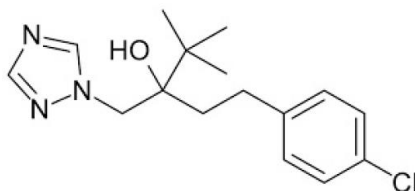


Le Tébuconazole

Question simple :

Les organomagnésiens mixtes : synthèse à partir des halogénoalcanes.

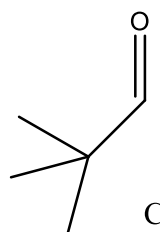
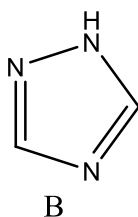
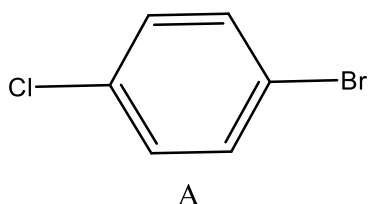
Question ouverte :



Le tébuconazole

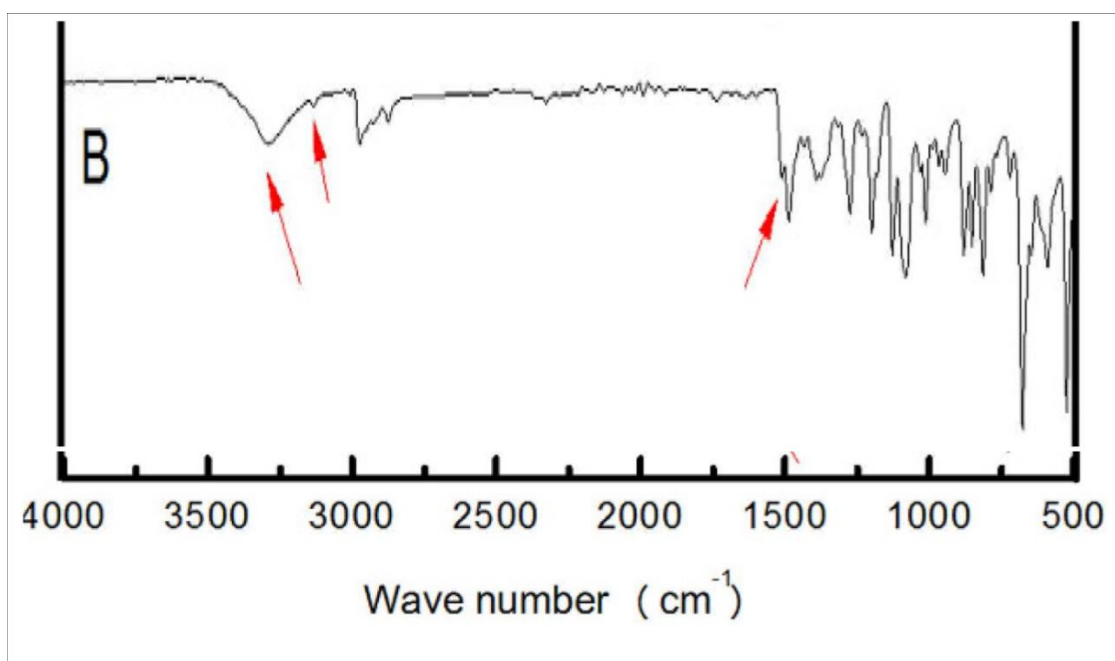
Le tébuconazole est un fongicide de la famille des triazoles, utilisé pour protéger les cultures contre divers champignons pathogènes.

1°) Proposez une synthèse du tébuconazole à partir des 4 molécules A, B, C, D et de toute molécule comportant au maximum un atome de carbone.

