

II.1.Introduction

Le rayonnement infrarouge (IR) fut découvert en 1800 par « Frédéric wilhelm herschel ». Ces radiations localisées au-delà des longueurs d'ondes dans le rouge sont situés entre la région du spectre visible et des ondes hertziennes. Le domaine infrarouge s'étend de 0,8 μM à 1000 μm .

Il est arbitrairement divisé en trois catégories :

Le proche infrarouge (0,8 \longrightarrow 2,5 μm).

Le moyen infrarouge (2,5 \longrightarrow 25 μm).

Le lointain infrarouge (25 \longrightarrow 100 μm).

Les radiations infrarouge traversent facilement l'atmosphère, on utilise cette propriété pour prendre des vus panoramiques (photographie aérienne).

L'infrarouge sert aussi au chauffage domestique ou industriel et au séchage des vernis, peintures, bois, cuir, papiers, pellicule photographiques, appareils nocturnes (jumelles) et à la déshydratation des fruits et légumes. Il est utilisé dans les applications militaires dont la plus importante concerne l'autoguidage à l'infrarouge des missiles. En thérapie les rayons infrarouges activent les processus cellulaire en particulier la cicatrisation.

En spectroscopie infrarouge, les longueurs d'onde utilisées en analyse sont celles qui vont de 2,5 μm à 25 μm . Cela correspond à une gamme de nombre d'onde généralement utilisée est 4000 cm^{-1} à 400 cm^{-1} , ou encore à des énergies plus faibles variant de 2 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ à 40 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Une telle énergie reste insuffisante pour provoquer des transitions électroniques comme en UV-Visible. Cette énergie va agir plutôt sur la vibration et la rotation des molécules. Pour modéliser ces vibrations et rotations, on utilise le modèle de l'oscillateur harmonique : deux masses reliées par un ressort (figure 7).

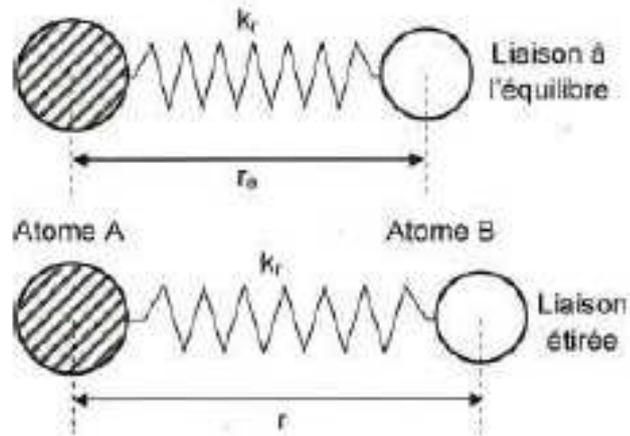


Figure 7 : Modèle de l'oscillateur harmonique.

On peut dire qu'ici, k , raideur du ressort, nous renseigne sur la force de la liaison :

k est d'autant plus grande que la liaison entre A et B est forte.

Ce système à deux corps peut être traité comme un système à un corps à condition d'introduire la masse réduite μ du système définie par :

$$\mu = \frac{m_A \cdot m_B}{m_A + m_B} \quad \text{provenant de : } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

Cet oscillateur harmonique constituera une bonne approximation pour les vibrations de faibles amplitudes.

La relation entre la pulsation ω , les masses des atomes et la force de la liaison est la même

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

que la loi de Hooke pour l'oscillateur harmonique :

A cette pulsation correspondent une fréquence ν et un nombre d'onde σ tels que :

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{et} \quad \sigma_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

II.2. Principe

Quelque soit leur état physique, les atomes d'une molécule ne sont pas immobiles : ils subissent des vibrations d'élongation ou de déformation à une fréquence bien déterminée qui dépend des atomes mais aussi de l'environnement de la liaison. Pour une fréquence donnée de lumière IR absorbée, ces liaisons rentrent en résonance : l'énergie apportée est alors consommée : les molécules absorbent et la transmittance T (proportion d'énergie transmise par un échantillon) diminue. Un spectre IR renseigne donc sur la nature des liaisons dans une molécule, sur ses groupes caractéristiques. Une transmittance de 100% signifie que l'échantillon n'absorbe rien, d'où des bandes vers le bas en cas d'absorption.

II.3. Types de vibration

L'absorption d'une radiation IR aura pour effet de faire vibrer la molécule en modifiant les angles et les longueurs des liaisons. Deux atomes reliés par une liaison covalente peuvent effectuer une vibration d'élongation/contraction. Quand il y a plus de deux atomes dans la molécule, les atomes peuvent vibrer ensemble selon une variété d'élongation et de déformations.

On distingue deux modes de vibrations : vibrations d'élongation (ou allongement) et vibration de déformation.

II.3.1. Vibration d'élongation (Stretching)

Elles ont lieu lorsque deux atomes s'éloignent ou se rapprochent périodiquement le long de leur axe commun. On a deux possibilités de vibration d'élongation : symétrique et asymétrique (figure 8). Ce type de vibration on l'appelle aussi vibrations de valence et elle se produit à des nombres d'onde élevés.

II.3.2. Vibration de déformation (bending)

Elles correspondent à des modifications de l'angle de liaison. Différents types de vibration sont possibles : dans le plan et hors du plan (figure 8). Ce type de vibration est observé vers les faibles nombre d'onde.

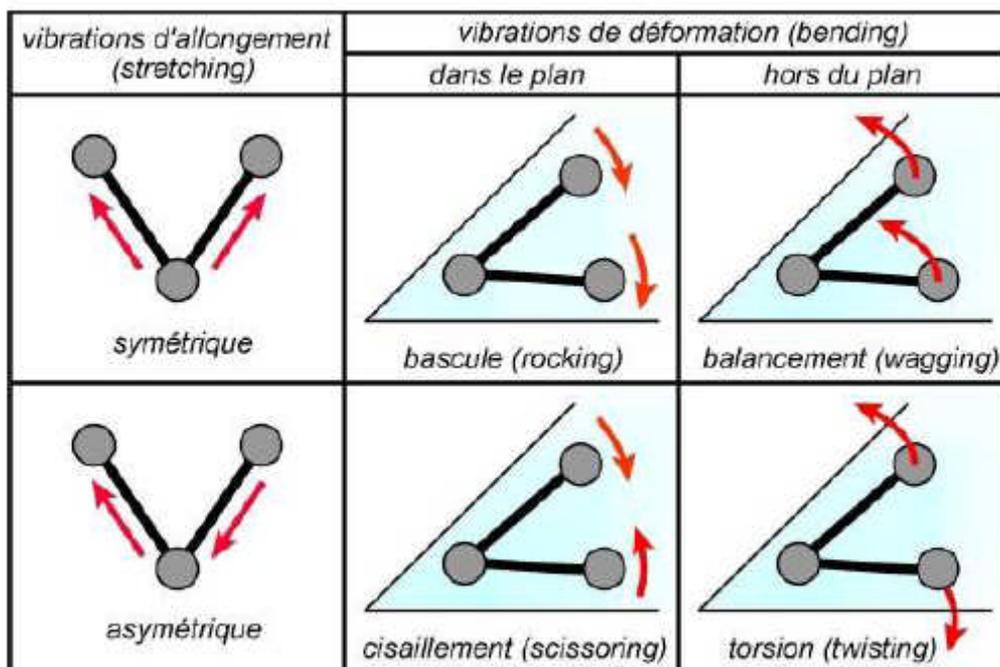


Figure 8 : Différents types de vibrations

II. 4. Appareillage

Les spectromètres infrarouges sont construits à partir d'éléments principaux avec quelques différences au niveau de matériaux utilisés ou de leur montage selon le domaine infrarouge exploité et selon le type d'interactions entre la matière et le rayonnement. Il existe deux grands types d'appareils, leurs différences résident essentiellement dans le système de sélecteurs de longueurs d'ondes.

