
LC 13 : Synthèse organique : Caractérisation par spectroscopie

CAROLINE MORTAGNE, Lucile Sanchez

Prérequis :

- Groupes fonctionnels
- Lien couleur - conjugaison - Beer Lambert
- Liaison hydrogène, électronégativité
- Transferts quantiques d'énergie, rayonnement (vu en Physique)
- Système Masse ressort (vu en Physique)

Niveau de la leçon :

Terminale

Références

- [1] *Physique Chimie Tle S.* Sirius, Nathan, 2012.
- [2] F. Lahitète B. Fosset, J-B Baudin. *Chimie tout en un PCSI.* Dunod, 2013.
- [3] Stanislas Antczak JFLM. *Physique Chimie Tle S.* Micromega, Hathier, 1990.
- [4] Mathieu Ruffenach. *Physique Chimie.* Bordas, 2012.

Table des matières

1 Spectroscopie UV-visible	1
1.1 Principe de fonctionnement	1
1.2 Caractérisation de la phénolphtaléine	2
2 Spectroscopie IR	3
2.1 Principe de fonctionnement	3
2.2 Synthèse et spectre IR du paracétamol	5
3 RMN du proton	7
3.1 Le phénomène de résonance magnétique	7
3.2 Utilisation en Chimie	8

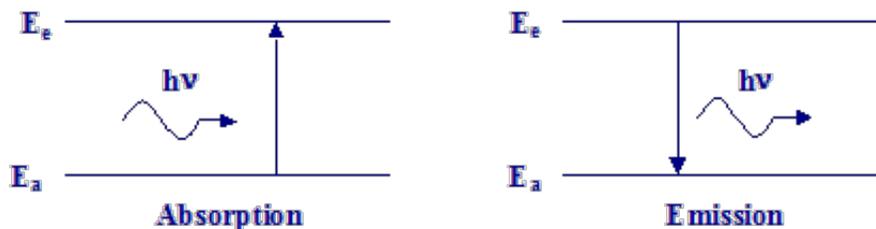
le 21/01/2014

Introduction

Une synthèse organique est toujours accompagnée d'une analyse des produits de la réaction afin de vérifier que la réaction s'est bien déroulée. Au cours des séances de TP, nous avons pu utiliser différentes techniques de caractérisation telles que la mesure du point de fusion sur banc Köfler, la réalisation d'une CCM,... Nous allons ici vous présenter trois nouvelles techniques basées sur la spectroscopie développée au cours du XXI^{ème} siècle grâce aux avancées théoriques de la Mécanique Quantique et aux progrès technologiques de l'instrumentation. Ces trois méthodes analytiques que sont la spectroscopie UV-visible, IR et la RMN vont être développées dans cette leçon.

Principes de la spectroscopie

Par définition, les méthodes spectroscopiques sont basées sur l'interaction entre la matière et un rayonnement électromagnétique. Comme vous l'avez vu précédemment, la mécanique quantique montre que les états énergétiques accessibles à une entité chimique (atome, ion, molécule) sont quantifiés. Ce système microscopique peut alors changer d'état énergétique ($E_1 \rightarrow E_2$) en absorbant/émettant un rayonnement d'une fréquence ν fixée par $|E_2 - E_1| = h\nu$. Les 3 techniques spectroscopiques développées dans cette leçon mettent en jeu différentes transitions énergétiques qui seront présentées par la suite.



1 Spectroscopie UV-visible

1.1 Principe de fonctionnement

La spectroscopie UV-visible est une technique d'analyse basée sur la possibilité d'un échantillon chimique d'absorber ou d'émettre un photon dont la fréquence appartient au domaine du visible ou de l'ultraviolet. Cette différence d'énergie correspond au passage d'un électron d'un niveau d'énergie E_1 à E_2 : il s'agit d'une transition électronique.

Spectrophotomètre : On place dans un spectrophotomètre une cuve transparente contenant la solution à analyser. On envoie alors sur l'échantillon une onde électromagnétique de fréquence variable, et on récupère à la sortie un spectre d'absorption de l'espèce en solution. Pour ne pas biaiser la mesure, on utilise un solvant et une cuve transparents aux longueurs d'ondes balayées. La comparaison du rayonnement incident $I_o(\lambda)$ à celui qui a traversé l'échantillon $I_t(\lambda)$ rend compte que certaines longueurs d'onde sont absorbées : $I_t < I_o$. Pour une λ fixée, on définit l'absorbance comme $A = \log\left(\frac{I_o}{I_t}\right)$. On trace alors A en fonction de λ : il s'agit du spectre d'absorption de l'échantillon. Ce spectre se compose de plusieurs bandes d'absorption pour lesquelles on peut déterminer une longueur d'onde λ_{max} . En règle générale, la couleur de la solution perçue par l'œil est la couleur complémentaire de celle absorbée. Pour la connaître on utilise le cercle chromatique.



