

IDENTIFICATION SPECTRALE DE MOLECULES ORGANIQUES

Le but est de réaliser l'analyse de spectres IR ou RMN pour identifier des espèces chimiques.

1. Identifier des molécules à l'aide de spectre IR

On dispose de sept spectres IR à identifier (annexe 1) correspondant à six molécules différentes notées A, B, C, D, E et F. La molécule A possède deux spectres, l'un correspondant à la molécule A à l'état liquide et l'autre à l'état gazeux.

Les six espèces chimiques sont :

- 3-méthylpentan-2-one
- butan-2-ol
- butanamide
- 2-méthylpentanal
- acide propanoïque
- butanoate de méthyle

- 1.1. Présenter les résultats de l'identification sous la forme d'un tableau récapitulatif contenant les informations suivantes : nom de la molécule, famille, formule semi développée avec groupe fonctionnel repéré, spectre correspondant.
- 1.2. Expliquer la démarche qui vous a permis d'associer chaque spectre à la molécule correspondante.

Vous trouverez en annexe 2 des exemples de tables de la littérature desquelles on peut s'inspirer pour en construire d'autres avec uniquement les informations nécessaires aux élèves.

- 1.3. Préciser l'origine des différences entre les deux spectres de la molécule A.

2. Identifier des molécules à l'aide de spectres RMN

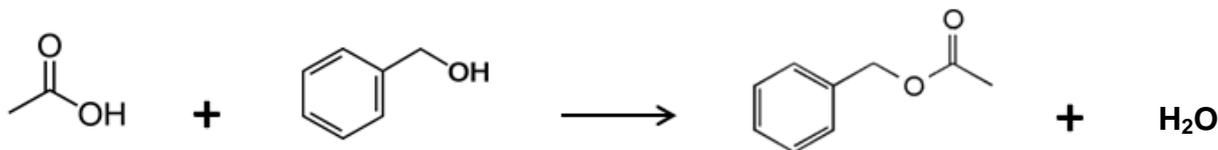
On dispose de quatre spectres RMN à identifier (annexe 3) et correspondant à quatre molécules différentes notées A, B, C et D. Voici le nom des quatre espèces chimiques :

- butan-2-one
- éthanol
- propanal
- acide propanoïque

- 2.1. Présenter les résultats de l'identification sous la forme d'un tableau récapitulatif contenant les informations suivantes : nom de la molécule, famille, formule semi développée avec groupe fonctionnel repéré, spectre correspondant.
- 2.2. Expliquer la démarche qui vous a permis d'associer chaque spectre à la molécule correspondante.

3. Analyse spectrale de l'arôme de jasmin

L'intérêt des analyses IR et RMN est l'identification et l'analyse de molécules. On peut aussi les utiliser pour suivre l'évolution d'une transformation chimique. Ici, l'étude porte sur la synthèse de l'éthanoate de benzyle (arôme de jasmin). L'autre produit formé étant de l'eau.



3.1. Identifier les groupes caractéristiques et les fonctions :

3.1.1. des deux réactifs : acide éthanoïque (ou acétique) et phényléthanol(ou alcool benzylique) ?

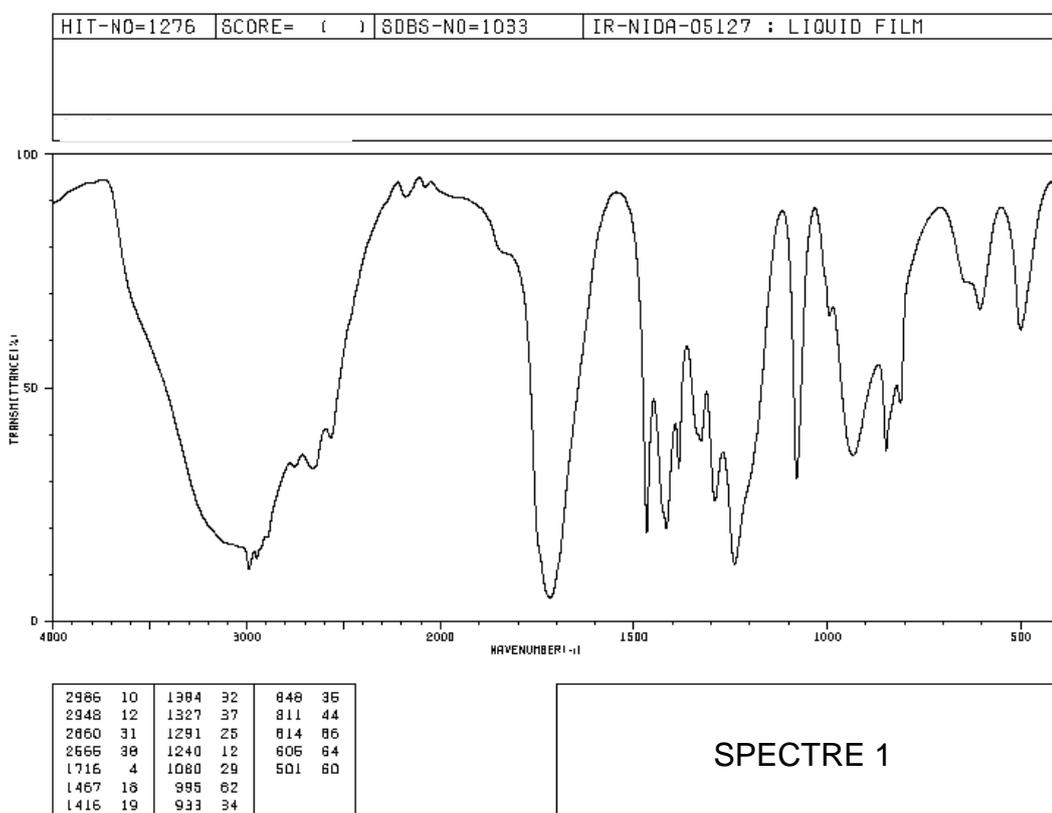
3.1.2. de l'arôme de jasmin ?

