



# TP18 – Identification de groupes fonctionnels à l'aide du spectre IR

L'objectif de cette séance en autonomie est de découvrir les informations que l'on peut tirer des spectres IR à l'aide de [SPECAMP](#), logiciel libre et gratuit de Serge Lagier.

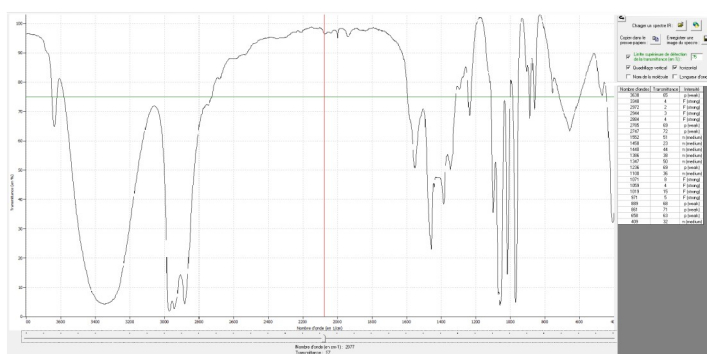
La spectroscopie infrarouge (IR) est une technique spectroscopique qui permet d'analyser des solides, des liquides ou des gaz. Dans l'industrie, elle trouve des applications pour les contrôles de qualité dans l'agroalimentaire et pour la recherche des polluants dans l'atmosphère. On l'utilise également pour identifier des espèces chimiques synthétisées au laboratoire, ou pour identifier les pigments d'une œuvre d'art.

Les molécules peuvent subir des mouvements de vibrations qui leur sont propres. Une molécule peut ainsi être le siège d'oscillations. On peut "visualiser" ces vibrations grâce au logiciel Specamp. Une fois le logiciel ouvert, dans le bandeau supérieur sélectionner


Choisir alors  Spectroscopie IR :  puis dans le cadre en bas à gauche le type de vibration à visualiser.

1. Indiquer les 5 principaux modes de vibrations dont est le siège la molécule excitée.


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 qui va alors résonner. Les rayonnements correspondants sont alors absorbés par la molécule. L'étude d'un spectre IR permet alors de mettre en évidence les radiations absorbées.



Exemple :

Charger un spectre IR : 

## I – Etude de l'allure générale d'un spectre

Visualiser en cliquant sur l'icône  puis en chargeant le fichier IR\_1-propanol dans le dossier correspondant aux alcools ( OH )

### Questions

En abscisse :

1. Quelle grandeur est représentée en abscisse ? .....avec quelle unité ? .....
2. Quelle est sa particularité ? .....
3. Cette grandeur ( wavenumber ) est liée à la longueur d'onde ; Choisir la bonne expression :

$$\sigma = -\lambda \quad \text{ou} \quad \sigma = \frac{1}{\lambda}$$

4. A l'aide de la bonne relation, montrez que les radiations utilisées pour réaliser ce spectre appartient aux IR

.....

En ordonnée :

5. Quelle grandeur est représentée en ordonnée ? .....avec quelle unité ? .....

6. Cette grandeur est liée aux intensités I et I<sub>0</sub> ; Choisir la bonne expression :

$$T = I - I_0$$

$$T = I/I_0$$

$$T = I_0/I$$

$$T = I_0 - I$$

7. Que signifie une Transmittance de 100 % : ..... de 0 % ? .....

8. Pour quelle raison les pics sont dirigés vers le bas ? .....

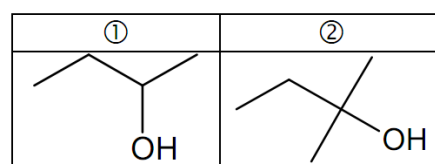
A. L'empreinte digitale de 2 molécules proches ( digital print )

Considérons les 2 molécules dont voici les formules topologiques :

1. Nommez ces 2 molécules

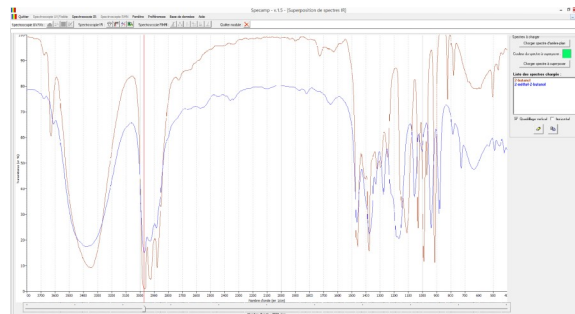
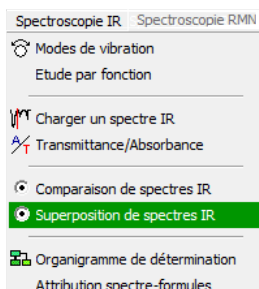
① .....