Analyse d'une espèce : L'absorbance de la solution pour une λ donnée dépend du nombre d'entités qui absorbent ce rayonnement et donc de la longueur de la cuve l et de la concentration C des différents éléments absorbants. Pour caractériser entièrement une espèce chimique par son spectre d'absorption, il faut donc définir un paramètre indépendant de ses facteurs : ϵ_λ le **coefficient d'extinction molaire**. Celui-ci est relié à l'absorbance par la loi de Beer Lambert : $A(\lambda) = \epsilon_\lambda Cl$. Les couples $(\lambda_{max}, \epsilon_{\lambda_{max}})$ de chaque bande d'absorption du spectre caractérise donc entièrement un produit.

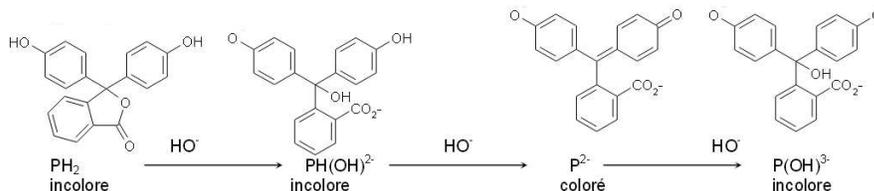
OG :

$\epsilon_\lambda \geq 10^3 L.mol^{-1}.cm-1$: espèce fortement absorbante

$\epsilon_\lambda \leq 10^{-2} L.mol^{-1}.cm-1$: espèce faiblement absorbante.

1.2 Caractérisation de la phénolphtaléine

On réalise la synthèse de la phénolphtaléine à partir de l'acide phtalique (JFLM 2).

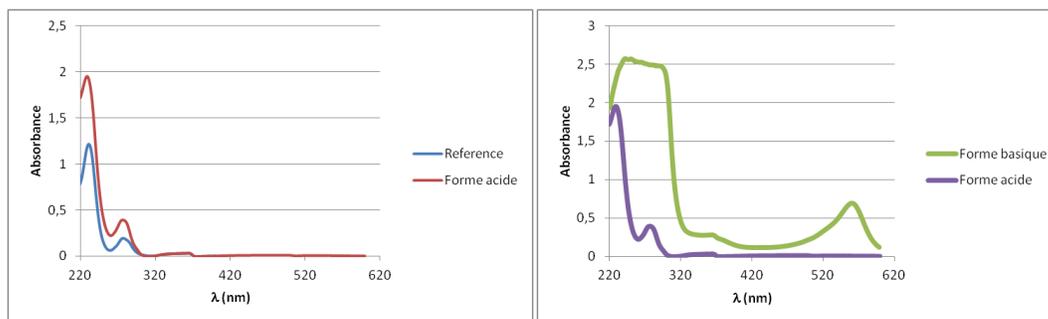


La phénolphtaléine est un indicateur coloré. Elle possède 4 formes en fonction du pH, dont une est colorée et les trois autres incolores absorbent dans l'UV. On réalise le spectre d'absorption du produit synthétisé en le dissolvant dans de l'éthanol à 95° (qui n'absorbe ni dans le proche UV ni dans le visible)¹. On effectue une mesure de référence "le blanc" de la cuve contenant uniquement le solvant pour s'affranchir des éventuelles absorptions parasites.

Pendant la leçon, on réalise le spectre de la forme colorée avec le spectrophotomètre (qui ne balaye que dans le visible). On remarque la présence d'une bande d'absorption à $\lambda = \dots nm$. Le produit absorbe donc dans le vert. La couleur nous apparaît violette car il s'agit de sa couleur complémentaire. En utilisant la loi de Beer Lambert, on peut déterminer ϵ_λ pour la λ_{max} en traçant $A = f(C)$. On compare alors avec la valeur tabulée de $\epsilon_{\lambda_{max}} = \dots L.mol^{-1}.cm-1$ ².

Voici les spectres obtenus.

