# Activités : Groupes caractéristiques et spectroscopie infrarouge (IR)

## I. La spectroscopie IR

**Document 1 : Intérêt de la spectroscopie IR**

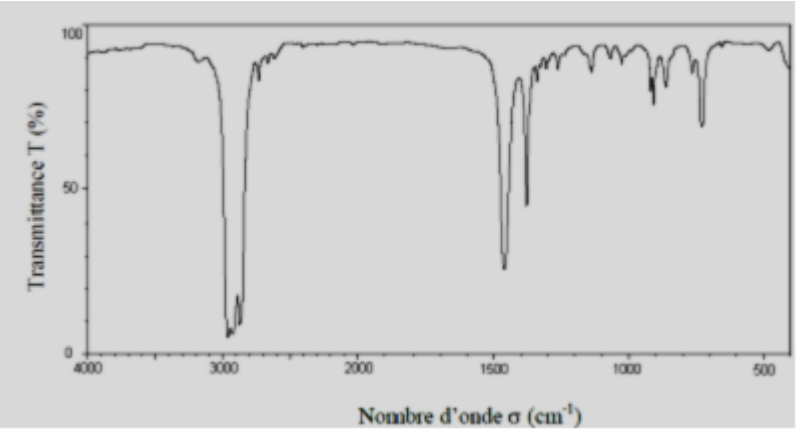
La spectroscopie IR est une technique spectroscopique qui permet d'analyser des solides, des liquides ou des gaz.
Dans l'industrie, elle trouve des applications pour les contrôles de qualité dans l'agroalimentaire ou pour la recherche de polluants dans l'atmosphère. Au laboratoire, elle est utilisée pour l'identification des espèces chimiques synthétisées.

Même si, comme d'autres analyses physico-chimiques dites destructives, elle nécessite des prélèvements de matière, cette technique présente un grand avantage, car la quantité d'échantillon qui doit être prélevée est extrêmement faible. Les micro-prélèvements se pratiquent à l'aide d'une aiguille.

**Document 2 : Origine du spectre IR**

Les molécules peuvent être assimilées à un ensemble de masses (les atomes) reliées par des ressorts différents (les liaisons simples, doubles…).
Les atomes d'une molécule ne sont pas fixes, ils peuvent vibrer! A chaque type de liaison correspond une fréquence de vibration qui lui est propre et qui dépend des atomes liés par la liaison.
En présence de rayonnement IR, les liaisons chimiques se mettent à vibrer lorsqu'elles sont soumises à des rayonnements de fréquence égale à leur fréquence propre. Le rayonnement étant absorbé par la liaison pour pouvoir vibrer, il en résulte une bande ou un pic (si la bande est très fine) d'absorption.
La spectroscopie IR permet donc de déterminer les groupes fonctionnels d'une molécule.

**Document : Un exemple de spectre IR**




Le spectre ci-dessus est le spectre IR du pentane. En ordonnée figure la transmittance T ou intensité lumineuse transmise par l'échantillon. Elle est exprimée en pourcentage.
En abscisse est porté le nombre d'onde σ, inverse de la longueur d'onde λ ($\sigma = 1 / \lambda$), exprimée généralement en $cm^{-1}$. Les radiations infrarouges exploitées en chimie organique s'étendent de 600 $cm^{-1}$ à 4000 $cm^{-1}$.
Les bandes d'absorption associées à chacune des liaisons rencontrées correspondent à un domaine de nombre d'ondes bien précis. (voir rabat couverture du livre)
Ainsi dans le spectre du pentane, on reconnaît les bandes d'absorption relatives aux liaisons C-H. En revanche celles relatives aux liaisons C-C ($\sigma < 1400$ $cm^{-1}$) est inexploitable.

