

# Examen d'analyse structurale

21 janvier 2014

**«position»**  
**«local»**  
**«Nom»**

**Question 1 : (25%)**

**Question 2 : (25%)**

**Question 3 : (25%)**

**Question 4 : (25%)**

**Note examen :**

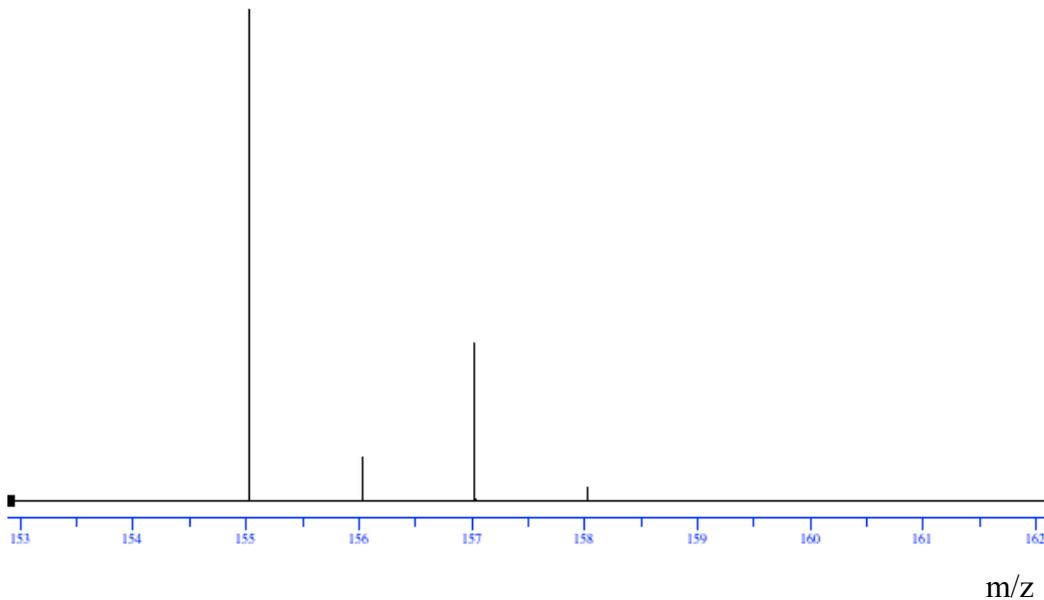
Signature

## Question 1

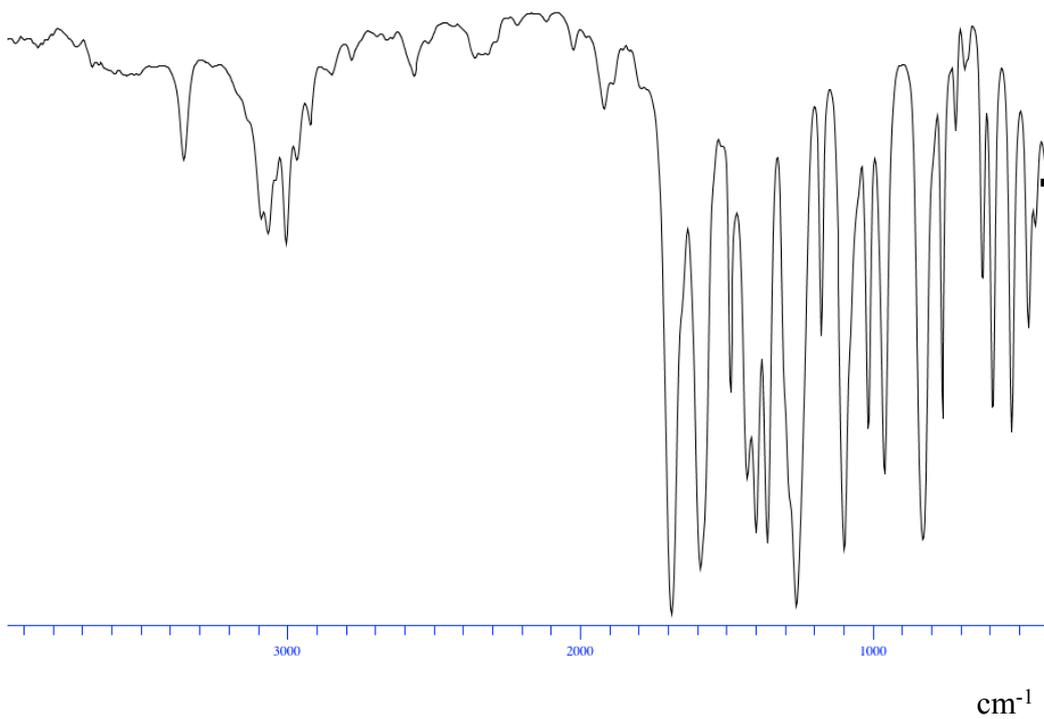
Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu, respectant la formule brute:  $C_{3-10}H_{0-20}N_{0-2}O_{0-3}Cl_{0-1}$  avec les informations suivantes:

### Spectre de masse

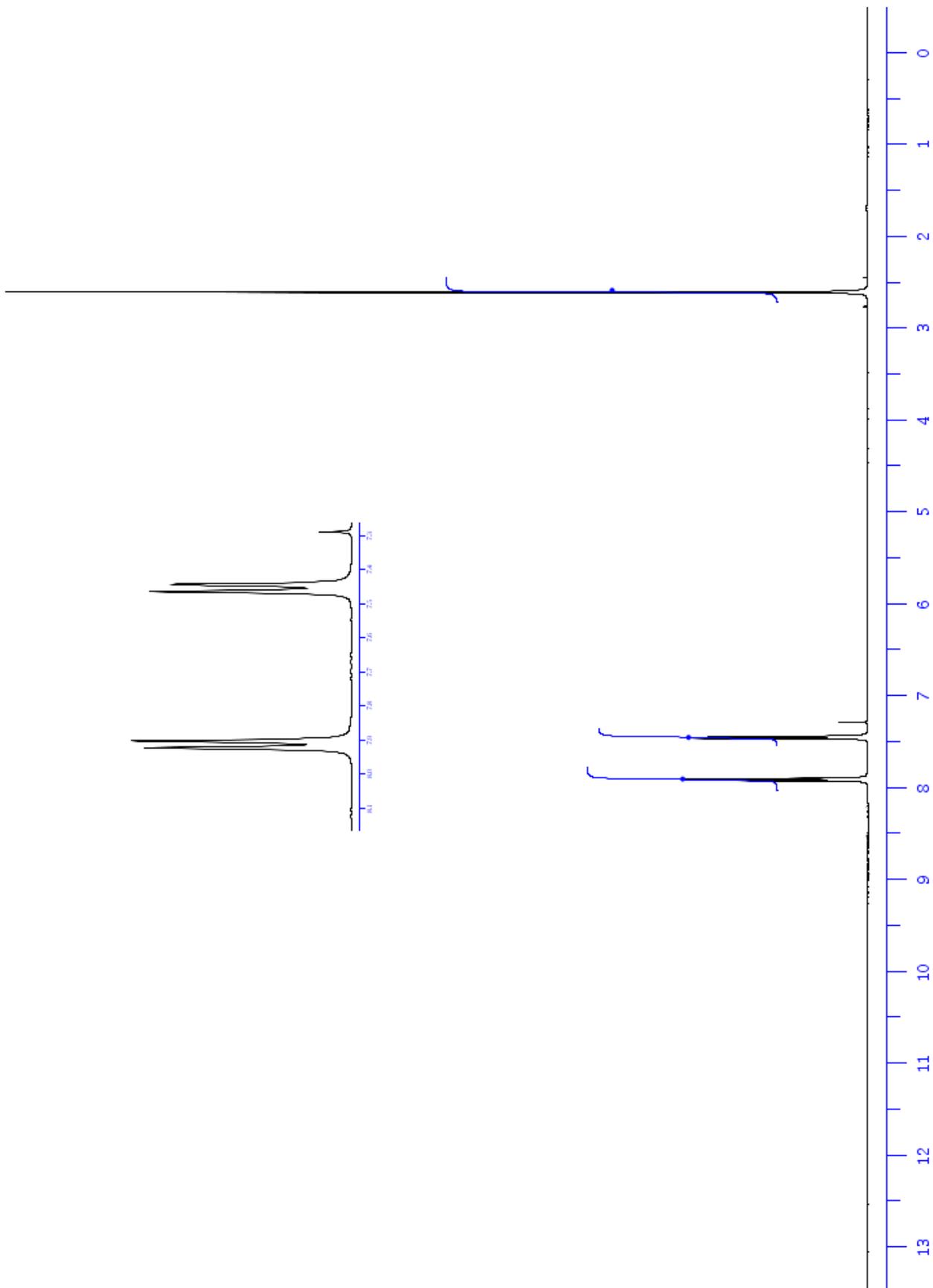
Le spectre de masse (ionisation par électrospray (ESI)) du produit inconnu donne un pic monoisotopique correspondant à la molécule simplement protonée en 155.029 u.m.a. (Dalton). L'erreur sur la mesure est de 50 ppm.



### Specctre IR



«Nom»  
Spectre RMN  $^1\text{H}$  400 MHz ( $\text{CDCl}_3$ )



## Question 2

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu, respectant la formule brute:  $C_{3-10}H_{0-20}N_{0-2}O_{0-3}Cl_{0-1}$  avec les informations suivantes:

### Spectre de masse

Le spectre de masse électrospray (ESI) possède la distribution isotopique donnée ci-après. La molécule observée est une fois protonée. Bien que la résolution du spectromètre soit très élevée, la précision n'est que de l'ordre de 1500 ppm.