② .....



2. Indiquer leur classe (d'alcool I, II ou III ) respective

A l'aide de Specamp, choisir de SUPERPOSER les spectres de ces 2 molécules à l'aide du menu déroulant d' IR



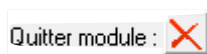
3. Sans tenir compte de la Transmittance, indiquez

- quelle zone( intervalle du nombre d'onde ) du spectre est liée aux liaisons ? : .....
- quelle zone du spectre est liée à l'enchaînement des carbones , zone appelée empreinte digitale de la molécule ? : .....

Conclure : .....

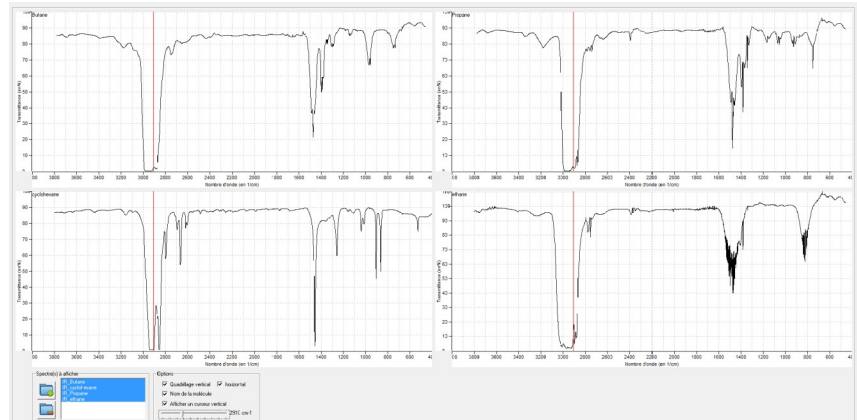
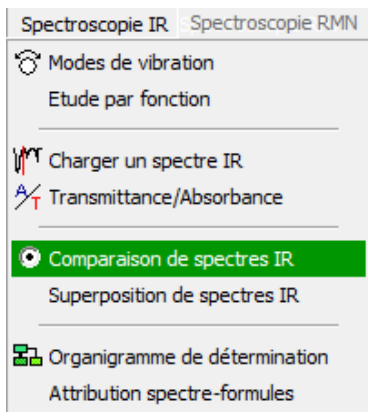
.....

Penser à quitter le module



## II – La liaison C-H

A l'aide de Specamp, choisir de COMPARER les spectres de ces plusieurs alcanes entre eux ( ou avec des alcools par exemples ), à l'aide du menu déroulant d' IR



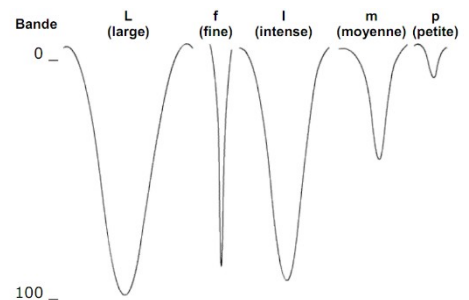
1. Quelle type de liaison possèdent les alcanes ? .....
2. La bande d'absorption due aux liaisons C-H se situe dans quel intervalle du nombre d'onde ?  
.....
3. Identifier ( donnez la valeur ) la bande d'absorption correspondante aux liaisons C-H de la Butanone en chargeant le spectre correspondant .....