II.4.1. Spectromètre dispersif

Ces instruments (figure 9) séparent les fréquences de l'énergie émise à partir de la source infrarouge à l'aide d'un prisme ou de réseaux, éléments dispersifs plus efficace. Le détecteur mesure la quantité d'énergie pour chaque fréquence qui passe à travers l'échantillon. Il en résulte un spectre qui est tracé de l'intensité en fonction du nombre d'ondes. L'inconvénient de ces appareils se situe dans la lenteur des mesures, la complexité mécanique et l'insensibilité.

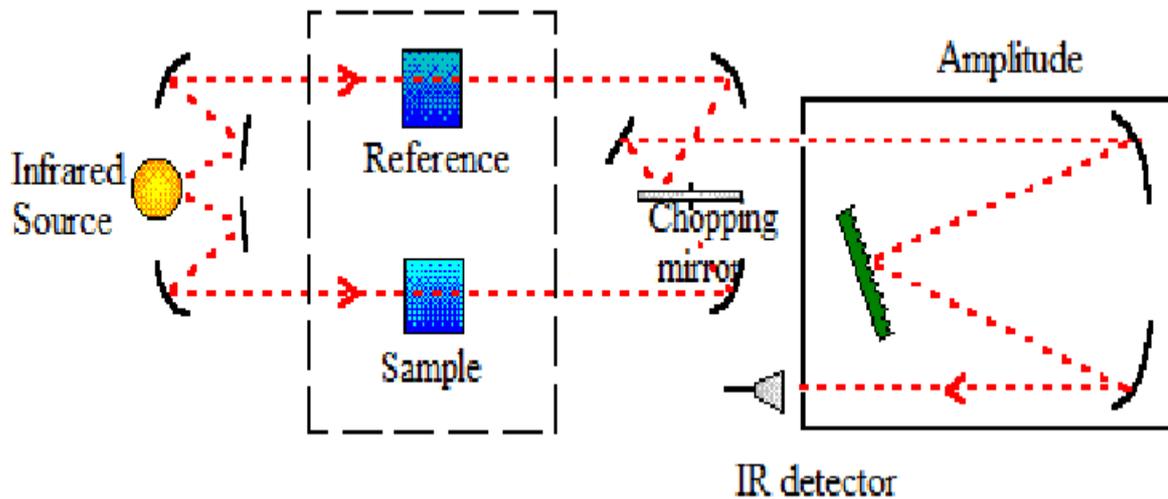


Figure 9 : Schéma du principe d'un spectromètre infrarouge classique dispersif.

II.4.2. Spectromètre infrarouge à transformée de Fourier

Les spectromètres FT-IR ont été développés pour apporter une réponse aux limitations des spectromètres dispersifs. La difficulté principale à résoudre était celle de la lenteur d'acquisition. Il était indispensable d'imaginer un dispositif mesurant toutes les fréquences simultanément. Le dispositif est l'interféromètre.

II.4.2.1. Mode de fonctionnement du spectromètre à transformée de Fourier

Un spectromètre à transformée de Fourier envoie sur l'échantillon un rayonnement infrarouge et qui mesure les longueurs d'onde absorbées et les intensités de l'absorption. Le faisceau infrarouge provenant de la source est dirigé vers l'interféromètre de Michelson qui va moduler chaque longueur d'onde du faisceau à une fréquence différente. Dans l'interféromètre le faisceau lumineux arrive sur la séparatrice. La moitié du faisceau est alors dirigée sur le miroir fixe, le reste passe à travers la séparatrice et est dirigé sur le miroir mobile. Quand les deux faisceaux se recombinent, des interférences destructives ou constructives apparaissent en fonction de la position du miroir mobile. Le faisceau modulé est alors réfléchi des deux miroirs vers l'échantillon, où des absorptions interviennent. Le faisceau arrive ensuite sur le détecteur pour être transformé en signal électrique.

Il comporte essentiellement cinq parties (figure 10) :

- Une source lumineuse
- Un dispositif permettant de générer les interférences

- Un compartiment échantillon qui permet d'accueillir plusieurs types d'accessoires (portes échantillon) dépendant du mode de mesure utilisé (réflexion ou transmission).
- Un détecteur ou capteur photosensible
- Un convertisseur analogique numérique qui interroge le détecteur à des intervalles réguliers et transforme le signal numérique manipulable par le système informatique.

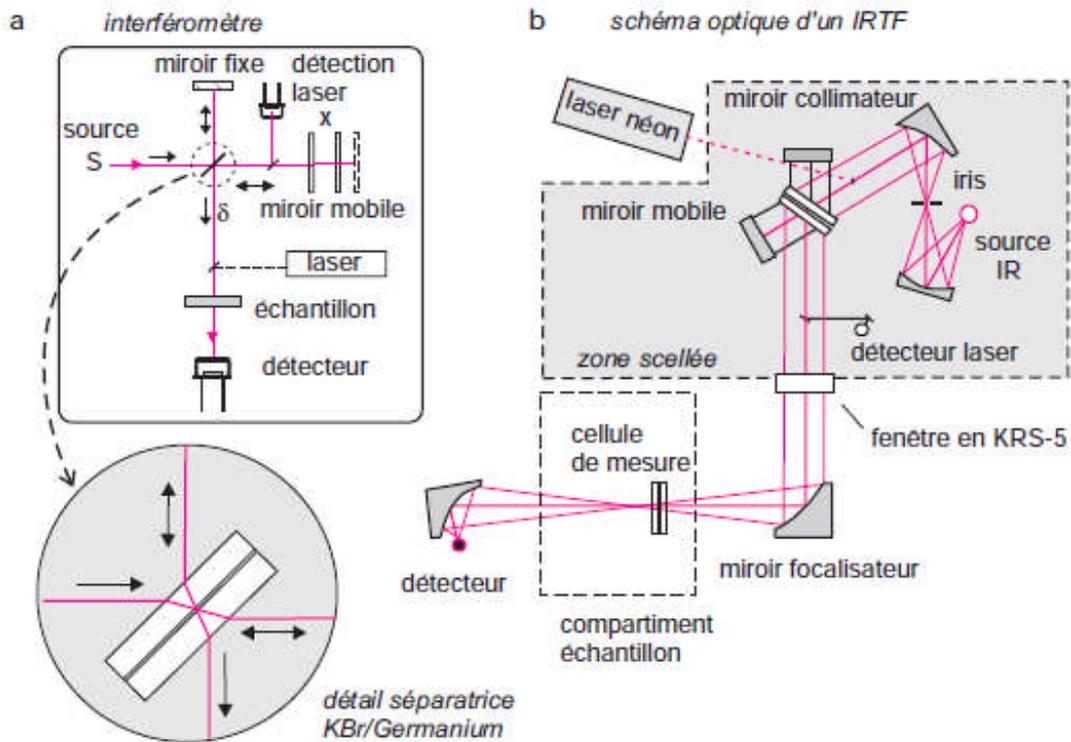


Figure 10 : Montage optique d'un appareil à transformée de Fourier.