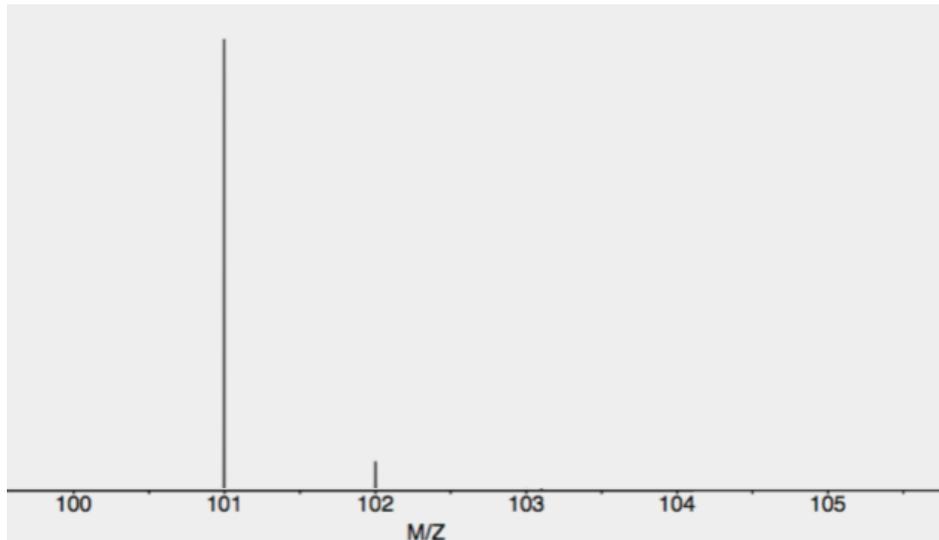


Figure: Spectre de masse ESI en mode positif

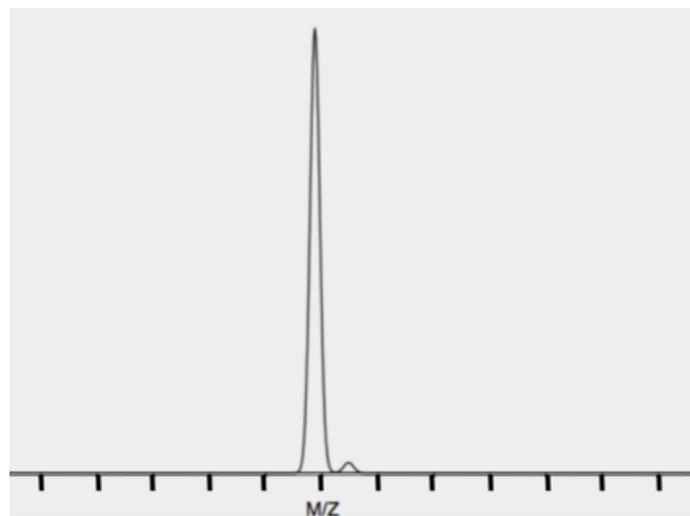
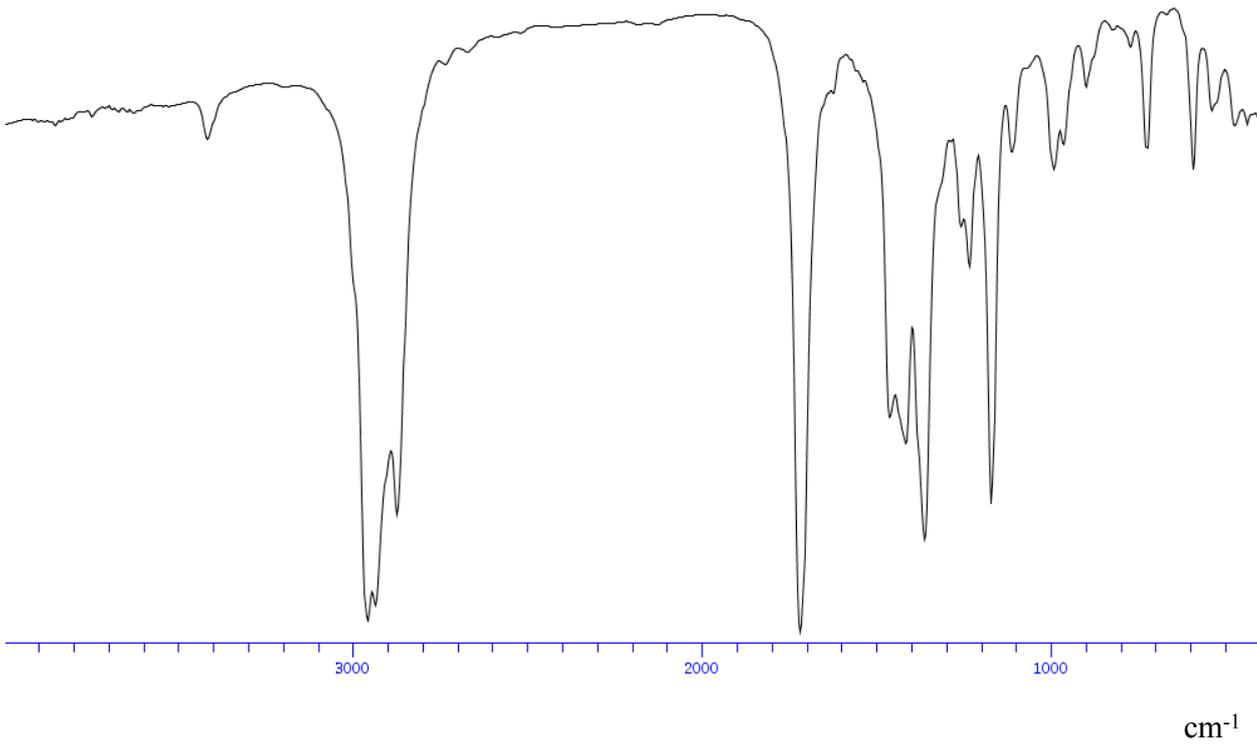
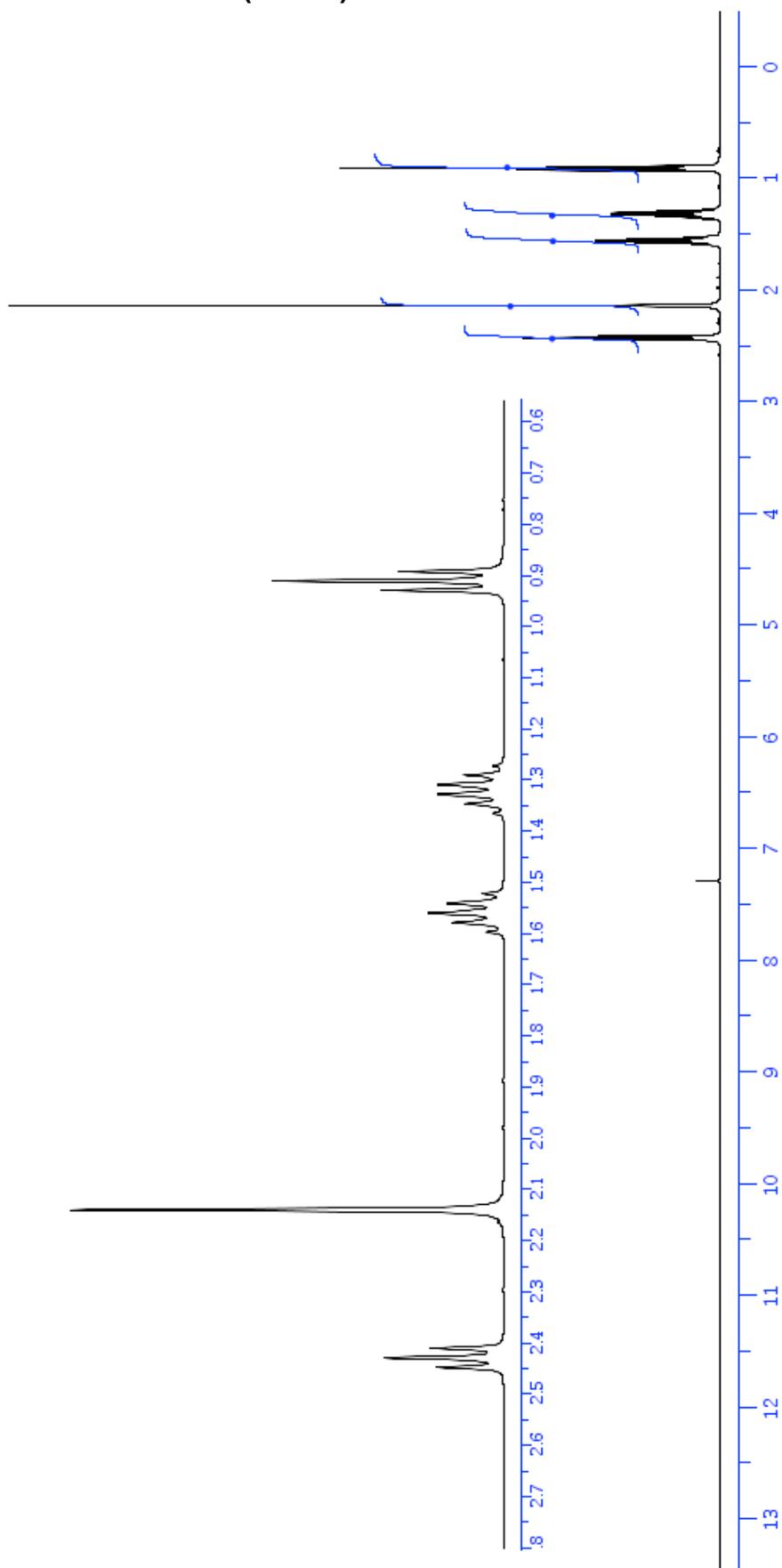