-
1. Faire une dissolution dans un mélange 50-50 d'eau et d'éthanol
 2. Ben en fait on a pas trouvé la valeur tabulée, dommage ça aurait fait un résultat quantitatif!



La première figure compare le spectre réalisé avec la phénolphtaléine du laboratoire et le produit que nous venons de synthétiser. Elles présentent toutes deux, deux bandes d'absorption dans l'UV, situées aux mêmes λ et de formes quasi identiques (si les deux solutions ont la même concentration) : nous avons a priori synthétisé le bon produit.

Le petit décrochement observé à 370 nm est dû au changement de lampe spectrale et ne constitue pas nécessairement une raie en soi. La deuxième figure compare la forme acide et la forme basique prise par la phénolphtaléine pour un pH compris entre 8.5 et 12. On constate qu'une nouvelle raie apparaît aux alentours de 580 nm. La solution absorbe donc dans le vert jaune ce qui explique sa couleur rose (cf triangle des couleurs). Les bandes observées pour la forme acide sont toujours présentes et sont très intenses, sur cette courbe elles saturent le spectromètre.

Comme prévu, les différentes formes de la phénolphtaléine n'absorbent donc pas dans le même domaine de longueur d'onde et l'on peut relier structure de la molécule est domaine d'absorption : une espèce est colorée si elle possède au moins 7 liaisons doubles conjuguées, entre une et 6 liaisons doubles conjuguées elle apparaît incolore mais absorbe dans l'UV.

- Pour $pH \geq 12.5$, la molécule possède 3 liaisons doubles conjuguées et donc absorbe donc dans l'UV.
- Pour $pH \in [8.5; 12.5]$, l'ion possède alors 10 liaisons conjuguées grâce à la délocalisation du doublet non liant de O.
- Pour $pH \leq 8.5$, la molécule présente seulement 4 liaisons conjuguées du fait de la protonation de l'oxygène et absorbe aussi dans l'UV.

Mécanisme de passage

Rq : Ces propriétés ne sont pas seulement l'apanage des molécules organiques, certaines espèces telles que les cations complexés ($Cu(aq)\dots$), ou des molécules inorganiques (I_2, \dots) sont aussi colorées.

Conclusion : La spectroscopie UV-visible permet d'identifier une espèce chimique colorée par comparaison de spectre d'absorption. L'étendue des espèces identifiables par cette méthode est cependant assez restreinte, c'est pourquoi les scientifiques ont développé des nouvelles méthodes basées sur un autre type de transition énergétique : la transition entre les niveaux de vibrations correspondant au domaine de rayonnement de l'infrarouge.

2 Spectroscopie IR

2.1 Principe de fonctionnement

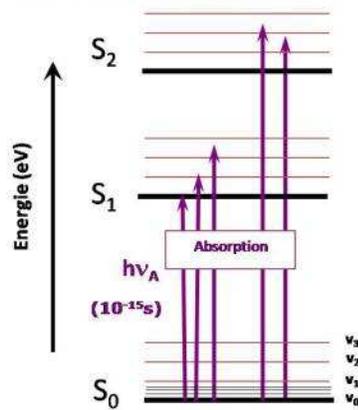
Développée dans les années 1950, la spectroscopie IR est une méthode spectroscopique utilisable pour la caractérisation de beaucoup plus de molécules que celle précédemment présentée. Elle a longtemps été la seule technique spectroscopique utilisée dans l'identification des composés organiques.

Description des transitions IR La spectro IR est semblable à la spectro UV dans son fonctionnement, cependant on s'intéresse à des transitions énergétiques différentes de la molécule reliées aux différents mouvements internes de la molécule.

Illustration avec un modèle moléculaire dans lequel les atomes sont représentés par des sphères dures et les liaisons covalents avec des ressorts.

Une molécule, telle que la molécule d'eau par exemple, n'est pas un édifice figé. Elle peut subir des déformations de sa structure telles que des vibrations d'élongations des liaisons covalentes. De la même manière que précédemment, les niveaux d'énergie accessibles à la molécule sont quantifiés. Ces états discrets caractérisent une certaine vibration de la molécule.

Diagramme d'énergie d'une molécule



L'écart énergétique moyen entre ces niveaux de vibration de la molécule est environ dix fois plus faible que les énergies mises en jeu pour les transitions électroniques. Le domaine des longueurs d'onde concernées est beaucoup plus grand (2500-25000 nm).

Modélisation de la vibration de la liaison

Une modélisation simple de la liaison covalente entre deux atomes permet de relier la fréquence du rayonnement absorbé à certains paramètres caractéristiques : masse des atomes, raideur de la liaison.