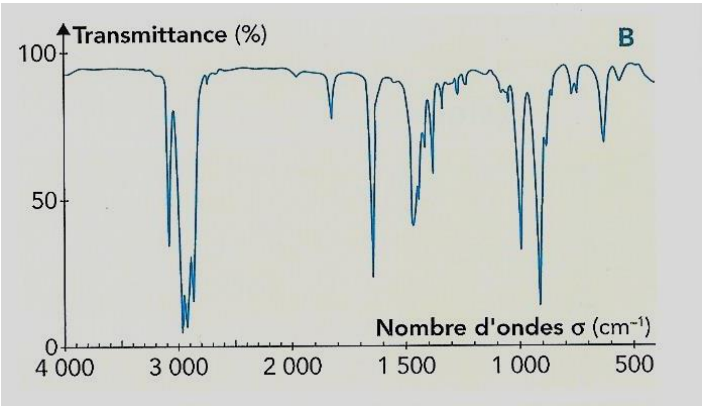
## Questions

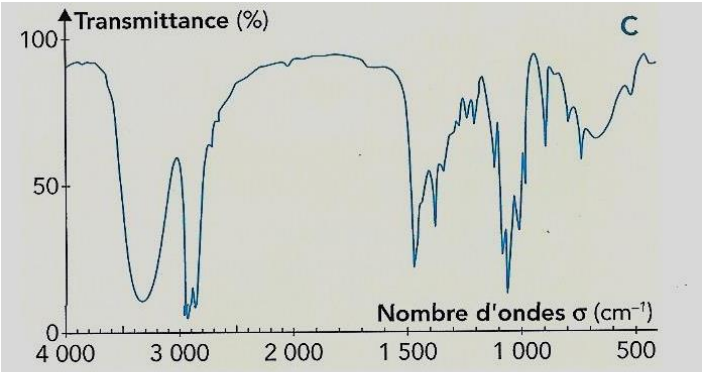
1. Quels sont les intérêts de la spectroscopie IR ?
2. Pourquoi certaines radiations IR sont-elles absorbées par les molécules et pas d'autres ?
3. Que signifie une transmittance de 100% ? Une transmittance de 0% ? Justifier alors pourquoi les bandes d'absorption d'un spectre IR pointent vers les bas ?
4. Quelles sont les valeurs limites des longueurs d'onde (exprimées en nm et µm) des radiations utilisées en IR ?
5. Pourquoi n'exploite-t-on généralement pas le domaine $\sigma < 1400$ cm$^{-1}$ ?

# II. Exploitation de spectres IR

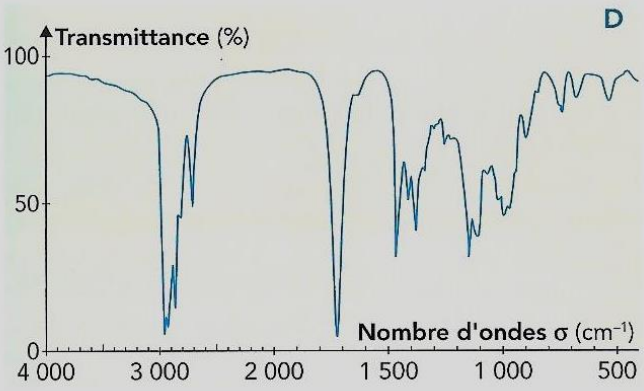
On donne ci-dessous les spectres IR de plusieurs molécules.

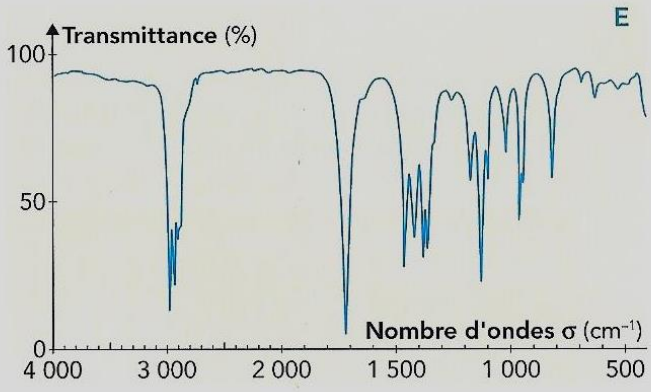
1. Pour chaque molécule, écrire la formule semi-développée, entourer et nommer les groupes caractéristiques.
2. Retrouver dans le spectre de chaque composé les bandes d'absorption relatives aux principales liaisons présentes.

