



Licence de Chimie, L3
Epreuve de Chimie Moléculaire
et Structurale

Jeudi 20 mai 2021 – Durée 2 h

Les 5 exercices sont indépendants.

Utilisez les spectres de l'énoncé (annotations, interprétations) pour vous aider dans vos réponses.

NOM :

Prénom :

Exercice 1 (Questions de cours) :

Spectrométrie de masse

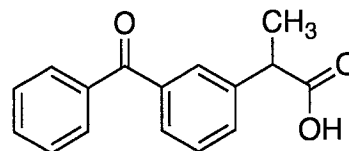
- 1) Donner la définition de la masse exacte et de la masse moyenne.
- 2) Décrire brièvement le principe de fonctionnement d'un spectromètre de masse MALDI/TOF (mode d'ionisation et analyseur).

RMN

- 3) Donner la définition du déplacement chimique δ en ppm.
- 4) Donner la définition du temps de relaxation longitudinal T_1 (équation + graphe montrant l'évolution de M_z au cours du temps).

Exercice 2.

- 1) Prévoir les fragmentations principales du spectre de masse du **kétoprofène**, un anti-inflammatoire non stéroïdien de formule $C_{16}H_{14}O_3$. Le spectre de masse montre notamment la présence de pics à $m/z = 209, 177, 105, 91$ et 77 .



Kétoprofène

Formule : $C_{16}H_{14}O_3$

Masse exacte : 254,0943

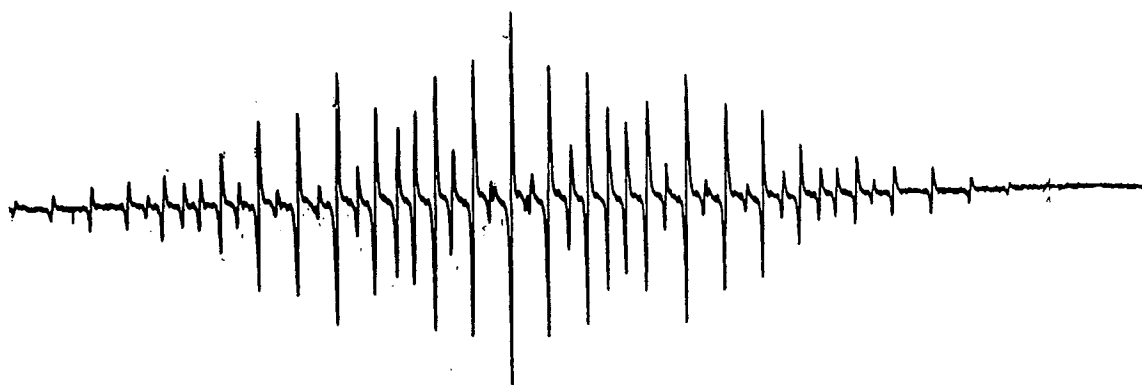
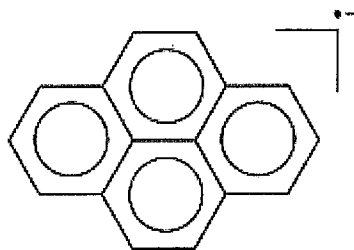
Masse moyenne : 254,2850

- 2) Le spectre de masse de l'**heptan-2-one** ($C_7H_{14}O$, masse molaire = $114,1 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$) présente un pic majoritaire à $m/z = 58$. Expliquer la fragmentation privilégiée qui est observée.

Exercice 3 : RPE

Le spectre RPE de l'anion radical du pyrène est représenté ci-dessous (à 298 K) :