Penser à quitter le module

## III – La liaison O-H

On va s'intéresser aux molécules possédant la liaison O-H

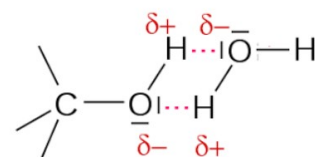
1. Quelles familles possèdent des liaisons -OH ?
2. A l'aide de Specamp, choisir de COMPARER les spectres de façon judicieuse afin de déterminer les valeurs approximatives du nombre d'onde de la bande d'absorption de la liaison OH des alcools



.....

Cette bande est-elle forte ou fine ? .....

- Les composés en phases liquides ou condensées établissent entre leur groupement OH des liaisons hydrogènes. : les liaison -OH sont dites alors LIEES.
- En phases gazeuses ces liaisons sont impossibles ( trop éloignées ) : ces liaison- OH sont dites LIBRES



1. A l'aide de Specamp, choisir de COMPARER les spectres de ces plusieurs alcools de façon judicieuse , et dire vers quelle longueurs d'onde apparait la liaison hydrogène ? .....

large ou fine ? .....

## IV – La liaison C=O

On s'intéressera aux molécules organiques possédant la double liaison C=O.

Vous pourrez utiliser l'onglet étude par fonction du Menu IR ou ouvrir de façon judicieuse des spectres de molécules.

1. Dans quelle fonction intervient la liaison C=O ? ( alcools, aldéhydes, cétones, acides carboxyliques, ester, amide, amine, ..)  
.....
2. Pour quelles valeurs approximatives du nombre d'onde trouve t-on une bande d'absorption de la liaison C=O ?  
.....
3. Est-elle plutôt étroite ou large ?  
.....
4. Identifier ( donnez la valeur ) la bande d'absorption correspondante aux liaisons C-H de la Butanone en chargeant le spectre correspondant  
.....

## V – Auto-évaluation

A l'aide du menu Attribution Spectre -Formule, il est temps de tester vos connaissances ...bonne chance !

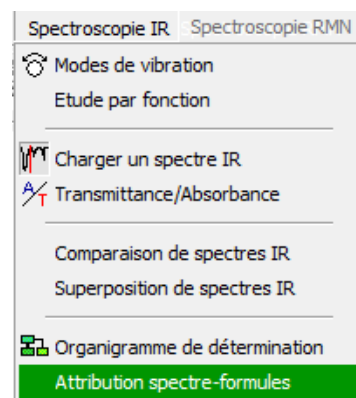
## VI – Pour les plus rapides : « Compréhension augmentée »



Décharger l'application Spectre IR2 Mirage de M.Chardine et utiliser les marqueurs mis à votre disposition afin de revoir ou tester vos connaissances

<https://play.google.com/store/apps/details?id=com.miragestudio.ir2>

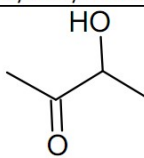
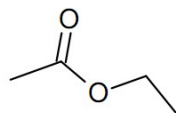
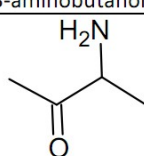
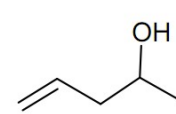
ou sur <https://itunes.apple.com/fr/app/spectre-ir-mirage/id943065989?mt=8>

