

# Analyse spectrale.

## Comment exploiter un spectre RMN du proton ?

<b>Thème :</b> Observer
<b>Type de ressources :</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Des pistes d'activités</li> <li>- Des spectres RMN illustrant les notions du programme</li> </ul>
<b>Notions et contenus : Spectres RMN du proton</b> Identification de molécules organiques à l'aide : <ul style="list-style-type: none"> <li>- du déplacement chimique ;</li> <li>- de l'intégration ;</li> <li>- de la multiplicité du signal : règle des (n+1)-uplets.</li> </ul>
<b>Compétences exigibles</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Relier un spectre RMN simple à une molécule organique donnée, à l'aide de tables de données ou de logiciels.</li> <li>- Identifier les protons équivalents. Relier la multiplicité du signal au nombre de voisins.</li> </ul>
<b>Compétences préambule cycle terminal</b> <u>Démarche scientifique</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Mettre en œuvre un raisonnement</li> <li>- Formuler des hypothèses pertinentes</li> <li>- Confronter des hypothèses à des résultats expérimentaux</li> <li>- Présenter les résultats obtenus</li> </ul>
<b>Compétences sur « Extraire et exploiter »</b> <u>Extraire des informations</u> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Tableaux de données</li> <li>- Spectres</li> </ul>
<u>Exploiter des spectres</u> <b>Prérequis</b> <i>« Associer un groupe caractéristique à une fonction dans le cas des alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique, ester, amine, amide »</i> <i>« Reconnaître les groupes caractéristiques dans les alcool, aldéhyde, cétone, acide carboxylique, ester, amine, amide »</i> <i>« Connaître les règles de nomenclature de ces composés ainsi que celles des alcanes et des alcènes »</i> <i>« Utiliser le nom systématique d'une espèce chimique organique pour en déterminer les groupes caractéristiques et la chaîne carbonée ».</i>
<b>Nature de l'activité</b> Exploitation de spectres RMN.
<b>Résumé :</b> Plusieurs niveaux de progression <ul style="list-style-type: none"> <li>- Niveau 1 : Activité de découvertes de la RMN. A partir de différents spectres RMN du proton fournis (feuille annexe ou site internet) et de tables de données, découvrir pas à pas la démarche à mettre en œuvre pour l'exploitation d'un spectre RMN ainsi que la signification du vocabulaire associé.</li> <li>- Niveau 2 : Exploitation de spectres.</li> <li>- Niveau 3 : Analyse d'une synthèse : identification du produit formé.</li> </ul>
Mots clefs : spectre RMN, RMN du proton ; spectroscopie ; groupes fonctionnels ; protons équivalents ; courbe intégrale ; multiplets ; déplacement chimique.
Académie où a été produite la ressource : TOULOUSE

### Remarque :

Tous les spectres utilisés dans ce document sont extraits du site « spectraschool » (cf. bibliographie).  
 Un PowerPoint animant les différentes activités proposées dans ce document est disponible sur le site de l'académie de Toulouse.

### Table des matières

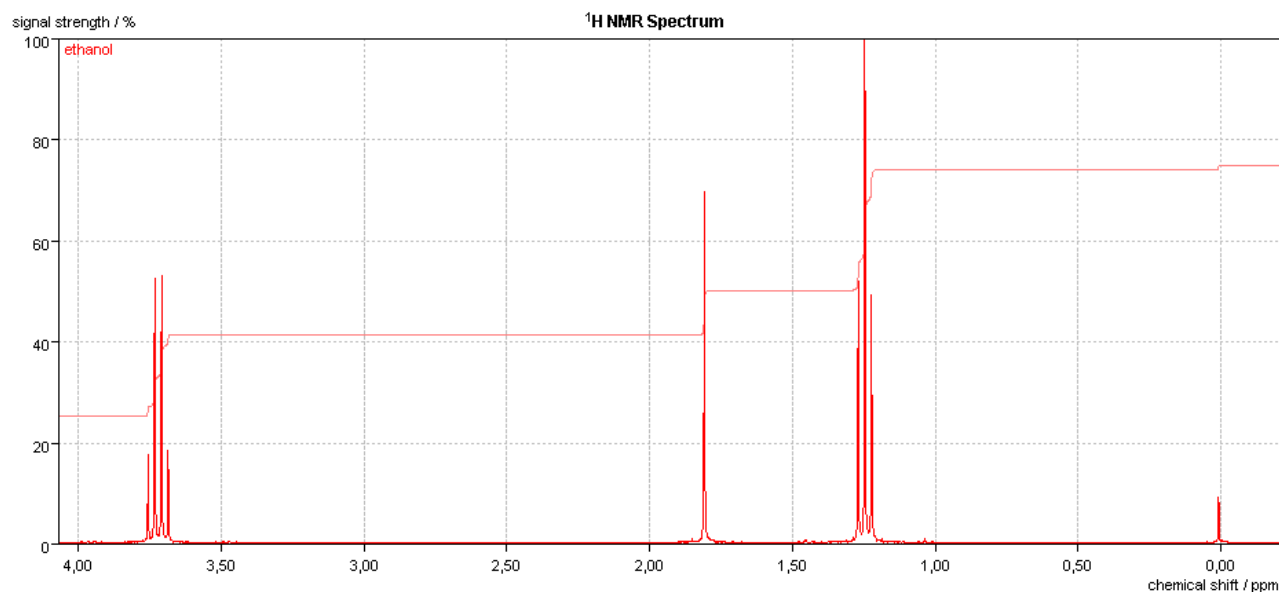
<b>1. Activité 1 : Comment analyser un spectre RMN ? .....</b>	<b>3</b>
1. Comment se présente un spectre RMN ? .....	3
2. Qu'appelle-t-on protons équivalents ? .....	3
3. Que représente le déplacement chimique ? .....	4
4. Quelles sont les informations données par la courbe d'intégration ? .....	4
5. Quelles sont les informations données par la multiplicité du signal ? .....	5
6. Annexe 1 .....	6
7. Annexe 2 .....	7
8. Annexe 3 .....	8
<b>2. Activité 2 : Comment relier un spectre RMN à une molécule organique ? .....</b>	<b>8</b>
1. Comment relier un spectre à une molécule donnée ? .....	9
2. Comment relier une molécule donnée à un spectre ? .....	10
3. Annexe 4 .....	11
4. Etude d'une molécule à caractère biologique : le paracétamol .....	12
5. Annexe 5 : spectre RMN du paracétamol .....	13
<b>3. Activité 3 : Etude du mécanisme d'une réaction.....</b>	<b>14</b>
<b>4. Tables de données .....</b>	<b>16</b>
<b>5. Bibliographie et sitographie .....</b>	<b>20</b>

# Analyse spectrale en RMN

## 1. Activité 1 : Comment analyser un spectre RMN ?

### 1. Comment se présente un spectre RMN ?

Faire apparaître sur le spectre RMN ci-dessous les termes suivants : déplacement chimique, référence (TMS), courbe d'intégration, massif, pic et multiplet



### 2. Qu'appelle-t-on protons équivalents ?

**Information :** Des protons équivalents sont des protons qui possèdent un environnement chimique identique dans une molécule.

Les spectres RMN des 3 molécules suivantes sont donnés en annexe 1 : éthanoate d'éthyle ; 2-méthylpropan-2-ol et l'éthanal.

#### Questions

- Ecrire les formules développées de ces 3 molécules (il est important de bien faire apparaître les différents H)
- Identifier les protons équivalents pour les 3 molécules étudiées.
- Peut-on faire un lien entre le nombre de massifs ou pics et le nombre de groupes de protons (équivalents ou individuel) sur les spectres RMN proposés en annexe 1 ?
- Peut-on associer pour chaque cas les massifs à ces groupes de protons sans informations supplémentaires ?
- Remarque : combien de pic(s) observerait-on dans le spectre de la propanone (acétone) ? justifier votre réponse.

### 3. Que représente le déplacement chimique ?

**Information :** Le déplacement chimique d'un proton,  $\delta$ , est caractéristique de son environnement. Tous les protons équivalents apparaîtront donc avec un même déplacement chimique. La valeur de ce déplacement chimique,  $\delta$  exprimé en ppm, donne donc une information quant au groupement chimique auquel est associé le proton étudié. On peut trouver les valeurs de  $\delta$  dans des tables de données.

Extrait des tables de données : déplacement chimique de quelques types de protons

Type de proton	$\delta$ /ppm	Type de proton	$\delta$ /ppm
R-CH <sub>3</sub>	0,8 – 1,2	R-OH	0,5 -6
R –CH <sub>2</sub> -R	1,2 – 1,4	R-CO-H	9,5 -9,6
R – CH <sub>2</sub> -OH	3,3 – 3,4	-CH-O-COR (CH <sub>3</sub> à CH)	3,7 -4,8
R-CO-CH <sub>3</sub>	2,1 -2,6	-CH-COOR (CH <sub>3</sub> à CH)	2,0 -2,4

**Questions :** Déterminer les valeurs des déplacements chimiques des différents massifs pour les 3 molécules précédentes. Vérifier que les valeurs sont conformes à celles de l'extrait de table de données proposé ci-dessus.