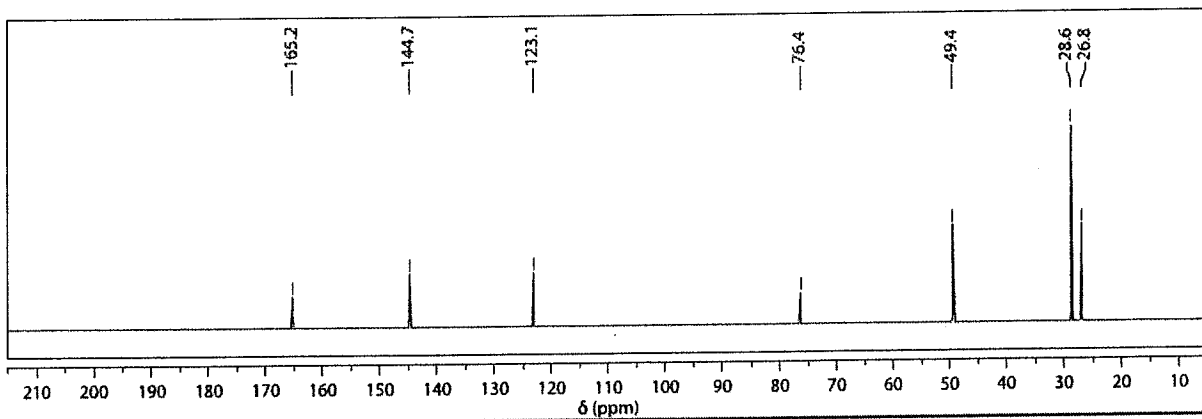
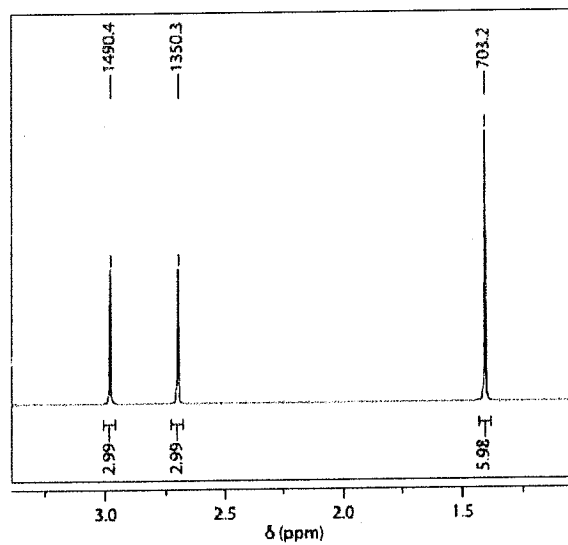
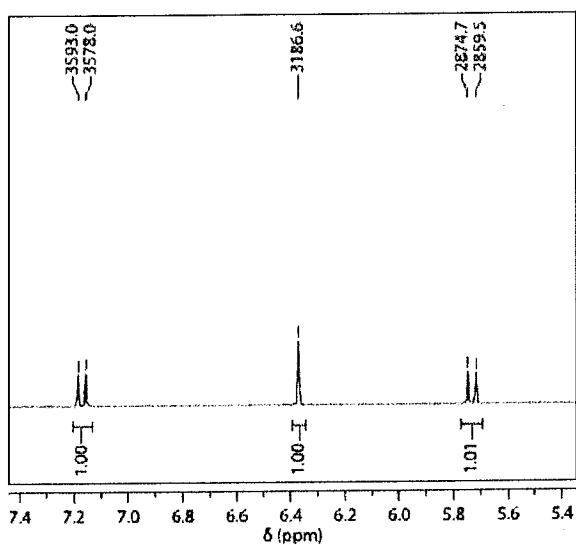
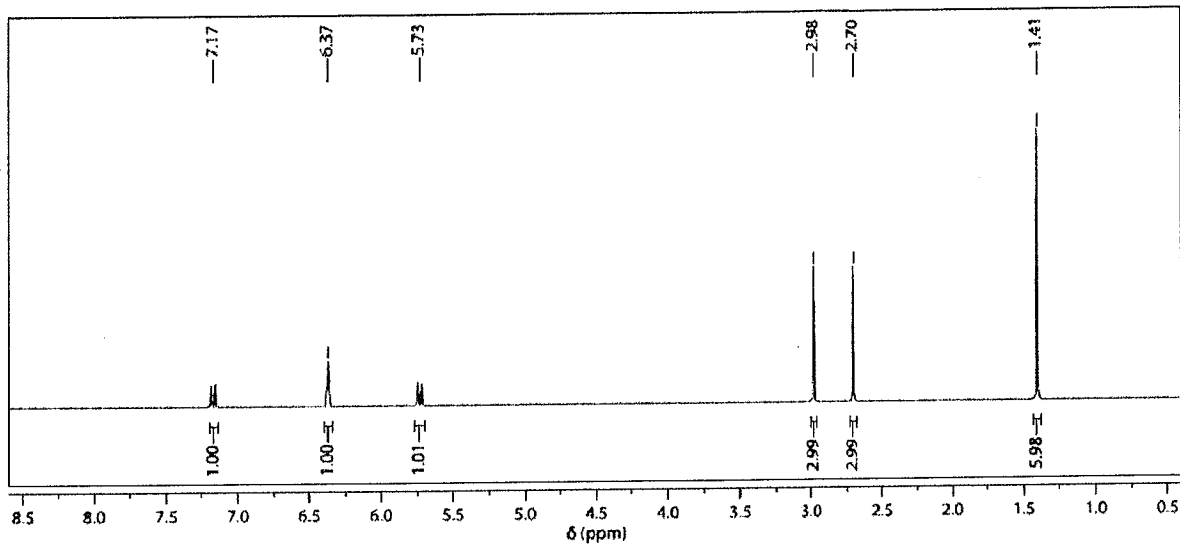
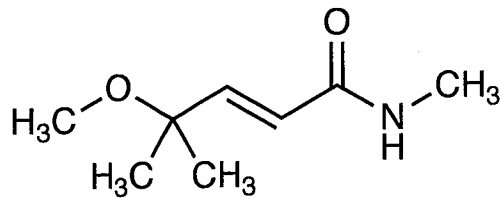
Anion radical Pyrène



