

# Caractérisations par spectroscopie en synthèse organique

---

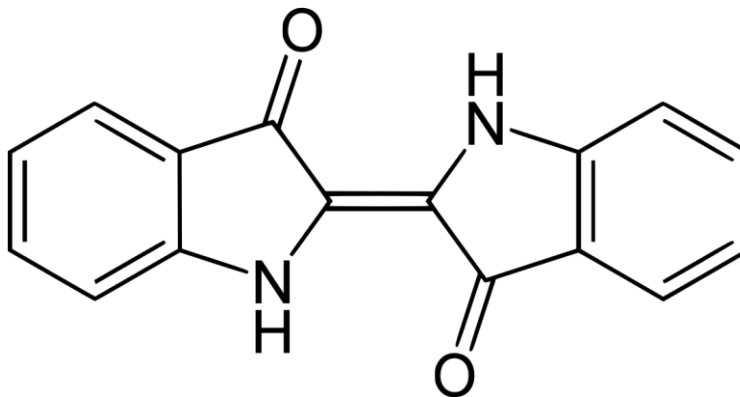
Agrégation 2020

# Synthèse de l'indigo

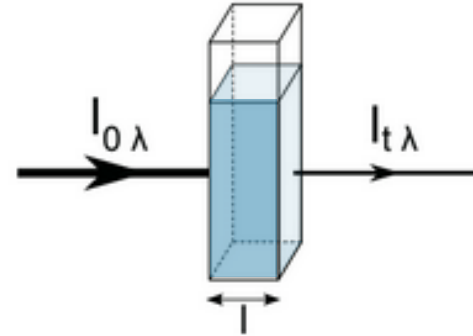
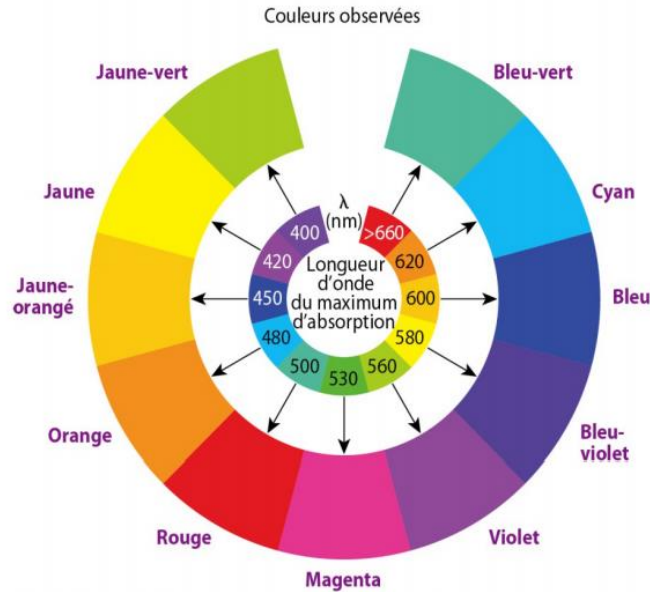


Espèces	2-nitrobenzaldéhyde	acétone	ion hydroxyde	indigo	ion éthanoate	eau
Quantités initiales	0,5 g = $3,3 \cdot 10^{-3}$ mol	5 mL = $68 \cdot 10^{-3}$ mol	2,5 mL à 1 mol/L			

Indigo :

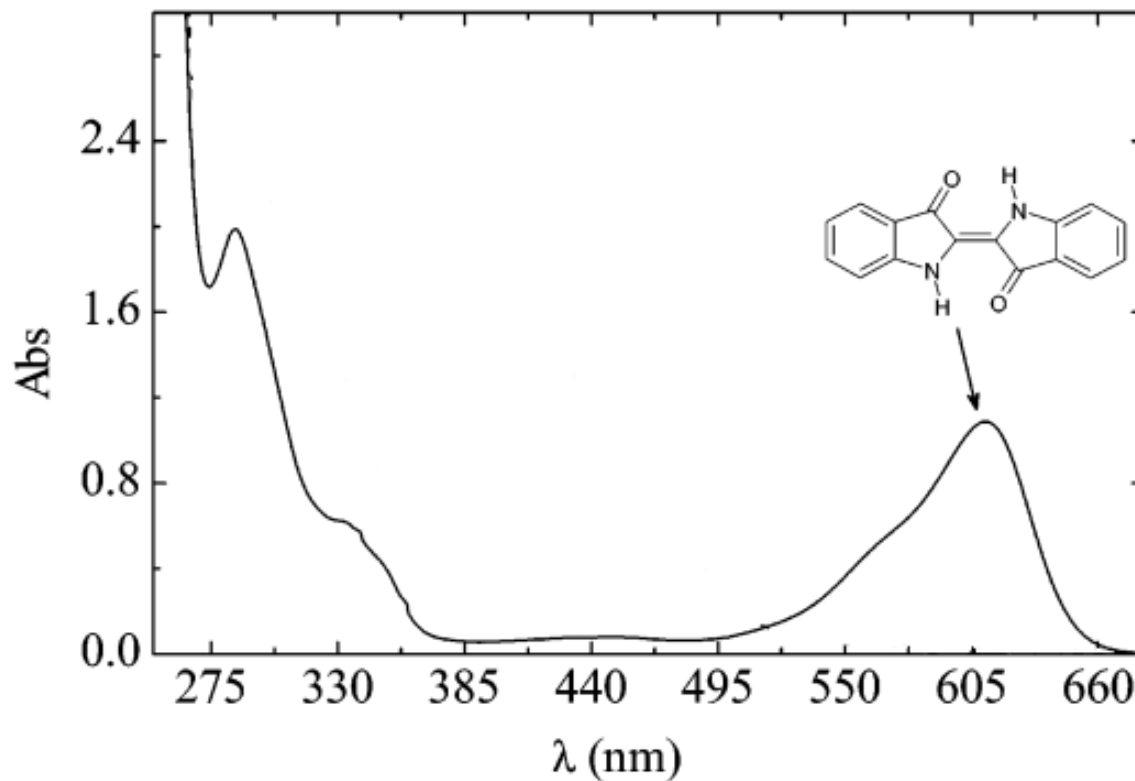


# Spectroscopie UV-Visible

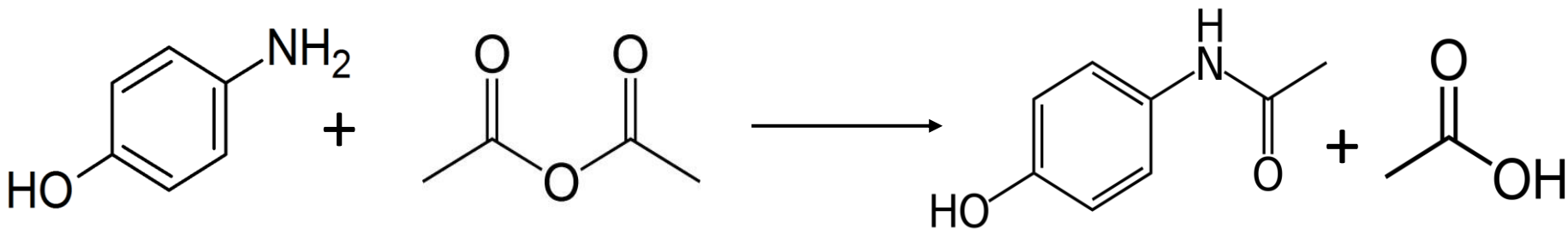


- ❖  $T_{\lambda} = I_{0\lambda} / I_{t\lambda}$  la transmittance
- ❖  $A_{\lambda} = -\log_{10}(T)$  l'absorbance

# Spectre de l'indigo commercial



# Synthèse du paracétamol



Para-aminophénol

Anhydride acétique

Paracétamol

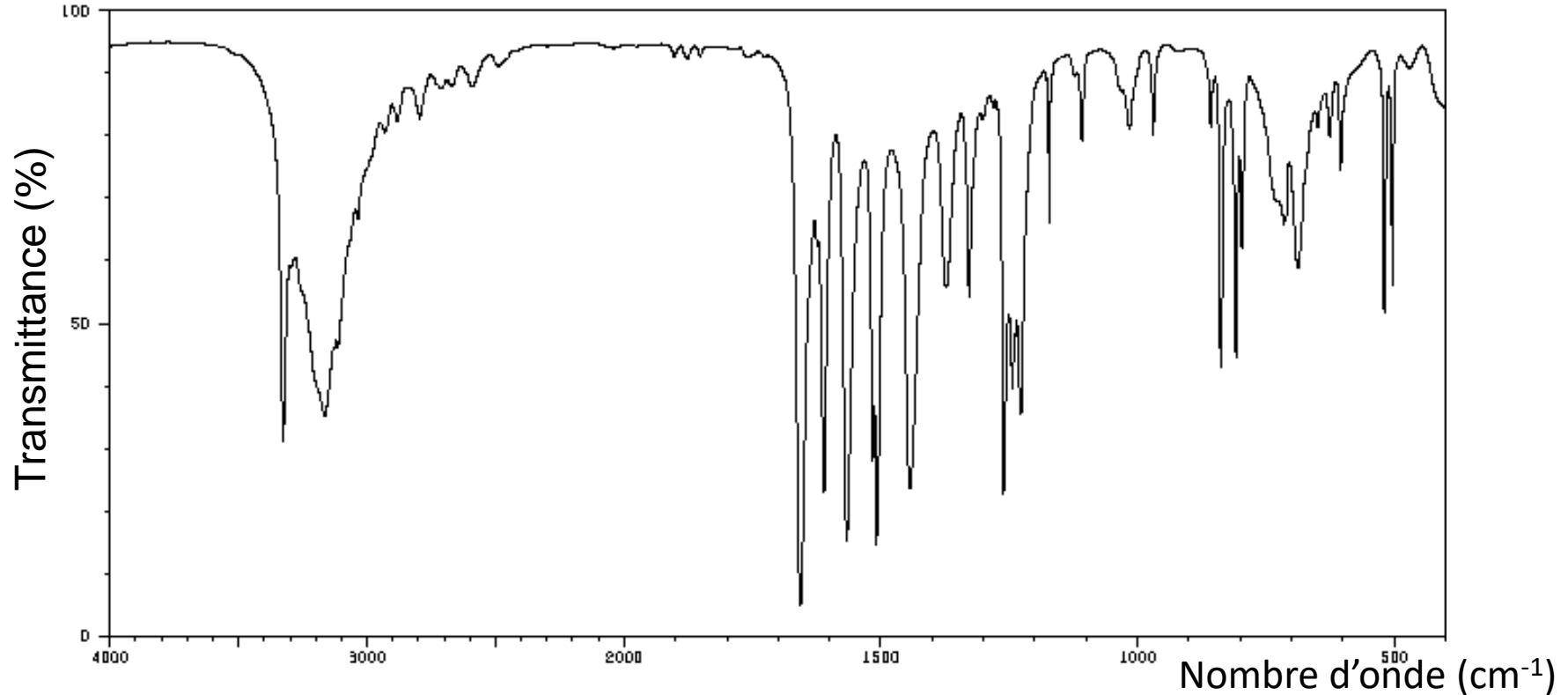
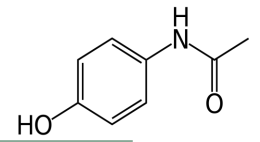
Acide acétique

5,50g =  $5,04 \cdot 10^{-2}$ mol

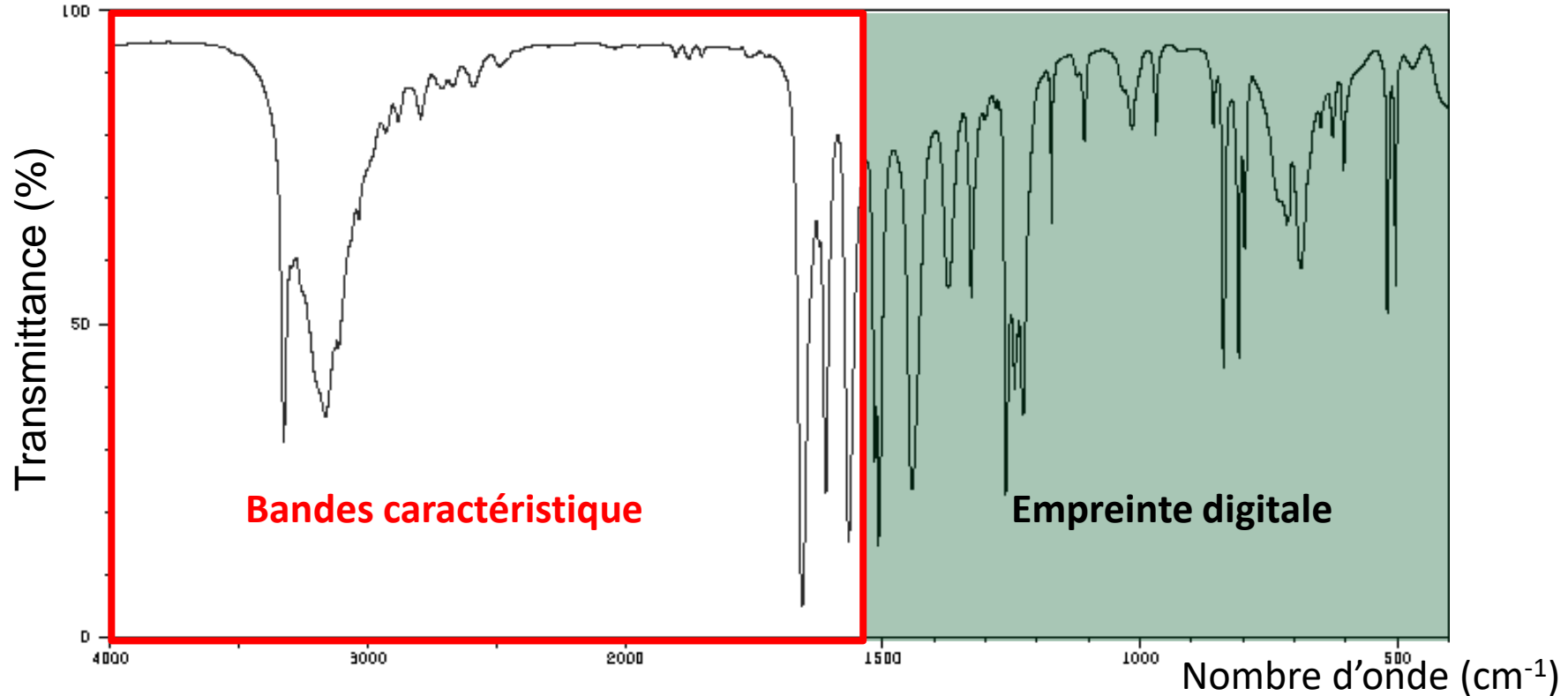
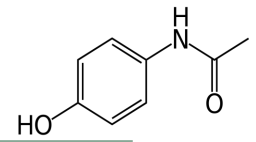
$\sim 7,0$ mL =  $7,4 \cdot 10^{-2}$ mol