### 4. Quelles sont les informations données par la courbe d'intégration ?

**Information :** L'aire sous les pics est proportionnelle au nombre de protons équivalents correspondant à ce pic. La courbe d'intégration permet de calculer le rapport des aires sous le pic. Le rapport des hauteurs  $h$  (équivalent au rapport des aires) est égal au rapport du nombre de protons équivalents de chaque signal.

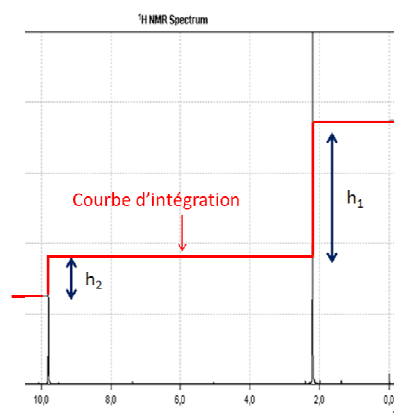
#### Données

Les spectres RMN et les courbes d'intégration sont donnés en annexe 2 pour les 3 molécules suivantes : 2-méthylpropan-2-ol, éthanal et éthanol

#### Questions

- En utilisant la courbe d'intégration et sans utiliser la table de données, identifier les différents pics.

#### Schéma explicatif :



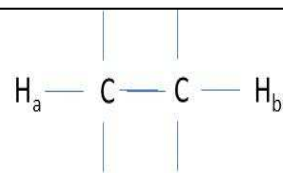
$$h_1/h_2 = n^b \text{ protons pic 1} / n^b \text{ protons pic 2}$$

## 5. Quelles sont les informations données par la multiplicité du signal ?

### Définition :

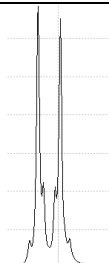
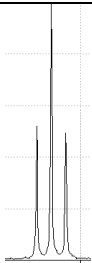
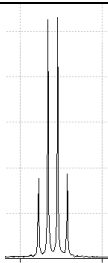
Les protons équivalents n'ayant pas d'autres protons dans leur voisinage donnent un signal unique, soit un pic appelé singulet.

Lorsque des groupes de protons équivalents sont voisins (par exemple  $H_a$  et  $H_b$ ), leur influence mutuelle modifie le signal qui apparaît sous forme d'un multiplet (pics très rapprochés constituant un massif).



$H_a$  et  $H_b$  sont « voisins »

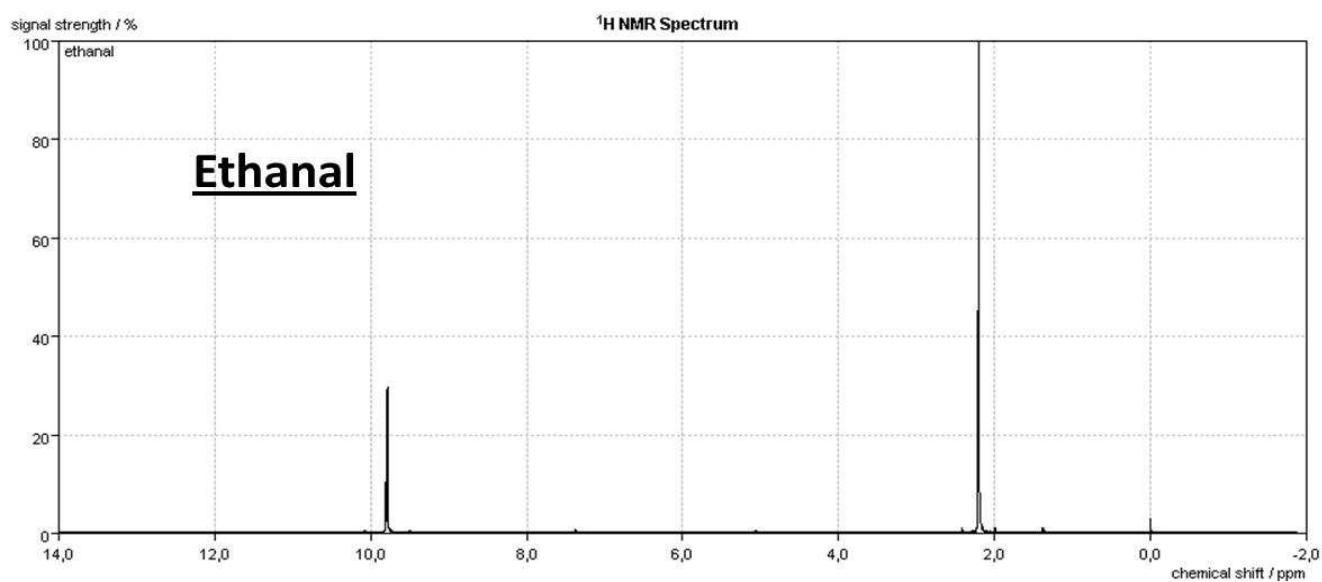
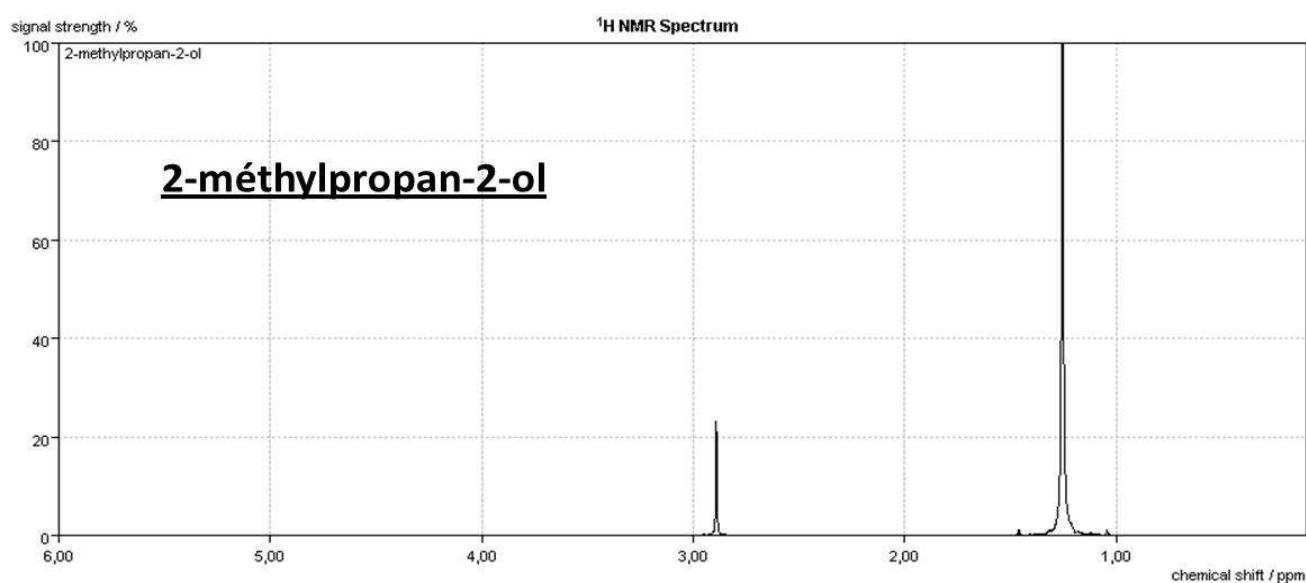
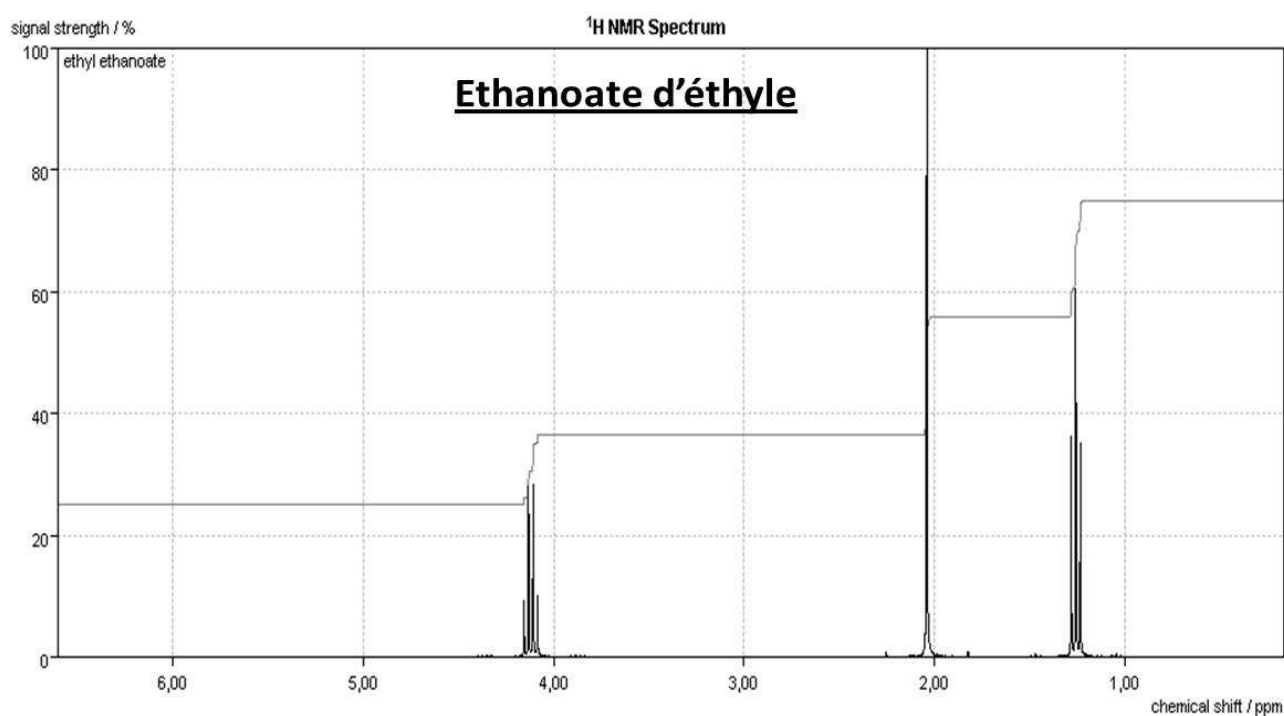
Règle des (n+1)-uplets : n protons équivalents voisins (portés par des carbones adjacents) conduisent à signal constitué de (n+1) pics

