

EXERCICE SYNTHÈSE IR RMN

7 Départager des isomères par spectroscopie

L'objectif de cet exercice est de montrer que les copies IR et de RMN peuvent permettre de départager des isomères.

Un chimiste dispose de deux molécules issues de la même formule brute C_3H_6O . Il sait que chaque formule représentée ci-dessous correspond à l'un des isomères.



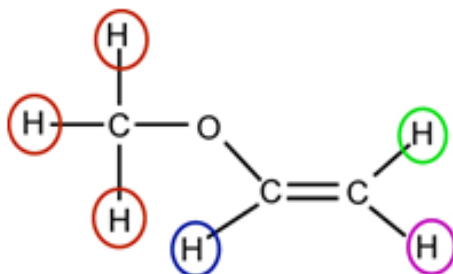
- Vérifier que ces deux molécules sont bien isomères.
- Laquelle est le propanal ?
- Combien le propanal contient-il de groupes de protons équivalents ?
- Écrire la formule développée correspondant à l'autre molécule. En déduire le nombre de groupes de protons équivalents dans cette molécule.

a. Les deux formules topologiques données correspondent à la même formule brute : C_3H_6O . Les deux molécules *A* et *B* sont donc bien isomères.

b. Le propanal est un aldéhyde dont la chaîne carbonée est constituée d'un enchaînement de trois atomes de carbone. La formule semi-développée du propanal est donc : $CH_3-CH_2-CH=O$,

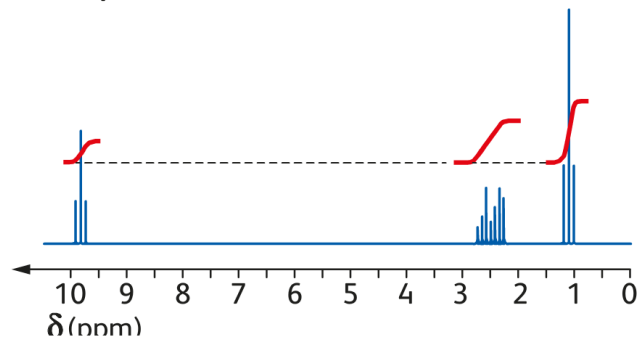
d. Écrire la formule développée correspondant à l'autre molécule. En déduire le nombre de groupes de protons équivalents dans cette molécule.

d. Les protons équivalents entre eux sont entourés d'une même couleur sur la formule développée ci-dessous :

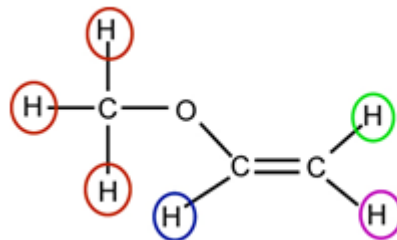
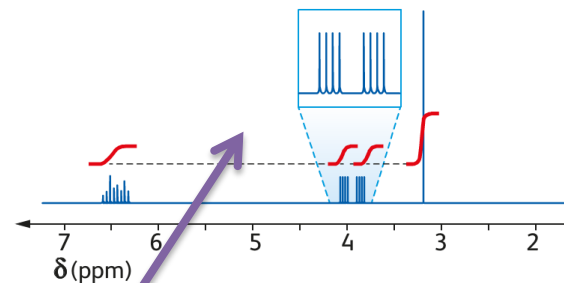


e. En déduire la formule de l'isomère A et celle de l'isomère B.

DOC 1. Spectre de RMN de la molécule A



DOC 2. Spectre de RMN de la molécule B



Le spectre de RMN de la molécule B fait apparaître quatre signaux : la molécule B comporte donc quatre groupes de protons équivalents.

f. Le spectre de RMN de la molécule A ne comporte aucun singulet, contrairement à celui de la molécule B (documents 1 et 2).

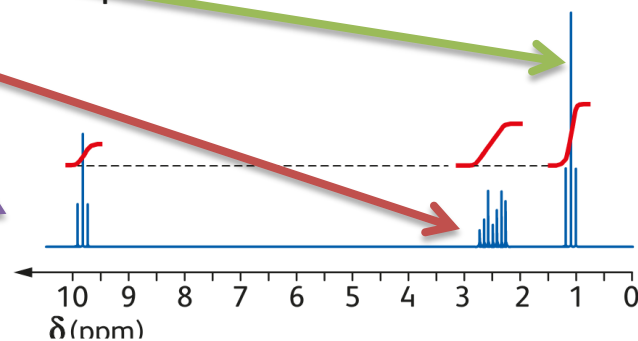
Cette observation est-elle cohérente avec les formules proposées pour les isomères A et B ?

L'isomère A est donc le propanal :



les 3 protons du méthyle $-\text{CH}_3$ ont 2 protons voisins (ceux de $-\text{CH}_2-$) et donnent donc un triplet

DOC 1. Spectre de RMN de la molécule A



le proton lié à l'atome de carbone du groupe carbonyle a aussi 2 protons voisins (ceux de $-\text{CH}_2-$) et donne donc un triplet

les 2 protons du $-\text{CH}_2$ ont $3+1 = 4$ protons voisins (et donnent donc un massif).