REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Dr. YAHIA FARES De MEDEA

Faculté des sciences

Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention d'obtenir le diplôme de Master
En physique
Spécialité: Physique des matériaux

Présenté par : MIHOUBI Imane

Thème

Étude des propriétés spectroscopiques, électroniques et mécaniques du L-Acide glutamique

Soutenu, le 14/07/2021, devant le jury composé de :

Membre des jurys

NOM ET PRENOM	GRADE	MEMBRE	UNIVERSITE
DEHBAOUI Mourad	MCA	Président	UV -Médéa
KHEROUBI Boumediene	MCB	Examinateur 1	UV- Médéa
SEBBAR Djamel	MCB	Examinateur 2	UV-Médéa
BOUKAOUD Abdelali	MCA	Encadreur	UV-Médéa

Année université 2020/2021

ملخص

يهدف هذا العمل التجريبي والنظري إلى دراسة الخصائص الهيكلية، الإلكترونية، الاهتزازية والميكانيكية لحمض الجلوتاميك ($C_5H_9NO_4$) .

تم إجراء حسابات التحسين الهندسي اعتمادا على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، باستخدام برنامج CASTEP، بتقريب GGA ووظيفة PBE .

تمت دراسة الخصائص الاهتزازية باستخدام تقنية الأشعة تحت الحمراء .

كما قمنا كذلك بدراسة تأثير الضغط الهيدروستاتيكي على الخصائص البنيوية للجزئي من أجل درجة حرارة(T=0) و ضغوط بين 10- و0 2 GPa من أجل دراسة السلوك الميكانيكي لحمض الجلوتاميك.

الكلمات المفتاحية : حمض الجلوتاميك $C_5H_9NO_4$ ، حسابات DFT طيف الأشعة تحت الحمراء.

R É S U M É

Ce travail consiste à étudier les propriétés structurales, électroniques, vibrationnelles et mécaniques de l'acide glutamique ($C_5H_9NO_4$), les calculs d'optimisation géométrique ont été effectués par la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT en utilisant le programme CASTEP avec l'approximation GGA et la fonctionnelle PBE.

Les propriétés vibrationnelles ont été étudiées à l'aide de la spectroscopie infrarouge .Nous avons également étudié l'effet du la pression hydrostatique sur les propriétés structurales de la molécule à température T = 0 K pour des pressions entre -10 et 20 GPa pour l'étude du comportement mécanique de la molécule de l'acide glutamique.

mots clés : L'acide glutamique $C_5H_9NO_4$, Calculs DFT ,spectroscopie IR.

A B S T R A C T

This work consists in studying the structural, electronic, vibrationnal and mechanical properties of glutamic acid (C5H9NO4).

The optimizations of the crystal structure were performed by density functional theory (DFT) using CASTEP program with the GGA approximation and PBE functional.

The vibrational properties have been investigated using the infrared spectroscopy

The effect of hydrostatic pressure on the structural properties at T = 0 K between -10, 20 GP has been also studied to understind the mechanical behavior of glutamic acid.

Keywords: glutamic acid C5H9NO4, IR spectroscopy, DFT calculations.

Dédicace

Avec mes sincères sentiments et d'une joie immense que je dédie ce travail à :

Tout d'abord et spécialement à mes très chers parents pour leurs encouragements, tendresse, disponibilité et leurs sacrifices durant toutes mes années d'étude

C'est grâce a eux que je suis arrivée à cette étape de ma vie.

À mes chers frères : Azzedine et Mustapha

À mes sœurs, Lamia, Hadjer et Zineb.

À mon soutien après mes parents, mon fiancé Abdou qui a été à mes cotés durant mon travail et qui ma vraiment aidé avec ses conseils.

À mes amies Meriam Benaissa et Nabila Khelile que j'aime beaucoup,

À Toute ma famille.

Remerciements

Je commence par remercie Allah, tout puissant, de m'avoir accordé la puissance et la volonté pour achever ce travail.

Je souhaiterais dans un premier temps exprimer mes remerciements les plus profonds envers mon promoteur de mémoire
Dr. BOUKAOUD ABDELALI d'avoir accepté de diriger et suivre ce travail. De façon générale, je le remercie pour ses conseils qui ont été vraiment apprécies et ses qualités humaines et ses haute moralité que dieu le bénisse.

je remercie les membres du jury d'avoir accepte examiner et juger mon travail.

Je remercie la responsable des laboratoires d'informatique, Mme LUZ KHADIJA, pour son aide et ses précieux conseils.

Merci à tous les enseignants de la Département de physique de L'Université de Médéa.

je n'oublie pas le professeur à L'Université de Bouira MADI DJAMEL, qui m'a toujours soutenu.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE : 1

CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES ACIDES AMINES 4

I .1 Introduction 4

I .2 Acides aminés : 4

I.2.1 Configuration: chiralité et activité optique : 6
I. 2.2 Conformation : forme moléculaire : 6
I.2.3 Cation, anion et zwitterion 7
I.2.4 Classification des acides aminés : 8
I.3 Acide glutamique 8

I.3.1 Définition : 8
I.3. 2 Structures 9
I.3.3 Proprieties de l'acide glutamique 9
I.3.3.1.Propriétés physique 9

I.3.3.2 Propriétés chimique 10

I.3.3.3 Propriétés biochimique 10

I. 3.3.4 Propriétés cristallographiques de l'acide glutamique 10

I.4 Conclusion 11

CHAPITRE II : SPECTROSCOPIES INFRAROUGE (IR) 14

II.1 Introduction 14

II. 2 La spectroscopie Infrarouge (IR) 14

II. 2 .1 Définition de la spectroscopie IR 14
II. 2 .2 Historique de la spectroscopie infrarouge 14
II.3 Propriétés des ondes électromagnétiques 15

II. 3.1. Le spectre électromagnétique 16

II. 3.1.1 Déférents domaines de l'IR 16
II. 3.1.2 Principe de la Spectroscopie Infrarouge (FTIR) *:* 17
II. 3.2.Oscillateur harmonique 19

II. 3.2.1Cas d'une seule masse relie à un ressort : 19
II. 3.2.2 Cas d'une molécule diatomique 20

II. 3.2.3. Oscillateur harmonique quantifié *:* 21
II. 4 Vibration de groupe (Molécules poly atomiques) : 22

II. 5. Les modes de vibrations : 22

II. 5.1 .Vibration d'élongation : 22
II. 5.2 .Vibration de déformation : 23
II.6 Conclusion : 24

CHAPITRE III : TECHNIQUES EXPÉRIMENTALES 27

III.1 Introduction : 27

III.2 Spectroscopie IR : 27

III.2.1. Sspectrometer à transformée de Fourier (FT-IR) : 27
III.2.2 Spectromètre utilisé : 28
III.3 Matériels utilisés 29

III.4 Produits utilisés 30

III.5. Méthode de préparation 31

III.6 Conclusion 34

CHAPITRE IV : RÉSULTATS ET DISCUSSION 36

DÉTAILS DE CALCULS 36

IV.1 Introduction 36

IV.2 Le logiciel CASTEP 36

IV .3 Propriétés structurales 36

IV .3 .1 Optimisation géométrique : 36
IV.4 Calcul dans l'état solide 38

IV.6. Les propriétés électroniques 42

IV.6.1 Structure des bandes : 42
IV.6.2 Structure des bandes électroniques de la molécule de l'acide glutamique 45
IV.6.3 Première zone de Brillouin 46
IV.7 Propriétés vibrationnelles de l'acide 47

IV.7.1 Spectre IR expérimental 47
IV.7.2 Attribution des modes de vibration 48
IV.8 Les propriétés mécaniques 50

IV.8.1 L'effet de la pression hydrostatique sur les paramètres structuraux 50
IV.9 Conclusion 52

Conclusion générale 55

Liste des figures

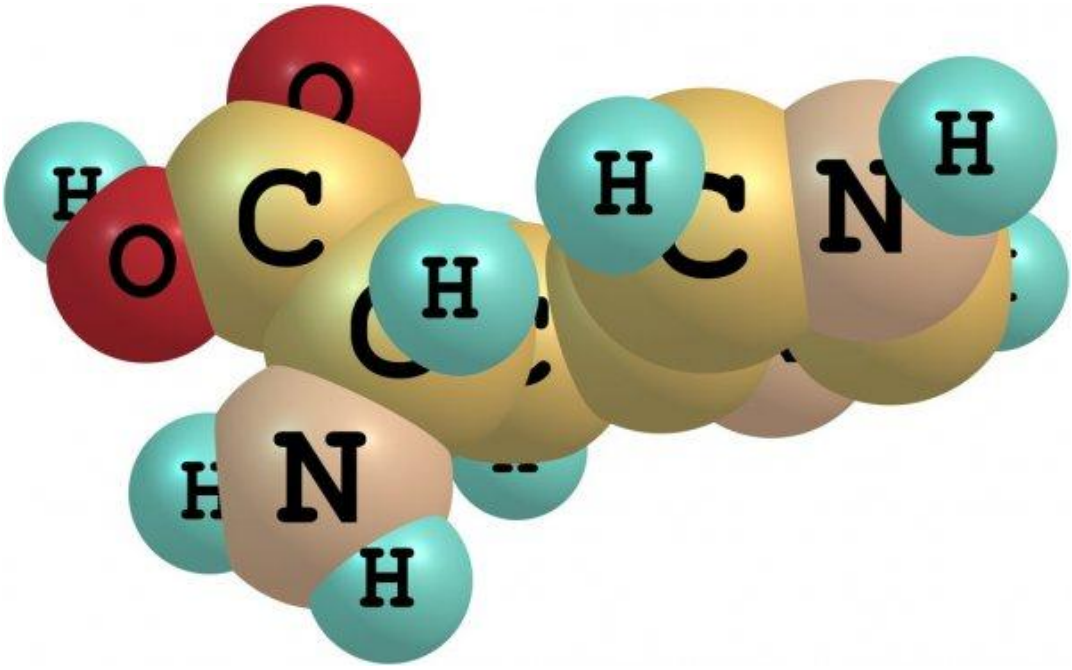
N°		TITRE	PAGE
Figure	(I.1)	La structure générale d'un acide aminé	4
Figure	(I.2)	Les vingt acides aminés standards	5
Figure	(I.3)	Structure tétraédrique d'un acide aminé	6
Figure	(I.4)	Enantiomères D et L d'une acide amine	6
Figure	(I.5)	Caractère amphotère des acides aminés	7
Figure	(I.6)	Formule structurales de l'acide glutamique	8
Figure	(I.7)	L'acide glutamique Sous forme zwitterionique	8
Figure	(I.8)	Structure cristalline de DL-glutamine	8
Figure	(II.1)	Représentation d'une onde électromagnétique	15
Figure	(II.2)	Domaines spectraux du rayonnement électromagnétique	16
Figure	(II.3)	Spectre IR du Chitosane	18
Figure	(II.4)	Représentation d'une masse attachée à un ressort	19
Figure	(II.5)	Représentation d'une molécule diatomique	20
Figure	(II.6)	Représentation idéale de l'énergie de liaison en fonction de la distance inter-atomique.	21
Figure	(II.7)	Exemples de vibration d'élongation	23
Figure	(II.8)	Exemple de vibration de déformation	23
Figure	(III.1)	Schéma spectromètre à transformée de Fourier	28
Figure	(III.2)	Image de spectromètre TF- IR utilisé dans notre travail	29
Figure	(III.3)	Matériels utilisés	29
Figure	(III.4)	Produits utilisés	30
Figure	(III.5)	Méthode de broyement	31
Figure	(III.6)	Préparation de pastille	32
Figure	(III.7)	Les étapes suivies pour la mesure du spectre IR	33
Figure	(IV.1)	Structure moléculaire expérimentale resaluée par la DRX	37

Figure	(IV.2)	Maille cristalline de l'acide glutamique optimisée a l'état solide par CASTEP	38
Figure	(IV.3)	Diagramme des bandes d'énergie	44
Figure	(IV.4)	Semi-conducteur à gap direct, et semi-conducteur à gap indirect	45
Figure	(IV.5)	Structure de bandes électroniques pour l'acide glutamique	45
Figure	(IV.6)	Les points des hautes symétries qui obtenir par CASTPE.	46
Figure	(IV.7)	La première zone de Brillouin pour un réseau orthorhombique de l'acide glutamique	47
Figure	(IV.8)	Spectre IR expérimental de l'acide glutamique	47
Figure	(IV.9)	La variation de volume en fonction de la pression pour l'acide glutamique	51

Liste des tableaux

N°	TITRE	PAGE
TABLEAU (I.1)	Groupes d'espace et paramètres de cellules unitaires	10
TABLEAU (II.1)	Régions du spectre IR: longueurs d'onde, fréquence et nombre d'onde	17
TABLEAU (IV.1)	Données cristallographiques d'acide glutamique	37
TABLEAU (IV.2)	Comparaison entre les paramètres cristallographiques calculés et expérimentaux	39
TABLEAU (IV.3)	Longueurs de liaison (Å) calculées par la DFT en utilisant le code CASTEP	40
TABLEAU (IV.4)	Les angles de liaison (°) calculées expérimentalement	41
TABLEAU (IV.5)	Angles de torsion calculés et obtenus expérimentalement	42
TABLEAU (IV.6)	Comparaison entre les fréquences calculées et expérimentales avec leurs attributions	48
TABLEAU (IV.7)	Effet de la pression sur les paramètres de la maille	50

INTRODUCTION GÉNÉRALE



INTRODUCTION GENERALE :

La biochimie est définie comme l'étude des substances chimiques appartenant à la matière vivante, elle est considérée comme un domaine vaste, mais sa particularité consiste à l'exploration de la matière vivante pour arriver aux résultats importants dans les domaines comme, la médecine, l'industrie alimentaire …etc **[1]**.

Les composés biologiques se divisent en deux parties principales: La première partie comporte les composés organiques carboniques. Ce sont des produits chimiques contiennent des carbones, la deuxième partie est celle des composés inorganiques comme l'eau et les selles.

La protéine est considérée comme l'un des composés organiques qui est la base de la composition des cellules vivante, elle est composée principalement des acides aminés. Les acides aminés eux-mêmes sont formés d'un carbone lié à un groupement amine (NH2), un groupement acide (COOH), un hydrogène et un radicale (R) **[2]**, ce qui explique la diversité des organismes vivants.

Le travail présenté dans ce mémoire porte sur l'étude des propriétés structurales, électroniques vibrationnelles et mécaniques de l'un des acides aminés, il s'agit de l'acide glutamique (C5H9NO4)**.** Nous avons choisi cette molécule en raison de sa grande importance biologique, elle est considérée comme la plus fréquente dans le tissu musculaire parmi les acides aminés. L'acide glutamique joue un rôle vital dans la transmission synaptique car il contribue à la transmission du signal aux extrémités des cellules nerveuses. Il est également utilisé dans l'industrie alimentaire en particulier comme additif (codes E620 - 629) sous forme de glutamate Mono-Sodique **[3,4]**.

Dans ce travail, nous avons étudié cette molécule théoriquement et expérimentalement .Les calculs théoriques sont basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) à l'aide du code CASTEP, et la partie expérimentale est basée sur la spectroscopie infrarouge.

Ce travail s'article autour de quatre chapitres :

Dans le premier chapitre, nous avons commencé par des généralités sur les acides aminés et la plus grande partie est consacrée à la présentation de la molécule étudiée ainsi que ses différentes propriétés.

- **Dans le deuxième chapitre :** nous avons abordé les notions théoriques des ondes électromagnétiques. Nous avons, aussi parlé de la technique expérimentale utilisée dans l'étude, qui est la spectroscopie infrarouge IR.
- **Dans le troisième chapitre :** nous avons présenté les différents appareils, instruments et les produits utilisés dans notre travail, et on a présenté en détail les différentes démarches expérimentales pour enregistrer le spectre IR de l'acide glutamique.
- **Dans le quatrième chapitre:** nous avons présenté les différents résultats théoriques et expérimentaux qui concernent les propriétés structurales électroniques, vibrationnelles et mécaniques de l'acide glutamique.

Enfin, Nous avons terminé ce mémoire par une conclusion générale résumera les principaux résultats obtenus.

Bibliographies

[1]LAZREG.A, « Calculs théoriques de quelque acides aminés et étude de l'interaction entre un cation et ces biomolécule », Thèse de Doctorat, Université de Sidi Bel-Abbés, (2018).

[2] RASSO.N, « chimie organique », boeck univ press, ISBN: 2804163695**.**

[3] DEPPENWEILER. A, « Le glutamate monosodique comme

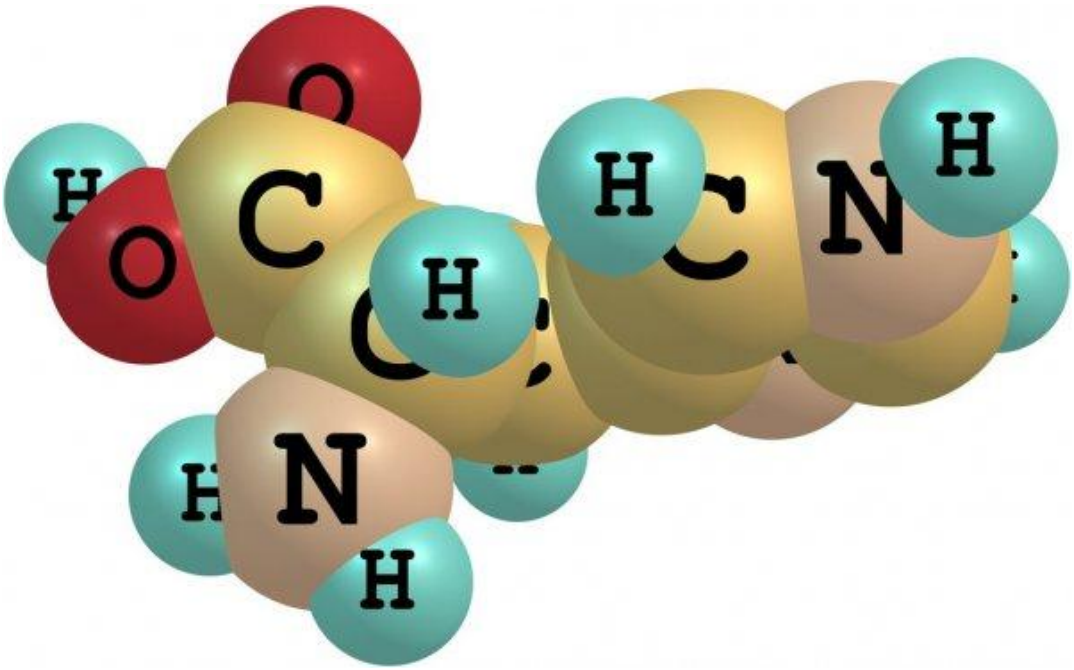
exhaussteur de gout: confiance ou mefiance ? », Thèse de Doctorat**,** Université Victor Segalen Bordeaux 2, (2014).

[4] BERTRAND.C, « Contributions à la compréhension des phénomènes de nucléation induite par laser. Applications à la glycine et études préliminaires sur l'histidine et l'acide glutamique », Thèse de doctorat, École Centrale, Paris, (2014).

CHAPITRE I

GÉNÉRALITÉS SUR

LES ACIDES AMINÉS



CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES ACIDES AMINES

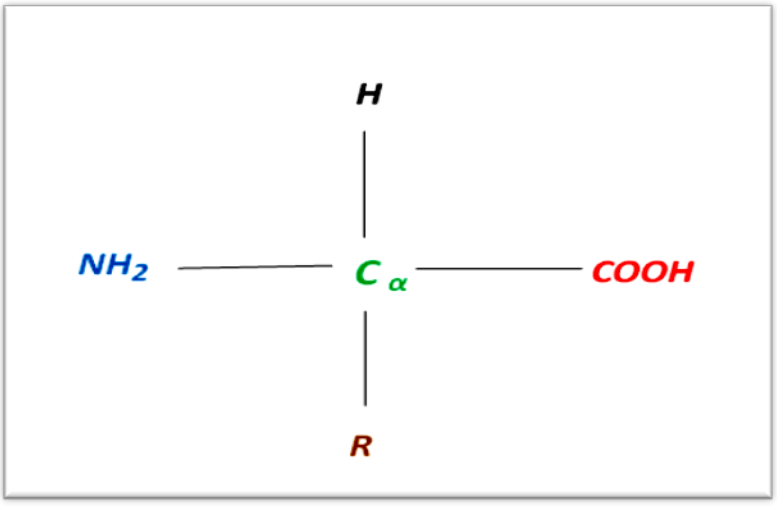
I .1 Introduction :

Les protéines sont des grosses molécules qui sont composées d'un enchaînement d'acides aminés reliés entre eux par des liaisons peptidiques (CO-NH). Toutes les protéines sont formées à partir de 20 différents acides aminés **[1].** Parmi ces 20 acides aminés, nous intéresserons à l'étude de l'acide glutamique (C5H9NO4), en étudiant ses propriétés structurales, vibrationnelles et mécaniques.

