

Question 1

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu, dont la formule brute se trouve dans le formulaire annexé et possédant les spectres caractéristiques suivants :

Spectre de masse

Le spectre de masse (ionisation par électrospray (ESI)) du produit inconnu donne un pic monoisotopique correspondant à la molécule simplement protonée à 137.0428 Da avec une précision de 100 ppm.

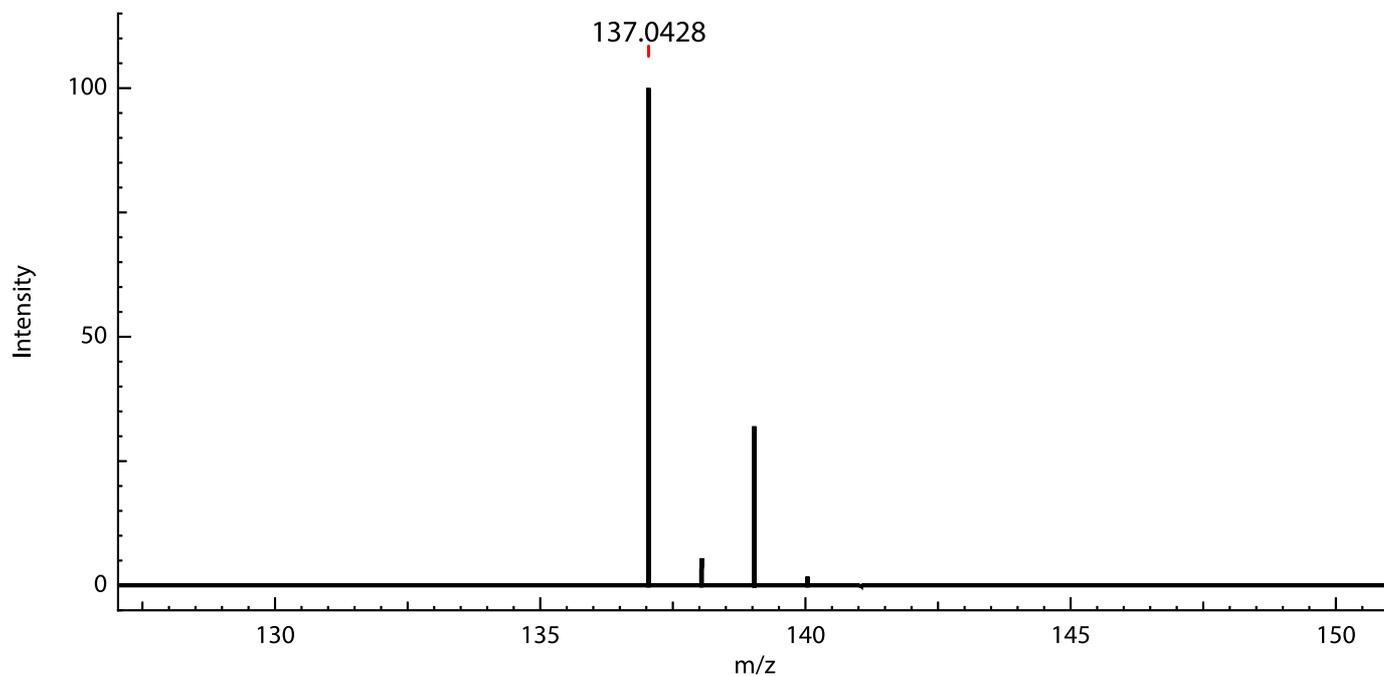


Figure: Spectre de masse (ESI) à haute résolution

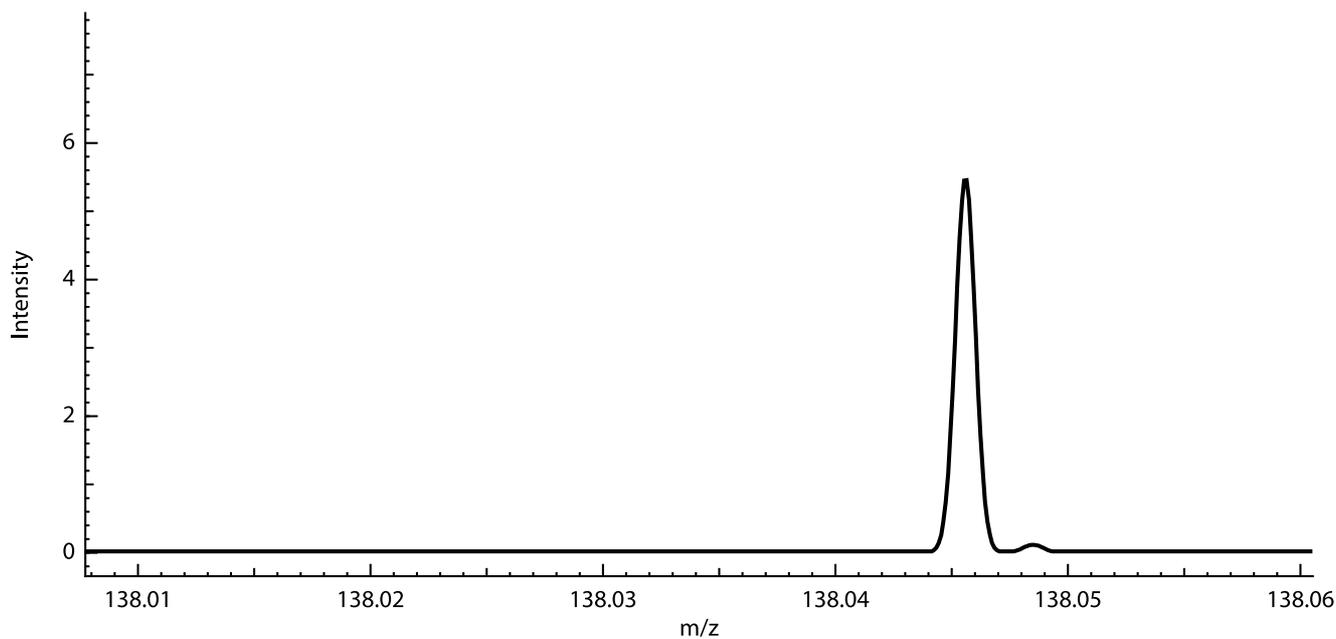


Figure: Spectre de masse (ESI) à haute résolution, agrandissement

Spectre IR

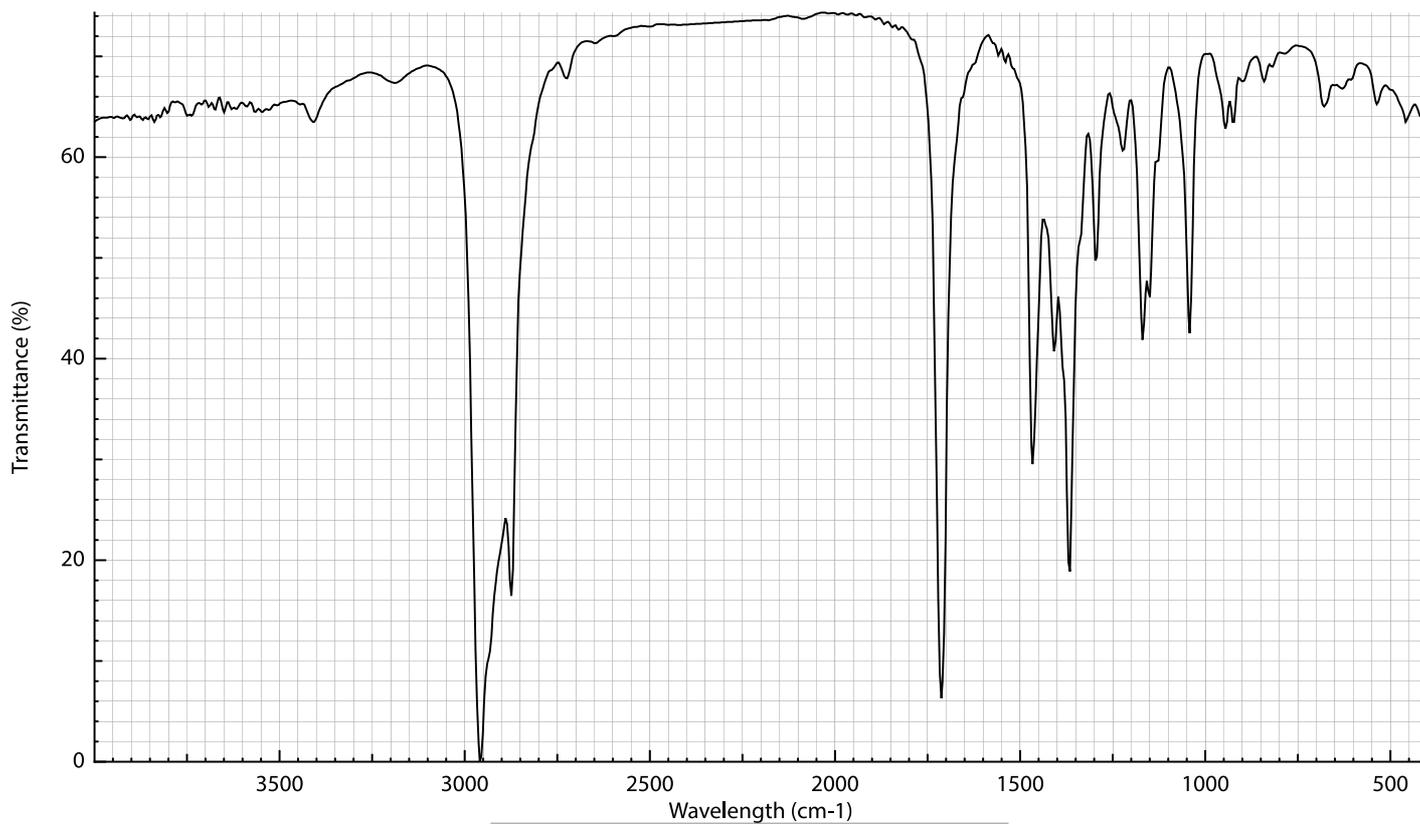


Figure: spectre IR, transmittance (%) en fonction de la longueur d'onde (cm⁻¹)

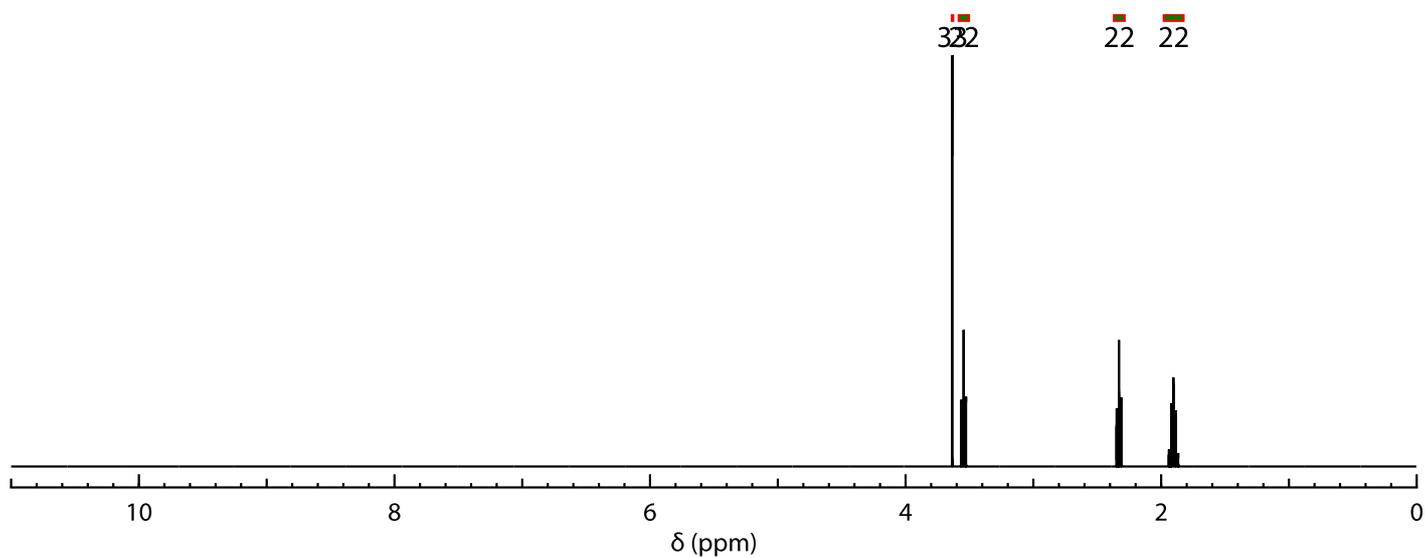
Spectre RMN ^1H 400 MHz (ppm, CDCl_3)

Figure: Spectre RMN ^1H simulé (400 MHz), la valeur au dessus du signal est proportionnelle au nombre de proton.

