



BUT : Exploiter des spectres infrarouge - Identifier des liaisons chimiques à l'aide des nombres d'ondes.

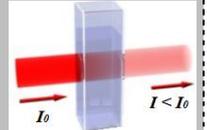
COMPETENCES : Se mobiliser en cohérence avec les consignes données (APP) – Exploiter des observations, mesures, informations, ... (ANA) – Rendre compte, rédiger ou présenter une argumentation avec le vocabulaire adapté (COM).

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, comme 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. 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 (phénomène de résonance). Les rayonnements correspondant sont alors absorbés par la molécule.

L'étude d'un spectre IR permet alors de mettre en évidence les radiations absorbées.



1. Vibrations

On peut "visualiser" ces vibrations grâce au logiciel Specamp :



Ouvrir le logiciel, puis cliquer sur le bouton  dans le bandeau supérieur Spectroscopie IR :  Choisir alors dans le cadre en bas à gauche le type de vibration à visualiser.

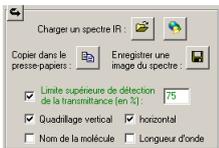
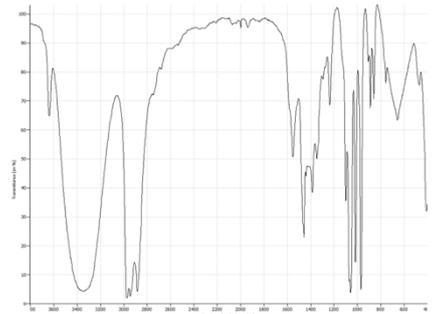
 Répondre aux questions de la feuille bilan.

2. Présentation d'un spectre infrarouge.

Ci-contre, le spectre du propan-1-ol :

1.1. Axe des abscisses

On peut visualiser ce spectre grâce au logiciel Specamp en cliquant sur le bouton  dans le bandeau supérieur Spectroscopie IR : .



Dans le panneau à droite de la fenêtre, cliquer sur *Charger un spectre IR*, puis dans la boîte de dialogue qui s'affiche choisir le fichier dans le répertoire du TP : [IR_propan-1-ol.jdx](#)

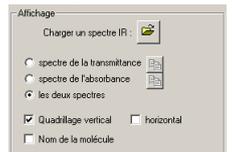
Cocher la case « Longueur d'onde » puis placer le curseur sur le nombre d'onde 2000 cm⁻¹.

 Répondre aux questions de la feuille bilan.

1.2. Axe des ordonnées

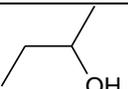
Dans le bandeau Spectroscopie IR : , cliquer sur le bouton  Charger de nouveau le spectre IR du propan-1-ol.

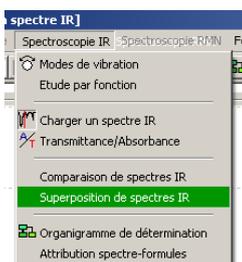
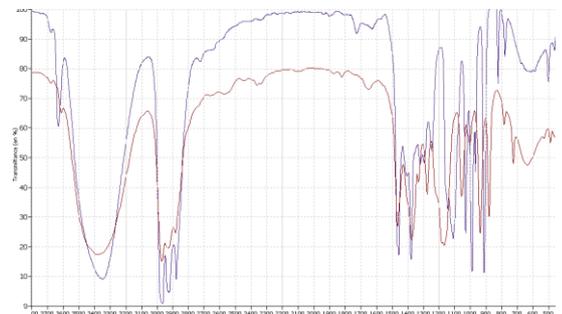
 Observer et répondre aux questions de la feuille bilan.



1.3. le spectre IR

Pour comprendre l'étude d'un spectre IR, on compare les spectres de deux molécules de la même famille de composés avec un alcane, toutes de structures carbonées étant très voisines.

Molécule ①	Molécule ②	isobutane
		

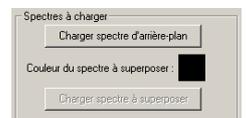


Dans le menu **Spectroscopie IR** choisir **Superposition des spectres IR**.

A partir du panneau situé à droite de la fenêtre, charger le spectre de la molécule 1 en arrière plan puis superposer celui de la molécule 2.

Remarque : choisir des couleurs foncées avant de charger le spectre.

Superposer également le spectre de l'alcane, l'isobutane (ou 2-méthylpropane) pour identifier la caractéristique des spectres des alcools.



 Répondre aux questions de la feuille bilan.

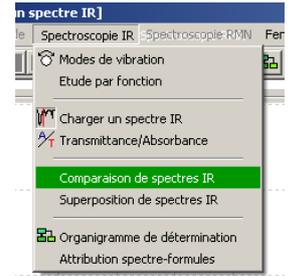
Quitter le module de superposition avant de poursuivre : 

3. Etude de différents spectres

Les spectres des molécules étudiées dans ce paragraphe vont permettre de compléter une base de données suffisante pour associer les molécules et les spectres dans le paragraphe suivant.

3.1. Comparaison de spectres

Pour cette étude, les spectres IR seront visionnés grâce au logiciel *Specamp*. Il faudra utiliser judicieusement le logiciel en **superposant** ou **comparant** certains spectres (voir le menu ci-contre) de façon à identifier les « bandes » caractéristiques de certaines liaisons chimiques **autres que la liaison C – C**.



Il faudra également avoir recours la base de données interactive *base_ir_frequencies.exe* (*Mes espaces sur Contrôleur/Logiciels réseau/Physique...*) pour une éventuelle confirmation des encadrements du nombre d'onde correspondant à ces pics.



Dans le panneau en bas à gauche de la fenêtre, commencer par afficher le spectre du propane *IR_propane.jdx* puis afficher un à un les spectres des molécules suivantes dans l'ordre du tableau. Observer les différences dans la zone 1.

Propan-1-ol	propanal	propanone (acétone)	acide propanoïque	propanamine	éthanoate de méthyle	propanamide

Compléter le tableau en associant des encadrements de valeurs du nombre d'onde aux liaisons chimiques présentes dans les différentes classes fonctionnelles ; préciser si le pic est fort (**F**), moyen (**m**) ou faible (**f**) et s'il est fin ou large.

APPEL	Montrer le tableau constitué au professeur	
--------------	---	--

3.2. Cas de la liaison O-H

Ouvrir la base de données interactive *base_ir_groupes.exe*.

Pointer la fonction alcool.

On constate que pour la liaison O–H, la table spectroscopique IR fait apparaître notamment deux possibilités dans les alcools : O–H lié et O–H libre.

Utiliser *Specamp* pour retrouver les deux bandes correspondantes en chargeant les spectres du butan-1-ol à l'état gaz et butan-1-ol en solution.

Répondre aux questions de la feuille bilan.

4. Identification de molécules.

On dispose des 4 spectres infrarouges ayant pu être réalisé en phase condensée (état liquide ou en solution) ou à l'état gaz, de quatre molécules isomères présentant des groupes caractéristiques différents dont les noms de fichier sont les numéros d'identification CAS (Chemical Abstracts Service).

Le jeu consiste à associer les molécules à leur spectre IR.

Le cas échéant, il faudra utiliser les bases de données IR interactives et/ou procéder par élimination si la base de données constituée précédemment s'avère insuffisante.

Une vérification par internet pourra confirmer ou infirmer le travail d'identification réalisé.

3-hydroxybutanone	méthanoate de propyle	3-hydroxybutanal	acide 2-méthylpropanoïque
gaz	gaz	liquide	liquide

Associer les 4 molécules aux 4 spectres avec les arguments nécessaires et suffisants et les légendes qui conviennent.