

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE D'OUM-EL-BOUAGHI DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE

Contrôle : Analyse physicochimique, instrumentation (MCHIP12).

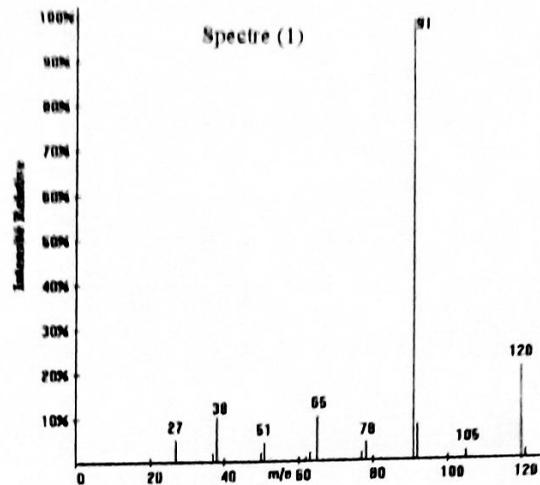
Spécialité : Chimie Pharmaceutique.

Durée : 1h et 30 minutes

1- L'ionisation par impact électronique est la méthode d'ionisation la plus ancienne et la plus utilisée. Expliquez ? Citez deux autres méthodes d'ionisation. (4.5pts)

Exercice 1 : (6pts)

Le spectre (1) est celui d'une molécule dont la formule brute est C_8H_8O . Proposer une formule développée.



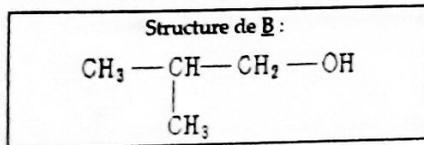
Exercice 2 : (3.5pts)

Un composé A contenant uniquement des atomes de C, H et Cl donne des signaux de l'ion parent à $m/z = 78$ et 80 dans un rapport 3:1. Proposer deux structures possibles pour A. (isotopes du chlore : ^{37}Cl , ^{35}Cl)

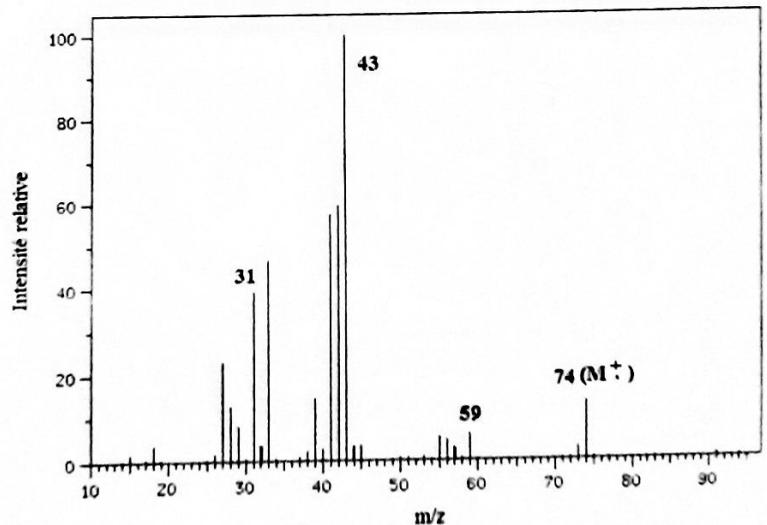
Exercice 3 : (6pts)

En spectrométrie de masse, que représentent le pic parent et le pic de base ?

On considère la structure B :



Soit le spectre de masse de B. Vérifier que ce spectre est compatible avec la structure proposée. Pour cela, on étudie l'aspect général du spectre et on explique les fragmentations qui donnent les pics à $m/z = 59$, 43 et 31 .



Bon travail

S. AZIZI

Solution : exercice 1 :

On peut à partir de la formule brute déduire l'indice d'insaturation (I) :

$$\text{Pour la formule brute } C_xH_yO_z I = (2x + 2 - y) / 2 \\ = (2 \cdot 8 + 2 - 8) / 2 = 5 \text{ (1pt)}$$

Un noyau benzénique correspond à 4 insaturations (3 doubles liaisons + 1 cycle). Il reste

donc une insaturation à placer en dehors du cycle. (1pt)

Le pic de base est à $m/z=91$ L'ion tropylium. (1pt)

Le pic moléculaire est à $m/z=120$. $M+1$ est visible à $m/e=121$. (1pts)

77, 51, 39, 27 : C_6H_5+ , C_4H_3+ , C_3H_4+ , C_2H_3+ . noyau benzénique mono substitué (1 pt)

Formule : ϕ

- CH_2-CHO (1 pt)

solution exercice 02,3

(isotopes du chlore : ^{37}Cl , ^{35}Cl)

Soit le composé $\text{C}_x\text{H}_y\text{Cl}_n$. (0,5 pts)

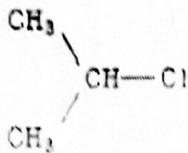
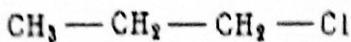
$n=1$: un seul chlore dans la structure.