# Spectroscopie infrarouge (IR)



# Spectroscopie infrarouge (IR)

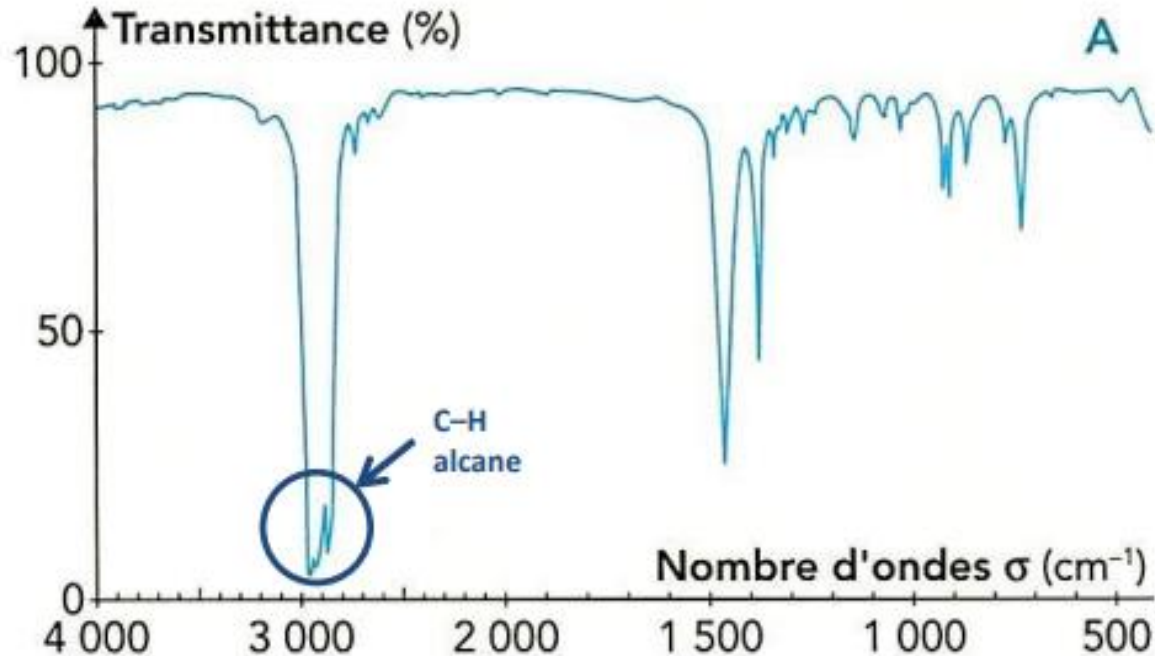


# Table de données IR

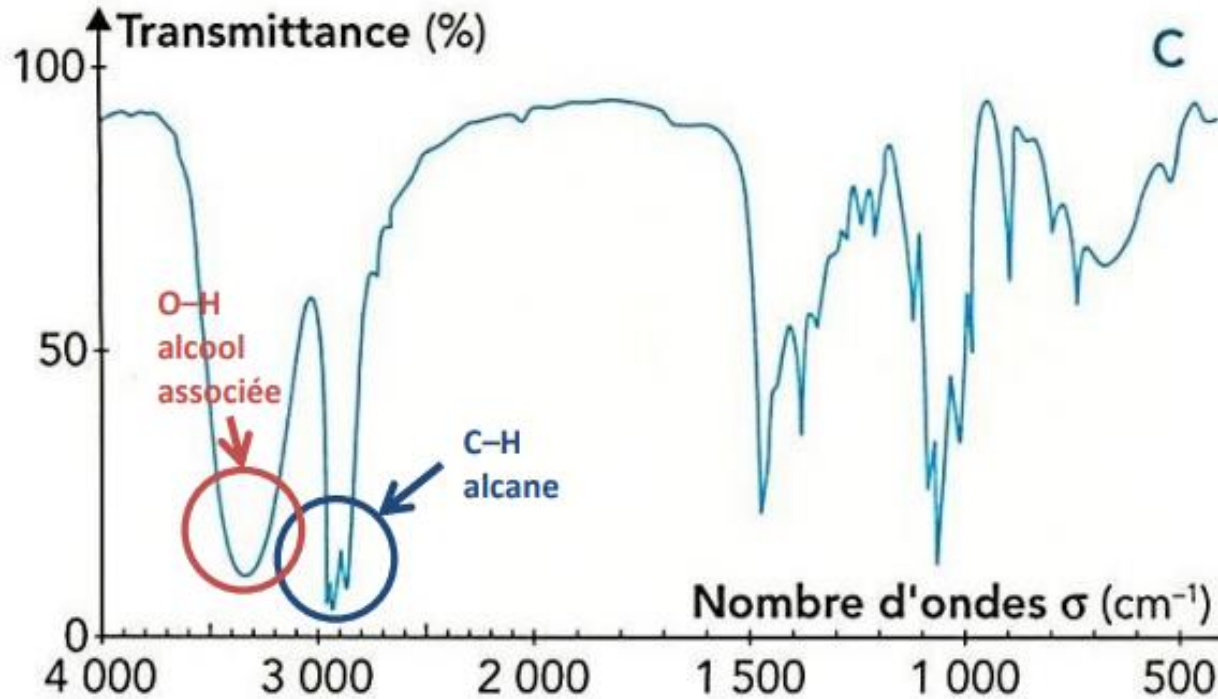
Type de liaison		$\sigma$ (en $\text{cm}^{-1}$ )	Largeur de la bande	Intensité d'absorption	Remarques
O – H hydroxyle	phase gazeuse	3600 – 3700	Fine	Moyenne	
	phase condensée	3200 - 3400	Large	Forte	se superpose à la précédente
N – H		3100 - 3500	Fine	Moyenne (amine) à forte (amide)	double bande si $\text{NH}_2$
C – H		2900 - 3100	Variable	Moyenne à forte	Peut descendre à 2700 $\text{cm}^{-1}$ pour un aldéhyde
O – H carboxyle		2500 - 3200	Large	Moyenne à forte	se superpose aux C-H
C = O		1650 - 1750	Fine	Forte	
C = C		1600 - 1700	Variable	Moyenne	
N – H		1560 - 1640	Fine	Forte	se superpose à C=O pour un amide



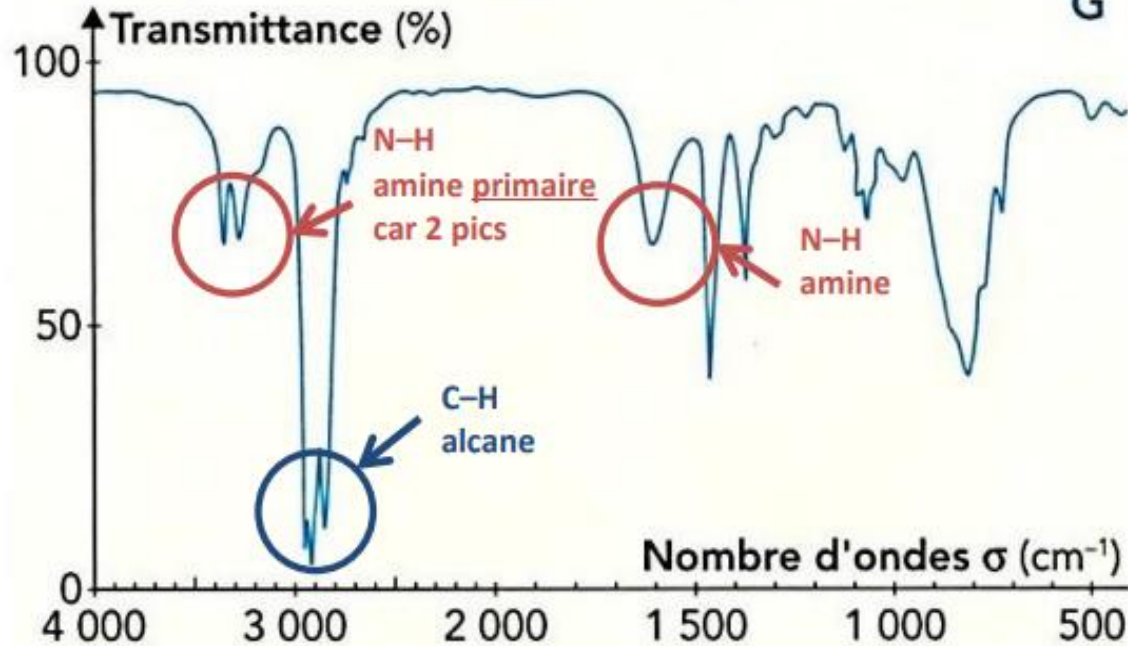
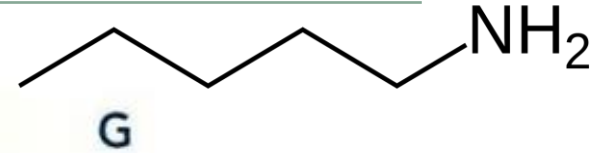
# Spectre IR du pentane CCCCC