II. 5. Source lumineuse de radiation infrarouge

II. 5.1. Sources thermiques

Dans les sources thermiques, la radiation lumineuse est le résultat de l'échauffement d'un filament métallique parcouru par un champ électrique. L'intensité de la source est forte ce qui réduit les problèmes d'amplification du signal.

Remarque : les sources thermiques restent stables pendant de longues périodes.

II. 5.2. Diodes émettrices de lumières

Les diodes émettrices de lumière (DEL) utilisent un semi-conducteur à base de galium à jonction de type. Un potentiel adéquat amène les électrons et les trous à se recombiner, de sorte que l'énergie est libérée sous forme de lumière dans une bande étroite de longueur d'onde.

Les DEL sont très stables en longueur d'onde et très robustes ; contrairement aux sources thermiques, elles peuvent être allumées et éteintes très rapidement en grand nombre de fois.

II.6. Etude des spectres I.R

Les spectres I.R se présente comme suit :

- En ordonnée, la transmittance en %, qui représente le pourcentage de lumière ayant traversé l'échantillon.

- En abscisse, le nombre d'onde (l'inverse de la longueur d'onde) en cm^{-1} .

La spectrométrie IR, permet par interprétation des spectres obtenus, de détecter les groupements fonctionnels contenus dans une molécule: alcool, aldéhyde, cétone, acide..., ainsi que les liaisons entre les carbones d'une chaîne (chaîne saturée, insaturée, caractère aromatique d'une molécule).

Il existe deux zones principales (figure 11) dans un spectre IR :

Une première zone à gauche correspondant à un nombre d'onde supérieur à 1400 cm^{-1} où se trouvent les bandes caractéristiques des liaisons de la molécule. On s'intéresse aussi à la position de la bande (indiquée par son nombre d'onde), à sa largeur (bande large ou fine) et à son intensité (valeur minimale de T)

- Une seconde zone à droite correspondant à un nombre d'onde inférieur à 1400 cm^{-1} , appelée « empreinte digitale » que nous ne pourrions pas analyser à cause de sa complexité et n'est exploitable que par comparaison avec un spectre de référence.

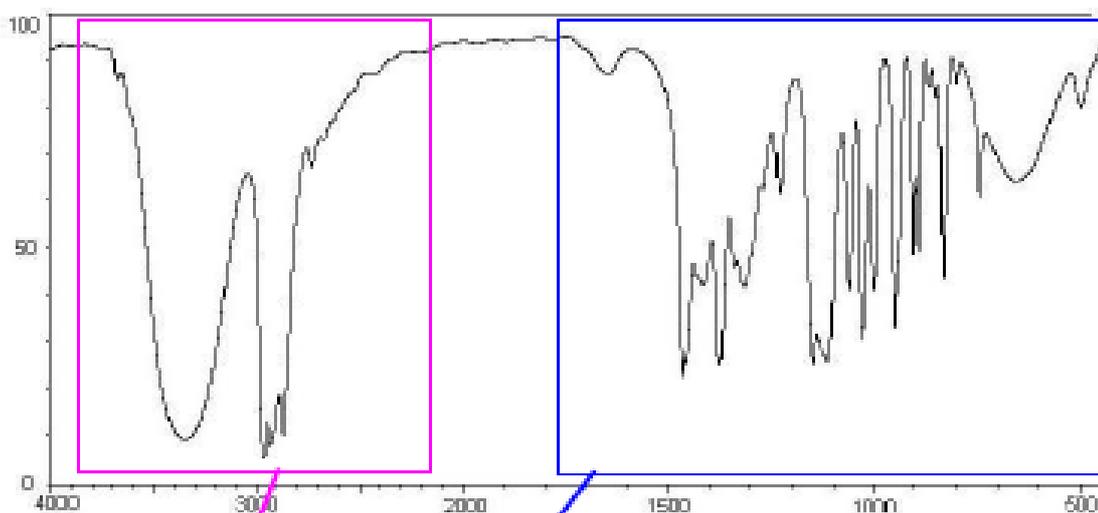


Figure 11 : Allure d'un spectre infrarouge

II.6.1. Préparation de l'échantillon

- * **Echantillon liquide** : La méthode la plus usuelle et la plus simple consiste à placer une goutte des liquides entre 2 plaquettes de constitution assez variable, les plus utilisés sont en sels de potassium ou de sodium, bien que les 4 en sels de K (KBr) présentent l'inconvénient d'être **hygroscopique** (retient de l'humidité).

La goutte est étalée de manière à former un film très fin et homogène. Cet arrangement est scellé, et inséré dans le spectrophotomètre dans la direction perpendiculaire de faisceau d'absorption et en absence du solvant.

- * **Echantillon solide** :

- l'échantillon solide est dissout dans un solvant usuellement on utilise le dichlorobutane, le chloroforme et le tétrachlorure de méthyle. Après cette opération la même goutte est placée dans une cellule. Une autre cellule contient uniquement le solvant utilisé. Les deux cellules sont placées perpendiculairement au 2 faisceau, la seconde servirait essentiellement à extraire l'absorption du solvant pour n'enregistrer que le spectre du produit.

II.6.2. Méthode d'étude d'un spectre I.R

On utilise une table donnant les nombres d'ondes des vibrations de valence (vibrations se produisant le long des liaisons) ou de déformation des principales fonctions chimiques.

Les étapes d'étude du spectre I.R :

- D'abord de repérer le ou les groupements fonctionnels de la molécule dont les plus courants et détectables par spectre IR sont : Les alcools, Les acides carboxyliques, Les aldéhydes, Les cétones, Les esters, Les amines et Les amides.

Au-delà de la détection de ces groupes (tableau II), il est difficile d'obtenir suffisamment d'informations d'un spectre IR pour pouvoir en déduire l'intégralité de la structure de la molécule.