10 gauss

- 1) Schématiser le spectre RPE théorique de ce composé (diagramme en nid d'abeille).
- 2) Interpréter le spectre expérimental et calculer les constantes de couplage hyperfin.

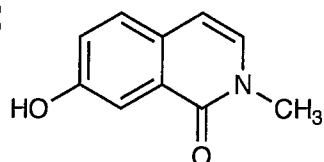
Exercice 4. Analyser les spectres de RMN ^1H et RMN ^{13}C du composé représenté ci-contre. Spectre enregistré dans CDCl_3 (500 MHz pour ^1H et 125 MHz pour ^{13}C). Faire les attributions directement sur les spectres RMN.



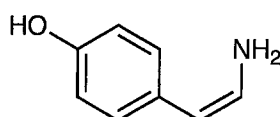
Exercice 5

Les spectres de RMN ^1H (CDCl_3 , 500 MHz) et de RMN ^{13}C (CDCl_3 , 125 MHz) d'un composé organique X sont donnés ci-après. Cinq structures notées A, B, C, D et E vous sont proposées. Identifier, à partir de l'analyse détaillée de ces données de RMN (attribution de tous les sites protons et carbones) la structure exacte du composé X en justifiant votre réponse. Indiquer pour quelle(s) raison(s) les quatre autres structures (non retenues) ne sont pas correctes d'un point de vue des données spectroscopiques (données RMN).

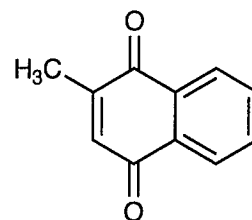
A:



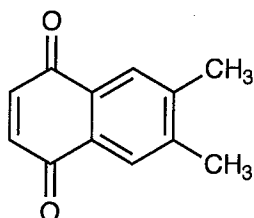
B:



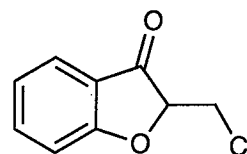
C:

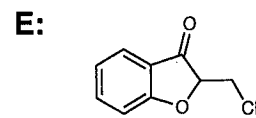
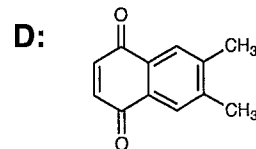
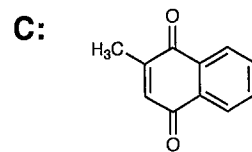
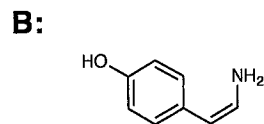
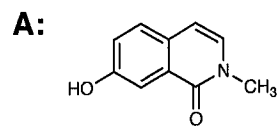
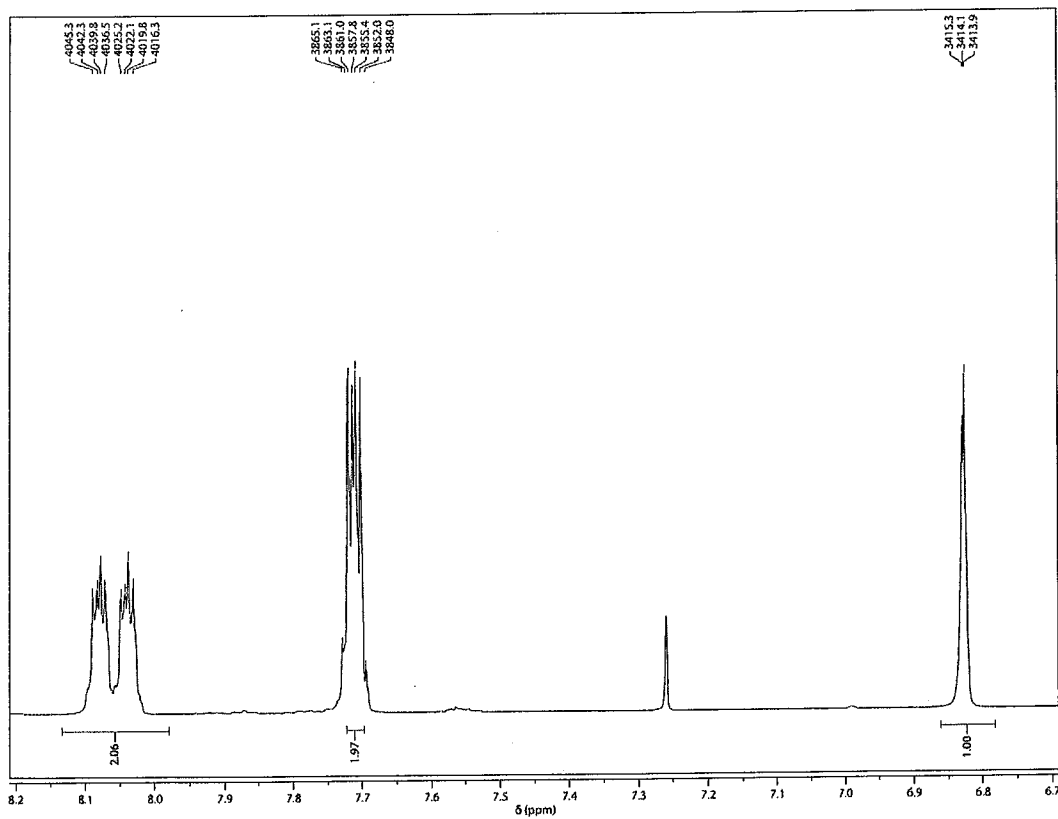
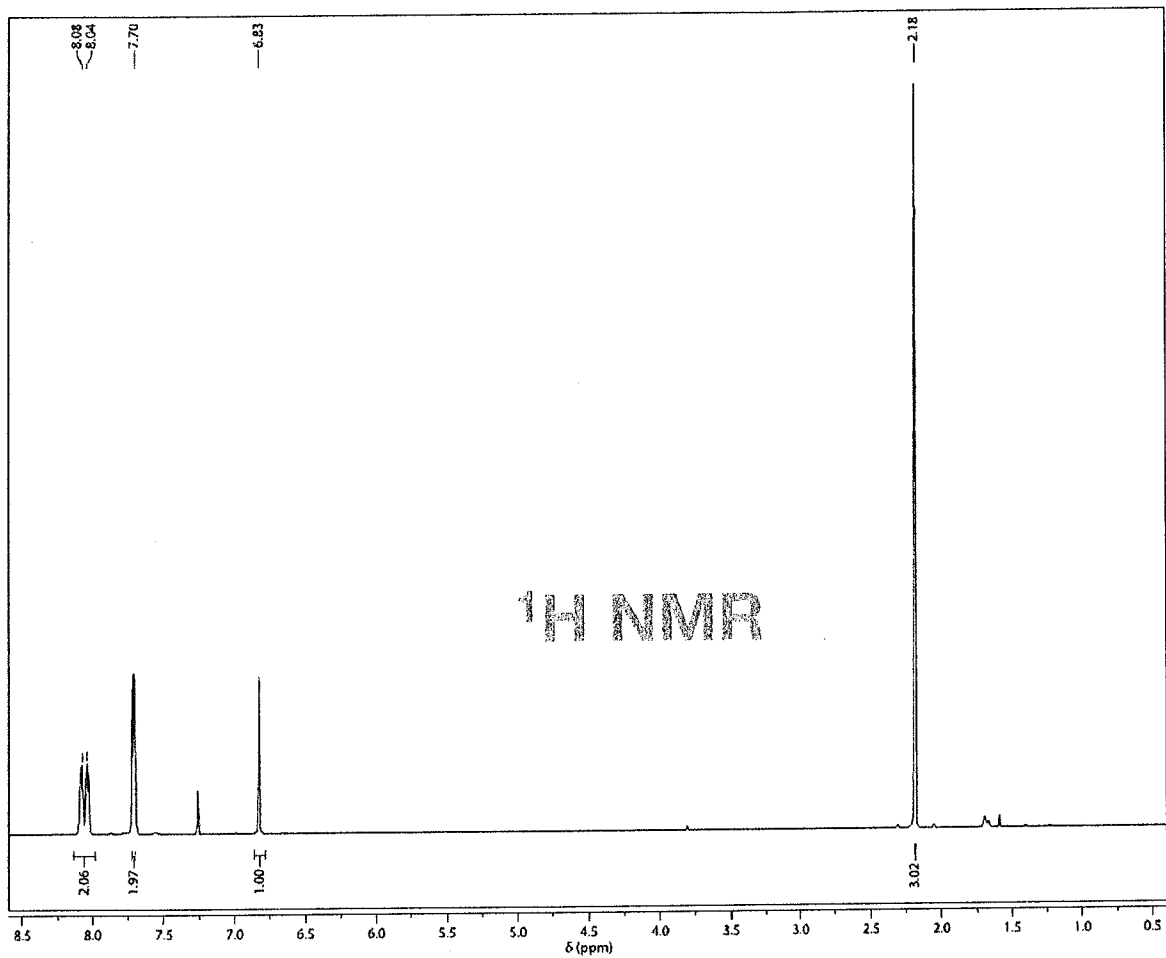


