

Corrigé exercice 20

DÉTERMINATION DE STRUCTURE

- À partir de la formule brute on calcule le degré d'insaturation. Comme il y a 8 atomes C, le nombre maximal d'atomes d'hydrogène est : $2 \times 8 + 2 = 18$. Il en manque donc $18 - 12 = 6$ pour atteindre la saturation. Le degré d'insaturation est donc :

$$DI = 3$$

- Le spectre UV possède une bande d'absorption pour $\lambda > 200$ nm. La molécule possède donc un **système pi conjugué** (au moins deux liaisons doubles séparées d'une simple).
- On analyse alors le spectre IR. La résolution est trop faible au voisinage de 3000 cm^{-1} pour qu'on puisse en tirer de l'information avec certitude, mais il semble qu'il y ait une certaine absorption au-delà de 3000 cm^{-1} , ce qui laisse supposer la présence de liaison C-H vinyliques (C=C-H).

Par ailleurs, comme il y a des atomes d'oxygène dans la molécule, on recherche surtout les groupes caractéristiques oxygénés, et on remarque notamment :

- l'absence de bande dans la zone 3300 cm^{-1} : il n'y a donc pas de liaison O-H, pas de fonction alcool. Il n'y a pas non plus la bande extrêmement large caractéristique de la fonction acide carboxylique ;
- la présence d'une bande très intense un peu au-delà de 1700 cm^{-1} . La molécule possède donc au moins une liaison double C=O : ce peut être dû à la fonction aldéhyde, cétone, ou ester.

- Le spectre RMN montre 3 signaux différents, d'intégration relative 3:2:1. Comme il y a 12 H dans la molécule, on en déduit :

- que le signal a vers 1,3 ppm intègre pour 6H ;
- que le signal b vers 4,3 ppm intègre pour 4H ;
- que le signal c vers 6,8 ppm intègre pour 2H.

La présence de seulement trois signaux pour 12H, de forme simple (triplet, quadruplet, singulet bien définis), laisse penser que la molécule possède une symétrie, qui rend de nombreux H isochrones.

De plus, a est un triplet pour 6H et b est un quadruplet pour 4H : cela laisse penser à un ensemble de deux groupes $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 -$ symétriques, donc à chaque extrémité de la molécule.

Étant donné le fort déblindage du signal b, et l'absence de couplage AMX, on en déduit que le groupe CH_2 est probablement lié à un atome O.

Il y a donc probablement deux groupes $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{O}$ à chaque extrémité.

Enfin, le déblindage extrêmement important du signal c, et le fait qu'il s'agisse d'un singulet, laissent penser qu'il s'agit de protons vinyliques symétriques ($-\text{CH}=\text{CH}-$ au centre de la molécule) à proximité d'atomes O.

- Conclusion : la seule structure compatible avec tous les renseignements est la suivante :

