

UNIVERSITE PARIS 8

CONCOURS EXTERNE

BAP : B

Emploi-type : Assistant ingénieur en analyse chimique

SESSION 2017

ADMISSIBILITE

EPREUVE ECRITE

Durée : 3 h - coefficient : 4

Mardi 23 mai 2017

IMPORTANT :

Vous êtes priés de composer directement sur le sujet.

Sont interdits :

La consultation de documents, l'usage des calculatrices programmables, téléphones portables, montres connectées et autres appareils connectés à Internet.

Il vous est rappelé que votre identité ne doit figurer que sur la page de garde du sujet.

Toute mention d'identité ou signe distinctif porté sur toute autre partie de la copie que vous remettrez en fin d'épreuve (dans le texte du devoir, en fin de copie...) mènera à l'annulation de votre épreuve.

Nombre de pages du sujet : 60

Nom :	
--------------	--



UNIVERSITE PARIS 8

CONCOURS EXTERNE

BAP : B

Emploi-type : Assistant ingénieur en analyse chimique

SESSION 2017

ADMISSIBILITE

N° d'anonymat : <i>(Ne rien écrire dans ce cadre)</i>	
---	--

Note : / 20

REPONDRE DIRECTEMENT SUR CETTE COPIE

QCM : (58 pts/322) Certaines questions nécessitent plusieurs réponses

1. Quel isotope du carbone a son spin nucléaire égal à 1/2 ?
 - ☐ ^{11}C
 - ☐ ^{12}C
 - ☐ ^{13}C
 - ☐ ^{14}C

2. En RMN, quelle est la sensibilité du carbone usuellement utilisé par rapport au proton ?
 - ☐ 1/3
 - ☐ 1/4
 - ☐ 1/5
 - ☐ 1/6

3. Comment écrit-on la loi de Bragg ?
 - ☐ $2d\sin\theta = n\lambda$
 - ☐ $E = h\nu$
 - ☐ $\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+]$
 - ☐ $U = RI$

4. En spectroscopie infra-rouge, quelle est la caractéristique de la raie attribuable à l'eau située à environ 3300 cm^{-1} ?
 - ☐ fine et faiblement intense
 - ☐ fine et fortement intense
 - ☐ large et faiblement intense
 - ☐ large et fortement intense

5. Que trace-t-on sur l'axe des abscisses d'un spectre infrarouge ?
 - ☐ le champ magnétique
 - ☐ le déplacement chimique
 - ☐ le nombre d'onde
 - ☐ la vitesse

6. Quelle est l'unité du champ magnétique ?

- ☐ le Hertz
- ☐ l'Ohm
- ☐ le Tesla
- ☐ le Volt

7. En RMN du ^1H , à quoi sert le TMS ?

- ☐ à accorder
- ☐ à *locker*
- ☐ à référencer
- ☐ à *shimer*

8. Quelle est l'abondance naturelle du ^{13}C ?

- ☐ 0,5 %
- ☐ 1 %
- ☐ 25 %
- ☐ 99 %

9. Dans l'abréviation EDS, que signifie le E ?

- ☐ electronic
- ☐ elemental
- ☐ energy
- ☐ entropy

10. Quel est le domaine, en longueur d'onde λ , de l'ultra-violet ?

- ☐ $\lambda < 400 \text{ nm}$
- ☐ $400 \text{ nm} < \lambda < 700 \text{ nm}$
- ☐ $700 \text{ nm} < \lambda < 900 \text{ nm}$
- ☐ $700 \text{ nm} < \lambda$

11. En RMN, un proton est couplé à trois autres protons : quelle est la multiplicité de son massif ?

- ☐ singulet
- ☐ doublet
- ☐ triplet
- ☐ quadruplet

12. A l'aide de quel(s) appareil(s) peut-on mesurer la viscosité d'un fluide ? (plusieurs réponses sont attendues)

- ☐ ATG
- ☐ Viscosimètre d'Ostwald
- ☐ rhéomètre rotatif
- ☐ zêtamètre

13. La DSC permet de déterminer (plusieurs réponses sont attendues) :

- ☐ Le degré de polymérisation d'un polymère
- ☐ Le point de fusion d'un polymère
- ☐ La température de transition vitreuse d'un polymère
- ☐ La masse d'un polymère

14. Une suspension colloïdale (plusieurs réponses sont attendues) :

- ☐ est une solution hétérogène
- ☐ est une dispersion de particules
- ☐ diffuse à travers une membrane semi-perméable
- ☐ peut être synthétique ou naturelle

15. En chromatographie liquide, que signifie « travailler en mode gradient » ?

- ☐ Travailler en faisant varier la température
- ☐ Travailler à composition variable de la phase mobile au cours de l'élution
- ☐ Travailler en faisant varier le débit
- ☐ Travailler avec des concentrations croissantes d'échantillon

16. Qu'est-ce que l'électrospray ?

- ☐ Un mode d'ionisation
- ☐ Un mode d'injection
- ☐ Un analyseur
- ☐ Un détecteur

17. Le vide secondaire se situe entre :

- ☐ 100 et 0.1 Pa
- ☐ 10^5 et 100 Pa
- ☐ 10^{-5} et 10^{-10} Pa
- ☐ 0.1 et 10^{-5} Pa

18. Une base est (plusieurs réponses sont attendues) :

- ☐ Accepteur de proton
- ☐ Donneur de proton
- ☐ Donneur d'électron
- ☐ Ampholyte

19. Parmi les propositions suivantes concernant les critères de validité d'une méthode d'analyse, laquelle est exacte ?

- ☐ La pente de la droite d'étalonnage permet d'apprécier la spécificité de la méthode
- ☐ La répétabilité s'apprécie à partir de mesures réalisées à des jours différents
- ☐ La sensibilité est représentée par la pente de la droite d'étalonnage
- ☐ Dans toute méthode d'analyse, la relation entre signal et concentration est linéaire

20. La loi de Beer-Lambert (plusieurs réponses sont attendues) :

- ☐ S'applique aux dosages polarimétriques
- ☐ S'applique aux dosages spectrophotométriques
- ☐ Est valable quelle que soit la concentration de la solution
- ☐ Est une loi additive

21. Parmi les propositions suivantes, lesquelles sont exactes ? En chromatographie d'échange d'ions, on peut utiliser comme échangeur :

- ☐ Des échangeurs pelliculaires
- ☐ De la silice micronisée
- ☐ Des silices greffées avec des groupements alkyles en C8 ou C18
- ☐ Des silices greffées avec des chaînes à groupement ammonium quaternaire

22. Parmi ces solvants, quels sont ceux utilisés en chromatographie en phase inverse (plusieurs réponses sont attendues) :

- ☐ Hexane
- ☐ Eau
- ☐ Acétonitrile
- ☐ Dichlorométhane

23. Comment puis-je augmenter l'efficacité de ma séparation chromatographique (pour la même composition de phase mobile et même type de phase stationnaire) ? – plusieurs réponses sont attendues –

- ☐ en augmentant la longueur de la colonne
- ☐ diminuant la granulométrie de la phase stationnaire
- ☐ en changeant les paramètres du détecteur utilisé
- ☐ en modifiant le débit

24. Parmi les propositions suivantes concernant la qualité d'une séparation en HPLC entre deux constituants d'un mélange, laquelle est exacte ? La qualité de la séparation est appréciée par :

- ☐ Le facteur de réponse
- ☐ La hauteur des pics
- ☐ La largeur des pics
- ☐ Le facteur de résolution

25. Parmi les propositions suivantes, lesquelles sont exactes ? Le coefficient d'extinction molaire d'une substance absorbante peut :

- ☐ Varier avec la température
- ☐ Varier avec la longueur d'onde
- ☐ Etre modifié par la nature du solvant
- ☐ Varier avec la longueur du trajet optique

26. Parmi les propositions suivantes, lesquelles sont exactes ? Les fonctions amines :

- ☐ Ont un groupement fonctionnel oxygéné
- ☐ Ont un groupement fonctionnel azoté
- ☐ Sont des bases
- ☐ Ont un groupement fonctionnel oxydant

27. Parmi les propositions suivantes concernant la fluorimétrie, une seule proposition est fausse. Laquelle ?

- ☐ La longueur d'onde du maximum de fluorescence est plus élevée que la longueur d'onde du maximum d'absorption
- ☐ Pour fluorescer, les molécules doivent absorber dans l'UV/visible
- ☐ La fluorescence a pour origine l'existence d'électrons excités singulet
- ☐ La fluorescence est un phénomène dont la durée est de l'ordre de la seconde

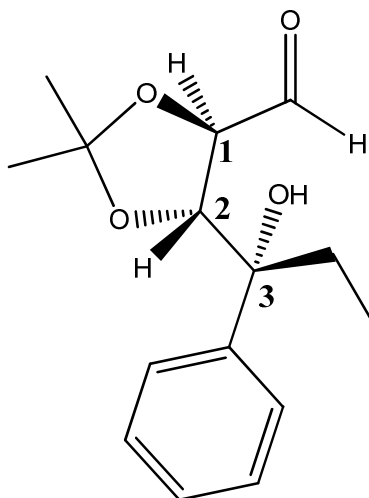
28. Choisir dans la liste les caractéristiques physiques sans unité :

- ☐ température d'ébullition
- ☐ masse volumique
- ☐ densité
- ☐ indice de réfraction

29. En chromatographie liquide, la hauteur équivalente à un plateau théorique : (plusieurs réponses sont attendues)

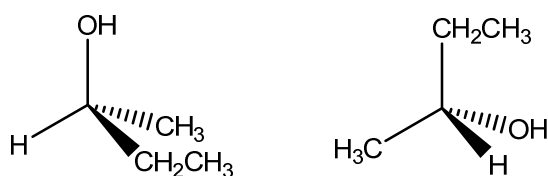
- ☐ Dépend du diamètre des particules
- ☐ Est fonction de la vitesse linéaire de la phase mobile
- ☐ Est indépendante du coefficient de diffusion de la substance dans la phase mobile
- ☐ Est une grandeur qui caractérise l'efficacité de la colonne

30. Quelle est la configuration des carbones asymétriques présents dans la molécule suivante :



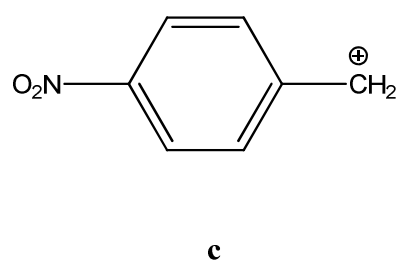
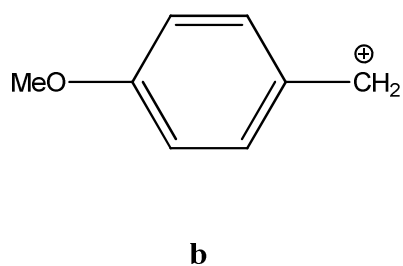
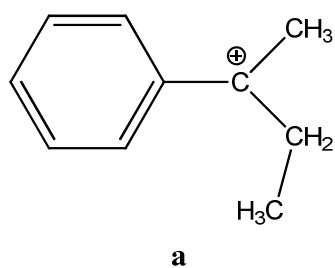
- ☐ 1 : R, 2 : S, 3 : S
- ☐ 1 : R, 2 : S, 3 : R
- ☐ 1 : R, 2 : R, 3 : R
- ☐ 1 : S, 2 : R, 3 : S