3.2. Prévoir les bandes d'absorption principales présentes sur les spectres IR des trois molécules.

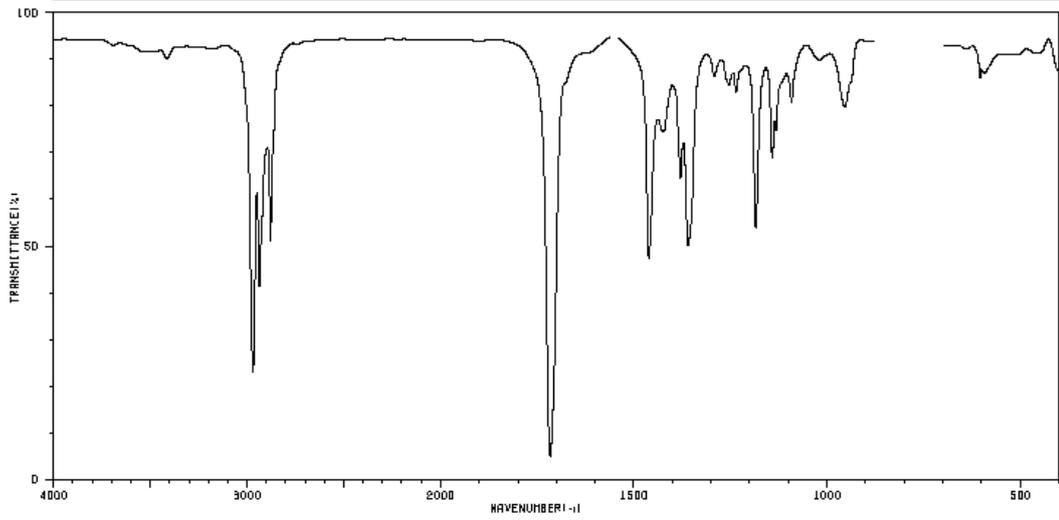
3.3. Quelle(s) bande(s) apparaisse(nt) et disparaisse(nt) lors de la synthèse étudiée ? Pourquoi ?

3.4. Compte-tenu de la structure semi-développée de l'ester formé, prévoir le nombre de pics (et leur multiplicité) présents sur le spectre RMN de cette molécule.

Annexe 1 : spectres IR à identifier



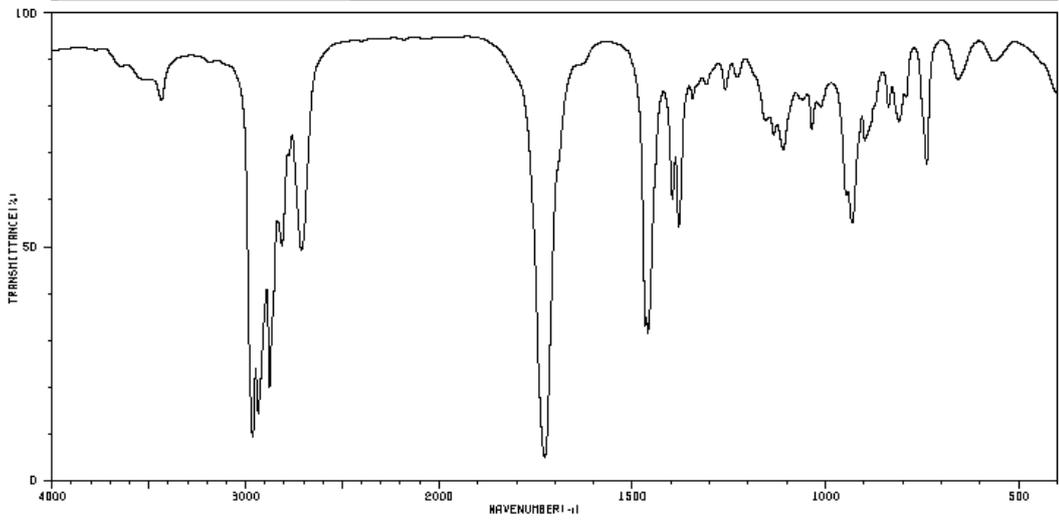
HIT-NO=72	SCORE= ()	SDBS-NO=3795	IR-NIDA-07499 : CCL4 SOLUTION



