

Claude Sirlin
Faculté de chimie

Epreuve de spectroscopies
Master de chimie et biologie
Master de chemo-informatique
Session de janvier 2008

1 (6 points)

- a Quelle est la relation fondamentale de la spectroscopie ?
- b Quelle est l'expression de la fréquence de Larmor ?
- c Quelle est l'expression du déplacement chimique ?

Pour chaque question, explicitez le sens des notations utilisées.

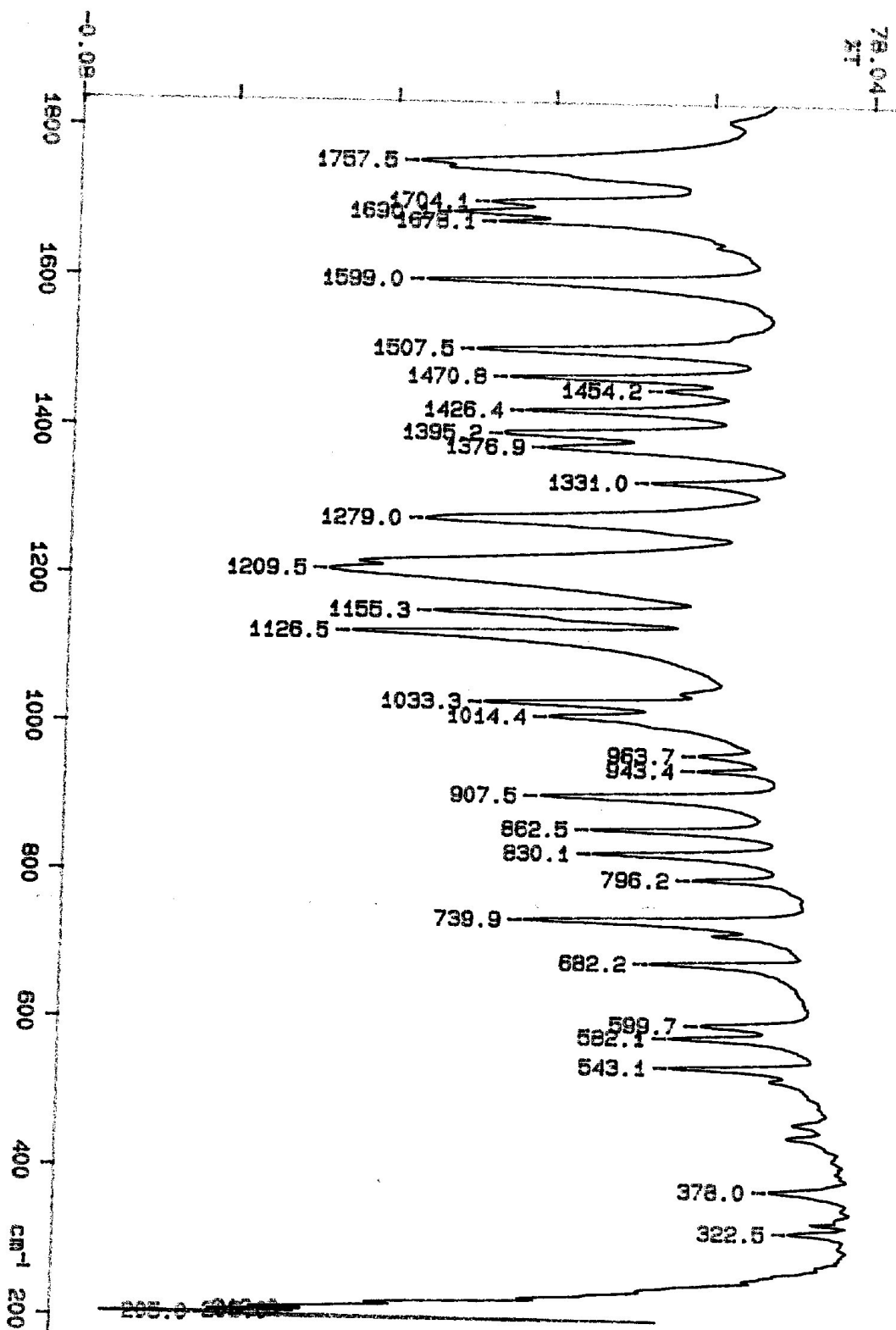
2 (14 points)

- a) Les spectres IR, RMN ^1H et ^{13}C de la molécule de formule brute $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{O}_4$ vous sont fournis. Analysez-les séparément en mettant en relief les données caractéristiques.
- b Synthétisez l'ensemble des informations et proposez une formule développée.
- c) Dans la mesure du possible, attribuez chaque atome d'hydrogène du spectre ^1H et chaque atome du spectre ^{13}C de l'énoncé précédent.

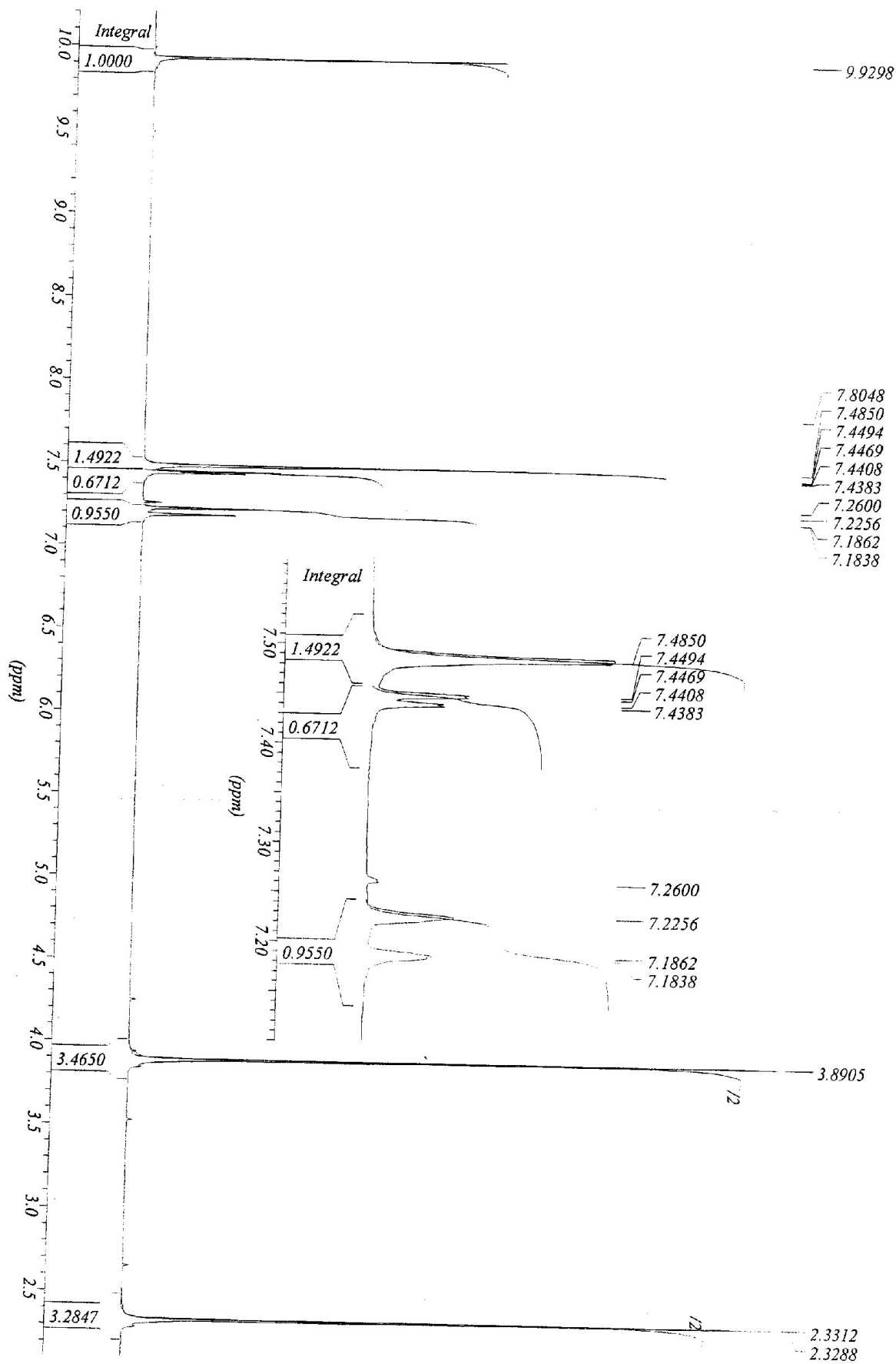
Documents autorisés : tous les documents distribués en cours et en TD.

PERKIN ELMER

78.04
21



01/11/23 17:49 ah
X: 16 scans, 4.0cm-1, apod weak



Current Data Parameters
NAME p6cs001
EXPNO 2
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20020113
Time 12.10