^{35}Cl : $M = 12x + y + 35 = 78$; cela correspond à $x=3$ et $y=7$. ^{37}Cl :

$M+2=80$.

Le composé est : **$\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}$** . (1 pt)

Deux structures sont possibles : ***1-chloropropane et 2-chloropropane***



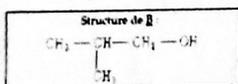
(2 pts)

II- En spectrométrie de masse, que représentent le pic parent et le pic de base ?

- Pic parent : pic qui correspond à la masse moléculaire ($m/z = M$) (0,5 pts)

- Pic de base : pic qui correspond au fragment cationique le plus abondant (intensité relative du pic = 100) (0,5 pts)

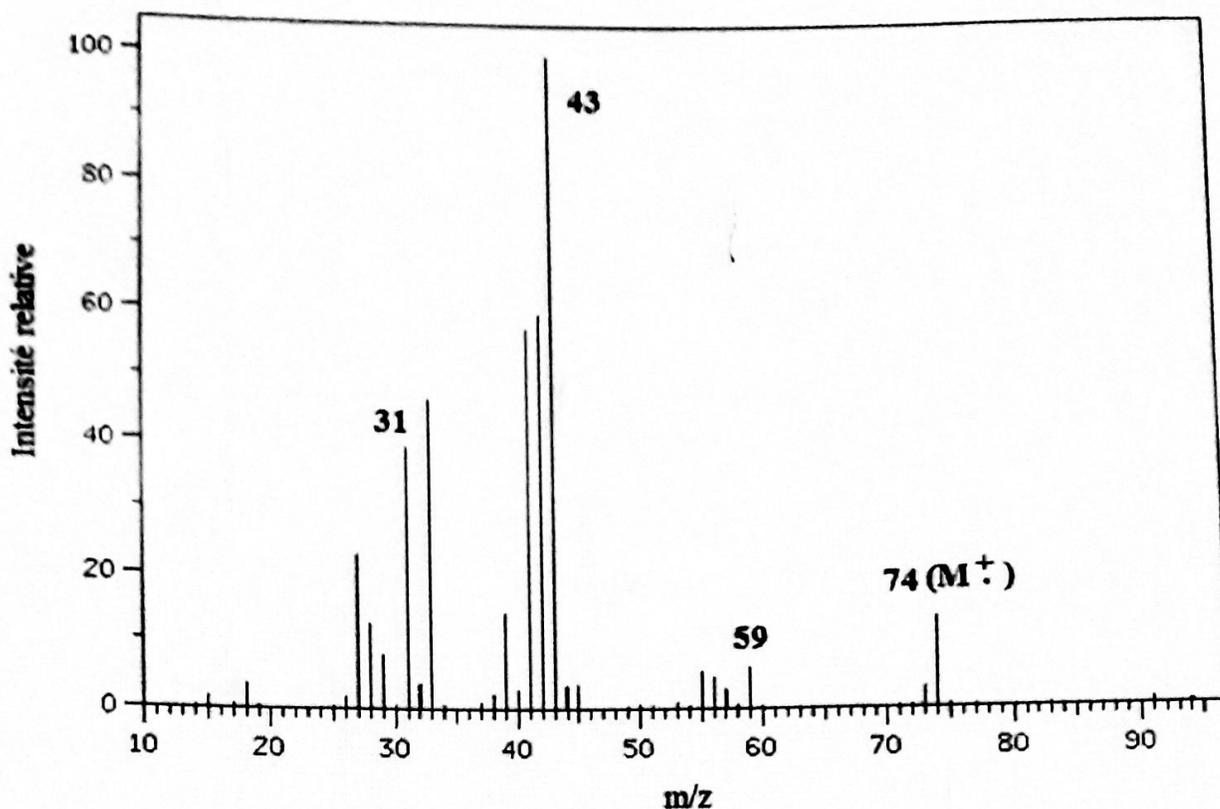
On considère la structure B :



Soit le spectre de masse de **B**. Vérifier que ce spectre est compatible avec la structure proposée. Pour cela, on étudie l'aspect général du spectre et on explique les

fragmentations qui donnent les pics à $m/z = 59$, 43 et 31 .

Solution exercice B.



Pic moléculaire : $m/z = 74$ (0,5 pts)

Pic de base : $m/z = 43$ (0,5 pts)

Le pic moléculaire correspond bien à la masse de B.

