

N° d'anonymat

Note Finale sur
20

Note sur X

Licence Professionnelle
Industries pharmaceutiques, cosmétiques et de santé

Option Contrôle et Développement Analytique

Année universitaire 2023/2024
Première session

UE N° 7

Matière : **Spectrophotométrie IR**
Durée de l'épreuve : 1 heure

Documents autorisés : non
Calculatrice autorisée : oui
Ordinateur ou tablette autorisés : non

Epreuve notée sur 20 points
Correcteur : L. GODIN

Ce cahier comporte 8 pages celle-ci comprise

Instructions générales

- Ne pas dégrafer ou déchirer ce fascicule
- Soyez très clair si vous faites un renvoi pour terminer une question.
- Respecter les modalités de réponses proposées
- Toute fraude ou tentative de fraude fera l'objet de poursuites disciplinaires (décret n° 92-657 du 13 juillet 1992)

ÉTUDE DE DIFFÉRENTES LIAISONS PAR SPECTROMÉTRIE IRTF

1^{ère} question

(1 point)

Dans le modèle classique de l'oscillateur harmonique, rappeler l'expression littérale du nombre d'onde $\bar{\nu}$ en fonction de la célérité c de l'onde IR, de la constante de force k de la liaison considérée, ainsi que de la masse réduite μ du système diatomique.

Réponse du candidat :

2^{ème} question

(2,5 points)

En admettant que dans une molécule des liaisons peuvent être considérées localisées et indépendantes, donc assimilables à un petit oscillateur, calculer la constante de force k d'une liaison O-H libre sachant que son nombre d'onde $\bar{\nu}(\text{OH}) = 3700 \text{ cm}^{-1}$.

Données utiles : $M_{\text{H}} = 1 \text{ g.mol}^{-1}$, et $M_{\text{O}} = 16 \text{ g.mol}^{-1}$.

Célérité de l'onde IR dans le vide : $c = 3,00.10^8 \text{ m.s}^{-1}$;

Nombre d'Avogadro : $N_{\text{A}} = 6,02.10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Réponse du candidat :

3^{ème} question

(2,5 points)

Pour les liaisons C-H et C-D, la constante de force k est sensiblement égale.

Pour cette approximation, et en prenant pour nombre d'onde de la bande de vibration de valence de la liaison C-H : 3000 cm^{-1} , en déduire le nombre d'onde de la bande de vibration de valence de la liaison C-D.

Données utiles : $M_H = 1 \text{ g.mol}^{-1}$, et $M_D = 2 \text{ g.mol}^{-1}$.

Célérité de la lumière dans le vide : $c = 3,00.10^8 \text{ m.s}^{-1}$;

Nombre d'Avogadro : $N_A = 6,02.10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Réponse du candidat :

4^{ème} question

(2,5 points)

Expliquer simplement, pourquoi on observe un déplacement vers les grands nombres d'ondes, pour une liaison C = C, par rapport à une liaison C - C.

Réponse du candidat :

5^{ème} question

(2 points)

On désire analyser, par transmission, un échantillon par absorption infrarouge. Sachant que celui-ci est sous forme d'une poudre, quelles méthodes peut-on utiliser (décrire en quelques lignes ces méthodes) ?

Réponse du candidat :

6^{ème} question**(3,5 points)**

Un composé A de formule $C_nH_{2n+1}O$ et de masse molaire $M_A = 102 \text{ g.mol}^{-1}$ est représenté par le spectre N° 1. Ce composé réagit avec de l'ammoniac pour donner de l'eau et un composé B de masse molaire $M_B = 101 \text{ g.mol}^{-1}$ représenté par le spectre N° 2.

Interpréter les bandes d'absorption de valence du spectre 1 :