31. Quelle relation existe-t-il entre les 2 molécules suivantes :



- ☐ identiques
- ☐ énantiomères
- ☐ diastéréoisomères
- ☐ mésomères

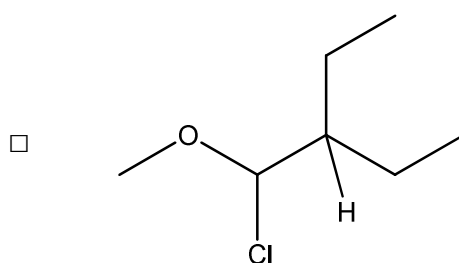
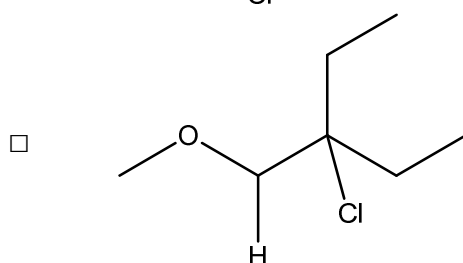
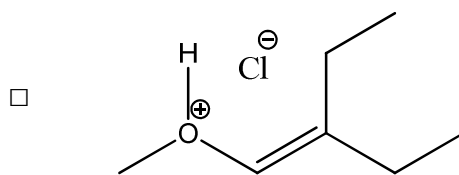
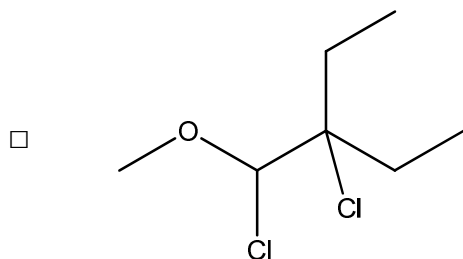
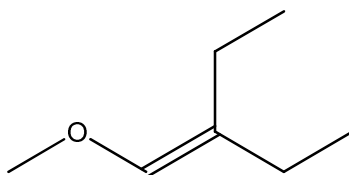
32. On souhaite classer les carbocations suivants par ordre de stabilité croissante :



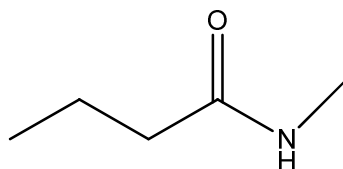
Quel est le bon classement ?

- ☐ $a < b < c$
- ☐ $c < b < a$
- ☐ $b < c < a$
- ☐ $c < a < b$

33. Quel est le produit formé par addition d'HCl sur l'alcène suivant ?



34. Quel est le nom de la fonction présente dans la molécule suivante :



- ☐ amine
- ☐ amide
- ☐ imide
- ☐ amino-acide

35. Quelle est l'unité de mesure internationale de Pression ?

- ☐ Le Bar
- ☐ Le Pascal
- ☐ L'Atmosphère
- ☐ Le Torr

36. Le bronze est un alliage de :

- ☐ Cuivre et de fer
- ☐ D'étain et de fer
- ☐ D'étain et de cuivre
- ☐ De plomb et de fer

37. Combien une maille cristallographique cubique face centrée possède-t-elle de nœuds en propre ?

- ☐ 4
- ☐ 8
- ☐ 12
- ☐ 14

38. À quelle mesure correspond $32 \text{ hm} + 4 \text{ dm} + 2 \text{ cm} + 12 \text{ dam} + 8 \text{ m}$?

- ☐ 33,2842 km
- ☐ 3249,22 m
- ☐ 3328,42 m
- ☐ 40,2842 m

39. - L'argon est :

- ☐ Un halogène
- ☐ Un gaz rare
- ☐ Un métal
- ☐ Un alcalino-terreux

40. En chromatographie en phase gazeuse (plusieurs réponses sont attendues)

- ☐ la phase stationnaire peut être liquide et la phase mobile gazeuse
- ☐ la phase stationnaire peut être solide et la phase mobile liquide
- ☐ la phase stationnaire peut être solide et la phase mobile gazeuse
- ☐ la phase stationnaire est gazeuse et la phase mobile liquide

41. On souhaite séparer en chromatographie en phase gazeuse un mélange d'hydrocarbures poly aromatiques : benzo(a)pyrène ($C_{20}H_{12}$), fluorène ($C_{13}H_{10}$), anthracène ($C_{14}H_{10}$), naphthalène ($C_{10}H_8$), le tétracène ($C_{18}H_{12}$). La phase stationnaire est une DB5 moyennement polaire. La phase mobile est de l'hélium. Prédire l'ordre d'élution :

- ☐ fluorène, anthracène, naphthalène, tétracène, benzo(a)pyrène
- ☐ naphthalène, fluorène, anthracène, tétracène, benzo(a)pyrène
- ☐ fluorène, benzo(a)pyrène, anthracène, naphthalène, tétracène,
- ☐ anthracène, naphthalène, tétracène, fluorène, benzo(a)pyrène

42. En spectrométrie de masse on mesure :

- ☐ le nombre de protons
- ☐ le rapport masse/charge
- ☐ la masse molaire
- ☐ la température d'ébullition
- ☐ le nombre de carbones

43. En spectrométrie de masse utilisant l'électro nébulisation en mode positif comme mode d'ionisation quelles valeurs peuvent être mesurées pour l'aniline (amine aromatique) $C_6H_5-NH_2$

- ☐ 93
- ☐ 94
- ☐ 92
- ☐ 116

44. Quelles affirmations sont vraies :

- ☐ en ionisation MALDI, l'échantillon est irradié par un faisceau laser.
- ☐ les ions sont produits dans l'analyseur du spectromètre de masse.
- ☐ les ions sont séparés en phase liquide.
- ☐ dans un analyseur à temps de vol, un ion de rapport m/z 258 arrive au détecteur avant un ion de rapport m/z 522.
- ☐ dans un analyseur à temps de vol, un ion de rapport m/z 522 arrive au détecteur avant un ion de rapport m/z 258.

45. Associer les parties principales d'un spectromètre de masse (lettre) avec leur fonction (numéro)

- A - Source d'ion
- B - Analyseur m / z
- C - Détecteur
- D - Traitement du signal

- 1 - représentation des données sous forme d'un spectre de masse.
- 2 - production d'ions en phase gazeuse.
- 3 - conversion d'un courant ionique en courant électrique.
- 4 - séparation des ions produits en fonction du rapport masse / charge (m / z).

- ☐ A-1 / B-2 / C-3 / D-4
- ☐ A-2 / B-4 / C-3 / D-1
- ☐ A-3 / B-1 / C-4 / D-2
- ☐ A-4 / B-2 / C-1 / D-3

46. Dans la liste ci-dessous quels éléments appartiennent à la famille des halogènes ?

- ☐ Astate
- ☐ Fluore
- ☐ Béryllium
- ☐ Iode
- ☐ Néon
- ☐ Chlore

47. L'activité d'un échantillon radioactif (plusieurs réponses sont attendues) :

- ☐ Est la masse des noyaux radioactifs que contient un échantillon.
- ☐ Est le nombre moyen de désintégrations par unité de temps que subissent les noyaux radioactifs d'un échantillon.
- ☐ Décroît au cours du temps.
- ☐ Ne varie pas au cours du temps : C'est une caractéristique du type de noyau radioactif que contient l'échantillon.

48. Pour réaliser le spectre de la lumière blanche, à la place du prisme on peut utiliser :

- ☐ Un miroir
- ☐ Un réseau
- ☐ Une lentille
- ☐ Un condenseur

49. Parmi les solvants suivants, quels sont ceux utilisables comme solvants d'extraction liquide-liquide de solutions aqueuses ?

- ☐ Chloroforme
- ☐ Ethanol
- ☐ Méthanol
- ☐ Diéthyléther
- ☐ Dichlorométhane
- ☐ Hexane

50. Un analyte est extrait de 2L d'eau par 10mL de chloroforme. Le rendement d'extraction est de 80%. La concentration dans les 10mL de chloroforme est de $4,4 \cdot 10^{-6}$ mol/L. Quelle est la concentration de cet analyte dans l'eau.

- ☐ $5,5 \cdot 10^{-8}$ mol/L
- ☐ $2,2 \cdot 10^{-8}$ mol/L
- ☐ $2,75 \cdot 10^{-8}$ mol/L

51. La limite de quantification peut être définie comme suit : (plusieurs réponses sont attendues)

- ☐ la concentration pour laquelle le rapport du signal de l'analyte sur le signal du bruit est supérieur à 10
- ☐ la concentration pour laquelle le rapport du signal de l'analyte sur le signal du bruit est supérieur à 3
- ☐ la plus petite concentration dans la zone de linéarité d'une gamme pour laquelle la valeur est juste et fidèle

52. La Chimiothèque Nationale regroupe dans les laboratoires publics français les collections de :

- ☐ Produits de synthèse
- ☐ Produits de synthèse, composés naturels et extraits naturels
- ☐ Produits de synthèse, produits commerciaux
- ☐ Composés naturels et extraits naturels

53. La Chimiothèque Nationale créée en 2003 compte à ce jour

- ☐ 14517 composés
- ☐ 35986 composés
- ☐ 66449 composés
- ☐ 88736 composés

54. Quelle est la mission principale de la Chimiothèque Nationale ? :

- ☐ Trier, archiver les composés
- ☐ Promouvoir la valorisation scientifique et industrielle des composés
- ☐ Créer une base de données pour le laboratoire adhérent
- ☐ Créer un groupement de laboratoires publics français

55. Qu'est-ce qu'un criblage ou criblage à Haut débit

- ☐ Mise en plaques 96 puits des produits d'une chimiothèque
- ☐ Miniaturisation d'un test biologique visant à étudier et à identifier dans les chimiothèques des molécules aux propriétés nouvelles.
- ☐ Utilisation d'un robot pour la mise en solution des composés d'une chimiothèque
- ☐ Identification structurale de l'ensemble des composés d'une chimiothèque

56. Comment s'appelle la base de données regroupant les extraits naturels ? :

- ☐ Chimiothèque d'extraits.
- ☐ Extraicthèque.
- ☐ Extractothèque.
- ☐ Extraictor.

57. Comment appelle-t-on à la suite d'une évaluation biologique ciblée une molécule biologiquement active ?

- ☐ Une touche, un hit.
- ☐ Une cible
- ☐ Un faux-positif
- ☐ Un artéfact

58. Quel est le solvant choisi pour la mise en solution des composés et compatible avec des tests biologiques ?

- ☐ L'eau
- ☐ Le DMSO (diméthylsulfoxyde)
- ☐ Le méthanol
- ☐ L'éthanol

Exercice 1 : détermination d'une structure (15 pts/322)

Le produit de formule brute $C_7H_{12}O_4$ a été mélangé à du chloroforme deutéré et à du TMS. Les spectres de RMN 1H et ^{13}C , respectivement obtenus à 300 et à 75 MHz, sont représentés **figures 1 et 2 (voir annexe)**. On s'aidera tout le long de l'exercice des différentes annexes jointes au sujet.

1. Quelle est la valeur du champ magnétique dans lequel ont été obtenus ces spectres ?

On donne $\gamma_H = 26,75 \cdot 10^7 \text{ rads}^{-1}\text{T}^{-1}$ et $\gamma_{^{13}C} = 6,73 \cdot 10^7 \text{ rads}^{-1}\text{T}^{-1}$.