2969	21	1644	96	1254	81	964	77
2936	39	1539	95	1236	79	604	81
2876	49	1461	44	1185	52	593	64
1716	4	1424	72	1142	66		
1559	95	1380	62	1132	72		
1554	95	1361	47	1092	77		
1649	95	1292	84	1019	86		

SPECTRE 2

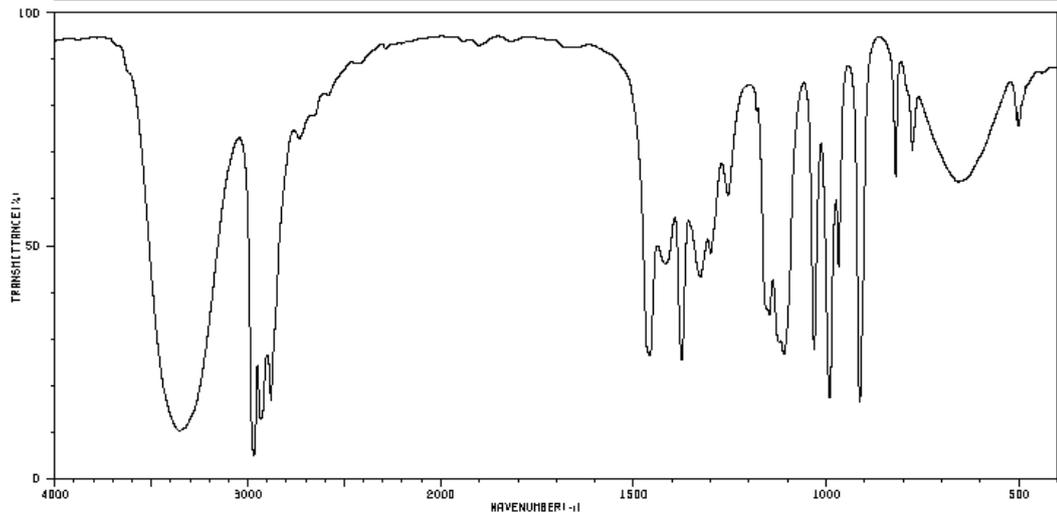
HIT-NO=4042	SCORE= ()	SDBS-NO=10224	IR-NIDA-02541 : LIQUID FILM



3436	79	1467	31	1229	84	931	69	666	86
2963	8	1460	30	1134	70	899	70		
2935	13	1397	58	1109	88	893	70		
2876	19	1380	62	1061	79	838	77		
2811	47	1344	79	1036	72	810	74		
2711	47	1309	81	1023	77	738	64		
1727	4	1260	81	947	68	667	81		

SPECTRE 3

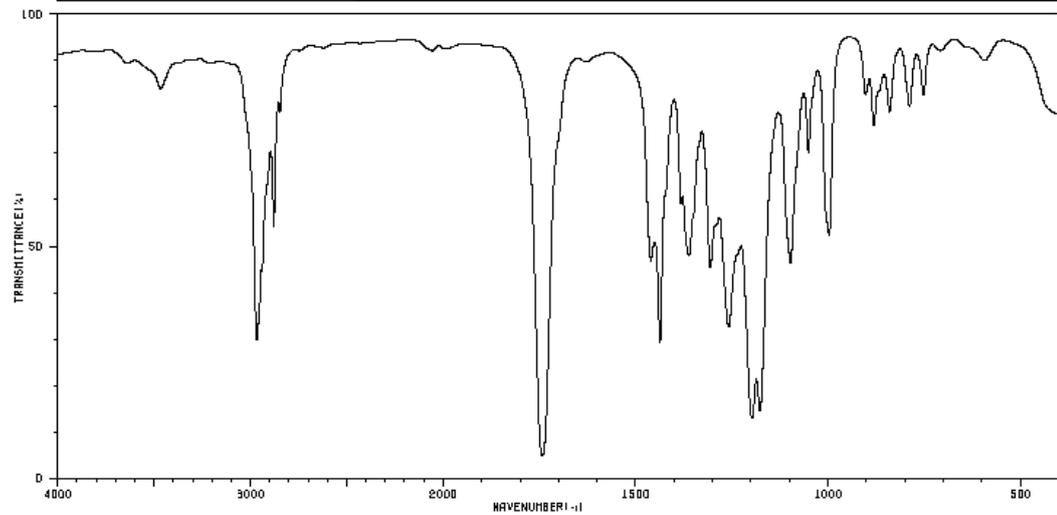
HIT-NO=1035 SCORE= () SDBS-NO=507 IR-NIDA-04700 : LIQUID FILM