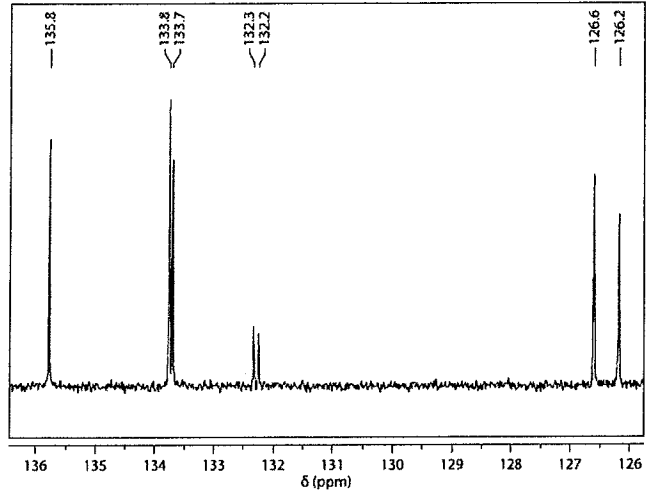
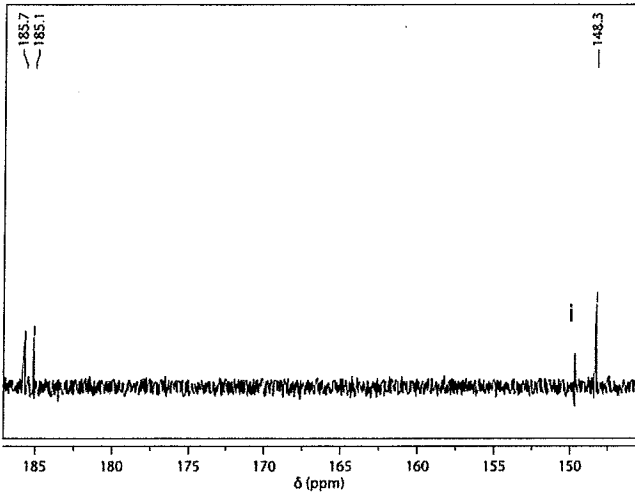
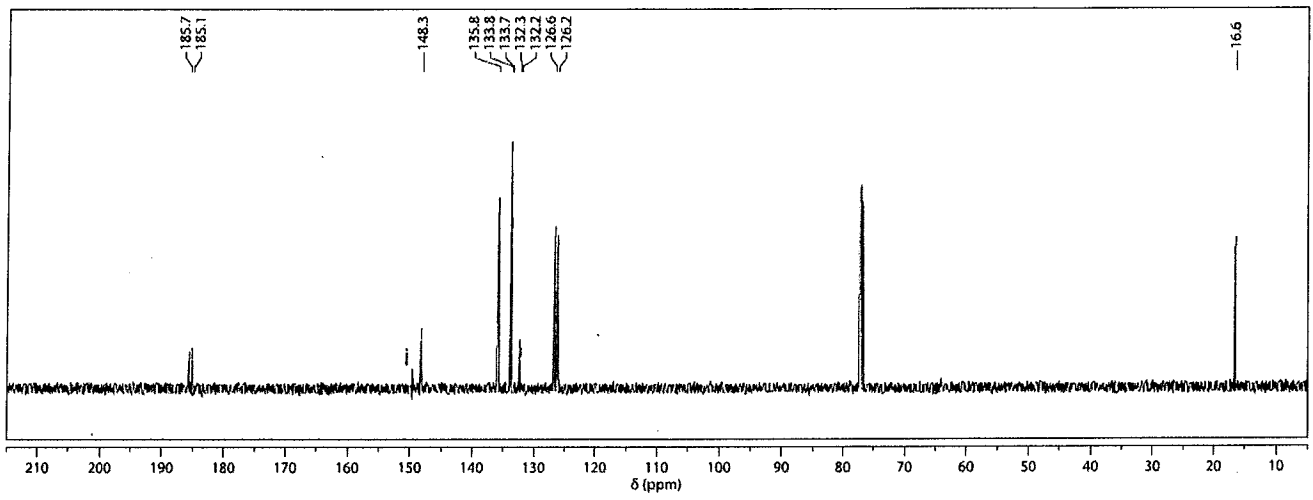
D:



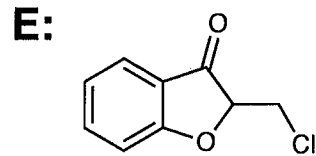
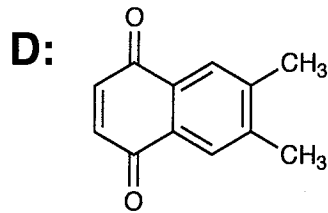
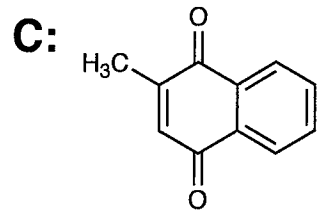
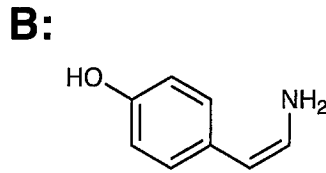
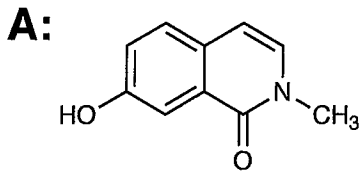
E:







i = impureté



Numéro d'anonymat :

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

