

C5 : Spectres

Sommaire

Spectroscopie UV-visible

Spectroscopie infrarouge

Vibration des liaisons covalentes
Spectres infrarouges

Spectroscopie RMN

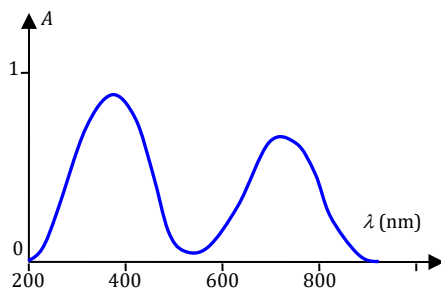
Déplacement chimique
Protons équivalents
Multiplicité des signaux
Courbe d'intégration

Spectroscopie UV-visible

Exploiter des spectres UV-visible

La spectroscopie UV-visible est l'étude de l'absorption d'espèces chimique dans le domaine des longueurs d'onde situé entre 200 nm (UV) et 1000 nm (proche IR).

Représentée par un graphique $A = f(\lambda)$. L'absorbance A n'est pas d'unité



Exemple d'un spectre absorbant le bleu et le rouge. Une telle espèce serait verte.

Le spectre d'une substance est **caractéristique** de celle-ci, pour un solvant et une température donnés.

Une substance est colorée si elle absorbe des radiations colorées. Elle aura la couleur complémentaire des radiations absorbées.

[Principe d'un spectrophotomètre](#) (animation)

[Principe d'un dosage spectrophotométrique](#) (animation)

Spectroscopie infrarouge

Exploiter un spectre IR pour déterminer des groupes caractéristiques à l'aide de tables de données ou de logiciels, dans le cas des alcools, aldéhydes, cétones, acides carboxyliques, esters, amines et amides.

Vibration des liaisons covalentes

Les liaisons covalentes peuvent être visualisées comme de minuscules ressorts liant deux atomes. Elles peuvent vibrer en élongation ou en déformation. Comme pour l'électron en orbite autour d'un atome, l'énergie de vibration de ces liaisons est **quantifiée**. Si l'on envoie sur une liaison un photon ayant l'énergie adéquate (c'est-à-dire l'énergie correspondant à la différence entre deux niveaux d'énergie de vibration), la liaison pourra l'absorber et vibrer avec une plus grande amplitude.

Ces niveaux d'énergies dépendent du type d'atomes (ou groupe d'atome) liés.

Spectres infrarouges

Le spectre infrarouge d'une molécule est le tracé de la transmittance T (en %) en fonction du nombre d'onde σ (cm⁻¹).

$$\sigma = 1/\lambda, \text{ avec } \lambda \text{ en cm}$$

Ce spectre, très complexe, est caractéristique d'une molécule. Il est possible de l'analyser en partie pour en déduire les groupes présents dans une molécule et ainsi avoir une idée de sa composition.

Un spectre s'analyse à l'aide d'un tableau résumant les nombres d'onde d'absorption des différents groupes.

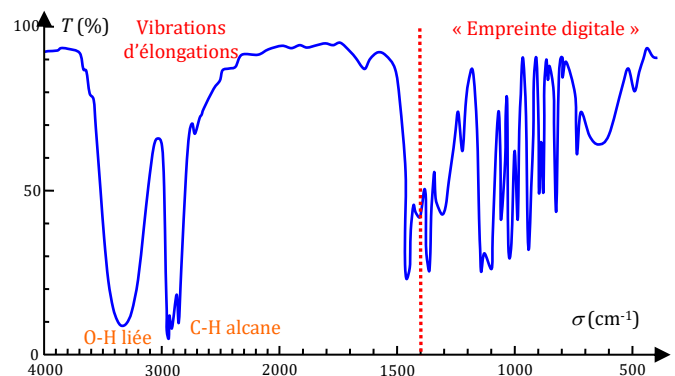
Liaison	Vibration	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité *
O-H alcool libre	élongation	3580-3670	F, large
O-H alcool lié	élongation	3200-3600	F, large
N-H amine	élongation	3100-3500	m
C-H aromatique	élongation	3030-3080	m
C-H	élongation	2800-3000	m
C-H aldéhyde	élongation	2750-2900	F
O-H acide carbo.	élongation	2500-3200	m
C=C	élongation	2100-2250	F à m ; large
C=O ester	élongation	1700-1740	F
C=O ald.-cétone	élongation	1650-1730	F
C=O acide carbo	élongation	1680-1710	F
C=C	élongation	1625-1685	F
C=C aromatique	élongation	1450-1600	3 ou 4 bandes
N=O	élongation	1510-1580 et 1325-1365	F ; 2 bandes
N-H amine ou amide	déformation	1560-1640	F ou m

* F : fort, m : moyen ; f : faible

La partie appelée « empreinte digitale » est propre à la molécule.

Dans ce spectre, on peut voir les liaisons O-H (alcool lié) et les liaisons C-H (alcane)

[Lire un spectre infrarouge](#) (animation)



Spectre infrarouge du pentan-2-ol

Exercice 1 Spectres IR

Exercice 2 Adrénalone et adrénaline

Exercice 3 A03 Fresques de Pompéi

Spectroscopie RMN

Extraire et exploiter des informations sur différents types de spectres et sur leur utilisation.

