

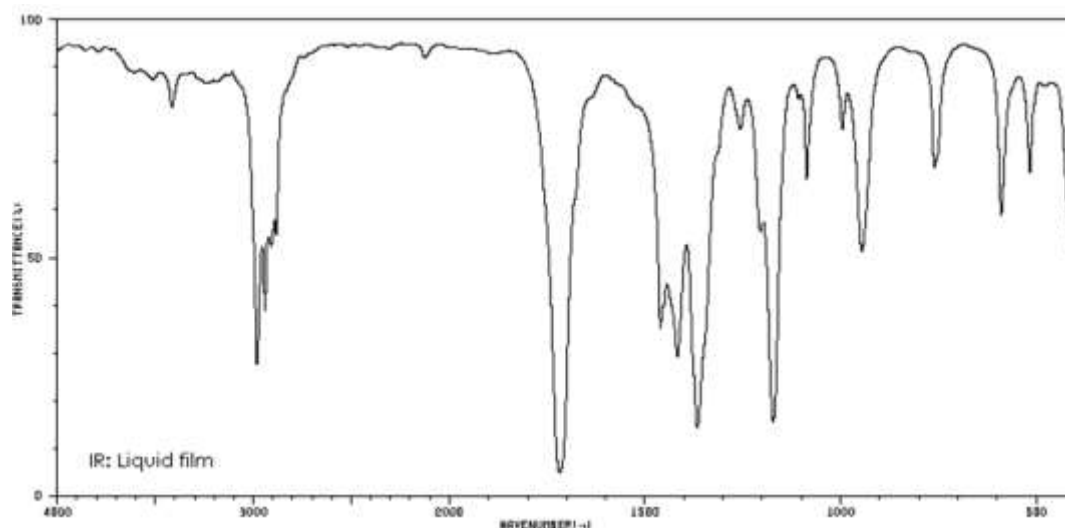
# DS Spectres et stéréoisométrie

## I. Détermination d'une espèce chimique

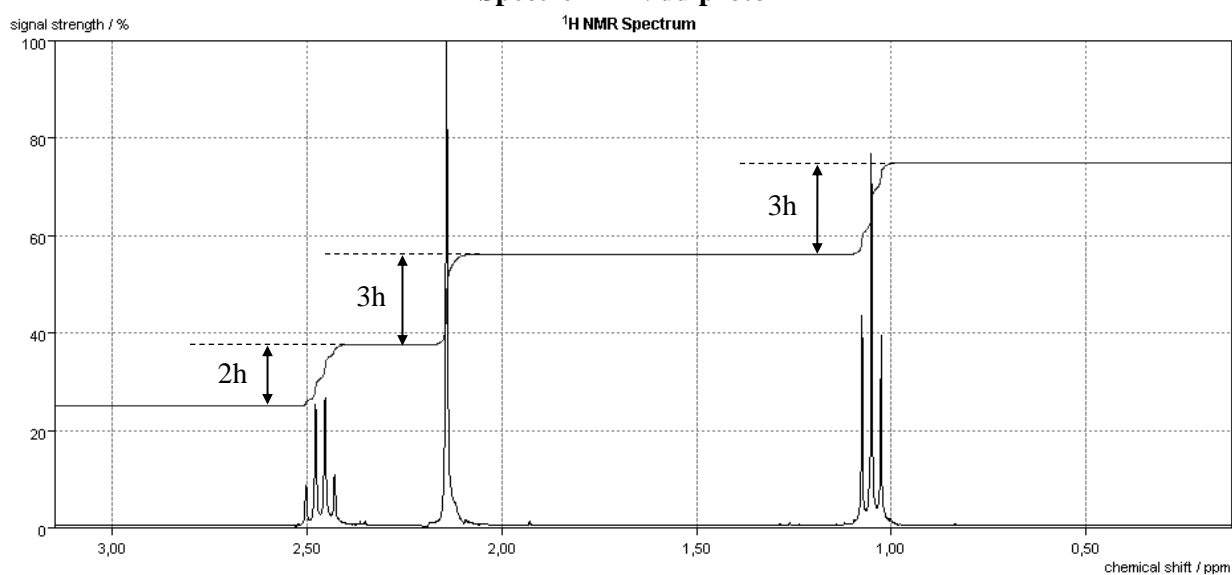
Une analyse centésimale massique a permis d'identifier la formule brute d'un composé chimique :  $C_4H_8O$

Les spectres IR et RMN du proton de ce composé chimique sont donnés ci-dessous :

**Spectre IR du composé en phase condensé**



**Spectre RMN du proton**



On donne par ailleurs le tableau correspondant aux bandes d'absorption IR de quelques types de liaisons chimiques :

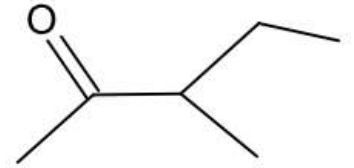
| Type de liaison          | Nombre d'onde $\sigma$ ( $cm^{-1}$ )           | Largeur de bande                | Intensité d'absorption |
|--------------------------|--|---------------------------------|------------------------|
| O – H en phase condensée | 3200 – 3400                                    | Très large                      | Forte                  |
| C – H                    | 2900 – 3100<br>(jusqu'à 2700 pour un aldéhyde) | Variables<br>(bandes multiples) | Moyenne à forte        |
| C = O                    | 1700 – 1720                                    | fine                            | forte                  |
| C = C                    | 1620 – 1650                                    | fine                            | Moyenne                |

1. D'après le spectre IR, identifier la fonction que contient la molécule correspondant au composé.
2. Proposer les formules semi-développées possibles correspondant à la molécule. Donner le nom de chacune des molécules.
3. A partir du spectre RMN, identifier la molécule. Justifier votre choix (1 seule justification attendue).

4. Préciser à quels protons de la molécule correspond chaque signal du spectre RMN. Justifier en utilisant la courbe d'intégration et la multiplicité des signaux.

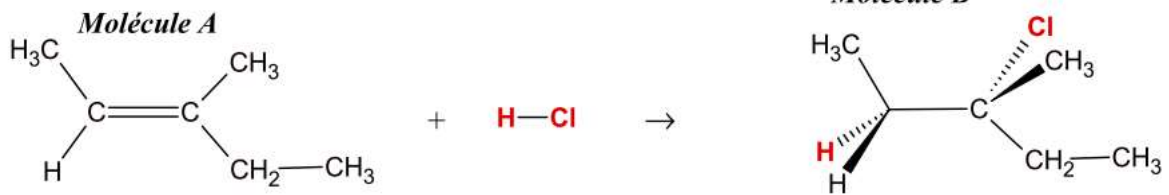
## II. Chiralité

- 1) Comment se nomme la représentation utilisée ci-contre ?
- 2) Donner le nom de cette molécule.
- 3) Donner la formule brute de cette molécule.
- 4) Recopier cette formule et indiquer par un astérisque le carbone asymétrique.
- 5) Représenter à l'aide du modèle de Cram les deux énantiomères possibles.
- 6) Comment se nomme un mélange contenant ces deux énantiomères en quantités égales ?



## III. Isoméries

- On considère la réaction suivante :



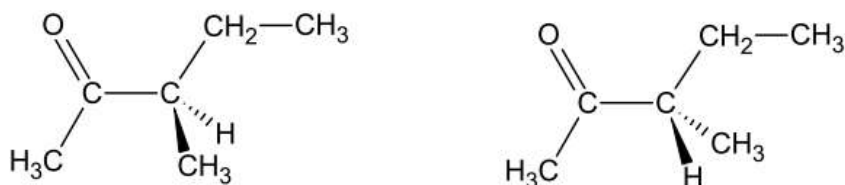
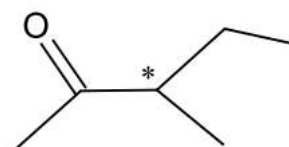
- 1) De quel type de réaction s'agit-il ?
- 2) Nommer la molécule A.
- 3) La stéréoisomérisie de la molécule A est-elle une stéréoisomérisie de conformation ou de configuration ? Justifier.
- 4) Les deux stéréoisomères possibles de la molécule A sont-ils des diastéréoisomères ou des énantiomères ? Justifier.
- 5) Les deux stéréoisomères de configuration de la molécule B sont-ils des diastéréoisomères ou des énantiomères ? Justifier.