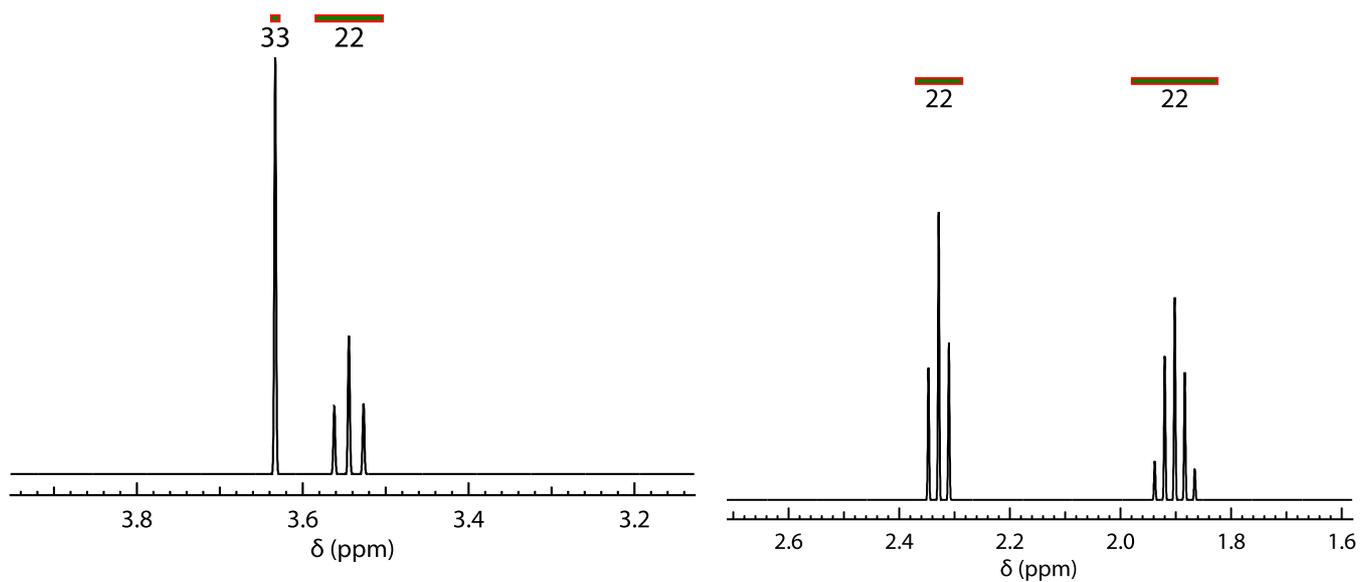


Figure: Spectre RMN ^1H simulé (400 MHz): agrandissements

Question 2

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu ayant comme formule brute $C_8H_9NO_2$ et possédant les spectres caractéristiques suivants :

Spectre spectres RMN ^{13}C découplé à 100 MHz ($CDCl_3$)

