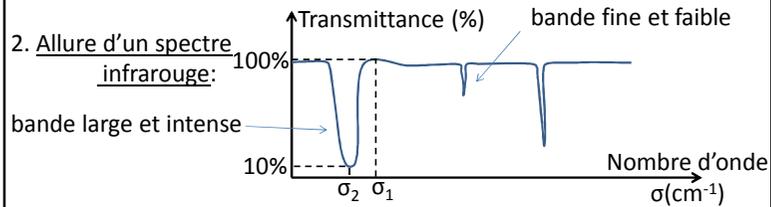


CQFR Spectres infrarouge et de RMN.

1. Intérêt d'un spectre infrarouge:

Il permet de connaître les groupes fonctionnels d'une molécule. (la molécule reçoit un rayonnement infrarouge, selon la valeur de la longueur d'onde du rayonnement reçu, le groupe fonctionnel va absorber ou pas la radiation)



Une transmittance de 100% signifie que le rayonnement frappant la molécule n'est absorbé par aucun groupe fonctionnel de la molécule → ex: rayonnement de nombre d'onde σ_1 .

Une transmittance de 10% signifie qu'un groupe fonctionnel de la molécule a absorbé le rayonnement à 90% → ex: rayonnement de nombre d'onde σ_2 .

6. Intérêt d'un spectre de RMN (résonance magnétique nucléaire):

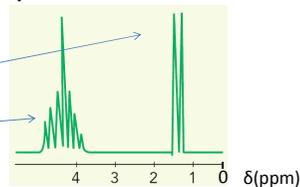
Il permet d'avoir des informations sur la structure du squelette carboné d'une molécule.

(la molécule reçoit un champ magnétique de fréquence variable, selon la fréquence et la position des atomes d'hydrogène de la molécule, ces derniers vont se mettre à «vibrer» ou pas).

2. Allure d'un spectre de RMN:

Signal 1 (ou 1^{er} massif): doublet

Signal 2 (ou 2nd massif): septuplet



3. Connaître le nom des multiplets:

- 1 pic : singulet
- 2 pics : doublet
- 3 pics : triplet
- 4 pics : quadruplet
- 5 pics : quintuplet
- 6 pics : sextuplet
- 7 pics : septuplet
- 8 pics : octuplet

3. Relation entre nombre d'onde σ et longueur d'onde λ :

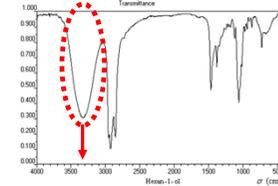
$$\lambda = \frac{1}{\sigma}$$

4. Savoir trouver la valeur de λ connaissant celle de σ :

Exemple : $\sigma = 3200 \text{ cm}^{-1}$ $\lambda = ?$

$$\lambda = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{3200} = 3,13 \cdot 10^{-4} \text{ cm} = 3,13 \cdot 10^{-6} \text{ m} = 3,13 \cdot 10^{-6} \cdot 10^9 \text{ nm} = 3,13 \cdot 10^3 \text{ nm}$$

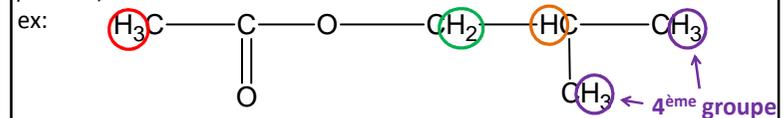
5. Savoir que la bande caractérisant le groupe hydroxyle OH (alcool et acide carboxylique (en phase liquide)) est facilement reconnaissable car la bande est large et intense, elle se situe entre 3200 et 3500 cm^{-1}



3. Plan pour l'étude d'un spectre de RMN:

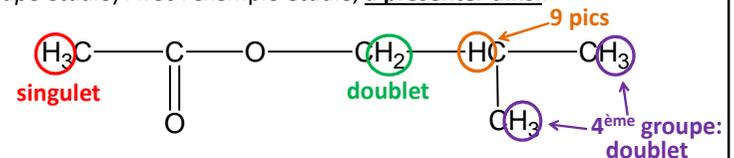
1^{er}: Entourer avec la même couleur les groupes de protons H équivalents.