I .2 Acides aminés :

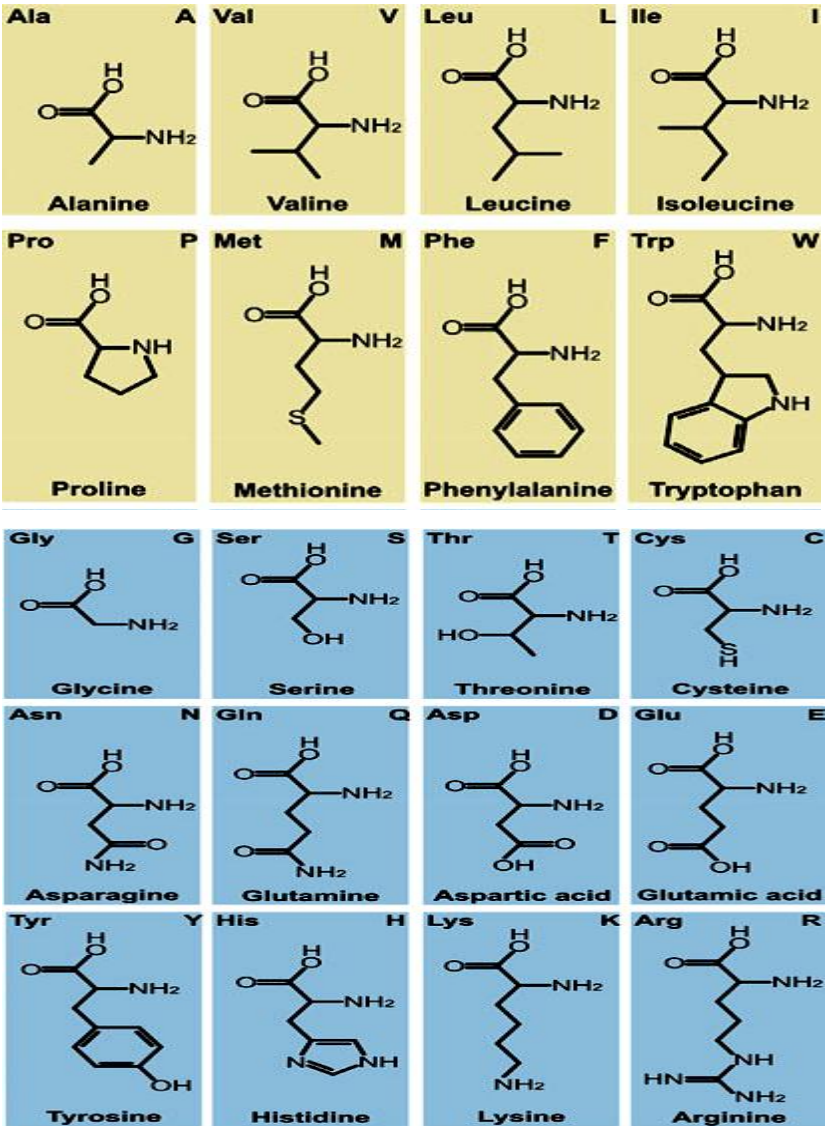
Un acide aminé est une espèce organique composé d'un carbone tétraédrique central (appelé carbone **α**) **[5]** attaché à un groupe amine (NH_2), un groupe carboxyle (COOH), un atome d'hydrogène et un radical R voire la figure (I.1**).**

Les acides aminés diffèrent par la nature de la chaine latérale (radicale R), ce qui conduit à l'obtention de 20 standards acides aminés voire la figure(I.2**).**



Figure(I.1): La structure générale d'un acide aminé.

Il est important de mentionner que tous les acides aminés ont la même structure de base comme montré dans la figure (I. 1), leurs structures ont été déterminées par les méthodes de diffraction des rayons X sur les monocristaux **[4].**



Figure(I.2) : Les vingt acides aminés standards.

I.2.1 Configuration: chiralité et activité optique :

Tous les acides aminés, à l'exception de glycine, sont des molécules chirales, car ils contiennent un atome carbone asymétrique (carbone α) associé à quatre groups d'atome figure (I.3), ce qui conduit à la activité optique de ces molécules [6].

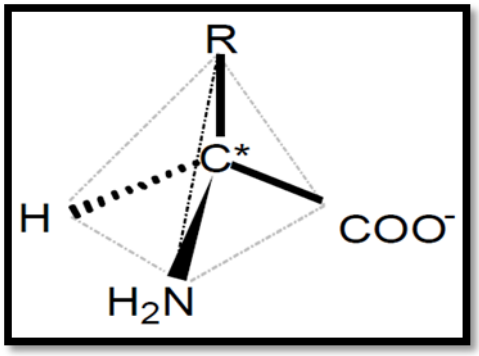


Figure (I.3) : Structure tétraédrique d'un acide aminé.

I. 2.2 Conformation : forme moléculaire :

Les acides aminés qui ont les configurations L et D sont appelés « **énantiomères»** figure(I.4) [7].

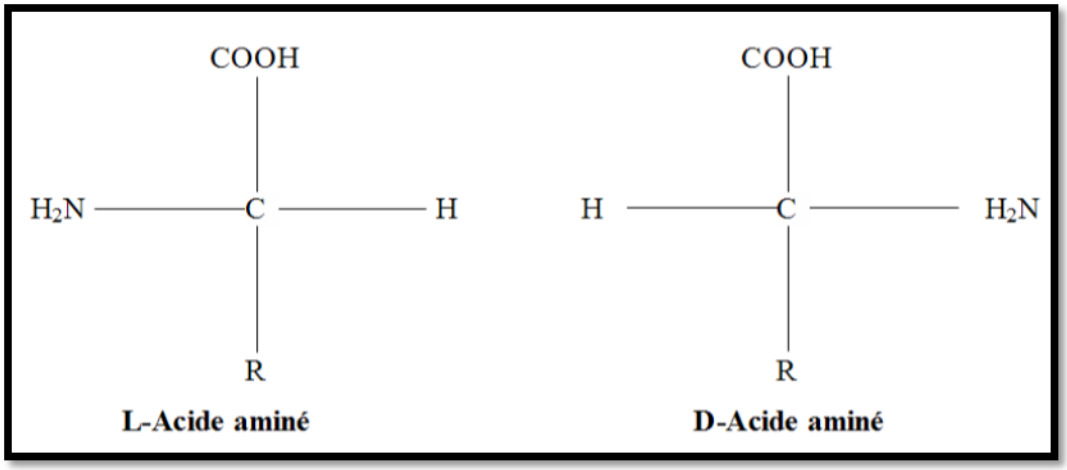


Figure (I.4) : Enantiomères D et L d'une acide amine.

- D-acide aminé : lorsque le groupe H_2N se trouve à la droite de l'atome de carbone (α).
- L-acide aminé : lorsque le groupe H_2N se trouve à la gauche de l'atome de carbone(α).
- Seule la forme (L) existe dans les protéines.

D'autre part, les acides aminés de forme DL sont composés de 50% de (L-Acides aminés) et 50% (D- Acides aminés).

I.2.3 Cation, anion et zwitterion

Les trois formes d'acides aminés, cations, anions et zwitterions coexistent dans toute solution aqueuse, mais varie en fonction de la valeur du pH de la solution. Ces formes ionisables peuvent donner ou accepter des protons (c'est-à-dire former des anions ou des cations), et aussi les deux à la fois zwitterion) voire la figure(I.5).

Chaque couple (acide-base) est caractérisé par à la constante de dissociation acide pKa **[8].**

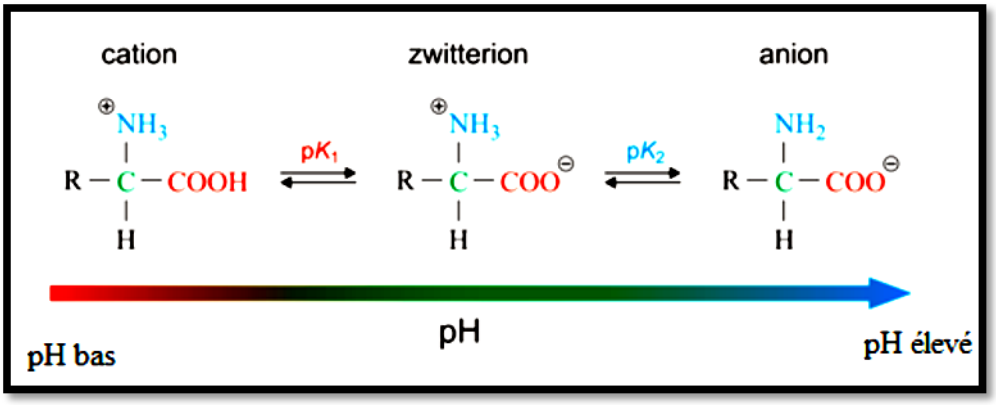


Figure (I.5): Caractère amphotère des acides aminés .

La valeur du pH de la solution joue un rôle essentiel pour la détermination de l'état acide en la comparant à la valeur de pH isoélectrique (PH i). Ce PHi peut être calculé en faisant la moyenne des pKa autour de la forme zwiterrion

PH i = (pK1+pK2)/2 Alors:

- Si pH < pHi amino-acide chargé positivement (l'acide aminé est un catin).
- Si pH > pHi amino-acide chargé négativement (l'acide aminé est un anion.
- Si pH = pHi les deux groupements (NH^+_3 et $-COO^-$) sont ionisés, donc la charge globale est nulle, on le nomme Zwiterrion.

Les acides aminés existent sous forme de zwitterions dans la plupart des tissus biologiques **[9]**. Ces zwitterion ont une forme moléculaire neutre qui possède des charges positives et négatives.

Exemples

Acide : un groupe aminé, groupe carbonylée et une chaine latérale carboxyle (chargées négativement) il s'agit de l'acide aspartique, l'asparagine, l'acide glutamique et la glutamine.

Basique : un groupe aminé, un groupe carbonylée et chaine latérale basique (chargées positivement). Ils s'agissent de l'arginine, la lysine, l'hydrox lysine et l'histidine.

I.2.4 Classification des acides aminés :

Les acides aminés peuvent être classés selon la structure de la chaine latérale

- ***Aliphatiques*** : comme la glycine, l'alanine, la valine, la leucine et l'isoleucine s'appellent comme les acides aminés à chaînes embranchés.
- ***Hydroxylées*** : comme la sérine et la thréonine, ils s'appellent également des Acides aminés hydroxylés.
- ***Soufrée*** **:** comme la cystéine, la méthionine et la cystine, ils s'appellent également des acides aminés soufrés.
- ***noyau aromatique*** **:** comme la phénylalanine, la tyrosine et le tryptophane, ils s'appellent également des acides aminés aromatiques.
- ***Cyclique*** **:** comme la proline **[10].**

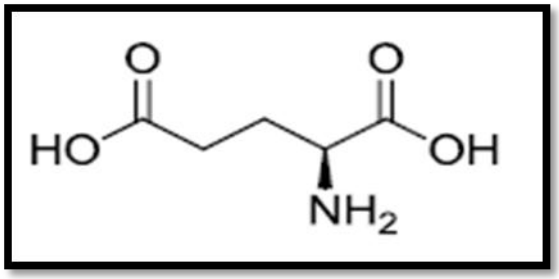
I.3 Acide glutamique

I.3.1 Définition :

L'acide glutamique (Glu) est un acide aminé aliphatique naturel de type (α), sa structure chimique est similaire à l'acide aspartique. Sa chaîne latérale contient un résidu carboxyle, ce qui le rend acide **[4]**. L'acide glutamique est un acide aminé polaire, sa formule chimique est : $C_5H_9NO_4$, découvert en 1866 par Kark Ritthausen, un scientifique allemand.

Il est considéré comme l'un des acides aminés les plus importants a cause de son rôle comme un neurotransmetteur dans le cerveau **[2]**.

I.3. 2 Structures :



Figure(I .6) : Formule structurales de l'acide glutamique **[12].**

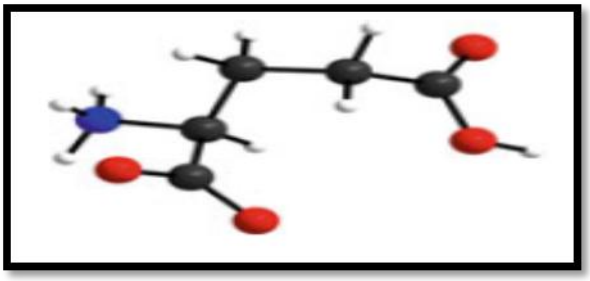
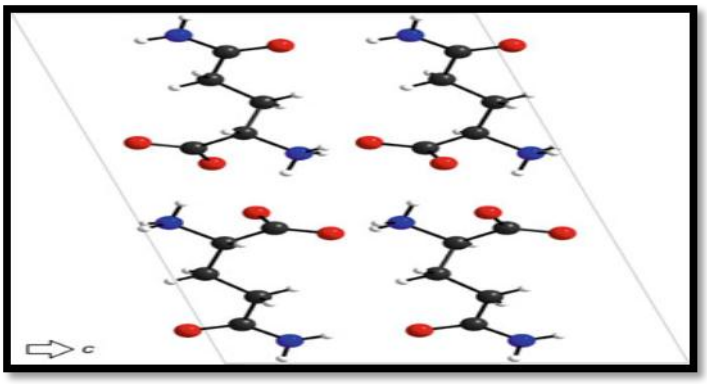


Figure (I.7) :L'acide glutamique Sous forme zwitterionique



Figure(I.8) : Structure cristalline de DL-glutamine, vue le long de [010]. Noter le motif double couche fréquemment trouvé dans les acides aminés non polaires **[4].**

Parmi les sels dérivés de l'acide glutamique, on peut citer les produits suivants **[13]**:

- Le glutamate mono sodique ou mono sodium glutamate (le plus utilisé).
- Le glutamate mono potassique.
- Le di-glutamate de calcium.
- Le glutamate d'ammonium.
- Le di-glutamate de magnésium.

I.3.3 Proprieties de l'acide glutamique

I.3.3.1.Propriétés physique :

- Forme : c'est une poudre blanche inodore [11, 12]
- existe sous forme anionique : Au pH physiologique [14].

- Solubilité : Soluble dans l'eau 0, 88g / 100 ml d'eau, à 25 °C [4] et légèrement soluble dans l'éthanol insoluble dans l'éther.
- Isomère optique : Un carbone α asymétrique (la chiralité) [9].
- Absorption et fluorescence : N'absorbe pas la lumière visible.
- Point de fusion et d'ébullition : points d'ébullition 225 et de fusion (205°C) [5], est élevé [12].