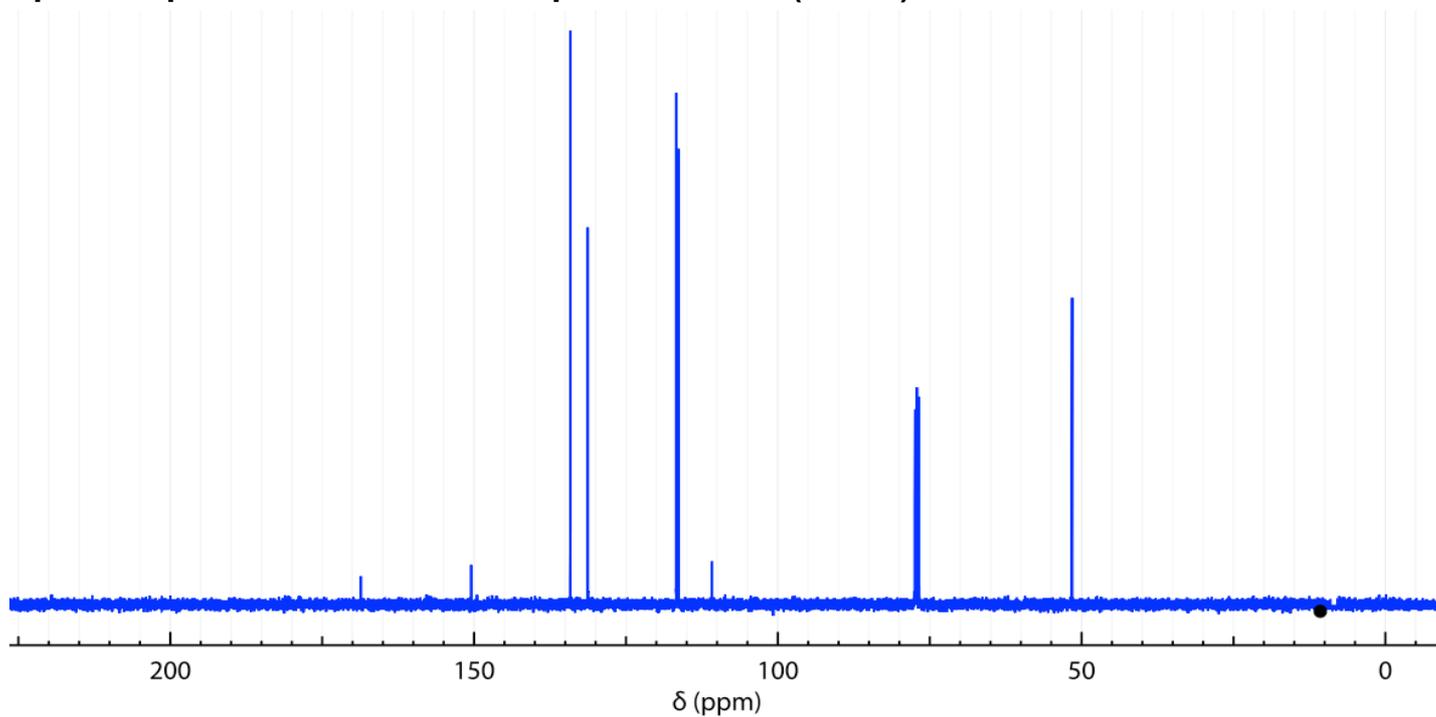


Figure: Spectre RMN ^{13}C découplé expérimental (100 MHz): agrandissements

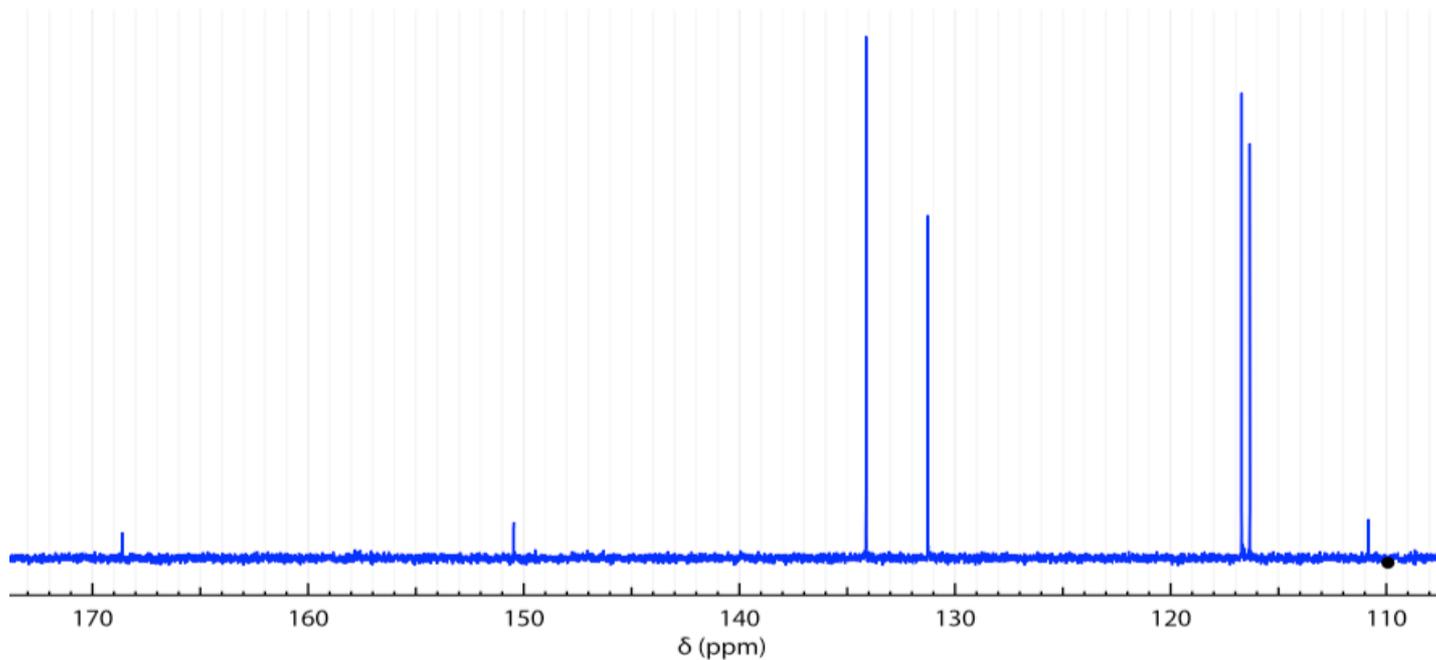


Figure: Spectre RMN ^{13}C découplé expérimental (100 MHz): agrandissements

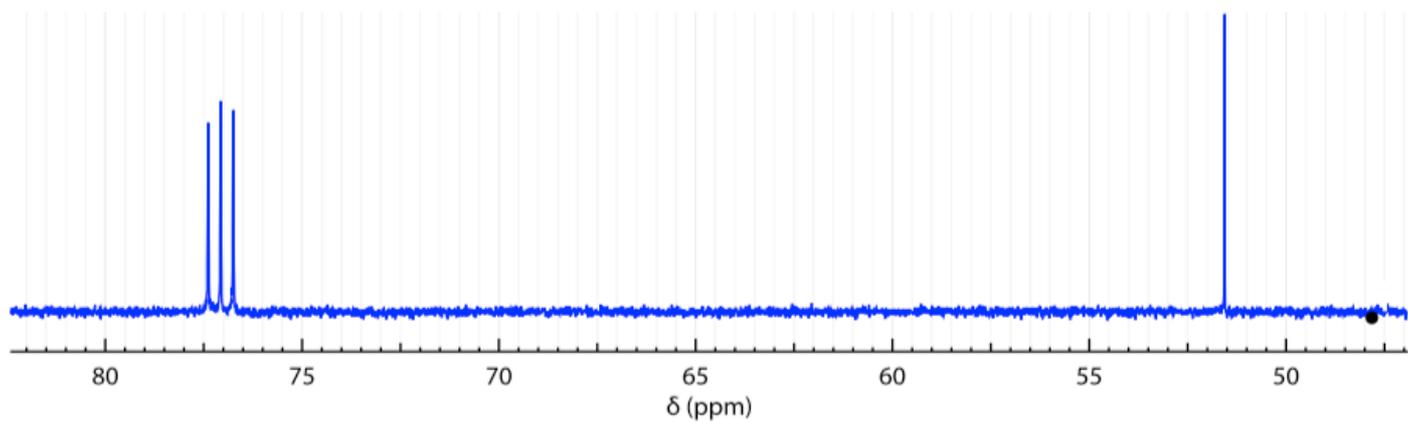


Figure: Spectre RMN ^{13}C découplé expérimental (100 MHz): agrandissements

Spectre IR

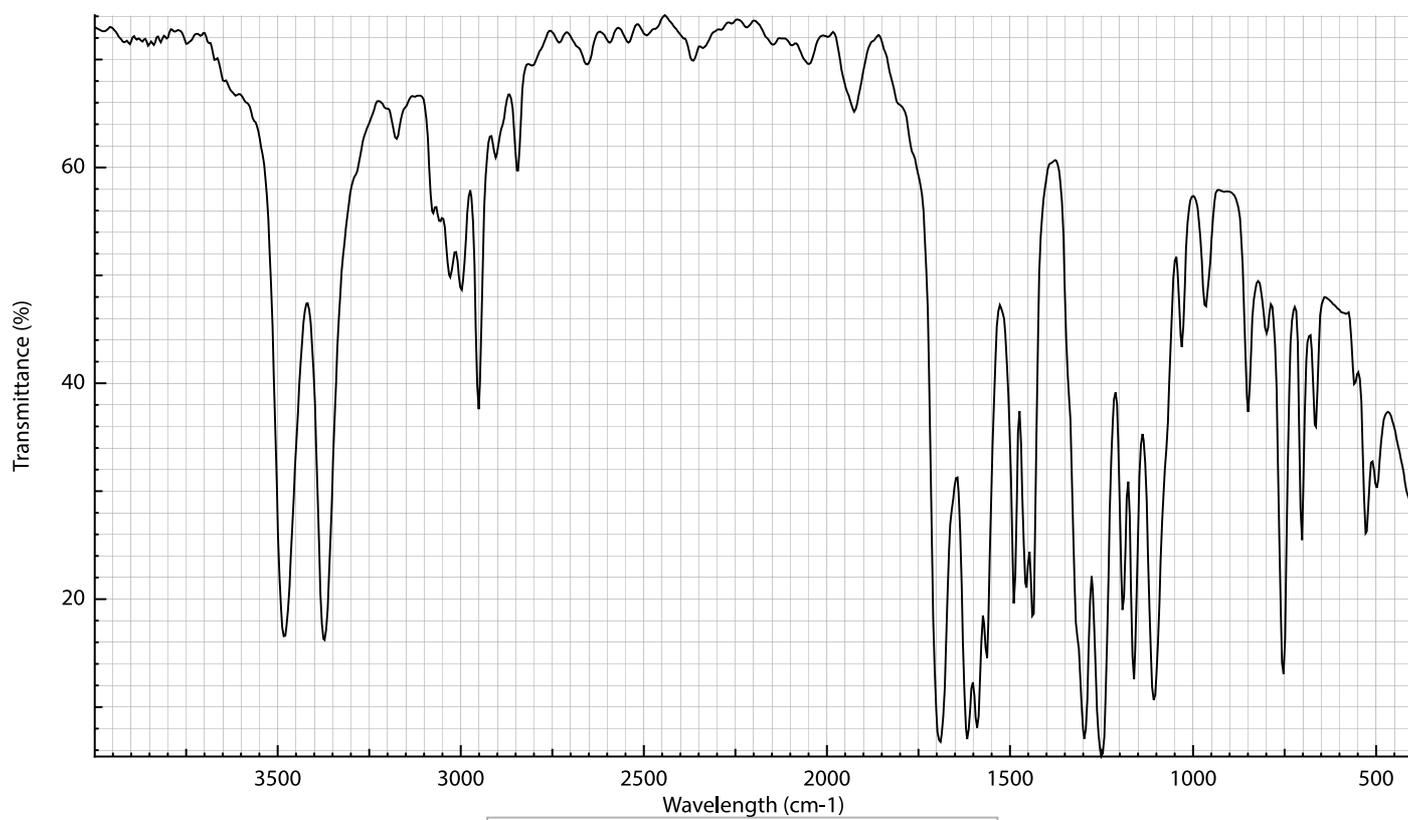
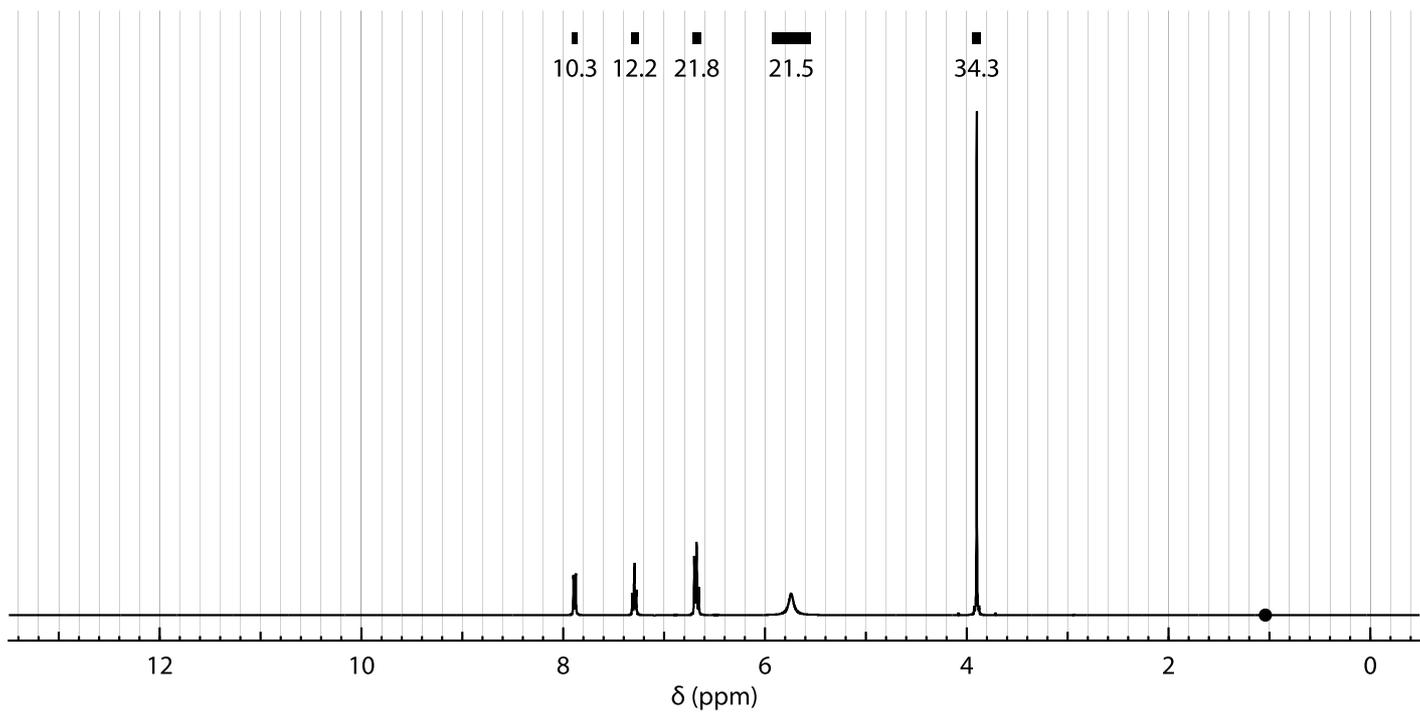
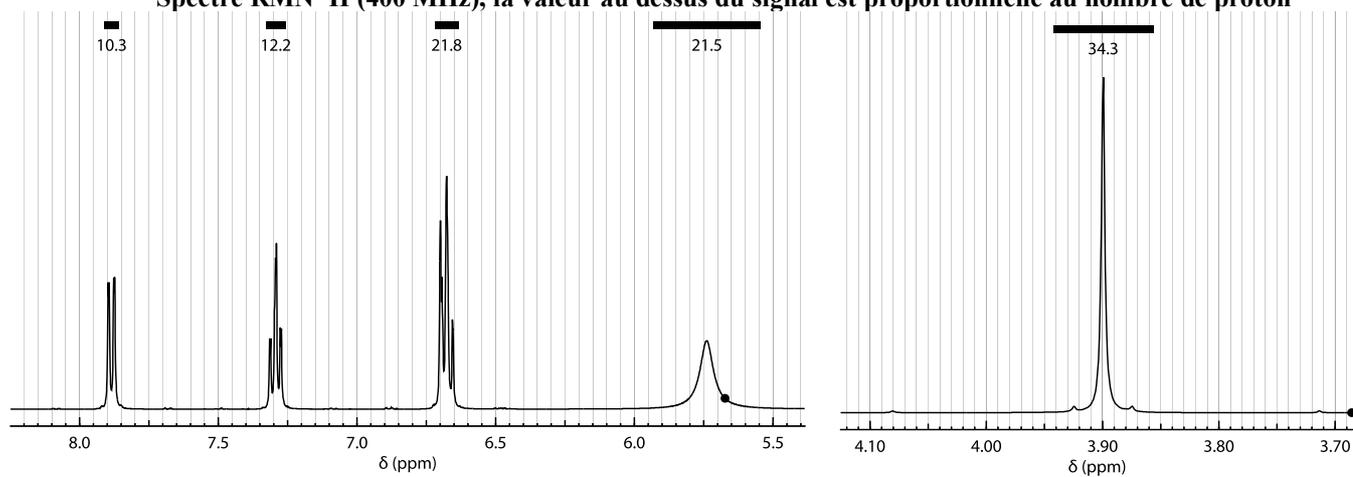


Figure: spectre IR, transmittance (%) en fonction de la longueur d'onde (cm $^{-1}$)

Spectre RMN ^1H 400 MHz (CDCl_3)**Spectre RMN ^1H (400 MHz), la valeur au dessus du signal est proportionnelle au nombre de proton****Spectre RMN ^1H (400 MHz): grandissement**

Question 3

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu, dont la formule brute se trouve dans le formulaire annexé et possédant les spectres caractéristiques suivants :

Spectre de masse

Le spectre de masse (ionisation par électrospray (ESI)) du produit inconnu donne un pic monoisotopique correspondant à la molécule simplement protonée à 181.9528 Da avec une précision de 100 ppm.

