

DTS n° 2
ANALYSE
(1h00)

*Documents non autorisés - Calculatrice autorisée
Justifier les calculs
Séparer calcul littéral et numérique*

Exercice 1 : Spectrophotométrie IR : (12,5 points)

1) Quelles sont les conditions requises pour qu'une molécule puisse donner un spectre en spectroscopie IR ?

2) Qu'appelle-t-on masse réduite d'une molécule diatomique ?

3) En considérant qu'une liaison chimique entre deux atomes peut-être assimilée à un oscillateur harmonique, calculer la constante de force de liaison C-Cl pour la molécule de tétrachlorure de carbone, sachant que la bande spectrale correspond au nombre d'onde $\lambda^{-1} = 715 \text{ cm}^{-1}$.

Données : célérité de la lumière $c = 3,00 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$; constante de Planck $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$.

Nombre d'Avogadro $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$;

masses molaires : $M_C = 12 \text{ g.mol}^{-1}$ et $M_{Cl} = 35,5 \text{ g.mol}^{-1}$.

4) Rappeler, en détaillant, les principales méthodes utilisées pour l'analyse d'une poudre en spectrophotométrie IR.

5) Interprétation de spectres :

Un composé A de formule C_xH_yO 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.

- a - Interpréter les principales bandes de vibration d'élongation des spectres 1 et 2.
(annexe 1 à rendre avec la copie).

- b - Identifier les composés A et B.

Données : les composés chimiques sont acycliques et non ramifiés.

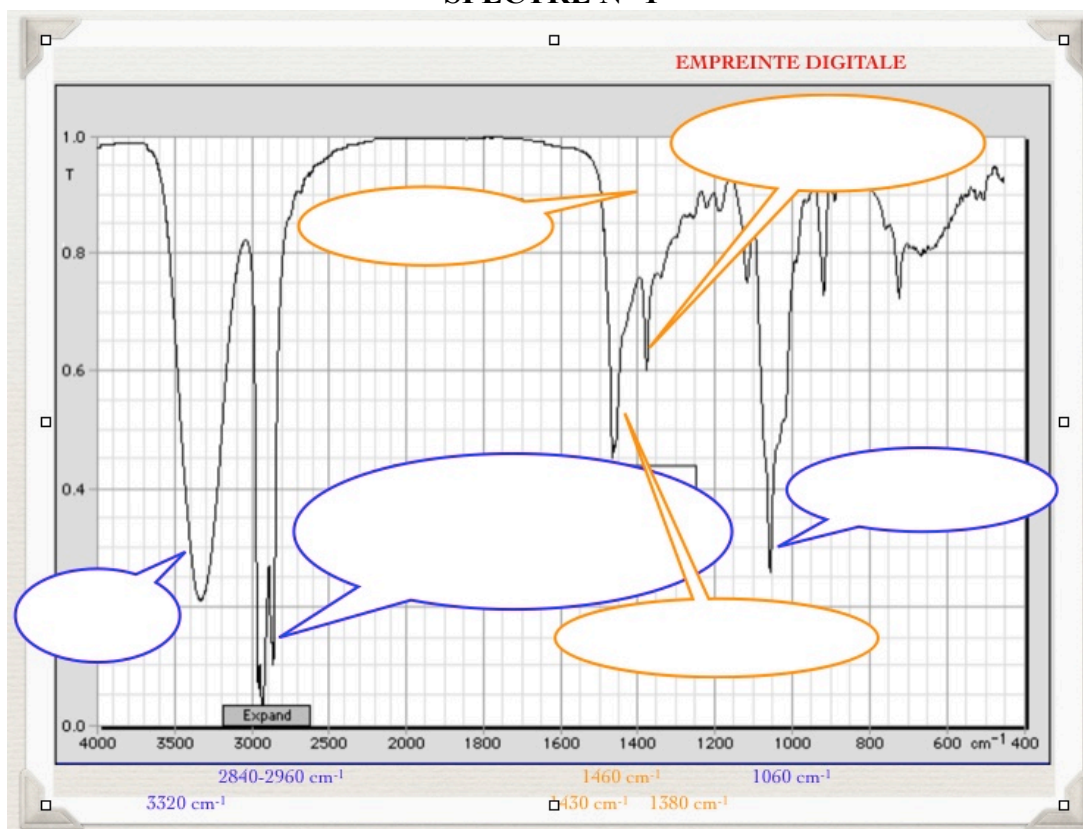
Masses molaires : $M_H = 1 \text{ g.mol}^{-1}$; $M_C = 12 \text{ g.mol}^{-1}$; $M_N = 14 \text{ g.mol}^{-1}$ et $M_O = 16 \text{ g.mol}^{-1}$.