3353	10	1376	24	1110	26	666	60
2968	4	1327	42	1031	26	651	60
2932	12	1300	46	991	16	501	72
2880	16	1266	68	968	43		
2734	70	1154	35	913	15		
1457	25	1148	34	820	82		
1416	44	1122	28	777	68		

SPECTRE 4

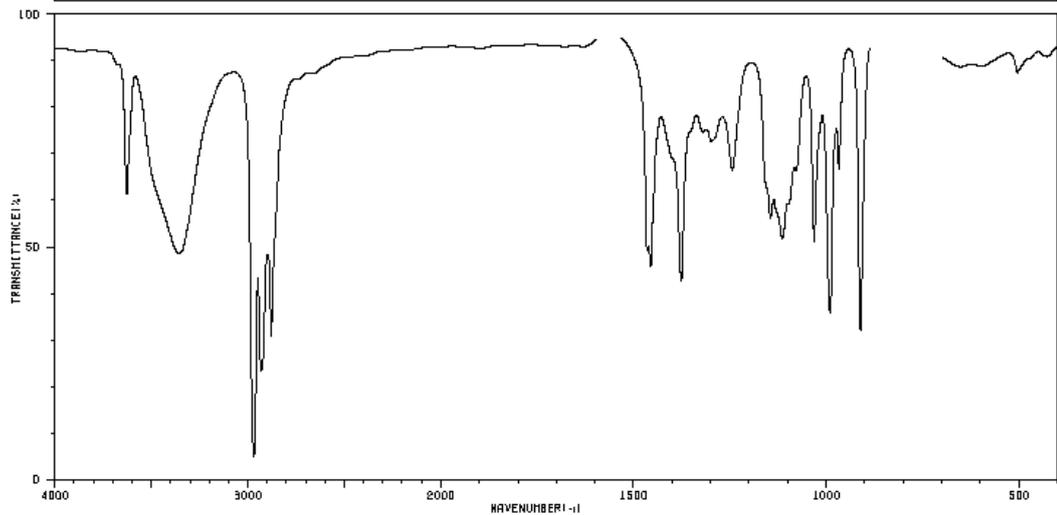
HIT-NO=1977 SCORE= () SDBS-NO=2641 IR-NIDA-00387 : LIQUID FILM



3466	81	1460	49	1177	13	840	77
2967	28	1437	28	1097	44	788	77
2940	43	1382	57	1051	88	752	78
2879	62	1362	48	997	50	694	86
2846	77	1306	43	902	79		
1742	4	1258	31	861	72		
1460	44	1198	12	859	79		

SPECTRE 5

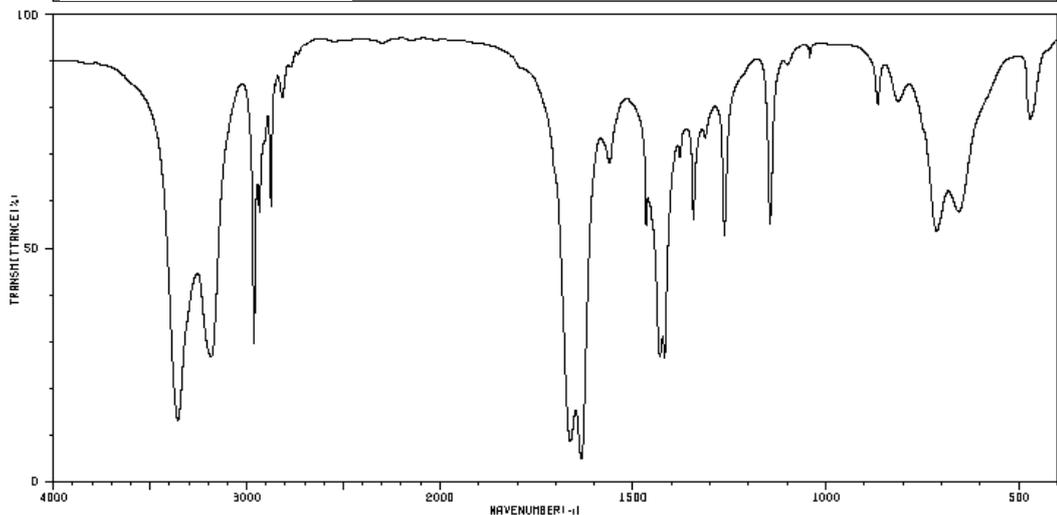
HIT-NO=959 SCORE= () SDBS-NO=507 IR-NIDA-06521 : CCL4 SOLUTION