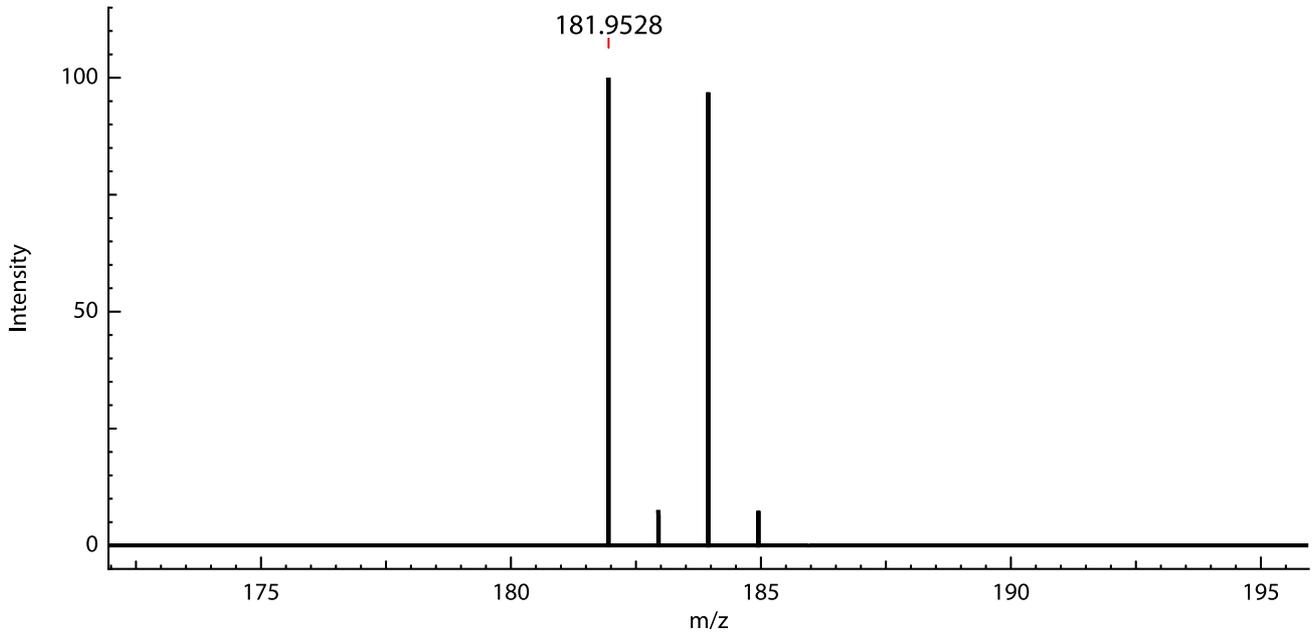


Figure: Spectre de masse (ESI) à haute résolution

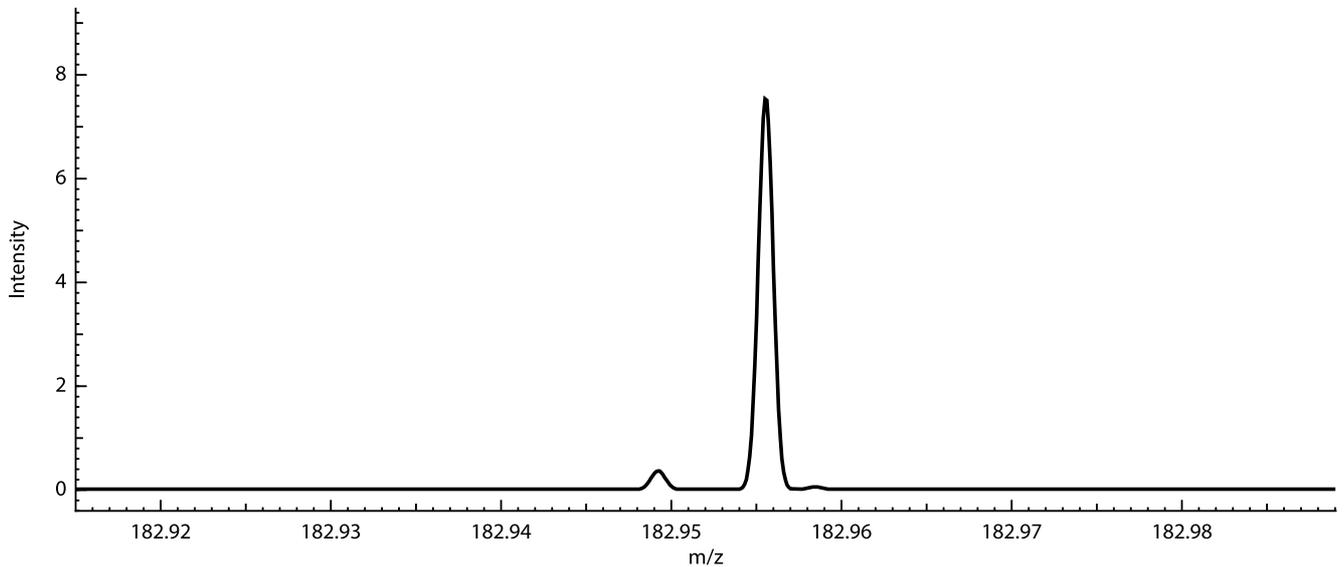
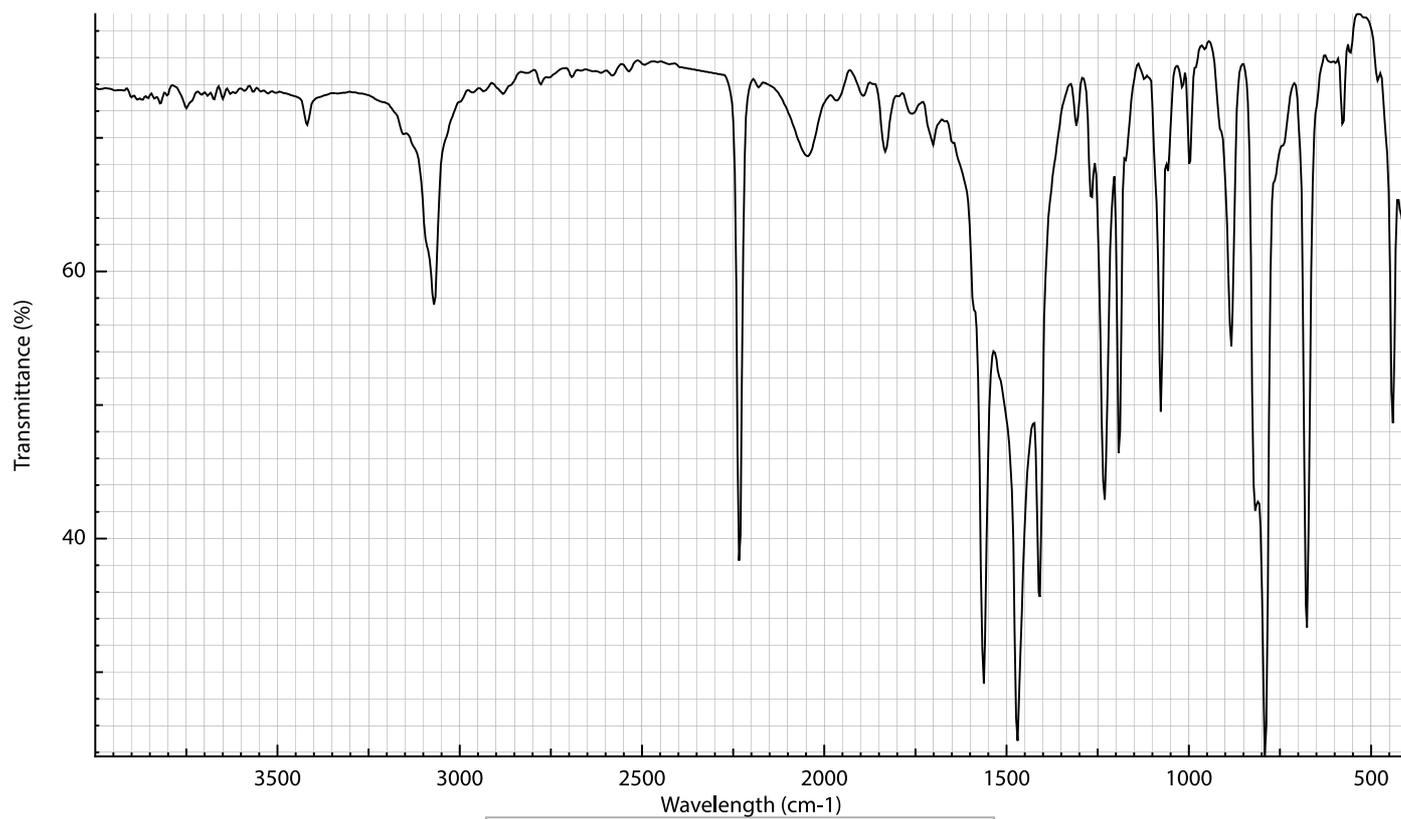