2. Déterminez le nombre d'insaturations.

3. Pour chacun des spectres, indiquez les déplacements chimiques du $CDCl_3$ et du tétraméthylsilane.

	spectre 1H	spectre ^{13}C
TMS		
$CDCl_3$		

4. Pour les autres pics du spectre proton, remplir le tableau ci-dessous :

δ (ppm)	multiplicité	nombre de voisins	surface
	q		
	s		
	t		

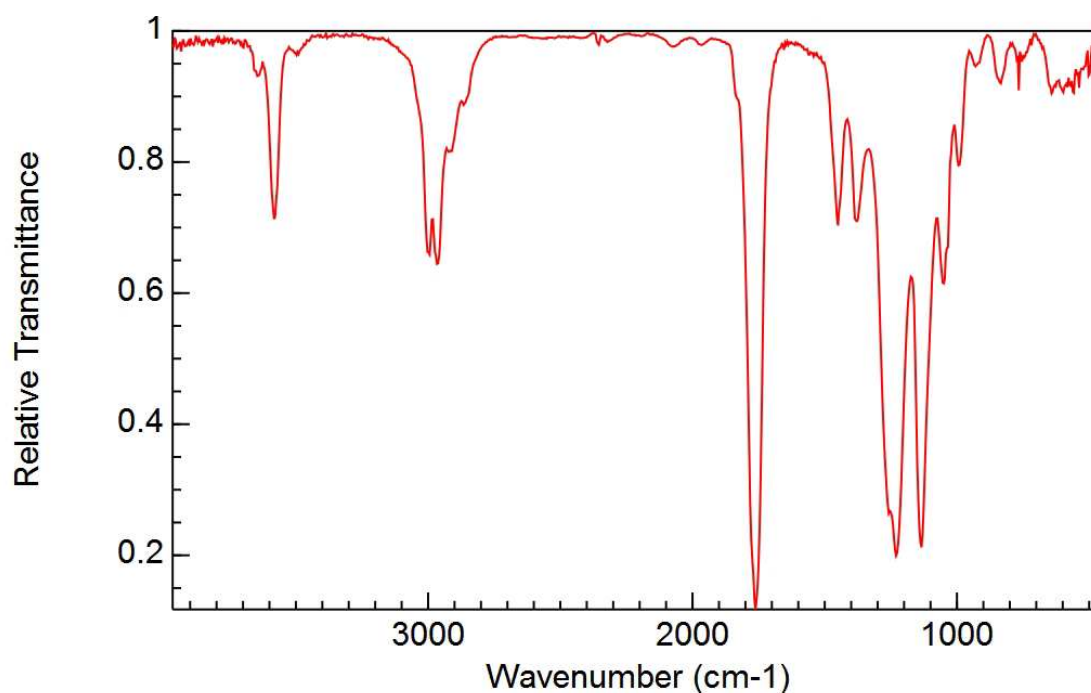
5. A partir des multiplicités suivantes de chacun des pics du spectre ^{13}C (hors CDCl_3 et TMS), indiquez le nombre de voisins. S'agit-il de voisins protons ou carbone ?

$\delta(\text{ppm})$	multiplicité	nombre de voisins
167	S	
62	T	
42	T	
14	Q	

6. Proposez une formule semi-développée.

Exercice 2 : spectroscopie infra-rouge (7 pts/322)

La formule brute du produit étudié ici est $C_4H_8O_3$. Son spectre infrarouge est donné ci-dessous. On s'aidera des annexes.



1. Quelle autre grandeur aurait pu être tracée sur l'axe des abscisses ?

2. Quelle est l'unité de l'axe des ordonnées ? Qu'aurait-il pu y être représenté ? Quelle loi relie ces deux grandeurs ?

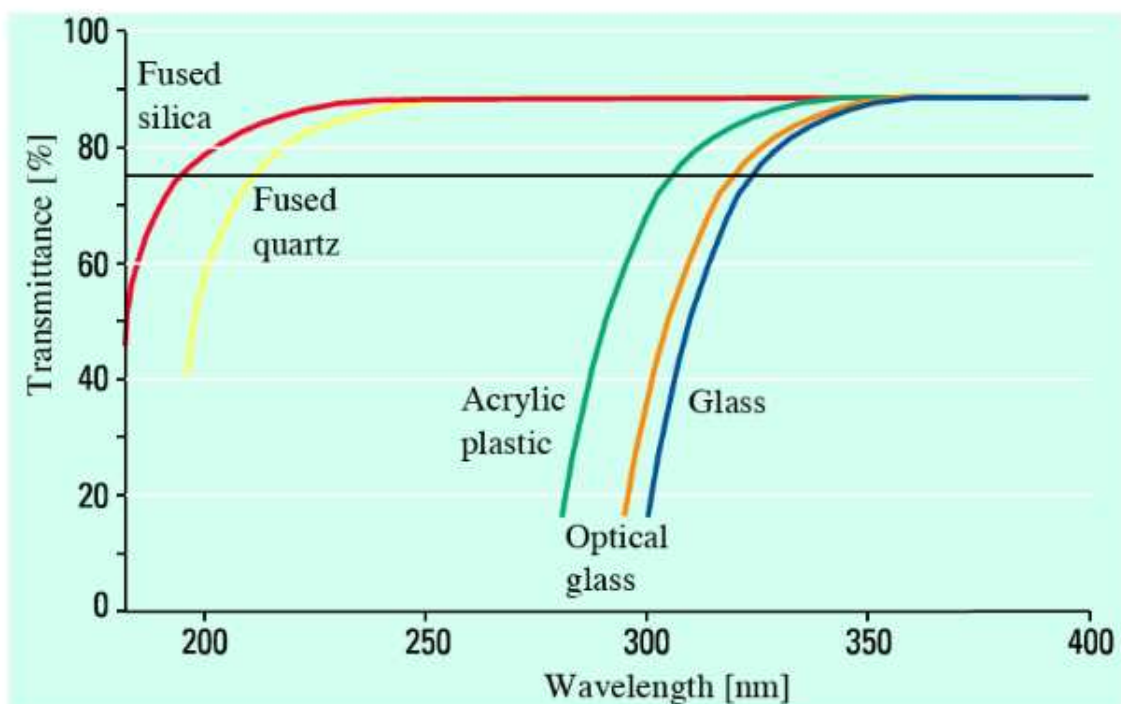
3. Attribuez trois raies.

Exercice 3 : UV/Visible (27 pts/322)

1. Rappelez la loi de Beer-Lambert en définissant les grandeurs utilisées (avec leurs unités).

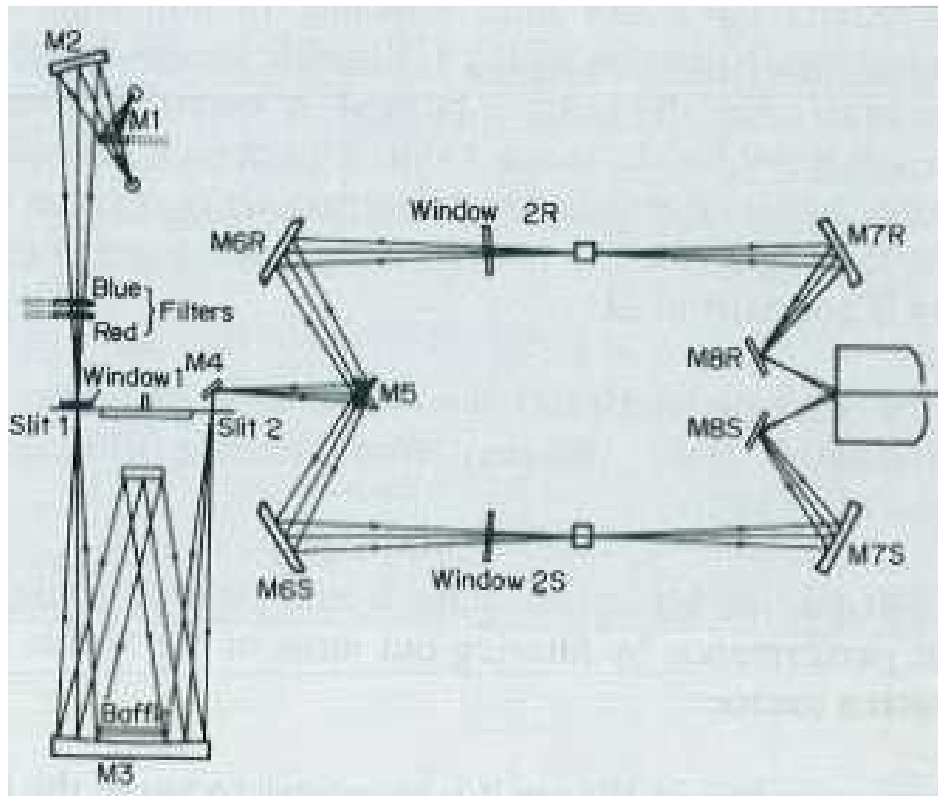
2. Qu'appelle-t-on l'effet bathochrome ?

3. A partir de la figure ci-dessous, expliciter pourquoi on utilise préférentiellement une cuve en quartz pour des mesures de spectrométrie UV-Visible.

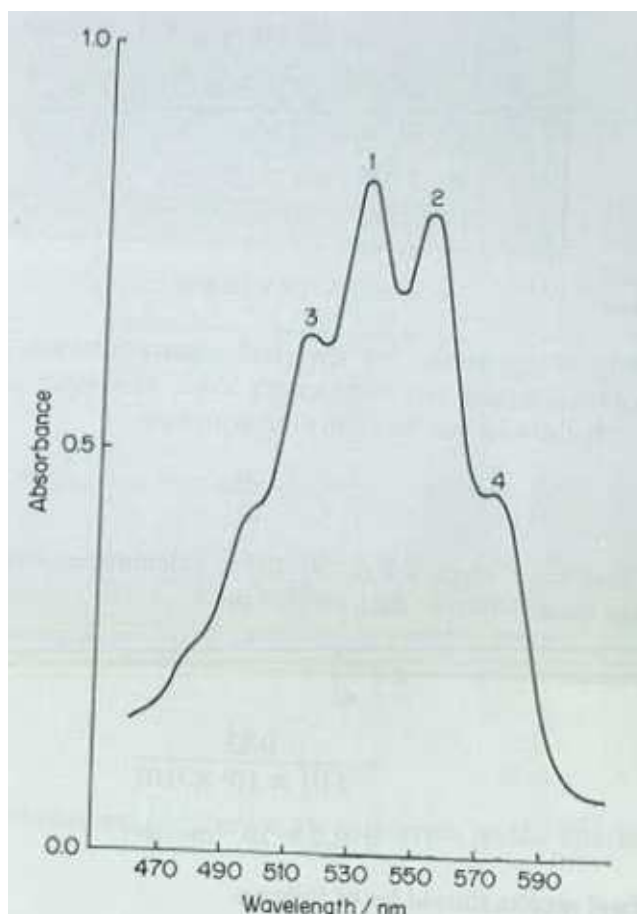


4. Sur le schéma ci-dessous, désigner les quatre zones proposées ci-dessous d'un spectrophotomètre UV/Visible :

- source
- monochromateur
- échantillon
- détecteur



5. Le spectre d'absorption, dans une cellule en quartz de $1,00 \pm 0,01$ cm de large, du permanganate de potassium présente plusieurs pics. Les quatre principaux sont notés sur la figure ci-dessous, et les valeurs de $\lambda_{\max}$ et $\epsilon_{\max}$ du pic principal sont fournies dans le tableau.



pic	$\lambda_{\max}$ (nm)	$\epsilon_{\max}$ (m ² /mol)	$\Delta\lambda_{\max}/\lambda_{\max}$	$\Delta\epsilon_{\max}/\epsilon_{\max}$
1	533	$1,01 \cdot 10^3$		
2				
3				
4				

5.1 A partir des données du pic numéro 1, déterminer la concentration en permanganate de potassium présent. Estimez son erreur relative en considérant que celle sur $\epsilon_{\max}$ est nulle. Détaillez les calculs.