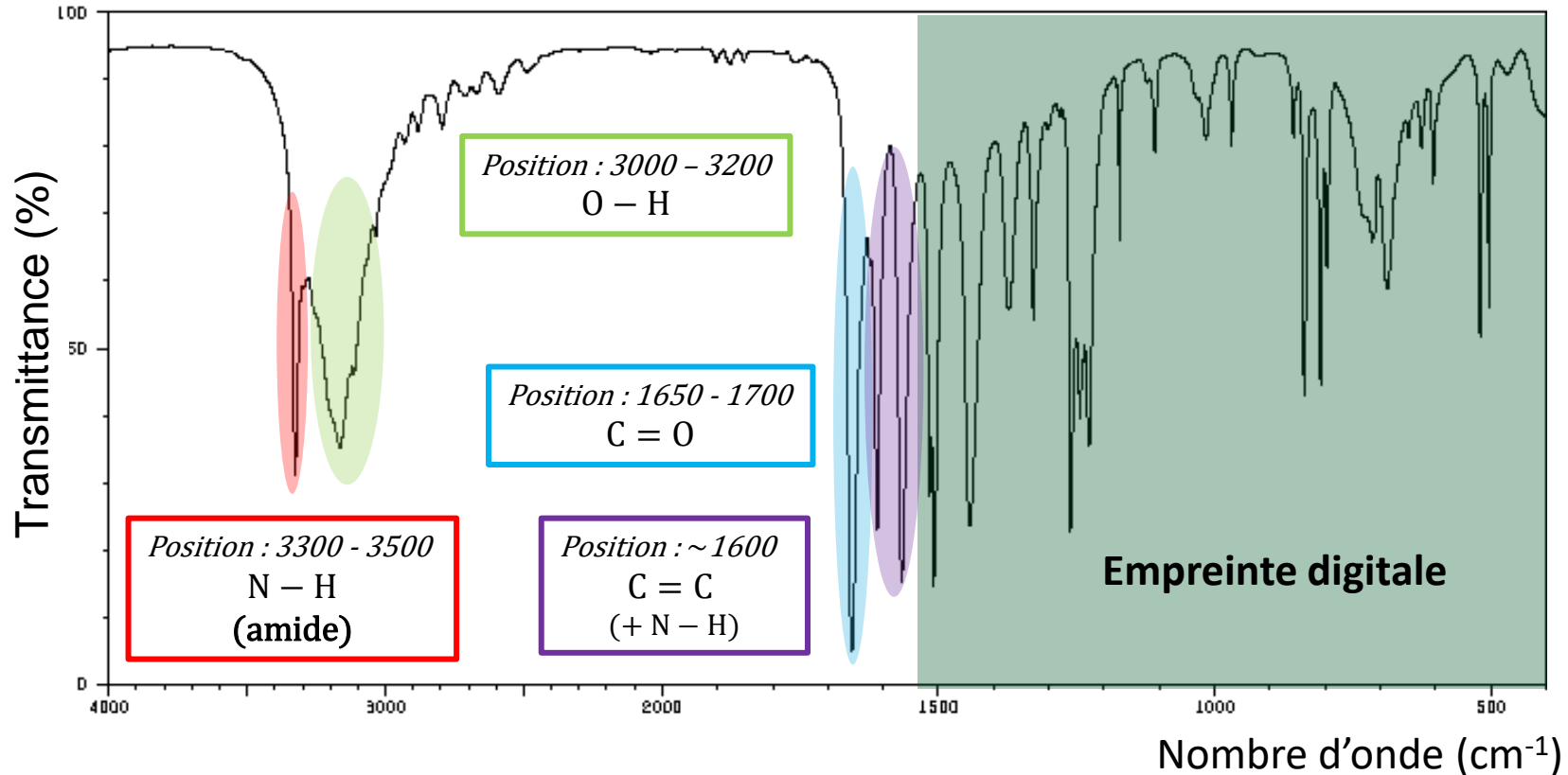
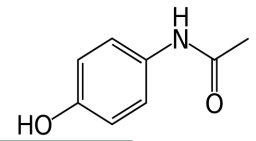
# Spectre IR du pentanol CCCCCO



