



Travaux dirigés relatifs aux cours

▪ Rappel

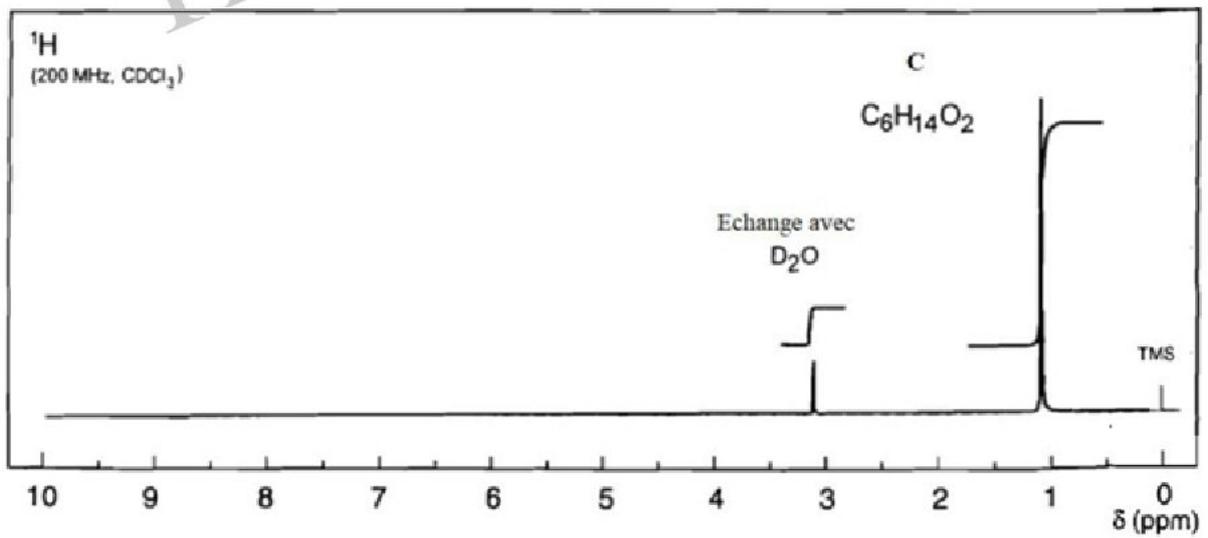
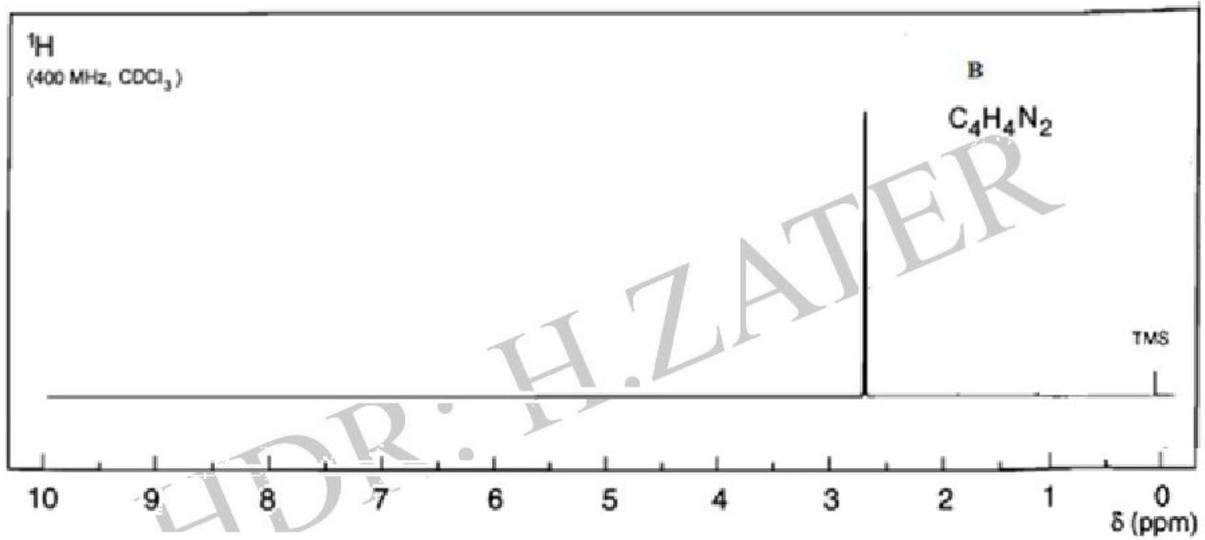
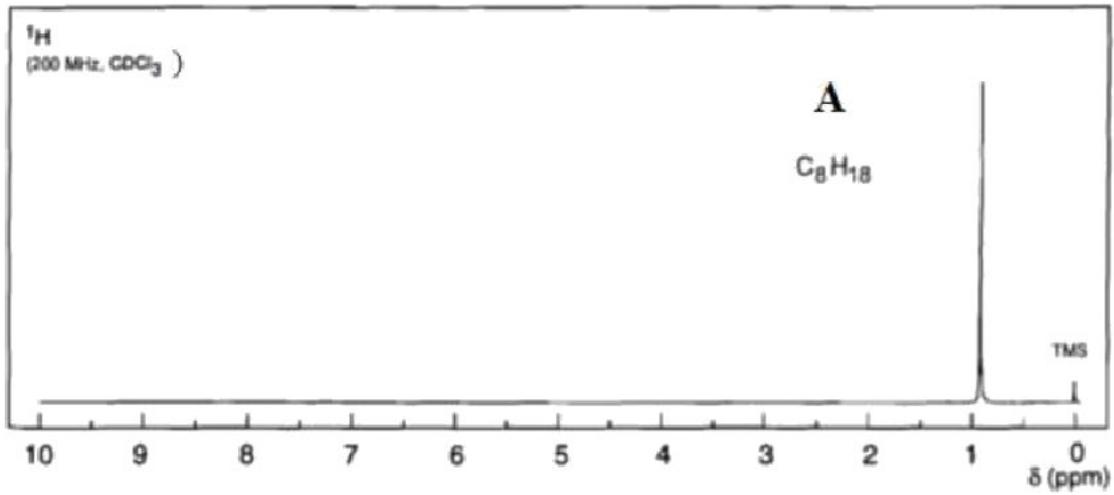
Nombre d'instaurations et de cycles dans une molécule organique ayant comme formule brute :

