

# MC5 : Détermination de structures par méthodes spectroscopiques

## Biblio :

- Drouin p228
- Grüber p232

## Introduction

En chimie, on souhaite connaître la structure des molécules pour prévoir leur réactivité, et concevoir des chemins de synthèse adaptés. La structure désigne *wiki structure*.

Les objets étudiés sont nanoscopiques à microscopiques (un atome = 1 angstrom, les molécules sont donc nanoscopiques). Déterminer leur structure est alors impossible par de la microscopie optique (diffraction). On doit recourir à d'autres méthodes. Une des voies principales est en observant leur interaction avec des rayonnements électromagnétiques. C'est la **spectroscopie**.

Def IUPAC : The study of physical systems by the electromagnetic radiation with which they interact or that they produce. Spectrometry is the measurement of such radiations as a means of obtaining information about the systems and their components. In certain types of optical spectroscopy, the radiation originates from an external source and is modified by the system, whereas in other types, the radiation originates within the system itself.

Certaines molécules sont reconnaissables par leur couleur (KMnO<sub>4</sub>) car absorbent dans le visible, on a alors à notre disposition la spectroscopie UV-vis pour l'observer.

On peut obtenir des informations sur les modes normaux de vibrations grâce à l'absorption d'ondes évanescentes IR.

On peut déduire de la fréquence de précession libre de spins leur environnement chimique en spectroscopie RMN.

Autres caractérisations : chromatographies, spectroMÉTRIE de masse,

*Prendre une image avec les différents domaines spectroscopiques*

## 1 Détermination de structure organique

Acylation de Friedel-Crafts (Drouin p228)

Niveau L2 (SEAr)

### Phases de manip :

- CCM : pas détermination de structure, mais permet de s'assurer qu'on n'a qu'une espèce à analyser.
- IR : Caractérisation des fonctions caractéristiques du produit : ester, aromatique
- RMN : détermination de la sélectivité  
Domaine de Fréquences : 43MHz, On peut avoir une meilleure résolution avec un 300 MHz de laboratoire

à préciser : on pourrait faire une RMN <sup>13</sup>C pour déterminer au mieux les fonctions (carbonyle visible en RMN du Carbone)).

Anisole en défaut car chlorure d'acyle plus facile à éliminer

Origine des couleurs ?

## 2 Détermination de structures inorganiques

Synthèse du jaune de Cobalt (Grüber p 232)

**Phases de manip :**

- Essorage
- UV-vis
- Exploitation Tanabe Tsugano

**Conclusion**

On a alors mis en oeuvre plusieurs techniques spectroscopiques pour remonter à la topologie moléculaire, la géométrie et la structure électronique d'espèces.

Ouverture : carbones asymétriques : polarimétrie, spectrométrie.