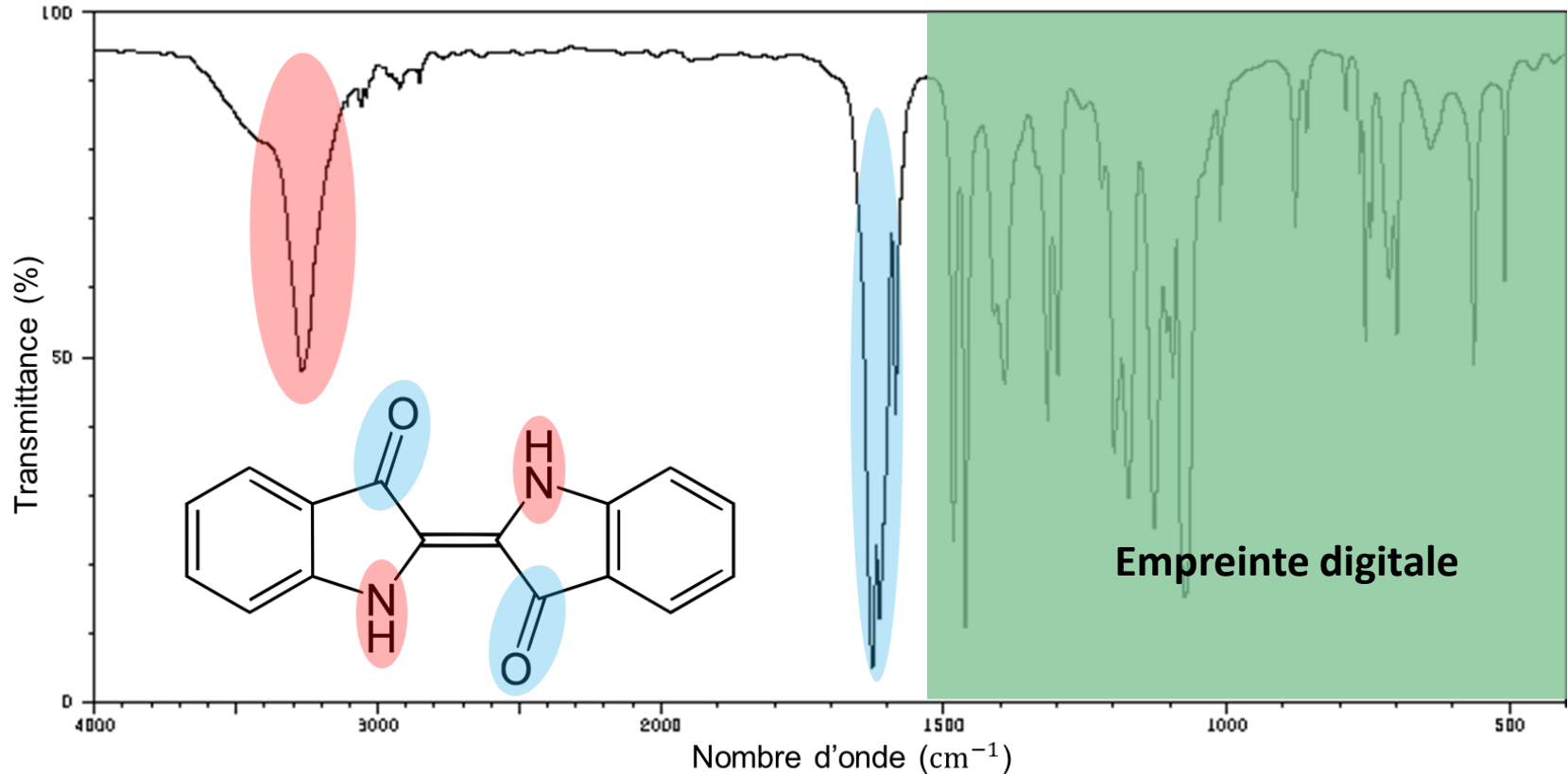
# Spectre IR du pentan-1-amine



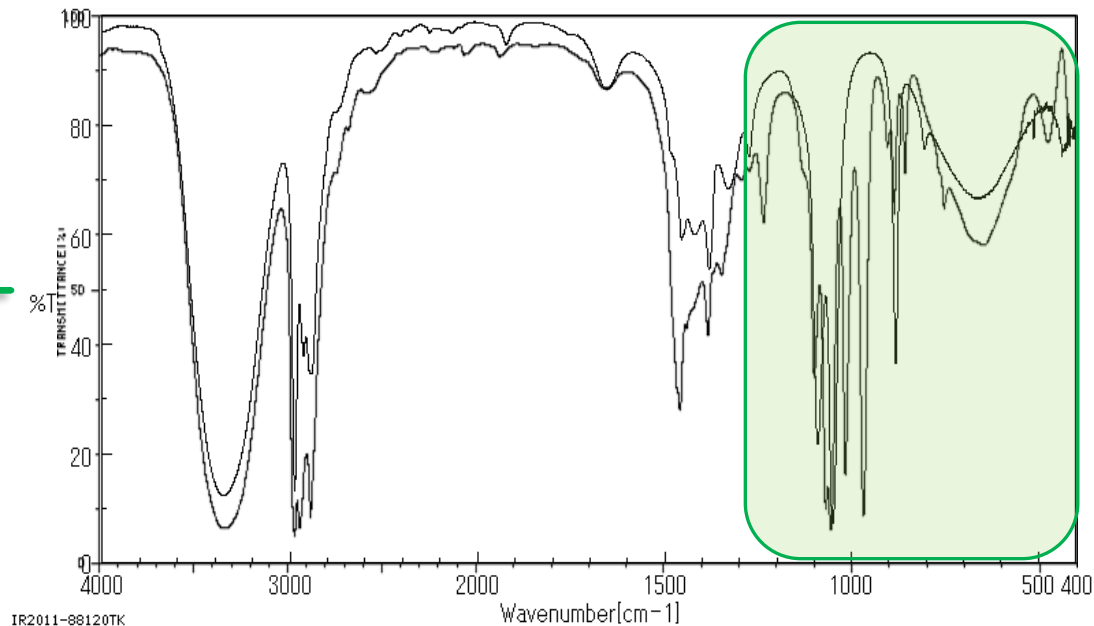
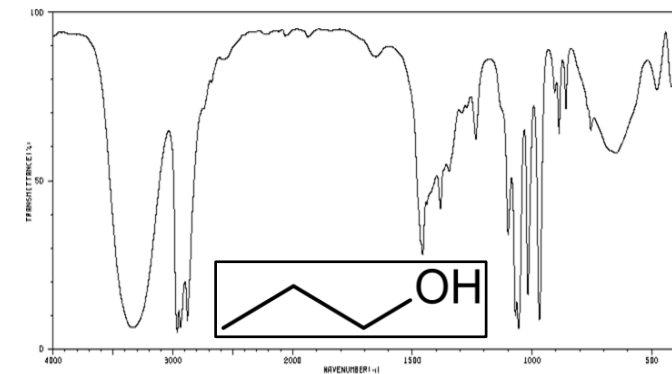
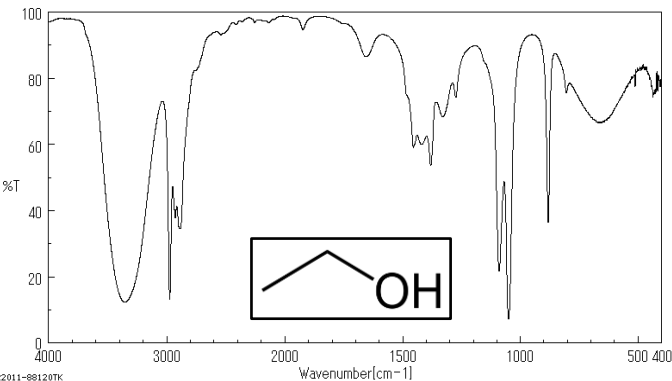
# Spectroscopie infrarouge (IR)



# Spectre IR de l'indigo

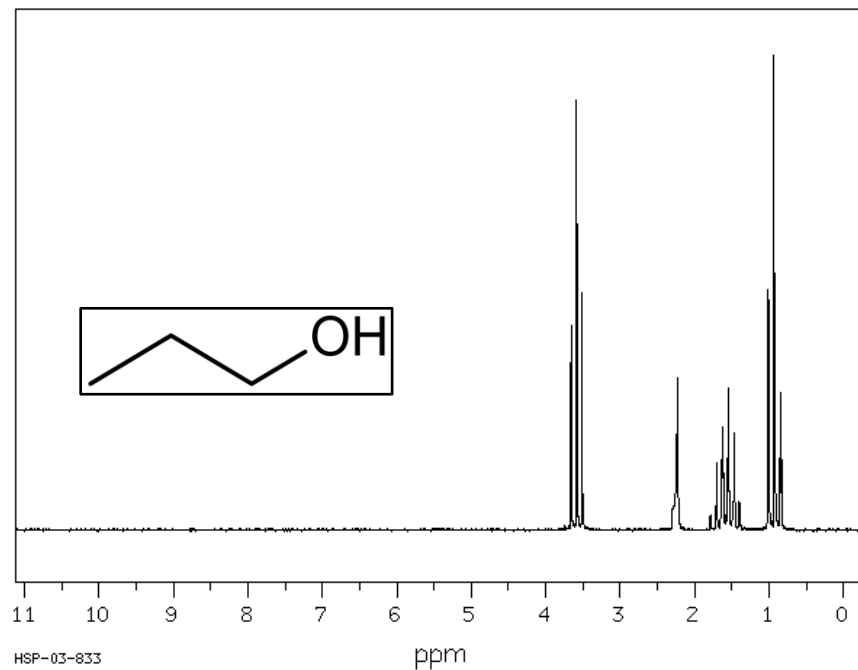
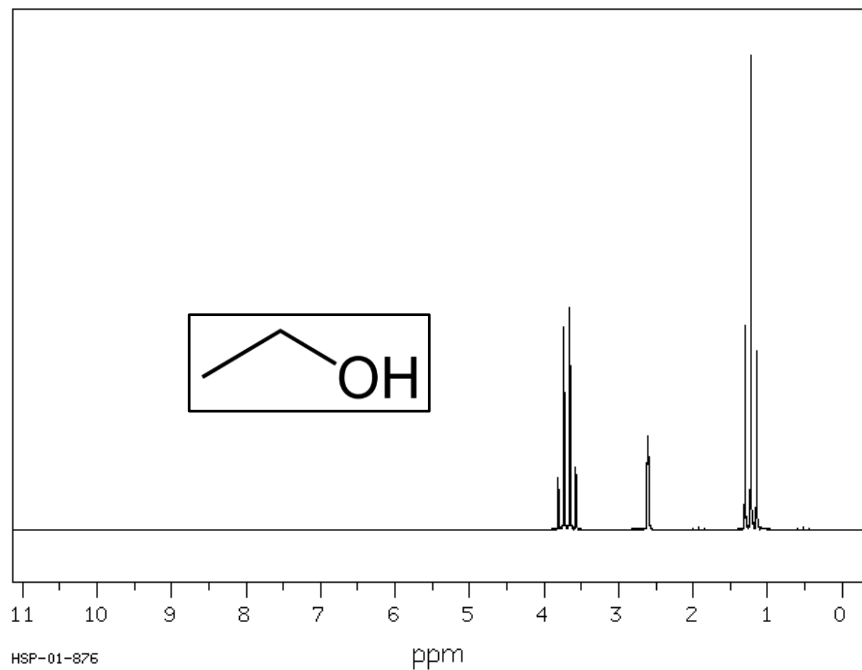