Afin d'identifier les groupes fonctionnels présents dans une molécule, on dispose de tables suivantes :

Tableau II : Nombres d'ondes des vibrations de valence des principales fonctions chimiques.

| Groupement | Liaison | Nombre d'onde cm^{-1} | Vibration | Bande |
|----------------------------|-----------------|--------------------------------|---------------------------------|-----------------------|
| Alcools primaires | O-H | 3640 | élongation | intense et large |
| Alcools secondaires | O-H | 3630 | élongation | intense et large |
| Alcools tertiaires | O-H | 3620 | élongation | intense et large |
| Acides | O-H | 3550-3500 | élongation | intense et très large |
| Amines primaires | N-H | 3500 | élongation asymétrique | faible |
| | | 3410 | élongation symétrique | faible |
| Amides primaires | N-H | 3500 | élongation asymétrique | faible |
| | | 3400 | élongation symétrique | faible |
| Amines secondaires | N-H | 3350-3310 | élongation | faible |
| Amides secondaires | N-H | 3400-3300 | élongation | faible |
| $^{\circ}$ C-H (alcynes) | C-H | 3340-3300 | élongation | moyenne et fine |
| Aromatiques | C-H | 3080-3030 | élongation | moyenne |
| =CH ₂ (alcènes) | C-H | 3080 | élongation asymétrique | moyenne |
| | | 2975 | élongation symétrique | moyenne |
| -CH ₃ (alcanes) | C-H | 2960 | élongation asymétrique | forte |
| | | 2870 | élongation symétrique | moyenne |
| -CH ₂ - | C-H | 2925 | élongation asymétrique | forte |
| | | 2850 | élongation symétrique | forte |
| -C-H | C-H | 2890 | élongation | faible |
| Aldéhydes | C-H | 2830-2720 | élongation asymétrique | faible |
| | | 2650 | élongation symétrique | moyenne |
| Nitrile | -C $^{\circ}$ N | 2260-2210 | élongation | moyenne à forte |
| C $^{\circ}$ C | C $^{\circ}$ C | 2150-2100 | élongation | faible |
| Aromatiques | C-H | 2000-1660 plusieurs bandes | harmonique des déformations C-H | faible |
| Aldéhydes aliphatiques | C=O | 1740-1720 | élongation | forte |
| Aldéhydes aromatiques | C=O | 1715-1695 | élongation | forte |

| | | | | |
|---------------------------------|-----|-----------------|--|------------------|
| Cétones aliphatiques | C=O | 1725-1705 | élongation | forte |
| Acides | C=O | 1800-1740 | élongation | forte |
| Esters aliphatiques | C=O | 1750-1730 | élongation | forte |
| Cétones aromatiques | C=O | 1700-1670 | élongation | forte |
| Amides secondaires | C=O | 1700-1630 | élongation | forte |
| Amides primaires | C=O | 1690-1620 | élongation | forte |
| C=C | C=C | 1645 | élongation | moyenne |
| Aromatiques | C=C | 1600 et 1500 | élongation | variable |
| Amines primaires | N-H | 1640-1560 | déformation cisaillement | forte à moyenne |
| Amines secondaires | N-H | 1580-1490 | déformation | très faible |
| Amides primaires | N-H | 1650-1590 | déformation | moyenne |
| Amides secondaires | N-H | 1570-1510 | déformation | |
| -CH ₂ - | C-H | 1470 | déformation cisaillement | moyenne |
| -CH ₃ (alcanes) | C-H | 1460 1380 | déformation asymétrique déformation symétrique | moyenne |
| -CH | C-H | 1340 | déformation | faible |
| Alcools | O-H | 1410-1330 | déformation dans le plan | |
| Acides | O-H | 1380-1280 | déformation dans le plan | moyenne |
| Amines | C-N | 1230-1030 | élongation | moyenne |
| Amines aromatiques | C-N | 1360-1180 | élongation | moyenne à forte |
| Esters | C-O | 1300-1050 | élongation 2 bandes | |
| Acides | C-O | 1190-1075 | élongation | forte |
| Alcools tertiaires | C-O | 1150 | élongation | variable |
| Ether | C-O | 1150-1070 | élongation | |
| Alcools secondaires | C-O | 1100 | élongation | variable |
| Alcools primaires | C-O | 1050 | élongation | variable |
| Aromatiques | C-H | 900-700 | déformation dans le plan bandes caractéristiques du type de substitution | variable |
| Amine primaire | N-H | 900-650 | déformation torsion | moyenne et large |
| (CH ₂) _n | C-H | 725-720 | déformation balancement n>4 | faible |

II.7. Les principaux groupements fonctionnels

II.7.1. Les alcanes

Le nombre d'onde dépend de la nature du carbone. Un alcane (figure 12) présentera deux bandes d'absorption due à la liaison C-H:

- entre 2800 et 3000 cm^{-1} d'intensité forte
- entre 1415 et 1470 cm^{-1} (lié à la déformation angulaire des liaisons C-H) d'intensité forte.

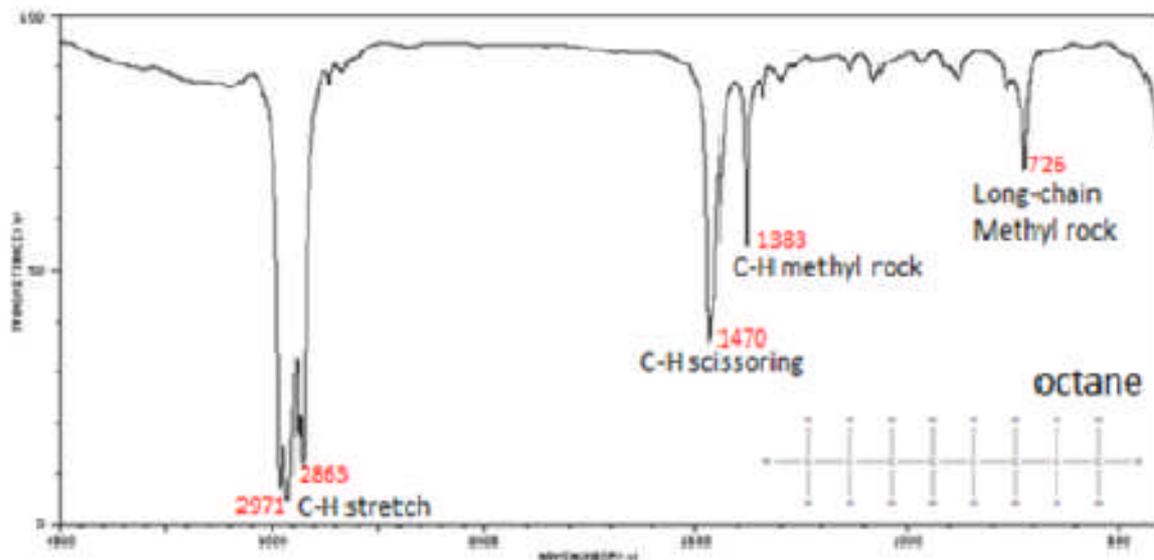


Figure 12 : Spectre I.R. de l'octane

II.7.2. Les alcanes cycliques

La bande de vibration d'élongation de la liaison C-H, ν (C-H) apparaît dans la zone 3100-2990 cm^{-1} . L'augmentation de la tension dans le cycle augmente la fréquence de vibration. S'il n'y a pas de tension, la bande de vibration d'élongation ν (C-H) apparaît à la même fréquence pour un cycle et un aliphatique. La cyclisation diminue la fréquence de vibration δ (C-H).

Exemple :

| | | |
|----------------|-----------------------|-----------------------|
| | Cyclohexane | hexane |
| δ (C-H) | 1452 cm^{-1} | 1468 cm^{-1} |

II.7.3. Les alcènes

Un alcène (figure 13) présentera une bande d'absorption de moyenne intensité due à la liaison C-H comprise entre 3000 et 3100. Les fréquences de vibration dépendent du mode de substitution de l'alcène, et de la conformation (cis et trans).