Figure: Agrandissement du spectre de masse aux alentours de 102 Da.  
La fenêtre affichée est de 0.06 Da, une graduation tous les 0.005 Da

«Nom»  
Spectre IR :



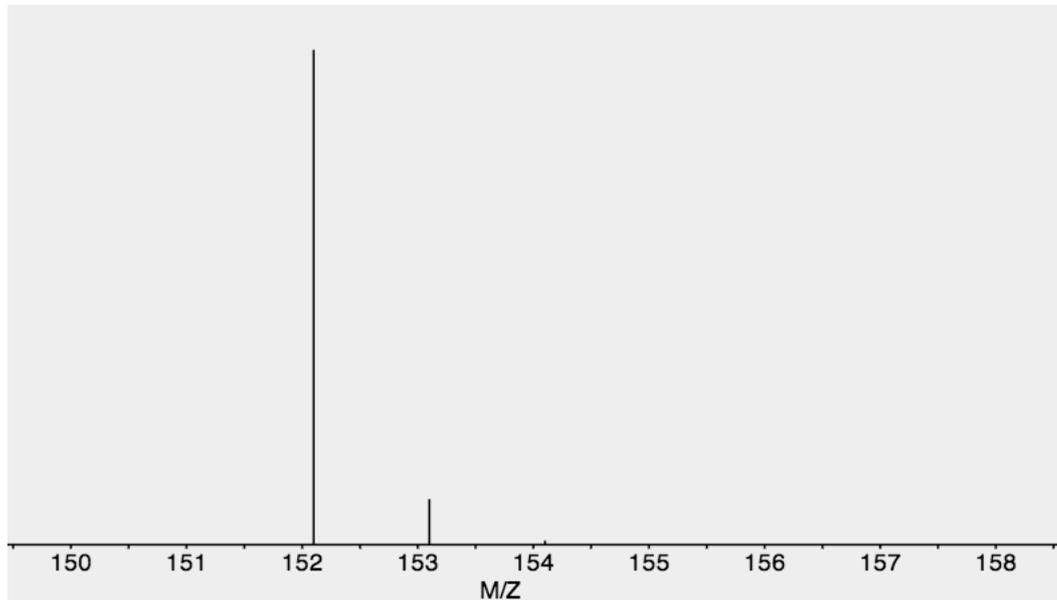
«Nom»  
Spectre RMN  $^1\text{H}$  400 MHz ( $\text{CDCl}_3$ )