# Limitations de la spectroscopie IR



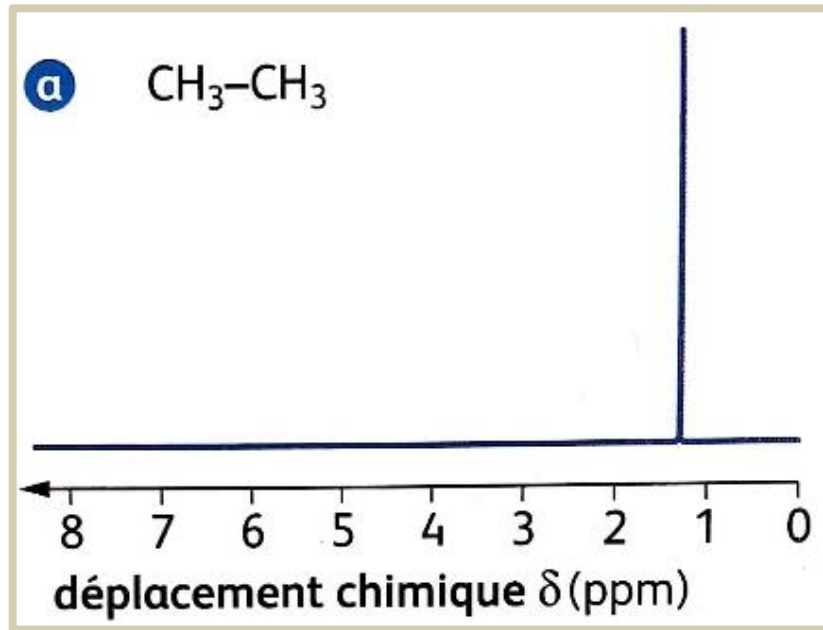
IR2011-88120TK

# Spectroscopie RMN

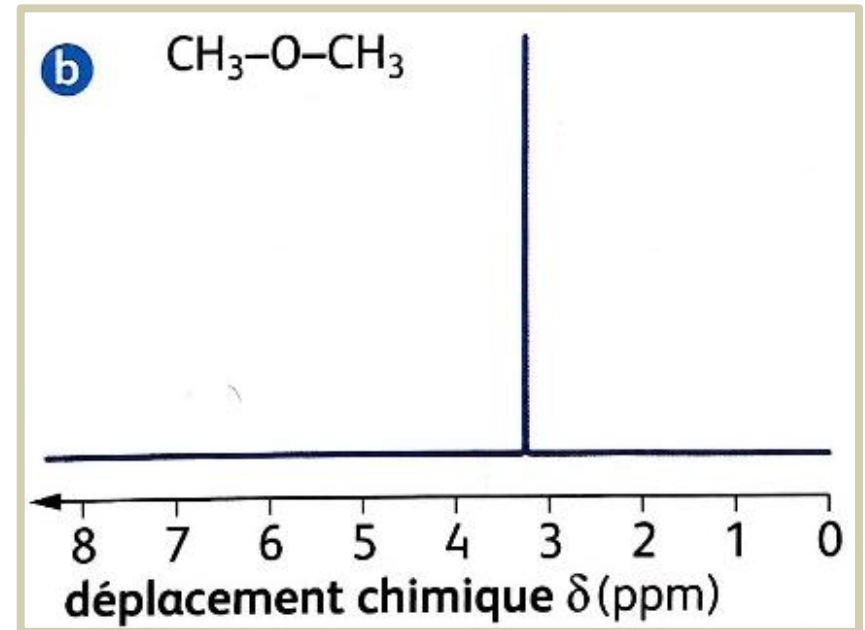


# Spectre RMN et déplacement chimique

SPECTRE RMN DE L'ETHANE



SPECTRE RMN DU METHOXYETHANE

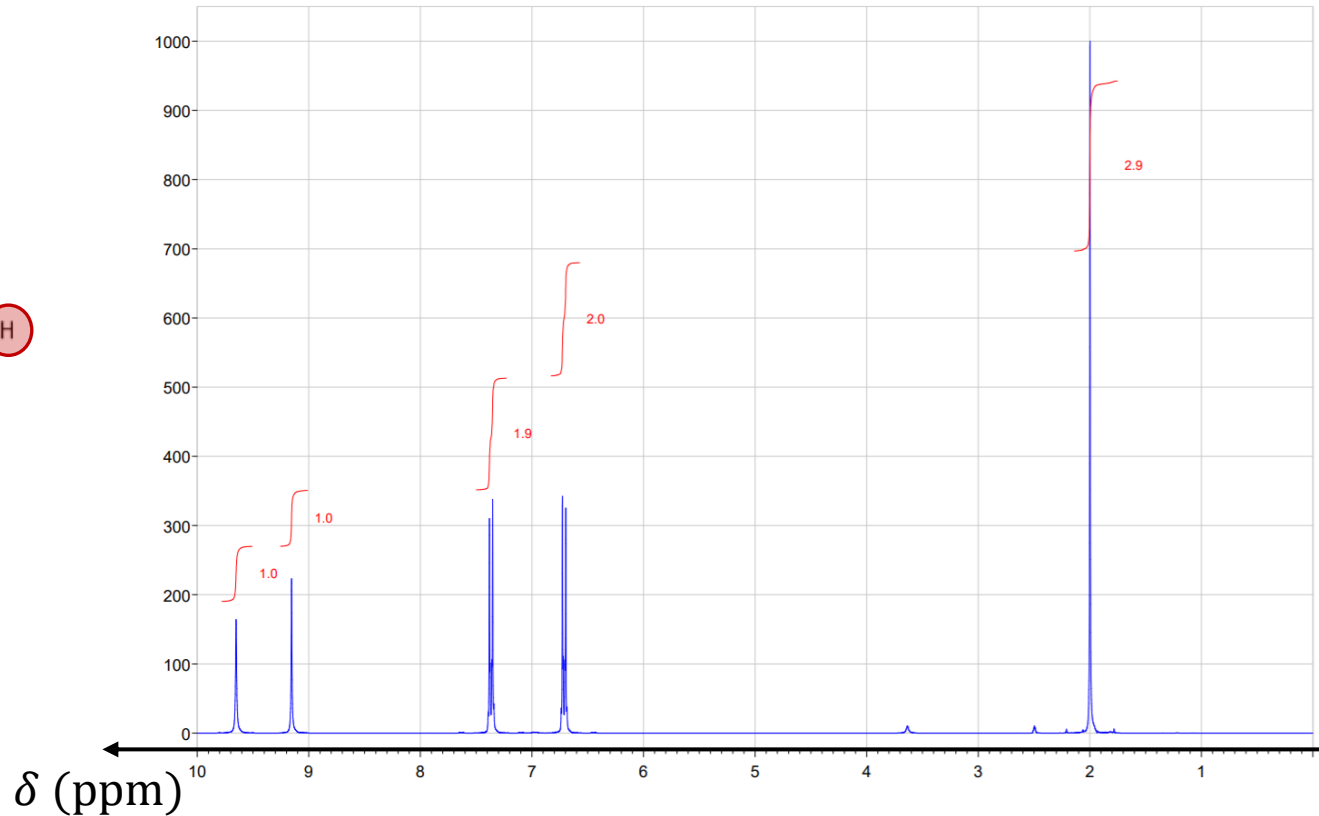
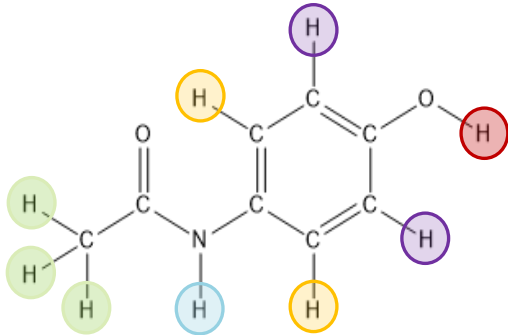