--

5.2 Compléter le tableau en détaillant les calculs ou le raisonnement.

--

Exercice n°4 : Maintenance et organisation (10 pts/322)

1. Sur une HPLC, vous passez après un étudiant et ne savez pas ce qu'il a utilisé comme phases mobiles, quelles précautions devez-vous prendre avant de mettre en place vos phases mobiles ?

2. Vous avez mis votre colonne à équilibrer, la pression du système varie beaucoup, qu'allez-vous suspecter ?

3. Vous avez mis votre colonne à équilibrer, la pression du système a beaucoup augmenté depuis votre dernier dosage, qu'allez-vous suspecter ?

4. Vous avez mis votre colonne à équilibrer, la pression du système a beaucoup diminué depuis votre dernier dosage, qu'allez-vous suspecter ?

5. L'étudiant qui utilisait la chaîne HPLC a fini son dosage, en sachant que sa colonne est une C18, sa phase mobile d'analyse était constituée de 60% d'acétonitrile et 40% de tampon phosphate pH4, comment lui conseillez-vous de procéder avant d'enlever sa colonne ?

6. Un enseignant-chercheur vous demande d'acheter un produit chimique. Quelles questions allez-vous lui poser pour choisir le produit le plus adapté ?

Exercice n°5 : Qualité (8 pts/322)

1. Décrivez en quelques lignes la fonction d'un cahier de laboratoire

2. A quelle périodicité doit-il être rempli ?

3. Si vous quittez le laboratoire, à qui appartient le cahier ?

4. Que signifie AFNOR ?

5. Qu'est-ce que la métrologie ?

6. Quels sont les tests à effectuer pour qualifier un détecteur UV ?

Exercice n°6 : Hygiène et sécurité (32 pts/322)

1. Que signifie l'acronyme INRS ?

2. Donnez la définition de l'acronyme E.P.I. En citer au moins deux.

3. Qu'est-ce qu'un produit CMR ?

4. Quelles sont les mentions qui complètent le(s) pictogramme(s) sur l'étiquette d'un produit chimique ?

5. Vous devez manipuler un produit que vous ne connaissez pas, quels sont les réflexes que vous allez adopter ?

6. Indiquez à l'aide de quelques mots la signification de chaque pictogramme



1



2



3



4



5



6

7. Citez 5 informations données par la Fiche de Données de Sécurité ?

8. Quelles précautions prendriez-vous pour préparer une dilution à partir d'une solution d'acide chlorhydrique 37%, qui est irritant pour les voies respiratoires ?

9. Quelles précautions prendriez-vous pour peser un produit pulvérulent et toxique par inhalation ?

10. Vous devez éliminer les produits ci-dessous et disposer des étiquettes suivantes, relier les produits avec les étiquettes correspondantes :

<u>Produits</u>	<u>Étiquettes</u>
Tetrahydrofurane	solvant halogéné
Dichlorométhane	solvant non halogéné
Acétate de sodium	solutions acides minéraux
Acide sulfurique	solutions acides organiques
Acide formique	solutions basiques

11. Citez au moins deux risques majeurs que comporte l'utilisation de l'azote liquide ?

12. Quelles précautions doit-on prendre lorsqu'on manipule de l'azote liquide ?

13. Dans quoi stocke-t-on l'azote liquide ?

14. Quel type d'extincteur allez-vous utiliser pour éteindre un feu d'origine électrique ?

Exercice n°7 : Chromatographie (25 pts/322)

1. Quels sont les 2 modes d'élution possibles en HPLC ?

2. Quelles sont les 3 méthodes comparatives utilisées pour la quantification en HPLC ?

3. Expliquer brièvement leurs principes

4. Quel est le principal avantage de ces méthodes par rapport aux méthodes dites « absolues » ?

5. En HPLC, peut-on utiliser un détecteur de réfractométrie lors d'une élution en gradient de phase mobile ? Justifier

6. Quels sont les acides aminés fluorescents ?

7. Quelle partie de leur structure leur confère cette fluorescence ?

8. On veut séparer 3 acides-aminés : l'acide L-glutamique, la L-leucine et la L-lysine par chromatographie sur une résine polystyrénique substituée par des groupements sulfonate (R-SO_3^-). Les pH isoélectriques de l'acide L-glutamique, de la L-leucine et de la L-lysine sont respectivement : 3,22 ; 5,98 ; 9,74, à 25 °C.

On dépose ces 3 acides aminés sur la colonne, à pH 2, puis on élue en amenant progressivement le pH à 7. Quel type de chromatographie est mise en jeu ici ? Quels acides aminés sont élués et dans quel ordre ? (On considérera que les interactions acide aminé-résine sont uniquement d'ordre électrostatiques)

9. Parmi les détecteurs suivants, indiquez les détecteurs destructifs et les détecteurs non destructifs. Précisez si le détecteur est spécifique ou universel et avec quel type de chromatographie (LC et/ou GC) il est utilisé en couplage.

Détecteur	Destructif	Non Destructif	Universel	Spécifique	Couplé avec
Détecteur à capture d'électrons (ECD)					
Spectromètre de masse (MS)					
Détecteur à ionisation de flamme (FID)					
Détecteur à diffusion de lumière (DEDL)					
Détecteur à Barrettes de Diodes (DAD)					
Catharomètre					

10. Que signifie le rapport S/N ?

11. Que signifie LOQ ?

12. Que signifie LOD ?

13. Qu'est-ce que le carry-over ?

14. Comment le déterminer ?

Exercice n°8 : Complexation (30 pts/322)

Remarque : dans l'ensemble de l'exercice, on supposera que seuls les complexes mentionnés sont susceptibles de se former dans le milieu réactionnel.

Les ions thiosulfates $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ forment, avec les ions Ag^+ , le complexe $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ de constante de formation globale $\beta_1 = 10^{13,5}$.

1) On mélange un volume $V_1 = 20,0 \text{ mL}$ d'une solution de nitrate d'argent de concentration $C_1 = 2,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ à un volume $V_2 = 30,0 \text{ mL}$ d'une solution de thiosulfate de potassium de concentration $C_2 = 1,00 \cdot 10^{-1} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

1. Donnez l'équation de formation globale du complexe $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ ainsi que l'expression de sa constante de formation β_1 .

2. Représentez, sur un axe orienté, les domaines de prédominance des ions Ag^+ et du complexe $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ en solution aqueuse en fonction de $\text{pS}_2\text{O}_3^{2-} = -\log[\text{S}_2\text{O}_3^{2-}]$

3. Calculez la concentration en ions $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ et Ag^+ dans la solution dans l'état initial (juste après le mélange, avant que la réaction chimique n'ait lieu)

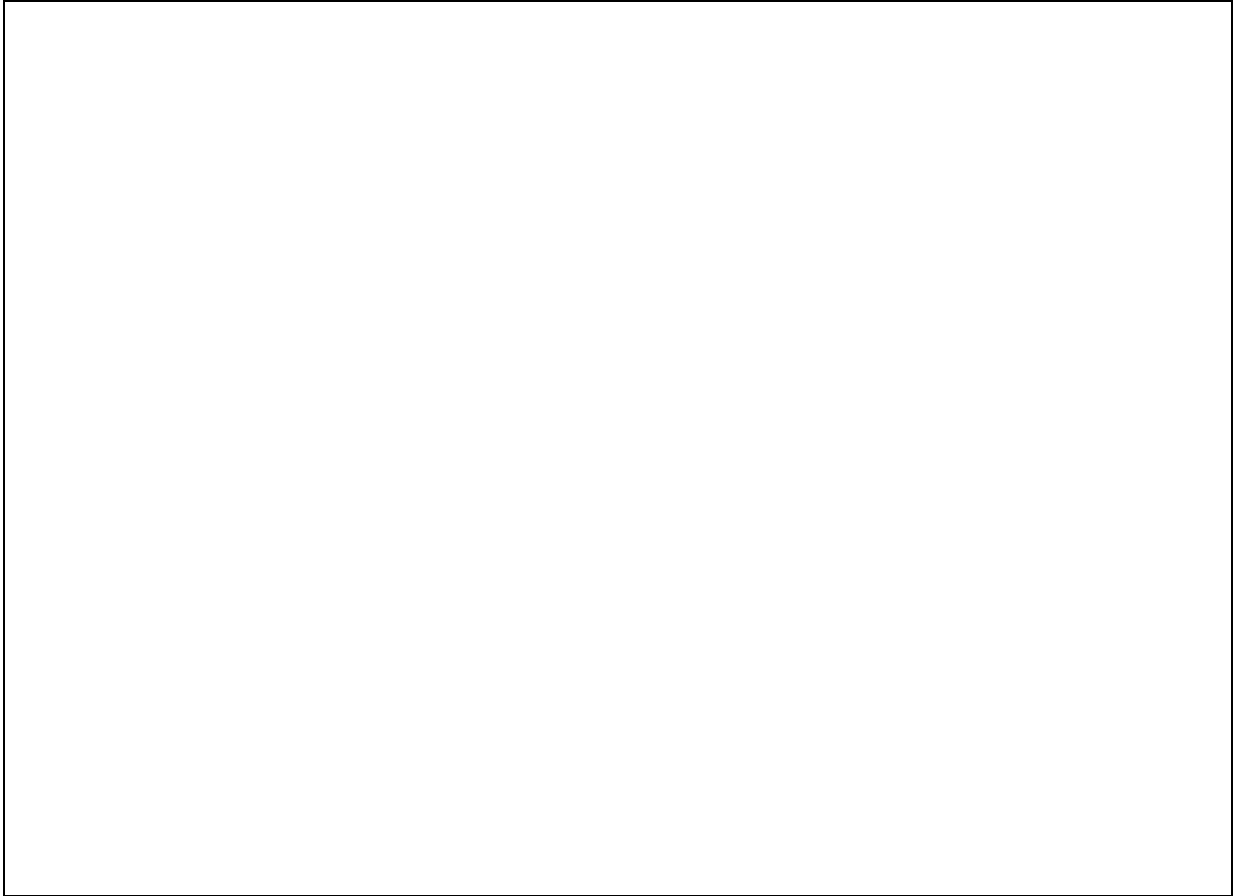
4. Calculez la concentration des espèces $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$, Ag^+ et $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$ à l'équilibre.

2) Les ions thiosulfates donnent également, avec les ions Hg^{2+} , le complexe $[\text{Hg}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{2-}$ de constante de formation globale $\beta_2 = 10^{29,9}$. À la solution obtenue précédemment, on ajoute un volume $V_3 = 50,0 \text{ mL}$ d'une solution de nitrate de mercure (II) de concentration $2,0 \cdot 10^{-1} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

1. On fait l'hypothèse que dans un premier temps les ions Hg^{2+} ajoutés réagissent **uniquement avec les ions $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ libre**, sans que cela ne modifie la concentration en $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$. Donnez l'équation de cette réaction et déterminez la concentration des espèces Hg^{2+} , $[\text{Hg}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{2-}$ et $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ après que cette réaction se soit produite.

2. En écrivant l'équation de la réaction et en calculant sa constante de réaction, montrez que les ions Hg^{2+} restants réagissent avec le complexe $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$.

3. Déterminez la concentration des espèces $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-}$, Ag^+ , Hg^{2+} et $[\text{Hg}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{2-}$ une fois l'équilibre final atteint.



Exercice n°9 : Atomistique (20 pts/322)

Le silicium est l'élément le plus abondant dans la croûte terrestre après l'oxygène. On le représente habituellement son isotope le plus abondant par la notation ${}^{28}_{14}\text{Si}$.

1. À quoi correspondent les nombres 28 et 14 ?

2. Écrivez la configuration électronique de cet élément. Déduisez-en la période dans laquelle se situe le silicium dans la classification périodique.

3. Combien le silicium possède-t-il d'électrons de valence ?

4. Donnez le nom et la valeur des nombres quantiques caractérisant les orbitales de valence du silicium.

5. Il existe à l'état naturel sous la forme de trois isotopes, tous stables : ^{28}Si , ^{29}Si et ^{30}Si . Sachant que la masse atomique du silicium est $28,0855 \text{ g.mol}^{-1}$ et que le pourcentage de l'isotope ($A=29$) est de 4,685 %, déterminez les pourcentages des isotopes ($A=28$) et ($A=30$) dans l'oxygène.

Données : masse molaire de ^{28}Si : $27,97692 \text{ g.mol}^{-1}$; masse molaire de ^{29}Si : $28,97649 \text{ g.mol}^{-1}$; masse molaire de ^{30}Si : $29,97377 \text{ g.mol}^{-1}$;

Exercice n°10 (GC/MS) (20 pts/322)

Le cannabis, nom latin donné au chanvre, est cultivé principalement au Pakistan, en Afghanistan, au Maroc, en Amérique Latine ...et sur nos balcons. Son principe actif majoritaire, à effet psychotrope, est le Delta-9-tétrahydrocannabinol ($C_{21}H_{30}O_2$, noté THC), dont la teneur, suivant les variétés, peut varier de 0,5 à 22%. Après inhalation de fumée de cannabis, 18% du THC est absorbé et passe rapidement dans le flux sanguin. Les concentrations plasmatiques sont alors de l'ordre de 8 à 10 $\mu\text{g/L}$ pour une consommation isolée et de 50 à 200 $\mu\text{g/L}$ pour un consommateur régulier. La quantification de ces composés, par GC/MS, permet de savoir si un individu est sous l'emprise de cannabis (applicable à d'autres stupéfiants) et/ou si il est consommateur occasionnel ou régulier.

Principe analytique : Le THC est extrait par adsorption sur une membrane solide (SPMEM : Solid Phase Micro-Extraction Membrane), désorbé par l'éthanol, dérivé par du N-Methyl-N-trimethylsilyl-trifluoroacetamide (MSTFA) puis analysé par chromatographie en phase gazeuse. Une gamme d'étalonnage est réalisée en utilisant le THC comme référence et le THC tri-deutérié THC-D3, noté Ei, comme étalon interne.

1. Quel est le rôle de l'étalon interne, comment doit-il être choisi, quels types d'étalons internes sont souvent utilisés en spectrométrie de masse ?

2. Pourquoi le composé doit-il être dérivé ? (deux réponses sont attendues)

3. A partir d'une solution mère de THC, notée S0, à la concentration de 1mg/L, on prépare 5 échantillons de solutions étalons (solutions filles dans l'éthanol) dans les conditions présentées dans le tableau ci-dessous. Calculer, pour chacune des solutions 'filles' la concentration (exprimée en ng/mL) en THC ainsi que le facteur de dilution par rapport à la solution initiale.

S mère	V prélevé (mL)	V total (mL)	S fille	Concentration S fille ng/mL	Facteur de dilution
S0	10	100	S1		
S1	25	50	S2		
S2	10	20	S3		
S1	10	50	S4		
S2	5	25	S5		

4. Calculer la concentration, en étalon interne, de la solution fille préparée comme suit :

A partir d'une solution mère d'étalon interne Ei à 200 mg/L, on prépare une solution d'étalon interne par dilution de 10 ml de solution mère compléter jusqu'à 50 ml dans l'éthanol.

--

Dans un flacon vial (petit flacon) de 2 ml, on introduit un volume de V1 de solution étalon de THC, auquel on ajoute V2 de solution d'étalon interne et un volume V3 d'agent de dérivation suivant le tableau ci-dessous :

S étalon	V1 (µl)	V2 (µl)	V3 (µl)	Réf. Echantillon
S1	500 µl	250 µl	500 µl	A
S2	500 µl	250 µl	500 µl	B
S3	500 µl	250 µl	500 µl	C
S4	500 µl	250 µl	500 µl	D
S5	500 µl	250 µl	500 µl	E

L'analyse des différents échantillons est réalisée par chromatographie en phase gazeuse (CPG) couplée à la spectrométrie de masse, dans les conditions suivantes :

Phase stationnaire : Colonne capillaire DB5, L = 25 m, diam = 0,32 mm. Film : 0,25 µm

Phase mobile : Hélium Débit : 1ml/mn (élution en mode isotherme)

Injection : 1 µl

Détection : Spectrométrie de masse

Le temps de rétention du THC est de 5,8 min, il est détecté à m/z 303.4.

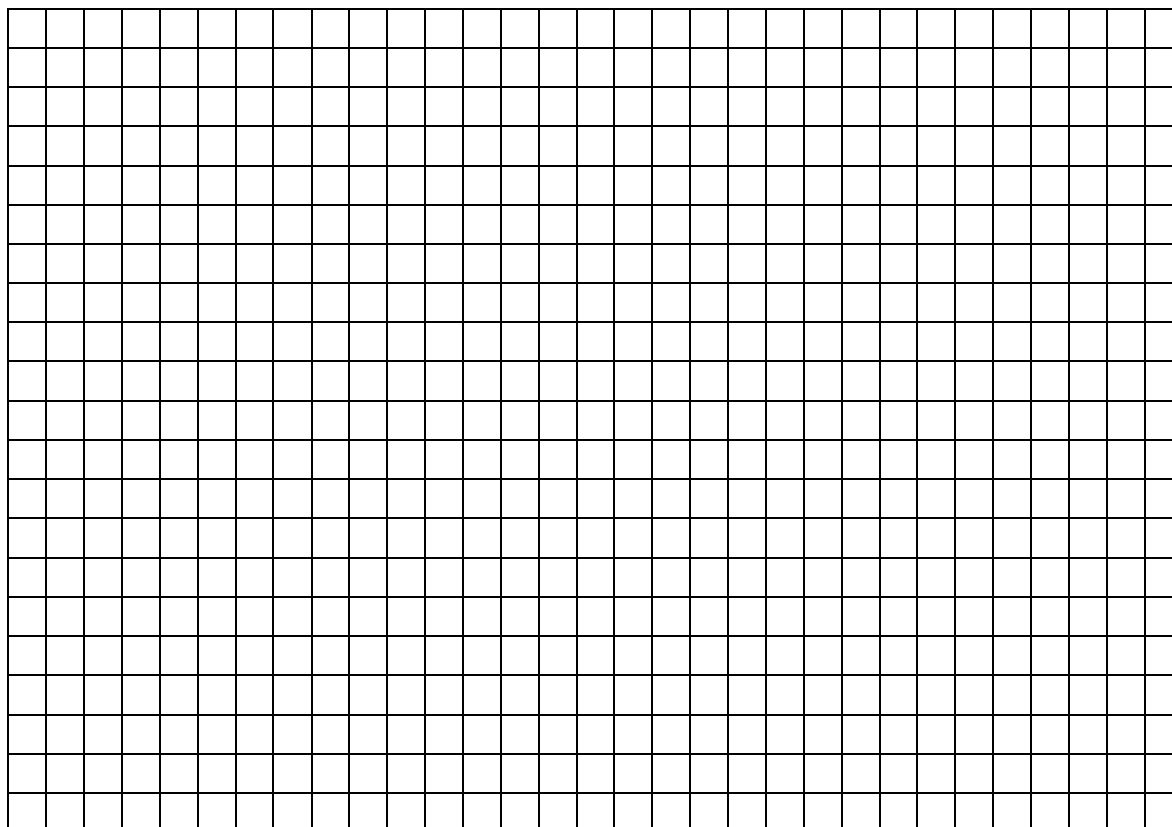
5. A quel m/z le THC-D3 pourra-t-il être détecté, expliquez?

On obtient les résultats suivants :

Echantillon	Aire chromatographique (THC)	Aire chromatographique (E.I)
E	10660	62000
D	24000	61350
C	62505	59580
B	137963	64300
A	249643	57540

6. Tracer la droite d'étalonnage permettant d'établir la relation liant la concentration en THC (dans les solutions étalons) et le rapport des aires chromatographiques ($A_{\text{THC}} / A_{\text{EI}}$) :

$$\text{Conc THC} = f(A_{\text{THC}} / A_{\text{EI}})$$



1mL de sang est déposé sur une cartouche SPE (solide phase extraction), le dépôt est lavé puis désorbé par 1 mL d'éthanol afin de récupérer le THC, on considère que le rendement d'extraction est proche de 100%. Comme pour les solutions étalons, 500 μL de la solution éthanolique sont introduits dans un vial, 250 μl de solution de standard interne et 500 μl de réactif de dérivation sont rajoutés. Deux injections successives sont réalisées. On obtient, pour le pic du THC et pour l'étalon interne les résultats suivants :

Injection	Aire chromatographique (THC)	Aire chromatographique (Ei)
N°1	199520	62350
N°2	197175	59750

7. Par lecture graphique donner, pour chacune des injections, la concentration en THC dans l'échantillon analysé. En déduire la valeur moyenne ainsi que le pourcentage d'incertitude.

8. A partir des données fournies pour la préparation de l'échantillon, en déduire la concentration moyenne en THC par mL de sang analysé. Que peut-on en conclure ?

Exercice n°11 : Spectrométrie de Masse (22 pts/322)

1. L'ensemble de ces sigles sont relatifs à la spectrométrie de masse, donner leur signification (10 pts)

1 - MALDI :

2 - ESI :

3 - APCI :

4 - EI :

5 - CI :

2. Expliquer en quelques lignes le mode d'ionisation des 2 sources d'ions suivantes (vous pouvez vous aider d'un schéma). Ces sources d'ions peuvent-elles être couplées en ligne avec une méthode de séparation, si oui laquelle. Dites à quels types de molécules ces sources d'ions sont le plus adaptées.

ESI

MALDI

Exercice n°12 : validation de méthodes (16 pts/323)

1. Dans le cadre de la validation de méthodes analytiques, plusieurs caractéristiques doivent être évaluées. Attribuer à chaque définition le nom qui convient : **fidélité** - **justesse** - **linéarité** - **limite de détection** - **répétabilité** - **reproductibilité** - **robustesse** - **limite de quantification**

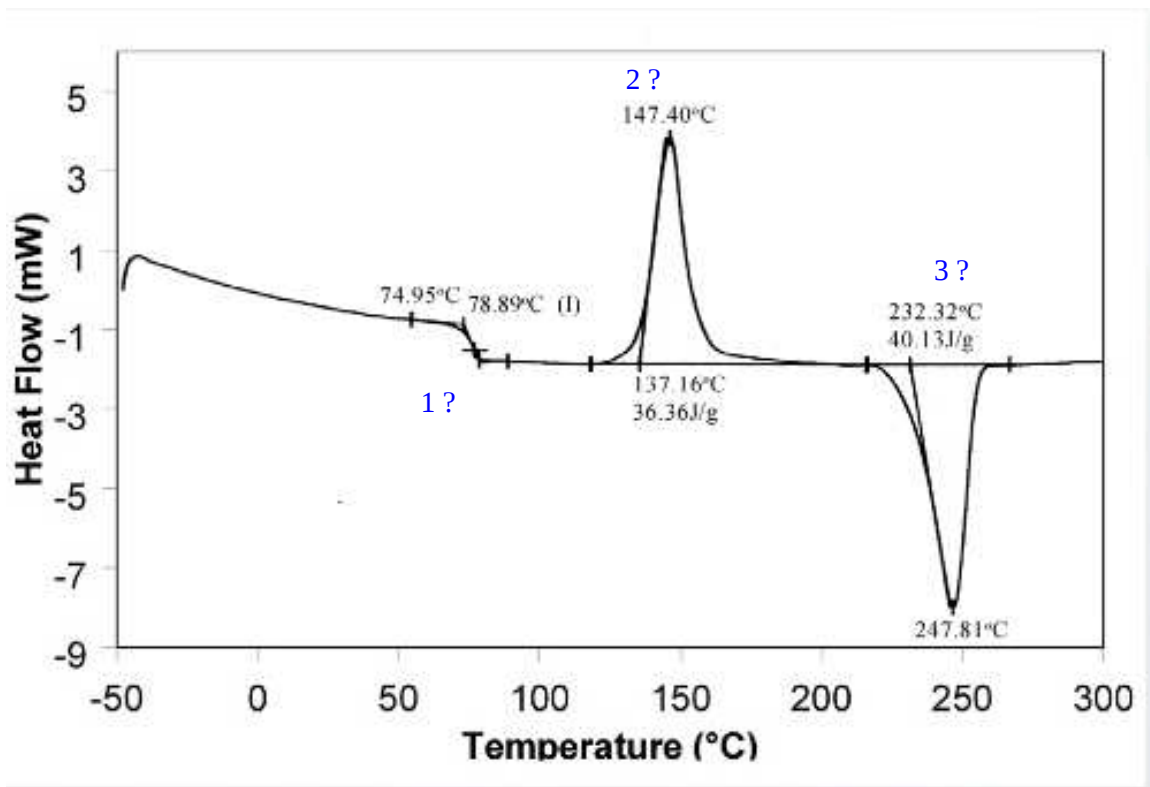
	Etroitesse de l'accord entre les mesures effectuées sur des prises multiples d'un échantillon homogène
	Plus petite concentration de l'analyte pouvant être détectée, mais non quantifiée, avec un risque d'erreur connue
	Etroitesse de l'accord entre une mesure et la valeur conventionnellement vraie de l'échantillon
	Mesure de la fidélité lorsque les mesures sont faites par un même opérateur, sur un même instrument et dans un délai court
	Evaluation de l'importance des effets observés lorsqu'on fait subir de légères variations contrôlées aux conditions expérimentales
	Capacité à fournir des réponses proportionnelles à la concentration en analyte à doser
	Mesure de la fidélité lorsque n'importe quelle condition change (opérateur, instrument, délai d'exécution ...)
	Plus petite concentration de l'analyte pouvant être mesurée de façon juste et précise.

Exercice 13 : Thermodynamique (12 Pts/322)

Partie 1 : calorimétrie

1. Donner le principe et la définition de l'analyse par DSC

2. Sur le thermogramme suivant identifier les 3 phénomènes observés :



3. On souhaite déterminer la capacité en eau d'un calorimètre. Pour ce faire, nous munissons un calorimètre d'une sonde de température et d'un système d'agitation. On introduit dans ce calorimètre 75 g d'eau, après un certain temps la température de l'ensemble « calorimètre + eau » se stabilise à 19°C. On rajoute alors 75 g d'eau chaude (initialement à 90°C) dans le calorimètre et la température se stabilise à 48°C.

Donnée : capacité thermique massique eau : $4180 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$

3.1 Déterminer la capacité thermique massique du calorimètre :

3.2 Dédire de la question précédente l'équivalent en eau du calorimètre utilisé :

Partie 2 : étude d'un gaz parfait

Une masse de gaz parfait est considérée dans 3 états successifs :

Etat 1 : $P_1 V_1 T_1$

Données :

$P_1 = 1.10^5 \text{ Pa}$

Etat 2 : $P_2 V_2 T_2$

$V_1 = 2,0 \text{ L}$

Etat 3 : $P_3 V_3 T_3$

$T_1 = 27^\circ \text{C}$

1. Le passage de l'état 1 à 2 se fait à pression constante, avec une élévation de température de 20 K.

Déterminer $P_2 V_2 T_2$.

2. Le passage de l'état 2 à 3 se fait à température constante, avec une élévation de pression de 1.10^4 Pa .

Déterminer $P_3 V_3 T_3$.

Exercice n°14 : Traduction (20 pts/322)

1. Veuillez traduire les textes suivants:

Protective equipment

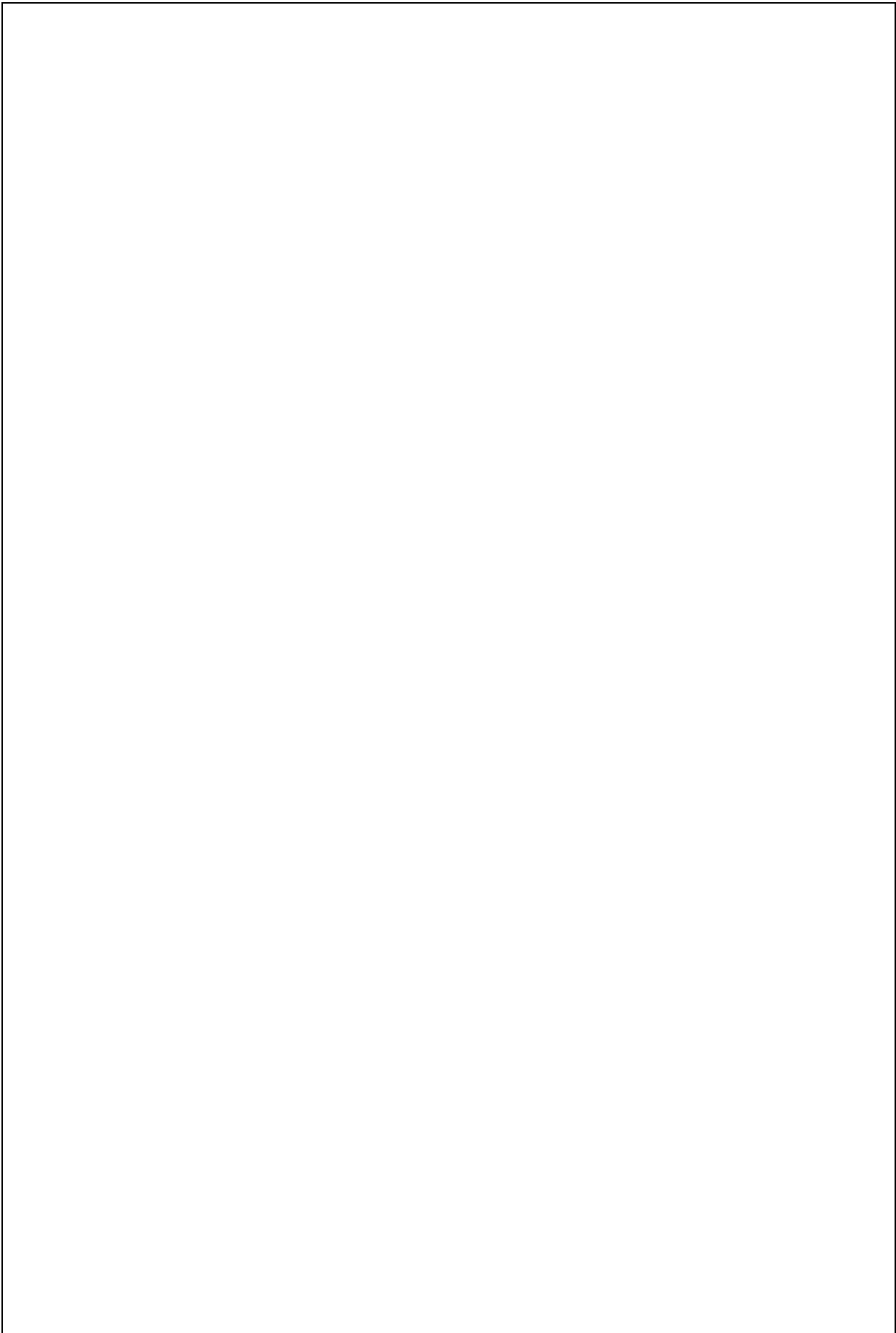
When performing any work on or near the HPLC system, wear personal protective equipment (protective clothing, safety gloves, safety glasses) as required by the hazard of the mobile phase and sample. For information about the proper handling of a particular substance and for advice on specific hazards, refer to the material safety data sheet for the substance you are using. Observe the guidelines of Good Laboratory Practice (GLP).

An eyewash facility and a sink ([évier/lavabo](#)) should be close to the device. If any substance splashes on the eyes or skin, wash the affected area and seek medical attention.

Hazardous substances

Many organic solvents, mobile phases, and samples are harmful to health. Be sure that you know the toxic and infectious properties of all substances that you are using. You may not know the toxic or infectious properties of many substances that you are using. If you have any doubt about a substance, treat it as if it contains a potentially harmful substance. For advice on the proper handling of a particular substance, refer to the Safety Data Sheet (SDS) of the manufacturer. Observe the guidelines of Good Laboratory Practice (GLP).

Dispose of waste substance in an environmentally safe manner that is consistent with all local regulations. Do not allow flammable, toxic, and/or infectious substances to accumulate. Follow a regulated, approved waste disposal program. Never dispose of flammable, toxic, and/or infectious substances through the municipal sewage ([eaux usées](#)) system.





