

Evaluation - Détermination d'une formule brute

On souhaite déterminer la formule brute d'un hydrocarbure azoté et oxygéné. On notera $C_xH_yO_zN_t$ la formule brute de cette molécule.

01. Une première analyse élémentaire quantitative sur une masse d'échantillon $m_1 = 650$ mg conduit à la formation de 561 mg d'eau et 1,175 g de dioxyde de carbone.

a. L'analyse élémentaire est basée sur une réaction d'oxydation (combustion).



b.
$$n_C = n_{CO_2} = x \text{ d'où } \%C = \frac{m_C}{m_A} = \frac{n_C \cdot M_C}{m_A} = \frac{n_{CO_2} \cdot M_C}{m_A} = \frac{m_{CO_2} \cdot M_C}{M_{CO_2} \cdot m_A}$$

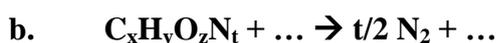
AN :
$$\%C = \frac{1,175 \times 12}{44 \times 0,650} = 49,30 \%$$

$$n_H = 2 \cdot n_{H_2O} = y \text{ d'où } \%H = \frac{m_H}{m_A} = \frac{n_H \cdot M_H}{m_A} = \frac{2 \cdot n_{H_2O} \cdot M_H}{m_A} = \frac{2 \cdot m_{H_2O} \cdot M_H}{M_{H_2O} \cdot m_A}$$

AN :
$$\%H = \frac{2 \times 0,561 \times 1}{18 \times 0,650} = 9,59 \%$$

02. Une seconde analyse utilisant la méthode de Dumas est réalisée afin de déterminer le pourcentage massique en élément azote. Un échantillon de masse $m_2 = 975,5$ mg est décomposé par l'oxyde de cuivre en présence de dioxyde de carbone, puis réduit de manière à libérer le diazote. On recueille, après passage dans une solution de potasse, un volume gazeux $V = 149,8$ mL de diazote, mesuré dans les conditions normales de température et de pression ($\theta = 0^\circ C$, $P = 1,013$ bar).

a. Une autre méthode permettant de doser l'élément azote est la méthode de **Kjeldahl**. Dans un premier temps, l'échantillon est minéralisé : l'élément azote se trouve alors sous forme d'ammonium. Un ajout de soude permet le passage à la forme basique, ammoniac, puis un chauffage permet de distiller ce gaz dans un volume connu d'une solution acide de concentration connue. Le dosage de l'excès d'acide permet ensuite de déterminer la quantité d'ammoniac dégagé, donc la quantité (puis la masse) d'élément azote contenu dans l'échantillon.



$$n_N = 2 \cdot n_{N_2} \text{ d'où } \%N = \frac{m_N}{m_A} = \frac{n_N \cdot M_N}{m_A} = \frac{2 \cdot n_{N_2} \cdot M_N}{m_A}$$

La quantité de diazote est ensuite déterminée en utilisant l'équation des gaz parfait :

$$n_{N_2} = \frac{P_{N_2} \cdot V_{N_2}}{R \cdot T} \text{ d'où } \%m_N = \frac{2 \cdot M_N \cdot P_{N_2} \cdot V_{N_2}}{R \cdot T \cdot m_A}$$

AN :
$$\%m_N = \frac{2 \times 14 \times 1,013 \cdot 10^5 \times 149,8 \cdot 10^{-6}}{8,314 \times 273,15 \times 0,9755} = 19,18 \%$$

03.
$$\%O = 100 - \%C - \%H - \%N = 21,93 \%$$

04. Afin de déterminer la masse molaire de l'espèce étudiée, une analyse par spectrométrie de masse est réalisée. On donne ci-dessous trois spectre de masse, dont l'un deux correspond effectivement au composé étudié.

a. Le spectre 1 semble correspondre à un dérivé bromé : en effet, il possède un massif parent caractéristique, avec deux pics de même intensité (à P et $P + 2$), du aux isotopes ^{79}Br et ^{81}Br .

Le spectre 3 semble correspondre à un dérivé chloré : en effet, il possède un massif parent caractéristique, avec deux pics d'intensité 3/1 à P et P + 2, dus aux isotopes ^{35}Br et ^{37}Cl .

Le spectre 2 doit donc correspondre à celui de l'échantillon étudié.

b. Spectre 2 : pic de base à $m/z = 73$, tout comme le pic parent. La masse molaire est donc de $73 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$.

c.

$$x = \frac{\%m_C \times M}{M_C} = \frac{49,30\% \times 73}{12} = 3$$

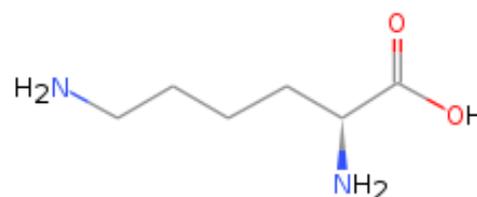
$$y = \frac{\%m_H \times M}{M_H} = \frac{9,59\% \times 73}{1} = 7$$

$$y = \frac{\%m_O \times M}{M_O} = \frac{21,93\% \times 73}{16} = 1$$

$$t = \frac{\%m_N \times M}{M_N} = \frac{19,18\% \times 73}{14} = 1$$

Formule brute : $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}$. Celle de l'ion moléculaire : $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}^+$.

05. Formule brute de la lysine : $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}_2$. Les analyses élémentaires auraient donné les mêmes résultats. Seul le spectre de masse aurait été différent.



06. Une fonction acide carboxylique, deux fonctions amines primaires.