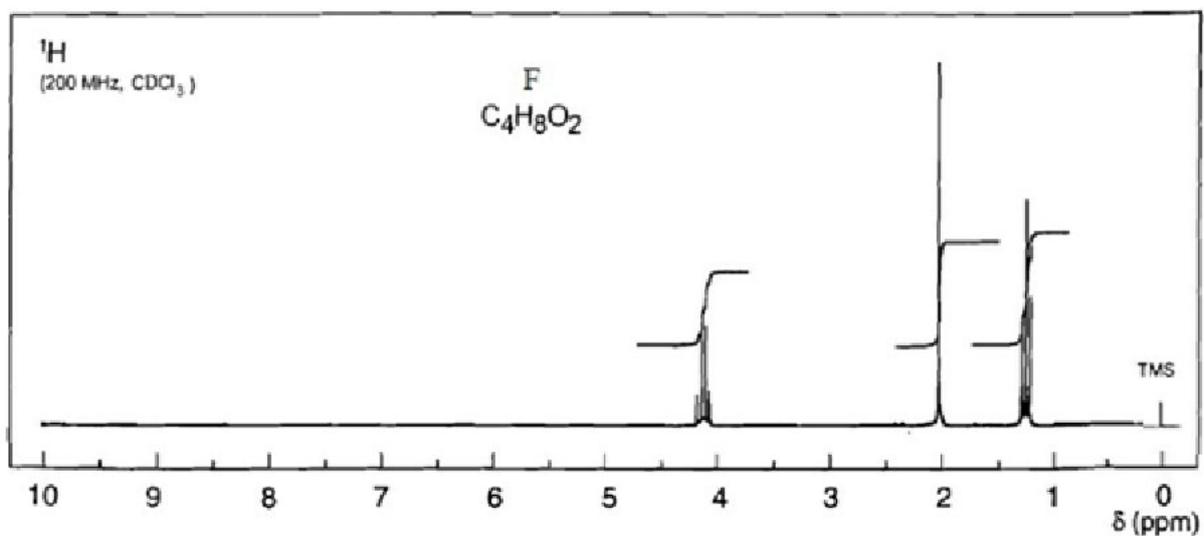
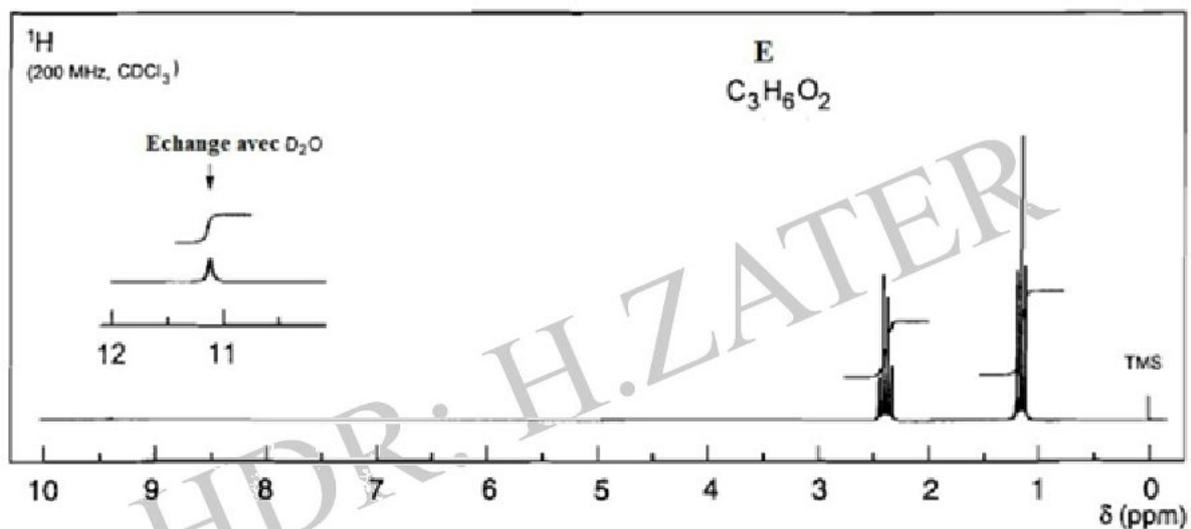
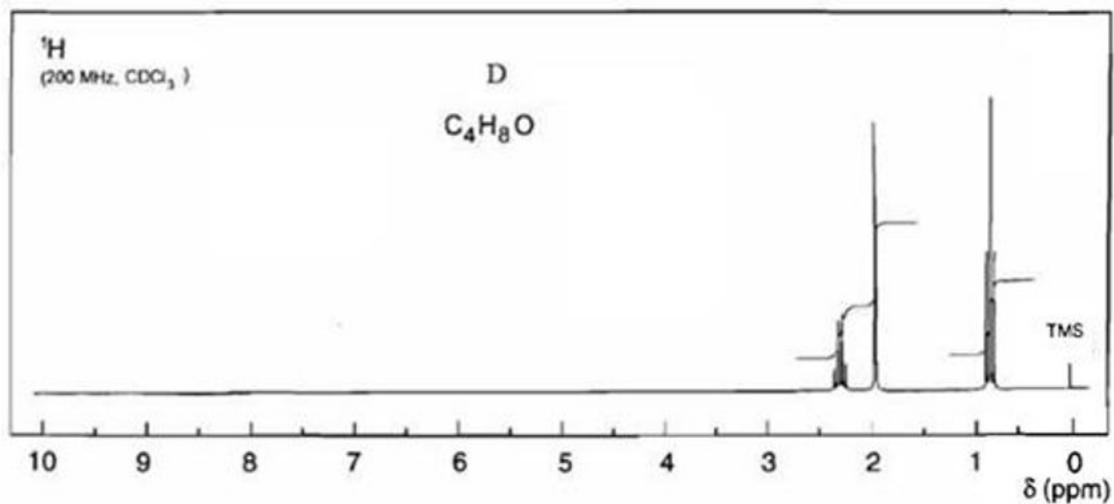
$$C_xH_yO_zN_t : = x - y/2 + t/2 + 1$$

