

CONSTITUTION DE LA MATIERE

TP : La spectroscopie infra-rouge

Objectif : Montrer qu'une analyse spectroscopique peut aider à la détermination d'une molécule

Contexte du sujet

Pour résoudre une enquête la police scientifique fait appel à vous !

La police a 4 suspects sérieux pour le crime : le suspect A est esthéticienne et utilise beaucoup d'acétone dans son travail; le suspect B travaille dans une parfumerie qui utilise de nombreux aldéhydes dont le propanal, le suspect C travaille dans une usine qui fabrique des résines utilisant notamment de l'alcool allylique (composé organique comportant un double liaison C = C et un groupe hydroxyle) quant au suspect D il est ouvrier chez un fabricant de colles qui utilise des époxydes (composé organique comportant un atome d'oxygène ponté sur une liaison C - C) . Un résidu organique inconnu a été trouvé sur le lieu d'un crime et son identification peut mener la police au coupable.

A vous de mener l'enquête !

I- Spectroscopie infrarouge : les liaisons se mettent à table !

1- L'allure générale : en utilisant les spectres donnés en annexe

- * Indiquer les grandeurs représentées sur les axes.
- * Que signifie une transmittance de 0% ?
- * Dans quel sens est orientée la bande d'absorption (ou pic d'absorption) d'un spectre IR ?
- * Quelles sont les valeurs limites des nombres d'onde utilisés en spectroscopie IR ?
- * Quelles particularités présente l'axe des abscisses ?

2- Modélisation d'une liaison par un oscillateur

Grâce à des expériences simples et visuelles, trouver le protocole pour déterminer comment évolue qualitativement la période T de l'oscillateur si la raideur du ressort augmente, puis si la masse suspendue augmente.

Réaliser les expériences et noter votre conclusion.

Pour la même raideur de la liaison, plus ?????? augmente, et plus la période de l'oscillateur ??????, donc le nombre d'onde ??????.

Par analogie on peut appliquer notre conclusion sur l'oscillateur à une molécule

Pour le même couple d'atomes, plus ?????? augmente, et plus la période de l'oscillateur ??????, donc le nombre d'onde ??????.

3- Conséquences : les grandes clés de l'identification en IR

a- Influence de la multiplicité de la liaison

Ranger par « raideur » croissante les liaisons C - C ; C = C et C \equiv C

Ranger par ordre décroissant σ_{C-C} , $\sigma_{C=C}$, $\sigma_{C\equiv C}$ puis σ_{C-O} , $\sigma_{C=O}$

b- Influence de la masse des atomes engagés dans la liaison

Calculer les deux masses réduites manquant dans le tableau

liaison	C-H	C-C	C-N	C-O	C-Cl
μ (kg)			$1,1 \cdot 10^{-26}$	$1,14 \cdot 10^{-26}$	$1,5 \cdot 10^{-26}$

Ranger alors par ordre décroissant σ_{C-H} , σ_{C-C} , σ_{C-Cl}

Rem : Si les masses réduites sont assez différentes, cet effet l'emporte sur la variation de la constante de raideur.

II- Les indices révélés par un spectre IR

1- La zone d'empreinte

- * Quelle différence structurale existe-t-il entre le pentan-1-ol et le pentan-2-ol ?
- * En superposant les spectres, déterminer la zone commune (les pics de transmittance < 20% ne sont pas pris en compte)
- * Peut-on différencier ces deux molécules grâce à l'IR ?
- * En dessous de quel nombre d'onde s'étend la zone d'empreinte ?

Rem : Dans la suite de ce TP, la zone d'empreinte ne sera pas étudiée.

2- Construire une table des bandes caractéristiques

* Quelle est la bande large et forte commune à tous les spectres présentés ? Que vaut le nombre d'onde σ de cette liaison ? À quelle liaison peut-on l'attribuer ? Noter cette liaison sur le spectre.

* En comparant les structures et les spectres du pentane et du pentan-2-one, déterminer la liaison responsable de l'absorption fine et forte vers 1700 cm^{-1} . Noter la sur le spectre.

* Comparer les structures et les spectres du pentan-2-ol et de la pentan-2-one. En vous appuyant sur l'influence de la multiplicité de la liaison sur le nombre d'onde, déterminer la liaison responsable de l'absorption large, arrondie et forte vers 3400 cm^{-1} .

* En déduire dans quelle zone se situe la liaison C - C ?

* La liaison triple $\text{C} \equiv \text{C}$ (présente dans des alcynes comme le pent-1-yne) se caractérise par une bande moyenne et fine. Déterminer son nombre d'onde.

* Déterminer le nombre d'onde d'une liaison $\text{C} = \text{C}$, en vous aidant de l'influence de la multiplicité de la liaison.

III- Le suspect ?

A l'aide de ces nouvelles informations identifier la molécule inconnue et donc le suspect du crime.