# Correction

| EXERCICE I                     |   |   |  |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
|--------------------------------|---|---|--|--------------|----------------|-----|---------------------------|---|--|-----|---------------------------|---|--|-----|---------------------------|--|--|-----------------------|
| 1.                             | Le composé contient une fonction carbonyle C = O caractérisée par une bande fine et forte pour $1700\text{cm}^{-1} < \sigma < 1720\text{cm}^{-1}$   | **  |  |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
| 2.                             | Formules semi-développées possibles :<br><div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center; margin-top: 10px;"> <div style="text-align: center;"> <math>\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}</math><br/>Butanal         </div> <div style="text-align: center;"> <math>\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{CH}_3}{\underset{ }{\text{CH}}}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}</math><br/>2-méthylpropanal         </div> <div style="text-align: center;"> <math>\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{CH}_3</math><br/>butanone         </div> </div>  | *<br>*<br>*                               |  |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
| 3.                             | D'après le spectre RMN il y a 3 signaux donc 3 groupes de protons équivalents on peut éliminer les deux aldéhydes qui comptent 4 groupes de protons équivalents.  | **  |  |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
| 4.                             | Intégration : une hauteur de 8h correspond à 8 protons. 1h correspond donc 1H   |   |  |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
|                                | <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Déplacement <math>\delta</math> du signal</th> <th>Intégration</th> <th>Multiplécité</th> <th>Interprétation</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center;">2,8</td> <td style="text-align: center;"><del>2h<br/>soit 2H</del></td> <td style="text-align: center;"><del>Quadruplet<br/>=&gt; 3 voisins</del></td> <td style="text-align: center;"><del>2H à 3 voisins<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del></td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">2,3</td> <td style="text-align: center;"><del>3h<br/>soit 3H</del></td> <td style="text-align: center;"><del>Singulet =&gt; sans<br/>voisin</del></td> <td style="text-align: center;"><del>3H sans voisin<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del></td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">1,2</td> <td style="text-align: center;"><del>3h<br/>soit 3H</del></td> <td style="text-align: center;"><del>Triplet<br/>=&gt; 2 voisins</del></td> <td style="text-align: center;"><del>3H à 2 voisins<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del></td> </tr> </tbody> </table> | Déplacement $\delta$ du signal            | Intégration  | Multiplécité | Interprétation | 2,8 | <del>2h<br/>soit 2H</del> | <del>Quadruplet<br/>=&gt; 3 voisins</del> | <del>2H à 3 voisins<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del> | 2,3 | <del>3h<br/>soit 3H</del> | <del>Singulet =&gt; sans<br/>voisin</del> | <del>3H sans voisin<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del> | 1,2 | <del>3h<br/>soit 3H</del> | <del>Triplet<br/>=&gt; 2 voisins</del> | <del>3H à 2 voisins<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del> | *<br>*<br>*<br>*<br>* |
| Déplacement $\delta$ du signal | Intégration   | Multiplécité                              | Interprétation   |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
| 2,8                            | <del>2h<br/>soit 2H</del>   | <del>Quadruplet<br/>=&gt; 3 voisins</del> | <del>2H à 3 voisins<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del> |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
| 2,3                            | <del>3h<br/>soit 3H</del>   | <del>Singulet =&gt; sans<br/>voisin</del> | <del>3H sans voisin<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del> |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |
| 1,2                            | <del>3h<br/>soit 3H</del>   | <del>Triplet<br/>=&gt; 2 voisins</del>    | <del>3H à 2 voisins<br/><math>\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_3</math></del> |              |                |     |                           |   |  |     |                           |   |  |     |                           |  |  |                       |

## II. Chiralité

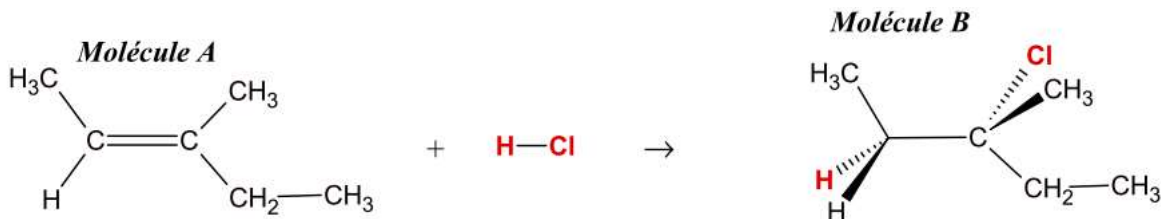
- 6) La représentation utilisée ci-contre est une formule topologique.
- 7) Le nom de cette molécule, une cétone, est 3-méthylpentan-2-one.
- 8) La formule brute de cette molécule est  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}$ .
- 9) Formule et indication par un astérisque du carbone asymétrique.
- 10) A l'aide du modèle de Cram les deux énantiomères possibles sont :



- 11) Un mélange contenant ces deux énantiomères en quantités égales est dit racémique.

## III. Isoméries

- 12) Cette réaction est une addition. La molécule  $\text{HCl}$  vient se fixer sur la double liaison de l'alcène.



- 13) La molécule A est de la (E)-3-méthylpent-2-ène
- 14) La stéréoisomérisie de la molécule A est une stéréoisomérisie de configuration. Une stéréoisomérisie de conformation nécessite une libre rotation autour d'une liaison simple. Or ici la stéréoisomérisie est due à une double liaison.
- 15) Les deux stéréoisomères possibles de la molécule A sont des diastéréoisomères. Or, comme ils ne sont pas l'image l'un de l'autre dans un miroir, ce sont des diastéréoisomères.

16) Les deux stéréoisomères de configuration de la molécule B sont des énantiomères. La molécule B présente un seul atome de carbone asymétrique. Ainsi, les deux stéréoisomères de configuration possible sont des énantiomères, car image l'un de l'autre dans un miroir.