Nombre de voisins n	1	2	3
Nombre de pics	Doublet – 2 pics	Triplets – 3 pics	Quadruplets – 4 pics
allure			

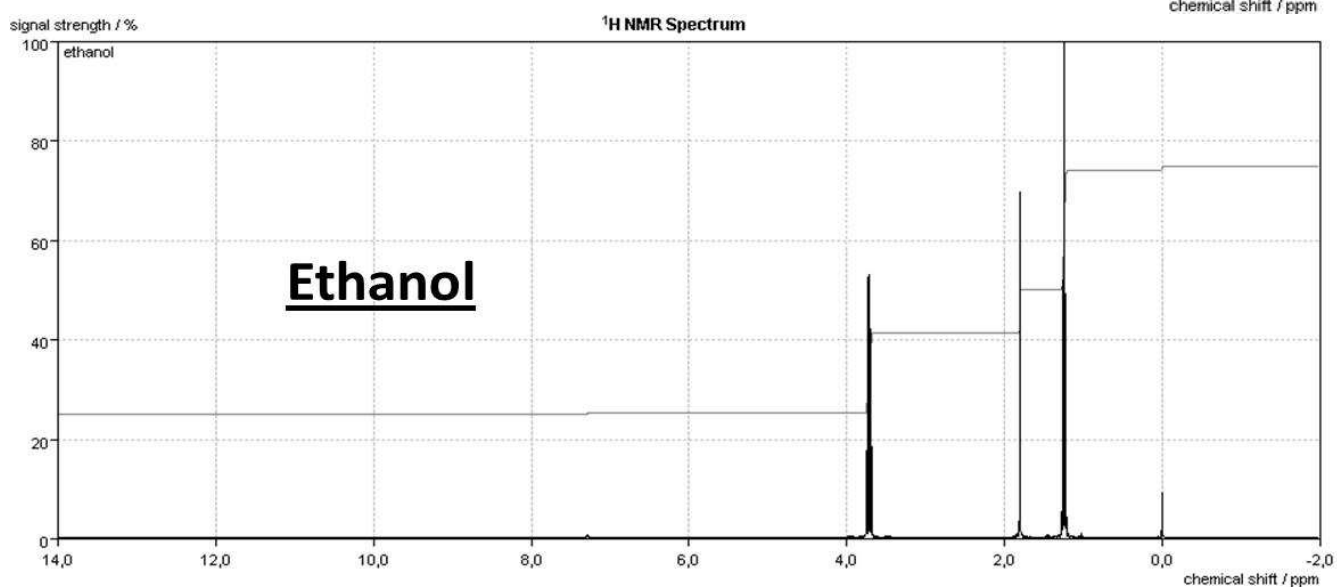
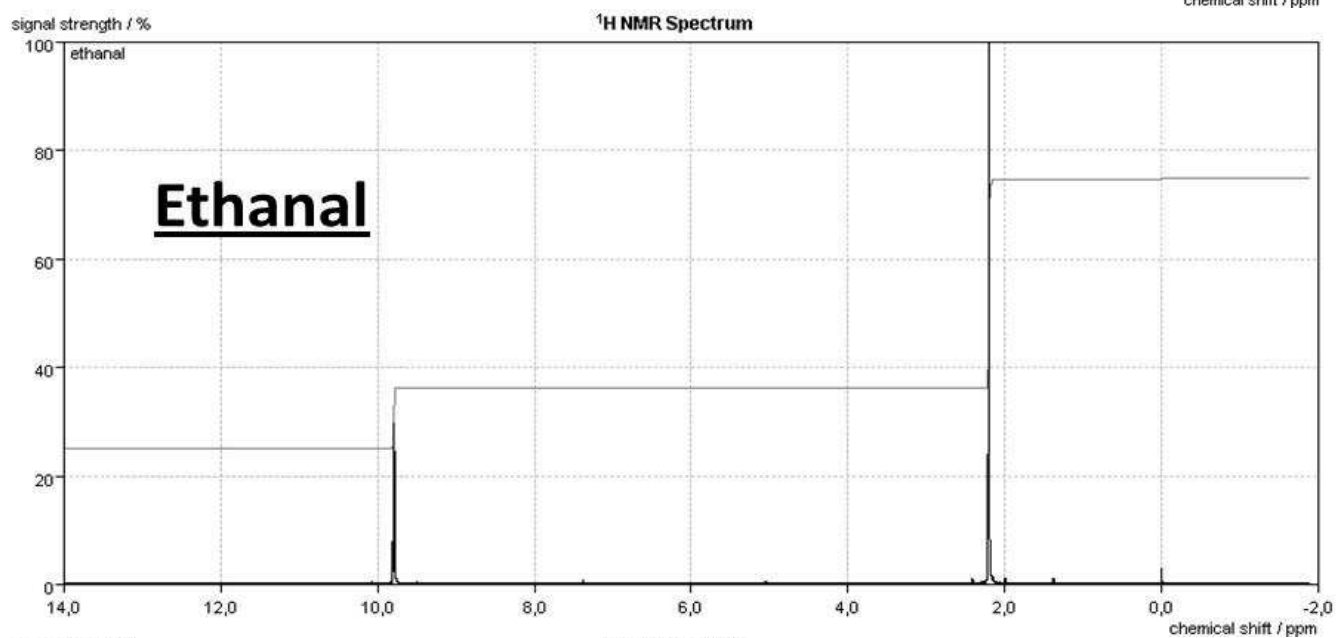
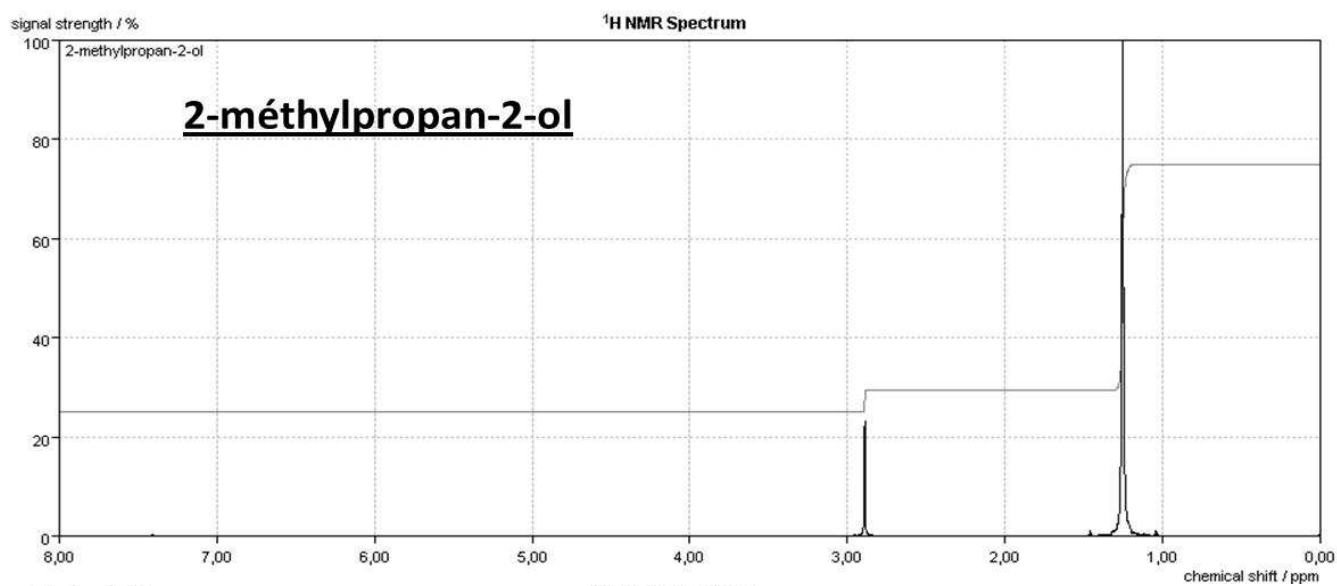
### Questions

- Pour les molécules propan-2-ol, de la butanone et du propanoate de méthyle, identifier les protons équivalents et déterminer la multiplicité du signal.
- Confronter vos prévisions aux spectres donnés en annexe 3.

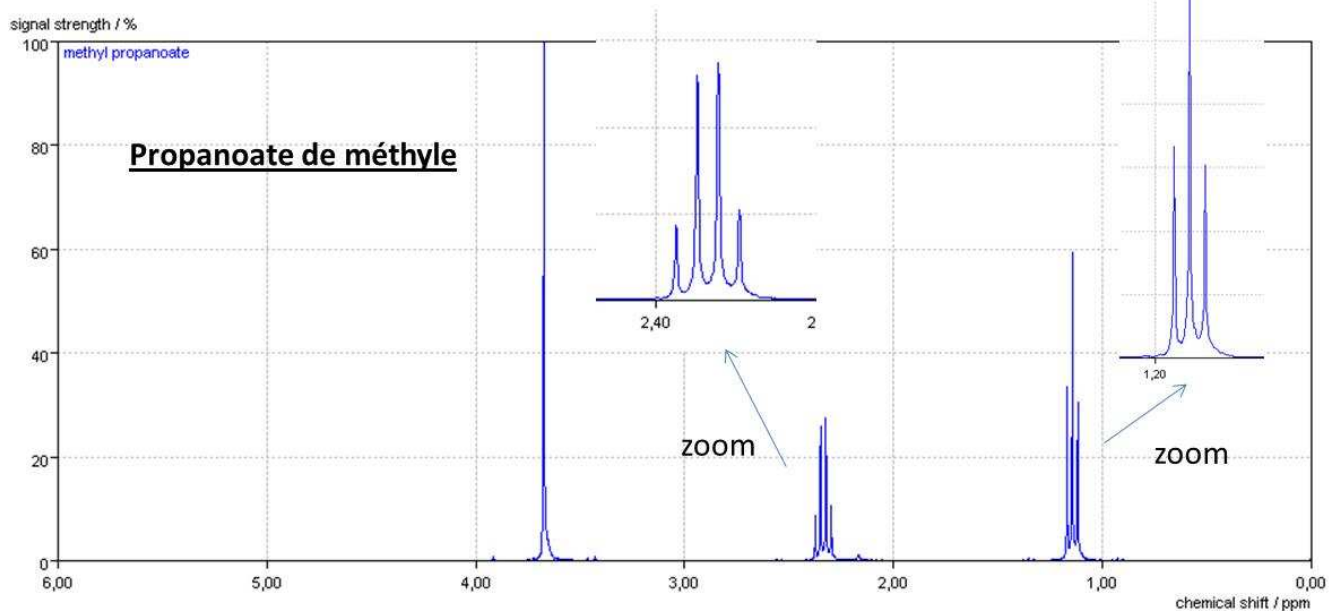
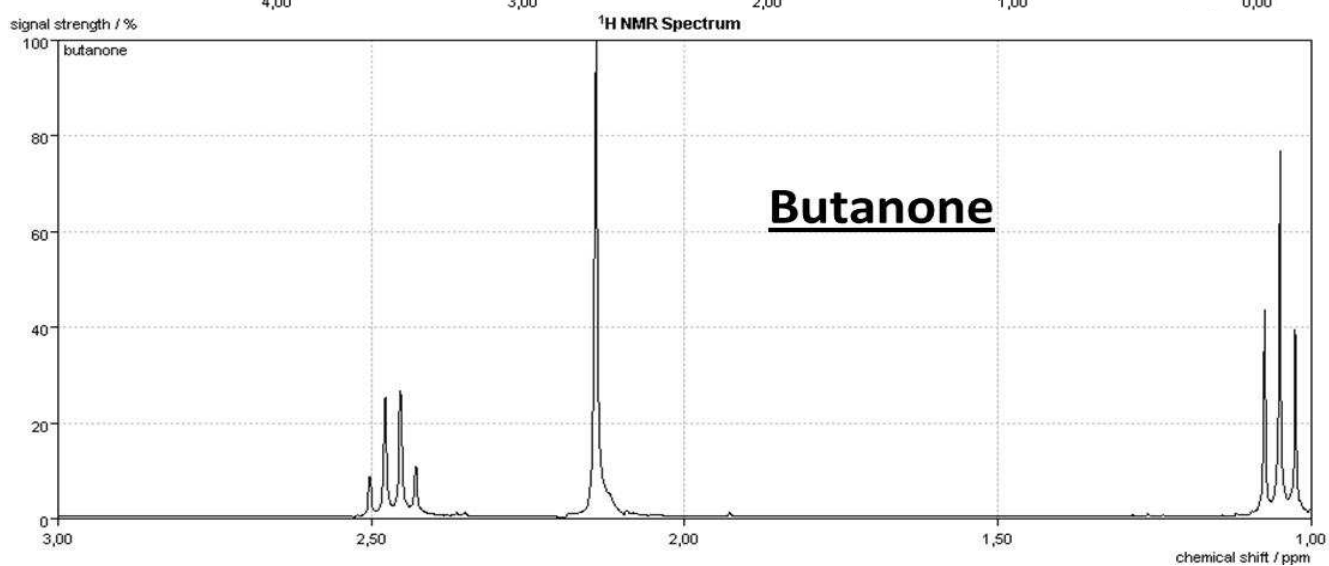
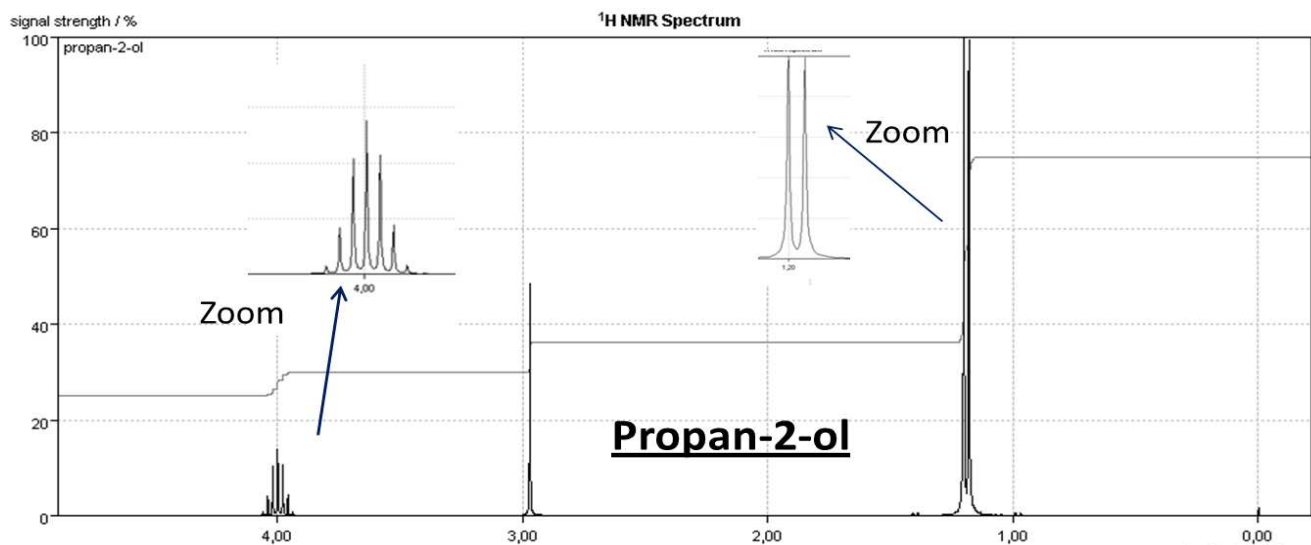
## 6. Annexe 1



## 7. Annexe 2



## 8. Annexe 3





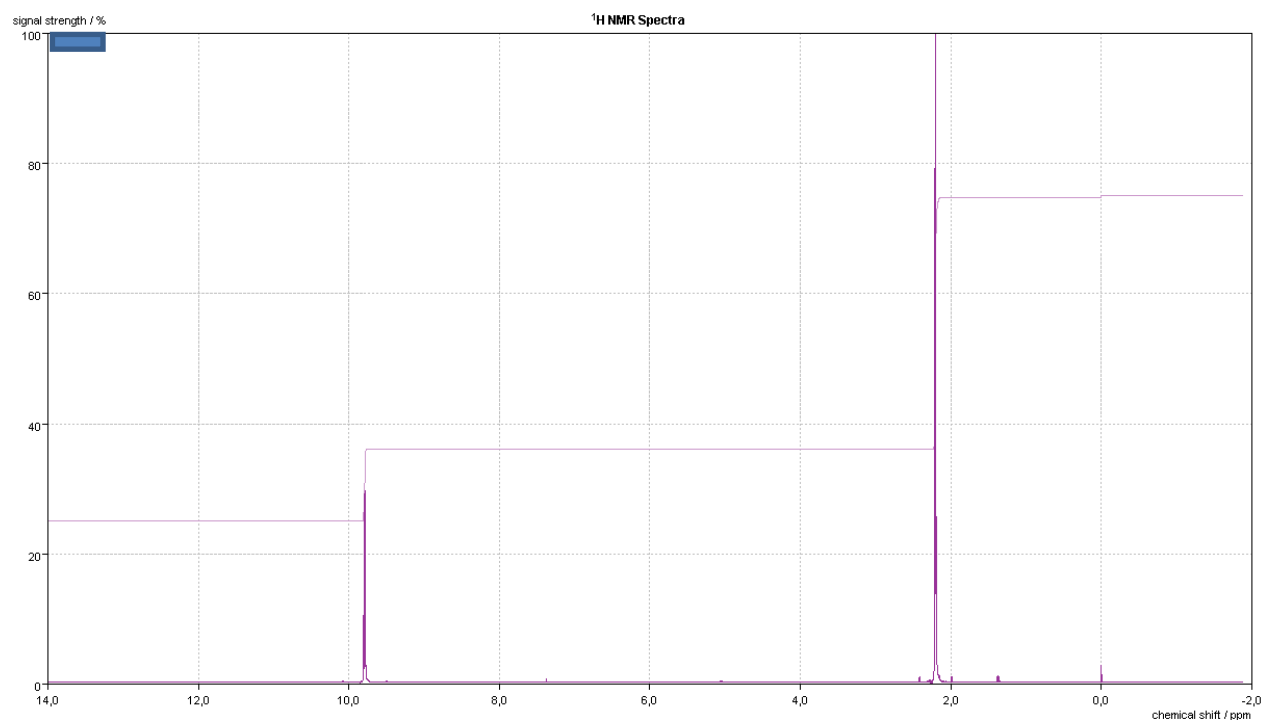
## Activité 2 : Comment relier un spectre RMN à une molécule organique ?

### 1. Comment relier un spectre à une molécule donnée ?

Parmi les molécules suivantes, laquelle peut correspondre à ce spectre ? Justifier votre raisonnement.

Données : table de données des déplacements chimiques + spectre.

$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$  ou  $\text{CH}_3\text{-CHO}$  ou  $\text{CH}_3\text{-COOH}$  ou  $\text{CH}_3\text{-COO-CH}_3$  ou  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$



### Corrigé

$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$  : tous les hydrogènes sont ici équivalents, un seul pic.

$\text{CH}_3\text{-COOH}$  : déplacement du  $\text{COOH}$  entre 8 et 12 ppm.

$\text{CH}_3\text{-COO-CH}_3$  : les deux pics devraient avoir des paliers d'intégration de même hauteur.

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$  : ici, il devrait y avoir 3 massifs.

$\text{CH}_3\text{-CHO}$  : 2 pics avec  $\delta(-\text{CHO}) = 9,9 \text{ ppm}$  et  $\delta(\text{CH}_3\text{-CO-R}) = 2,2 \text{ ppm}$

## 2. Comment relier une molécule donnée à un spectre ?

Parmi les spectres donnés en annexe 4, lequel correspond au 1-bromopropane ? Justifier votre raisonnement.

Données : table de données des déplacements chimiques + spectres de différentes molécules non identifiées (cf. document ci-contre).

(Pour information du professeur : il s'agit du 1-bromopropane, de la butanone, du 2-méthylpropan-2-ol et de l'éthanol)

### Corrigé

Le spectre (3) correspond au 1-bromopropane ( $C_3H_7Br$ )

Il faut 3 massifs puisqu'il y a 3 groupes de protons équivalents, on élimine le spectre (2).

Les protons  $H_{(a)}$  possèdent 2 voisins équivalents, ils conduisent à un triplet,

les protons  $H_{(c)}$  possèdent 2 voisins équivalents, ils conduisent à un triplet.

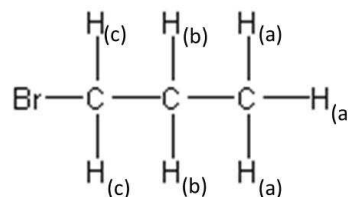
Les protons  $H_{(b)}$  possèdent (3 + 2) voisins, ils conduisent à un multiplet.

Les spectres (1) et (4) sont à éliminer puisqu'ils possèdent un singulet.

Attribution des massifs aux groupes de protons équivalents à l'aide des courbes intégrales :

Pour le massif (1) à 1 ppm :  $h_1 = 1,5$   $h_2$  et  $h_2 = h_3$ . On sait de plus que la molécule possède 7 protons, par conséquent le massif (1) compte pour 3 protons et les 2 autres massifs pour 2 protons. Le massif à 1 ppm correspond aux protons  $H_{(a)}$ . Le massif (2) correspond aux protons  $H_{(b)}$ , avec son multiplet et le massif (3) correspond donc aux protons  $H_{(c)}$

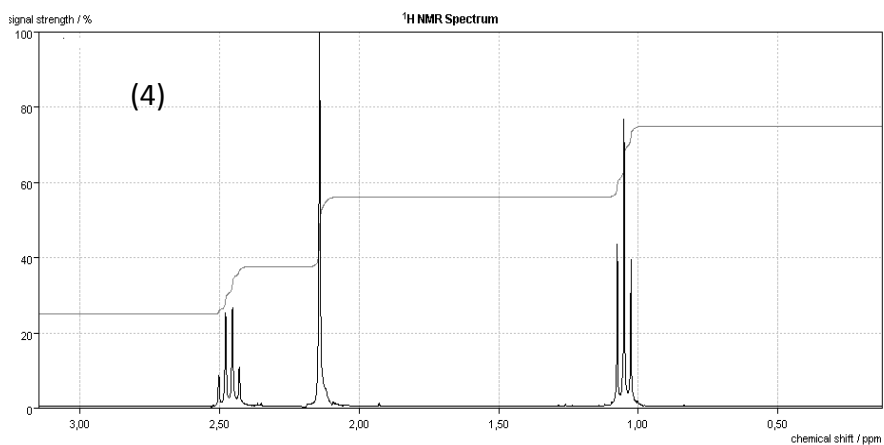
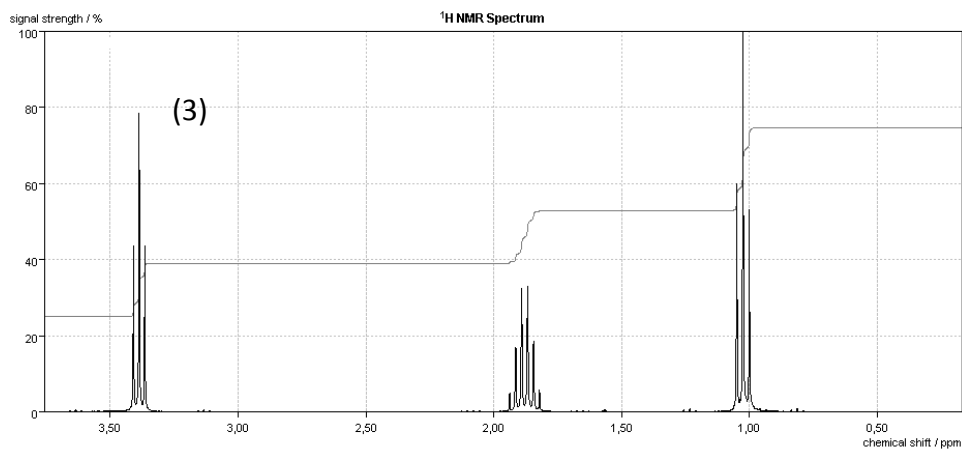
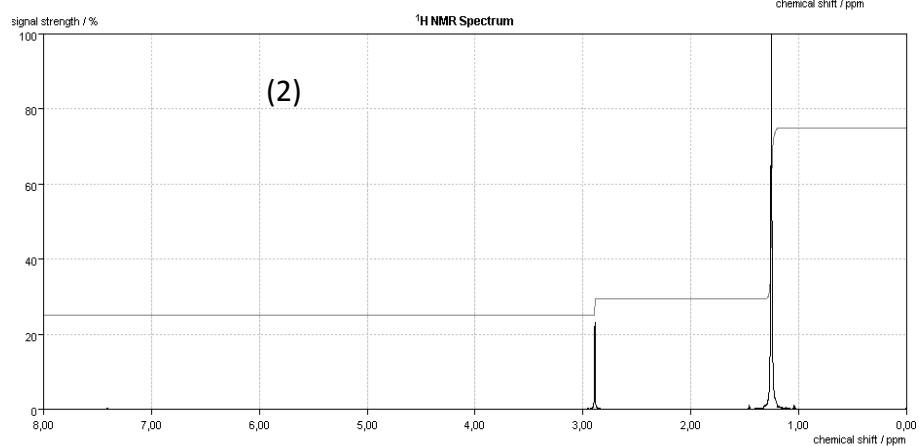
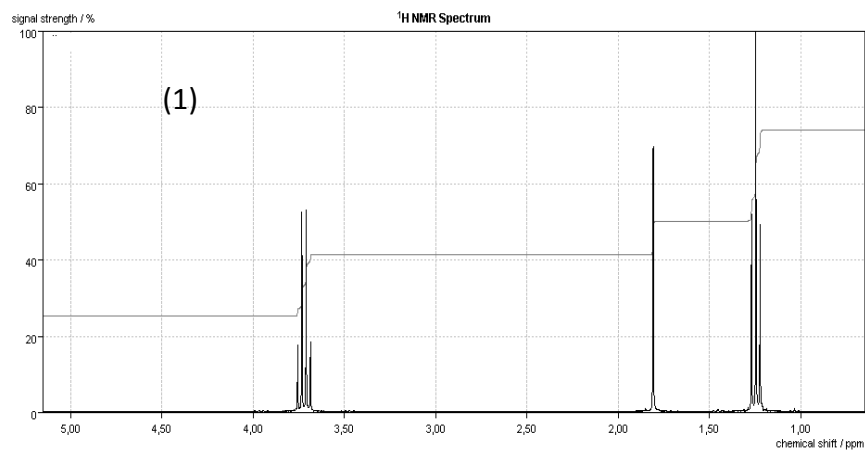
Vérification avec les déplacements chimiques :  $H_{(a)}$  à 1 ppm correspond au déplacement chimique de  $RCH_3$  (0,8-1,2 ppm),  $H_{(b)}$  à  $RCH_2R$  (1,2-2 ppm) et  $H_{(c)}$  correspond à  $-C-CH_2-Br$  (environ 3 ppm)



### Remarque professeur à propos des protons $H_{(b)}$

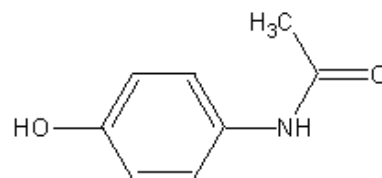
Les protons voisins de  $H_b$  ne sont pas rigoureusement équivalents (influence de  $Br$  sur  $H_c$ ). Mais si on suppose que les constantes de couplage des protons  $H_{(a)}$  et  $H_{(c)}$  avec  $H_b$  sont sensiblement égales, on peut alors prévoir un sextuplet, ce que l'on peut admettre au niveau de la terminale.

### 3. Annexe 4



#### 4. Etude d'une molécule à caractère biologique : le paracétamol

Analyser le spectre RMN du paracétamol (annexe 5)

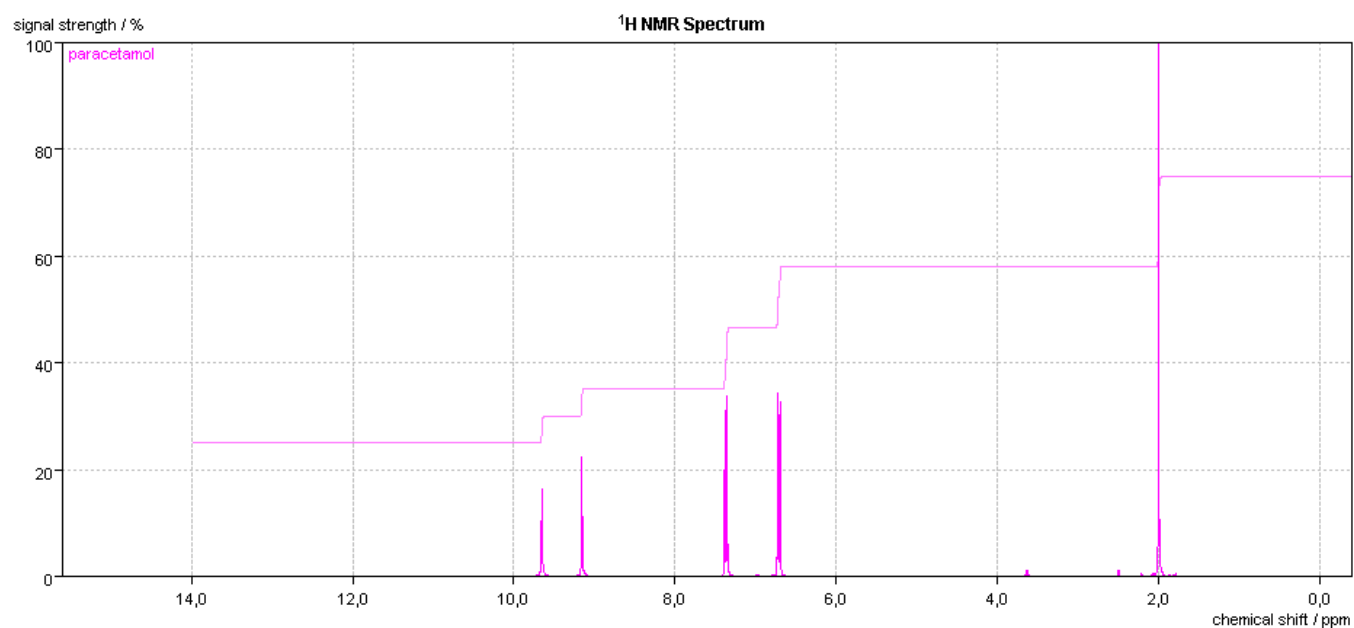


#### Suggestions de questions et de méthode à mettre en jeu pour analyser un spectre plus complexe

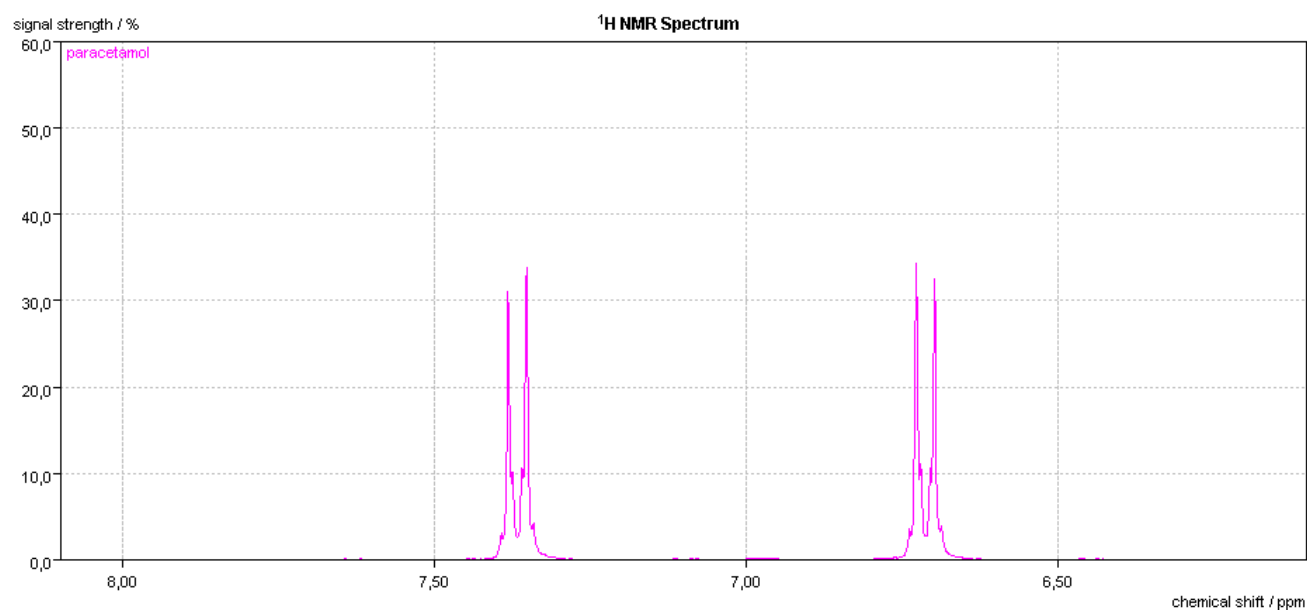
- Sur la molécule identifier les protons équivalents
- Relever et présenter sous forme de tableau les données relatives à chaque « massif » (déplacement chimique, intégration, multiplicité).
- Interpréter alors le spectre RMN de la molécule de paracétamol en justifiant votre démarche : analyse des multiplets et de la courbe d'intégration, analyse des déplacements chimiques en comparaison avec les valeurs données par les tables. On admettra aussi que le déplacement chimique pour un OH est plus grand que celui d'un NH, de même pour CH benzénique, le déplacement est plus important s'il est à proximité d'un atome d'azote que s'il est à proximité d'un atome d'oxygène.

Numéro du massif			
Valeur du déplacement chimique			
Nombre de pics (multiplicité)			
Hauteur de la courbe d'intégration			
Nombre de protons équivalents			

## 5. Annexe 5 : spectre RMN du paracétamol

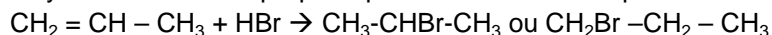


### Zoom sur les massifs 2 et 3



### 3. Activité 3 : Etude du mécanisme d'une réaction

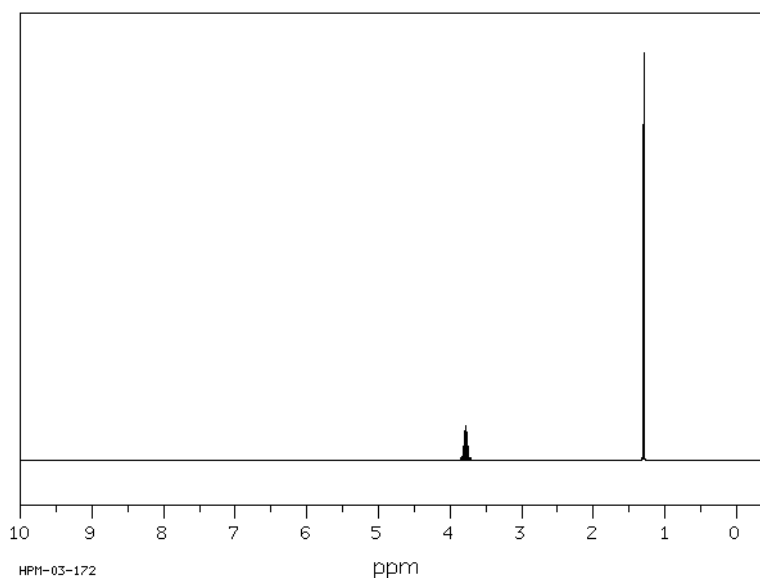
L'hydrobromation du propène peut conduire à deux produits différents selon le bilan suivant :



A l'issue de la synthèse, on trace le spectre RMN du produit obtenu.

