



Université de
Bourgogne

Licence de Chimie, L3
Epreuve de Chimie Moléculaire
et Structurale

Examen du jeudi 24 mai 2018

Durée : 2 heures

Numéro d'anonymat :

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

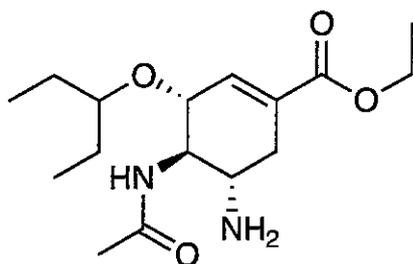
L'utilisation de téléphones portables, montres connectées,
tablettes connectées est strictement interdite.

Les 5 exercices sont indépendants.

ATTENTION : la notation prendra en compte le soin apporté à la rédaction de la copie
(orthographe, grammaire, vocabulaire scientifique...).

Exercice 1 : spectrométrie de masse

1) Prévoir deux à trois fragmentations principales du spectre de masse de l'oseltamivir, un anti-viral de formule $C_{16}H_{28}N_2O_4$ représenté ci-dessous. Le spectre de masse montre notamment la présence d'un pic à $m/z = 284$ et d'un pic relativement intense à $m/z = 212$ (ion fils) provenant d'un fragment à $m/z = 238$ (ion père). On envisagera notamment une coupure de type rétro Diels-Alder et un réarrangement de Mac Lafferty.

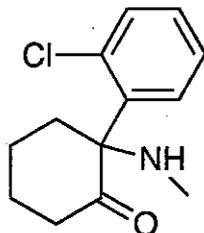


Formule : $C_{16}H_{28}N_2O_4$
Masse exacte : 312,20
Masse moyenne : 312,41

Oseltamivir

2) Prévoir deux fragmentations principales du spectre de masse de la kétamine, un psychotrope de formule $C_{13}H_{16}ClNO$ représenté ci-dessous. Le spectre de masse montre notamment la présence d'un pic à $m/z = 220$ et d'un pic relativement intense à $m/z = 192$ (ion fils) provenant du fragment à $m/z = 220$ (ion père).

Remarque : Il est conseillé de tenir-compte de la tautomérie céto-énolique (forme énol).



Formule : $C_{13}H_{16}ClNO$
Masse exacte : 237,09
Masse moyenne : 237,73

Kétamine

Exercice 2 : questions de cours

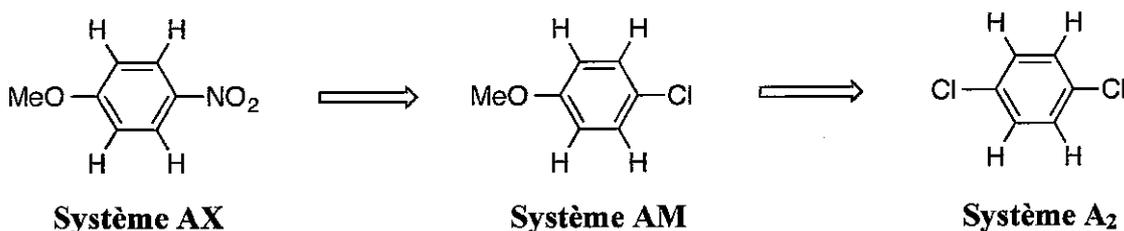
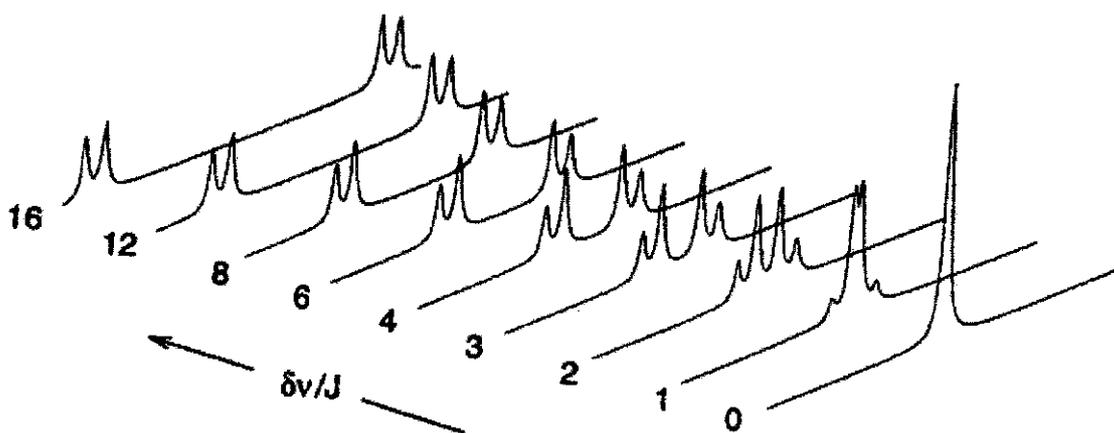
Spectrométrie de masse :

