



**TD IR**

godin.lionel@orange.fr  
<http://ligodin.free.fr>

**ASPECT CALCULATOIRE  
Spectroscopie IR**

**Exercice 1 :**

Donner le nombre d'onde correspondant à la longueur d'onde  $\lambda = 12 \mu\text{m}$  en  $\text{cm}^{-1}$ .

**Exercice 2 :**

À quelle longueur d'onde exprimée en nm correspond le nombre d'onde  $800 \text{ cm}^{-1}$  ?

À quelle bande spectrale correspond cette longueur d'onde ?

À quelle fréquence correspond cette longueur d'onde ?

**Exercice 3 :**

La liaison entre deux atomes d'une molécule diatomique est caractérisée par une constante de force de valeur  $k = 1000 \text{ N.m}^{-1}$ . Cette liaison est responsable d'une absorption située à  $2000 \text{ cm}^{-1}$ .

En admettant que l'énergie de la radiation incidente est transformée en énergie de vibration, donner une valeur approchée de l'augmentation de l'élongation maximum de cette liaison.

**Exercice 4 :**

Sachant que la fréquence fondamentale du monoxyde de carbone est de  $6,405 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$ , en déduire la constante de force de la liaison de cette molécule.

**Exercice 5 :**

## TRAVAUX DIRIGES n° 2 - 2024/2025

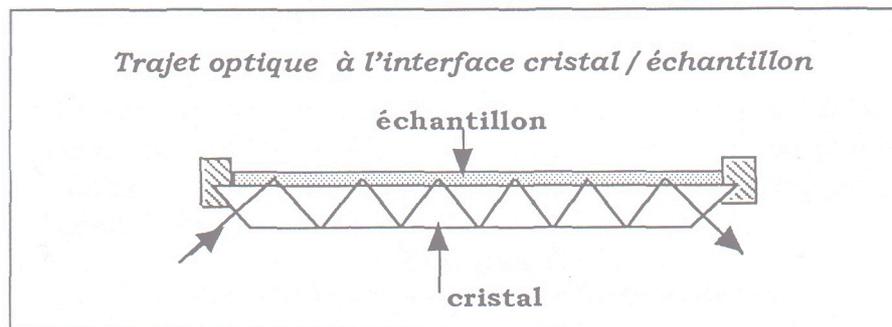
Licence des Industries pharmaceutiques, cosmétologiques et de santé : gestion, production et valorisation  
Options CDA

---

La bande relative à la vibration de valence de la liaison C-C correspond à un nombre d'onde compris entre 1260 et 1100  $\text{cm}^{-1}$ . Considérant les distances interatomiques suivantes  $d_{\text{C-C}} = 154 \text{ pm}$ ,  $d_{\text{C-Cl}} = 176 \text{ pm}$ , évaluer la position de la bande relative à la vibration de valence C-Cl.

### Exercice 6 :

Soit un cristal de ZnSe d'un accessoire ATR de forme parallélépipédique.



Son indice de réfraction est  $n_1 = 2,4$  et ses dimensions sont  $L \times l \times h = 24 \times 8 \times 3 \text{ mm}$ .

On rappelle que la profondeur de pénétration est donnée par :

$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi \cdot n_1 \sqrt{(\sin^2 \theta - n_{2/1}^2)}}$$

Sachant que l'angle d'incidence vaut  $45^\circ$  et que l'on dépose sur la totalité de sa face supérieure une substance liquide d'indice de réfraction  $n_2 = 1,4$ , calculer :

- 1) l'angle critique de ce cristal lorsqu'il est recouvert de la substance.
- 2) le nombre  $N$  de réflexions sur la face supérieure.
- 3) la profondeur de pénétration  $d_p$  du faisceau ainsi que le trajet effectif ( $EPL = N \cdot d_p$ ) pour les nombre d'onde  $4000 \text{ cm}^{-1}$  et  $400 \text{ cm}^{-1}$

## TRAVAUX DIRIGES n° 2 - 2024/2025

Licence des Industries pharmaceutiques, cosmétologiques et de santé : gestion, production et valorisation  
Options CDA

---

### Spectroscopie IR

#### Exercice 1 :

Donner les nombres d'onde (en  $\text{cm}^{-1}$ ) des bandes d'absorption identifiant les fonctions organiques des molécules suivantes :

Benzylamine

2-ethylbutanal

#### Exercice 2 :

Interprétation de groupes fonctionnels organiques, à partir des spectres suivants :

- |                              |                     |
|------------------------------|---------------------|
| 1) <b>Alcane</b>             | (Hexane)            |
| 2) <b>Alcène</b>             | (Hexène)            |
| 3) <b>Alcyne</b>             | (Heptyne)           |
| 4) <b>Aromatique</b>         | (Toluène)           |
| 5) <b>Alcool</b>             | (Hexanol)           |
| 6) <b>Amine</b>              | (Hexylamine)        |
| 7) <b>Aldéhyde</b>           | (Heptaldehyde)      |
| 8) <b>Cétone</b>             | (Heptanone)         |
| 9) <b>Acide carboxylique</b> | (Acide Heptanoïque) |
| 10) <b>Ester</b>             | (Acétate d'éthyle)  |

# TRAVAUX DIRIGES n° 2 - 2024/2025

Licence des Industries pharmaceutiques, cosmétologiques et de santé : gestion, production et valorisation  
Options CDA

liaison	nature	nombre d'onde (cm <sup>-1</sup> )	intensité
O-H alcool libre	valence	3 580 – 3 670	F ; fine
O-H alcool lié	valence	3 200 – 3 400	F ; large
N-H amine	valence	3 100 – 3 500	m
imine			
N-H amide	valence	3 100 – 3 500	F
C <sub>dt</sub> -H	valence	3 300 – 3 310	m ou f
C <sub>tri</sub> -H	valence	3 000 – 3 100	m
C <sub>tri</sub> -H aromatique	valence	3 030 – 3 080	m
C <sub>tét</sub> -H	valence	2 800 – 3 000	F
C <sub>tri</sub> -H aldéhyde	valence	2 750 – 2 900	m
O-H acide carboxylique	valence	2 500 – 3 200	F à m ; large
C≡C	valence	2 100 – 2 250	f
C≡N	valence	2 120 – 2 260	F ou m
C=O anhydride	valence	1 700 – 1 840	F ; 2 bandes
C=O chlorure d'acyle	valence	1 770 – 1 820	F
C=O ester	valence	1 700 – 1 740	F
C=O aldéhyde et cétone	valence	1 650 – 1 730	F
		abaissement de 20 à 30 cm <sup>-1</sup>	
		si conjugaison	
C=O acide	valence	1 680 – 1 710	F
C=C	valence	1 625 – 1 685	m
C=C aromatique	valence	1 450 – 1 600	variable ; 3 ou 4 bandes
N=O	valence	1 510 – 1 580	F ; 2 bandes
		1 325 – 1 365	
C=N	valence	1 600 – 1 680	F
N-H amine ou amide	déformation	1 560 – 1 640	F ou m
C <sub>tét</sub> -H	déformation	1 415 – 1 470	F
C <sub>tét</sub> -H (CH <sub>3</sub> )	déformation	1 365 – 1 385	F ; 2 bandes
C-O	valence	1 050 – 1 450	F
C-C	valence	1 000 – 1 250	F
C-F	valence	1 000 – 1 040	F
C <sub>tri</sub> -H aromatique monosubstitué	déformation	730 – 770	F ; 2 bandes
		690 – 770	
C <sub>tri</sub> -H aromatique o-disubstitué	déformation	735 – 770	F
m-disubstitué	déformation	750 – 810	F et m ; 2 bandes
		680 – 725	
p-disubstitué	déformation	800 – 860	F
C <sub>tri</sub> -H aromatique trisubstitué	déformation	770 – 800	F et m ; 2 bandes
1,2,3		685 – 720	
1,2,4	déformation	860 – 900	F et m ; 2 bandes
		800 – 860	
1,3,5	déformation	810 – 865	F ; 2 bandes
		675 – 730	
C-Cl	valence	700 – 800	F
C-Br	valence	600 – 750	F
C-I	valence	500 – 600	F

F : fort ; m : moyen ; f : faible

Table des nombres d'onde des vibrations de valence et de déformation de quelques groupes fonctionnels.

• distinguer les atomes de carbone tétraogonaux (notés C<sub>tét</sub>), trigonaux (notés C<sub>tri</sub>) et digonaux (notés C<sub>dt</sub>).