Ce spectre montre 1 pic (singulet) à 1,3 ppm ; un massif complexe à 3,8 ppm. La courbe d'intégration montre qu'il y a un rapport 6 entre ces 2 signaux.

Spectres du 2-bromopropane (qu'il est inutile de donner aux élèves)



#### Suggestions de questions

- Parmi les 2 produits éventuellement possibles, identifier celui qui est effectivement obtenu, en argumentant votre réponse.
- Représenter l'allure du massif à 3,8 ppm, en justifiant votre réponse

**Prolongement de l'exercice en liaison avec la partie du programme** « Transformation en chimie organique – aspect microscopique »

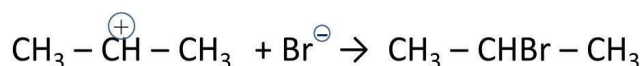
#### Informations :

- Pour cette réaction, on peut proposer le mécanisme suivant :

- Etape 1 :



- Etape 2 :



- Lors de ce mécanisme on passe par l'intermédiaire d'un carbocation (ion positif, dérivé d'un composé organique, la charge positive étant portée par un atome de carbone). On admettra qu'un carbocation tertiaire est plus stable qu'un carbocation secondaire, lui-même plus stable qu'un carbocation primaire.
- Electronegativité de Br > celle de H.

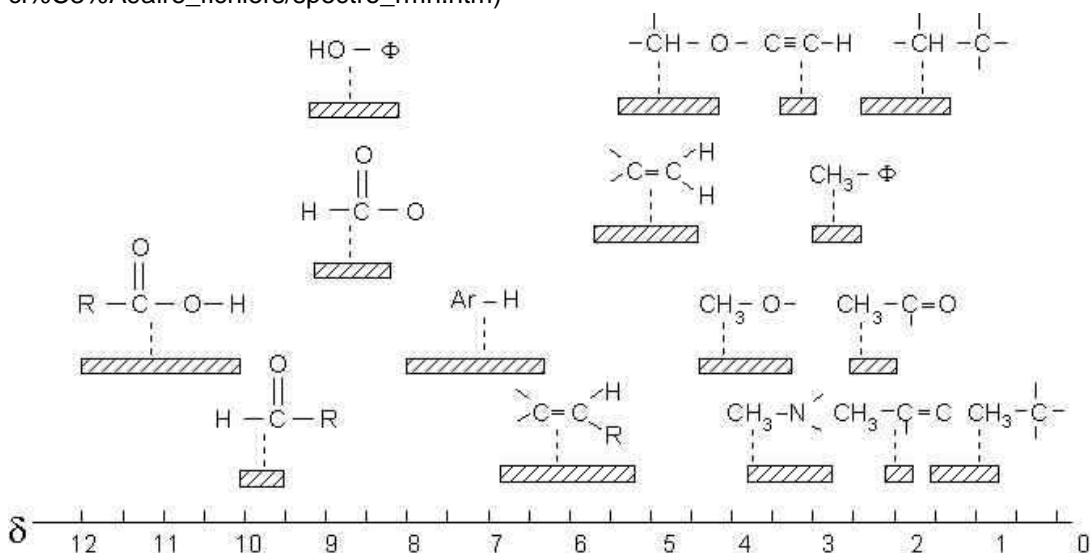
**Suggestions de questions :**

- Identifier les sites donneurs, les sites accepteurs de doublets dans les réactifs, identifier les sites qui réagissent (ne pas oublier de faire apparaître les doublets non liants si nécessaire).
- Représenter le mouvement des électrons à l'aide d'une flèche courbe pour les 2 étapes de ce mécanisme.
- Quelle est la nature de la réaction lors de chaque étape : addition, substitution ou élimination ?
- Quel autre carbocation était-il possible d'envisager ? Pourquoi ne se forme-t-il pas ?
- Ce mécanisme permet-il d'expliquer les résultats expérimentaux ?

## 4. Tables de données

**Table 1**

([http://www.ac-nancy-metz.fr/enseign/physique/chim/Jumber/SPECTRO\\_RMN/Resonance\\_magn%C3%A9tique\\_nucl%C3%A9aire\\_fichiers/spectro\\_rmn.htm](http://www.ac-nancy-metz.fr/enseign/physique/chim/Jumber/SPECTRO_RMN/Resonance_magn%C3%A9tique_nucl%C3%A9aire_fichiers/spectro_rmn.htm))



R est un groupe aliphatique saturé ; Ar est un groupe aromatique

**Table 2** : tableau simplifié

Domaines de déplacements chimiques de quelques espèces de protons (est exprimé en ppm par rapport au tétraméthylsilane ( $\text{CH}_3)_4\text{Si}$  pris comme référence).

R désigne un radical aliphatique saturé.

Types d'atomes d'hydrogène (en gras)	Domaine de déplacements chimiques ( $\delta/\text{ppm}$ )
$\text{RCH}_3$ (alkyle primaire)	0,8 à 1,0
$\text{CH}_3-\text{CR}_2-\text{OH}$	1,1 à 1,3
$\text{R}_2\text{CH}_2$ (alkyle secondaire)	1,2 à 1,4
$\text{R}_3\text{CH}$ (alkyle tertiaire)	1,4 à 1,7
$\text{R}_2\text{C}=\text{CR}-\text{CH}_3$ (H en position allylique)	1,6 à 1,9
$\text{RCH}_2\text{OH}$	3,3 à 3,9
$\text{R}_2\text{C}=\text{CH}_2$ (alcène terminal)	4,6 à 5,0
$\text{R}_2\text{C}=\text{CHR}$	5,2 à 5,7
$\text{ROH}$	0,5 à 5,0



**Table 3 simplifié (d'après sujet BTS )**

H + environnement	déplacement chimique du proton (ppm)
<b><i>C-H voisins de C</i></b>	
C-CH- (CH <sub>3</sub> à CH)	0,9-1,5
-CH <sub>2</sub> -cycle	1,5
-C=C-CH- (CH <sub>3</sub> à CH)	1,6-2,3
-C≡C-H	3,1
-C=CH- (CH à CH <sub>2</sub> )	5,1-5,3
Ar-H	7,0-9,0
<b><i>O-H</i></b>	
R-OH (alcools)	0,7-5,5
Ar-OH (phénols)	4,2-7,1
R-CO-OH (acides carboxyliques)	8,5-13
C=C-OH (énols)	11-17
<b><i>N-H</i></b>	
R-NH- (alkylamines)	0,6-5
Ar-NH- (amines aromatiques)	2,9-4,7
R-CO-NH- (amides)	2,8-5
<b><i>C-H lié à O</i></b>	
R-CH-OH (alcools) (CH <sub>3</sub> à CH)	3,4-3,9
R-O-CH- (éthers) (CH <sub>3</sub> à CH)	3,3-3,7
Ar-O-CH (esters) (CH <sub>3</sub> à CH)	3,8-4,3
R-CO-O-CH (esters) (CH <sub>3</sub> à CH)	3,7-4,8
RCHO (aldéhydes)	9,9
<b><i>C-H lié à C=O</i></b>	
R-CO-CH (cétones) (CH <sub>3</sub> à CH)	2,2-2,7
HO-CO-CH-R (acides) (CH <sub>3</sub> à CH)	2,0-2,4
RO-CO-CH-R (esters) (CH <sub>3</sub> à CH)	2,0-2,4
<b><i>C-H lié à N</i></b>	
>N-CH- (amines) (CH <sub>3</sub> à CH)	2,3-2,8
NO <sub>2</sub> -CH- (dérivés nitrés)	4,2-4,7
<b><i>C-H lié à X</i></b>	
R-CH-Br (CH <sub>3</sub> à CH)	2,7-3,6
R-CH-Cl (CH <sub>3</sub> à CH)	3,0-4,0
R-CH-I (CH <sub>3</sub> à CH)	2,2-4,2

**Table 3 : Extrait du sujet BTS chimie 2010****SPECTROSCOPIE DE RMN <sup>1</sup>H**

Domaines de déplacements chimiques des protons des groupes M (méthyle CH<sub>3</sub>, méthylène CH<sub>2</sub> et méthine CH) en α ou en β de groupes caractéristiques.

