

2 Identification spectrale de molécules organiques (p. 118-119)

1. a. **A** et **B** ont la même formule brute, $C_8H_{10}O$; ce sont des isomères.

b. **B** est un alcool, car le groupe hydroxyle est lié à un carbone tétragonal et non trigonal comme celui de l'espèce **A**.

c. Groupes caractéristiques et fonctions des composés :

- **C** : groupe carbonyle, fonction aldéhyde;
- **D** : groupe carboxyle, fonction acide carboxylique;
- **E** : groupe ester, fonction ester.

2. a. Bandes d'absorption :

a : liaison O–H; b : liaison $C_{\text{tri}}-H_{\text{aromat}}$;

c : liaison $C_{\text{tét}}-H$; d : liaison $C_{\text{tét}}-H$;

g : liaison O–H; h : liaison $C_{\text{tri}}-H_{\text{aromat}}$;

i : liaison $C_{\text{tét}}-H$; j : liaison $C_{\text{tét}}-H$.

b. Le signal **a** est fin et se situe vers 3600 cm^{-1} . C'est celui d'une liaison O–H pour un alcool dilué dans le tétrachlorométhane, c'est-à-dire ne présentant pas de liaison hydrogène ($O-H_{\text{libre}}$).

Le signal **g** est large et se situe vers 3300 cm^{-1} . C'est celui d'une liaison O–H pour un alcool à l'état liquide, c'est-à-dire présentant des liaisons hydrogène ($O-H_{\text{lié}}$).

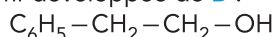
3. a. Les bandes d'absorption caractéristiques des constituants majoritaires du vin sont les bandes O–H (eau et éthanol) et $C_{\text{tét}}-H$ (éthanol).

b. Le spectre infrarouge de ce vin ne permettrait pas de vérifier la présence des composés **A** et **B** dans un vin, car les bandes d'absorption des constituants majoritaires sont aussi les bandes d'absorption des composés **A** et **B**.

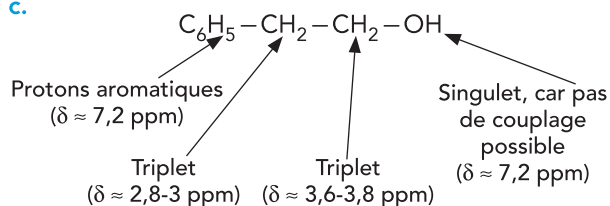
La spectroscopie infrarouge suit la loi de Beer-Lambert. Vu l'intensité des bandes O–H et $C_{\text{tét}}-H$ des espèces majoritaires, l'intensité des bandes $C_{\text{tri}}-H_{\text{aromat}}$ serait très faible et inutilisable.

4. a. Le spectre de RMN du document 3 est celui du composé **B**, car les deux triplets présents correspondent aux deux groupes méthylène $-CH_2-CH_2-$, alors que le spectre du document 4 est celui du composé **A**, car le triplet et le quadruplet présents authentifient la présence du radical éthyle CH_3-CH_2- .

b. Formule semi-développée de **B** :



c.



5. a. L'oxydation du composé **B** à l'aide d'un oxydant en défaut donne le phényléthanal **C**.

b. Le produit obtenu sera pur s'il ne présente pas de bande O–H (vers 3300 cm^{-1} - 3600 cm^{-1}) qui traduirait soit des restes d'alcool **B** (oxydation incomplète), soit des traces d'acide **D** (oxydation excessive).

6. a. L'oxydation du composé **B**, à l'aide d'un oxydant introduit en excès, donne l'acide phényléthanoïque **D**.

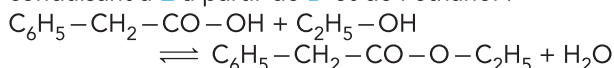
b. Un spectre infrarouge de **C** mettrait en évidence, entre autres, une bande O–H, que l'on peut aussi observer dans le spectre de l'alcool **B**, et une bande $C=O$, également présente dans le spectre de l'aldéhyde **C**.

Dans le spectre de RMN de **D**, on verra le signal (singulet) du proton du groupe carboxyle $-CO-OH$ pour $\delta \approx 11\text{ ppm}$.

Si le produit obtenu contient encore de l'aldéhyde **C**, on aura aussi un signal (triplet) pour $-CO-H$ pour $\delta \approx 9,9\text{ ppm}$.

Si le produit contient encore de l'alcool **B**, le spectre de RMN présentera un signal (singulet) pour $-CH_2-OH$ pour $\delta \approx 0,5-5\text{ ppm}$.

7. a. **G** est l'eau H_2O , d'où l'équation de la réaction conduisant à **E** à partir de **D** et de l'éthanol :



b. La spectroscopie de RMN paraît la technique spectroscopique la plus indiquée pour vérifier la pureté du produit et les fonctions présentes dans l'impureté. En effet, il sera facile de vérifier, dans le spectre de RMN, l'absence des signaux relatifs aux protons du groupe carboxyle $-CO-OH$ et du groupe hydroxyle $-OH$.

Ce spectre présentera deux singulets, l'un intégrant pour $5H(C_6H_5-)$, l'autre pour $2H(-CH_2-)$, un triplet pour $3H(CH_3-)$ et un quadruplet pour $2H(-CH_2-)$.