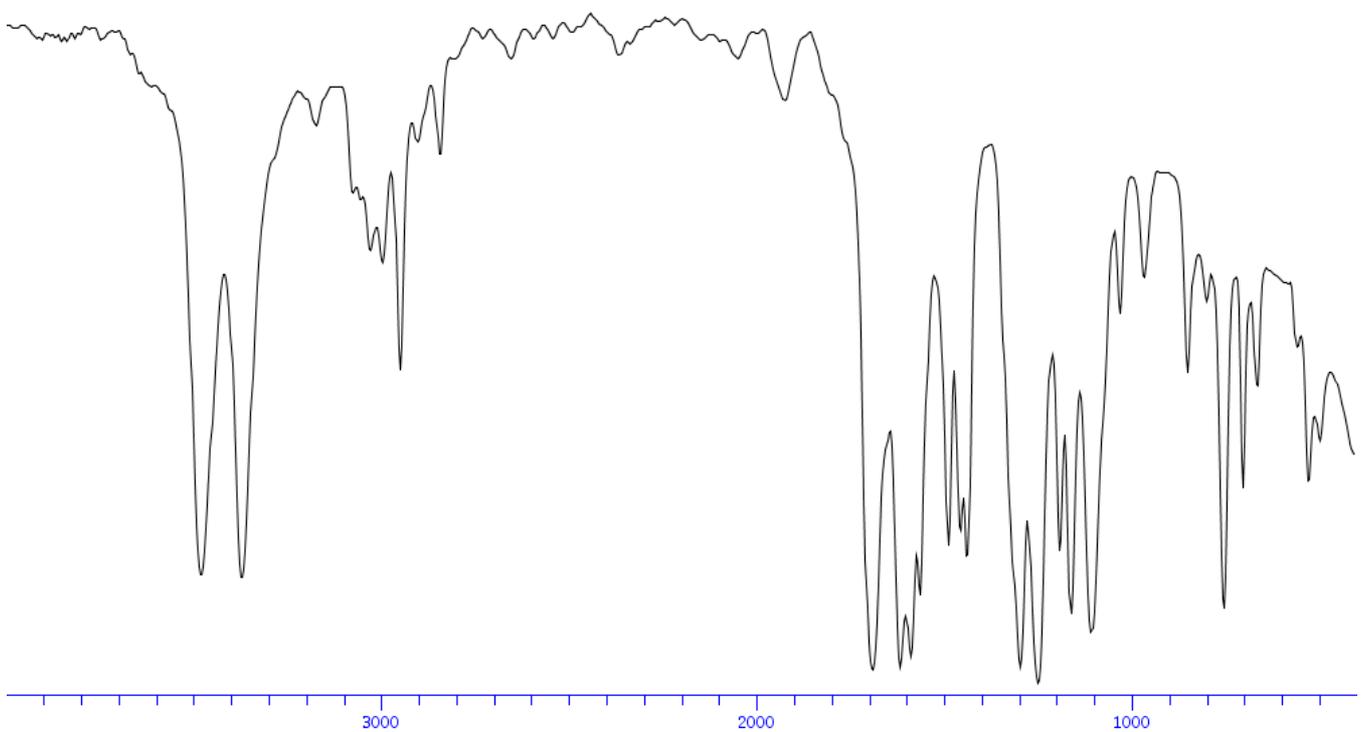
### Question 3

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu, respectant la formule brute:  $C_{3-10}H_{0-20}N_{0-2}O_{0-3}Cl_{0-1}$ , ayant comme masse monoisotopique expérimentale de la molécule une fois protonée de 152.061 