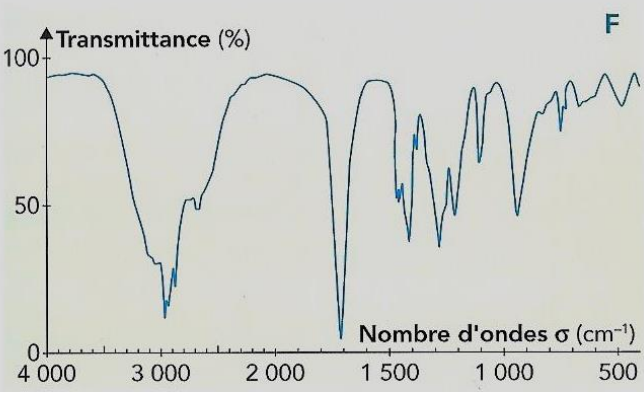


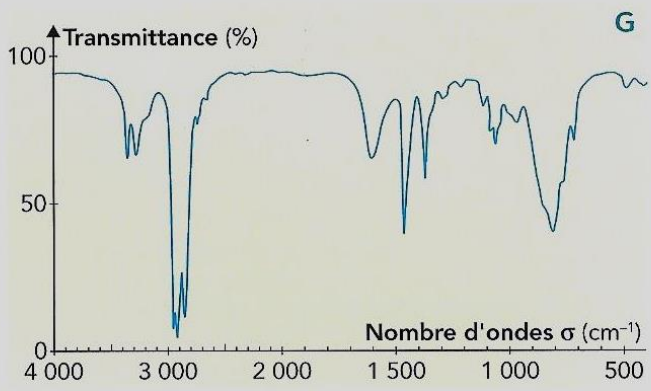



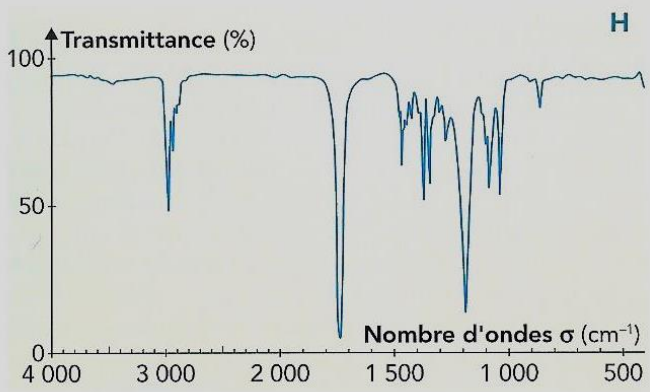

**Doc. 10 a.** Spectres du pent-1-ène (B) et du pentan-1-ol (C).

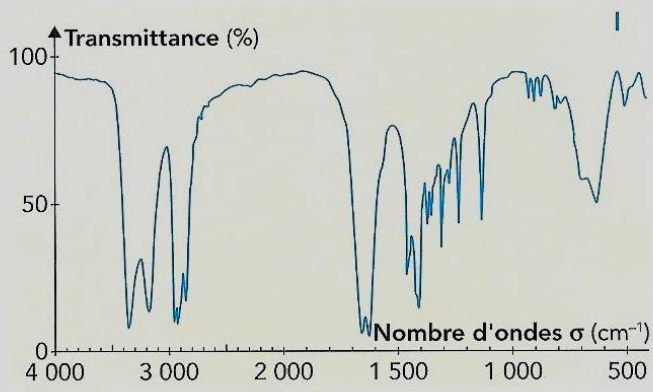


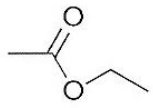


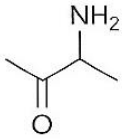

**Doc. 10 b.** Spectres du pentanal (D), de la pentan-3-one (E), de l'acide pentanoïque (F), de la pentan-1-amine (G), du propanoate d'éthyle (H) et du pentanamide (I).