3627	68	1378	41	867	64
3355	47	1300	70	911	31
2969	4	1244	64	505	84
2930	22	1146	69	500	84
2879	30	1114	50		
1466	47	1032	49		
1456	44	990	36		

SPECTRE 6

HIT-NO=2785 SCORE= () SDBS-NO=3782 IR-NIDA-03114 : KBR DISC



3366	12	1634	4	1313	70	666	66
3184	25	1561	66	1263	50	470	74
2962	28	1468	52	1145	53		
2934	66	1430	26	866	77		
2873	57	1418	25	813	79		
2816	79	1379	66	803	79		
1662	8	1344	63	713	62		

SPECTRE 7

SPECTROSCOPIE INFRAROUGE

Table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation.

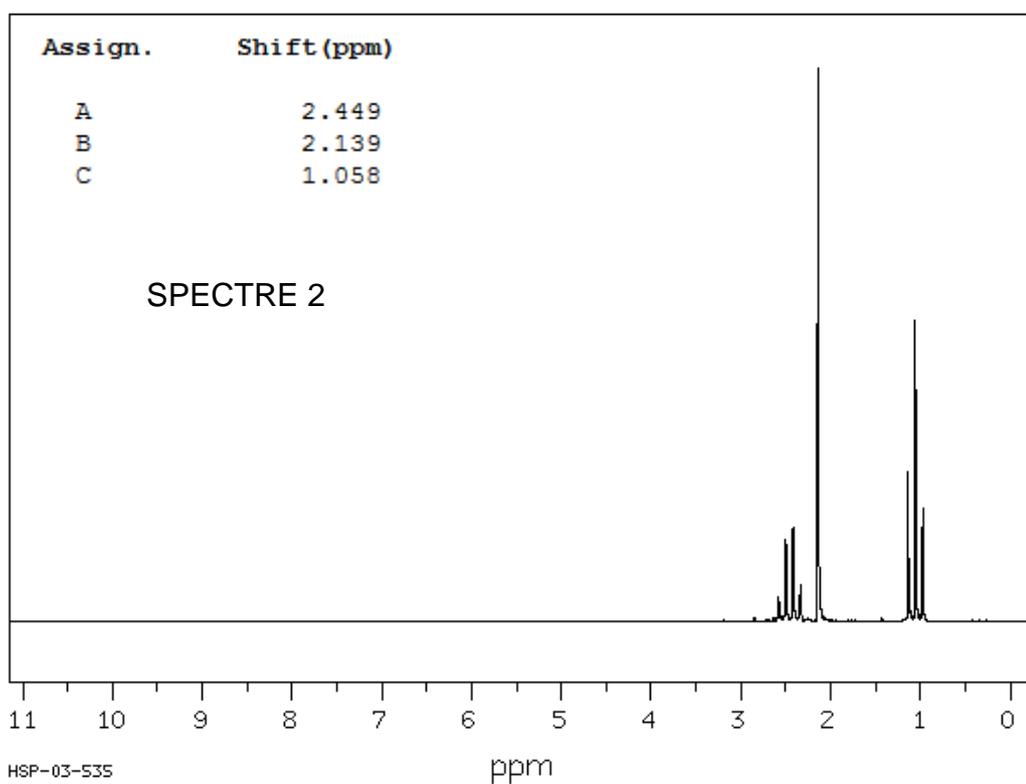
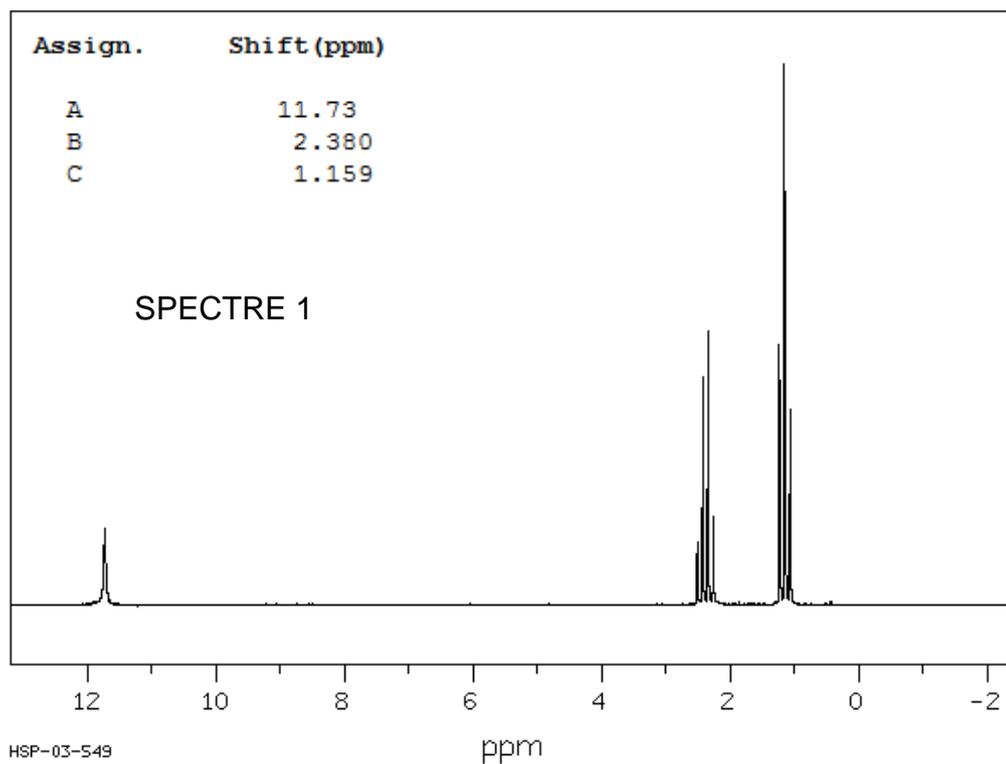
Liaison	Espèce	Nature des vibrations	Nombre d'onde cm^{-1}	Intensité F : fort ; m : moyen ; f : faible
O-H	Alcool libre	Valence	3590-3650	F (fine)
O-H	Alcool lié	Valence	3200-3600	F (large)
N-H	Amine primaire	Valence	3300-3500	m (2 bandes)
N-H	Amine secondaire	Valence		m (1 bande)
N-H	Amide	Valence	3100-3500	F
$\text{C}_{\text{di}}\text{-H}$	Alcyne	Valence	≈ 3300	m ou f
$\text{C}_{\text{tri}}\text{-H}$	Alcène	Valence	3030-3100	m
$\text{C}_{\text{tri}}\text{-H}$	Aromatique	Valence	3000-3100	m
$\text{C}_{\text{tet}}\text{-H}$	Alcane	Valence	2850-3000	F
$\text{C}_{\text{tri}}\text{-H}$	Aldéhyde	Valence	2700-2900	m (2 bandes)
OH	Acide carboxylique	Valence	2500-3200	F à m (large)
$\text{C}\equiv\text{C}$	Alcyne	Valence	2100-2260	f
$\text{C}_{\text{tri}}=\text{O}$	Aldéhyde et cétone	Valence	1650-1730 abaissement de 20 à 30 cm^{-1} si conjugaison	F