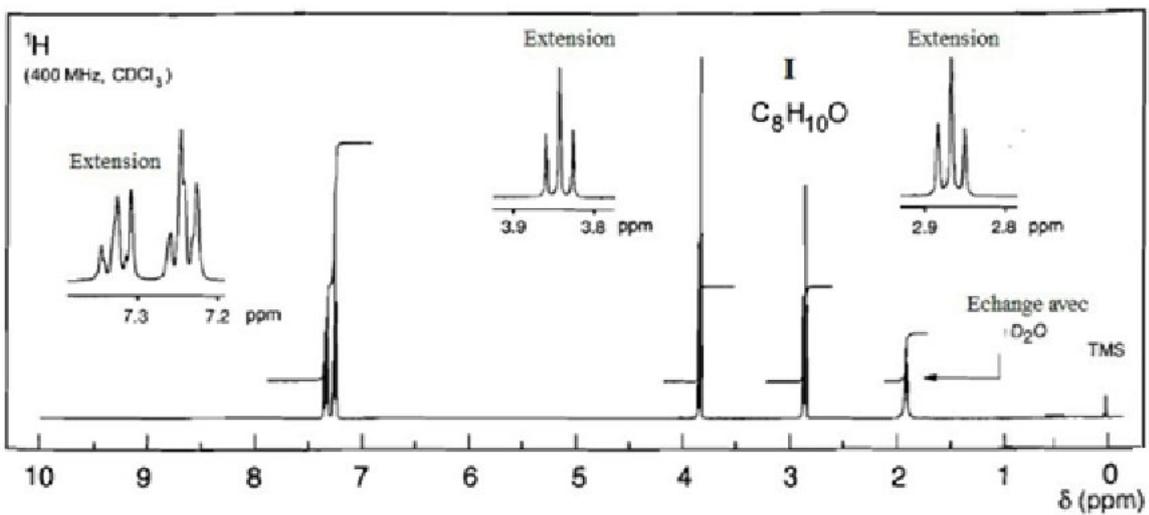
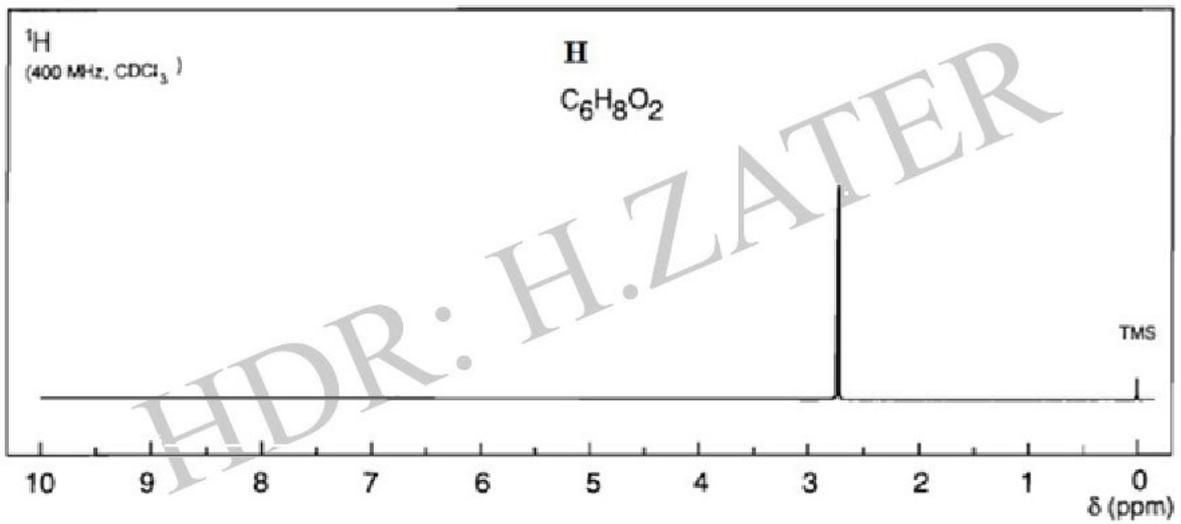
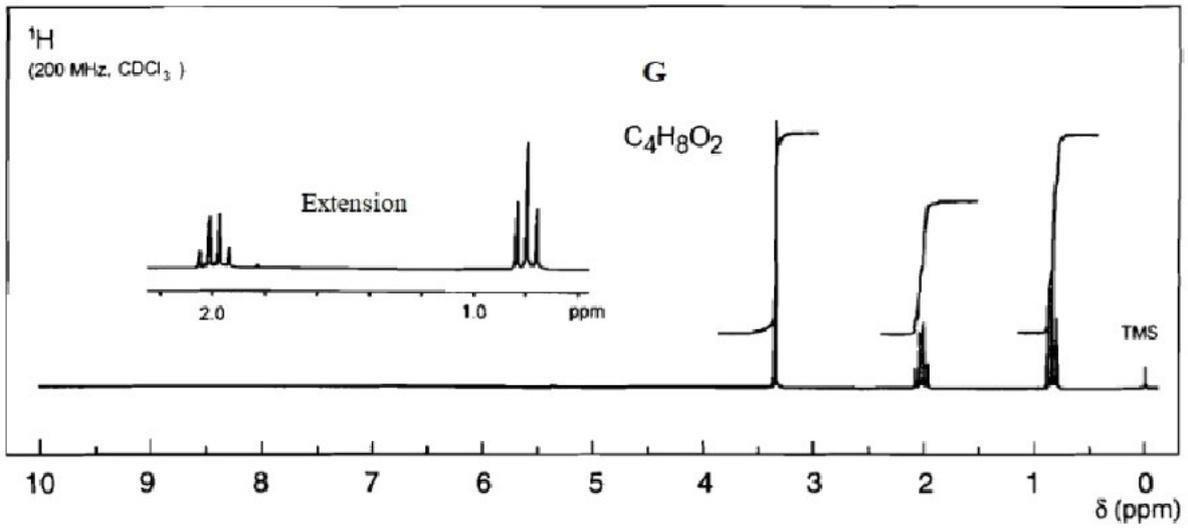
On remarquera :

