

La RMN (Résonance Magnétique Nucléaire) est une méthode spectroscopique permettant l'identification et la détermination de la structure d'une molécule organique.

Cette méthode repose sur l'interaction entre une onde électromagnétique et les protons de la matière soumise à un champ magnétique. Elle est aujourd'hui utilisée aussi bien en analyse structurale qu'en analyse quantitative.

Le spectre RMN est utilisé pour identifier les formules développées des molécules en analysant leurs atomes d'hydrogène

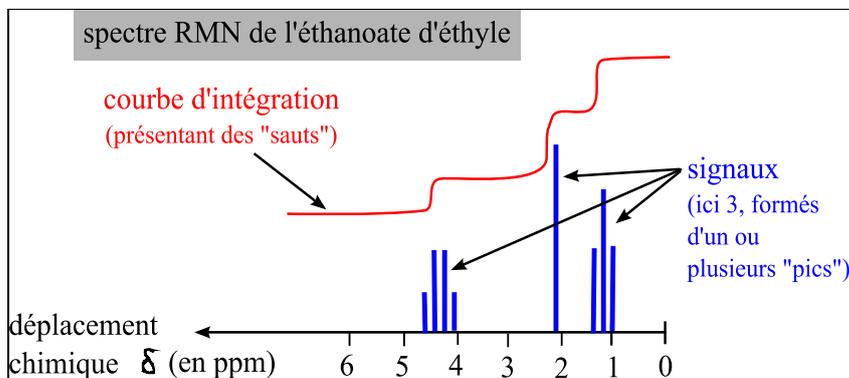
1. Vocabulaire

Voici le spectre RMN de la molécule d'éthanoate d'éthyle :

L'axe des abscisses est orienté vers la gauche et représente le δ en ppm (parties par million)

On retrouve les « » composés d'un ou plusieurs « ».

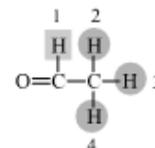
Enfin, une courbe présentant des « sauts » est dessinée : il s'agit de la



2. Les protons équivalents

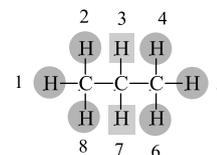
Des noyaux d'atomes d'hydrogène (appelés aussi protons) sont **équivalents** s'ils ont le même environnement chimique. (c'est-à-dire s'ils « voient » les mêmes groupes d'atomes.)

Exemple 1 : Pour l'éthanal, ci-contre : les atomes d'hydrogène 2,3 et 4 sont équivalents. Mais ils ne sont pas équivalents avec 1. On retrouve donc deux groupes de protons équivalents (le groupe 1 et le groupe 2,3 et 4).

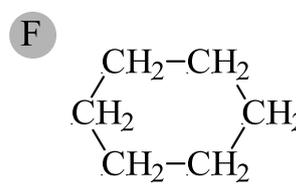
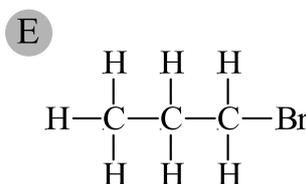
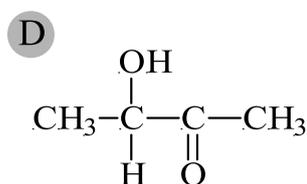
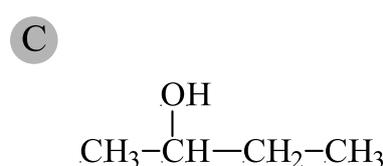
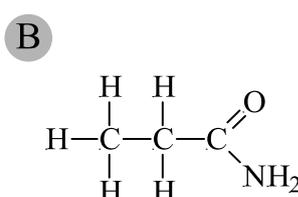
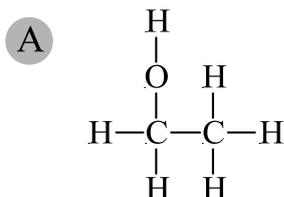


Exemple 2 : Cas du propane : les H aux extrémités « voient » tous les mêmes groupes d'atomes : ils sont donc tous équivalents donc ici 1,2,4,5,6 et 8 sont équivalents entre eux.

3 et 7 sont équivalents entre eux donc il n'y a que deux groupes de protons équivalents.



- Sur les molécules suivantes, entourer d'une même couleur des protons équivalents. (Changer de couleur entre chaque groupe de protons équivalents.) **Nommer chaque groupe avec des lettres : a,b,c,d** Compléter la seconde colonne du tableau page suivante



3. Les protons voisins

Des protons sont voisins s'ils sont séparés uniquement par trois liaisons (simples ou multiples) entre deux atomes de **carbone**.

Exemple : 1 et 2 sont voisins mais 1 et 3 ne le sont pas.



- Sur les molécules précédentes, pour chaque proton (ou groupe de protons) équivalent, indiquer le nombre de voisins. Compléter la 4^{ème} colonne du tableau

4. Les signaux

A chaque proton (ou groupe de protons) équivalent(s) correspond un signal.
Ce signal étant d'autant plus déplacé vers la gauche (les grandes valeurs de déplacement chimique) que l'atome d'hydrogène (ou le groupe) est proche d'un atome très électronégatif (N, O, F, Cl, Br ...)