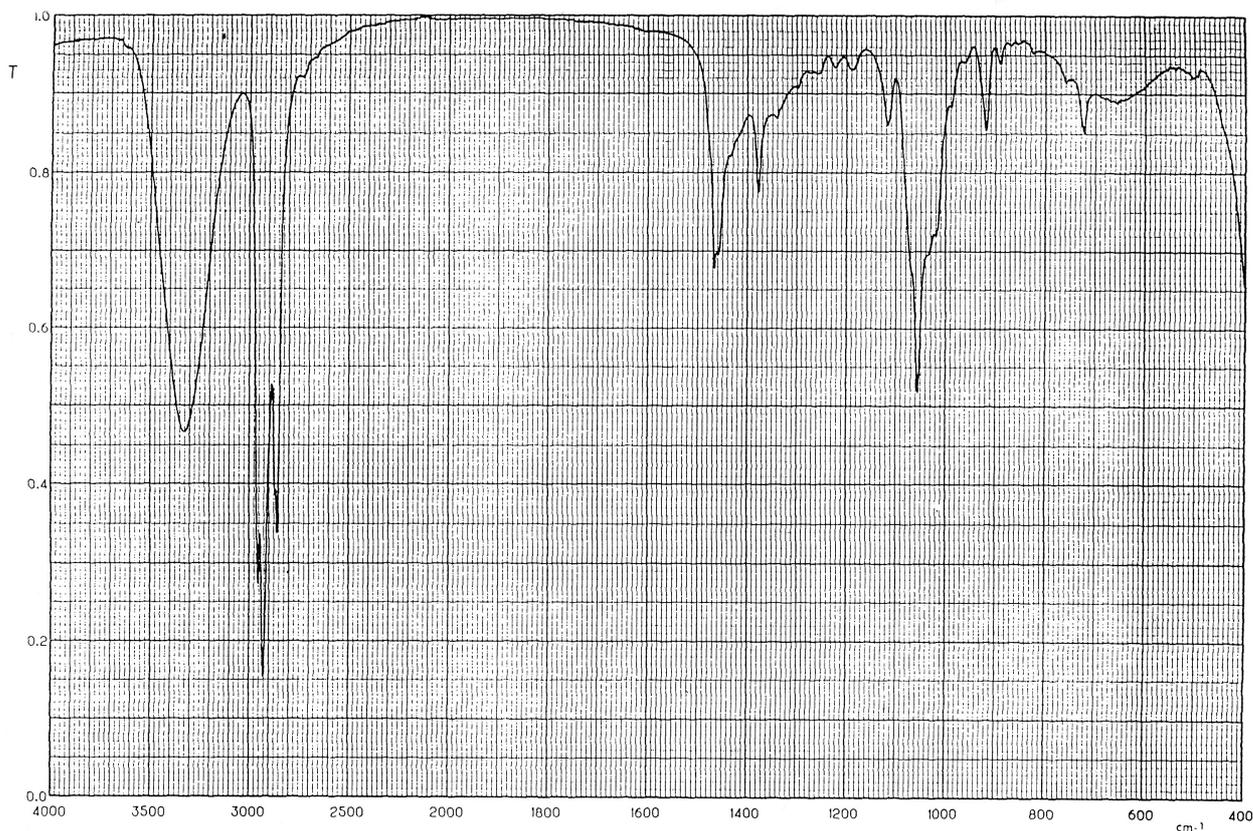


Figure 1 : spectre 1

Réponse du candidat :

Le spectre IR met en évidence :

| nombre d'onde $\bar{\nu}$ (cm^{-1}) | mode de vibration | groupement chimique |
|--|-------------------|---------------------|
| 3320 | | |
| 2840-2960 | | |
| 1460 | | |
| 1430 | | |
| 1380 | | |
| 1060 | | |
| 660 | | |

7^{ème} question

(3 points)

Interpréter les bandes d'absorption de valence du spectre 2 :

