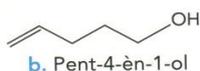
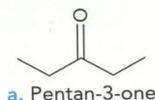


Associer une molécule à son spectre infrarouge

Énoncé

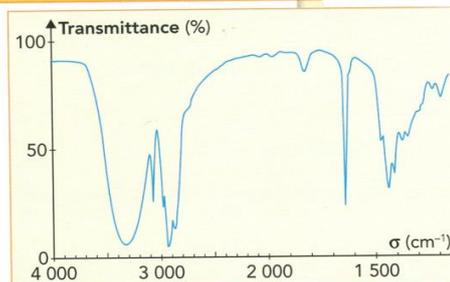
Le spectre infrarouge d'un composé organique A de formule brute $C_5H_{10}O$ est donné ci-contre.

- Le composé A possède-t-il, a priori, des liaisons :
 $C_{\text{tét}}-H$? $C_{\text{tri}}-H$? $O-H$? $C=O$? $C=C$?
- Lequel des deux composés suivants peut-être le composé A?



COMPÉTENCES

- Exploiter des graphes.
- Raisonnement.



Conseils

Comment vérifier la présence éventuelle d'une liaison ?

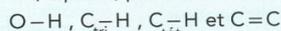
- Rechercher, pour chacune des liaisons proposées, le domaine correspondant des nombres d'ondes caractéristiques dans la fiche n° 11B, p. 594. Repérer si le spectre présente une bande d'absorption dans ce domaine.

Quel composé peut-on associer à ce spectre ?

- Pour chacun des composés proposés, écrire la formule semi-développée, en respectant la règle de l'octet pour l'atome de carbone. Repérer les liaisons effectivement présentes et conclure.

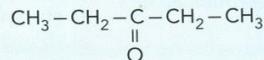
Solution rédigée

- Domaine des nombres d'ondes :
 $C_{\text{tét}}-H$: 2800-3000 cm^{-1} et 1415-1470 cm^{-1} ;
 $C_{\text{tri}}-H$: 3000-3100 cm^{-1} ; $O-H$: 3200-3250 cm^{-1} ;
 $C=O$: 1650-1750 cm^{-1} ; $C=C$: 1625-1685 cm^{-1} .
 • Le spectre présente des bandes d'absorption vers 3300 cm^{-1} , 3080 cm^{-1} , 2950 cm^{-1} (et 1430 cm^{-1}) et 1650 cm^{-1} .
 • Le composé A peut donc, a priori, présenter des liaisons :



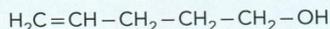
En revanche, A ne possède pas de liaison $C=O$.

- a. La formule de la pentan-3-one est :



Elle présente une liaison $C=O$. Ce ne peut être le composé A.

- b. La formule du pent-4-èn-1-ol est :



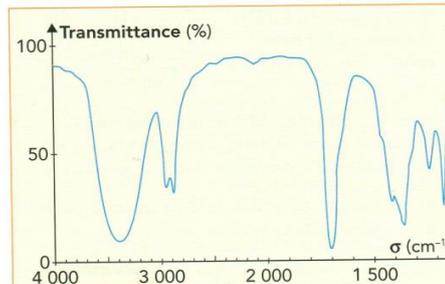
Il a des liaisons $O-H$, $C_{\text{tri}}-H$, $C_{\text{tét}}-H$ et $C=C$.

Le **pent-4-èn-1-ol** peut être le composé A.

Application immédiate

Le spectre infrarouge d'un composé organique B, de formule brute $C_4H_8O_2$, est donné ci-contre. Le composé B peut-il avoir pour formule semi-développée :

- a. $HO-CH_2-CH_2-\overset{\overset{O}{||}}{C}-CH_3$?
- b. $HO-CH_2-CH=CH-CH_2-OH$?
- La bande vers 3400 cm^{-1} est large. Pourquoi ?



6 Relier un spectre de RMN à une molécule

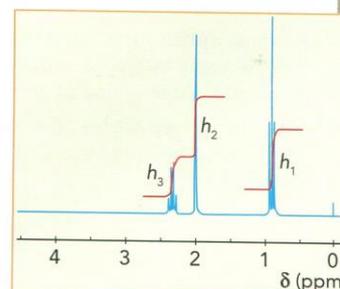
Énoncé

Le spectre de RMN d'un composé organique A de formule brute C_4H_8O est donné ci-contre.

Le composé A peut-il être la butanone ?

COMPÉTENCES

- ▶ Exploiter des graphes.
- ▶ Raisonner.



Conseils

Comment vérifier qu'un spectre de RMN peut être celui d'une molécule donnée ?

Écrire la formule semi-développée de la molécule.

Vérifier que le nombre de types de protons équivalents est égal au nombre de signaux.

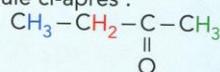
Utiliser la courbe d'intégration pour vérifier le nombre de protons associé à chaque signal.

Vérifier que les multiplicités observées respectent la règle des $(n + 1)$ -uplets.

Vérifier, avec la fiche n° 11C, p. 595, que les déplacements sont ceux attendus.

Solution rédigée

- La butanone présente **trois types de protons équivalents** en bleu, rouge et vert dans la formule ci-après :



ce qui est en accord avec la présence de **trois signaux** dans le spectre de RMN.

- Sur la courbe d'intégration on mesure :

$$h_1 \approx 9 \text{ mm}, h_2 \approx 9 \text{ mm} \text{ et } h_3 \approx 6 \text{ mm}.$$

La somme $h_1 + h_2 + h_3 \approx H \approx 24 \text{ mm}$ est proportionnelle

au nombre total N de protons du composé A, soit 8.

Une hauteur $h = H/N = 24/8 = 3 \text{ mm}$ correspond donc à un proton.

Trois protons résonnent donc pour $\delta_1 \approx 0,9 \text{ ppm}$, trois protons pour $\delta_2 \approx 2 \text{ ppm}$ et deux pour $\delta_3 \approx 2,3 \text{ ppm}$.

- Les trois protons à $\delta_1 \approx 0,9 \text{ ppm}$ donnent un **triplet**; ils ont donc deux protons voisins.

Les trois protons à $\delta_2 \approx 2 \text{ ppm}$ donnent un **singulet**; ils n'ont donc pas de protons voisins.

Les deux protons à $\delta_3 \approx 2,4 \text{ ppm}$ donnent un **quadruplet**; ils ont donc trois protons voisins.

- Dans les tables de données (fiche n° 11C, p. 595) on lit :

– pour $\text{CH}_3 - \text{C}$ $\delta \approx 0,9 \text{ ppm}$;

– pour $-\text{C} - \text{CH}_2 - \text{CO} - \text{R}$ $\delta \approx 2,4 \text{ ppm}$;

– pour $\text{CH}_3 - \text{CO} - \text{R}$ $\delta \approx 2,2 \text{ ppm}$.

Le nombre de protons équivalents par signal, la courbe d'intégration, les multiplicités et les déplacements chimiques du spectre sont effectivement compatibles avec la **butanone**.

Application immédiate

Le spectre de RMN d'un composé organique B de formule brute $C_2H_4Cl_2$ est donné ci-contre.

Les signaux ont été zoomés pour les rendre plus visibles.

Le composé B peut-il être le 1,1-dichloroéthane ?