- Compléter la 3^{ème} colonne du tableau.

5. Multiplicité des signaux

Le signal correspondant un à proton (ou groupe de protons) équivalent(s) peut être multiple c'est-à-dire présenter plusieurs pics. Le nombre de pics est lié au nombre de voisins du proton (ou groupe de protons) équivalent(s).

Règle des (n+1)-uplets :

Si un proton (ou groupe de protons) équivalent(s) possède n voisins, le signal correspondant présentera (n+1) pics.

S'il y a un pic, on parle de **singulet** ; deux pics : **duet** ; trois : **triplet** ; quatre : **quadruplet** etc....

- Compléter la 5^{ème} colonne du tableau

6. Courbe d'intégration

La courbe d'intégration présente des paliers entre des signaux puis un saut au niveau des signaux.

La hauteur du saut de la courbe d'intégration au niveau d'un signal est proportionnelle au nombre de protons équivalents associés au signal.

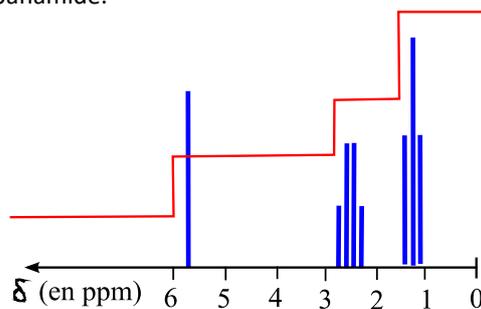
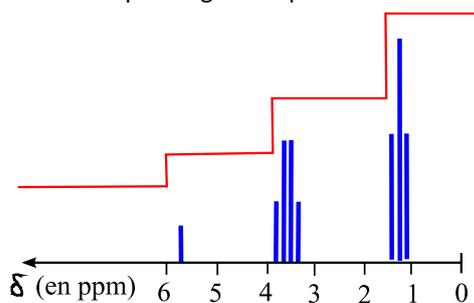
- Compléter la dernière colonne du tableau

Molécule (nom)	Nombre de protons (ou groupes) équivalents	Nombre de signaux	Nombre de voisins pour chaque groupe de protons équivalent		Nombre de pics de chaque signal correspondant (+nom : duet etc...)	Hauteur du saut de la courbe correspondante (par rapport à un proton équiv seul)
A			Groupe a			
			Groupe b			
			Groupe ...			
					
Molécule (nom)	Nombre de protons (ou groupes) équivalents	Nombre de signaux	Nombre de voisins pour chaque groupe de protons équivalent		Nombre de pics de chaque signal correspondant (+nom : duet etc...)	Hauteur du saut de la courbe correspondante (par rapport à un proton équiv seul)
B						
C						
D 3-hydroxypropan-2one						
E 1-bromopropane						
F cyclohexane						

7. Interprétation de spectres RMN

Voici deux spectres de deux composés du tableau précédent.

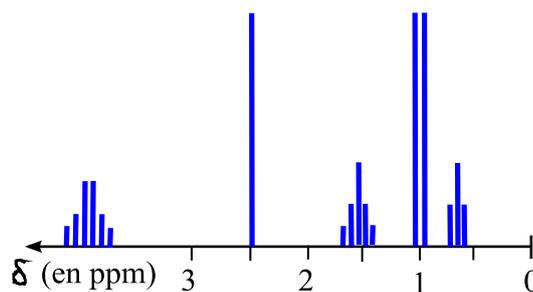
- ✓ Justifier le fait qu'il s'agit des spectres de l'éthanol et du propanamide.



- ✓ Quelle information du spectre doit-on utiliser pour l'associer à la bonne molécule ?
- ✓ Une fois l'association faite, identifier chaque signal en l'associant aux protons équivalents de la molécule.

Voici le spectre du butan-2-ol.

- ✓ Associer chaque signal au groupe de protons équivalent associé.
- ✓ Dessiner l'allure de la courbe d'intégration.



Considérons la molécule de 3-hydroxypropan-2-one (molécule D).

- ✓ Dessiner l'allure de son spectre RMN en utilisant la table de déplacement ci-dessous:

Hydrogène concerné	Déplacement en ppm	Taille relative du pic principal
CH ₃ (relié à CH)	1,4	moyenne
CH ₃ (relié à C=O)	2,2	grand
OH	3,7	Petit
CH (relié à OH)	4,3	petit

- ✓ Dessiner également la courbe d'intégration.

Pour les deux dernières molécules,

- ✓ Dessiner l'allure du spectre RMN avec la courbe d'intégration.
- ✓ Associer chaque signal au groupe de protons équivalents associés.

Données :

- Pour le cyclohexane, les protons liés au cycle résonnent à 1,4 ppm. Le pic a une grande taille.
- Pour le 1-bromopropane, penser que plus un groupe de protons équivalents est proche d'un atome électro-négatif, plus son déplacement chimique sera important. Déplacements pour cette molécules : 1 ppm (grande taille) ; 1,8 ppm (taille moyenne) ; 3,4 ppm (grande taille).