

TS3 - Physique-Chimie
Devoir en classe n°4 - Durée : 2h
Proposition de correction

EXERCICE I : IDENTIFICATION DE MOLÉCULES ORGANIQUES (15 points)

1. Nomenclature

1.1. Les formules brutes des composés **A** et **B** sont identiques : $C_8H_{10}O$. Il s'agit donc de deux isomères.

1.2. Groupes caractéristiques et fonctions organiques :

Composé	Fonction et groupe	Composé	Groupe caractéristique
B	alcool primaire (groupe hydroxyle)	D	acide carboxylique (groupe carboxyle)
C	aldéhyde (groupe carbonyle)	E	ester (groupe ester)

2. Analyse des spectres infrarouge

2.1. Attribution des bandes d'absorption

Composé A	Composé B
(a) fine, moyenne, 3600 cm^{-1} : $O - H_{\text{libre}}$	(g) large, intense, 3350 cm^{-1} : $O - H_{\text{lié}}$
(c) fine, moyenne, 3000 cm^{-1} : $C_{\text{tétra}} - H$	(h) moyenne, 3030 cm^{-1} : $C_{\text{tri}} - H_{\text{aromat.}}$
(d) fine, forte, 1510 cm^{-1} : $C = C_{\text{aromat.}}$	(j) fine, forte, 1500 cm^{-1} : $C = C_{\text{aromat.}}$

2.2. Les composés **A** et **B** sont tous deux des alcools et sont donc susceptibles de former des liaisons hydrogène. En revanche, le spectre du composé **A** (figure 1) a été obtenu à partir d'une solution diluée dans un solvant apolaire (le tétrachlorométhane). Dans cette situation, le composé **A** est dans l'incapacité de former des liaisons hydrogène. En revanche, le spectre du composé **B** (figure 2) a été obtenu à partir de l'alcool **B** pur à l'état liquide : ce composé peut donc aisément former des liaisons hydrogène, ce qui a pour effet de diminuer le nombre d'onde de la bande d'absorption et d'élargir cette dernière de façon caractéristique.

2.3. Les constituants majoritaires du vin sont l'eau et l'éthanol. Par conséquent, les principales bandes d'absorption caractéristiques sont celle du groupe hydroxyle OH (entre 3200 cm^{-1} et 3650 cm^{-1} selon le milieu) ainsi que celle des liaisons CH de la chaîne carbonée (entre 2800 cm^{-1} et 3000 cm^{-1}).

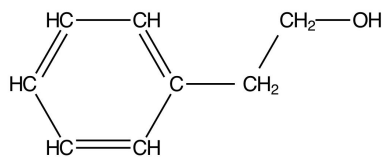
2.4. Les bandes d'absorption des composés **A** et **B** se superposent à celles de l'eau et de l'éthanol contenus dans le vin car elles se situent à des nombres d'onde similaires. Il n'est donc pas possible d'identifier la présence de **A** ou de **B** dans un vin à partir des spectres infrarouge.

3. Analyse des spectres RMN

3.1. Si on se limite à l'analyse des chaîne carbonées non aromatiques, on constate que le composé **A** présente deux groupes de protons non équivalents sur le radical éthyle $CH_3 - CH_2$: les protons se situant à l'extrémité ont deux voisins qui ne leur sont pas équivalents, ce qui doit donner un triplet dans le spectre RMN tandis que les deux protons du groupe méthylène CH_2 ont trois voisins qui ne leur sont pas équivalents, ce qui doit donner un quadruplet dans le spectre RMN. Seule la figure 4 présente à la fois un triplet et un quadruplet : c'est donc le spectre du composé **A**.

Le composé **B** présente quant à lui deux groupes de deux protons non équivalents (CH_2) qui devraient donc donner lieu à deux triplets dans le spectre RMN. La figure 3 présente bien deux triplets et correspond donc au spectre du composé **B**.

3.2. Formule semi-développée du composé **B** :



3.3. D'après le document V, le singulet situé à 2 ppm correspond au proton du groupe hydroxyle OH. Les deux triplets correspondent aux deux groupes CH_2 comme dit précédemment. Le triplet situé à 2,8 ppm correspond au groupe CH_2 proche du cycle aromatique (comme l'indique le document V) tandis que le triplet situé à 3,8 ppm correspond à l'autre groupe CH_2 proche de l'atome d'oxygène. Enfin, le singulet situé à 7,2 ppm correspond aux protons du cycle aromatique comme l'indique également le tableau du document V.

4. Oxydation douce

- 4.1. Le composé **B** est un alcool primaire dont l'oxydation douce mène à la formation d'un aldéhyde comme l'indique le document III. On obtient donc principalement le composé **C**.
- 4.2. En réalisant un spectre infrarouge du produit extrait et purifié et en le comparant à celui du composé **B**, on doit observer la disparition de la bande (g) caractéristique du groupe hydroxyle OH et l'apparition d'une bande d'absorption forte caractéristique du groupe carbonyle entre 1650 cm^{-1} et 1730 cm^{-1} . Cette technique est donc tout à fait opportune.

5. Oxydation forcée

- 5.1. D'après le document III, on obtient cette fois un acide carboxylique qui correspond en fait au composé **D**.
- 5.2. En spectroscopie infrarouge, les bandes d'absorption du groupe OH de l'alcool et du groupe OH de l'acide carboxylique pourraient se superposer, ce qui ne permet pas de s'assurer de la pureté du produit obtenu. En revanche, en RMN, l'étude du nombre de signaux et de leur multiplicité permet de confirmer ou d'infirmer la présence du réactif donc d'obtenir des informations sur la pureté du produit obtenu.

6. Réaction d'estérification

Là encore, les bandes d'absorption de la fonction ester et de la fonction acide carboxylique se superposent en spectroscopie infrarouge. La spectroscopie de RMN semble donc plus appropriée pour caractériser le produit obtenu et vérifier sa pureté.