$\text{C}_{\text{tri}}=\text{O}$	Acide carboxylique	Valence	1700-1725	F
$\text{C}_{\text{tri}}=\text{O}$	Ester	Valence	1735-1750	F
$\text{C}_{\text{tri}}=\text{O}$	Amide	Valence	1630-1700	F
$\text{C}_{\text{tri}}=\text{C}_{\text{tri}}$	Alcène	Valence	1620-1690	m
$\text{C}_{\text{tri}}=\text{C}_{\text{tri}}$	Aromatique	Valence	1450-1600	Variable (3 ou 4 bandes)
N-H amine	Amine	<i>Déformation</i>	1560-1640	F ou m
$-\text{NO}_2$	Groupe nitro	Valence	1540-1570 et 1340-1390	F (2 bandes)
$\text{C}_{\text{tet}}\text{-H}$	Alcane	<i>Déformation</i>	1430-1480	F
$\text{C}_{\text{tet}}\text{-H (CH}_3\text{)}$	Alcane	<i>Déformation</i>	1370-1390	F (2 bandes)
$\text{C}_{\text{tet}}\text{-O}$	Alcool	Valence	1010-1200	F
$\text{C}_{\text{tet}}\text{-N}$	Amine	Valence	1020-1250	m
$\text{C}_{\text{tri}}\text{-H de -HC=CH- (E)}$ (Z)	Alcène	<i>Déformation</i>	960-970	F
		<i>Déformation</i>	670-730	m
$\text{C}_{\text{tri}}\text{-H}$	Aromatique monosubstitué	<i>Déformation</i>	730-770 et 680-720	F (2 bandes)
$\text{C}_{\text{tri}}\text{-H}$	Aromatique 1,2-disubstitué	<i>Déformation</i>	735-770	F
	Aromatique 1,3-disubstitué	<i>Déformation</i>	750-800 et 680-720	F et m (2 bandes)
	Aromatique 1,4-disubstitué	<i>Déformation</i>	800-860	F
C-Cl	Chlorure d'alkyle ou d'aryle	Valence	600-800	F
C-Br	Bromure d'alkyle ou d'aryle	Valence	500-750	F
C-I	Iodure d'alkyle ou d'aryle	Valence	≈ 500	F