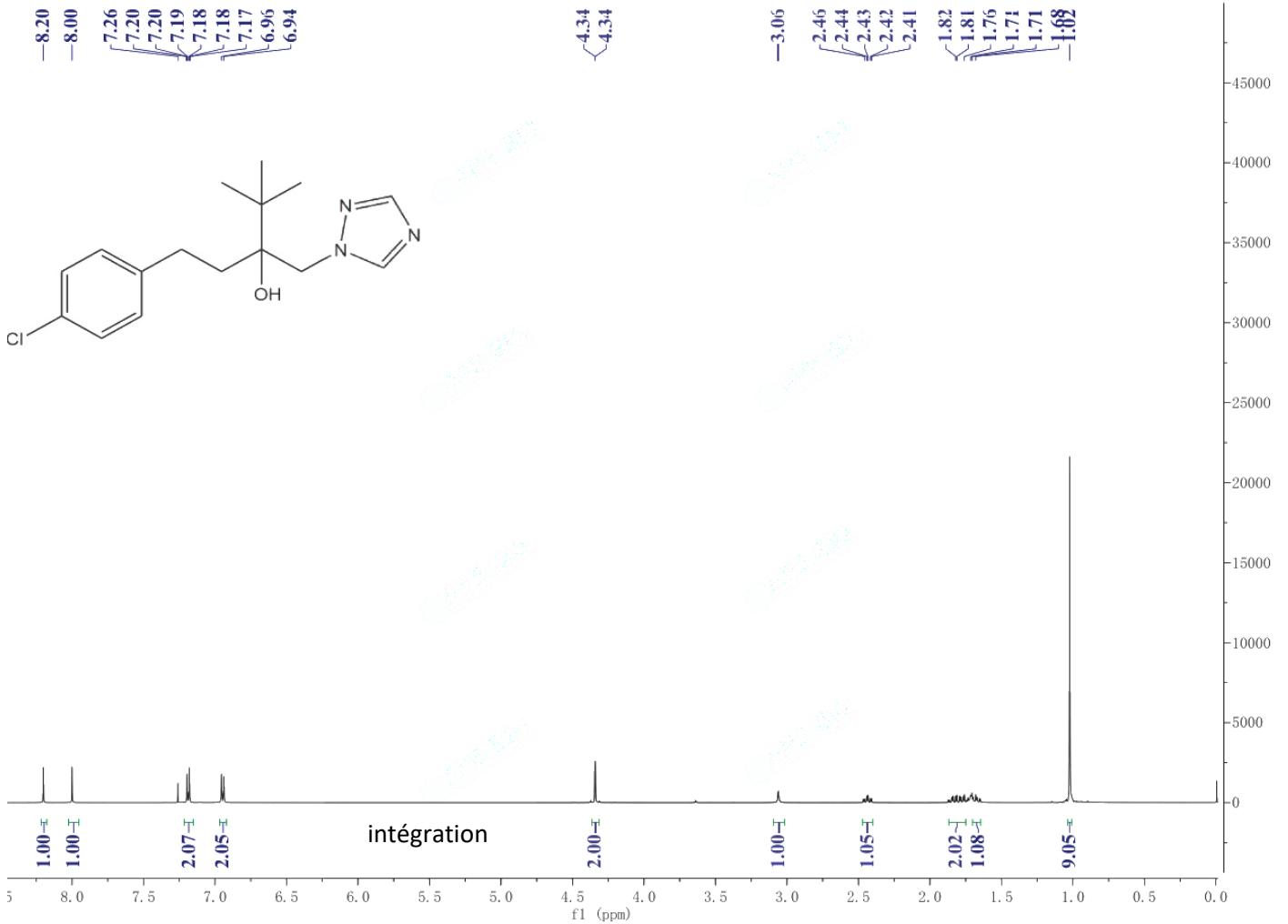


2°) Déterminer l'intervalle de concentrations en tébuconazole dans une eau potable accessible par spectrophotométrie UV. Décrire le protocole mis en œuvre et commenter le rôle du script Python fourni. Compléter les lignes 15 et 16 du script.

DOCUMENT 1 : spectres Infra rouge et RMN du tébuconazole.

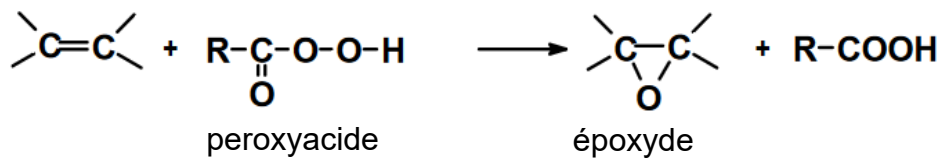


Valeurs des déplacements chimiques



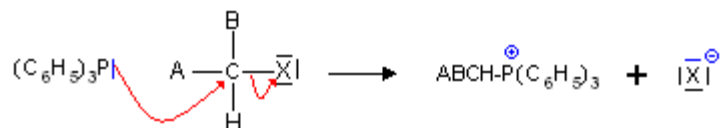
DOCUMENT 2 : Banque de réactions.

1°) Préparation d'un époxyde .