Exercice 2: Chromatographie (7,5 points)

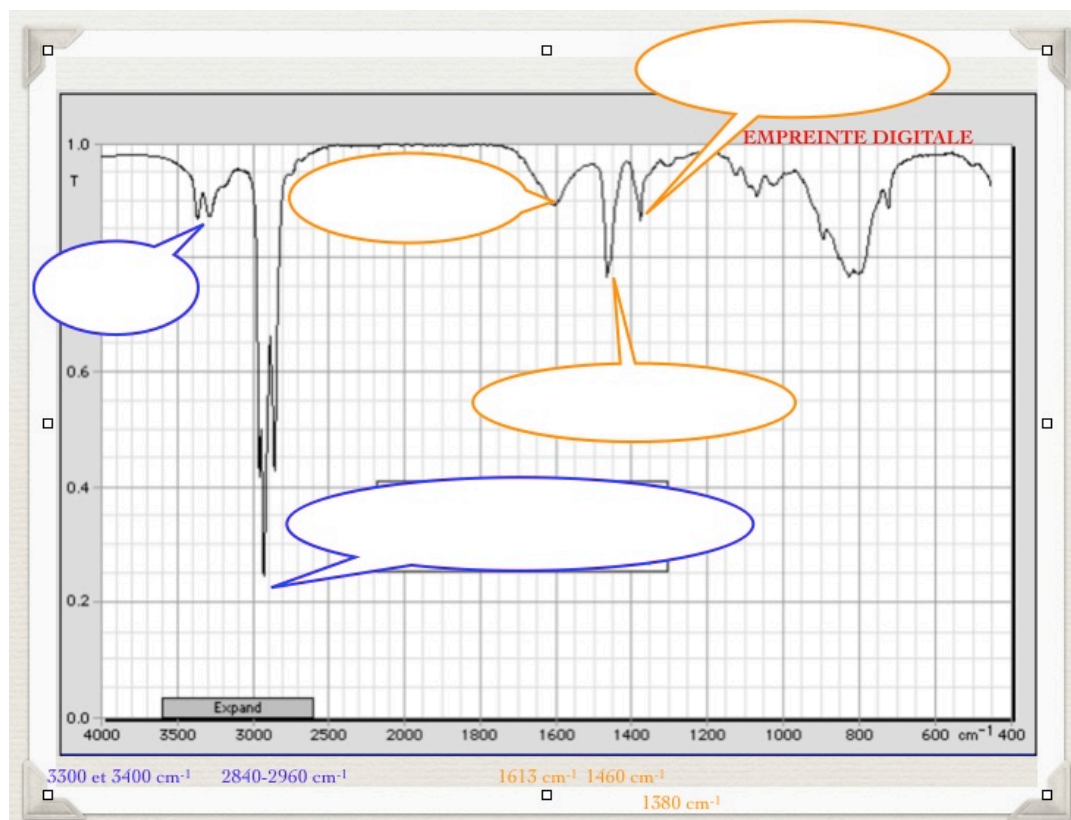
Trois composés A, B et C sont séparés par chromatographie sur une colonne d'une longueur de 5 cm. La vitesse linéaire moyenne de la phase mobile est de $0,16 \text{ cm.s}^{-1}$. Les temps de rétention et les largeurs à la base des pics sont donnés par le tableau suivant :

Composé	t_R (min)	w (?)
A	2,50	0,32
B	5,20	0,69
C	10,00	1,46

- 1) En quelle unité exprime-t-on w ? À quoi correspond w ?
- 2) Quel est le composé le plus retenu ?
- 3) Calculer le temps mort t_M .
- 4) Calculez pour chaque composé :
 - le facteur de rétention k' ;
 - le nombre de plateaux théoriques N (les pics sont supposés gaussiens).
- 5) Calculez pour chaque couple :
 - le facteur de sélectivité α ;
 - la résolution R_s .
- 6) Conclure sur la séparation des composés étudiés.