On considère pour cela une molécule composée de deux atomes A et B supposés ponctuels, de masse m_a et m_b . On modélise l'interaction covalente entre les deux atomes par un ressort de raideur k . Comme vous avez pu le voir en mécanique, une masse attachée à un ressort oscille autour de sa position d'équilibre avec une fréquence $\nu = 2\pi\sqrt{\frac{k}{m}}$. De même, suite à une perturbation de la molécule AB, celle-ci oscille autour de sa position d'équilibre avec une fréquence de vibration de la molécule de :

$$\nu_{A-B} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \text{ avec } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_a} + \frac{1}{m_b} \quad (1)$$

En spectroscopie IR, on utilise préférentiellement le nombre d'onde $\sigma = 1/\lambda$ d'où $\sigma_{A-B} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$. On remarque que le nombre d'onde propre au système dépend de la masse de A et B et de la raideur de la liaison k correspondant à la force de l'interaction entre A et B. Cette raideur augmente notamment avec la multiplicité de la liaison.

Ce nombre d'onde caractérise donc la fréquence du rayonnement électromagnétique que peut absorber la molécule AB pour faire vibrer la liaison le long de son axe.

Dans une molécule réelle plus grande, l'effet des vibrations d'élongations de chaque liaison devient beaucoup plus difficile à modéliser : le comportement de chaque liaison est a priori influencée par celui de toutes les autres : on dit qu'il y a **couplage**. Heureusement, dans de nombreux cas, le couplage entre les liaisons est suffisamment faible pour que les vibrations **d'élongation** de certaines liaisons soient peu affectées par la présence des autres atomes de la molécule.

Résumé En spectroscopie IR, on peut donc déterminer la présence de certaines liaisons chimiques dans une molécule. Chaque type de liaison chimique produit une bande d'absorption caractéristique dont le nombre d'onde se trouve dans certaines plages définies et tabulées.

Lecture d'un spectre IR :

Un spectre représente la transmittance T en fonction du nombre d'onde orienté de droite à gauche. Dans un spectre d'absorption on différencie deux zones principales :

- La zone d'empreinte digitale située pour des nombres d'onde $\sigma < 1500 \text{ cm}^{-1}$ très confuse. Elle présente de nombreux pics pour lesquels il est difficile d'associer une déformation particulière d'une partie de la molécule. Cependant, cette zone permet d'identifier la molécule par comparaison avec un spectre de référence.
- En revanche, la zone des groupes fonctionnels qui se situe au dessus de $\sigma = 1500 \text{ cm}^{-1}$ contient un nombre limité de bandes caractérisées par la position de leur minimum, leur largeur et leur intensité. C'est dans cette zone que l'on retrouve les absorptions d'élongation des groupes O-H, C=O, C-H, C-O...

Ce nombre d'onde est lié à la force de l'interaction de la liaison et à la masse des atomes ce qui explique certaines valeurs :

- pour un acide carboxylique par exemple $\sigma_{\text{C-O}} \approx 1,5\sigma_{\text{C=O}}$ car une double liaison est beaucoup plus forte qu'une liaison simple.
- les liaisons impliquant un atome d'hydrogène sont légères et sont caractérisées par des nombres d'ondes élevés (souvent supérieurs à 2500 cm^{-1}).

Nous allons donc appliquer cette technique de caractérisation sur un spectre expérimental.

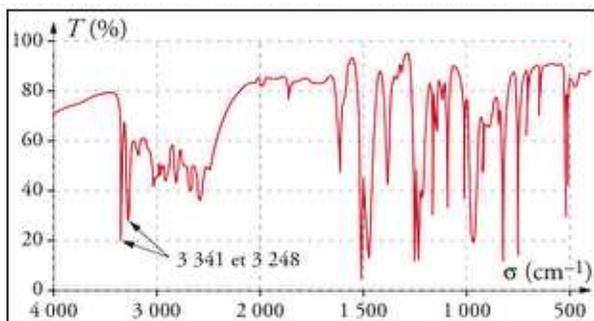
2.2 Synthèse et spectre IR du paracétamol

Fonctionnement de l'appareil *Synthèse du paracétamol : On effectue le montage et la récupération du paracétamol en préparation. On réalise une recristallisation du solide obtenu suite à la filtration.*

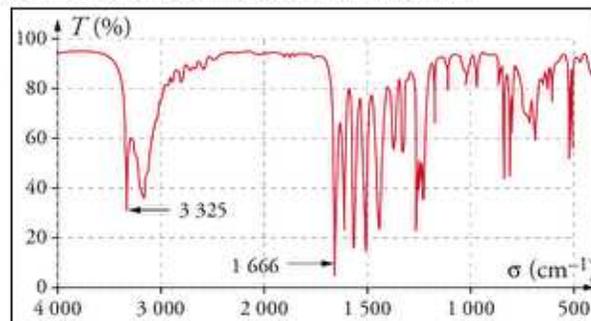
On dépose une goutte du produit à caractériser entre deux pastilles de sel ionique (NaCl, NaBr...) n'absorbant pas dans la gamme d'infrarouge utilisée. Après avoir "fait le blanc" (avec deux pastilles sans le produit), on introduit la pastille (avec le produit) dans le spectromètre et l'on envoie un rayonnement de fréquence variable balayant le domaine de fréquences d'intérêt. Après soustraction du blanc et comparaison du rayonnement transmis à travers la pastille au rayonnement incident, on trace le spectre de transmission. Dans le cas, d'un produit solide, on broie le solide avec le sel ionique jusqu'à en faire une poudre finement divisée. On place alors cette poudre dans une presse pour en faire une pastille

solide que l'on peut alors placer dans le spectromètre. On obtient le spectre suivant et l'on place en dessous un spectre de référence.

Spectre IR du para-aminophénol



Spectre du paracétamol

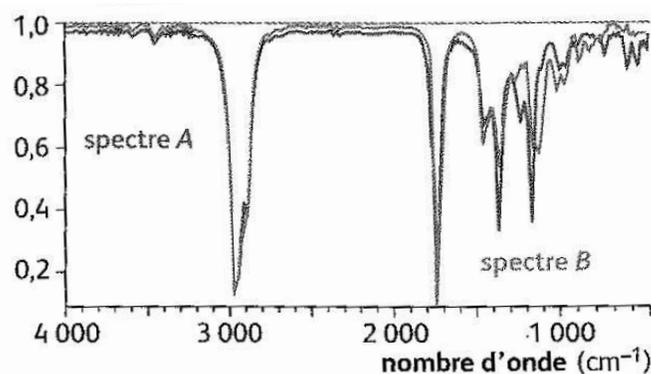


Deux méthodes de caractérisation sont possibles. On peut soit comparer le spectre expérimental au spectre du produit de référence, soit on détermine si l'on a bien création ou destruction de certaines liaisons par rapport au réactif.

Dans cette molécule, nous pouvons reconnaître plusieurs groupes caractéristiques qui sont visibles en IR comme C=O, C-H aromatique. De plus, on remarque que pour les liaisons OH et NH les bandes sont larges et se recourent. En effet, on a dit précédemment que les bandes caractéristiques dépendent peu de son environnement. Cependant, un spectre IR permet de savoir si les hydrogènes de la fonction alcool ou amine sont liés par liaison H. En leur présence, la bande d'absorption est élargie $\sigma_{OH} \in [3200; 3400]cm^{-1}$ au lieu d'apparaître sous la forme d'un pic étroit entre 3500 et $3670cm^{-1}$. On rappelle que la liaison H est une interaction qui s'établit entre un atome H lié à un atome comme O, N, et d'un doublet non liant d'un autre O, N. Cette interaction affaiblit la liaison covalente O-H, N-H de la molécule. On a alors une force de la liaison diminuée donc k diminue d'où un σ_{OH} caractéristique plus faible.

Rq : L'épaississement de la bande d'absorption de la liaison OH est due au couplage des différents oscillateurs o-H.

Résumé : La spectroscopie IR basée sur la transition énergétique entre niveaux de vibration des atomes, est un outil puissant de caractérisation non destructive des différentes liaisons composant la molécule. Parfois, il existe des cas où cette spectroscopie ne suffit pas à différencier deux molécules. Par exemple, l'hexan-2-one et l'hexan-3-one possèdent toutes deux le même spectre en IR, puisqu'elles possèdent les mêmes liaisons chimiques, seule la place de la fonction cétone est différente. [1], p 148.



Pour pouvoir différencier ces deux molécules, il faudrait s'intéresser à la position relative de l'oxygène et des hydrogènes les composant. C'est sur ces derniers que la technique de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) se focalise, elle sera donc en mesure de différencier ces deux isomères.