Fragmentations :

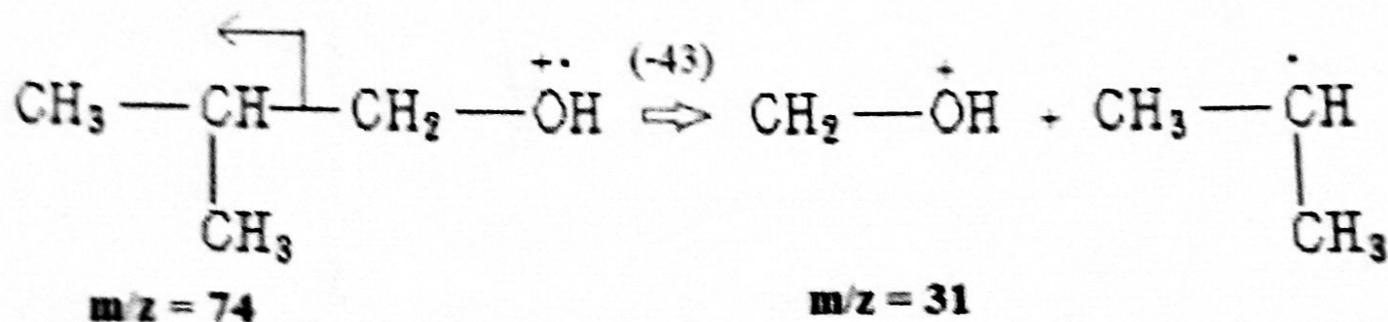
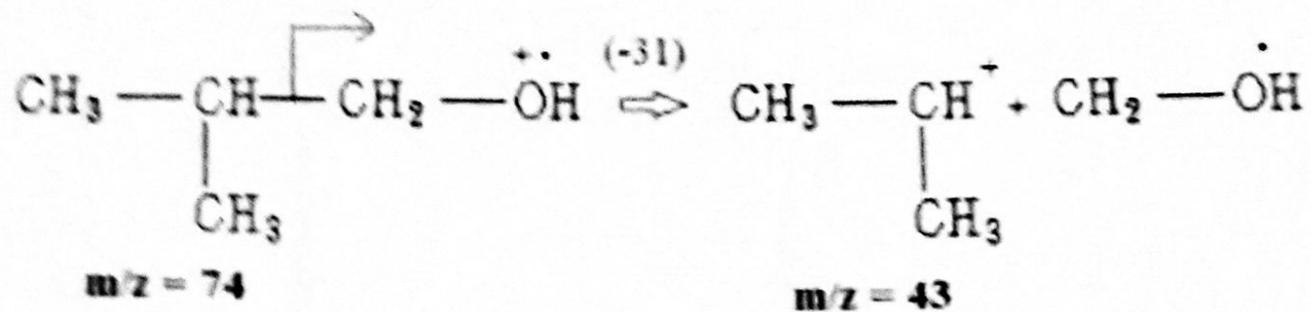
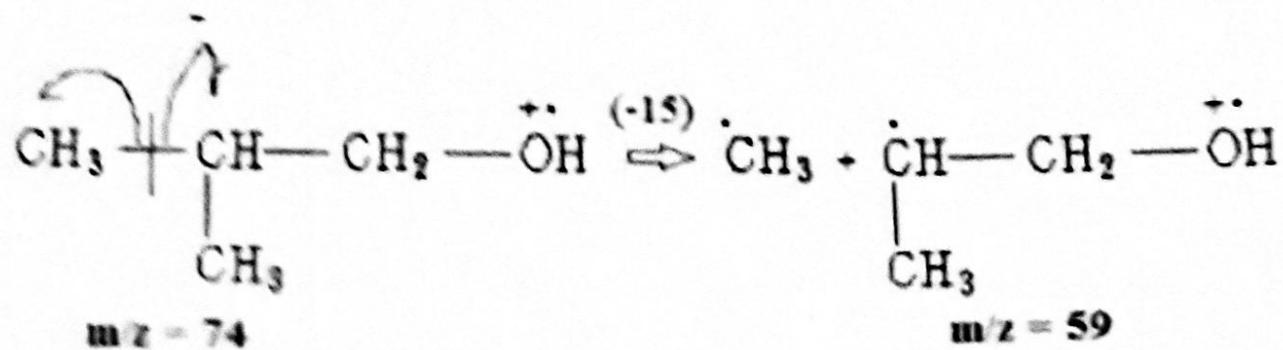
Pic à 59 : $74 - 59 = 15$: perte de CH_3 à partir de l'ion moléculaire (0,25 pts)

Pic à 43 : correspond au cation du groupe isopropyle (0,25 pts)

Pic à 31 : correspond au cation du groupe CH_2OH (alcool primaire) (0,25 pts)

Ces fragmentations sont compatibles avec la structure proposée.

Mécanismes de fragmentation :



(3,25 pts)