type de proton	δ en ppm	type de proton	δ en ppm
M-CH <sub>2</sub> R	0,8-1,6	M-C-CH <sub>2</sub> R	0,9-1,6
M-C=C	1,6-2,0	M-C-C=C	1,0-1,8
M-C≡C	1,7-2,8	M-C-C≡C	1,2-1,8
M-Ph	2,2-2,8	M-C-Ph	1,1-1,8
M-Cl	3,0-5,0	M-C-Cl	1,5-2,0
M-Br	3,4-4,1	M-C-Br	1,8-1,9
M-I	3,1-4,2	M-C-I	1,7-2,1
M-OH et M-OR	3,2-3,6	M-C-OH et M-C-OR	1,2-1,8
M-OPh	3,8-4,6	M-C-OPh	1,3-2,0
M-O-CO-R	3,6-5,0	M-C-O-CO-R	1,3-1,8
M-O-CO-Ph	3,8-5,0	M-C-O-CO-Ph	1,6-2,0
M-CHO et M-CO-R	2,1-2,6	M-C-CHO	1,1-1,7
M-CO-Ph	3,8-5,0	M-C-CO-R	1,1-1,8
M-CO-OH et M-CO-OR	1,8-2,8	M-C-CO-Ph	1,1-1,9
M-CO-NR <sub>2</sub>	1,8-2,2	M-C-CO-OR	1,1-1,9
M-C≡N	2,2-3,0	M-C-CO-NR <sub>2</sub>	1,1-1,8
M-NH <sub>2</sub> et M-NR <sub>2</sub>	2,2-3,0	M-C-C≡N	1,2-2,0
M-NH-CO-R	3,0-3,8	M-C-NH-CO-R	1,1-1,9
M-NO <sub>2</sub>	4,1-4,4	M-C-NO <sub>2</sub>	1,6-2,5
M-SH et M-SR	2,1-5,1	M-C-SH et M-C-SR	1,3-1,9

**Domaines de déplacements chimiques de divers protons**

Type de proton	δ (ppm)	Type de proton	δ (ppm)
>C(cycle)=CH <sub>2</sub>	4,6	-CO-OH	8,5-13
>C=CH <sub>2</sub>	5,3	>C=C-OH	11-17
-C=CH-	5,1	Ph-H	7,2
-C=CH- (cyclique)	5,3	R-OH	0,5-5,5
R-C≡CH	3,1	Ar-OH	4,0-7,5
Ar-H	7,0-9,0	Ar-OH (avec liaison H intramoléculaire)	5,5-12,5
>C=CH-CO-	5,9	R-NH-	0,5-3,0
-CH=C-CO-	6,8	Ar-NH-	3,0-5,0
R-CHO	9,9	R-CO-NH-	5,0-8,5
H-CO-O-	8,0	CHCl <sub>3</sub>	7,2
H-CO-N<	8,0	H <sub>2</sub> O	≈ 5,0

**Table 4 : Déplacement chimique des protons des groupes méthyle, méthylène et méthyne en ppm, le TMS étant pris comme référence**

R est un groupe aliphatique saturé ; Ar est un groupe aromatique.

CH <sub>3</sub> -		-CH <sub>2</sub> -		-C<	
proton	δ	proton	δ	proton	δ
CH <sub>3</sub> -C	0,9	-C-CH <sub>2</sub> -C	1,3	-C-CHC	1,5
CH <sub>3</sub> C-C-C=C	1,1	-C-CH <sub>2</sub> -C-C=C	1,7	-C-CH-C-O	2,0
CH <sub>3</sub> -C-O	1,4	-C-CH <sub>2</sub> -C-O	1,9	-CH-Ar	3,0
CH <sub>3</sub> -C=C	1,6	-C-CH <sub>2</sub> -C=C	2,3	-C-CH-CO-R	2,7
CH <sub>3</sub> -Ar	2,3	-C-CH <sub>2</sub> -Ar	2,7	-C-CH-O-R	3,7
CH <sub>3</sub> -CO-R	2,2	-C-CH <sub>2</sub> -CO-R	2,4	-C-CH-O-H	3,9
CH <sub>3</sub> -CO-Ar	2,6	-C-CH <sub>2</sub> -CO-O-R	2,2	-C-CH-O-CO-R	4,8
CH <sub>3</sub> -CO-O-R	2,0	-C-CH <sub>2</sub> -O-R	3,4	-C-CH-N	2,8
CH <sub>3</sub> -CO-O-Ar	2,4	-C-CH <sub>2</sub> -O-H	3,6	-C-CH-NO <sub>2</sub>	4,7
CH <sub>3</sub> -CO-N-R	2,0	-C-CH <sub>2</sub> -O-Ar	4,3	-C-CH-Cl	4,0
CH <sub>3</sub> -O-R	3,3	-C-CH <sub>2</sub> -O-CO-R	4,1	-C-CH-C-Cl	1,6
CH <sub>3</sub> -OH	3,4	-C-CH <sub>2</sub> -N	2,5	-C-CH-Br	3,6
CH <sub>3</sub> -O-Ar	3,8	-C-CH <sub>2</sub> -S	2,4	-C-CH-C-Br	1,7
CH <sub>3</sub> -O-CO-R	3,7	-C-CH <sub>2</sub> -NO <sub>2</sub>	4,4	-C-CH-I	4,2
CH <sub>3</sub> -N	2,3	-C-CH <sub>2</sub> -C-NO <sub>2</sub>	2,1	-C-CH-C-I	1,9
CH <sub>3</sub> N <sup>+</sup>	3,3	-C-CH <sub>2</sub> -C=C-CO	2,4	-C-CH-CN	2,7
CH <sub>3</sub> S	2,1	-C=C(CH <sub>2</sub> )-CO	2,4		
CH <sub>3</sub> -C-NO <sub>2</sub>	1,6	-C-CH <sub>2</sub> -Cl	3,4		
CH <sub>3</sub> -C=C-CO	2,0	-C-CH <sub>2</sub> -C-Cl	1,7		
-C=C(CH <sub>3</sub> )-CO	1,8	-C-CH <sub>2</sub> -Br	3,3		
CH <sub>3</sub> -Cl	3,0	-C-CH <sub>2</sub> -C-Br	1,7		
CH <sub>3</sub> -C-Cl	1,5	-C-CH <sub>2</sub> -I	3,1		
CH <sub>3</sub> -Br	2,7	-C-CH <sub>2</sub> -C-I	1,8		
CH <sub>3</sub> -C-Br	1,7	-C-CH <sub>2</sub> -CN	2,3		
CH <sub>3</sub> -I	2,2	-CO-CH <sub>2</sub> -Ar	3,8		
CH <sub>3</sub> -C-I	1,9				
CH <sub>3</sub> -CN	2,0				

### **Animations**

[http://www.unice.fr/cdiec/cours/rmn\\_web/tables/c\\_tables.htm](http://www.unice.fr/cdiec/cours/rmn_web/tables/c_tables.htm)

## 5. Bibliographie et sitographie

---

(Établie début mars 2012)

Où trouver un spectre RMN ?

**Spectraschool** : <http://www.le.ac.uk/spectraschool/> : très didactique. Possibilité de zoomer. On peut donc montrer les signaux sans multiplicité au début puis ensuite montrer cette dernière en zoomant. On peut indiquer les différents pics et les « H » correspondants sont mis en évidence sur la molécule ! Courbe d'intégration existe. Une bibliothèque de molécules assez riche, mais on n'a pas tout. On peut copier et importer directement les spectres mais aussi les formules développées des molécules..

**SDBS** : [http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)

TBien beaucoup de molécules possibles. Echelle de déplacement chimique précisée pour chaque H identifié. Donne les valeurs des couplages (pour le prof). Mais pas de courbe d'intégration directement tracée ! A l'aide de « peak data » on peut faire apparaître les valeurs correspondantes à chaque pic mais ne permet pas de trouver immédiatement le nombre de protons équivalents.

**Specamp** : <http://www.sciences-edu.net/physique/specamp/specamp.htm> Un logiciel de simulation sur toutes les spectroscopies que l'on peut télécharger directement..

Notice utilisation prof : <http://www.sciences-edu.net/physique/specamp/Notice-enseignants-%20Specamp.pdf>

Le mieux pour chercher le spectre d'une espèce chimique donnée sur un site en anglais c'est de donner le n° de CAS de ce composé (pour trouver les CAS, WIKIPEDIA c'est TB)

Sitographie sur généralités:

- [http://gwenaelm.free.fr/Physique/Physchim/capes/Doc/Julien\\_Lalande/O1.pdf](http://gwenaelm.free.fr/Physique/Physchim/capes/Doc/Julien_Lalande/O1.pdf)
- <http://webpeda.ac-montpellier.fr/spc/ABCDORGA/Famille/RMN.htm>
- <http://gsite.univ-provence.fr/gsite/Local/lcp-ira/dir/Etienne/Cours%20RMN.pdf>
- [http://culturesciences.chimie.ens.fr/nodeimages/images/Histoire\\_de\\_la\\_RMN\\_Goldman.pdf](http://culturesciences.chimie.ens.fr/nodeimages/images/Histoire_de_la_RMN_Goldman.pdf)

Bibliographie

- « Traité de chimie organique » - Vollhard – Editeur De Boeck. : de très nombreux spectres RMN commentés
- « Identification spectrométrique de composés organiques » de Silverstein, Webster et Kiemle. Editeur De Boeck.
- Chimie organique expérimentale - Chavanne et al - Belin
- Analyse chimique - Rouessac - Dunod
- Chimie organique 2 terminale STL CLPI - Prunet - Dunod