La spectroscopie RMN (résonance magnétique nucléaire) permet d'obtenir de nombreuses informations sur les atomes d'hydrogène d'une molécule organique.

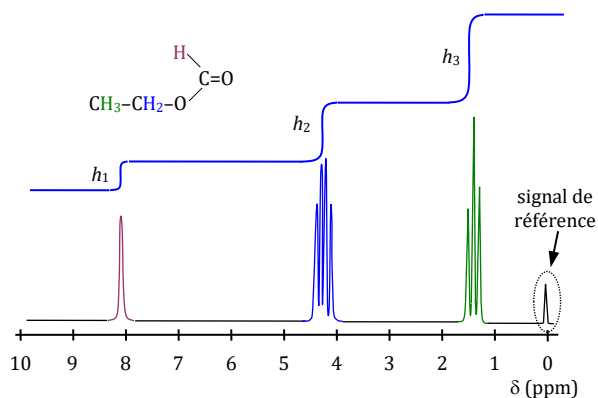
Les spectres RMN les plus courants (et les seuls vus en terminale) sont ceux correspondant aux signaux dus aux noyaux des atomes d'hydrogène (appelé aussi « proton ») d'une molécule. Par abus de langage, on pourra raccourcir l'expression « noyau des atomes d'hydrogène » par le terme « hydrogène » ou « proton ».

Associée à la spectroscopie IR, la spectroscopie RMN permet souvent d'élucider la structure de molécules relativement simple.

Un spectre RMN est un ensemble de signaux constitués d'un ou plusieurs pics. L'étude de leur **déplacement**, de leur **multiplicité** et de leur aire (par la **courbe d'intégration**) permet d'obtenir de nombreux renseignements sur le nombre et la disposition des **atomes d'hydrogène** dans la molécule étudiée.

Exemple

Dans le spectre ci-dessous, on observe 4 signaux (en mauve, en bleu, en vert et le signal de référence, qui n'est pas dû à la molécule étudiée et qui ne nous intéresse donc pas).



Spectre RMN du méthanoate d'éthyle

Déplacement chimique

Déplacement chimique : abscisse d'un spectre RMN. Noté δ , se mesure en ppm.

Le déplacement chimique correspondant à un hydrogène (ou un groupe d'hydrogène équivalents, voir paragraphe suivant) augmente (c-à-d. se déplace vers la gauche) si un atome voisin est très électronégatif ou si une liaison double est proche.

Exemple

Le signal en mauve correspond à un déplacement chimique élevé, car l'hydrogène correspondant est proche de deux atomes d'oxygène (élément très électronégatif) et d'une double liaison.

Protons équivalents

Identifier les protons équivalents

Des protons sont **équivalents** lorsqu'ils ont exactement le même environnement. Ils sont responsables des mêmes signaux.

Exemple

Les hydrogène représentés d'une même couleur sont équivalents. Les hydrogène en vert, par exemple, ont tous l'environnement suivant : ils sont liés à un atome de C, lui-même lié à deux autres H et un groupe $-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CHO}$.

Multiplicité des signaux

Relier la multiplicité d'un signal au nombre de voisins

La multiplicité des signaux, c'est-à-dire le fait qu'un signal soit un singulet, un doublet, un triplet, etc., dépend du nombre d'hydrogène voisins portés par des atomes de **carbone adjacents**. Si un groupe d'hydrogène équivalents a n voisins, le signal est composé de $n+1$ pics.

Attention : Si un atome d'hydrogène est porté par un autre atome que du carbone, il est « isolé ». Il n'a pas de voisin et ne peut pas être considéré comme voisin d'autres hydrogène. Il produira toujours un singulet.

Exemple

Les protons en vert ont 2 voisins : ce sont les deux atomes d'hydrogène du groupe $-\text{CH}_2-$ en bleu. Le signal a donc 3 pics (on dit que c'est un triplet).

Les protons en bleu ont trois voisins, ce sont les 3 atomes d'hydrogène du groupe $-\text{CH}_3$. Le signal a donc 4 pics (on dit que c'est un quadruplet).

Courbe d'intégration

Relier un spectre RMN simple à une molécule organique donnée, à l'aide de tables de données ou de logiciels

La hauteur **relative** de la courbe d'intégration permet de savoir combien de protons sont responsables du signal.

Exemple

La hauteur du signal en vert est 1,5 fois plus grande que celle du signal en bleu. On peut donc en déduire qu'il y a 1,5 fois plus de protons responsables de ce signal que de celui en bleu.

De même, cette hauteur est 3 fois plus grande que celle du signal en mauve. Il y a donc 3 fois plus de protons responsables du signal en vert que du signal en mauve.

Analyses de spectres RMN (diaporama)

Exercice 4 Interpréter un spectre RMN

Exercice 5 2013 LIB-1 Acide lactique et médecine animale

Exercice 6 2013 ADS-2 Les dangers de l'alcool

Exercice 7 2013 PON-2 Molécule d'ibuprofène

Exercice 8 2013 ADN-1 Aspirine et prévention cardiovasculaire

Exercice 9 2013 ANT-2 Molécules témoins du mûrissement des pommes

Exercice 10 2013 CET-2 L'estérification

Exercice 11 2014 ASI-2 À la recherche des molécules de la vie