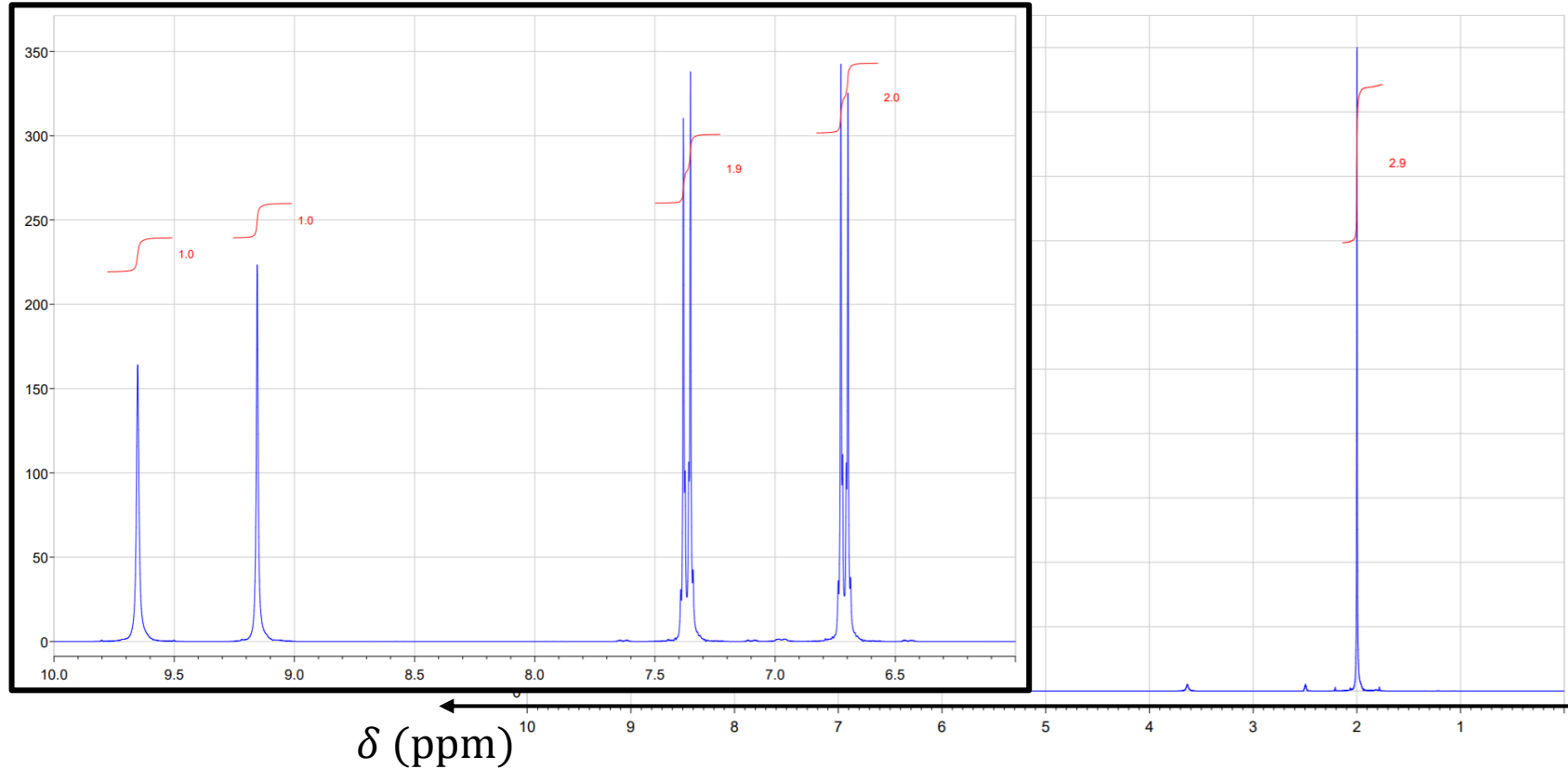
# Table de déplacement chimique

Type de proton	Exemple	$\delta(\text{ppm})$
Proton d'un alcane ou de chaîne carbonée éloignée d'atomes électronégatifs	$\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--CH}_2\text{--CH}_3$	0,8 – 2,5
Proton sur un atome de carbone lié à un atome électronégatif	$\text{CH}_3\text{--OH}$ $\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--O--CH}_3$ $\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--Cl}$	3,1 – 5,0
	$\text{CH}_3\text{--CH=CH}_2$	4,5 – 6,0 pour alcène 6,5 – 8,2 pour le cycle
Proton lié à l'atome de carbone d'un groupe carbonyle	$\text{CH}_3\text{--CH=O}$	9,5 – 11
Proton lié à d'un groupe carboxyle	$\text{CH}_3\text{--CO}_2\text{H}$	10,5 – 12
Proton d'un groupe hydroxyle ou amino	$\text{CH}_3\text{--OH}$ $\text{CH}_3\text{--NH}_2$	0,5 – 5
Proton d'un phénol	$\text{Ar--OH}$	4,5-7,1
Proton lié à une amide	$\text{CO--NH--}$	6,0-8,5