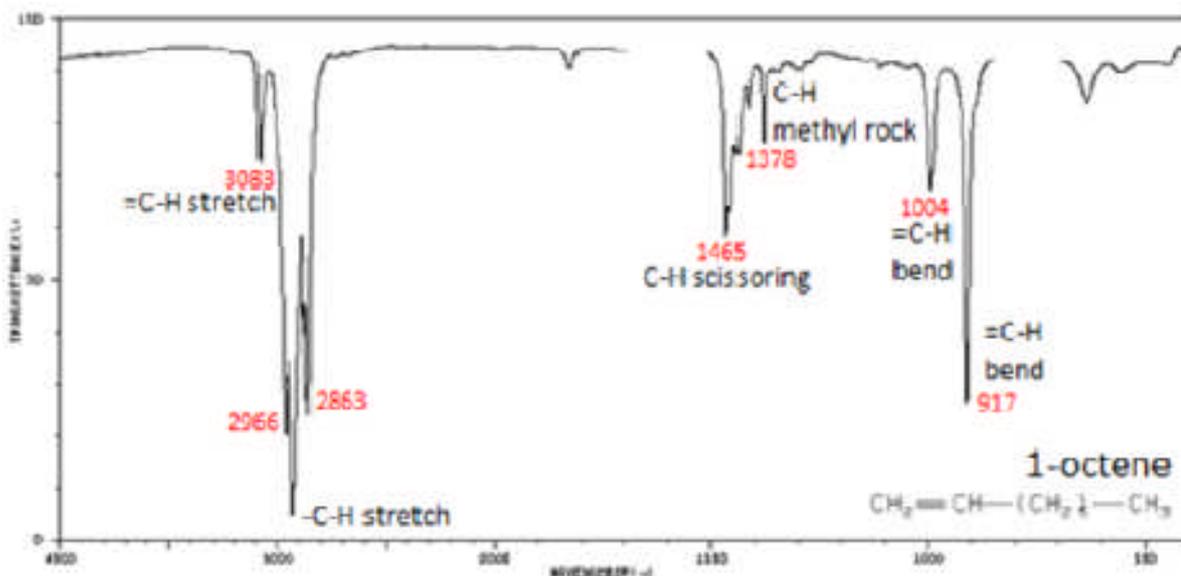


Figure 13 : Spectre IR du 1-octène

II.7.4. Les alcynes

Les bandes caractéristiques des alcynes (figure 14)

ν (HC≡CH) : 2100-2260 cm⁻¹

ν (C-H) : 3330-3267 cm⁻¹

δ (C-H) : 700-610 cm⁻¹

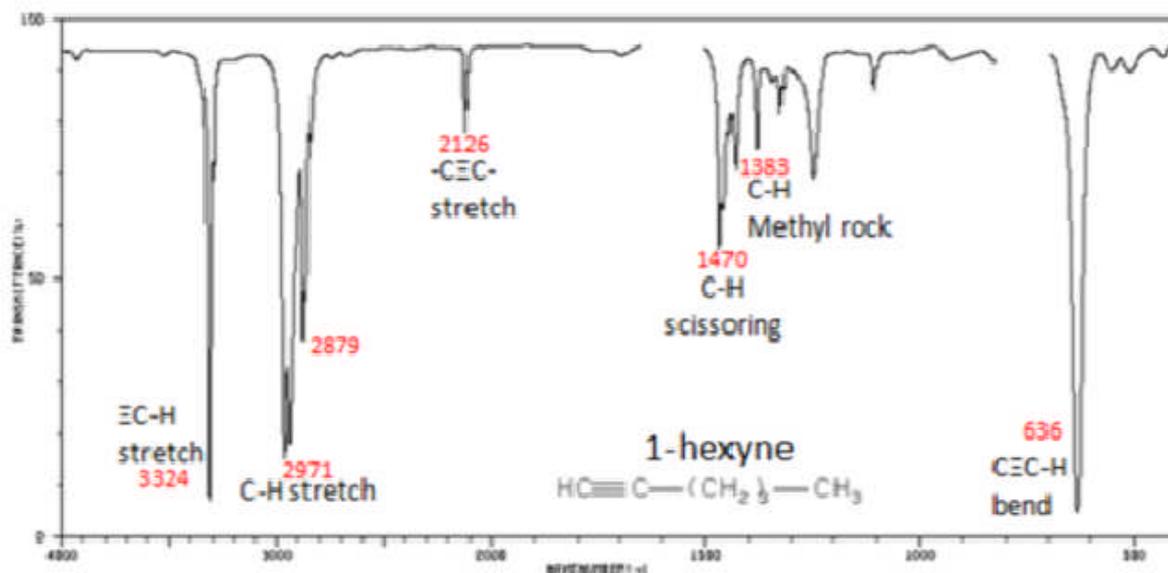


Figure 14 : Spectre IR du 1-hexyne

II.7.5. Les aromatiques

Les aromatiques présentent des bandes de vibration avec lesquelles ils peuvent être identifiés facilement :

ν (C=C) : 1600-1500 cm^{-1}

ν (C-H) : 3100-3010 cm^{-1}

δ (C-H) : 900-690 cm^{-1}

La position de ces bandes dépend de la substitution du cycle, donc du nombre de H voisins (tableau III).

Tableau III : Variation des bandes d'absorption infrarouge selon le degré de substitution

| Groupement | Bande δ (C-H) | Degré de substitution |
|-------------|--------------------------|---|
| 5 H voisins | 710-685 cm^{-1} | mono substitution |
| 4 H voisins | 760-740 cm^{-1} | 1,2 di substitution |
| 3H voisins | 800-770 cm^{-1} | 1,2,3 tri substitution 1,3 di substitution |
| 2H voisins | 840-800 cm^{-1} | tétra substitution 1,3,4 tri substitution 1,4 di substitution |
| 1 H | 900-800 cm^{-1} | |

II.7.6. Les aldéhydes et cétones

La liaison C=O est présente dans les aldéhydes, cétones, esters, amides etc. La fonction carbonyle est l'une des fonctions qu'on caractérise très facilement par infra rouge, par la vibration d'élongation C=O qui présente une bande très intense et fine entre 1870-1540 cm^{-1} .

Ils se caractérisent également par la vibration d'élongation et déformation de C-CO-C dans le domaine 1300-1100 cm^{-1} (figure 15). Dans le cas des aldéhydes, on a aussi la vibration ν (C-H) : 2830-2695 cm^{-1} (figure 16).

Figure spectre dun aldehyde 2- phényl-propanal

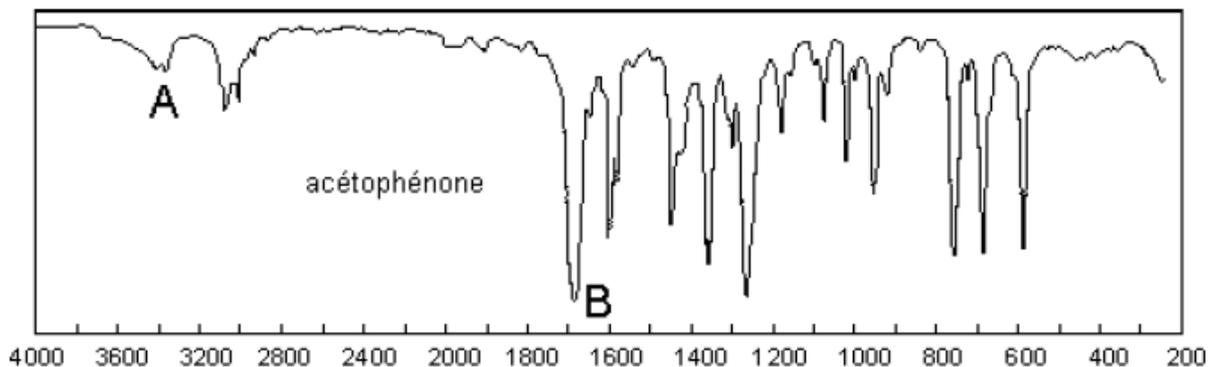


Figure 15 : Spectre d'une cétone acétophénone

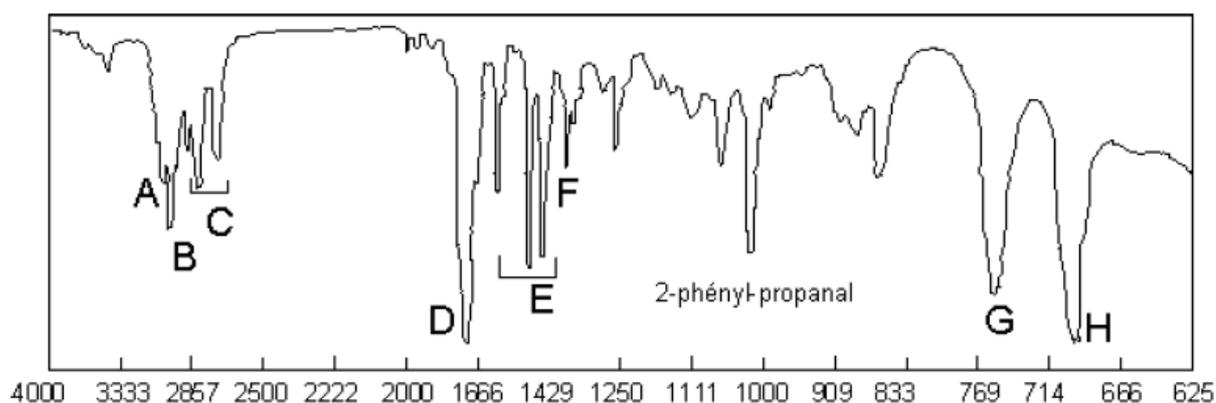


Figure 16 : Spectre d'un aldéhyde 2- phényl-propanal

II.7.7. Les alcools et phénols

L'absorption d'élongation O-H est la bande la plus caractéristique dans les spectres IR des alcools (figure 17 et 18), apparaissant sous forme d'un large pic dans une zone assez étendue (3200-3650 cm^{-1}). La largeur de ce pic est due à des liaisons hydrogène avec d'autres molécules d'alcool ou avec de l'eau (O-H associé). Les alcools anhydres et en solution diluée donnent lieu à des bandes plus effilées dans une fourchette plus étroite (3620-3650 cm^{-1}) (O-H libre).

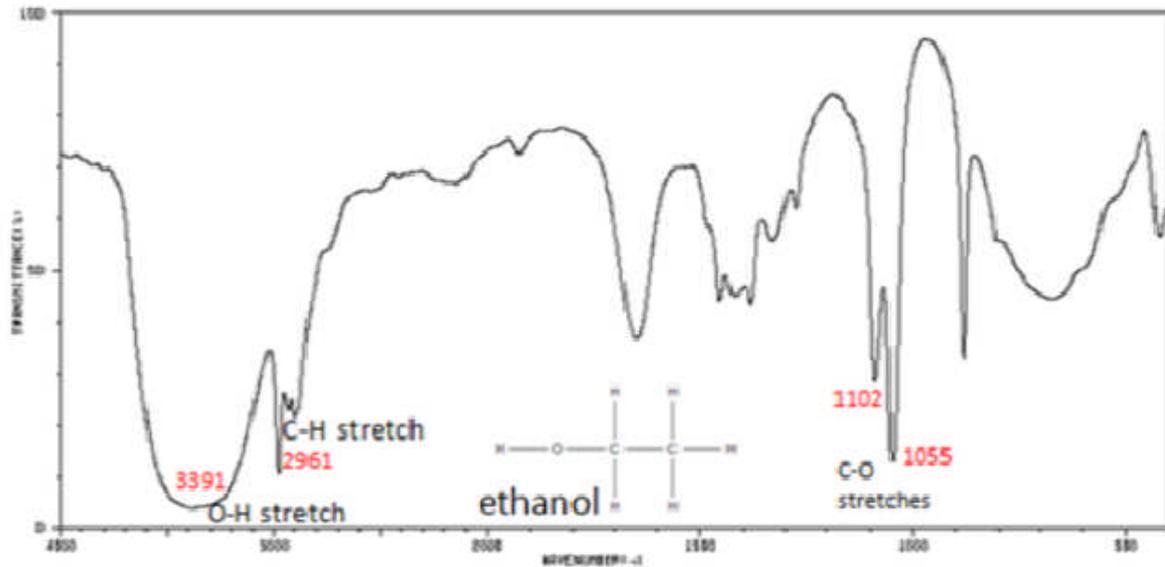


Figure 17 : Spectre IR de l'éthanol

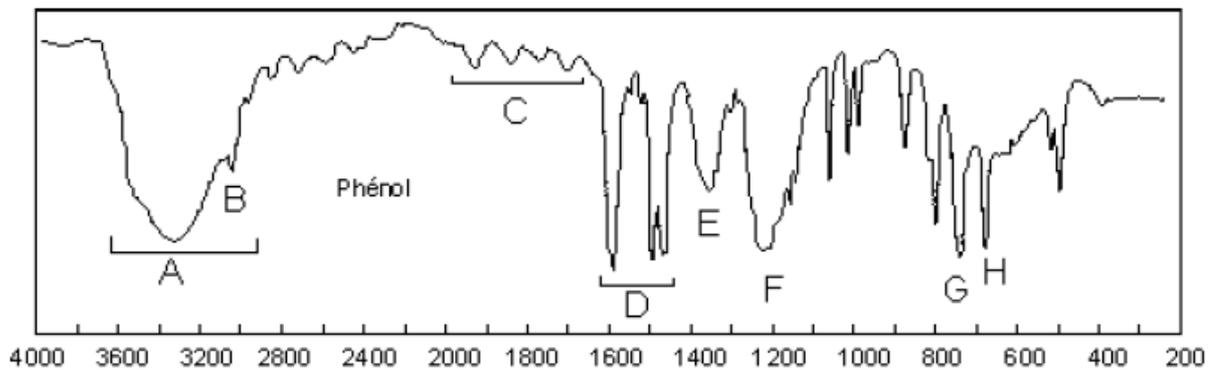


Figure 18 : Spectre d'un phénol

II.7.8. Les Acides carboxyliques COOH

Le groupe carboxyle est constitué d'un groupe carbonyle auquel est lié un substituant hydroxyle. Par voie de conséquence, les deux absorptions caractéristiques dues aux vibrations d'élongation de ces deux entités sont observées dans le spectre infrarouge (figure 19). La liaison O-H donne lieu à une large bande à un nombre d'ondes moins élevé (2500-3300 cm⁻¹) que celui qui est observé avec les alcools, à cause des fortes liaisons hydrogène.

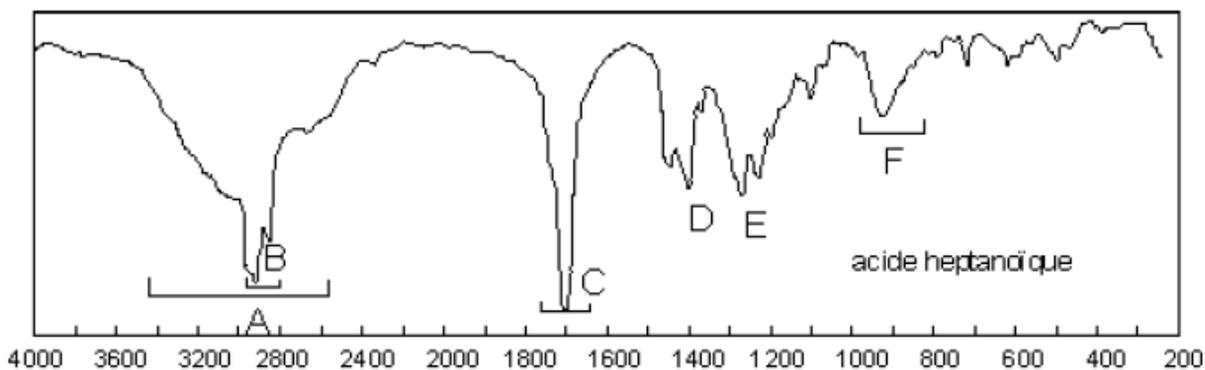


Figure 19 : Spectre de l'acide heptanoïque

II.7.9. Les Amines

La liaison N-H est présente dans les amines et amides etc. ; La position de la bande d'absorption dépend du type de fonction. Sa bande (figure 20) se situe entre 3100 et 3500 cm^{-1} .

Remarque : le spectre IR d'une amine RNH_2 donne 2 bandes alors que celui d'une amine $\text{RNR}'\text{H}$ ne donne qu'une bande (1 seule liaison N-H).

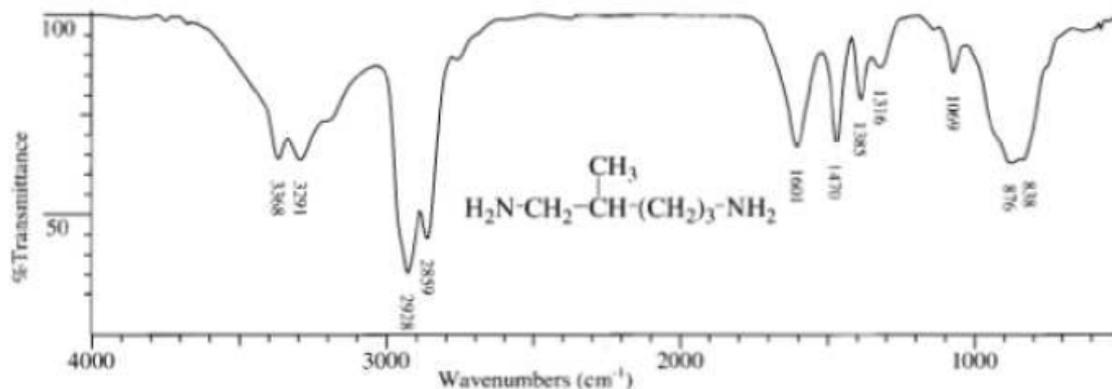


Figure 20 : Spectre IR du 2-méthylpentane 1,5-diamine.

II.7.10. Les nitriles

Les nitriles (figure 21) présentent une bande caractéristique de la liaison $\text{C}\equiv\text{N}$ dans le domaine 2280 -

2210 cm^{-1} . Les amines secondaires présentent une seule 3350 - 3310 cm^{-1} .

Ces bandes sont plus fines que celles de spectrométrie présentent deux bandes de vibration ν (N-H) dans le domaine 3330 - 3250 cm^{-1} . Ces bandes sont plus fine que celle ν (O-H).

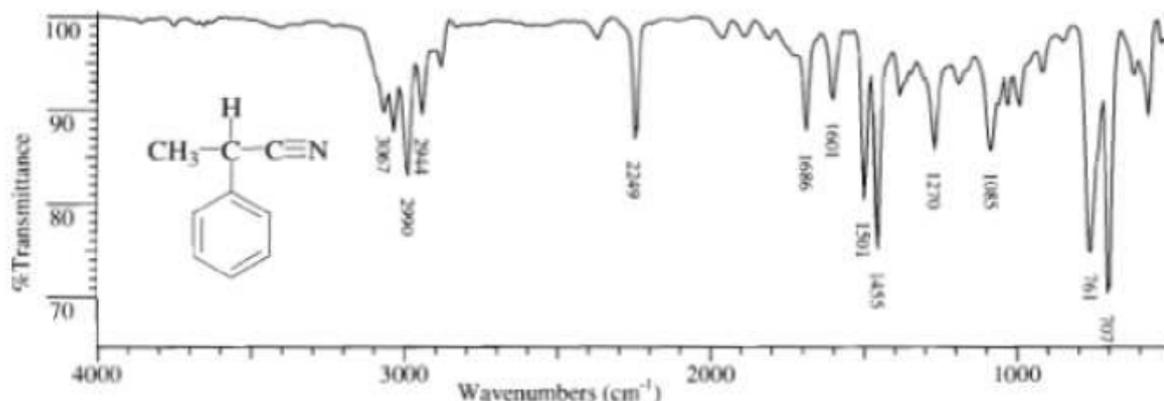


Figure 21 : Spectre IR du 2-phenylpropanenitrile.

II.8. Série d'exercices N°02

Exercice 01

Le chlorure d'hydrogène gazeux présente un pic à 2890 cm^{-1} dû à la vibration d'élongation de la liaison H-Cl.

- 1)- Calculer la constante de rappel de la liaison H-Cl.
- 2)- Calculer le nombre d'onde du pic d'absorption de la liaison D-Cl en admettant que la constante de rappel est égale à celle de la liaison H-Cl. Conclure.

2D : deutérium (isotope de l'hydrogène).

Exercice 02

Dosage des hydrocarbures totaux dans les eaux par spectrophotométrie IR (Norme AFNOR T 90 – 114).

Principe : extraction des composés hydrocarbonés par le tétrachlorure de carbone en milieu acide ; séparation des hydrocarbures des autres matières organiques par chromatographie ; détermination spectrophotométrique de la somme des absorbances aux quatre longueurs d'onde dans l'IR : 3 290 nm, 3 380 nm, 3 420 nm et 3 510 nm.

1. Calculer, en cm^{-1} , les nombres d'onde correspondant à ces longueurs d'onde.
2. À quelles vibrations correspondent ces nombres d'onde ?
3. Pourquoi utilise-t-on le tétrachlorure de carbone comme solvant ?

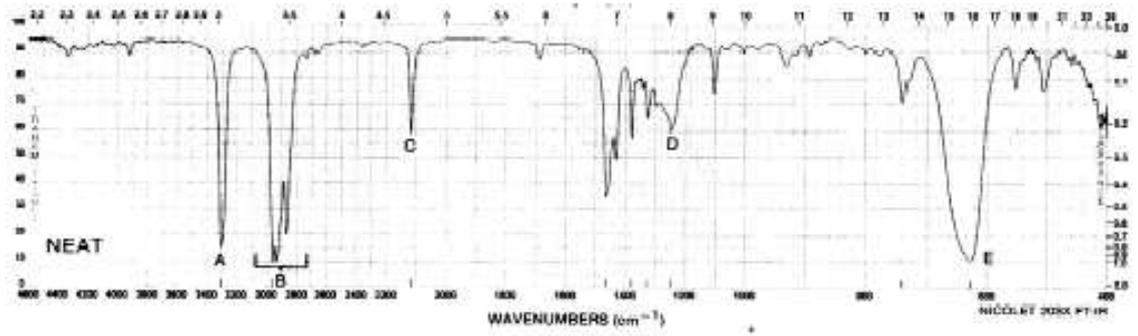
Exercice 03

Sachant que la fréquence fondamentale du monoxyde de carbone est de $2\,135\text{ cm}^{-1}$ dans le tétrachlorure de carbone comme solvant, en déduire la « constante » de force de la liaison de cette molécule dans ces conditions.

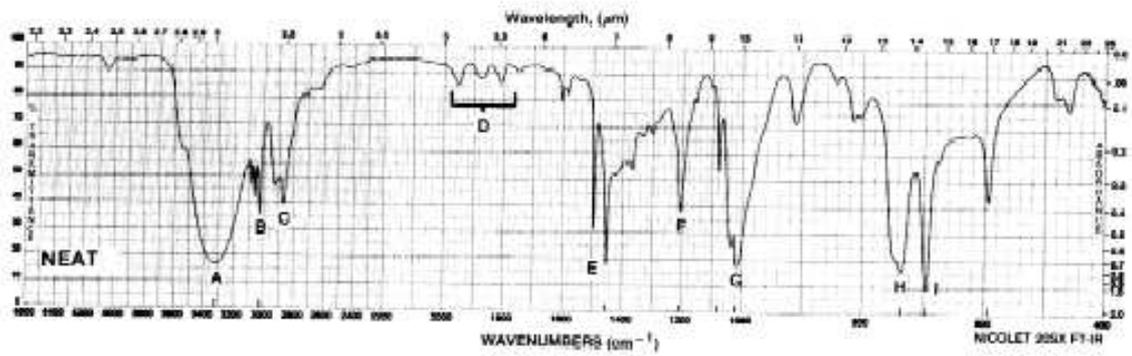
Exercice 04

Soient les spectres infra-rouge 1-3 représentés ci-dessous. Ils correspondent chacun à un composé figurant dans la liste suivante : aminobenzène, pentan-2-one, phénylméthanol, méthylbenzène, hex-1-yne, phénol.

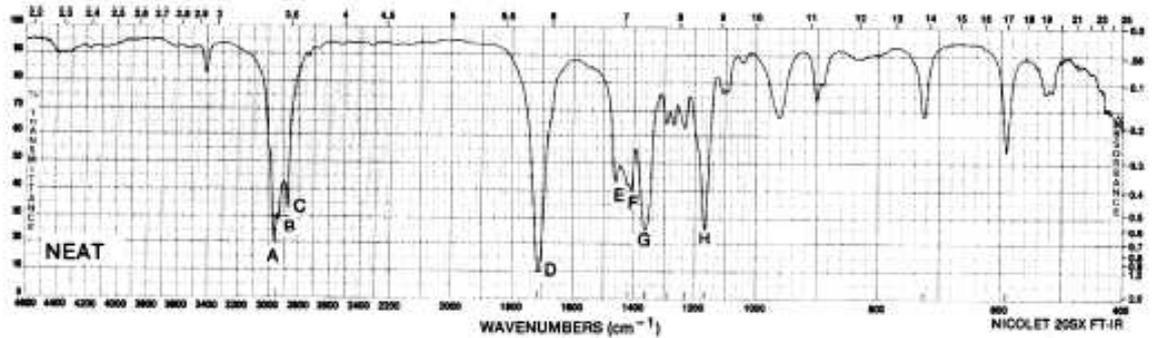
Attribuer à chaque spectre le composé correspondant, en indexant les bandes les plus importantes.



Spectre 1



Spectre 2



Spectre 3

Exercice 05

1. Quelle est l'énergie transportée par une radiation définie par un nombre d'onde de $1\ 000\ \text{cm}^{-1}$?
2. Transformer $l = 15\ \text{mm}$ en cm^{-1} , puis en m^{-1} . À quelle longueur d'onde correspond $1\ 700\ \text{cm}^{-1}$?

II.9. Corrigé de la série d'exercices N°02

Exercice 01

1)- On applique la loi de Hooke :

$$k = 478,8\ \text{N}\cdot\text{m}^{-1}.$$

2)- $\bar{\nu} = 2075,2\ \text{cm}^{-1}$.

Exercice 02

1- $3\ 040, 2\ 959, 2\ 924, 2\ 849\ \text{cm}^{-1}$;

2- Il s'agit de vibrations d'élongation des liaisons C-H aromatiques pour la première, alcaniques pour les trois autres ;

3- CCl_4 n'apporte pas de liaisons C-H ;

$$A_{\text{tot}} = 2,21 \times 10^{-2}C - 2,07 \times 10^{-4}, \quad (r = 0,999999) ; \quad C = 0,222\ \text{g}\cdot\text{L}^{-1}.$$

Exercice 03

La masse réduite approximative est : $1,138 \times 10^{-26}\ \text{kg}$; on trouve $k = 1\ 845\ \text{N}\cdot\text{m}^{-1}$.

Exercice 04

En utilisant les tables, on peut facilement identifier les composés en se basant surtout sur les groupes fonctionnels, on doit trouver :

Spectre 1: hex1-yne ($\bar{\nu}(\equiv\text{C}-\text{H}) = 3310\ \text{cm}^{-1}$, $\bar{\nu}(\text{C}\equiv\text{C}) = 2119\ \text{cm}^{-1}$).

Spectre 2 : phénylméthanol ($\bar{\nu}(\text{OH}) = 3330\ \text{cm}^{-1}$)

Spectre 3 : pentan2-one ($\bar{\nu}(\text{C}=\text{O}) = 1717\ \text{cm}^{-1}$)

Exercice 05

1. $E = 1,99 \times 10^{-20}\ \text{J}$. Rapporté à une mole on trouvera $12\ 000\ \text{J}$ (soit $2,87\ \text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$).
2. $\bar{\nu} = 666,67\ \text{cm}^{-1}$ (ou $66\ 667\ \text{m}^{-1}$) ; $\lambda = 5,88\ \text{mm}$.