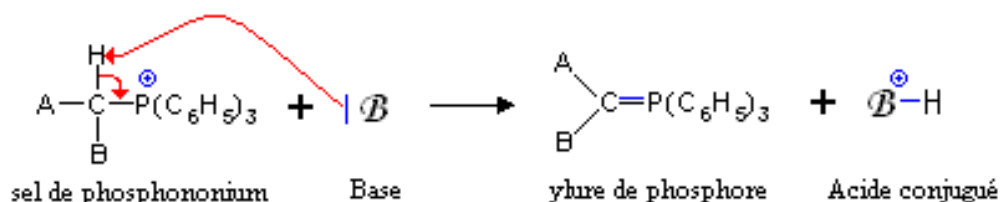


2°) La réaction de Wittig .

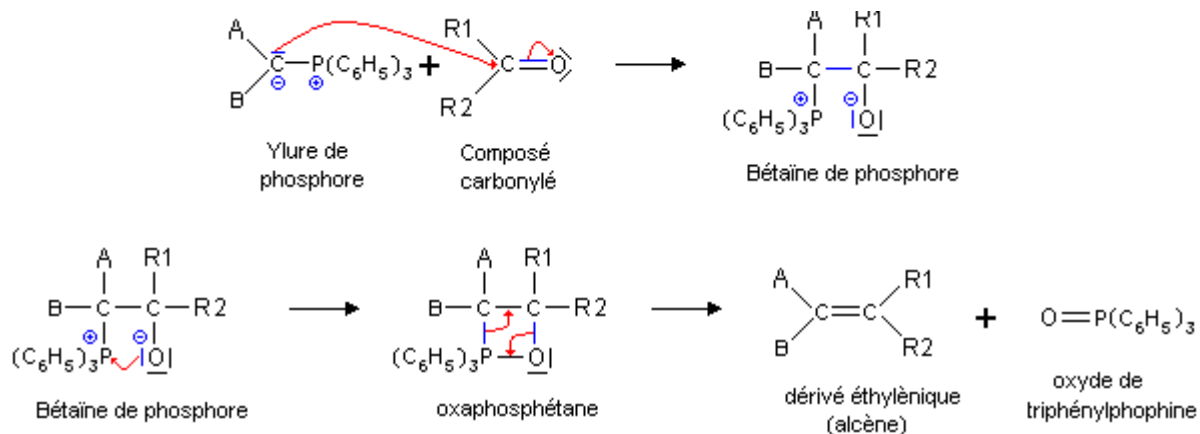
1°) Préparation d'un sel de phosphonium.



2°) Transformation du sel en ylure de phosphore (carbanion stabilisé) :



2°) Addition nucléophile de l'ylure de phosphore sur un dérivé carbonilé :



DOCUMENT 3 : Données physico-chimiques

Les caractéristiques physico-chimiques dont l'ordre de grandeur est indiqué ci-après, influencent les risques de transfert de cette substance active vers les eaux, et le risque de [pollution des eaux](#) :

- Formule moléculaire : C₁₆H₂₂ClN₃O
- Masse molaire : 307,8 g.mol⁻¹
- Hydrolyse à pH 7 : stable
- Solubilité : eau : 29 mg·L⁻¹ à pH 7
- Concentration maximale admise dans l'eau potable : 0,1µg/L



TEBUCONAZOLE

Attention

- H302 - Nocif en cas d'ingestion
- H361d - Susceptible de nuire au fœtus
- H411 - Toxique pour les organismes aquatiques, entraîne des effets néfastes à long terme

Les conseils de prudence P sont sélectionnés selon les critères de l'annexe 1 du règlement CE n° 1272/2008.

403-640-2

DOCUMENT 4 : Suivi par spectrophotométrie UV.

L'absorbance de différentes solutions de tébuconazole, irradiées avec une intensité I_0 , sont mesurées à la longueur d'onde $\lambda=225$ nm . Les mesures sont idéales pour une transmittance entre 20 % et 60 %.

La transmittance représente le pourcentage d'intensité transmise à la sortie de l'échantillon.

L'absorbance A de la solution est définie par $A = \log \frac{I_0}{I_T}$ où I_T représente l'intensité transmise à la sortie de l'échantillon.

