Licence Sciences et Techniques – L2
Techniques spectroscopiques (ChOr42)

CC – durée : 1h – Jeudi 24 mars 2016

La calculatrice n'est pas autorisée. L'utilisation du téléphone portable est interdite.
Document fourni : les tables de spectroscopie infrarouge/RMN – Répondre sur le sujet

---

Nom :	**Prénom :**

Exercice 1

Attribuer à chaque donnée RMN ^{1}H le composé correspondant (cocher la bonne réponse).

1.1) RMN ^{1}H : δ 1,19 ppm (singulet), 3,65 ppm (singulet)

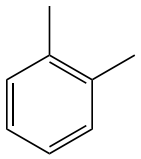
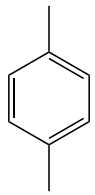
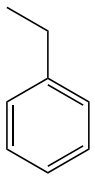
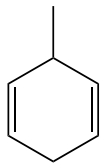
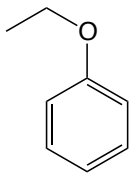
☐	☐	☐	☐	☐
$(CH_3)_3C\text{-}OH$	$CH_3\text{-}O\text{-}CH(CH_3)_2$	$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$	$CH_3CH_2CH(CH_3)OH$	$CH_3CH_2CH_2\text{-}O\text{-}CH_3$

1.2) RMN ^{1}H : δ 0,91 ppm (doublet), 2,15 ppm (multiplet), 3,34 (doublet)

☐	☐	☐	☐	☐
$(CH_3)_3C\text{-}Cl$	$Cl\text{-}CH_2\text{-}CH(CH_3)_2$	$CH_3CH_2CH(CH_3)Cl$	$CH_3CH_2CH_2CH_2Cl$	$CH_3CH_2CH(CH_3)CH_2Cl$

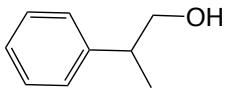
1.3) RMN ^{1}H : δ 1,25 ppm (triplet), 2,60 ppm (quadruplet), 7,30 (multiplet)

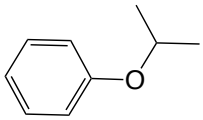
☐ ☐ ☐ ☐ ☐

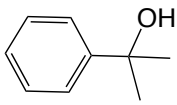






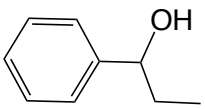
1.4) RMN ^{1}H : δ 1,25 (doublet), 3,03 (sextuplet), 3,65 (singulet), 3,94 (doublet), 7.31 (multiplet)

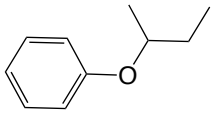
☐ ☐ ☐ ☐ ☐





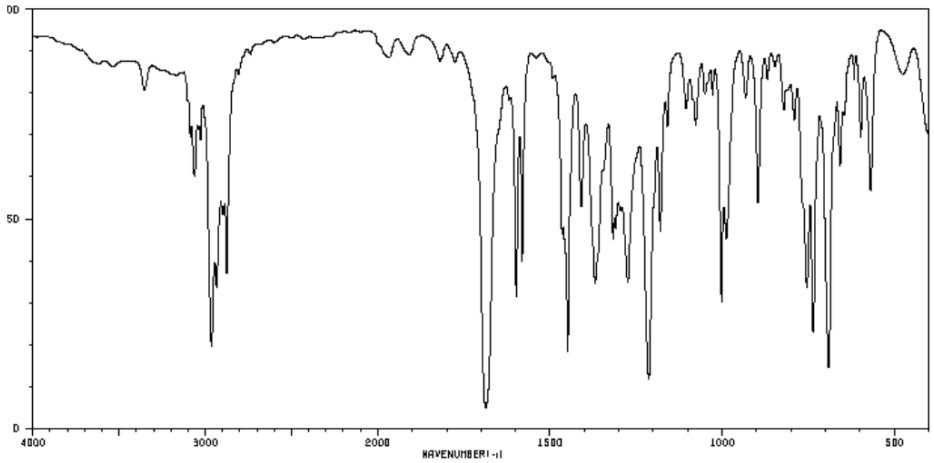


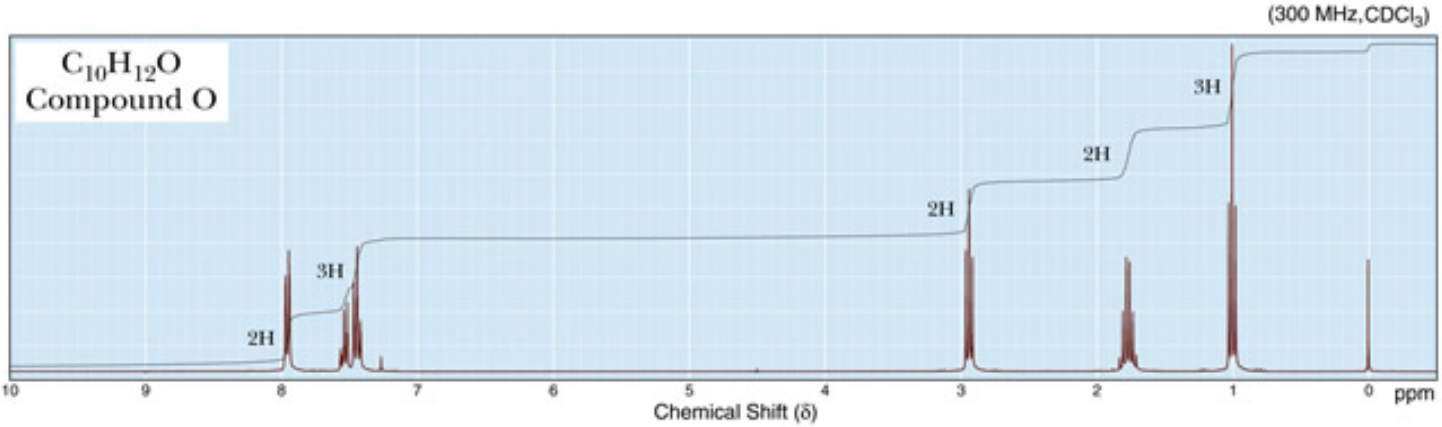




Exercice 2

Soit un composé **O** de formule brute $C_{10}H_{12}O$ caractérisé par le spectre infrarouge et RMN ^1H suivant :





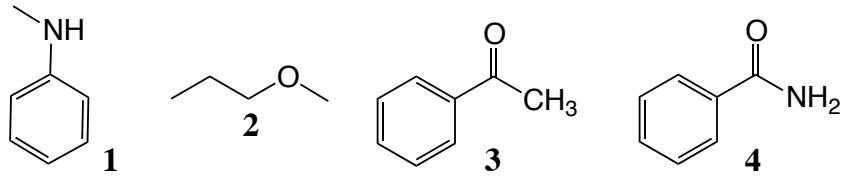
- Calculer le nombre d'insaturations (DBE) (donner le calcul) :

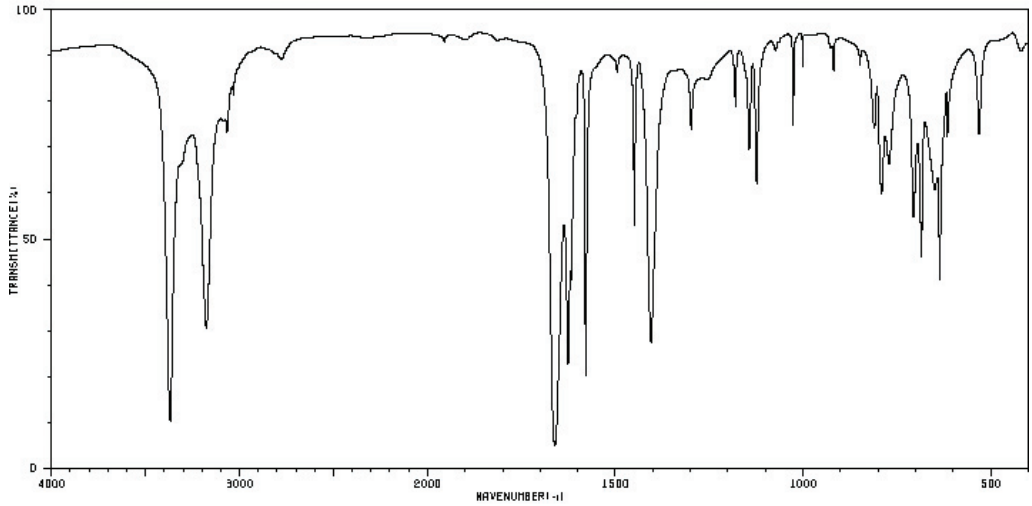
- Interpréter les données infrarouge :

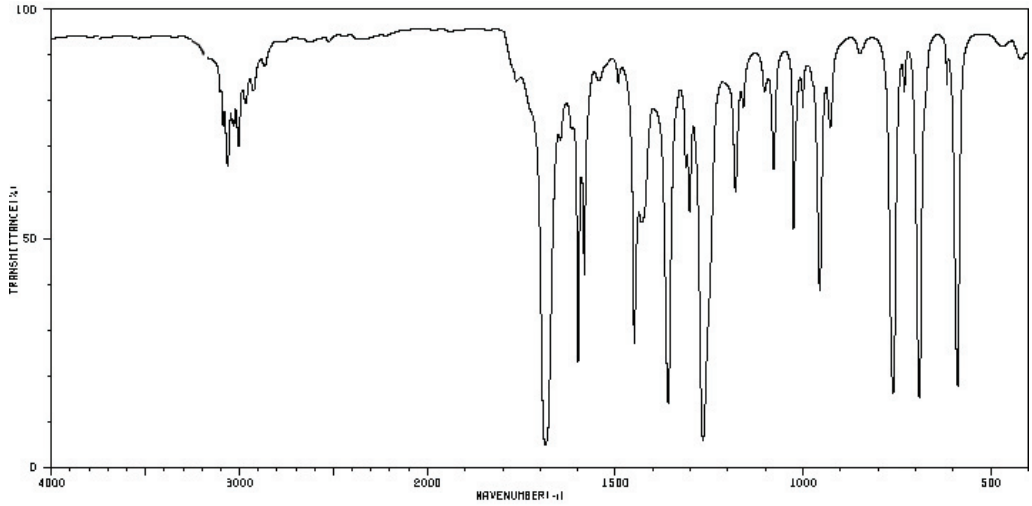
- Interpréter le spectre RMN ^1H (attribution et multiplicité des signaux) puis, à partir de l'ensemble des données, donner la formule semi-développée du composé **O** :

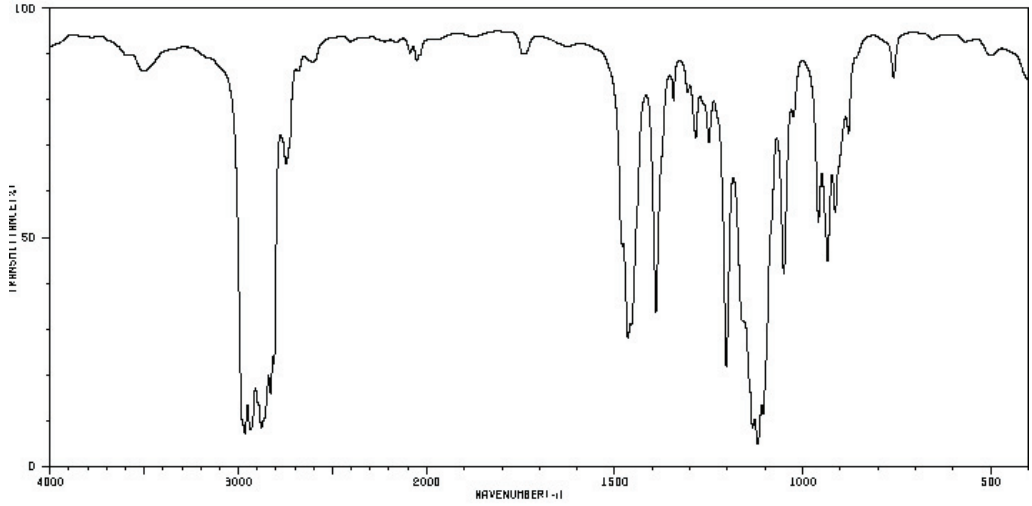
Exercice 3

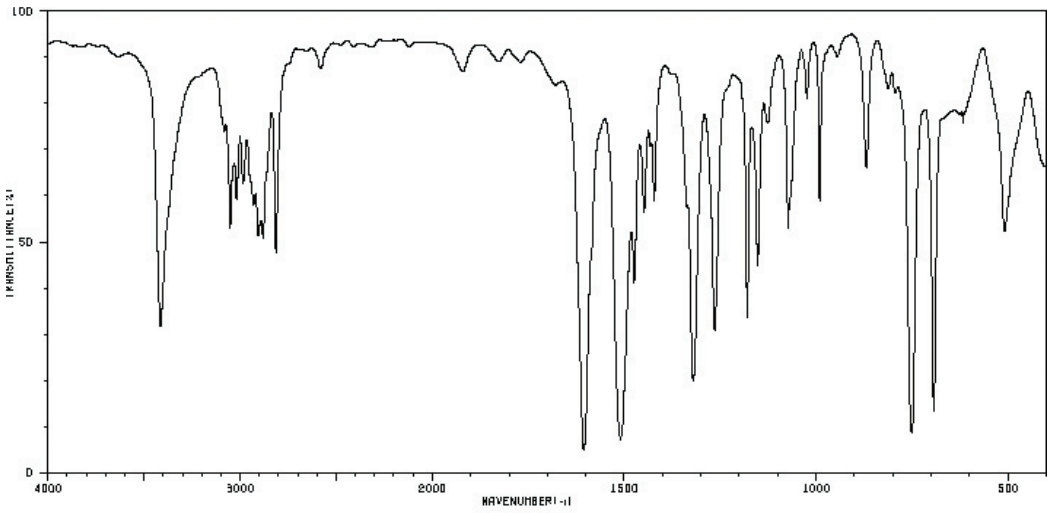
Attribuer à chacun des composés **1** à **4** son spectre infrarouge en indiquant sur chaque spectre la(les) bande(s) caractéristique(s).











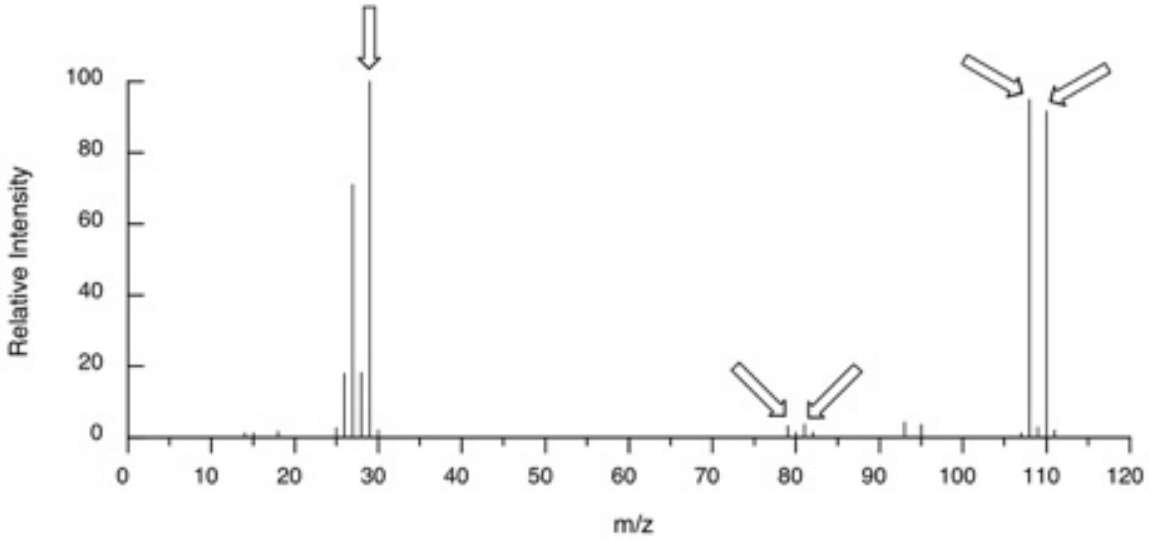
Exercice 4

Soit le spectre de masse d'un halogénoalcane simple de formule brute C_xH_yX obtenu en bombardement électronique (EI) (m/z = rapport masse sur charge en uma).
Données : masses molaires atomiques en $g.mol^{-1}$: F : 19 ; Cl : 35,453 (2 isotopes *100/32,5) ; Br : 80 (2 isotopes 100/98) ; I : 127.*

a) Quelle est l'équation générale de la réaction d'ionisation ?

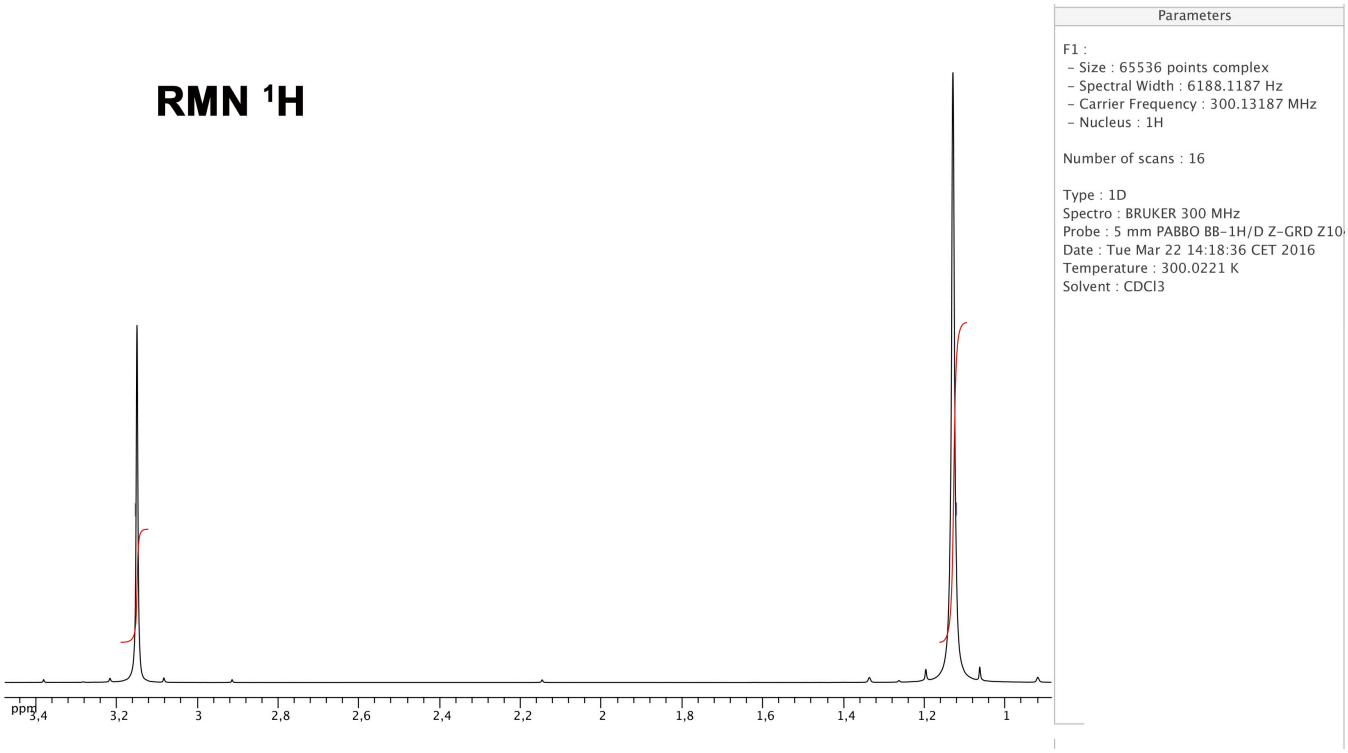
b) Quelle est la nature de l'halogène dans ce composé ? Justifier votre réponse.

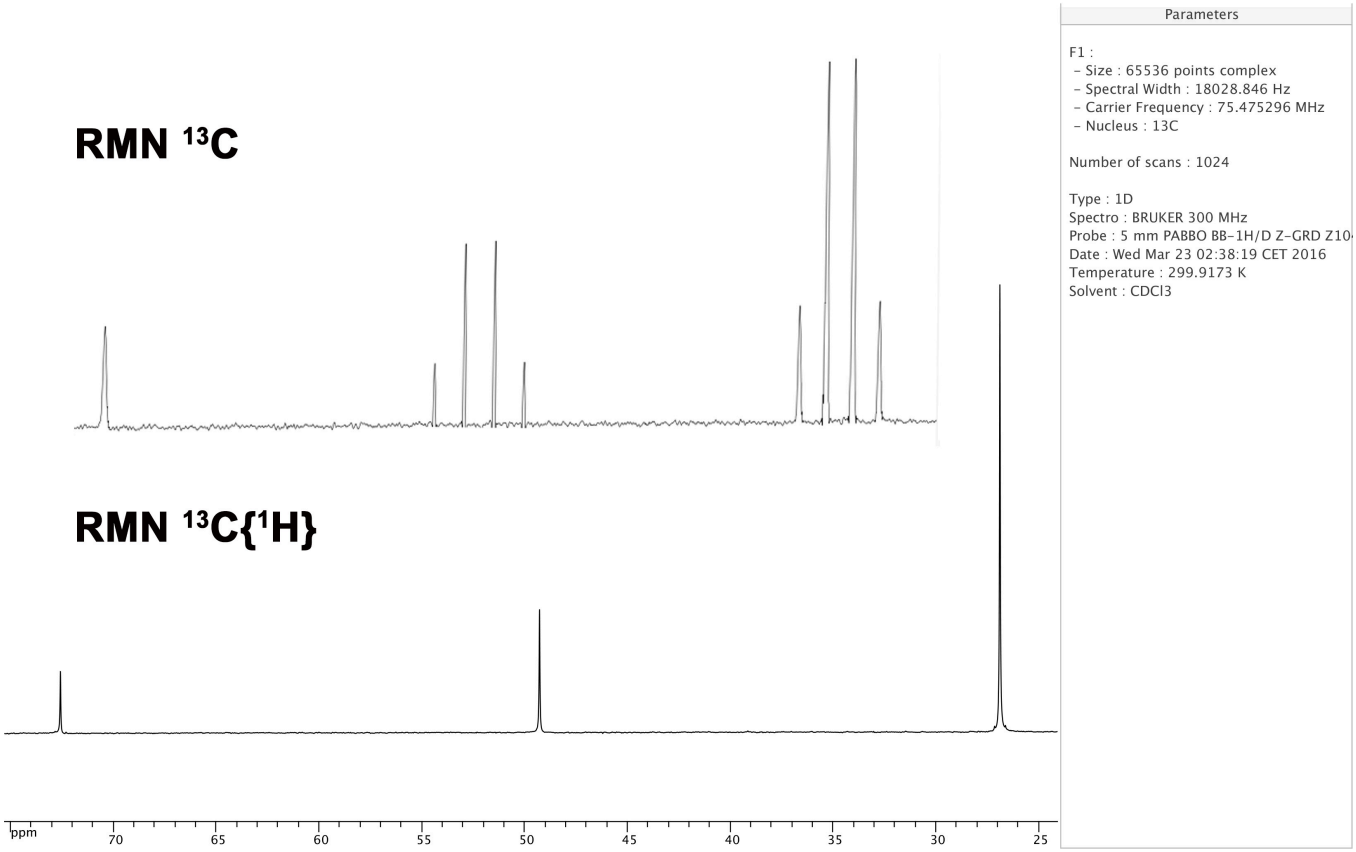
c) Compléter le spectre de masse en indiquant à côté de chaque flèche l'espèce correspondante.



Exercice 5

Soit un composé de formule brute $C_5H_{12}O$ et caractérisé par les spectres RMN ^1H et ^{13}C ci-dessous. Quelle est la formule semi-développée du composé ? Justifier votre réponse en attribuant les pics observés en RMN ^1H et ^{13}C non découplé du proton. Expliquer l'allure des pics observés sur ces deux spectres.





Licence Sciences et Techniques – L2
Techniques spectroscopiques (ChOr42)

CC – durée : 1h – Jeudi 24 mars 2016

La calculatrice n'est pas autorisée. L'utilisation du téléphone portable est interdite.
Document fourni : les tables de spectroscopie infrarouge/RMN – Répondre sur le sujet

---

Nom :	**Prénom :**

Exercice 1 /3 0,75 = 1 bonne réponse

Attribuer à chaque donnée RMN ^{1}H le composé correspondant (cocher la bonne réponse).

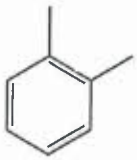
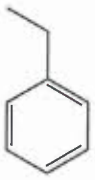
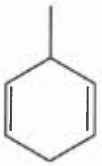
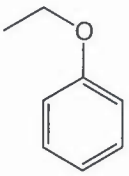
1.1) RMN ^{1}H : δ 1,19 ppm (singulet), 3,65 ppm (singulet)

☒	☐	☐	☐	☐
$(CH_3)_3C\text{-}OH$	$CH_3\text{-}O\text{-}CH(CH_3)_2$	$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$	$CH_3CH_2CH(CH_3)OH$	$CH_3CH_2CH_2\text{-}O\text{-}CH_3$

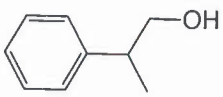
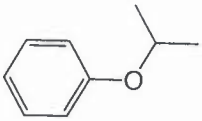
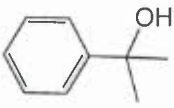
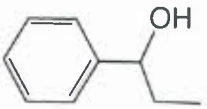
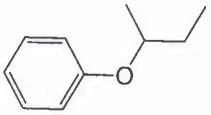
1.2) RMN ^{1}H : δ 0,91 ppm (doublet), 2,15 ppm (multiplet), 3,34 (doublet)

☐	☒	☐	☐	☐
$(CH_3)_3C\text{-}Cl$	$Cl\text{-}CH_2\text{-}CH(CH_3)_2$	$CH_3CH_2CH(CH_3)Cl$	$CH_3CH_2CH_2CH_2Cl$	$CH_3CH_2CH(CH_3)CH_2Cl$

1.3) RMN ^{1}H : δ 1,25 ppm (triplet), 2,60 ppm (quadruplet), 7,30 (multiplet)

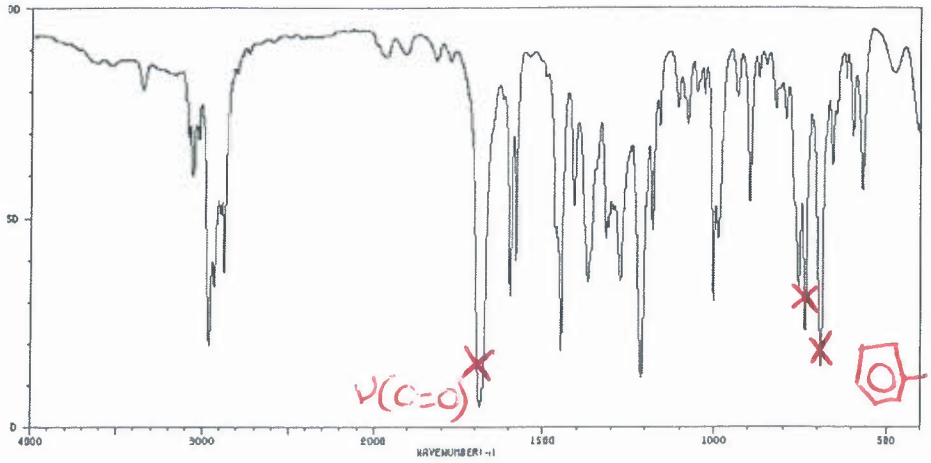
☐	☐	☒	☐	☐
				

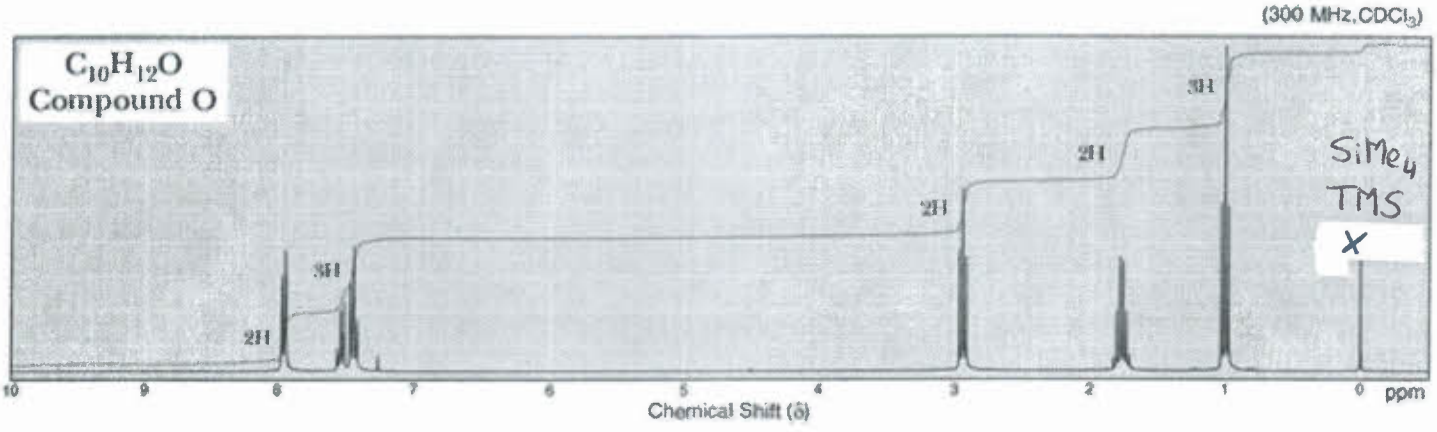
1.4) RMN ^{1}H : δ 1,25 (doublet), 3,03 (sextuplet), 3,65 (singulet), 3,94 (doublet), 7.31 (multiplet)

☒	☐	☐	☐	☐
				

Exercice 2 /5

Soit un composé **O** de formule brute $C_{10}H_{12}O$ caractérisé par le spectre infrarouge et RMN ^1H suivant :





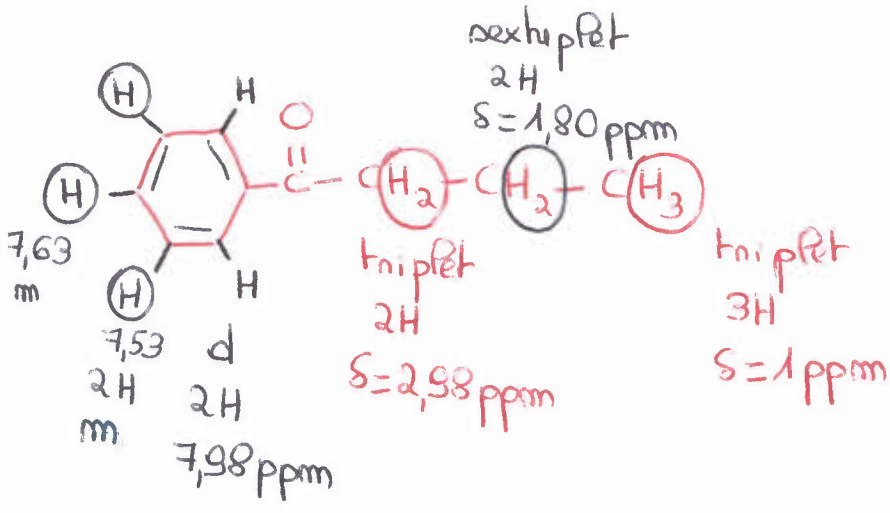
- Calculer le nombre d'insaturations (DBE) (donner le calcul) : || 1

$$DBE = \frac{2 \times 10 - 12 + 2}{2} = 5 = 1 \text{ cycle aromatique } (4) + 1 \text{ double liaison}$$

- Interpréter les données infrarouge : || 1

ν(C=O) à environ 1700 cm^{-1} + aromatique monosubstitué (cf plus haut)

- Interpréter le spectre RMN ^1H (attribution et multiplicité des signaux) puis, à partir de l'ensemble des données, donner la formule semi-développée du composé **O** :



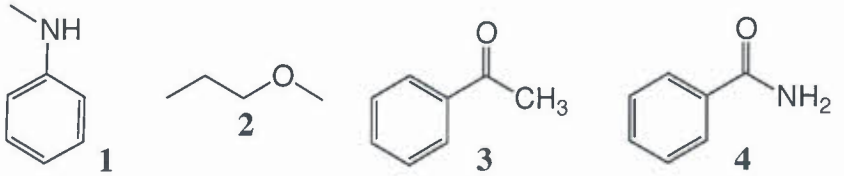
|| RMN ^1H = 2
|| Formule = 1

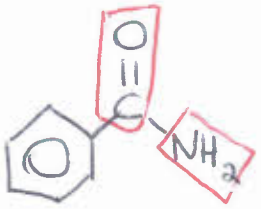
/4 Attribution = 0,5 x 4 + Explication = 0,5 x 4

Exercice 3

Attribuer à chacun des composés **1** à **4** son spectre infrarouge en indiquant sur chaque spectre la(les) bande(s) caractéristique(s).

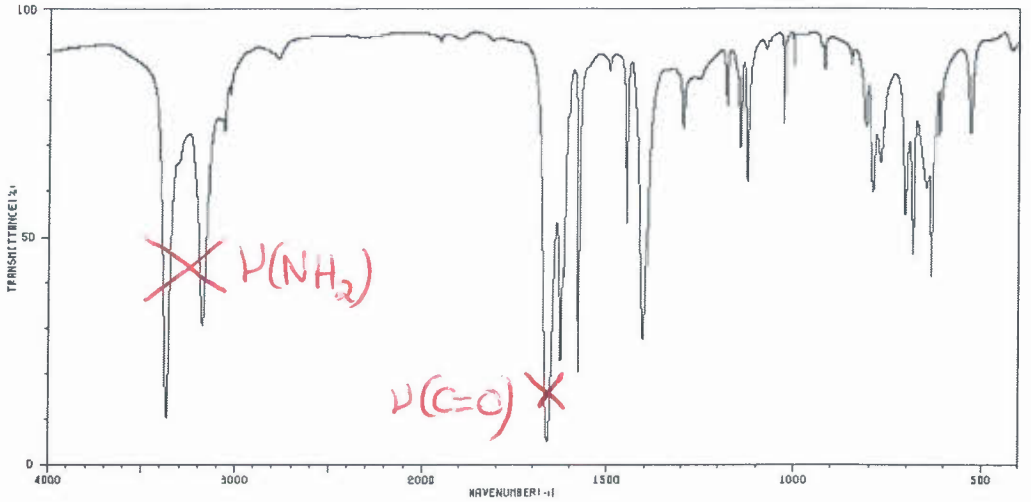
Di mumeno OK
Pas je les "justifier"

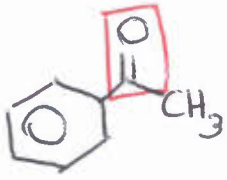




Amide

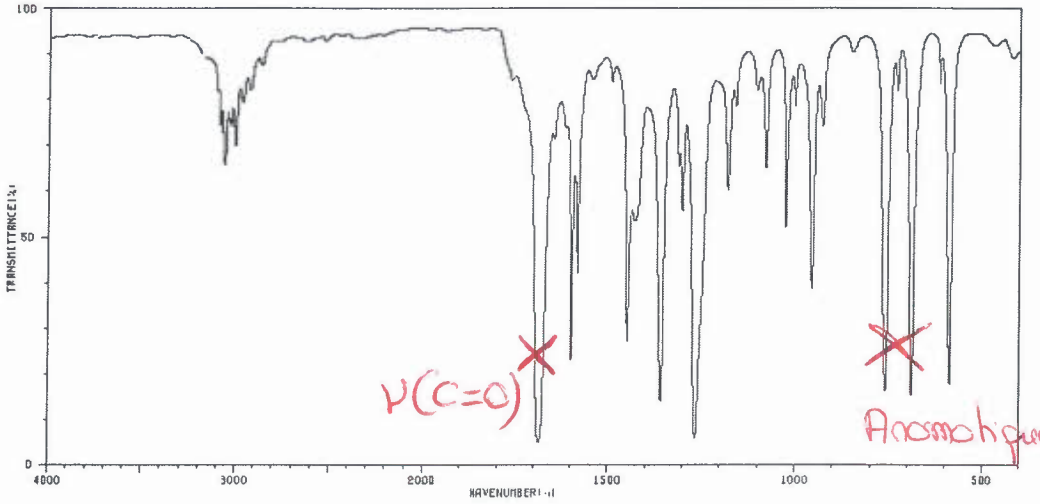
4





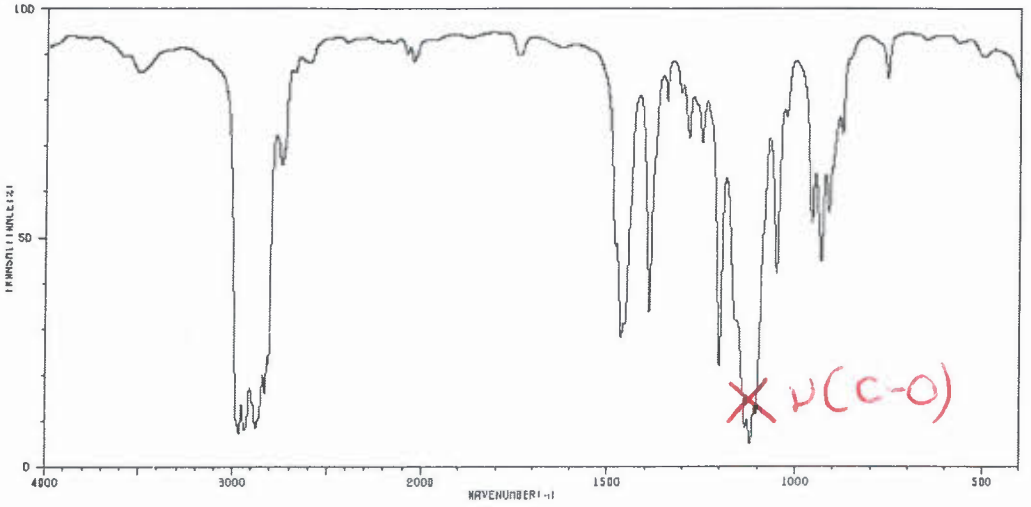
Cétone

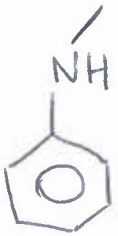
3



Ether

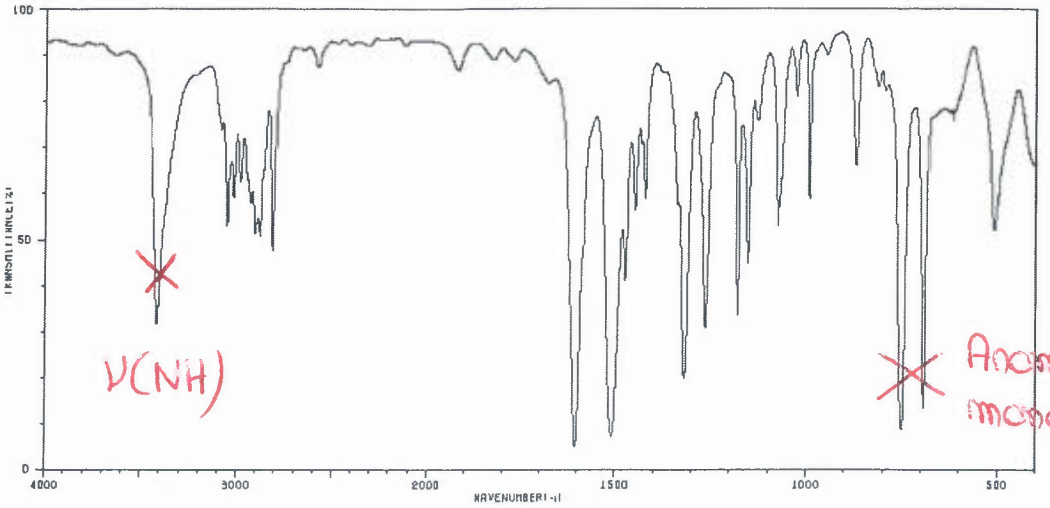
2





Amine secondaire

1



Exercice 4 / 4

Soit le spectre de masse d'un halogénoalcane simple de formule brute C_xH_yX obtenu en bombardement électronique (EI) (m/z = rapport masse sur charge en uma).
Données : masses molaires atomiques en $g.mol^{-1}$: F : 19 ; Cl : 35,453 (2 isotopes *100/32,5) ; Br : 80 (2 isotopes 100/98) ; I : 127.*

1 a) Quelle est l'équation générale de la réaction d'ionisation ? 0,5 si point manquant

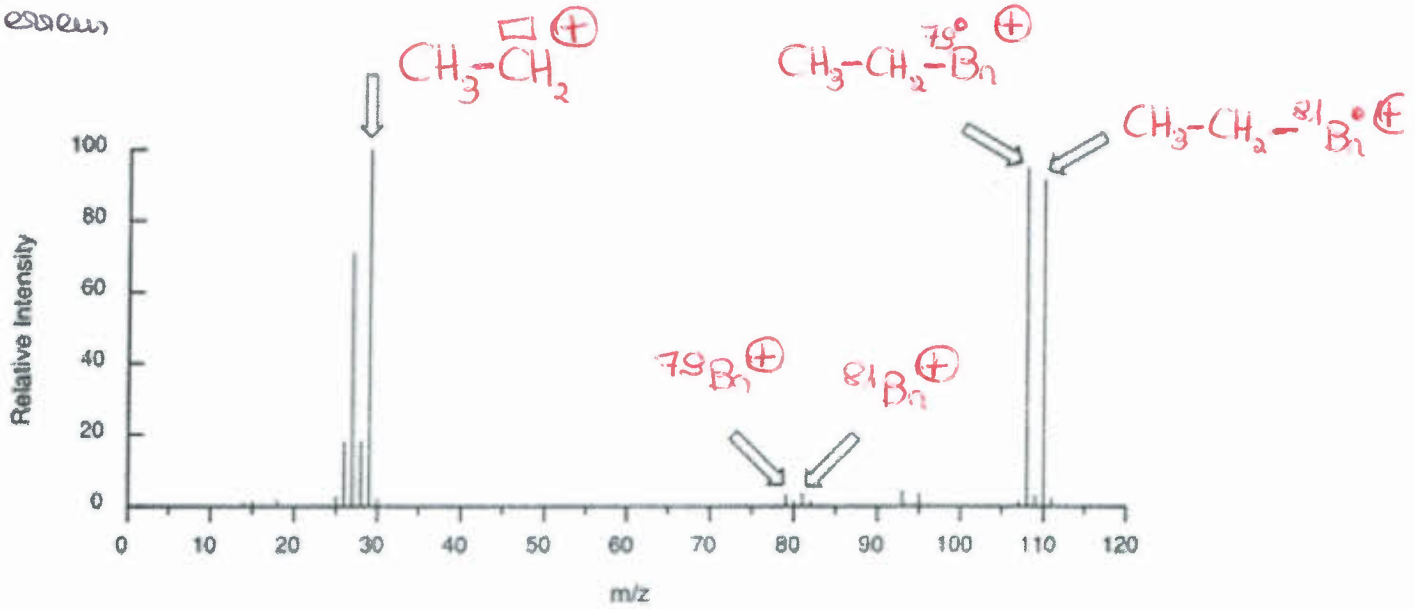
$M + e^- \rightarrow M^{+\bullet} + 2e^-$

1 b) Quelle est la nature de l'halogène dans ce composé ? Justifier votre réponse.

Composition isotopique du Br ⇒ ^{79}Br 100% / ^{81}Br 98%) 2 pics environ identiques

2 c) Compléter le spectre de masse en indiquant à côté de chaque flèche l'espèce correspondante.