Da (u.m.a.) avec une précision de 100 ppm et possédant les spectres caractéristiques suivants :

#### Spectre de masse (ionisation chimique, $M + H^+$ ) :



#### Spectre IR :

 $cm^{-1}$

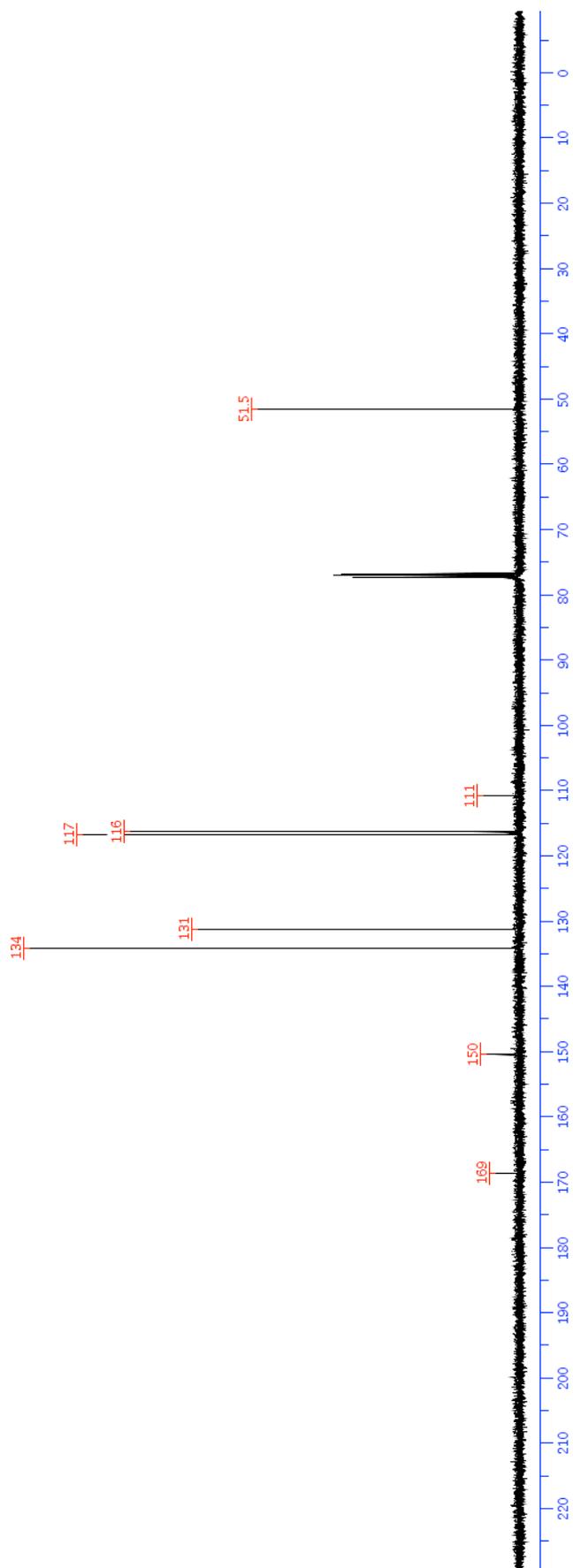
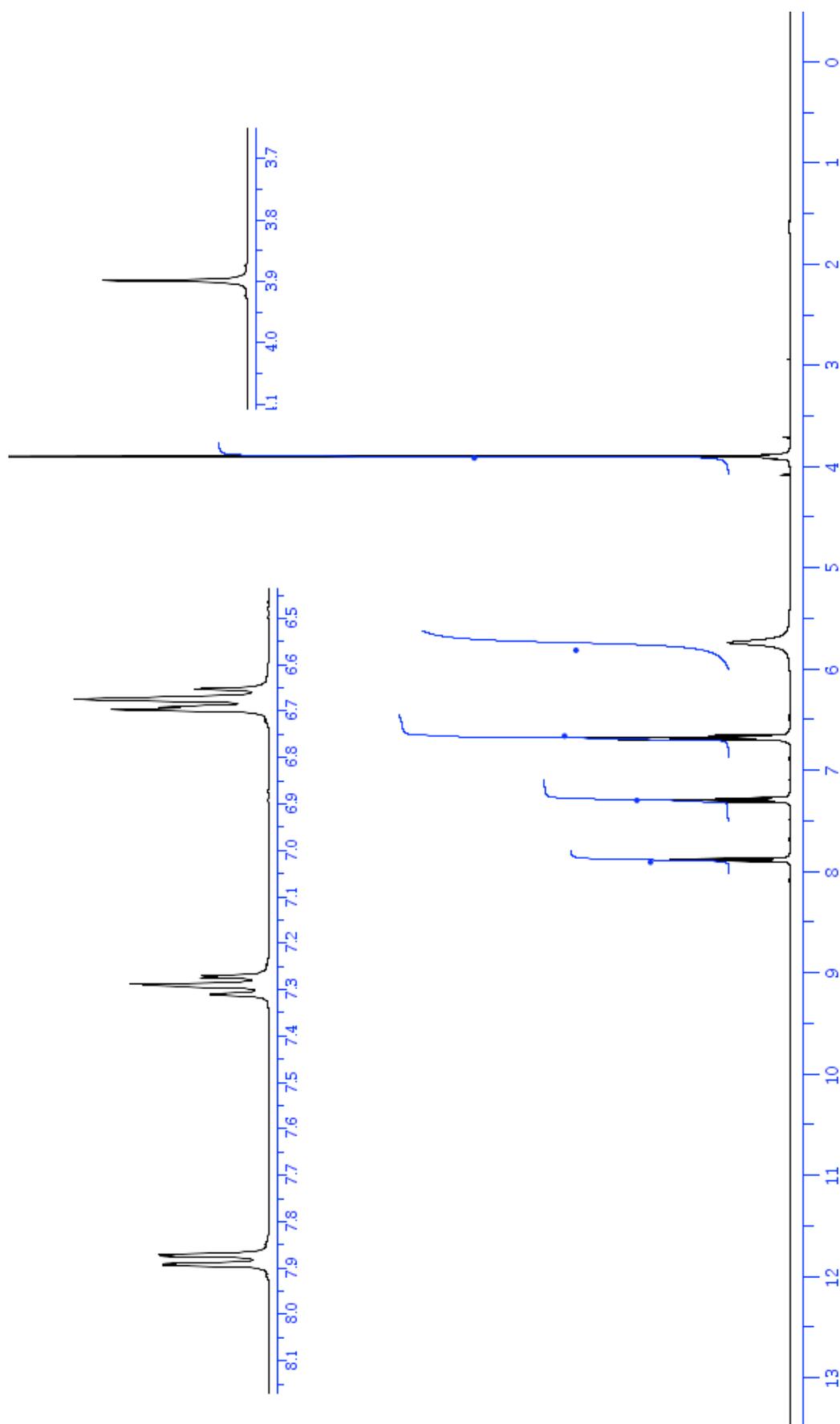