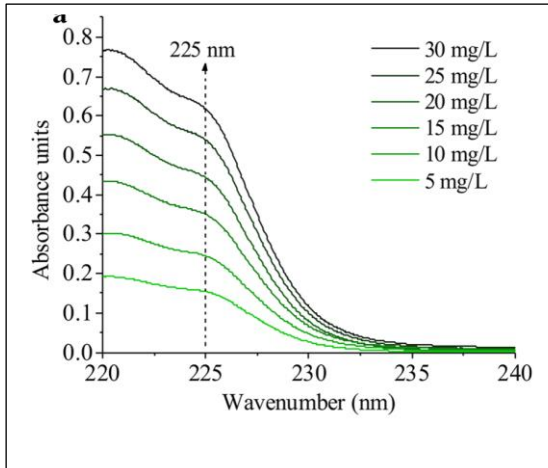


Figure 1. : spectres UV de différentes solutions aqueuses de tébuconazole

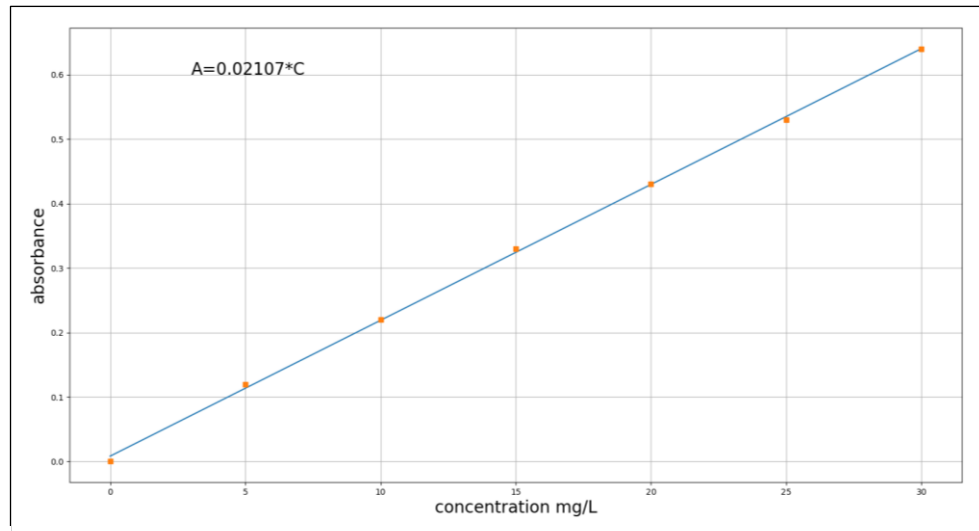


Figure 2. : Absorbance de différentes solutions aqueuses de tébuconazole à 225 nm

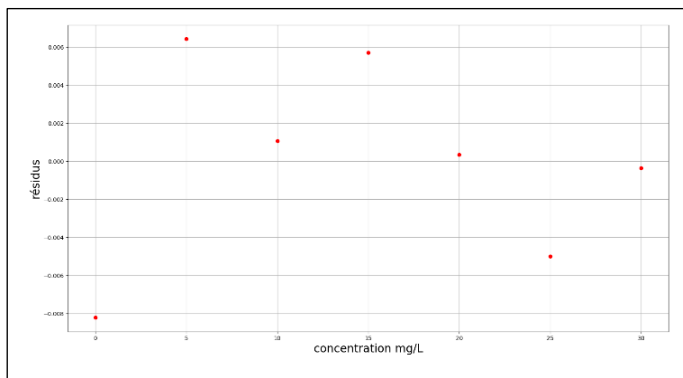


Figure 3. : Tracé des résidus de la courbe d'absorbance

```
# tebuconazole_spectro_àcompléter.py
01 | #import des bibliothèques
02 | import numpy as np
03 | import matplotlib.pyplot as plt
04 |
05 | #valeurs des concentrations des solutions aqueuses de tébuconazole:
06 | C=[0,5,10,15,20,25,30]
07 | #valeurs des absorbances mesurées :
08 | A=[0,0.12,0.22,0.33,0.43,0.53,0.64]
09 |
10 | a,b=np.polyfit(C,A,1)
11 |
12 | lA_mod=[]
13 | lresidus=[]
14 | for i in range (len(C)):
15 |     lA_mod.append(#COMPLETER)
16 |     lresidus.append(#A COMPLETER)
17 |
18 | plt.figure(1)
19 | plt.plot(C,A,'s')
20 | plt.plot(C,lA_mod)
21 | plt.xlabel('concentration mg/L',fontsize=20)
22 | plt.ylabel('absorbance',fontsize=20)
23 | plt.text(3,0.6,'A=0.02107*C',fontsize=20)
24 | plt.figure(2)
25 | plt.plot(C,lresidus,'o',color='r')
26 | plt.xlabel('concentration mg/L',fontsize=20)
27 | plt.ylabel('résidus',fontsize=20)
28 |
29 | plt.grid()
30 | plt.show()
```

Figure 4. : script Python associé au tracé des figures 2. et 3.