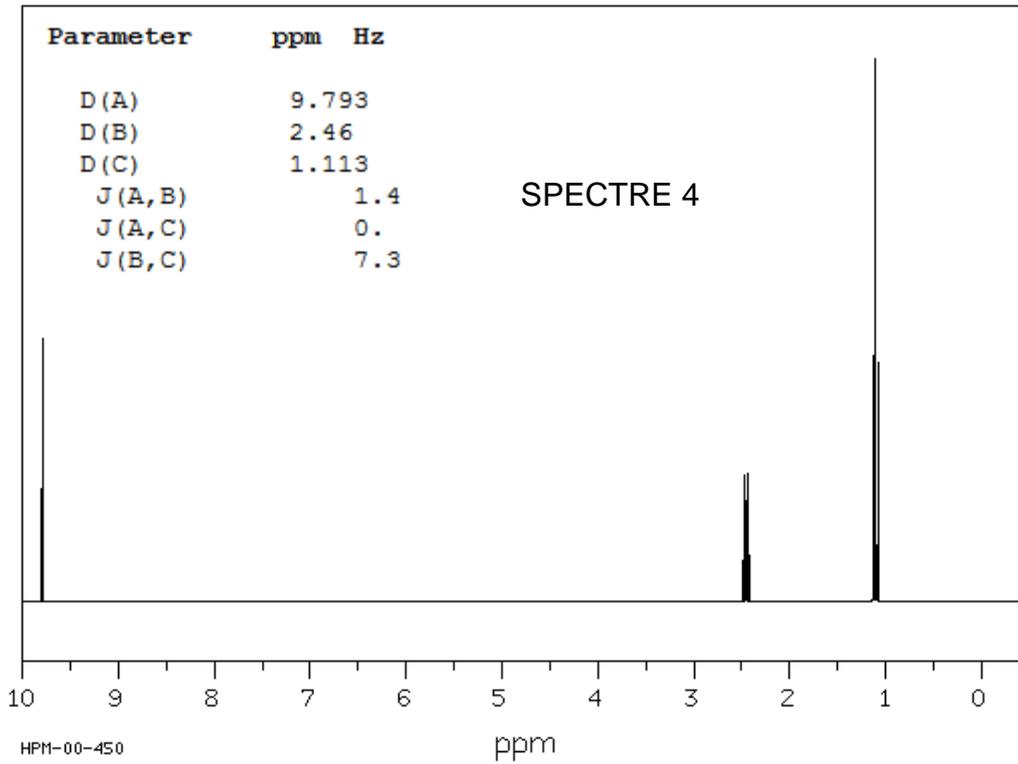
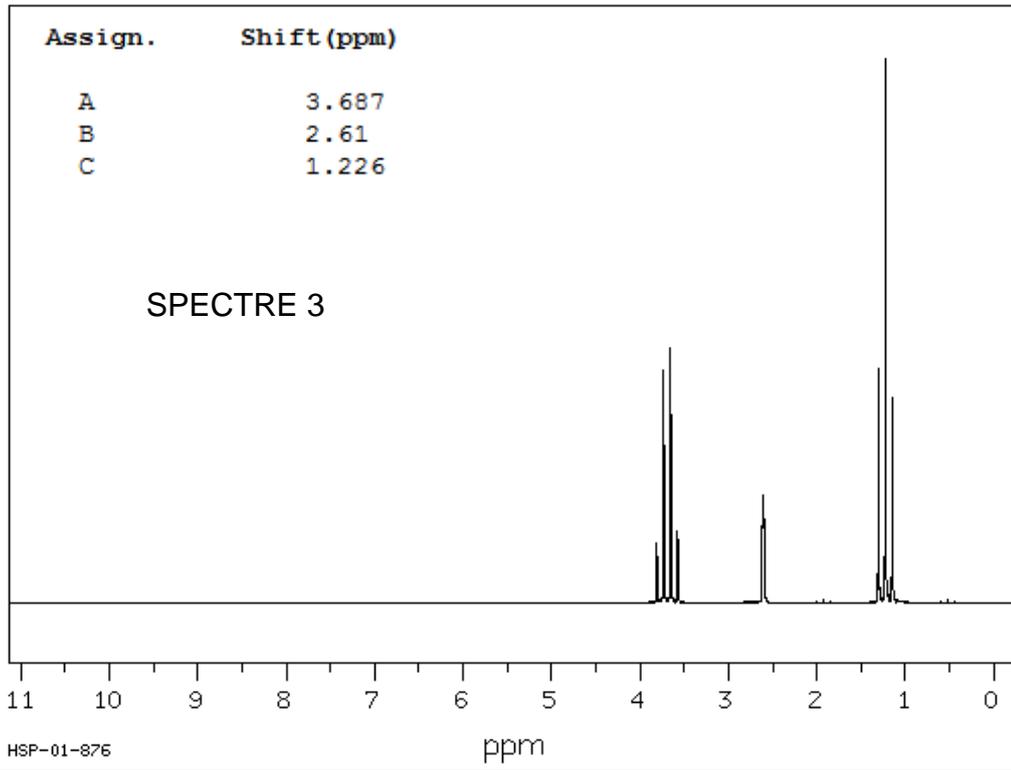