## III- Identification d'un composé

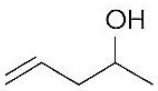
Le document 11 fournit de spectre de l'un des trois composés suivants. Lequel ?



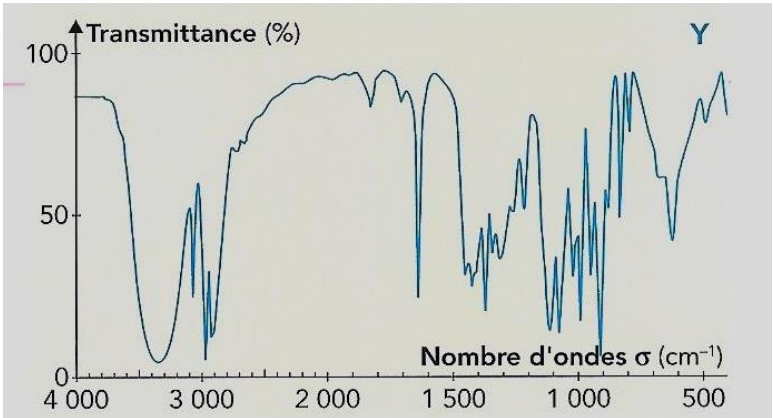
K Éthanoate d'éthyle



L 3-aminobutanone



M Pent-4-èn-2-ol



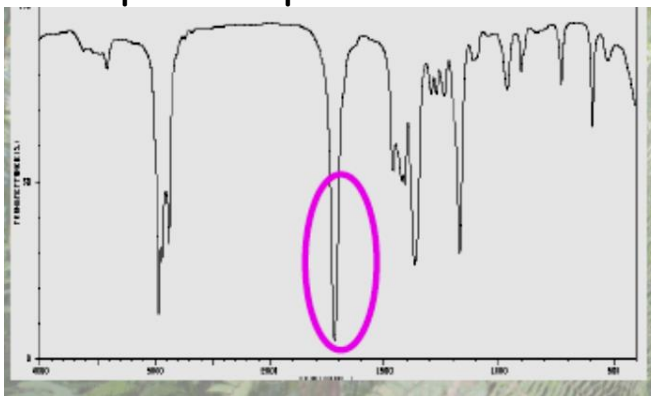

**Doc. 11** Spectre IR de l'un des composés J, K, L et M.

## IV- Les limites de la spectroscopie infrarouge

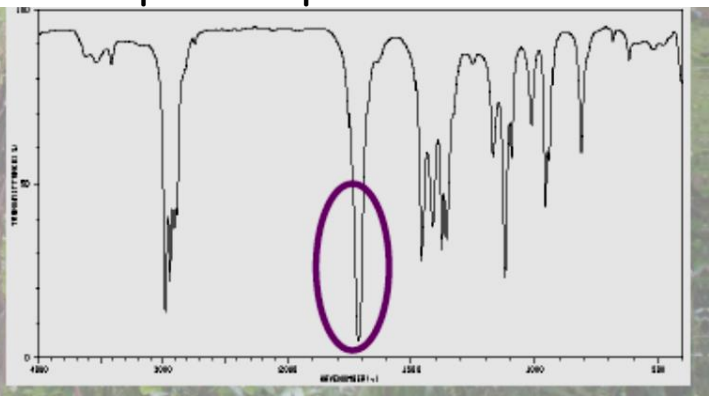
Ecrire la formule semi-développée du pentan-2-one et du pentan-3-one.