SIEMAH
DATE 25-9-96

SF 300.13
SY 0.0
O1 5100.00
SI 32768
TD 32768
SW 4000.00
HZ/PT 124

PW 1.5
RO 0.0
AQ 4.09
RG 1
NS 32
IE 297

FW 5000
O2 5100.00
CP 101.00

L3 0.0
GB 0.0
CX 35.50
CY 0.0
F2 2459.96
F2 -24.90
HZ/CX 69.39
HZ/CX 234.23
SR 3353.91

S. SINBANDHIT

E 1H

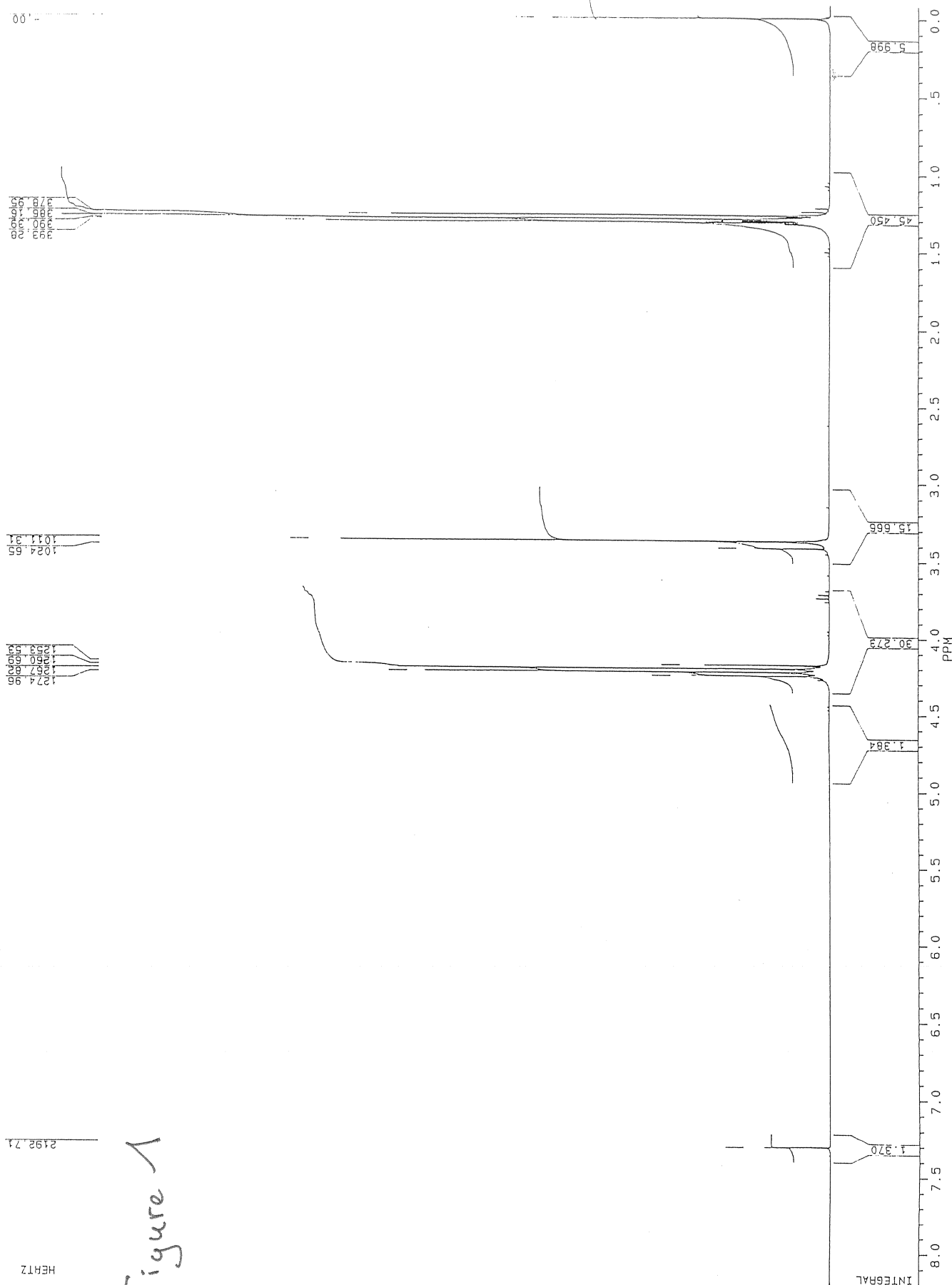
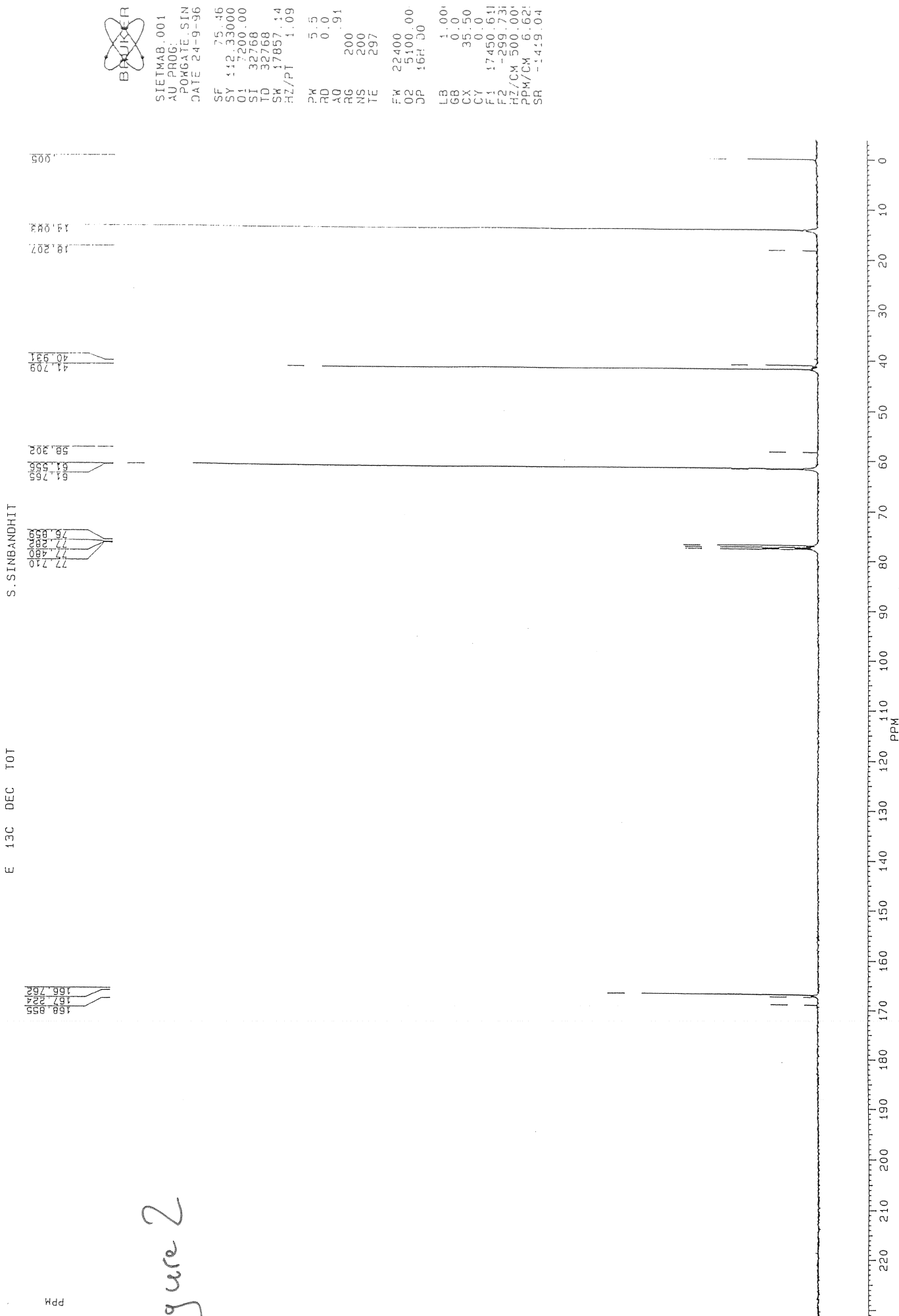


Figure 1

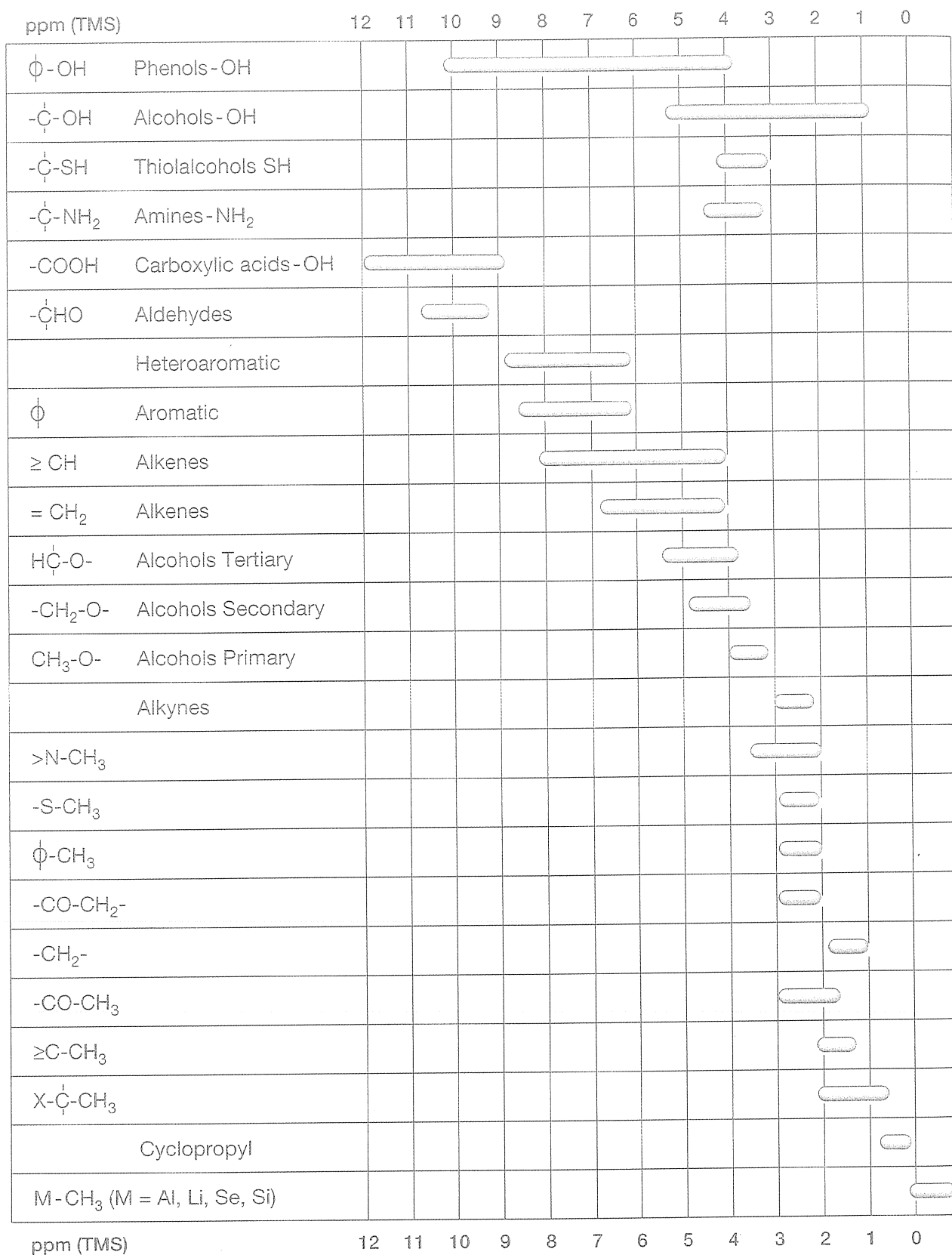
Figure 2



^1H Chemical Shifts

^1H Nuclear Spin : 1/2
TMS = 0 ppm

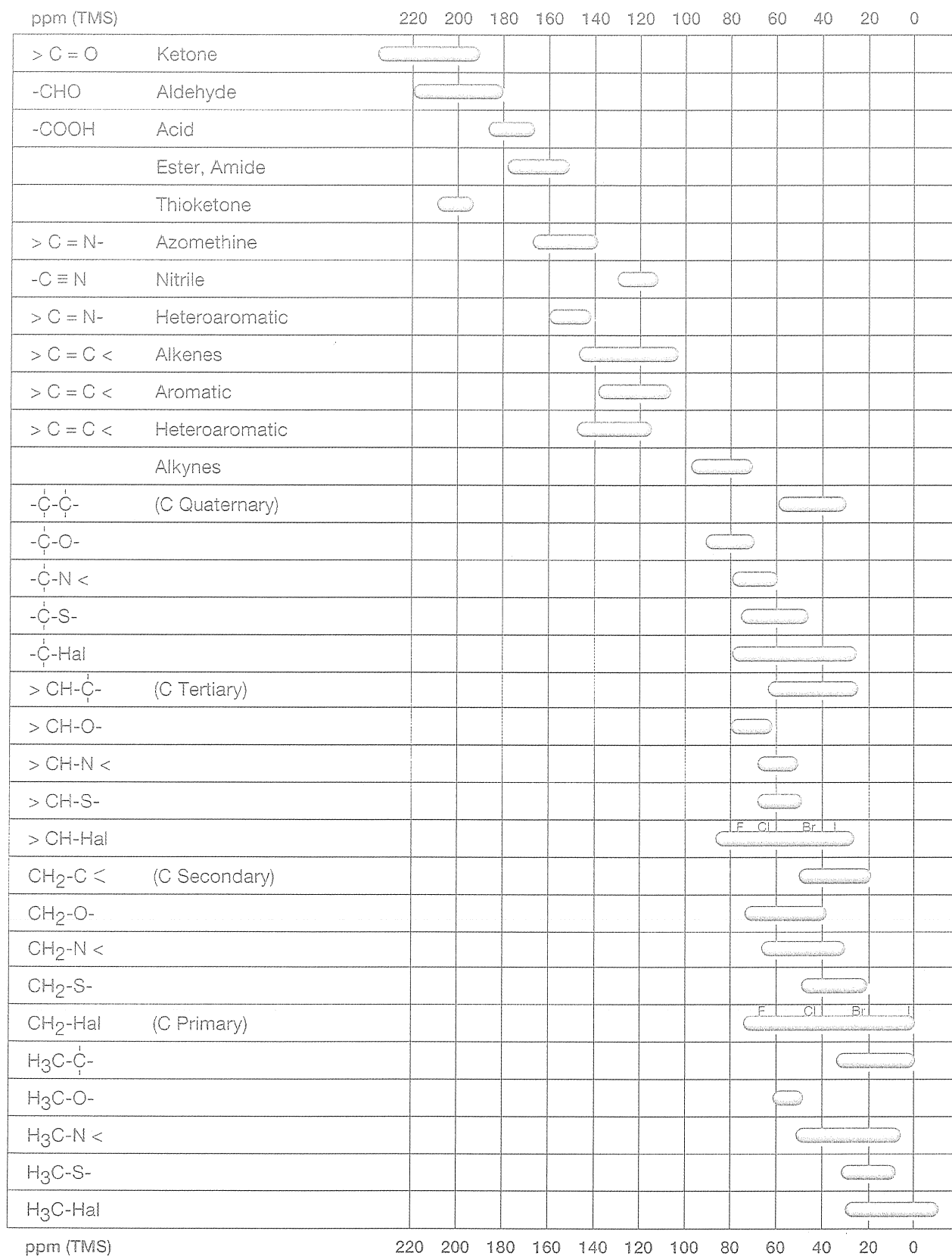
$\delta ^1\text{H}$ (ppm)



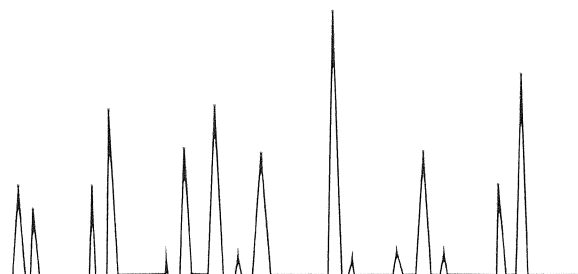
^{13}C Chemical Shifts

 ^{13}C Nuclear Spin : 1/2

TMS = 0 ppm

 $\delta^{13}\text{C}$ (ppm)

NMR SOLVENT DATA CHART



The ¹H spectra of the residual protons and ¹³C spectra were obtained on a Varian Gemini 200 spectrometer at 295°K. The NMR solvents used to acquire these spectra contain a maximum of 0.05% and 1.0% TMS (v/v) respectively. Since deuterium has a spin of 1, triplets arising from coupling to deuterium have the intensity ratio of 1:1:1. 'm' denotes a broad peak with some fine structures. It should be noted that chemical shifts, can be dependent on solvent, concentration and temperature.

□ Approximate values only, may vary with pH, concentration and temperature.

■ Melting and boiling points are those of the corresponding unlabeled compound (except for D₂O). These temperature limits can be used as a guide to determine the useful liquid range of the solvents. Information gathered from the Merck Index - Eleventh Edition.

SOLVENT	¹ H Chemical Shift (ppm from TMS) (multiplicity)	JHD (Hz)	Carbon-13 Chemical Shift (ppm from TMS) (multiplicity)	JCD (Hz)	¹ H Chemical Shift of HOD □ (ppm from TMS)	Density at 20°C ■	Melting point (°C) ■	Boiling point (°C) ■	Dielectric Constant	Molecular Weight ■
Acetic Acid-d ₄	11.65 (1) 2.04 (5)	2.2	178.99 (1) 20.0 (7)	20	11.5	1.12	16.7	118	6.1	64.08
Acetone-d ₆	2.05 (5)	2.2	206.68 (1) 29.92 (7)	0.9 19.4	2.8	0.87	-94	56.5	20.7	64.12
Acetonitrile-d ₃	1.94 (5)	2.5	118.69 (1) 1.39 (7)	21	2.1	0.84	-45	81.6	37.5	44.07
Benzene-d ₆	7.16 (1)		128.39 (3)	24.3	0.4	0.95	5.5	80.1	2.3	84.15
Chloroform-d	7.24 (1)		77.23 (3)	32.0	1.5	1.50	-63.5	61-62	4.8	120.38
Cyclohexane-d ₁₂	1.38 (1)		26.43 (5)	19	0.8	0.89	6.47	80.7	2.0	96.24
Deuterium Oxide	4.80 (DSS) 4.81 (TSP)		NA	NA	4.8	1.11	3.81	101.42	78.5	20.03
N, N-Dimethyl -formamide-d ₂	8.03 (1) 2.92 (5) 2.75 (5)	1.9 1.9	163.15 (3) 34.89 (7) 29.76 (7)	29.4 21.0 21.1	3.5	1.03	-61	153	36.7	80.14
Dimethyl Sulfoxide-d ₆	2.50 (5)	1.9	39.51 (7)	21.0	3.3	1.19	18.45	189	46.7	84.17
1,4-Dioxane-d ₈	3.53 (m)		66.66 (5)	21.9	2.4	1.13	11.8	101.1	2.2	96.16
Ethanol-d ₆	5.19 (1) 3.56 (1) 1.11 (m)		56.96 (5) 17.31 (7)	22 19	5.3	0.89	-114.1	78.5	24.5	52.11
Methanol-d ₄	4.78 (1) 3.31 (5)	1.7	49.15 (7)	21.4	4.9	0.89	-97.8	64.7	32.7	36.07
Methylene Chloride-d ₂	5.32 (3)	1.1	54.00 (5)	27.2	1.5	1.35	-95	39.75	8.9	86.95
Pyridine-d ₅	8.74 (1) 7.58 (1) 7.22 (1)		150.35 (3) 135.91 (3) 123.87 (3)	27.5 24.5 25	5	1.05	-42	115-116	12.4	84.13
Tetrahydrofuran-d ₈	3.58 (1) 1.73 (1)		67.57 (5) 25.37 (5)	22.2 20.2	2.4-2.5	0.99	-108.5	66	7.6	80.16
Toluene-d ₈	7.09 (m) 7.00 (1) 6.98 (5) 2.09 (5)	2.3	137.86 (1) 129.24 (3) 128.33 (3) 125.49 (3) 20.4 (7)	23 24 24 19	0.4	0.94	-95	110.6	2.4	100.19
Trifluoroacetic Acid-d	11.50 (1)		164.2 (4) 116.6 (4)		11.5	1.41	-15.4	72.4		115.03
Trifluoroethanol-d ₃	5.02 (1) 3.88 (4x3)	2(9)	126.3 (4) 61.5 (4x5)	22	5	1.41	-43.3	75		103.06

S Budavari, M.J. O'Neil, A. Smith, P.E. Heckelman, The Merck Index, an Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals - Eleventh Edition, Merck Co., Inc. Rahway, NJ, 1989.

04-137

EURISO-TOP Parc des Algorithmes - Bâtiment Homère
Route de l'Orme F-91194 Saint-Aubin Cedex - France
Tel: 33.(0)1.69.41.95.96 • Fax: 33.(0)1.69.41.93.52
E-Mail: eurisotop@eurisotop.fr • Web: www.eurisotop.fr

EURISO-TOP GmbH Postfach 10 05 43
D-66005 Saarbrücken
Tel: 49.(0)681.99.63.338 • Fax: 49.(0)681.99.63.438
E-Mail: eurisotop@eurisotop.de • Web: www.eurisotop.de

TABLES DE FREQUENCE DES VIBRATIONS DE VALENCE
CARACTERISTIQUES EN IR

Groupelement	Liaison	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Vibration	Intensité
Alcools et phénols	O-H libre	3650-3590	élongation	variable et fine
Alcools et phénols	O-H assoc.	3400-3200	élongation	forte et large
Acides	O-H assoc.	3300-2500	élongation	forte et très large
Amines primaires	N-H	3500	élongation asymétrique	moyenne
		3410	élongation symétrique	moyenne
Amines secondaires	N-H	3500-3310	élongation	moyenne
≡C-H (alcynes)	C-H	≈ 3300	élongation	moyenne et fine
Aromatiques	C-H	3080-3030	élongation	variable
HC=CH ₂ (vinyl)	C-H	3095-3075	élongation	moyenne
		3040-3010	élongation	moyenne
=CH ₂ (alcènes disubstitués gémisés)	C-H	3095-3075	élongation	moyenne
		3040-3010	élongation	moyenne
HC=CH ou C=CH	C-H	3040-3010	élongation	moyenne
-CH ₃ (alcanes)	C-H	≈ 2960	élongation asymétrique	forte
		≈ 2870	élongation symétrique	forte
-CH ₂ - (alcanes)	C-H	≈ 2925	élongation asymétrique	forte
		≈ 2850	élongation symétrique	moyenne à forte
-C-H (aliphatiques)	C-H	2890-2880	élongation	faible
Aldéhydes	C-H	2900-2800	élongation	faible
		2775-2700	élongation	moyenne
Nitriles	C≡N	2260-2210	élongation	moyenne à forte
Alcynes	C≡C	2140-2100	élongation	faible
Aldéhydes aliphatiques	C=O	1740-1720	élongation	forte
Aldéhydes aromatiques	C=O	1715-1690	élongation	forte

Cétones aliphatiques	C=O	1725-1705	élongation	forte
Cétones aromatiques	C=O	1700-1670	élongation	forte
Acides	C=O	1725-1700	élongation	forte
Esters aliphatiques	C=O	1750-1730	élongation	forte
Alcènes	C=C	1675-1645	élongation	moyenne
Aromatiques	C=C	1600 ; 1580 1500 ; 1450	élongation ; 4 bandes	variables
Groupelement nitro (aliphatique)	C-NO ₂	1570-1550 1380-1370	élongation élongation ; 2 bandes	intense
Groupelement nitro (aromatique)	C-NO ₂	1570-1500 1370-1300	élongation élongation ; 2 bandes	intense
Amines aliphatiques	C-N	1220-1020	élongation	moyenne
Amines aromatiques	C-N	1360-1180	élongation	moyenne à forte
Esters	C-O	1300-1050	élongation ; 2 bandes	fortes
Acides	C-O	1300-1200	élongation	forte
Alcools tertiaires	C-O	1200-1125	élongation	variable
Alcools secondaires	C-O	1125-1085	élongation	variable
Alcools primaires	C-O	1085-1050	élongation	variable
Ethers	C-O	1150-1020	élongation	forte