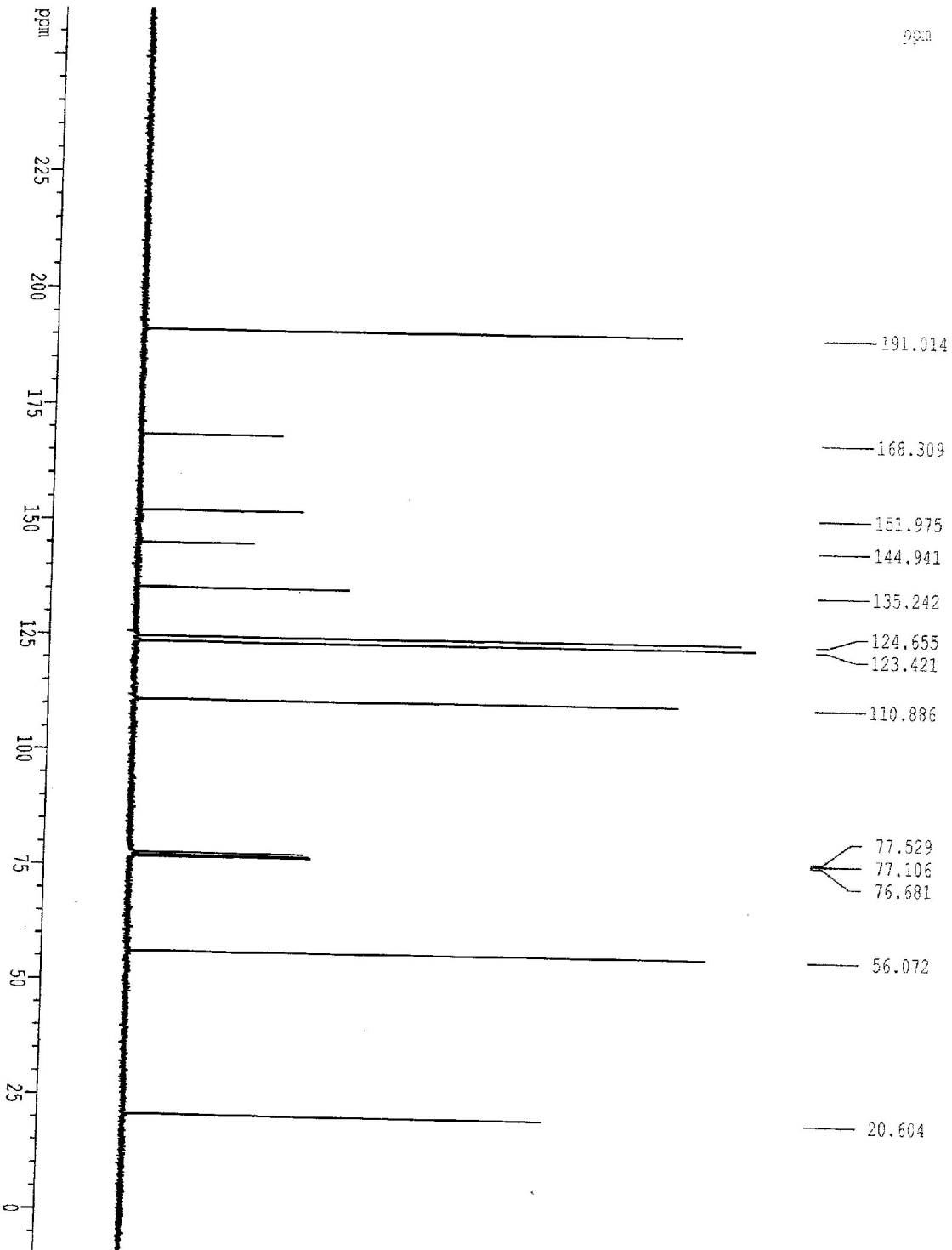
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm PRCNP SW1
PULPROG zgpg30
TD 32768
SOLVENT CDCl3
NS 1000
DS 2
SWH 20325.203 Hz
FIDRES 0.620276 Hz
AQ 0.8061429 sec
RG 23170.5
DE 24.600 usec
TE 10.00 usec
D1 300.0 K
d11 0.80000001 sec
0.03000000 sec

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.50 usec
PL1 0.00 dB
SFO1 75.477243 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 100.00 usec
PL2 0.00 dB
PL12 19.37 dB
SFO2 300.1316507 MHz

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 75.4677480 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

1D NMR plot parameters
CX 22.00 cm
CY 11.00 cm
FLP 259.847 ppm
F1 19610.08 Hz
F2P -9.476 ppm
F2 -715.12 Hz
PPMCM 12.24196 ppm/cm
HZCM 923.87299 Hz/cm



Current Data Parameters

NAME pccs001
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20020113
Time 11.42
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm PHNP Swi
PULPROG dept135
TD 32768
SOLVENT CDCl3
NS 200
DS 2
SWH 15822.785 Hz
FIDRES 0.482873 Hz
AQ 1.0355188 sec
RG 13004
DM 31.600 usec
DE 10.00 usec
TE 300.0 K
CNS12 130.0000000
D1 2.00000000 sec
d2 0.00384615 sec
d12 0.00002000 sec
DELTA 0.00001337 sec

CHANNEL F1

NUC1 13C
P1 10.50 usec
P2 21.00 usec
PL1 0.00 dB
SF01 75.4749517 MHz

CHANNEL F2

CEDEPRG2 waltz16
NUC2 1H
P3 10.75 usec
P4 21.50 usec
PCPD2 100.00 usec
PL2 0.00 dB
PL12 19.37 dB
SF02 300.1317257 MHz

F2 - Processing parameters

SI 32768
SF 75.4677480 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

1D NMR plot parameters

CX 22.00 cm
CY 5.00 cm
F1P 199.902 ppm
F1 15086.15 Hz
F2P -9.761 ppm
F2 -736.63 Hz
BPMCM 9.53013 ppm/cm
HZCM 719.21747 Hz/cm