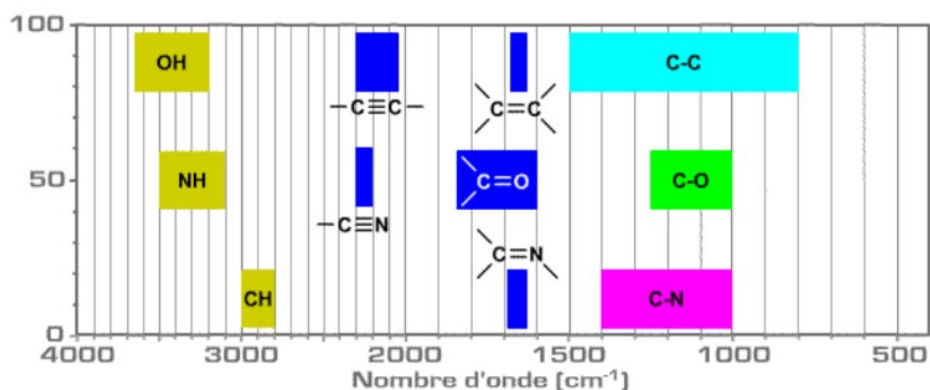
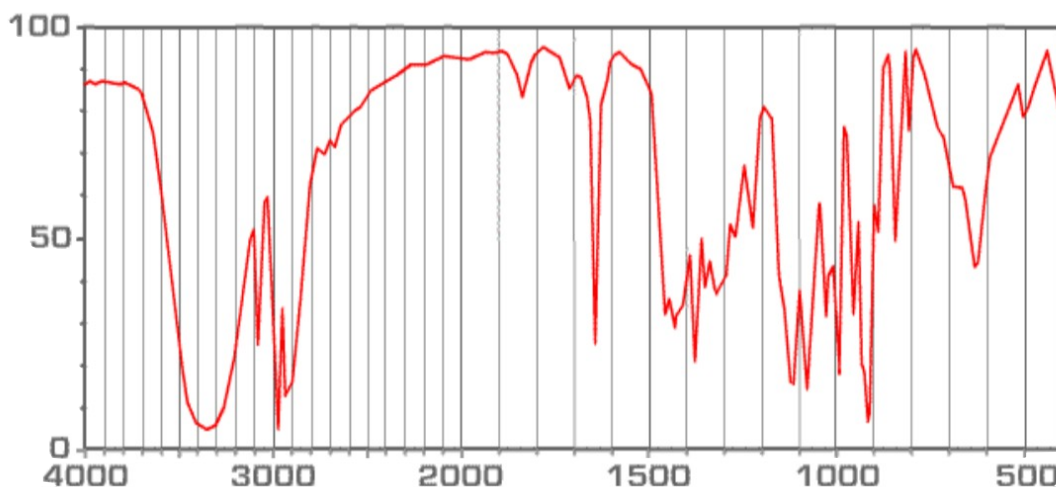


## VII – Identification d'une molécule

Le service des fraudes vous demande de vérifier la conformité de flacons importés, il peut s'agir d'une de ces molécules ci-contre :

Au laboratoire, vous obtenez son spectre ci-dessous :

3-hydroxybutanone 	Ethanoate d'éthyle 
3-aminobutanone 	Pent-4-ène-2-ol 



Document 2 : Tables de référence

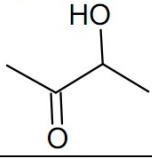
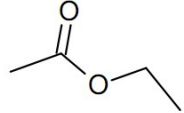
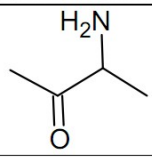
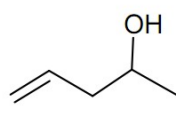
Liaison	Nombre d'onde (cm <sup>-1</sup> )	Intensité et commentaire
Liaison OH libre	Entre 3500 et 3700 cm <sup>-1</sup>	Bande fine et moyenne.
Liaison OH liée (liaison hydrogène)	Entre 3100 et 3500 cm <sup>-1</sup>	Bande forte et large.
Liaison N-H	Entre 3050 et 3500 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O	Entre 1700 et 1800 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O des esters	Entre 1700 et 1750 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O des acides carboxyliques	Entre 1660 et 1740 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O des amides	Entre 1630 et 1710 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C-H de CHO	Entre 2650 et 2800 cm <sup>-1</sup>	Bande moyenne.
Liaison OH des acides carboxyliques	Entre 2500 et 3300 cm <sup>-1</sup>	Bande forte et large.
Liaison C-O des acides carboxyliques	Entre 1200 et 1320 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison CO des esters	Entre 1210 et 1260 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison NH des amides	Entre 3050 et 3500 cm <sup>-1</sup>	Deux bandes moyennes larges.
Liaison NH des amides substituées	Entre 3050 et 3400 cm <sup>-1</sup>	Bande moyenne large.