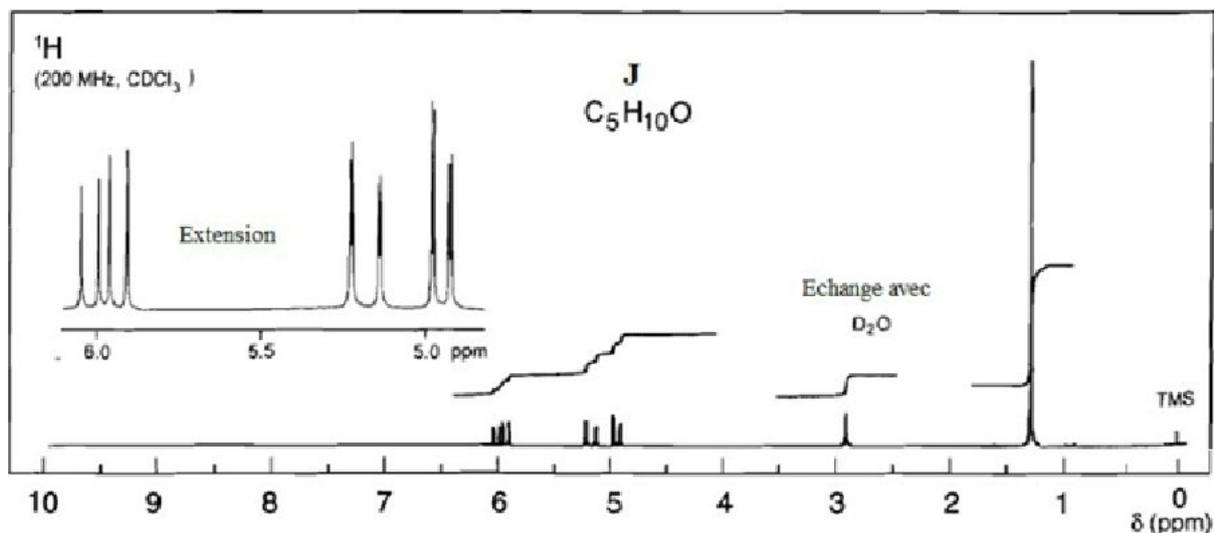
- 1)- que le nombre d'atome d'oxygène O, voire de soufre S, n'intervient pas dans ce calcul
 - 2)- qu'un atome d'halogène F, Cl, Br, I compte comme un atome d'hydrogène
 - 3)- qu'un atome d'azote, voire de phosphore P, compte comme un atome H « en moins ».
-