(2 protons sont équivalents si on rencontre le même enchaînement d'atomes quand on se déplace dans la molécule en partant de ces 2 protons)



2^{ème}: préciser le multiplet pour chaque groupe de protons équivalents:

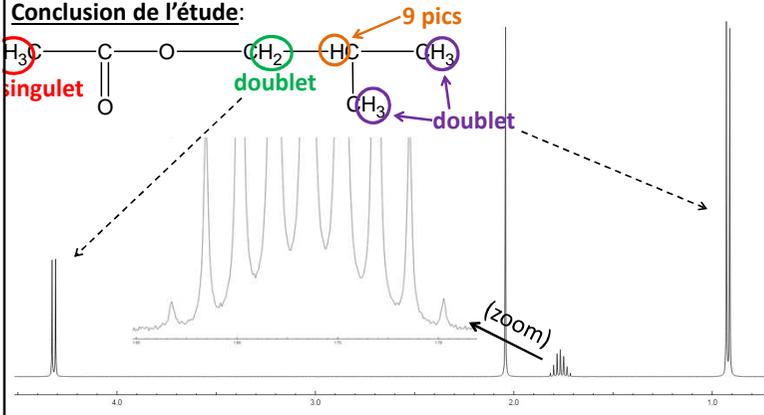
(règle des n+1-uplets: on ajoute 1 au nombre de protons voisins du groupe étudié) Avec l'exemple étudié, à présenter ainsi:



3^{ème} : Si les 2 première étapes ne suffisent pas pour associer les groupes de protons aux signaux du spectre, il faut alors utiliser les tables qui donnent les valeurs des déplacements chimiques δ .

Dans l'exemple, les valeurs de δ peuvent permettre de distinguer les 2 doublets : $-\text{O}-\text{CH}_2-$: $\delta = 4,3\text{ppm}$ et $-\text{C}(\text{CH}_3)_2$: $\delta = 0,9\text{ ppm}$

Conclusion de l'étude:



4. Cas particulier:

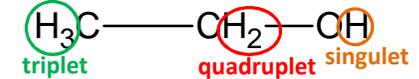
L'hydrogène H du groupe **OH** et les hydrogènes H liés à un atome d'azote N ($-\text{NH}_2$ ou $-\text{NH}-$) ne se couplent pas avec les protons voisins, concrètement cela signifie qu'il faut «isoler» ces protons des autres;

exemple avec : H3C-CH2-OH

Il faut imaginer que OH est très éloigné des autres H:



Rédiger de la façon suivante: Le proton lié à O ne se couple pas donc :

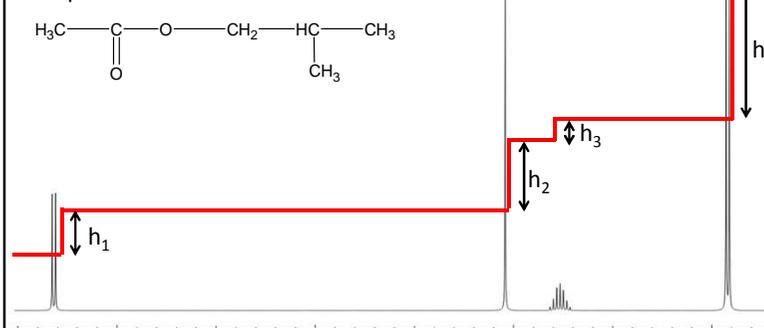


6. Courbe d'intégration:

C'est une courbe que l'on superpose au spectre de RMN, elle sert à déterminer le nombre d'atomes d'hydrogène dans chaque groupe de protons équivalents.

Propriété de cette courbe : la hauteur h d'une «marche» est proportionnelle au nombre d'atomes d'H contenus dans le groupe correspondant.

Exemple avec la molécule étudiée:



Résolution:
$$\left. \begin{array}{l} h_1 \approx 15 \text{ mm} \\ h_2 \approx 23 \text{ mm} \\ h_3 \approx 8 \text{ mm} \\ h_4 \approx 46 \text{ mm} \end{array} \right\} h_{\text{tot}} \approx 92 \text{ mm}$$

(x est le nombre d'atomes H contenus dans le groupe étudié, x_{tot} est le nombre total d'atomes H dans la molécule)

On sait que:
$$\frac{x_1}{h_1} = \frac{x_2}{h_2} = \frac{x_3}{h_3} = \frac{x_4}{h_4} = \frac{x_{\text{tot}}}{h_{\text{tot}}}$$

D'après la formule semi-développée: $x_{\text{tot}} = 12$

donc $x_1 = \frac{x_{\text{tot}} \cdot h_1}{h_{\text{tot}}} = \frac{12 \times 15}{92} = 1,96 \rightarrow 2$ atomes d'hydrogène

donc $x_2 = \frac{x_{\text{tot}} \cdot h_2}{h_{\text{tot}}} = \frac{12 \times 23}{92} = 3,00 \rightarrow 3$ atomes d'hydrogène

donc $x_3 = \frac{x_{\text{tot}} \cdot h_3}{h_{\text{tot}}} = \frac{12 \times 8}{92} = 1,04 \rightarrow 1$ atome d'hydrogène

$x_4 = 6,00 \rightarrow 6$ atomes d'hydrogène