Figure: Spectre de masse (ESI) à haute résolution, agrandissement

Spectre IR :

Spectre RMN ^1H 400 MHz

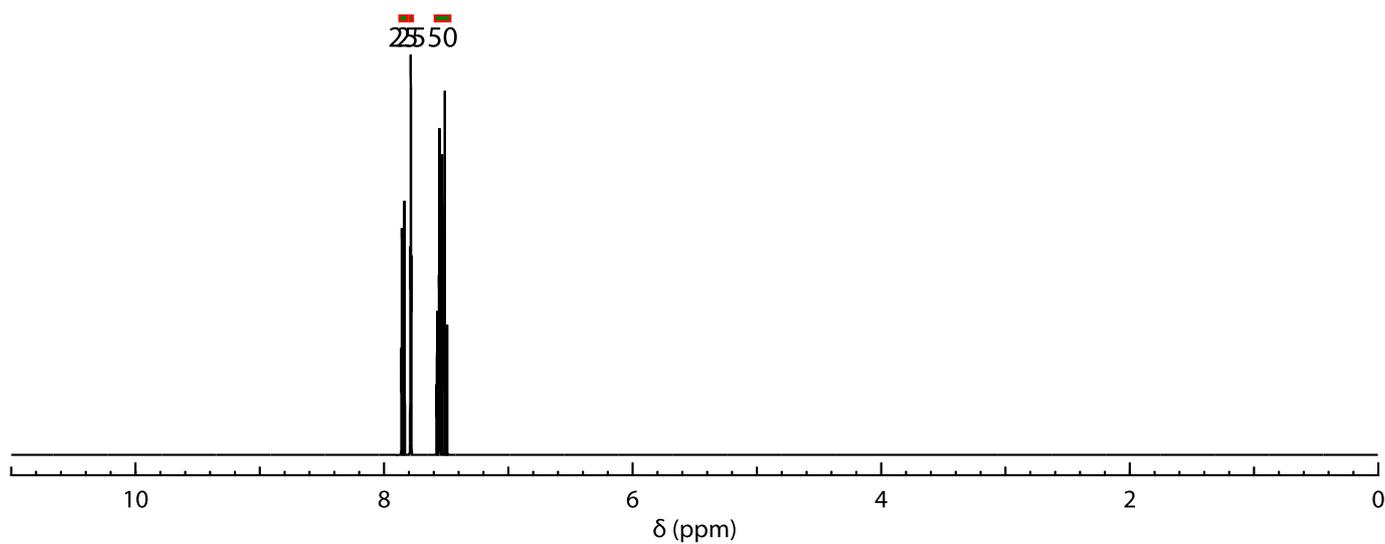


Figure: Spectre RMN ^1H simulé (400 MHz, CDCl_3), le nombre de proton relatif est indiqué au-dessus du signal.