3 RMN du proton

3.1 Le phénomène de résonance magnétique

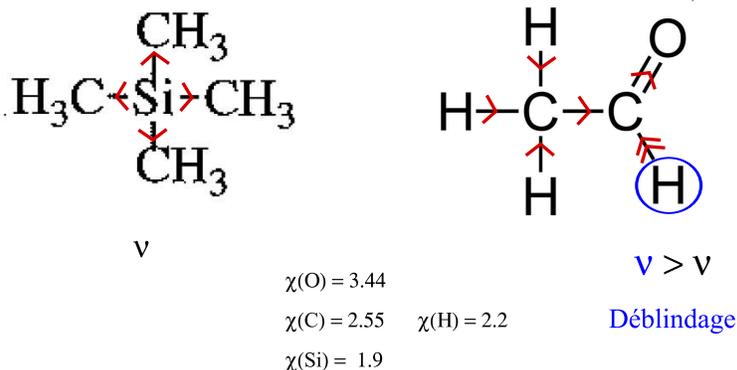
[1] Certains noyaux, comme le noyau d'hydrogène $1H$, sont sensible à la présence d'un champ magnétique, en se comportant comme des petites boussoles. En effet, en l'absence de tout champ magnétique une aiguille aimantée s'oriente de façon quelconque, puis en lui appliquant un champ, celle-ci s'aligne le long du champ. Modifier l'orientation de cette boussole demande alors un apport énergétique. Un phénomène similaire se produit alors avec les noyaux H d'une molécule lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique. L'analogie de l'aiguille magnétique appelée spin, s'oriente de même selon le champ \vec{B}_0 . Pour modifier son orientation, il faut apporter au noyau d'hydrogène, une énergie spécifique qui comme précédemment est quantifiée. D'une manière analogue aux précédentes techniques, on envoie un rayonnement électromagnétique à une fréquence particulière appelée fréquence de résonance $\nu = \gamma B/h$. On parle alors de Résonance Magnétique Nucléaire. Les énergies mises en jeu lors ces transitions sont bien plus faibles que celles intervenant dans les transitions vibrationnelles. L'onde EM associée appartient au domaine des ondes radio $\lambda \sim qm$.

Le proton n'est pas le seul élément chimique possédant un tel comportement magnétique (spin nucléaire), le $13C$ ou le $2H$ possèdent aussi des fréquences de résonance particulières, cependant, celles-ci ne se trouvent pas dans la plage de fréquence étudiée en RMN du proton.

Les protons au sein d'une molécule Les fréquences de résonance des différents protons de la molécule ne sont en général pas les mêmes. En effet, le spin nucléaire du protons est sensible au champ magnétique local et dépend donc de l'entourage de l'hydrogène considéré. Les variations de ce champ au niveau du proton sont dues à la fois aux autres atomes dont le spin est sensible au champ magnétique et les nuages électroniques aux alentours. Les électrons issus des liaisons chimiques ou des atomes voisins interagissent avec le champ magnétique créant un champ induit \vec{B}_{ind} qui s'oppose au champ \vec{B}_0 . Le champ réellement perçu par un atome d'hydrogène est donc : $\vec{B}_{local} = \vec{B}_0 + \vec{B}_{ind}$. Ainsi, en présence d'une forte densité d'électrons la fréquence de résonance proportionnelle à \vec{B}_{local} est plus faible que sans cette densité supplémentaire.

La fréquence de résonance du proton considéré dépend donc de son environnement proche, on parle d'effet d'écran.

- Quand la densité électronique ρ est forte, le champ induit est fort. La fréquence ν diminue alors, on parle alors de blindage du proton.
- Quand la densité électronique ρ est faible, ν augmente, on parle alors de déblindage du proton.



On peut alors retenir le résultat suivant : plus un atome d'hydrogène est proche d'un atome électronégatif, plus celui-ci attire son nuage électronique et donc le proton est déblindé.

Protons équivalents Cependant, dans une molécule, certains protons occupent une même place relativement aux différents autres atomes de la molécule et ont donc le même environnement. Ceux-ci possèdent donc une même fréquence de résonance. On parle alors de protons chimiquement **équivalents**. Deux protons sont équivalents s'il existe une opération de symétrie de la molécule permettant de les faire correspondre. Si on remplace alors tour à tour un des hydrogènes par un deutérium on obtient deux molécules identiques ou énantiomères. Au sein d'une même molécule, on sépare alors les différents groupes de protons équivalents. Chacun des groupes sont donc associés à la même fréquence de résonance. Dans le spectre d'absorption d'une molécule, on a donc autant de fréquences de résonance que de groupes équivalents.