Figure: Spectre RMN  $^{13}\text{C}$  découplé. Les signaux relatifs au produit inconnu possèdent une étiquette avec le déplacement chimique.

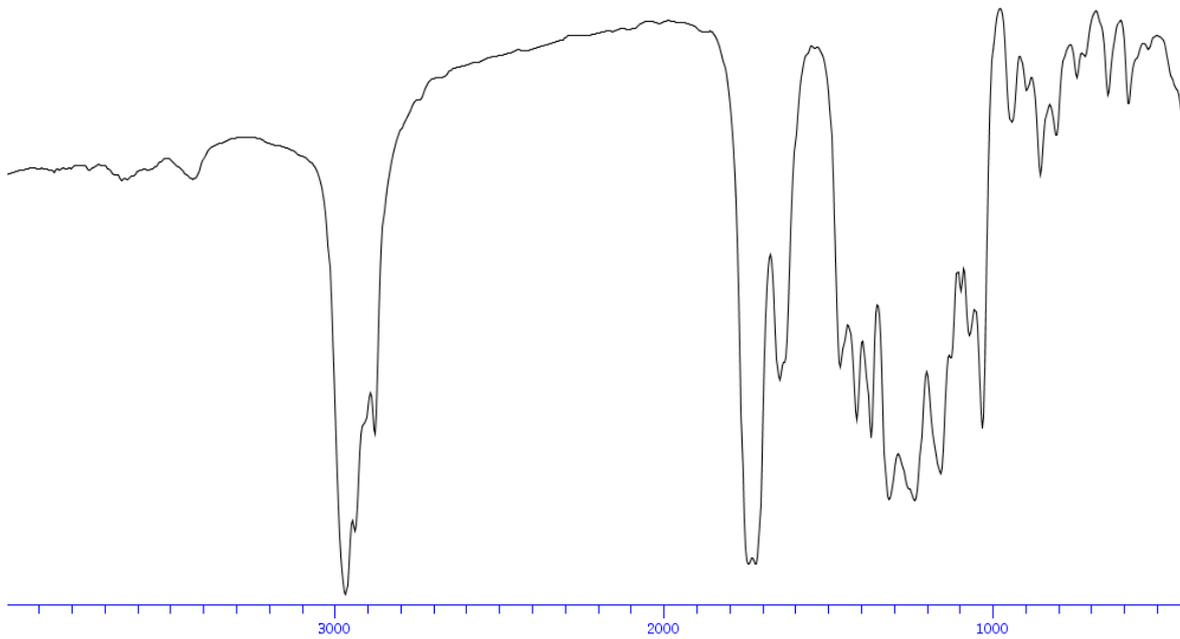
«Nom»  
Spectre RMN <sup>1</sup>H 400 MHz



