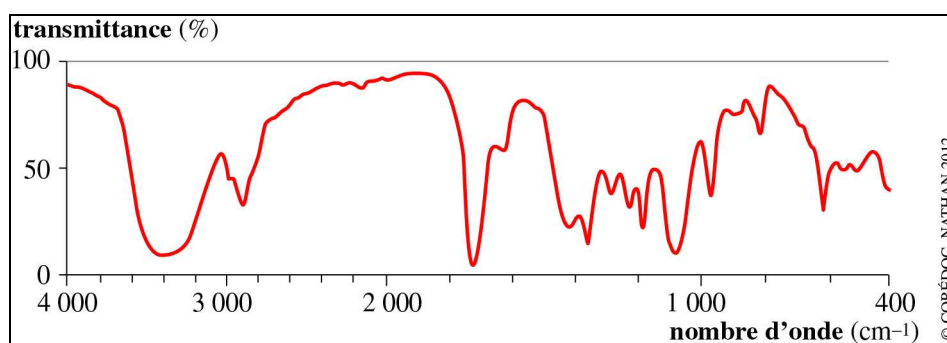


**EXERCICE RÉSOLU 2****Caractérisation de deux isomères par spectroscopie IR****Énoncé**

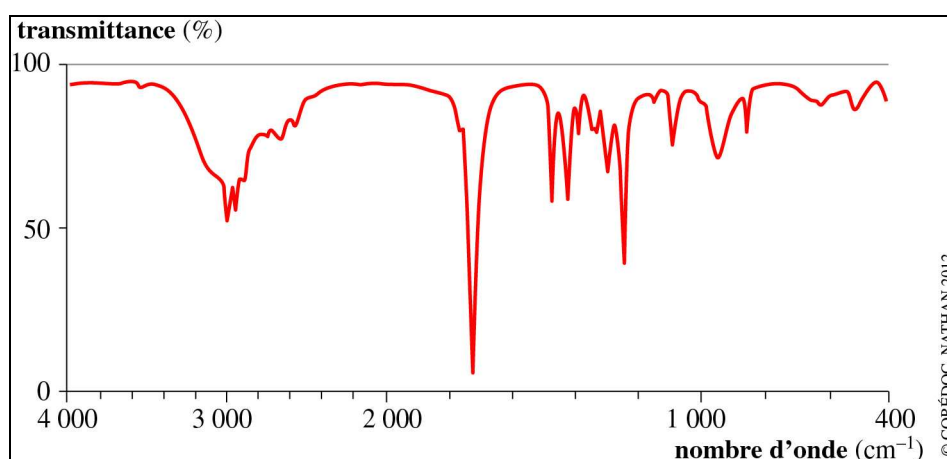
La 1-hydroxypropan-2-one ( $\text{HO-CH}_2\text{-CO-CH}_3$ ) et l'acide propanoïque sont deux isomères.

1. Rappeler la définition de deux molécules isomères.
2. Donner les formules topologiques de ces deux molécules organiques. Vérifier qu'elles sont bien isomères.
3. Nommer les groupes caractéristiques présents sur chacune des deux molécules. À quelles classes fonctionnelles ces molécules appartiennent-elles ?
4. La spectroscopie IR est-elle *a priori* capable de distinguer deux isomères ? Le cas échéant, préciser la zone du spectre qui le permet : celle des nombres d'onde compris dans l'intervalle  $[400 \text{ cm}^{-1}; 1\,500 \text{ cm}^{-1}]$  ou dans l'intervalle  $[1\,500 \text{ cm}^{-1}; 4\,000 \text{ cm}^{-1}]$ .
5. Expliquer pourquoi l'une des deux zones évoquées à la question précédente est *a priori* inexploitable pour distinguer les deux isomères envisagés.
6. Les spectres IR relatifs aux deux molécules (en phase condensée) sont présentés ci-dessous.

Interpréter ces spectres et conclure quant à l'identification des deux isomères par spectroscopie IR.



Spectre IR de la 1-hydroxypropan-2-one.



Spectre IR de l'acide propanoïque.