ANNEXE 1
SPECTRE N° 1

SPECTRE N° 2



ANNEXE 2 SPECTROSCOPIE INFRAROUGE

Table des nombres d'onde des vibrations d'élongation et de déformation

C_{tet} : C tétragonalC_{tri} : C trigonal >C=C_{di} : C digonal -C≡

Liaison	Nature	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité F : fort ; m : moyen ; f : faible
O-H alcool libre	Élongation	3590-3650	F (fine)
O-H alcool lié	Élongation	3200-3600	F (large)
N-H amine	Élongation	3300-3500	M
N-H amide	Élongation	3100-3500	F
C _{di} -H	Élongation	~ 3300	M ou f
C _{tri} -H	Élongation	3030-3100	M
C _{tri} -H aromatique	Élongation	3000-3100	M
C _{tet} -H	Élongation	2850-2970	F
C _{tri} -H aldéhyde	Élongation	2700-2900	M
O-H acide carboxylique	Élongation	2500-3200	F à m (large)
C≡C	Élongation	2100-2260	F
C≡N nitriles	Élongation	2200-2260	F ou m
C=O anhydride	Élongation	1800-1850 1740-1790	F
C=O chlorure d'acide	Élongation	1790-1815	F
C=O ester	Élongation	1735-1750	F
C=O aldéhyde et cétone	Élongation	1700-1740 abaissement de ~ 20 à 30 cm ⁻¹ si conjugaison	F
C=O acide carboxylique	Élongation	1700-1725	F
C=O amide	Élongation	1650-1700	F
C=C	Élongation	1620-1690	M
C=C aromatique	Élongation	1450-1600	Variable ; 3 ou 4 bandes
N=O (de -NO ₂) Conjugué	Élongation	1500-1550 1290-1360	F
N=N	Élongation	1400-1500	f ; parfois invisible
C=N	Élongation	1640-1690	F ou m
N-H amine ou amide	Déformation	1560-1640	F ou m
C _{tet} -H	Déformation	1430-1470	F
C _{tet} -H (CH ₃)	Déformation	1370-1390	F ; 2 bandes
O-H	Déformation	1260-1410	F
P=O	Élongation	1250-1310	F
C _{tet} -O-C _{tet} (étheroxydes)	Élongation	1070-1150	F
C _{tet} -OH (alcools)	Élongation	1010-1200	
C _{tet} -O-C _{tri} (esters) C _{tri} -O-C _{tri} (anhydrides)	Élongation	1050-1300	F ; 1 ou 2 bandes
C-N	Élongation	1020-1220	M
C-C	Élongation	1000-1250	F
C-F	Élongation	1000-1040	F
C _{tri} -H de -HC=CH- (E) (Z)	Déformation Déformation	960-970 670-730	F M
C _{tri} -H aromatique monosubstitué	Déformation	730-770 et 680-720	F ; 2 bandes
C _{tri} -H aromatique o-disubstitué	Déformation	735-770	F
m-disubstitué	Déformation	750-800 et 680-720	F et m ; 2 bandes
p-disubstitué	Déformation	800-860	F
C _{tri} -H aromatique 1,2,3 trisubstitué	Déformation	770-800 et 685-720	F et m ; 2 bandes
1,2,4 trisubstitué	Déformation	860-900 et 800-860	F et m ; 2 bandes
1,3,5 trisubstitué	Déformation	810-865 et 675-730	F et m ; 2 bandes
C _{tet} -Cl	Élongation	600-800	F
C _{tet} -Br	Élongation	500-750	F
C _{tet} -I	Élongation	≈ 500	F