- I. A quelle intensité de champ magnétique, les protons résonnent-ils a)- à une fréquence de 300 MHz ; b)- à une fréquence de 600 MHz ?
- II. Le spectre RMN ^1H du méthyllithim (CH_3Li) enregistré sur un spectromètre opérant à 250 MHz montre un signal à 525 Hz à droite du signal du TMS. Calculer son déplacement chimique en ppm. Expliquer.
- III. Un composé de formule brute $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$ donne sur son spectre RMN ^1H , un signal unique à 2,05 ppm, proposer une structure à cette molécule. Expliquer.
- IV. Le spectre RMN ^1H du toluène (methylbenzène) enregistré sur un spectromètre opérant à 80 MHz montre deux signaux, le premier d'intégration 5 à 578 Hz et le second d'intégration 3 à 188 Hz. Calculer les déplacements chimiques en ppm de ces noyaux. Quels seraient les déplacements chimiques de ces noyaux si ce spectre avait été enregistré sur un spectromètre opérant à 500 MHz ? Expliquer.
- V. Analyser les spectres RMN ^1H des molécules A à J et écrire leurs structures. Calculer les constantes de couplage relatives aux signaux des molécules G, I et J.









VI.

- Simuler la portion de spectre RMN- ^1H du premier ordre, relative à un système AMX2 connaissant les paramètres suivants avec le TMS comme référence interne : $A = 350 \text{ Hz}$; $M = 240 \text{ Hz}$; $X = 100 \text{ Hz}$; $J_{AM} = 10 \text{ Hz}$; $J_{MX} = 6 \text{ Hz}$ et $J_{AX} = 2 \text{ Hz}$.
- Représenter les diagrammes de couplage, indiquer la multiplicité des trois signaux et calculer les déplacements chimiques en ppm, sachant que les fréquences de résonance données ont été obtenues avec un spectromètre opérant à 60 MHz.