**Une solution**

**Connaissances**

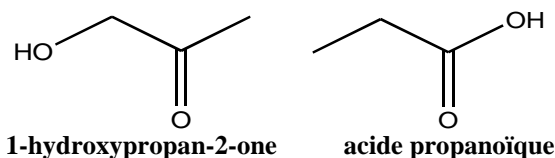
La notion d'isomérisation est une connaissance du cours de seconde.

1. Des isomères sont des espèces chimiques qui ont la même formule brute, donc qui sont constituées des mêmes atomes. Cependant, leur formule topologique (ou semi-développée...) est différente : l'agencement des atomes entre eux diffère.

2. Voici les formules topologiques des deux isomères :

**Schématiser**

Prenez l'habitude d'écrire des formules topologiques : on y gagne en temps, en espace et en clarté.



**Connaissances**

Il faut connaître les principaux groupes caractéristiques et les principales classes fonctionnelles en chimie organique.

Les deux molécules ont la même formule brute :  $C_3H_6O_2$ . Elles sont donc bien isomères.

3. La 1-hydroxypropan-2-one possède un groupe hydroxyle OH et un groupe carbonyle C=O. Elle appartient à la classe fonctionnelle des alcools **ainsi** qu'à celle des cétones.

L'acide propanoïque possède le groupe carboxyle COOH. Il appartient à la classe fonctionnelle des acides carboxyliques.

4. L'empreinte digitale des deux molécules, comprise entre  $400\text{ cm}^{-1}$  et  $1\,500\text{ cm}^{-1}$ , est caractéristique de chaque molécule, mais, pour l'exploiter, elle nécessite une comparaison avec un spectre de référence.

5. Dans la partie du spectre comprise entre  $1\,500\text{ cm}^{-1}$  et  $4\,000\text{ cm}^{-1}$  interviennent les bandes d'absorption caractéristiques des liaisons. Or, les deux isomères possèdent certes des groupes caractéristiques différents, mais ceux-ci font intervenir les mêmes types de liaisons : C=O et O-H (ainsi que C-O, difficilement exploitable en spectroscopie IR). Cette zone ne devrait donc pas *a priori* permettre de distinguer les deux isomères étudiés.

6. Lorsque l'on observe les deux spectres, on a tout d'abord confirmation que les empreintes digitales des deux isomères sont bien différentes.

**Compétences**

Vous devez savoir attribuer des bandes d'absorption caractéristiques de liaisons à partir d'une table de données IR.

Attribution des bandes d'absorption de la zone comprise entre  $1\,500\text{ cm}^{-1}$  et  $4\,000\text{ cm}^{-1}$  :

- on repère une première bande commune, assez fine, et d'intense absorption aux alentours de  $1\,725\text{ cm}^{-1}$ , caractéristique de la liaison C=O. Cette liaison est en effet aussi bien présente dans le groupe carbonyle que le groupe carboxyle ;
- on repère également une bande commune, relative aux liaisons C-H, aux alentours de  $3\,000\text{ cm}^{-1}$  mais dans le cas de l'acide propanoïque, cette dernière bande est superposée à la bande d'absorption très large et d'intensité moyenne, caractéristique de la liaison O-H du groupe carboxyle (aux alentours de  $3\,000\text{ cm}^{-1}$ ) ;
- en revanche, dans le cas de la 1-hydroxypropan-2-one, la bande caractéristique de la liaison O-H du groupe hydroxyle est bien isolée, centrée autour de  $3\,350\text{ cm}^{-1}$ , très large et de forte intensité.

**Raisonner**

Il faut garder un esprit critique. L'expérience prime : il faut donc savoir « adapter » son discours à la réalité.

Ainsi, contrairement à la liaison C=O, la liaison O-H présente une bande d'absorption assez variable suivant le groupe caractéristique dans lequel elle intervient. La différence se traduit notamment par la position de la bande, mais aussi par l'intensité de son absorption.

Il est ainsi possible de distinguer un acide carboxylique d'un céto-alcool, sans avoir à comparer son empreinte digitale à celle d'un spectre de référence, et ce, bien que les groupes caractéristiques fassent intervenir les mêmes types de liaisons. Cela nécessite toutefois l'utilisation d'une table de données IR.