3.2 Utilisation en Chimie

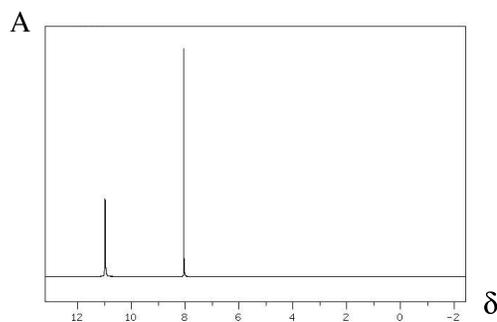
Déplacement chimique Dans un spectre RMN, l'échantillon soumis à un champ B intense (qq tesla) est traversé par des ondes radio. L'appareil mesure alors les fréquences de résonance des différents noyaux d'hydrogènes contenu dans l'espèce considérée. Afin de s'affranchir de la valeur du champ appliqué par l'appareil de mesure, et ainsi de pouvoir comparer les différents spectres provenant de plusieurs appareils de mesure, on ajoute une molécule de référence dans les échantillons analysés. Il s'agit généralement du TMS (tétraméthylsilane) inerte chimiquement et ne possédant qu'un seul groupe de proton équivalents. Sa fréquence de résonance sert alors d'origine.

Pour échafauder un spectre RMN, on construit alors une grandeur sans dimension appelée déplacement chimique (exprimée en ppm) :

$$\delta = 10^6 \frac{\nu_i - \nu_{ref}}{\nu_{ref}} \quad (2)$$

Avec le déplacement chimique, on s'affranchit de la valeur du champ \vec{B}_0 délivré par l'appareil. Après avoir mesuré les différents δ des protons équivalents d'une molécule, on trace le spectre $A = f(\delta)$, avec l'axe des abscisses inversé. Globalement, le spectre RMN d'une molécule présente alors de nombreux pics fins correspondant aux groupes de protons équivalents. Sur ce graphe, on ajoute souvent une courbe appelée courbe d'intégration qui renseigne sur l'amplitude du pic et donc le nombre de protons absorbant à cette fréquence. En général, il s'agit d'une courbe en escalier superposée au spectre dont chaque palier se situant au niveau du déplacement chimique du groupe de protons équivalents est proportionnel au nombre de protons de ce groupe.

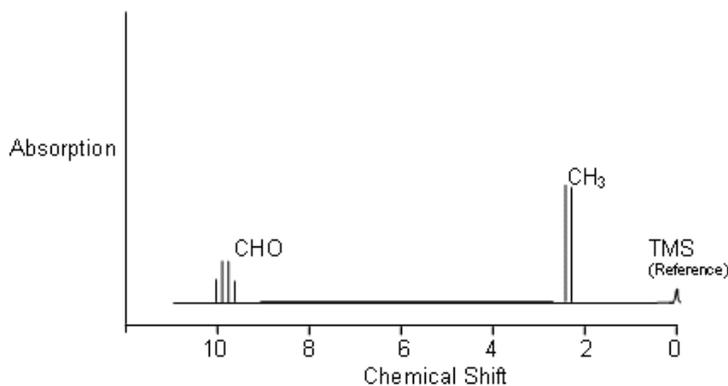
On représente sur le graphe suivant le spectre de l'acide formique $CH - COOH$. Dans cette molécule, il n'y a que deux protons. Ceux-ci ne voient pas le même environnement chimique de la molécule. Le proton lié à l'oxygène produit un pic de fort déplacement chimique étant donné que l'oxygène, très électronégatif draine les électrons de la liaison. Le proton est donc déblindé, son pic se situe dans la zone de champ faible $\delta = 11ppm$. L'autre proton, lié à C a un environnement plus chargé en électrons, il a donc un déplacement moins fort $\delta = 8ppm$. De plus, on remarque que l'intensité des pics n'a pas de lien direct avec les déplacements chimiques auxquels ils apparaissent.