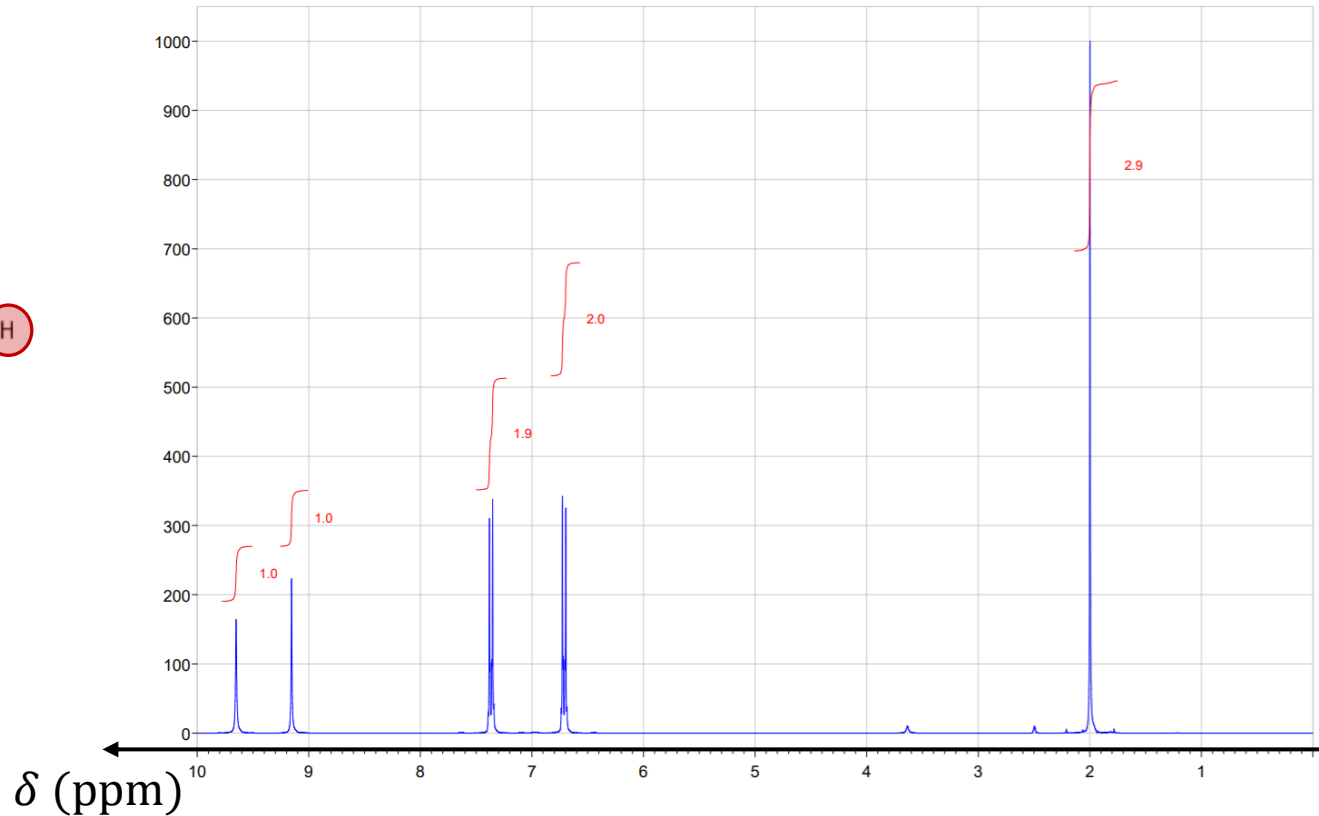
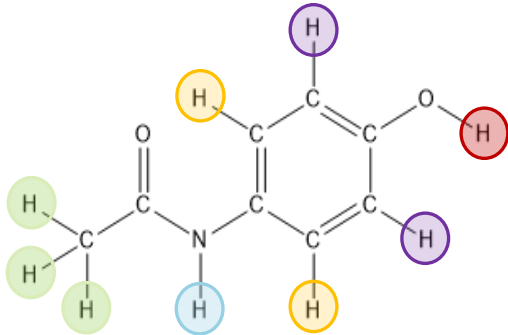
# Spectre RMN du paracétamol



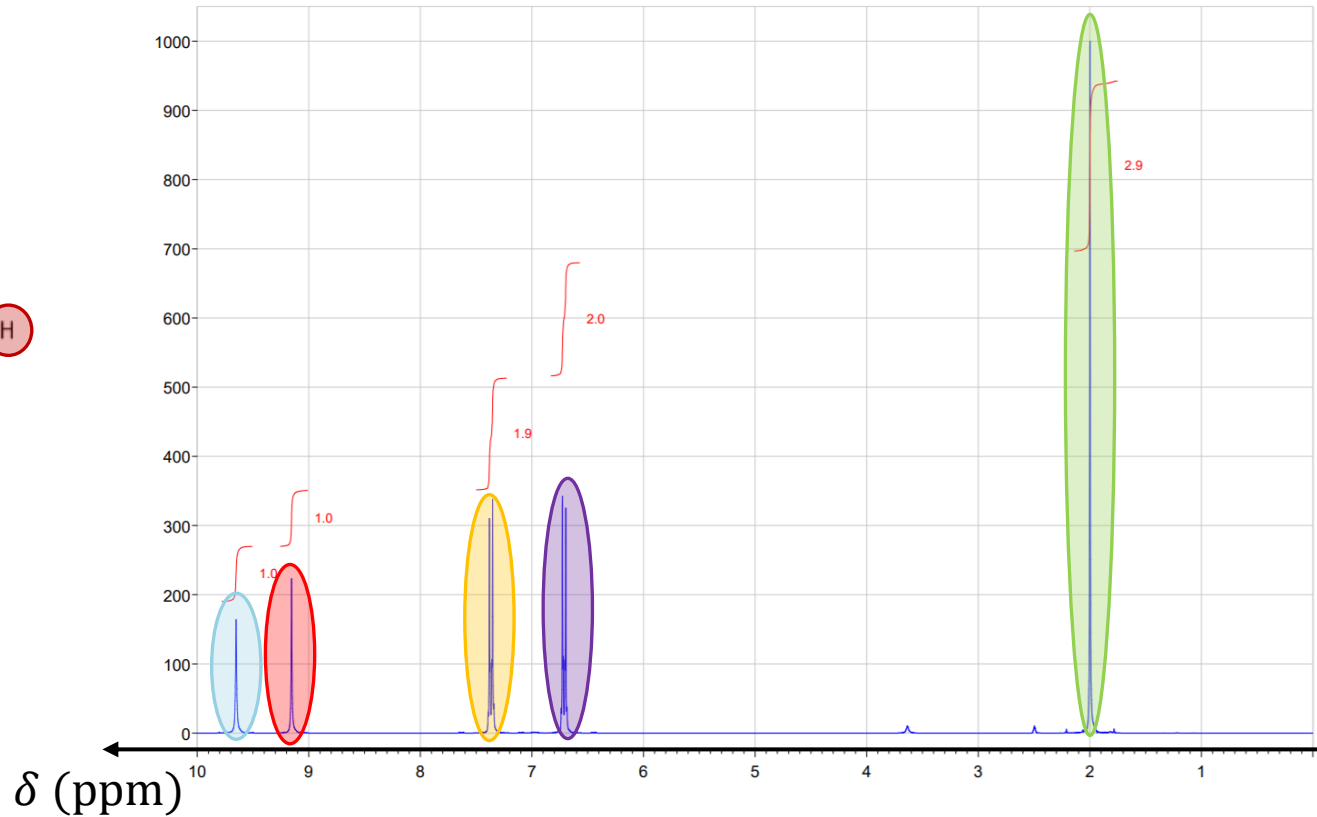
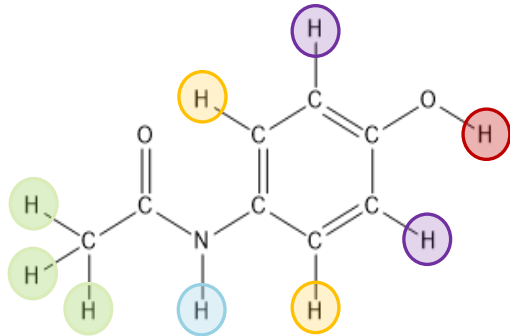
# Spectre RMN du paracétamol



# Spectre RMN du paracétamol



# Spectre RMN du paracétamol



---

# Merci

---