- 1) Donner la définition de la masse exacte et de la masse moyenne.
- 2) Décrire brièvement le principe de fonctionnement d'un spectromètre de masse ESI/TOF (mode d'ionisation et analyseur).

RMN :

- 3) Donner la définition du déplacement chimique δ en ppm.
- 4) Donner la définition du temps de relaxation longitudinal T_1 (équation + graphe montrant l'évolution de M_z au cours du temps).
- 5) Couplages forts et effets de toit en RMN ^1H .

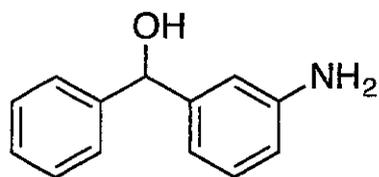
A partir de l'exemple des 3 dérivés aromatiques ci-dessous, expliquez et justifiez l'évolution des spectres RMN ^1H ci-contre (passage d'un système AX à un système AM, AB puis A_2).



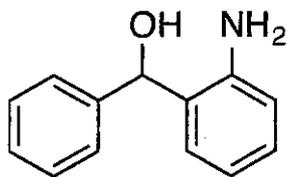
Exercice 5 : RMN ^1H et ^{13}C

A quel **isomère A, B** ou **C** de l'aminobenzhydrol (de formule $\text{C}_{13}\text{H}_{13}\text{NO}$) appartiennent les spectres RMN ^1H et ^{13}C ci-après ?

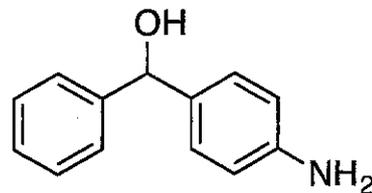
Justifier votre réponse en tenant-compte du nombre de signaux des protons aromatiques, de leur intégration et de leur multiplicité.



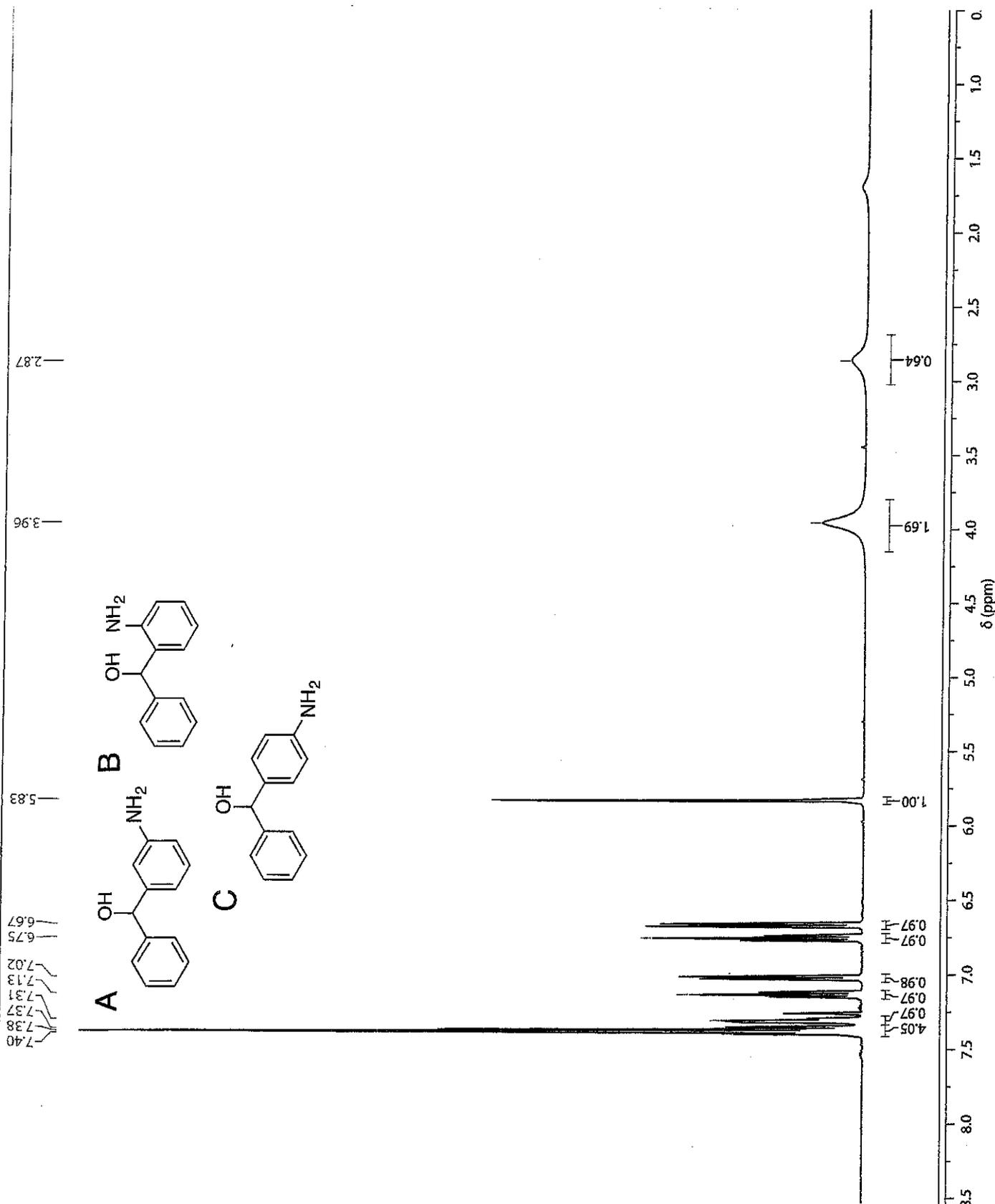
Isomère A

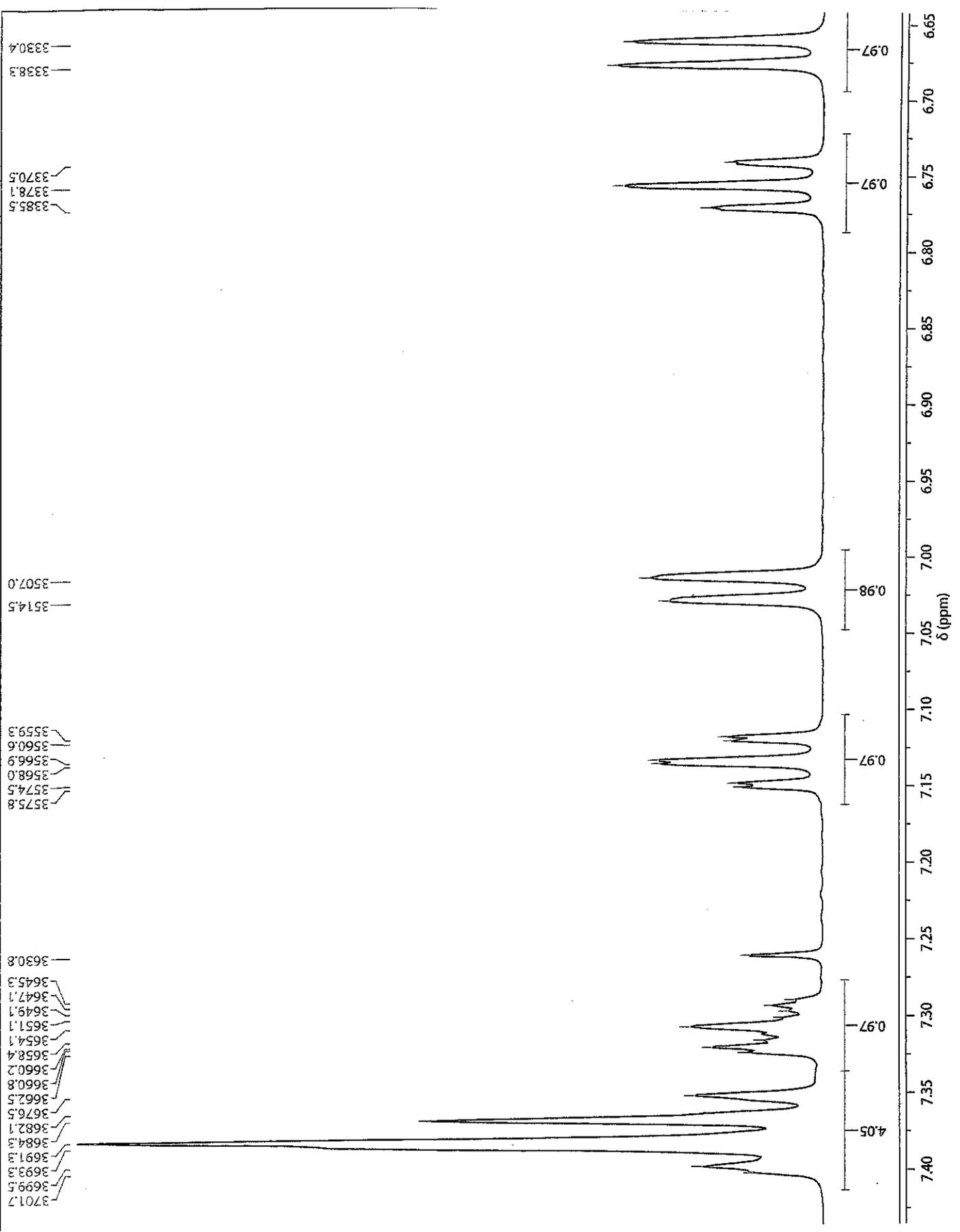


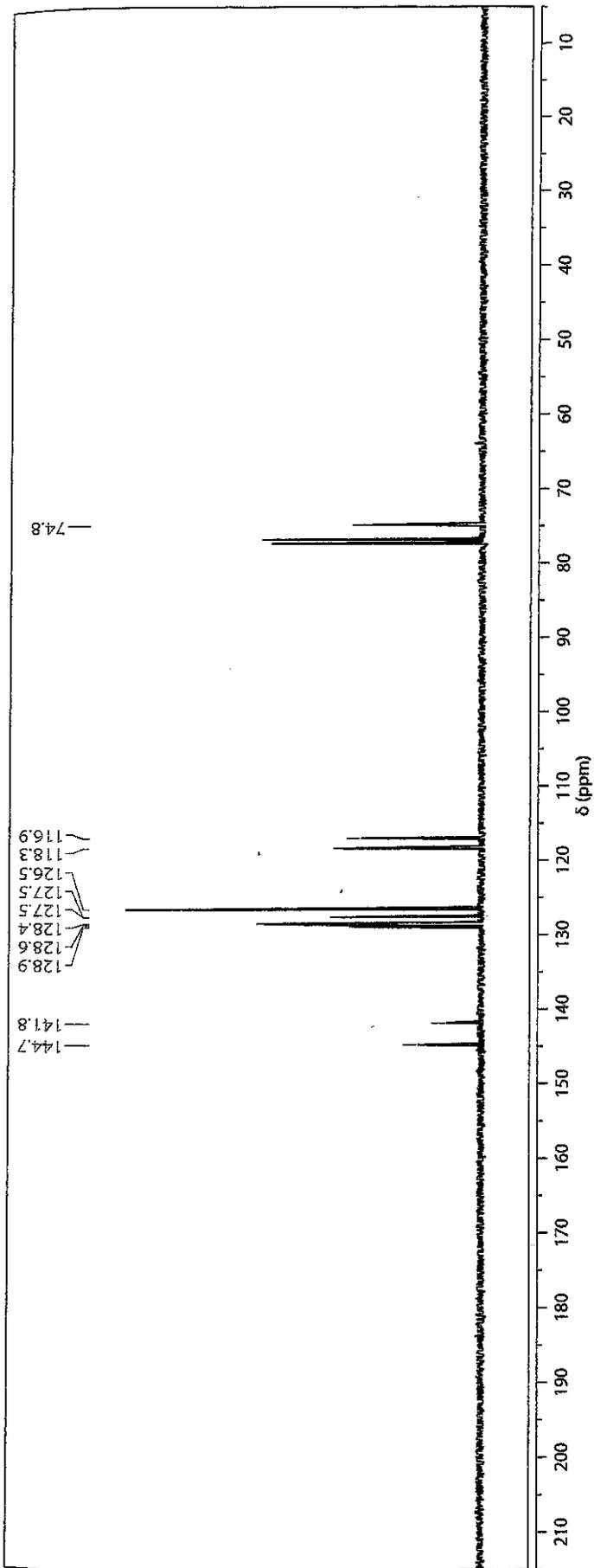
