TD n°1 : RMN ^{1}H : Lecture de spectres RMN ^{1}H

Dans ce TD, on s'intéresse aux caractéristiques de la RMN ^{1}H ainsi qu'aux paramètres susceptibles de modifier un spectre.

Sauf contre-indication, ces spectres ont été enregistrés dans $CDCl_3$ sur un spectromètre travaillant à la fréquence pour le proton de 300 MHz.

Equivalence magnétique et couplage – effet des substituants

a) On donne sur la figure **1a** les spectres RMN ^{1}H des trois isomères du dichlorobenzène. Représenter ces isomères et attribuer chaque spectre en justifiant votre réponse.
b) Sur la figure **1b** on donne les spectres RMN ^{1}H (région aromatique uniquement) de dérivés *para*-nitro : *p*-dinitrobenzène, *p*-nitrotoluène, acide *p*-nitrobenzoïque, *p*-nitroanisole, *p*-chloronitrobenzène. Attribuer chacun des spectres et expliquer l'évolution des massifs.

Identification de composés organiques - Détermination de structures

Les figures numérotées de **2** à **5** présentent les spectres RMN ^{1}H des composés suivants :

2: 4-méthoxybut-3-én-2-one
3 : crotonate de méthyle
4 : acide crotonique
5 : pent-3-én-2-one

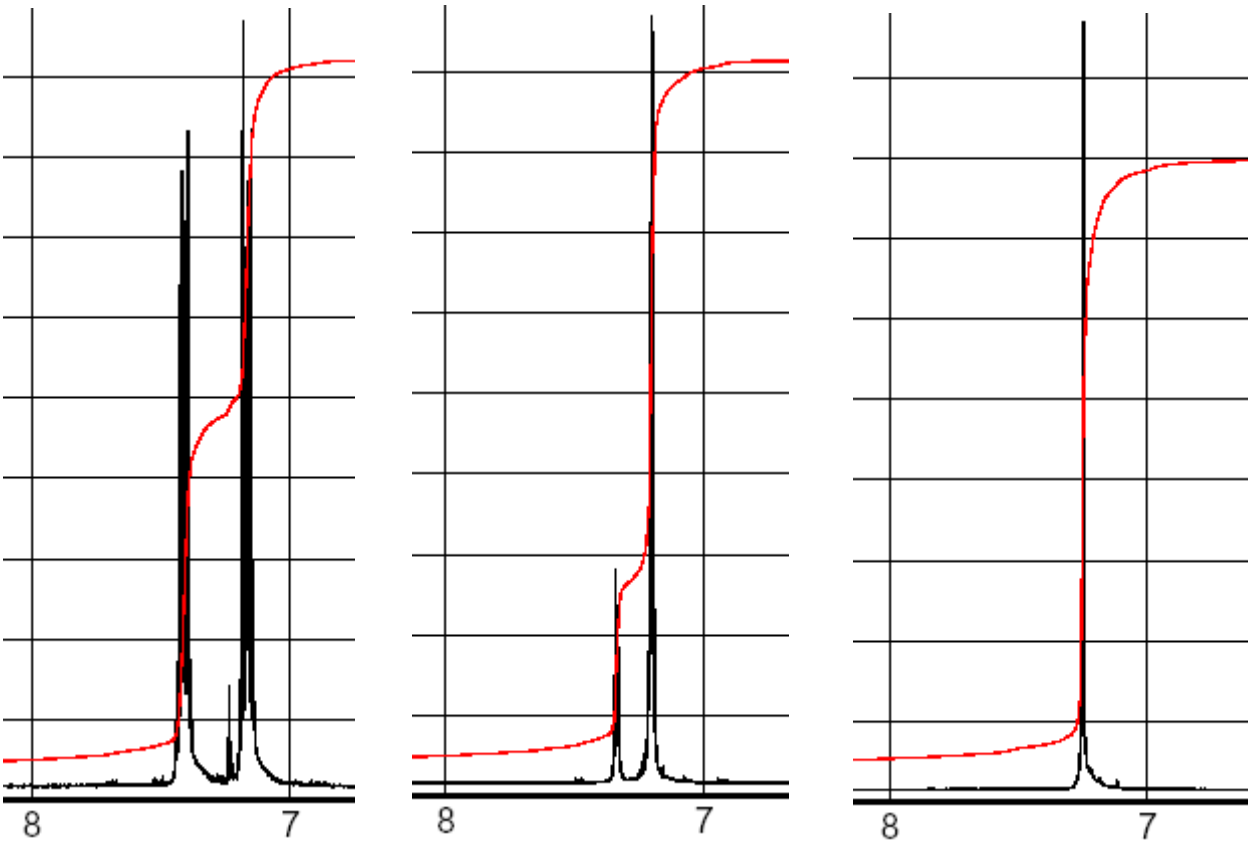
a) Commentez le spectre de la 4-méthoxy-3-butén-2-one (spectre **2**) identifiez les multiplets correspondant aux différents groupes de protons. On utilisera les courbes d'intégration, les valeurs des déplacements chimiques et on expliquera la forme des multiplets. On mesurera les constantes de couplages lisibles sur ces spectres. Selon quel critère peut-on reconnaître, en RMN ^{1}H, un composé *cis* d'un composé *trans* ? Quelle est la configuration de ce composé?

b) Repérez les différents protons sur le spectre RMN ^{1}H du crotonate de méthyle (spectre **3**). Quelle est sa configuration ? On comparera les valeurs des déplacements chimiques des deux groupes méthyles de cette molécule et on expliquera la différence observée.

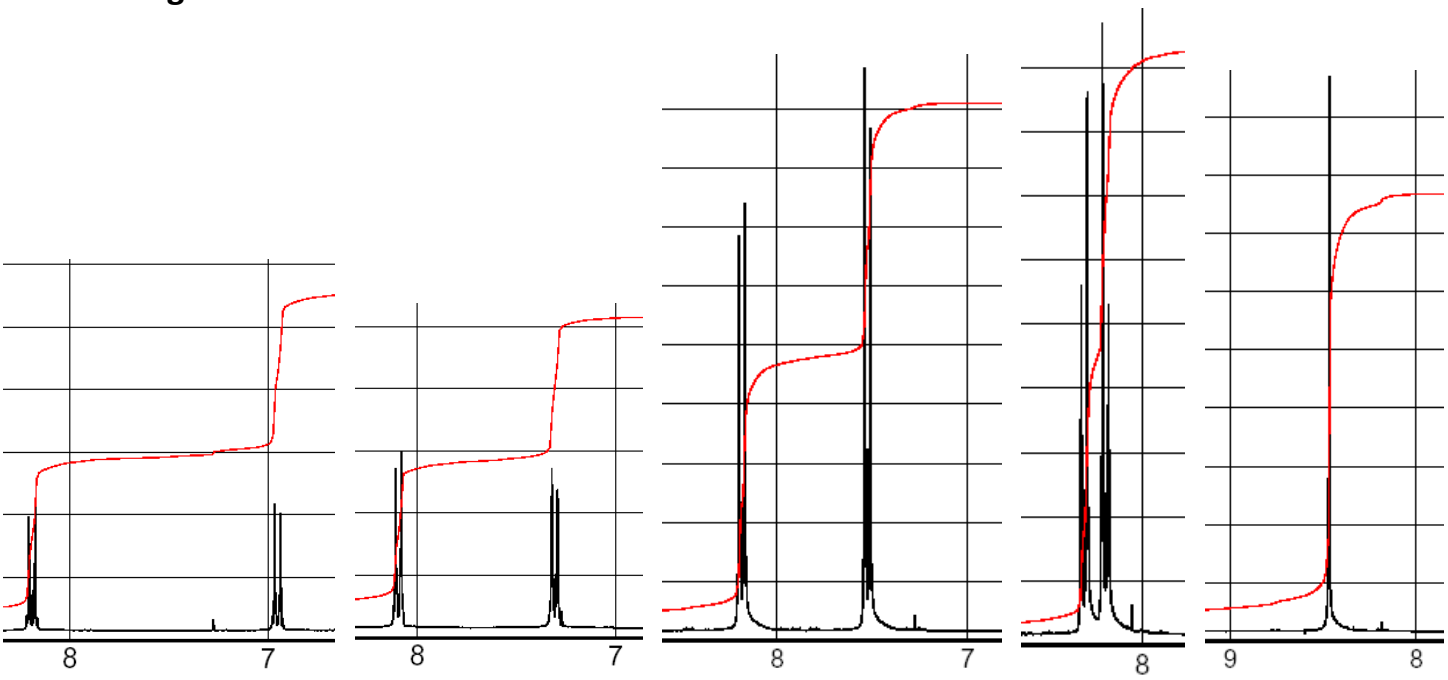
c) On analyse ensuite le spectre **4**.
- quels protons résonnent à 1.9, 5.7 et 7 ppm? Mesurez les constantes de couplage visibles sur ces massifs. Quelle est leur origine ?
- quelle est la configuration de l'acide crotonique étudié ici ?

d) Expliquez le spectre de la pent-3-én-2-one (spectre **5**).

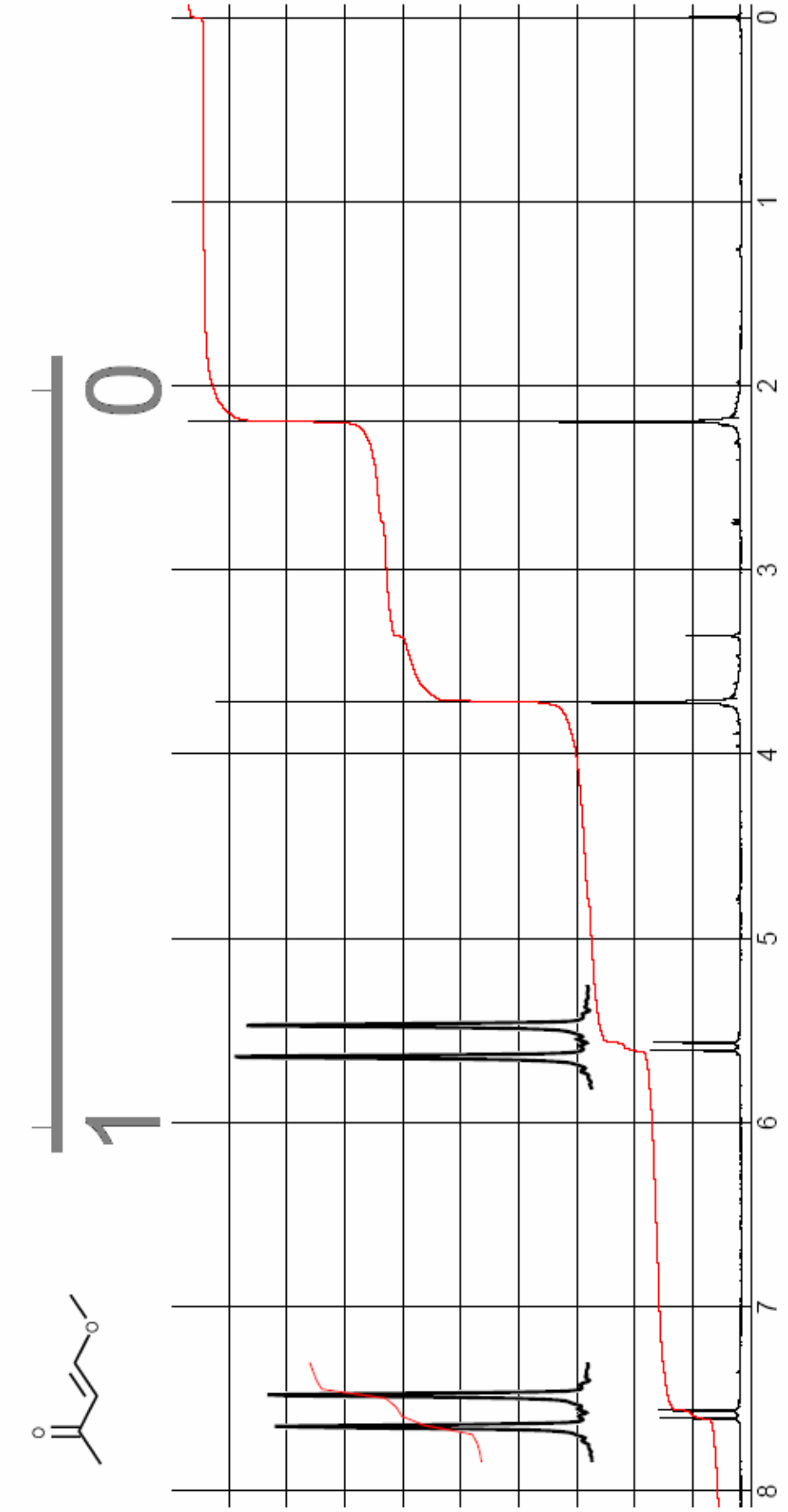
TD 1 Figure 1a



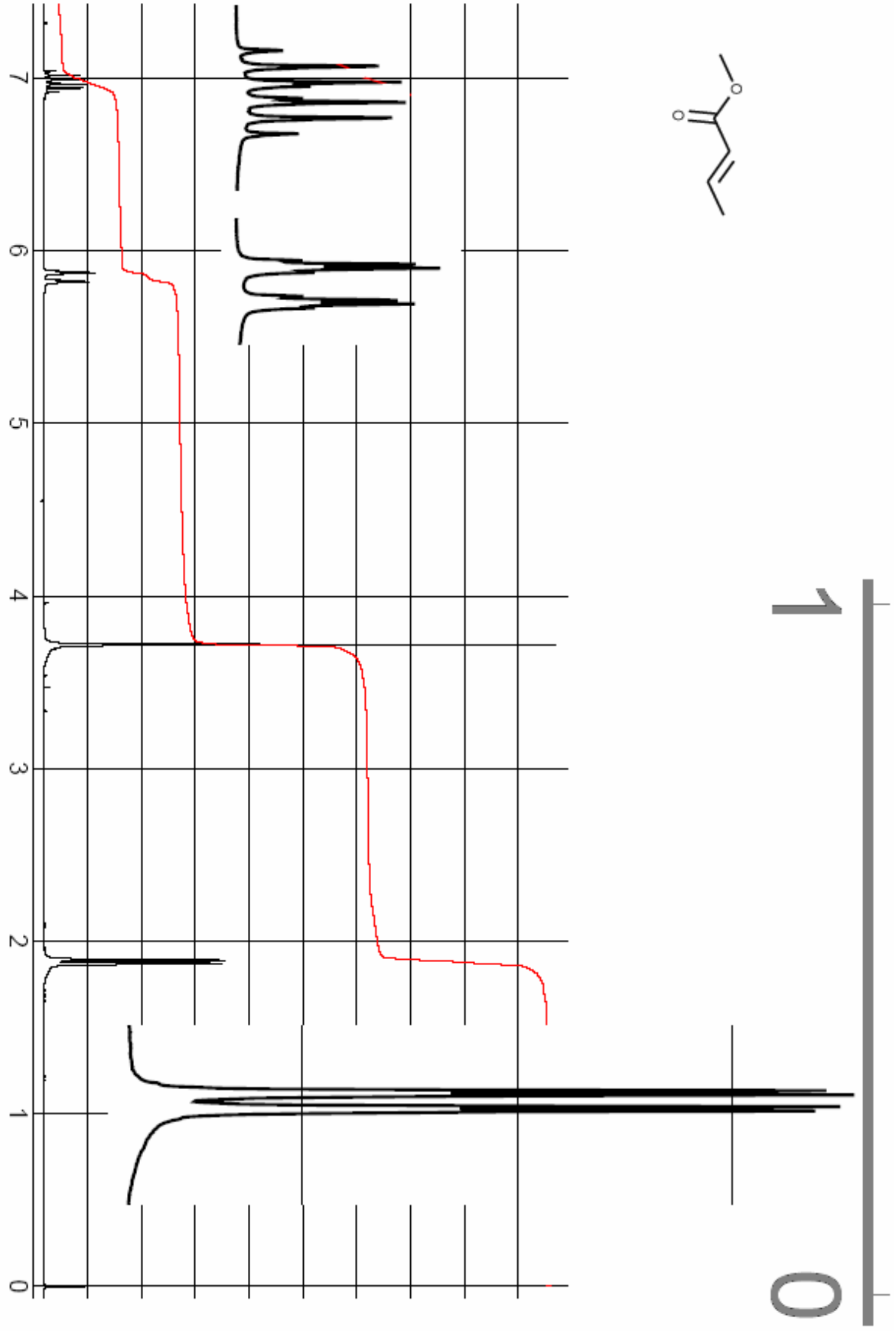
TD 1 Figure 1b



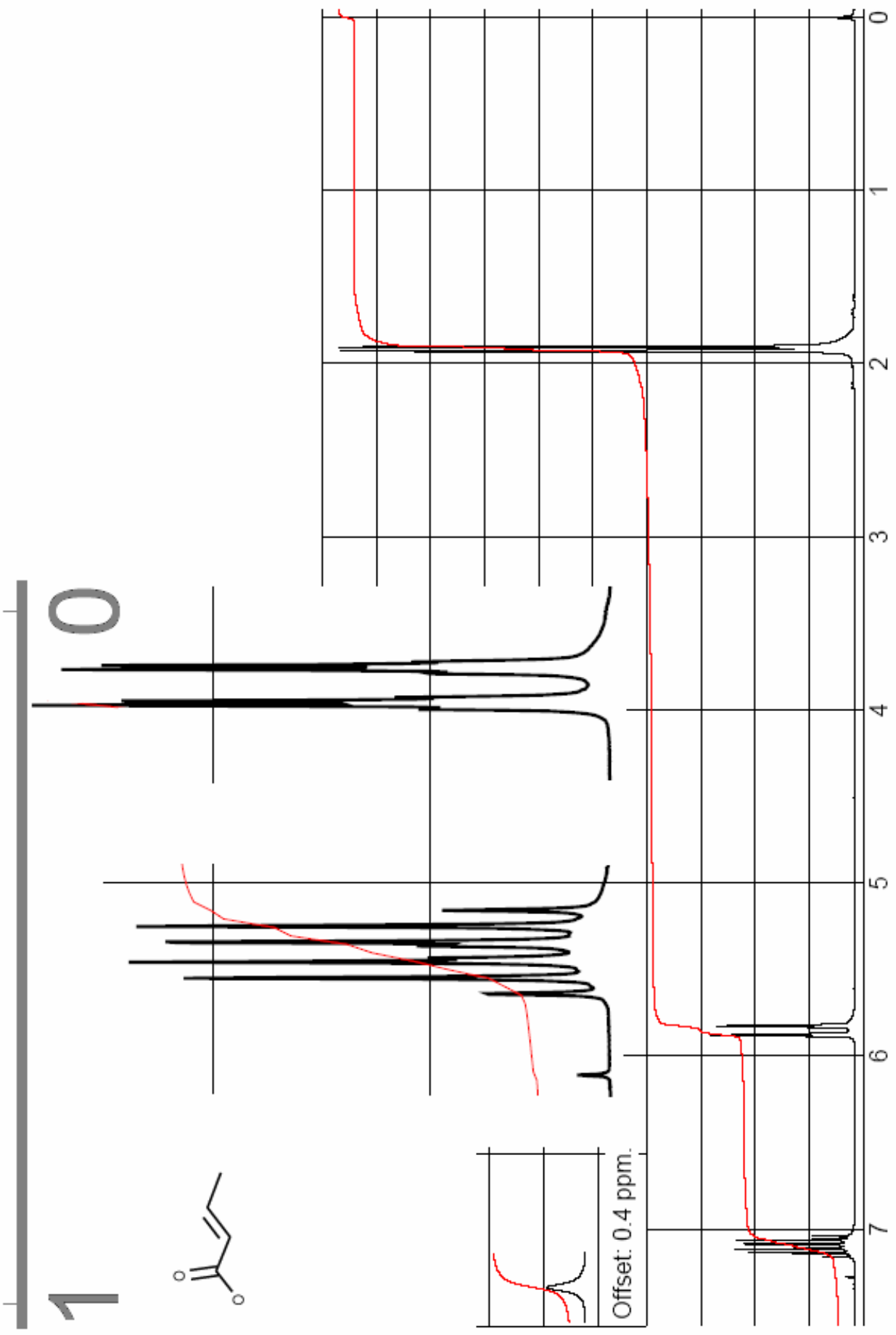
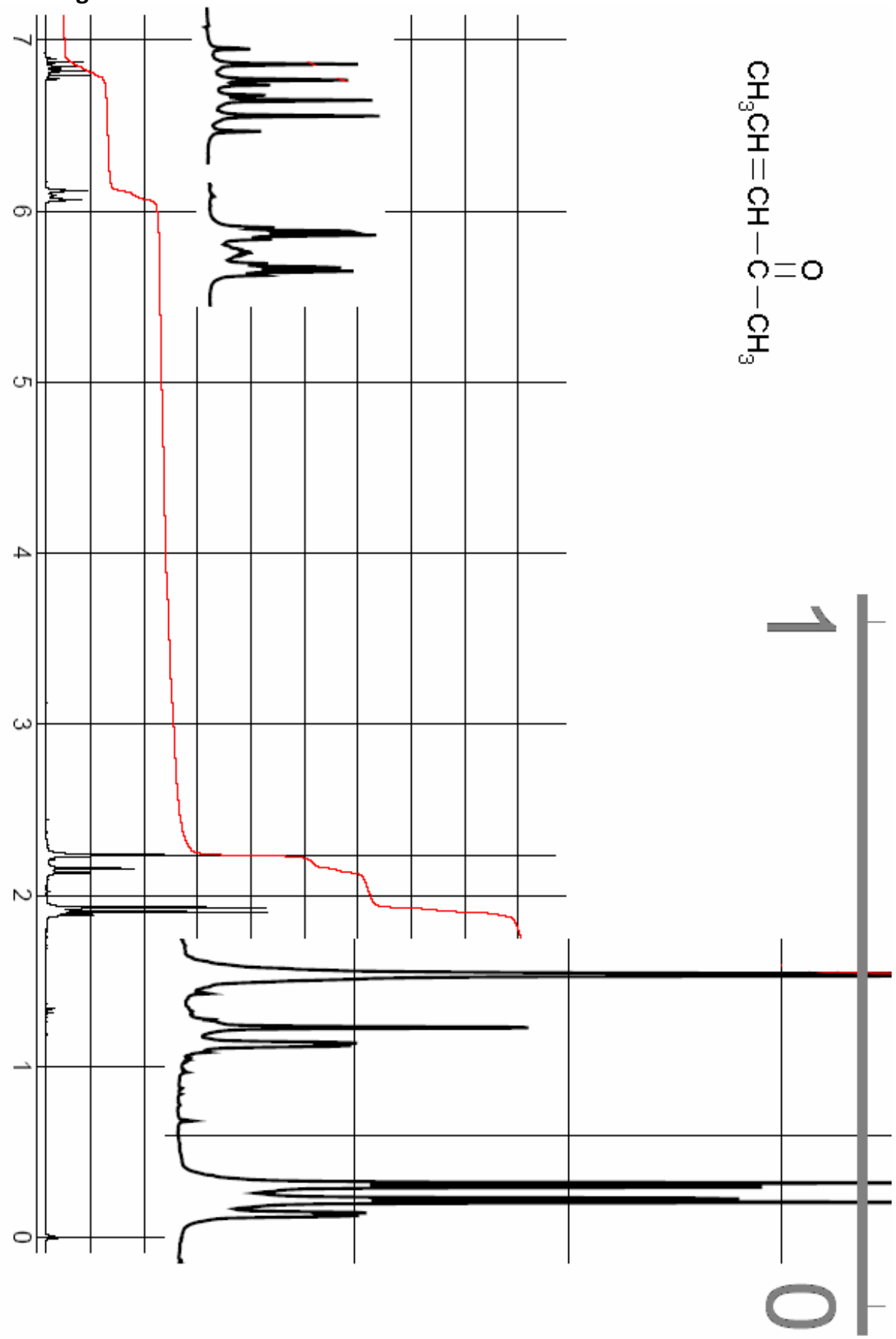
TD 1 Figure 2



TD 1 Figure 3



TD 1 Figure 4



TD 1 Figure 5