Base de données IR par fréquence :

http://www.unice.fr/cdiac/animations/spectroscopie/infra_rouge/infra_rouge.htm

Annexe 3 : spectres RMN à identifier





Annexe 4 : exemple de table de la littérature

Table de valeurs de déplacements chimiques en RMN ¹H.

Déplacements chimiques moyens de quelques types de protons
(δ est exprimé en ppm par rapport au TMS pris comme référence)

R est un groupe aliphatique saturé ; Ar est un groupe aromatique.

Protons CH ₃	δ	Protons CH ₂	δ	Protons CH	δ
Lié à un C AX₃:		Lié à un C AX₃:		Lié à un C AX₃:	
CH ₃ -C	0,9	CH ₂ -C	1,3	CH-C	1,5
CH ₃ -C-NH ₂ (ou NR ₂)	1,15	CH ₂ -C-NH ₂ (ou NR ₂)	1,3	CH-C-OH(ou OR)	1,6-2
CH ₃ -C-Ar	1,25	CH ₂ -C-Ar	1,6	CH-C-Cl	1,6
CH ₃ -C-OH(ou OR)	1,15-1,3	CH ₂ -C-OH(ou OR)	1,8		
En α d'une insaturation:		En α d'une insaturation:		En α d'une insaturation:	
CH ₃ -C=C	1,6	CH ₂ -C=C	2,1-2,3	CH-C=C	2,5
CH ₃ -CO-OR	2,0	CH ₂ -C \equiv C	2,6	CH-C \equiv N	2,7
CH ₃ -CO-OH	2,1	CH ₂ -CO-OR	2,2	CH-CO-OH	2,6
CH ₃ -CO-NH ₂ (ou NR ₂)	2-2,1	CH ₂ -CO-OH	2,35	CH-CO-R	2,5-2,7
CH ₃ -C=C-C=O		CH ₂ -CO-NH ₂ (ou NR ₂)	2,1-2,2	CH-Ar	3,0
CH ₃ -CO-R	2,0	CH ₂ -C=C-C=O		CH-CO-Ar	3,3
CH ₃ -Ar	2,1-2,2	CH ₂ -CO-R	2,4		
CH ₃ -CO-Ar	2,3-2,4	CH ₂ -Ar	2,4		
	2,6	CH ₂ -CO-Ar	2,7		
			2,9		
Lié à un hétéroatome		Lié à un hétéroatome		Lié à un hétéroatome	
CH ₃ -NH ₂ (ou NR ₂)	2,1-2,3	CH ₂ -NH ₂ (ou NR ₂)	2,5	CH-NH ₂ (ou NR ₂)	2,9
CH ₃ -NH-COR	2,8-2,9	CH ₂ -NH-COR	3,3	CH-NH-COR	3,8-4,1
CH ₃ -OR	3,3	CH ₂ -OR	3,4	CH-OR	3,7
CH ₃ -OH	3,4	CH ₂ -OH	3,6	CH-OH	3,9
CH ₃ -OCOR	3,7	CH ₂ -OCOR	4,2	CH-OCOR	4,8-5,1
CH ₃ -OAr	3,8	CH ₂ -OAr	4,0	CH-OAr	4,0
CH ₃ -NO ₂	4,3	CH ₂ -NO ₂	4,4	CH-NO ₂	4,5-4,7
Protons liés à un C insaturé:	δ	Protons portés par un hétéroatome. Leur position dépend considérablement du solvant et de la concentration.			
-C \equiv CH	1,8-3,1	OH	NH		
-C=CH-	4,5-6,0	Alcool (ROH) : 0,7-5,5	Amine aliphatique (RNH ₂ , RNH-) : 0,6-5,0		
ArH	6,5-8,2	Phénol (ArOH) : 4,5-7,1	Amine aromatique (ArNH ₂ , ArNH-) : 2,9-4,7		
	(benzène : 7,27)	Amides (-CO-NH ₂ , CO-NH-) : 6,0-8,5			
RCH=O	9,5-10,0	Acide (R-CO-OH) : 10,5-12,5			
ArCH=O	9,7-10,5				