Couplage et Multiplicité

Exemple de l'éthanal : [2]

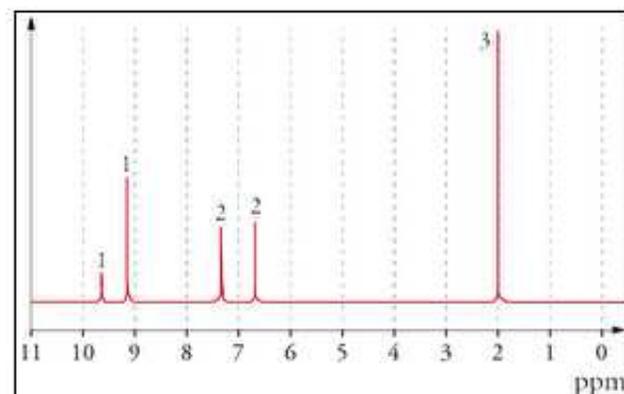
Dans cette molécule on distingue deux groupes de protons équivalents. D'un côté, les trois hydrogènes du groupe méthyle (la rotation autour de la liaison simple C-C rend les 3 protons indistinguables) et de l'autre l'hydrogène du groupe CHO. On s'attend donc à n'observer que 2 pics : le H de CHO étant le plus déblindé il apparaît pour un fort déplacement chimique alors que les trois autres auront un pic intégrant pour 3 protons mais avec un déplacement chimique faible. Cependant, le signal attribué au noyau d'hydrogène de la fonction aldéhyde est composé de 4 pics or il n'intègre que pour un seul proton, on parle alors de quadruplet. De plus, celui correspondant au groupe méthyle se compose de deux pics (un doublet). Cette multiplicité de pics est liée à la présence d'un couplage avec les noyaux d'hydrogène voisins.



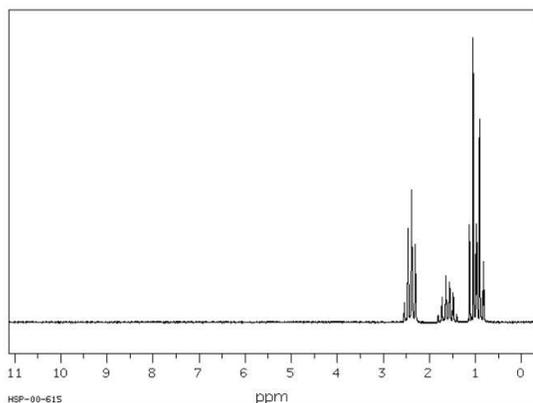
Un groupe de protons équivalents est couplé avec un autre groupe voisin composé de n protons équivalents, est caractérisé non par un seul pic mais par un multiplet de $(n+1)$ pics équidistants de hauteurs relatives correspondant aux coefficients du triangle de Pascal. On parle de protons voisins lorsque ceux-ci sont éloignés de deux ou trois liaisons C-C ou C-H dans la molécule. La présence d'une liaison avec un hétéroatome comme CH-OH inhibe

le couplage avec d'autres protons. La multiplicité du signal renseigne sur le nombre de voisins équivalents du groupe de protons considérés. Sur le spectre RMN, l'aire se situant sous chaque multiplet est proportionnelle au nombre de protons équivalents du groupe considéré.

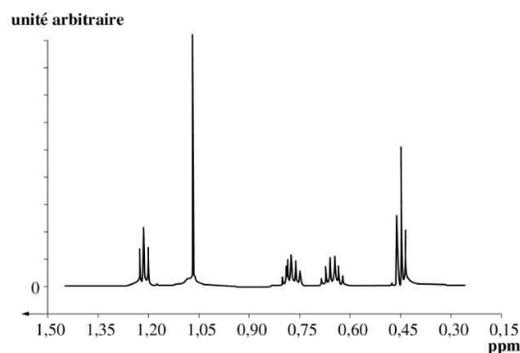
Spectre RMN du paracétamol



SPECTRE DE RMN DU PROTON DE L'HEXAN-3-ONE :



SPECTRE DE RMN DU PROTON DE L'HEXAN-2-ONE :



Pour l'hexanone, on détermine 5 groupes de protons équivalents dans chacune des deux isomères. Cependant leurs voisins ne sont pas les mêmes.

Conclusion

Les méthodes de caractérisation spectroscopiques sont des techniques non destructives permettant de vérifier si lors d'une synthèse organique, le produit final est bien celui recherché. On utilise généralement la RMN et la spectroscopie IR de manière complémentaire si le laboratoire possède les deux appareils. En pratique, les laboratoires sont équipés de spectromètres IR mais la possession d'un appareil de RMN n'est pas encore systématique. En pratique, la méthode UV-Visible n'est que rarement utilisée pour caractériser un produit mais plutôt pour déterminer sa concentration lors de titrage, d'étude cinétique...