I.3.3.2 Propriétés chimique :

- Code : E [6].
- Abrév. : Glu [6].
- Formule brute : C5H9NO4 [11].
- Masse molaire : 147.13g/mol [6].
- pKa_1 (α-COOH) : 2,10 [2].
- pKa_2 (α-NH3) : 4,07 [2].
- pKa_3 (chaîne latérale) : 4,07 [2].
- Le pH d'une solution saturée : est de 6,7-7,2 [13].

I.3.3.3 Propriétés biochimique :

- PH isoélectrique : 3.15 (faible) [12].
- Acide aminé non essentiel : synthétisés dans le corps humain [12].

I. 3.3.4 Propriétés cristallographiques de l'acide glutamique

Tableau (I.1):Groupes d'espace et paramètres de cellules unitaires [4] :

	Groupes d'espace	*a (A°)*	*b (A°)*	*c (A°)*	*α(°)*	*β(°)*	*γ(°)*
α- L Glu	P $2_1 2_1 2_1$	7,06	10,30	8,75	90	90	90
β-L Glu	P $2_1 2_1 2_1$	5,17	17,34	6,95	90	90	90
DL-Glu	P 2_1/ n	5,743	13,036	8.431	90	103.66	90
DL-Glu· H_2O	Pb ca	9,119	15,480	10,627	90	90	90

Remarque : les lettres grecques α et β dans ce tableau désignent différents polymorphes de l'acide glutamique.

- Le polymorphe **α** : est métastable.
- Le polymorphe **β** : est stable.

- Les deux polymorphes sont orthorhombiques et appartiennent au même groupe d'espace $P2_12_12_1$ **[3].**

I.4 Conclusion

Comme conclusion, l'acide glutamique est l'un des acides aminés principal, qui joue un rôle crucial pour les êtres vivants **[13]**. Il est utilisé dans de nombreux domaines tels que:

- les industries pharmaceutiques pour traiter certaines maladies du systèmes digestif et les ulcères d'estomac **[3]**.
- Dans l'industrie alimentaire : il est utilisé comme additif sous forme de glutamate Mono-Sodique **[5]** (codes E620 – 629) et les cosmétique **[4].**

Il est important de dire que la connaissance des propriétés physico-chimiques et spectroscopique des acides aminés est une tâche importante à faire (voir le chapitre IV).

Bibliographies :

[1] BEAUFRERE .B, « Métabolisme des acides aminés chez l'homme normal », France, (2002**)**.

[2] EPPENWEILER .A, « Le glutamate mono sodique comme exhausteur de gout : confiance ou mefiance ? », Thèse de Doctorat**,** Université de Victor Segalen Bordeaux 2, (2014).

[3] CLAIR. B, « Contributions à la compréhension des phénomènes de nucléation induite par laser. Applications à la glycine et études préliminaires sur l'histidine et l'acide glutamique ». Thèse de Doctorat**,** Université, Université de Paris,(2014).

[4] Michel Fleck • Aram M. **Petrosyan «** Salts of Amino Acids, Crystallization, Structure and Properties », University of Viennas,pringre International Publishing Switzerland, (2014).

[5] BESSEM. B, « Etude de la stabilité des interactions ioniques en phase gazeuse : application aux complexes Biologiques », Thèse de Doctorat, Université de Paris, (2014).

[6] MEKHATRI.A, « Synthése de Nouveaux Matériaux à porosité Controlée », Thèse de Doctorat,Université d'Oran, (2021).

[7] BAHA. Kh, MADADI. Kr, « Étude expérimentale et théorique des propriétés électroniques et vibrationnelles du DL-tyrosine et du DL-tryptophane », Mémoire de master, Université de Médéa, (2017).

[8] BELKHELFA. C, « Synthèse et caractérisation des complexes de Cu(II) et Ni(II) avec l'hexaméthylènetétramine et une série d'acides aminés », Thèse de doctorat, Université de Tizi-Ouzou, (2016).

[9] BOUGHERRA .H, « Synthèse et caractérisation de complexes du cuivre(II) avec la diméthylglyoxime, une série d'acides aminés, lebases puriques et l'ortho-phénylènediamine. Application biologique », Thèse de doctorat, Université de Tizi-Ouzou, (2018).

[10] ELASSAD. Z, OUARRI .Y, « Etude de la formation des complexes de la L-sérine avec les sels de nickel(II), et de fer(II) Détermination de la conductivité ; étude de l'effet antibactérien du complexe synthétisé », Mémoire de master, Université d'Oran, (2012).

[11] SAGOT. E, « Synthèse d'analogues de l'acide glutamique par transamination enzymatique : Synthèse et Modélisation », Thèse de Doctorat, Université de Blaise Pascal, (2007).

[12] MEYER.T, « Caractérisation électrochimique et spectroscopique de protéines membranaires immobilisées sur des nanomatériaux », Thèse de Doctorat, Université de Strasbourg, (2015).

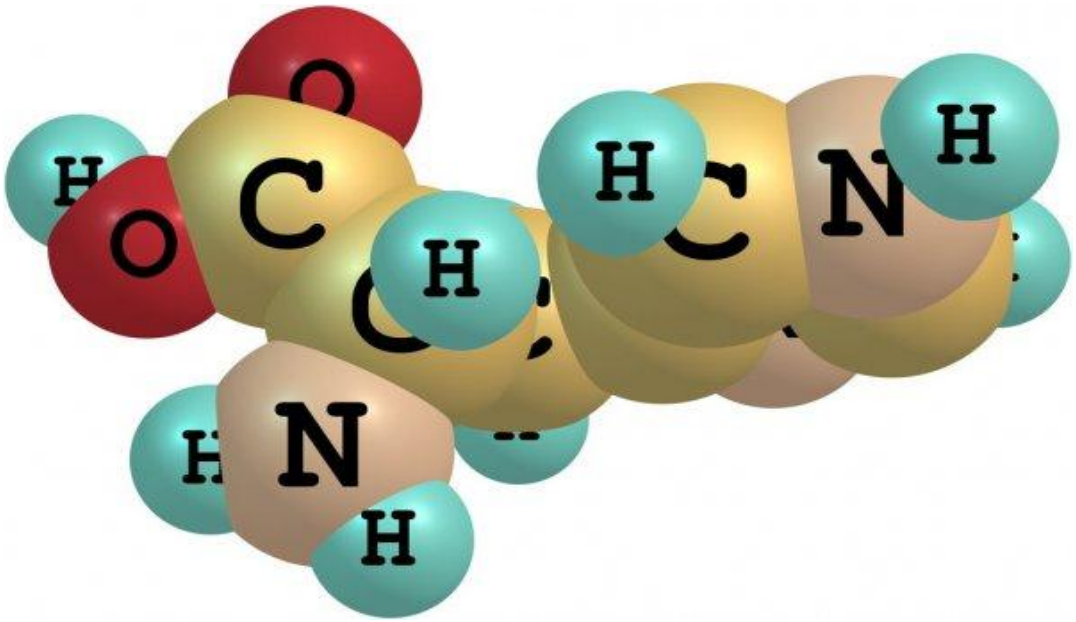
[13] MOUFFOK. A, « Étude de la production d'acide glutamique à partir de jus de datte par Corynebacterium glutamicum 2262 thermo-inductible », Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif 1, (2017).

[14] HARTREE .D.R, proc .Camb. phil .Soc.1928,24,89,ibid 24,111.

CHAPITRE II

SPECTROSCOPIES

INFRAROUGE (IR)



CHAPITRE II : SPECTROSCOPIES INFRAROUGE (IR)

II.1 Introduction *:*

La spectroscopie est basée sur l'interaction entre les ondes électromagnétiques et la matière. Cette interaction existe sous trois formes possibles, à savoir l'absorption, l'émission et la diffusion **[1].**

Dans ce chapitre, on va présenter une technique spectroscopique bien connue, il s'agit de la spectroscopie infrarouge IR. La théorie et le principe de cette technique spectroscopique seront discutés en détail dans cette partie.

II. 2 La spectroscopie Infrarouge (IR)

II. 2 .1 Définition de la spectroscopie IR

La spectroscopie infrarouge: est une spectroscopie moléculaire d'absorption dont la substance étudiée reçoit un rayonnement électromagnétique, certaines radiations sont absorbées par la molécule et provoquent des transitions entre les niveaux d'énergie vibrationnels et rotationnels de la molécule **[2].** L'examen des radiations absorbées permet l'identification et le des échantillons étudiés **[3].**

II. 2 .2 Historique de la spectroscopie infrarouge

Isaac Newton est le fondateur de la spectroscopie. Il a été le premier à comprendre que l'étalement des couleurs par le prisme est lié à la nature intrinsèque de la lumière. En utilisant un prisme un trou d'entrée pour mieux définir la source et le dispositif de focalisation, il a construit le premier spectroscope. Le domaine de la lumière visible, le seul connu, s'est étendu grâce à William Herschel, qui a découvert en 1800 les effets thermiques du rayonnement infrarouge **[4]**, Il a observé que lors du déplacement d'un thermomètre à alcool sur le spectre solaire, du violet vers le rouge, la température augmente et présente un maximum au-delà du rouge, où l'œil ne discerne aucun éclairement**[5]**. Donc Herschel a montré que le spectre électromagnétique s'étendait au-delà du rouge vers les grandes longueurs d'ondes **[6].**

II.3 Propriétés des ondes électromagnétiques

Une onde électromagnétique est la résultante d'un champ électrique $(\vec{E})$ et d'un champ magnétique

$(\vec{B})$ Dont les amplitudes varient de façon sinusoïdale au en fonction du temps **[7]**.

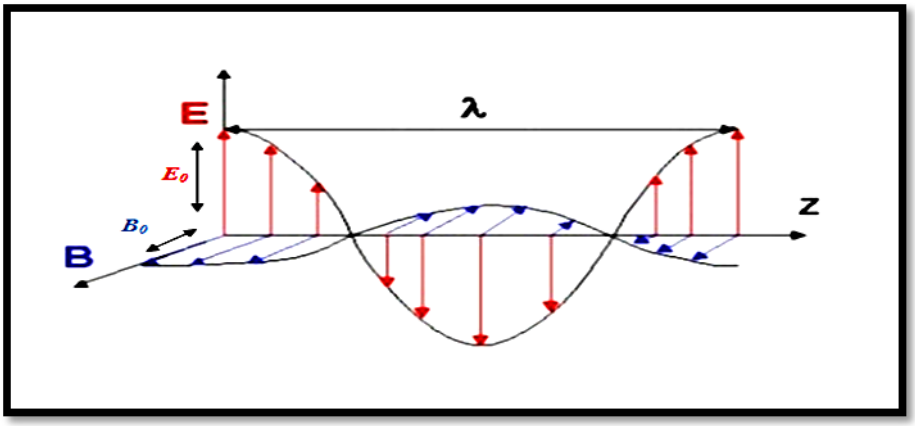


Figure (II. 1) : Représentation d'une onde électromagnétique

Les vecteurs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ étant perpendiculaires entre eux et leur valeur est donnée par les relations suivantes **[8]:**

$$E = E_0 \sin(2\pi\nu t - k x) \qquad \textit{(II. 1)}$$

$$B = B_0 \sin(2\pi\nu t - k x) \qquad \textit{(II. 2)}$$

E_0 **et** B_0 sont des amplitudes.

Il existe une relation ente le vecteur d'onde $\vec{k}$ et la longueur d'onde $\vec{\lambda}$ **qui est [9] :**

$$k = \frac{2\pi\lambda}{c} \qquad \textit{(II. 3)}$$

c : est la vitesse de la lumière dans le vide, qui est égale à $3.10^8 m .s^{-1}$

- La longueur d'onde **(λ) :** c'est la distance linéaire entre deux minima ou deux maxima successifs de cette onde.
- le nombre de périodes par seconde appelé fréquence représenté par (ν) *et* exprimée en (Hertz).

Dans le vide ou l'air la relation entre la fréquence (***ν***) et la longueur d'onde **(*λ*)** s'écrit :

$$\lambda \nu = c \qquad \textit{(II. 4)}$$

II. 3.1. Le spectre électromagnétique

II. 3.1.1 Déférents domaines de l'IR

Le spectre électromagnétique est généralement divisé en plusieurs régions : les rayons gamma, les rayons X ; l'ultraviolet, le visible, l'**infrarouge**, les micro-ondes et les ondes radios fréquences **Figure (II.2)** **[10]**.

Le domaine infrarouge entre 4000 cm^{-1} et 400 cm^{-1} (2.5 – 25 µm) correspond au domaine d'énergie de vibration des molécules **[11]**.

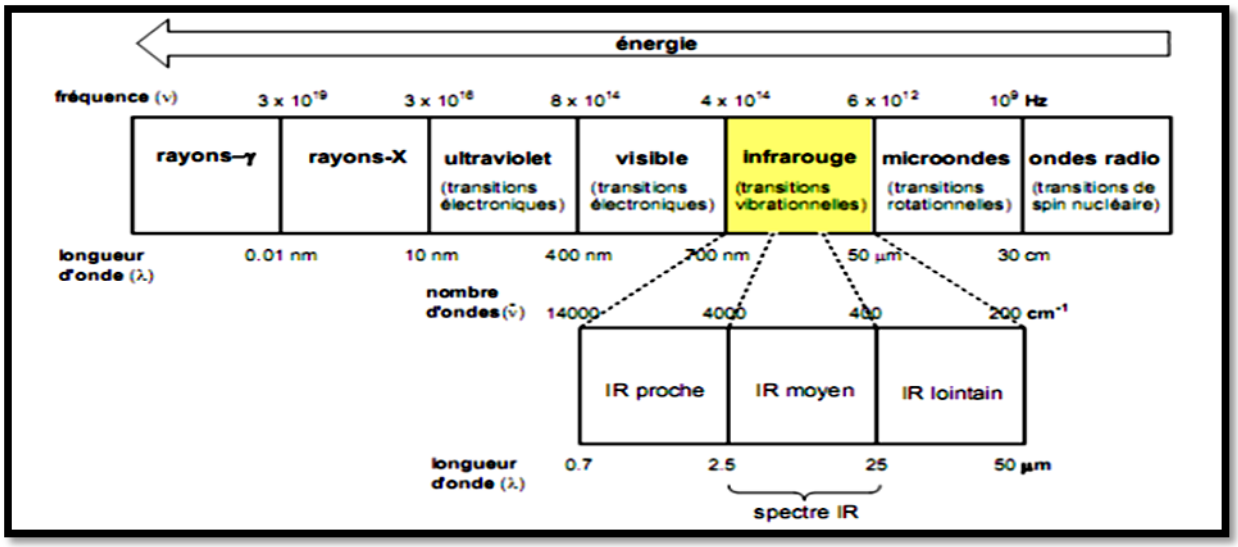


Figure (II.2) : Domaines spectraux du rayonnement électromagnétique

Dans le vide, tous les radiations électromagnétiques ont la même vitesse de la lumière et caractérisés par leur longueur d'onde ***λ*,** le nombre d'onde$\tilde{\nu}$, ou leur fréquence ν **[8]**.

