

Corrigé TD Série-4

Interprétation des Spectres IR

Exercice-1

a- C_4H_8O

C_nH_mO

$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 4 + 2) - 8] = \frac{2}{2} = 1$$

$DBE = \text{Doubles Bandes Equivalentes}$ (nombre de centres non saturés).

Le pic à $1720 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow C=O_{\text{str}}$.

L'absence de bande à 2750 cm^{-1} qui pourrait nous renseigner sur un aldéhyde.

Ceci implique qu'on est en présence d'un cétone non conjugué.

Donc le centre d'insaturation $DBE = 1$ concerne le $(C=O)$

D'après la formule brute C_4H_8O le composé est de type $R-CO-R'$

Dans la région $2990 \text{ cm}^{-1} - 2872 \text{ cm}^{-1}$ on observe plus de deux pics $\Leftrightarrow (C-H_{\text{str}\cdot\text{sym}})$ et $C-H_{\text{str}\cdot\text{antisym}}$ de (CH_3) et (CH_2) . (voir le cours)

$1465 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow (C-H_{\text{def}\cdot\text{sym}})$ de (CH_2) :

$1420 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow (C-H_{\text{def}\cdot\text{antisym}})$ de (CH_3)

$1375 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow (C-H_{\text{def}\cdot\text{isym}})$ de (CH_3)

$C-H_{\text{def}}$ du CH_2 hors du plan à 720 cm^{-1}

Donc on a : $R = CH_3$ et $R' = CH_2CH_3$.

Le composé est :



b- C₅H₈O

$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 5 + 2) - 8] = \frac{4}{2} = 2$$

$$DBE = 2$$

L'absence de bandes aux alentours de 1700 cm⁻¹ indique l'absence du groupement carbonyle.

Donc soit on a deux doubles liaisons C=C ou un triple liaison C≡C !

D'après le spectre la bande faible à 2200 cm⁻¹ indique clairement la présence d'un C≡Cstr.

Nous avons aussi une forte absorption à 3300 cm⁻¹ caractéristique au C-Hstr sp.
=> la présence d'un alcyne terminal R- C≡C-H.

La bande large 3320-3500 cm⁻¹ est caractéristique d'une liaison hydrogène à partir d'un alcool (O-Hstr)lié .

La bande à 1150 cm⁻¹ <=> C-Ostr.

Dans la région 2900-3000 cm⁻¹ on observe que deux pics <=> (C-H_{str·sym}) et C-H_{str·antisym}) de (CH₃). pas de bandes pour les CH₂.

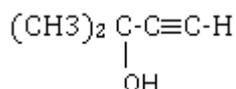
La même chose dans la région de vibration de déformation, on constate que deux bandes à

$$1420 \text{ cm}^{-1} \text{ <=> (C-H}_{\text{def.antisym}}) \text{ de (CH}_3\text{)}$$

$$1375 \text{ cm}^{-1} \text{ <=> (C-H}_{\text{def.isym}}) \text{ de (CH}_3\text{)}$$

R ne peut être donc que : R= HO-C(CH₃)₂

Le composé est :



C- $C_8H_8O_2$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 8 + 2) - 8] = \frac{10}{2} = 5$$

Si on a une formule brute C_nH_mO ou $C_nH_mN_p$, ou' $n \geq 6$, $DBE \geq 4$, et dans le spectre il existe des pics forts (s) dans la régions $700-900cm^{-1}$ et des pics (m) dans la région $1400-1620cm^{-1}$ et des pics (w) dans la région $3000-3080cm^{-1}$, c'est une significative d'un noyau aromatique.

Dans ce spectre on en constate :

Une forte absorption à $700cm^{-1}$ qui indique la vibration de déformation C-Hdef. mono substitué.

Les deux bandes à 1460 et $1600 cm^{-1}$ sont caractéristiques au $C \equiv C$ str. aromatique.

Des bandes faible (w) dans la région $3000-3080cm^{-1}$ caractéristiques au $C-H$ str .

Donc on a un cycle aromatique monosubstitué avec 4 DBE (1 pour le cycle et 3 π)



$$\begin{array}{r} C_8H_8O_2 \\ - C_6H_5 \\ \hline = C_2H_3O_2 \end{array}$$

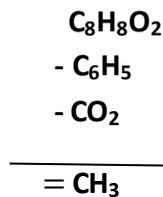
Dans le reste de la formule $C_2H_3O_2$, nous avons encore une double liaison

La bande forte à $1715 cm^{-1}$ indique un groupement carbonyle $\Rightarrow C=O$ str.

Il reste encore un oxygène donc soit un acide ou un ester

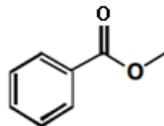
Les bandes à $1100-1150cm^{-1} \Leftrightarrow C-O$ str

L'absence d'une bande large dans la région $2500-3450cm^{-1}$ indique que le composé est un ester.



Le pic à 2950 => (C-H_{str.}) de (CH₃)

Donc la structure est:



Exercice-2

C₈H₈O: 3080cm⁻¹ (m), 2900cm⁻¹ (m), 1690cm⁻¹ (s), 1610cm⁻¹ (m),
1450cm⁻¹(m),750cm⁻¹(s).

$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 8 + 2) - 8] = \frac{10}{2} = 5$$

Une forte absorption à 750cm⁻¹ qui indique la vibration de déformation C-Hdef. mono substitué

Les deux bandes à 1450 et 1610 cm⁻¹ sont caractéristiques au C≡Cstr. aromatique.

La bande moyenne (m) à 3080cm⁻¹ caractéristiques au ≡ C-Hstr .

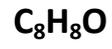
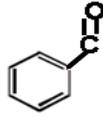
Donc on a un cycle aromatique monosubstitué avec 4 DBE (1 pour le cycle et 3 π)



Dans le reste de la formule **C₂H₃O**, nous avons encore une double liaison

La bande forte à 1690cm⁻¹ (s) indique un groupement carbonyle conjugué

=> C=Ostr, lié directement au cycle aromatique, c'est-à-dire on a le fragment suivant :



Le pic à 2900 => C-H_{str.} de (CH₃)

Donc la structure est:

