

Corrigé type Td Série N-2 UEF-5 M-1 Chim. Pharm.

Reponse – Ex.-1

D'après la formule brute C_5H_{12} on a un alcane $C_n H_{2n+2}$

A partir du spectre on peut déduire les informations suivantes:

Les pics d'absorption entre 2870 et 2980cm^{-1} sont très caractéristique aux vibrations d'élongation de la liaison $C-H_{str.}$, $CH_{3str.}$ et $CH_{2str.}$ (symétriques (ν_s) et asymétriques (ν_{as}) de la liaison $C-H$)

$$\nu_{as}(CH_3) : 2960\text{ cm}^{-1} \quad \nu_s(CH_3) : 2872\text{ cm}^{-1}$$

$$\nu_{as}(CH_2) : 2926\text{ cm}^{-1} \quad \nu_s(CH_2) : 2853\text{ cm}^{-1}$$

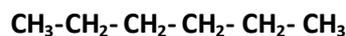
Vers 1400 cm^{-1} se situent les vibrations de déformation dans le plan des liaisons $C-H$ def.

$$\delta_s(CH_3) : 1375\text{ cm}^{-1} \quad \delta_s(CH_2) : 1465\text{ cm}^{-1}$$

La bande forte $> 1400\text{ cm}^{-1}$ et une bande moyenne à $< 1400\text{ cm}^{-1}$ sont très caractéristiques aux alkyles primaire .

Une vibration de déformation hors du plan des CH_2 apparait à 720cm^{-1}

Donc notre composé est un alcane linéair saturé c'est le pentane



Réponse Ex.-2

a)

Alcane	Alcène (simple)
<p>pics d'absorption entre 2870 et 2980cm^{-1} $C-H_{str.}(sp^3)$ ----- -----</p>	<p>pics d'absorption entre 2870 et 2980cm^{-1} $C-H_{str.}(sp^3)$ pics d'absorption entre 3000 et 3080cm^{-1} $C-H_{str.}(sp^2)$ oléphinique. pics d'absorption entre 1620 et 1680cm^{-1} $C=C_{str.}$</p>
<p>Vers 1400 cm^{-1} $C-H$ def -----</p>	<p>Vers 1400 cm^{-1} $C-H$ def pics d'absorption entre 900 et 1000cm^{-1} $C-H_{def.}$ alcène Hors de plans .</p>
<p>Une vibration de déformation hors du plan des CH_2 sp^3 apparait à 720cm^{-1}</p>	<p>Une vibration de déformation hors du plan des CH_2 sp^3 apparait à 720cm^{-1}</p>

b)

Aldéhyde	Cétone
<p>L'absorption C=O str. se fait pour une fréquence un peu plus élevée que pour une cétone (1740–1720 cm^{-1}).</p> <p>l'absorption de C-H str. aldéhydique, sous forme d'un doublet (m), (m) entre 2750 et 2850 cm^{-1}.</p> <p>Un second absorption de C-H def. sort à 1400 cm^{-1}.</p>	<p>L'absorption C=O str. se fait pour une fréquence un peu moins élevée que pour une cétone (1715–1690 cm^{-1}).</p> <p>-----</p> <p>-----</p>

c)

alcool	Ether
<p>Vibration d'élongation (O-H str.) fine apparaît entre 3600 et 3650 cm^{-1}. pas de liaison H</p> <p>Vibration d'élongation (O-H str.) large apparaît entre 3400 et 3200 cm^{-1} attribuée à O-H str associé.</p> <p>Vibration de déformation (O-H def.) apparaît entre 1330 et 1420 cm^{-1}.</p> <p>-----</p>	<p>-----</p> <p>-----</p> <p>-----</p> <p>Les éthers aliphatiques donnent une vibration asymétrique C-O str. fort vers 1120 cm^{-1}, et une vibration symétrique très faible autour de 850 cm^{-1}.</p>

d)

Acide carboxylique	Ester
<p>Vibration d'élongation (O-H str.) large apparaît entre 3400 et 2500 cm^{-1} attribuée à O-H str associé.</p> <p>Vibration de déformation (O-H def.) dans le plan apparaît entre 1330 et 1420 cm^{-1}.</p> <p>Vibration de déformation (O-H def.) apparaît à 950 cm^{-1}, hors du plan.</p>	<p>-----</p> <p>-----</p> <p>-----</p>

Reponse Ex.-4



$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 4 + 2) - 8] = \frac{2}{2} = 1$$

$DBE = \text{Doubles Bandes Equivalentes}$ (nombre de centres non saturés).

Le pic à $1720 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow C=O_{\text{str}}$.

L'absence de bande à 2750 cm^{-1} qui pourrait nous renseigner sur un aldéhyde.

Ceci implique qu'on est en présence d'un cétone non conjugué.

Donc le centre d'insaturation $DBE = 1$ concerne le $(C=O)$

D'après la formule brute C_4H_8O le composé est de type $R-CO-R'$

Dans la région $2990 \text{ cm}^{-1} - 2872 \text{ cm}^{-1}$ on observe plus de deux pics $\Leftrightarrow (C-H_{\text{str-sym}})$ et $(C-H_{\text{str-antisym}})$ de (CH_3) et (CH_2) . (voir le cours)

$1465 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow (C-H_{\text{def-sym}})$ de (CH_2) :

$1420 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow (C-H_{\text{def-antisym}})$ de (CH_3)

$1375 \text{ cm}^{-1} \Leftrightarrow (C-H_{\text{def-isym}})$ de (CH_3)

$C-H_{\text{def}}$ du CH_2 hors du plan à 720 cm^{-1}

Donc on a : $R = CH_3$ et $R' = CH_2CH_3$.

Le composé est :



$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 5 + 2) - 8] = \frac{4}{2} = 2$$

$$DBE = 2$$

L'absence de bandes aux alentours de 1700cm^{-1} indique l'absence du groupement carbonyle.

Donc soit on a deux doubles liaisons $\text{C}=\text{C}$ ou un triple liaison $\text{C}\equiv\text{C}$!

D'après le spectre la bande faible à 2200cm^{-1} indique clairement la présence d'un $\text{C}\equiv\text{C}_{\text{str}}$.

Nous avons aussi une forte absorption à 3300cm^{-1} caractéristique au $\text{C-H}_{\text{str sp}}$.
=> la présence d'un alcyne terminal $\text{R}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$.

La bande large $3320-3500\text{cm}^{-1}$ est caractéristique d'une liaison hydrogène à partir d'un alcool (O-H_{str})lié .

La bande à 1150cm^{-1} \Leftrightarrow C-O_{str} .

Dans la région $2900-3000\text{cm}^{-1}$ on observe que deux pics \Leftrightarrow ($\text{C-H}_{\text{str}\cdot\text{sym}}$) et $\text{C-H}_{\text{str}\cdot\text{antisym}}$) de (CH_3). pas de bandes pour les CH_2 .

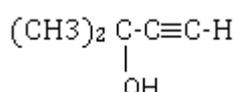
La même chose dans la région de vibration de déformation, on constate que deux bandes à

$$1420\text{cm}^{-1} \Leftrightarrow (\text{C-H}_{\text{def}\cdot\text{antisym}}) \text{ de } (\text{CH}_3)$$

$$1375\text{cm}^{-1} \Leftrightarrow (\text{C-H}_{\text{def}\cdot\text{isym}}) \text{ de } (\text{CH}_3)$$

R ne peut être donc que : $\text{R} = \text{HO}-\text{C}(\text{CH}_3)_2$

Le composé est :



C- $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_2$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 8 + 2) - 8] = \frac{10}{2} = 5$$

Si on a une formule brute $\text{C}_n\text{H}_m\text{O}$ ou $\text{C}_n\text{H}_m\text{N}_p$, ou' $n \geq 6$,
 $DBE \geq 4$, et dans le spectre il existe des pics forts (s) dans la régions $700-900\text{cm}^{-1}$ et des pics (m) dans la région $1400-1620\text{cm}^{-1}$

et des pics (w) dans la région $3000-3080\text{cm}^{-1}$, c'est une significative d'un noyau aromatique.

Dans ce spectre on en constate :

Une forte absorption à 700cm^{-1} qui indique la vibration de déformation C-H def. mono substitué.

Les deux bandes à 1460 et 1600cm^{-1} sont caractéristiques au $\text{C}\equiv\text{C}$ str. aromatique.

Des bandes faible (w) dans la région $3000-3080\text{cm}^{-1}$ caractéristiques au C-H str.

Donc on a un cycle aromatique monosubstitué avec 4 DBE (1 pour le cycle et 3 π)



$$\begin{array}{r} \text{C}_8\text{H}_8\text{O}_2 \\ - \text{C}_6\text{H}_5 \\ \hline = \text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2 \end{array}$$

Dans le reste de la formule $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2$, nous avons encore une double liaison

La bande forte à 1715cm^{-1} indique un groupement carbonyle $\Rightarrow \text{C}=\text{O}$ str.

Il reste encore un oxygène donc soit un acide ou un ester

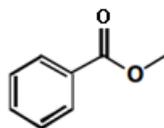
Les bandes à $1100-1150\text{cm}^{-1} \Leftrightarrow \text{C-O}$ str

L'absence d'une bande large dans la région $2500-3450\text{cm}^{-1}$ indique que le composé est un ester.

$$\begin{array}{r} \text{C}_8\text{H}_8\text{O}_2 \\ - \text{C}_6\text{H}_5 \\ - \text{CO}_2 \\ \hline = \text{CH}_3 \end{array}$$

Le pic à $2950 \Rightarrow (\text{C-H}_{\text{str.}})$ de (CH_3)

Donc la structure est:



Réponse Ex.-4

C₈H₈O: 3080cm⁻¹ (m), 2900cm⁻¹ (m), 1690cm⁻¹ (s), 1610cm⁻¹ (m), 1450cm⁻¹(m), 750cm⁻¹(s).

$$DBE = \frac{1}{2}[(2n + 2) - m]$$

$$DBE = \frac{1}{2}[(2 \times 8 + 2) - 8] = \frac{10}{2} = 5$$

Une forte absorption à 750cm⁻¹ qui indique la vibration de déformation C-H def. mono substitué

Les deux bandes à 1450 et 1610 cm⁻¹ sont caractéristiques au C≡Cstr. aromatique.

La bande moyenne (m) à 3080cm⁻¹ caractéristiques au ≡C-Hstr .

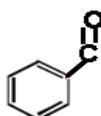
Donc on a un cycle aromatique monosubstitué avec 4 DBE (1 pour le cycle et 3 π)



Dans le reste de la formule **C₂H₃O**, nous avons encore une double liaison

La bande forte à 1690cm⁻¹ (s) indique un groupement carbonyle conjugué

=> C=Ostr, lié directement au cycle aromatique, c'est-à-dire on a le fragment suivant :



- CO

= CH₃

Le pic à 2900 => C-H_{str.} de (CH₃)

Donc la structure est:

