre elles des liaisons hydrogène.

En revanche, la liaison O-H de l'éthanol, en solution aqueuse, en établit avec l'eau car l'eau est polaire et sa liaison O-H fortement polarisée.

Dans la figure 1, la bande d'absorption de la liaison O-H est à 3350 cm^{-1} , elle est **large et intense**. Dans la figure 2, la bande d'absorption de la liaison O-H est à 3650 cm^{-1} , elle est **fine et peu intense**. La **figure 1** correspond donc à un spectre où l'éthanol établit des liaisons hydrogène : **il est en solution dans l'eau**. La **figure 2**, l'éthanol est **en solution dans le tétrachlorure de carbone**.

c) Élément de cours :

- Un spectre IR est modifié si certains groupes établissent des liaisons hydrogène. **En présence de liaisons hydrogène, le pic d'absorption est plus large et son nombre d'onde diminue (affaiblissement des liaisons covalentes O-H).**

Exemple : la liaison O-H absorbe entre 3580 cm^{-1} et 3670 cm^{-1} et présente un pic fin en l'absence de liaison hydrogène ; elle absorbe entre 3200 cm^{-1} et 3400 cm^{-1} et présente un pic large en présence de liaisons hydrogène.

Exemple : spectre IR du propan-2-ol en solution aqueuse (présence de liaisons hydrogène).