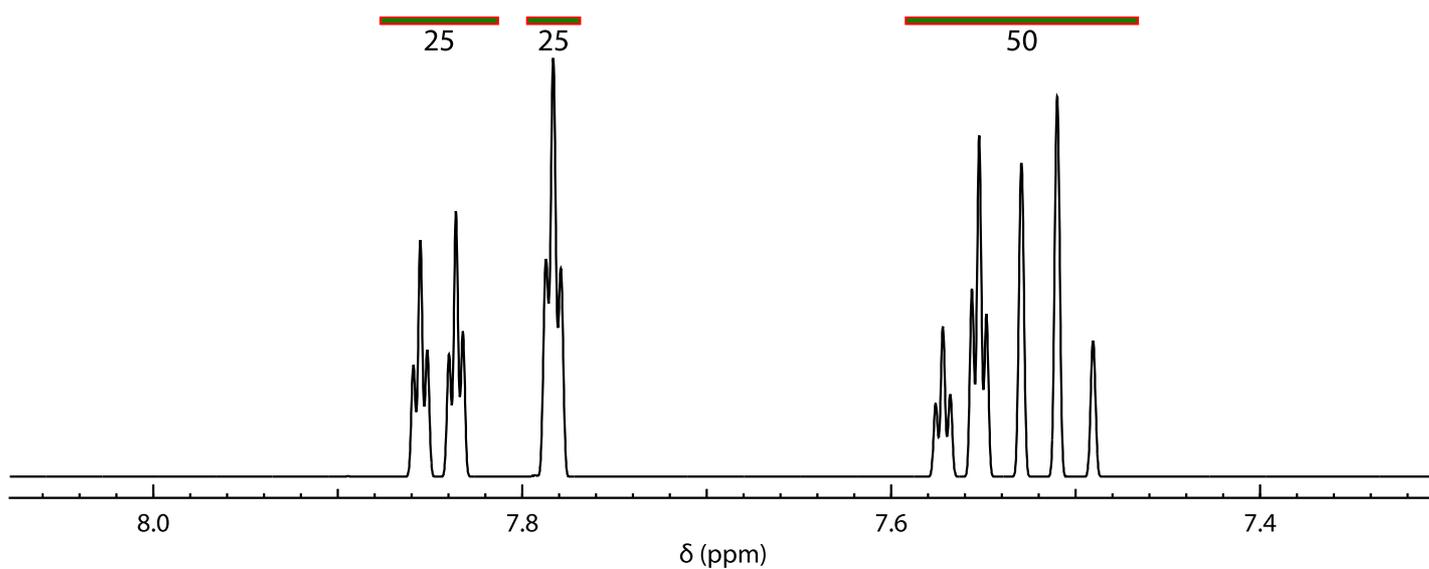


Figure: Agrandissement du RMN ^1H simulé (400 MHz, CDCl_3), le nombre de proton relatif est indiqué au-dessus du signal.

Question 4

Donnez le nombre d'insaturation et dessinez la structure du produit chimique inconnu qui a la formule brute: $C_{10}H_{22}O$ et possédant les spectres caractéristiques suivants :

Spectre RMN 1H 400 MHz

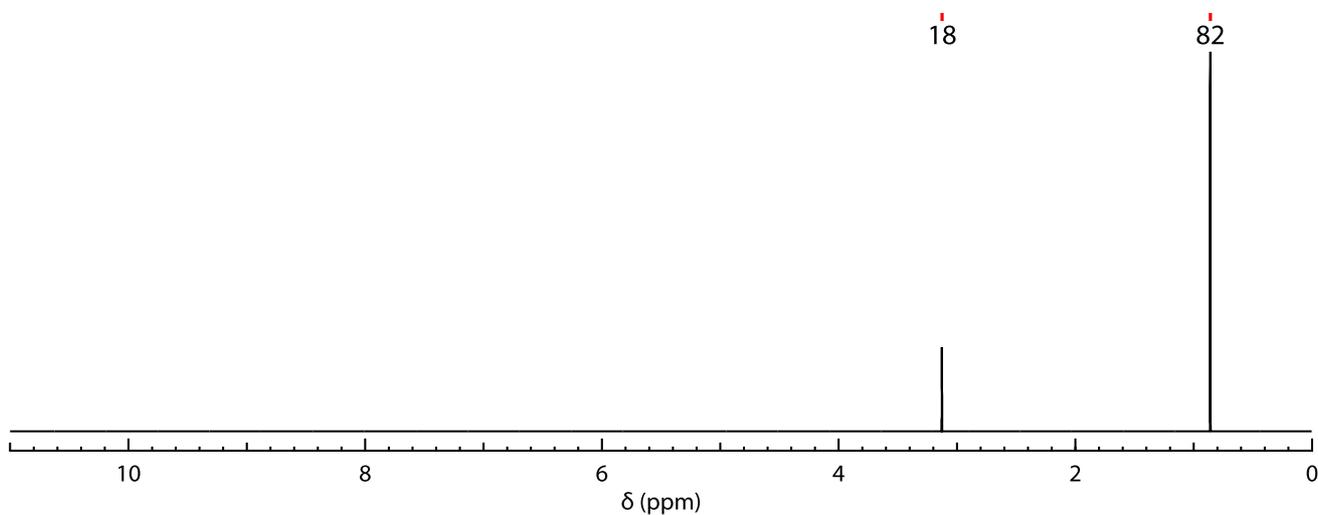


Figure: Spectre RMN 1H simulé, la valeur au dessus du signal correspond au nombre de proton.

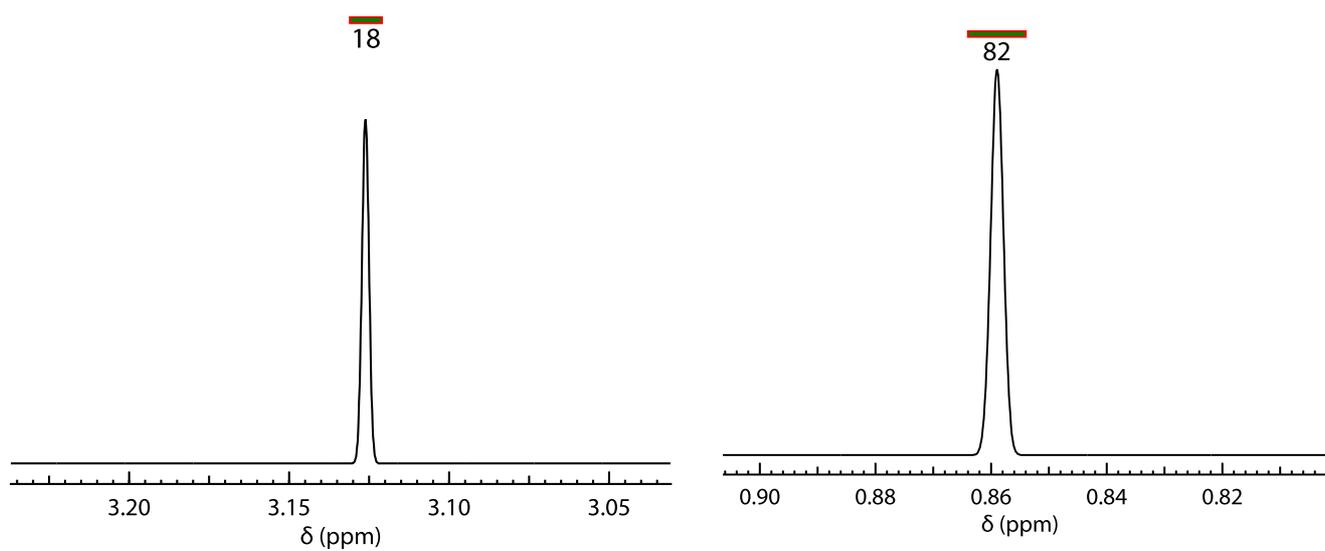


Figure: Spectre RMN 1H simulé, agrandissements.