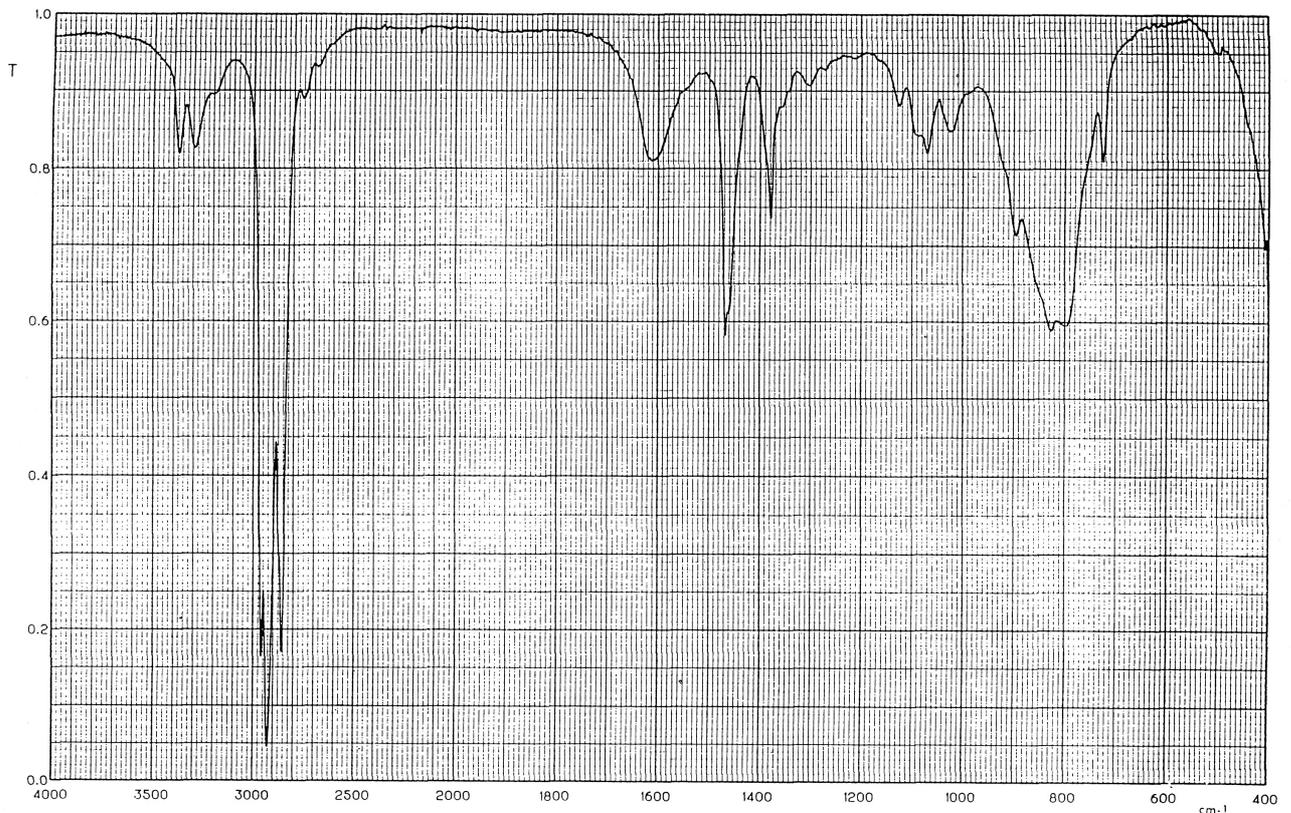


Figure 2 : spectre 2

Réponse du candidat :

Le spectre IR met en évidence :

| nombre d'onde $\bar{\nu}$ (cm ⁻¹) | mode de vibration | groupement chimique |
|---|-------------------|---------------------|
| 3300 et 3400 | | |
| 2840-2960 | | |
| 1610 | | |
| 1460 | | |
| 1380 | | |
| 800 | | |

8^{ème} question

(3 points)

Écrire la réaction du composé A avec l'ammonique. Identifier les composés A et B, à l'aide de l'analyse des spectres et des masses molaires.

Réponse du candidat :

TABLE IR

| liaison | nature | nombre d'onde (cm ⁻¹) | intensité |
|--|-------------|---|--------------------------|
| O-H alcool libre | valence | 3 580 – 3 670 | F ; fine |
| O-H alcool lié | valence | 3 200 – 3 400 | F ; large |
| N-H amine | valence | 3 100 – 3 500 | m |
| imine | | | |
| N-H amide | valence | 3 100 – 3 500 | F |
| C _{di} -H | valence | 3 300 – 3 310 | m ou f |
| C _{tri} -H | valence | 3 000 – 3 100 | m |
| C _{tri} -H aromatique | valence | 3 030 – 3 080 | m |
| C _{tét} -H | valence | 2 800 – 3 000 | F |
| C _{tri} -H aldéhyde | valence | 2 750 – 2 900 | m |
| O-H acide carboxylique | valence | 2 500 – 3 200 | F à m ; large |
| C≡C | valence | 2 100 – 2 250 | f |
| C≡N | valence | 2 120 – 2 260 | F ou m |
| C=O anhydride | valence | 1 700 – 1 840 | F ; 2 bandes |
| C=O chlorure d'acyle | valence | 1 770 – 1 820 | F |
| C=O ester | valence | 1 700 – 1 740 | F |
| C=O aldéhyde et cétone | valence | 1 650 – 1 730 | F |
| | | abaissement de 20 à 30 cm ⁻¹ | |
| | | si conjugaison | |
| C=O acide | valence | 1 680 – 1 710 | F |
| C=C | valence | 1 625 – 1 685 | m |
| C=C aromatique | valence | 1 450 – 1 600 | variable ; 3 ou 4 bandes |
| N=O | valence | 1 510 – 1 580 | F ; 2 bandes |
| | | 1 325 – 1 365 | |
| C=N | valence | 1 600 – 1 680 | F |
| N-H amine ou amide | déformation | 1 560 – 1 640 | F ou m |
| C _{tét} -H | déformation | 1 415 – 1 470 | F |
| C _{tét} -H (CH ₃) | déformation | 1 365 – 1 385 | F ; 2 bandes |
| C-O | valence | 1 050 – 1 450 | F |
| C-C | valence | 1 000 – 1 250 | F |
| C-F | valence | 1 000 – 1 040 | F |
| C _{tri} -H aromatique monosubstitué | déformation | 730 – 770 | F ; 2 bandes |
| | | 690 – 770 | |
| C _{tri} -H aromatique o-disubstitué | déformation | 735 – 770 | F |
| C _{tri} -H aromatique m-disubstitué | déformation | 750 – 810 | F et m ; 2 bandes |
| | | 680 – 725 | |
| p-disubstitué | déformation | 800 – 860 | F |
| C _{tri} -H aromatique trisubstitué | déformation | 770 – 800 | F et m ; 2 bandes |
| 1,2,3 | | 685 – 720 | |
| 1,2,4 | déformation | 860 – 900 | F et m ; 2 bandes |
| | | 800 – 860 | |
| 1,3,5 | déformation | 810 – 865 | F ; 2 bandes |
| | | 675 – 730 | |
| C-Cl | valence | 700 – 800 | F |
| C-Br | valence | 600 – 750 | F |
| C-I | valence | 500 – 600 | F |

F : fort ; m : moyen ; f : faible

*Table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation de quelques groupes fonctionnels.
On distingue les atomes de carbone tétraonaux (notés C_{tét}), trigonaux (notés C_{tri}) et digonaux (notés C_{di}).*

C-N

valence

1250-1360

variables ; 3 ou 4 bandes