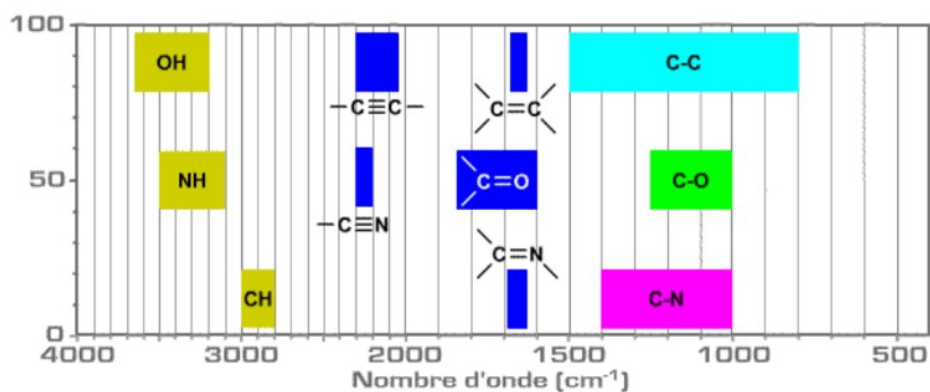
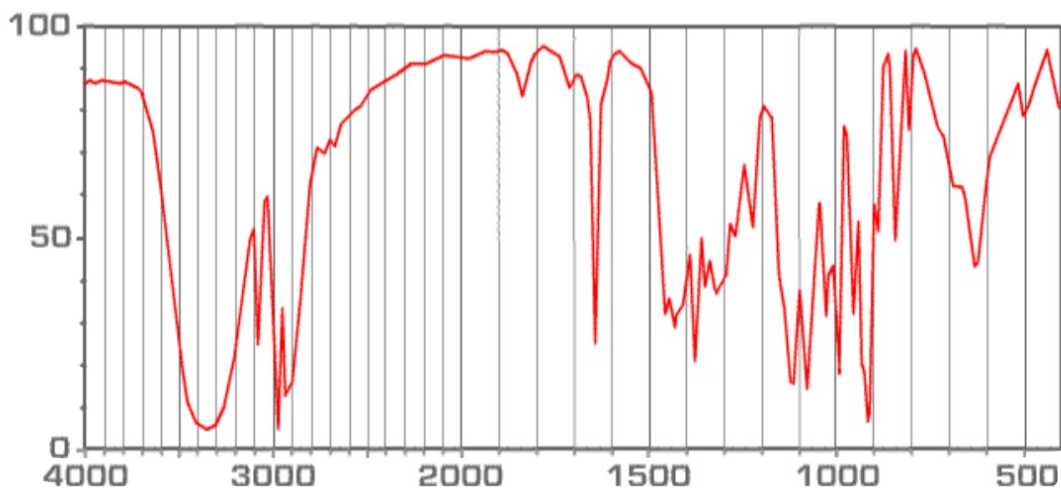
A vous d'identifier l'espèce chimique contenues dans les flacons!

## VII – Identification d'une molécule

Le service des fraudes vous demande de vérifier la conformité de flacons importés, il peut s'agir d'une de ces molécules ci-contre :

Au laboratoire, vous obtenez son spectre ci-dessous :

3-hydroxybutanone 	Ethanoate d'éthyle 
3-aminobutanone 	Pent-4-ène-2-ol 



Document 2 : Tables de référence

Liaison	Nombre d'onde (cm <sup>-1</sup> )	Intensité et commentaire
Liaison OH libre	Entre 3500 et 3700 cm <sup>-1</sup>	Bande fine et moyenne.
Liaison OH liée (liaison hydrogène)	Entre 3100 et 3500 cm <sup>-1</sup>	Bande forte et large.
Liaison N-H	Entre 3050 et 3500 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O	Entre 1700 et 1800 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O des esters	Entre 1700 et 1750 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O des acides carboxyliques	Entre 1660 et 1740 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C=O des amides	Entre 1630 et 1710 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison C-H de CHO	Entre 2650 et 2800 cm <sup>-1</sup>	Bande moyenne.
Liaison OH des acides carboxyliques	Entre 2500 et 3300 cm <sup>-1</sup>	Bande forte et large.
Liaison C-O des acides carboxyliques	Entre 1200 et 1320 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison CO des esters	Entre 1210 et 1260 cm <sup>-1</sup>	Bande forte.
Liaison NH des amides	Entre 3050 et 3500 cm <sup>-1</sup>	Deux bandes moyennes larges.
Liaison NH des amides substituées	Entre 3050 et 3400 cm <sup>-1</sup>	Bande moyenne large.

A vous d'identifier l'espèce chimique contenues dans les flacons!