On donne ci-dessous le spectre IR de chaque molécule.

**Spectre du pentan-2-one**



**Spectre du pentan-3-one**

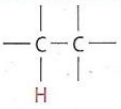
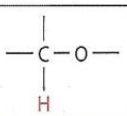
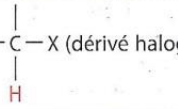
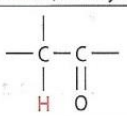


Les spectres IR permettent-ils de distinguer les deux molécules ? Justifier

## Bandes caractéristiques en spectroscopie IR

| Famille | Liaison | Nombre d'onde ($cm^{-1}$) |
|---|---|---|
| alcane | C–H (élongation)<br>C–H (déformation) | 2 850-3 000<br>1 370-1 470 |
| alcène | C=C<br>C–H | 1 650<br>3 000-3 080 |
| cétone | C=O | 1 705-1 725 |
| aldéhyde | C–H<br>C=O | 2 650-2 830<br>1 720-1 740 |
| acide carboxylique | O–H<br>C=O<br>C–O | 3 450-3 550<br>1 740-1 800<br>1 080-1 190 |
| ester | C=O<br>C–O | 1 730-1 750<br>1 050-1 300 |
| alcool | O–H lié<br>O–H libre | 3 200-3 450<br>3 600-3 700 |
| amine | C–N<br>N–H | 1 030-1 230<br>1 640-1 560 |
| amide | N–H<br>C=O | 3 300-3 500<br>1 620-1 700 |
| | C≡N | 2 200-2 260 |

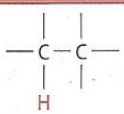
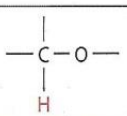
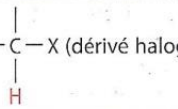
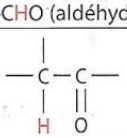
## Déplacements chimiques en spectroscopie RMN

| Environnement du proton | δ (ppm) |
|---|---|
|  | 0,8 à 2 |
|  | 3 à 4,1 |
|  | 2,5 à 4 |
| R–OH (alcool) | 1 à 6 |
| R–CHO (aldéhyde) | 9,5 à 9,9 |
|  | 2 à 2,7 |
| H–COO–R (ester) | 8 à 8,5 |
| R–$CO_2$H (acide carboxylique) | 10 à 13 |

## Bandes caractéristiques en spectroscopie IR

| Famille | Liaison | Nombre d'onde ($cm^{-1}$) |
|---|---|---|
| alcane | C–H (élongation)<br>C–H (déformation) | 2 850-3 000<br>1 370-1 470 |
| alcène | C=C<br>C–H | 1 650<br>3 000-3 080 |
| cétone | C=O | 1 705-1 725 |
| aldéhyde | C–H<br>C=O | 2 650-2 830<br>1 720-1 740 |
| acide carboxylique | O–H<br>C=O<br>C–O | 3 450-3 550<br>1 740-1 800<br>1 080-1 190 |
| ester | C=O<br>C–O | 1 730-1 750<br>1 050-1 300 |
| alcool | O–H lié<br>O–H libre | 3 200-3 450<br>3 600-3 700 |
| amine | C–N<br>N–H | 1 030-1 230<br>1 640-1 560 |
| amide | N–H<br>C=O | 3 300-3 500<br>1 620-1 700 |
| | C≡N | 2 200-2 260 |

## Déplacements chimiques en spectroscopie RMN

| Environnement du proton | δ (ppm) |
|---|---|
|  | 0,8 à 2 |
|  | 3 à 4,1 |
|  | 2,5 à 4 |
| R–OH (alcool) | 1 à 6 |
| R–CHO (aldéhyde) | 9,5 à 9,9 |
|  | 2 à 2,7 |
| H–COO–R (ester) | 8 à 8,5 |
| R–$CO_2$H (acide carboxylique) | 10 à 13 |