-0,5 par erreur

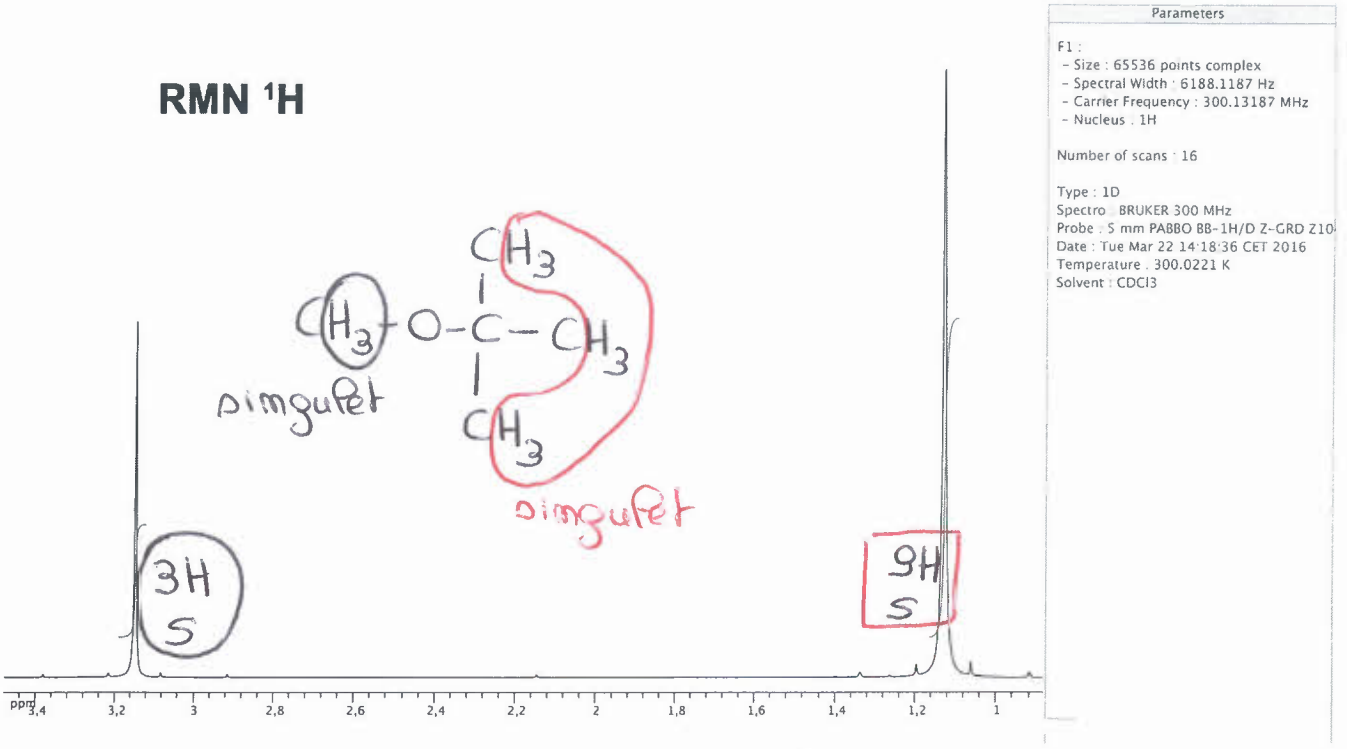
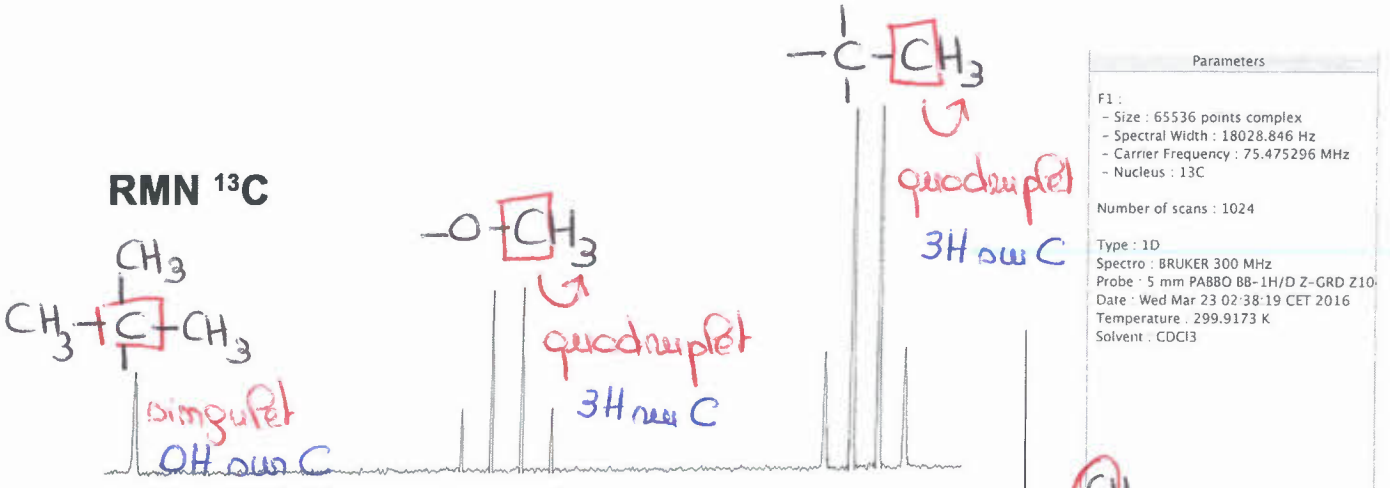
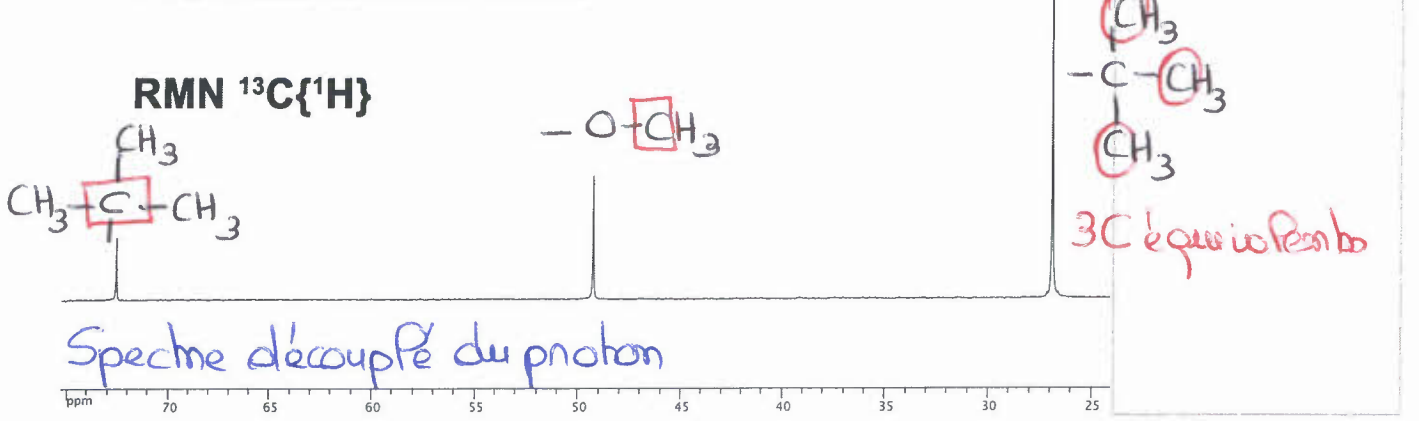


/4

Formule = 1

^1H = attribution + explications 1,5

^{13}C = // + // 1,5

Exercice 5

Soit un composé de formule brute $C_5H_{12}O$ et caractérisé par les spectres RMN ^1H et ^{13}C ci-dessous. Quelle est la formule semi-développée du composé ? Justifier votre réponse en attribuant les pics observés en RMN ^1H et ^{13}C non découplé du proton. Expliquer l'allure des pics observés sur ces deux spectres.