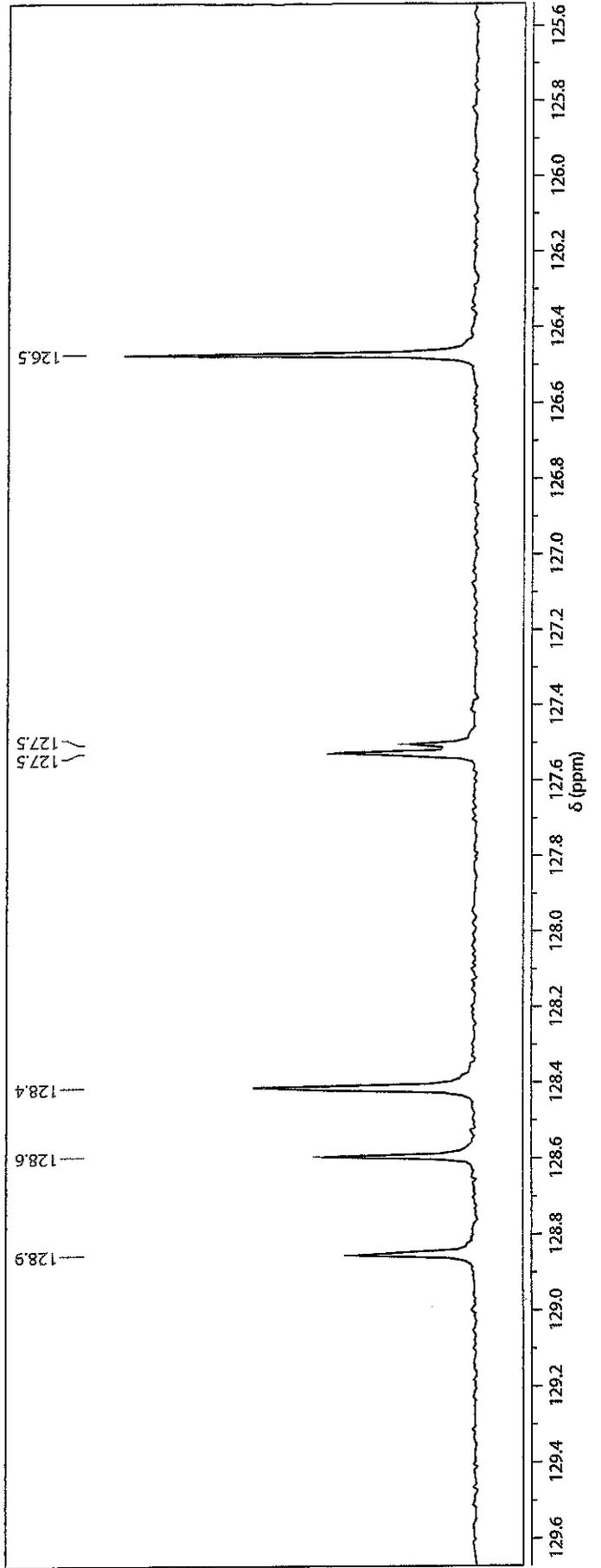
Isomère B



Isomère C







717