TABLE DE DONNEES Infra Rouge

Functional Group	Wavenumber (cm ⁻¹)	Intensity
Alkyl		
C-H	2853-2962	medium-strong
Alkenyl		
=C-H	3010-3095	medium
C=C	1620-1680	variable
Alkynyl		
≡C-H	3300	strong
C≡C	2100-2260	variable
Aromatic		
Ar-H	3030	variable
C=C	1400-1600	variable
Alcohols, Phenols & Carboxylic Acids		
O-H (alcohols / phenols)	3200-3500	broad, strong
O-H (carboxylic acids)	2500-3000	broad, variable
Aldehydes, Ketones, Esters, Carboxylic acids & Amides		
C=O (Aldehydes)	1690-1740	strong
C=O (Ketones)	1680-1750	strong
C=O (Esters)	1735-1750	strong
C=O (Carboxylic acids)	1710-1780	strong
C=O (Amides)	1630-1690	strong
Amines		
N-H	3300-3500	medium

TABLE DE DONNEES RMN

Protons CH ₃	δ	Protons CH ₂	δ	Protons CH	δ
Lié à un C AX₃ :		Lié à un C AX₃ :		Lié à un C AX₃ :	
CH ₃ -C	0,9	CH ₂ -C	1,3	CH-C	1,5
CH ₃ -C-NH ₂ (ou NR ₂)	1,15	CH ₂ -C-NH ₂ (ou NR ₂)	1,3	CH-C-OH(ou OR)	1,6-2
CH ₃ -C-Ar	1,25	CH ₂ -C-Ar	1,6	CH-C-Cl	1,6
CH ₃ -C-OH(ou OR)	1,15-1,3	CH ₂ -C-OH(ou OR)	1,8		
En α d'une insaturation:		En α d'une insaturation:		En α d'une insaturation:	
CH ₃ -C=C	1,6	CH ₂ -C=C	2,1-2,3	CH-C=C	2,5
CH ₃ -CO-OR	2,0	CH ₂ -C≡C	2,6	CH-C≡N	2,7
CH ₃ -CO-OH	2,1	CH ₂ -CO-OR	2,2	CH-CO-OH	2,6
CH ₃ -CO-NH ₂ (ou NR ₂)	2-2,1	CH ₂ -CO-OH	2,35	CH-CO-R	2,5-2,7
CH ₃ -C=C-C=O		CH ₂ -CO-NH ₂ (ou NR ₂)	2,1-2,2	CH-Ar	3,0
CH ₃ -CO-R	2,0	CH ₂ -C-C-C=O		CH-CO-Ar	3,3
CH ₃ -Ar	2,1-2,2	CH ₂ -CO-R	2,4		
CH ₃ -CO-Ar	2,3-2,4	CH ₂ -Ar	2,4		
	2,6	CH ₂ -CO-Ar	2,7		
			2,9		
Lié à un hétéroatome		Lié à un hétéroatome		Lié à un hétéroatome	
CH ₃ -NH ₂ (ou NR ₂)	2,1-2,3	CH ₂ -NH ₂ (ou NR ₂)	2,5	CH-NH ₂ (ou NR ₂)	2,9
CH ₃ -NH-COR	2,8-2,9	CH ₂ -NH-COR	3,3	CH-NH-COR	3,8-4,1
CH ₃ -OR	3,3	CH ₂ -OR	3,4	CH-OR	3,7
CH ₃ -OH	3,4	CH ₂ -OH	3,6	CH-OH	3,9
CH ₃ -OCOR	3,7	CH ₂ -OCOR	4,2	CH-OCOR	4,8-5,1
CH ₃ -OAr	3,8	CH ₂ -OAr	4,0	CH-OAr	4,0
CH ₃ -NO ₂	4,3	CH ₂ -NO ₂	4,4	CH-NO ₂	4,5-4,7
Protons liés à un C insaturé:	δ	Protons portés par un hétéroatome. Leur position dépend considérablement du solvant et de la concentration.			
-C≡CH	1,8-3,1	OH	NH		
-C=CH-	4,5-6,0	Alcool (ROH) : 0,7-5,5	Amine aliphatique (RNH ₂ , RNH-) : 0,6-5,0		
ArH	6,5-8,2	Phénol (ArOH) : 4,5-7,1	Amine aromatique (ArNH ₂ , ArNH-) : 2,9-4,7		
	(benzène : 7,27)	Amides (-CO-NH ₂ , CO-NH-) : 6,0-8,5			
RCH=O	9,5-10,0	Acide (R-CO-OH) : 10,5-12,5			
ArCH=O	9,7-10,5				