## Question 4

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu qui a comme formule brute  $C_8H_{14}O_3$  et possédant les spectres caractéristiques suivants :

### Spectre infra-rouge:



### RMN $^{13}C$ découplé à 100 MHz ( $CDCl_3$ ).

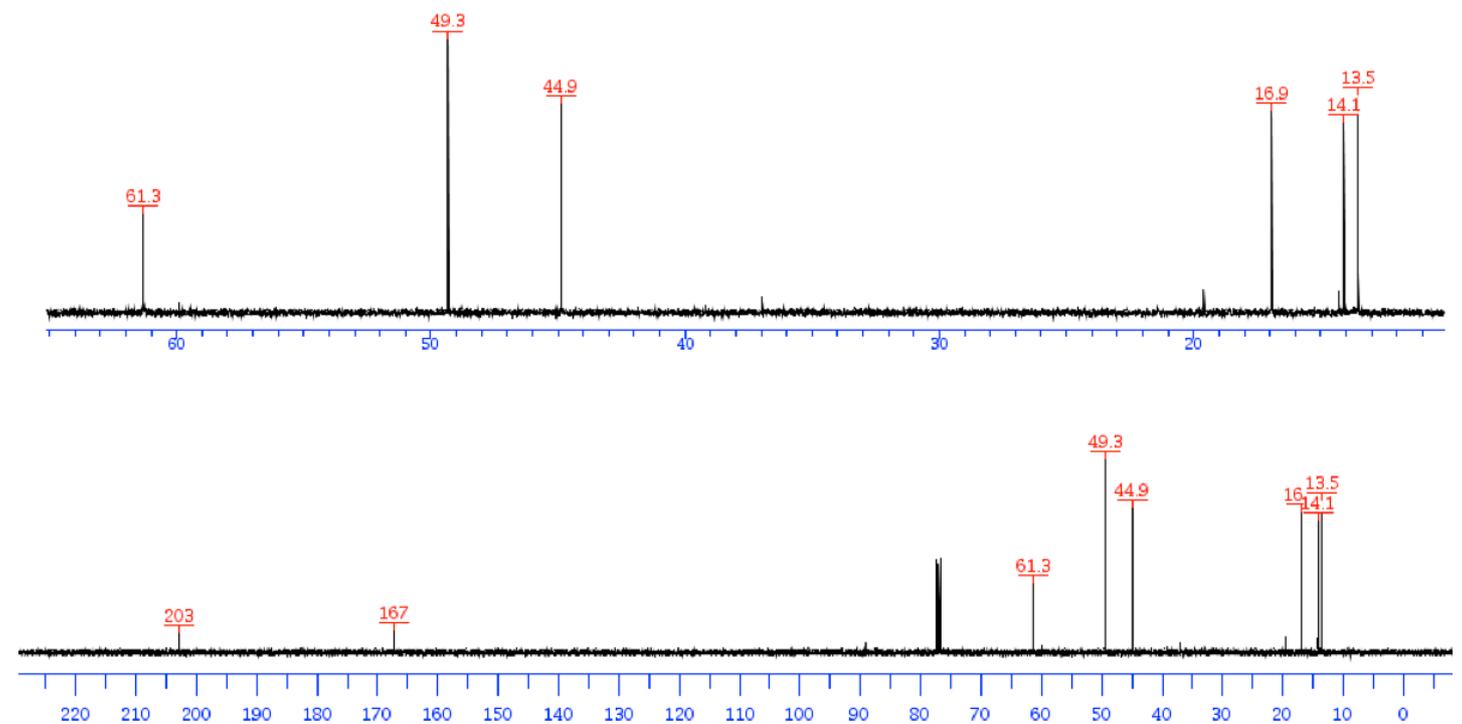


Figure: Spectre RMN  $^{13}C$  découplé. Les signaux relatifs au produit inconnu possèdent une étiquette avec le déplacement chimique. Au-dessus, agrandissement de la zone 0 à 65 ppm.

**Spectre RMN  $^1\text{H}$  400 MHz ( $\text{CDCl}_3$ ).** Les intégrations des signaux en 1.6, 2.5, 3.5 et 4.2 sont identiques