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{1}{\tilde{\nu}} \qquad \textit{(II.5)}$$

L'énergie W d'une onde électromagnétique est proportionnelle à sa fréquence solon l'équation générale :

$$W = \Delta E = h \cdot \nu = \frac{h.c}{\lambda} = h\, c\, \tilde{\nu} \qquad \textit{(II. 6)}$$

Avec :

ΔE=la variation d'énergie de transmission de deux niveaux énergétiques.

h : constante de Planck h = $6.62.10^{-34}$J.s.

λ : est la longueur d'onde.

c : est la vitesse de la lumière.

$\tilde{\nu}$: est le nombre d'onde.

La partie infrarouge du rayonnement électromagnétique est divisée en trois domaines : l'infrarouge proche, l'infrarouge moyen et l'infrarouge lointain, **le tableau (II.1)** présente les différentes régions de l'infrarouge **[10].**

Tableau (II.1): Régions du spectre IR: longueurs d'onde, fréquence et nombre d'onde

	λ (cm)	ν (H_Z)	$\tilde{\nu}$(cm^{-1})
IR lointain	$3,8.10^{-5}$ à $7,8.10^{-5}$	$7,9.10^{-14}$ à $3,8.10^{-14}$	26300 à 12800
Proche IR	$7,8.10^{-5}$ à $2,5.10^{-4}$	$3,8.10^{-14}$ à $1,2.10^{-14}$	12800 à 4000
IR moyen	$2,5.10^{-4}$ à 5.10^{-3}	$1,2.10^{-14}$ à 6.10^{-12}	4000 à 200

II. 3.1.2 Principe de la Spectroscopie Infrarouge (FTIR) :

Le spectrophotomètre infrarouge permet de mesurer l'intensité du rayonnement (absorbée ou transmise) qui traverse un échantillon par un balayage automatique.

L'échantillon peut être à l'état solide sous forme de poudre (quelques mg), à l'état liquide ou gazeux. La mesure donne un graphique représentant l'absorbance ou transmittance de rayonnement en fonction du nombre d'ondes (voir le spectre) **[12]**.

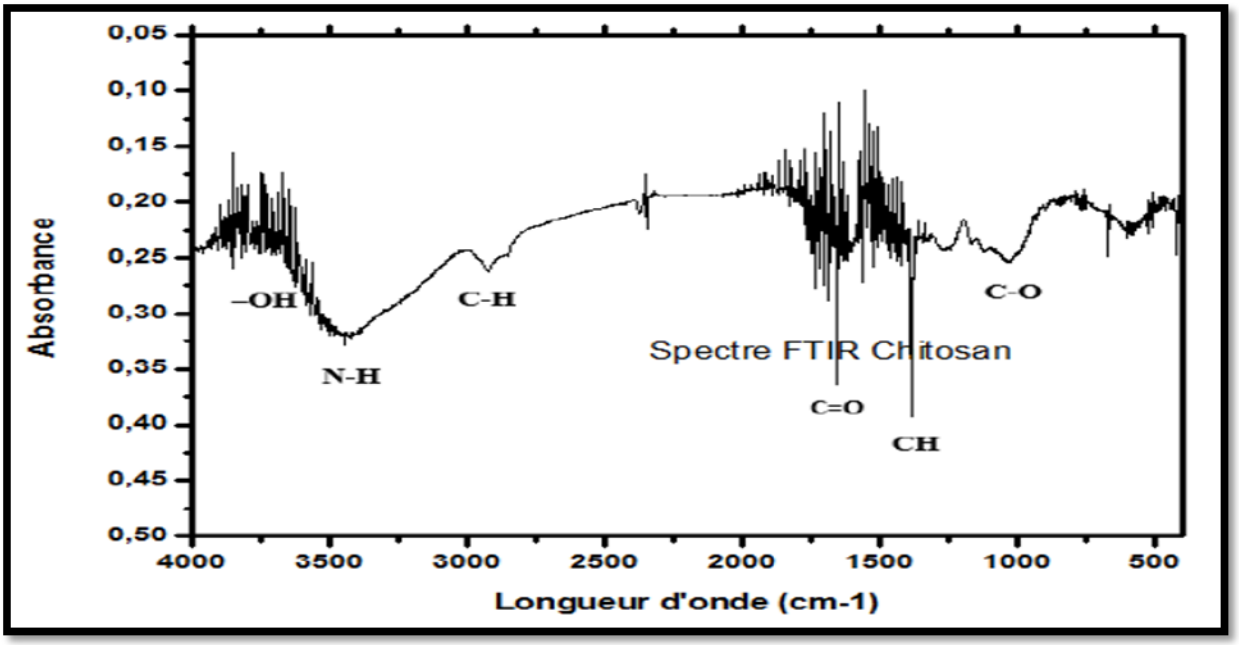


Figure (II.3) : Spectre IR du Chitosane. .

Comme montré dans la **figure (II.3),** le spectre IR est constitué de plusieurs bandes d'absorption. Avec différentes intensités.

On peut calculer la transmittance T par la relation **[13]** :

A : l'absorbance à une longueur d'onde λ en unité arbitraire.

$\mathbf{I_{éch}}$: intensité du faisceau transmis (après passage dans l'échantillon)

$\mathbf{I_0}$: intensité du faisceau incident (faisceau de référence)

- La loi de Beer-Lambert est aussi valable en spectroscopie IR **[13].**

Il affirme que l'absorption est proportionnelle au nombre de molécules absorbantes

$$T(\lambda) = I_{éch} / I_0 \qquad \textit{(II. 7)}$$

Généralement, la transmittance est évaluée en pourcentage (%) **[9]**.

La relation qui donne l'absorbance **A** est donnée par :

$$A(\lambda)=log1/T(\lambda) \qquad \textit{(II. 8)}$$

$$A(\lambda)=log1/\ T(\lambda)=\varepsilon(\lambda).\ l.\ c \qquad \textit{(II. 9)}$$

Avec :

$\varepsilon(\lambda)$ **:** coefficient d'extinction molaire ($L.mol^{-1}.cm^{-1}$) **[14] .**

c : concentration en (mole/l).

l : longueur du chemin optique en (cm).

II. 3.2.Oscillateur harmonique

II. 3.2.1Cas d'une seule masse relie à un ressort :

Nous avons une masse m attachée à un ressort (la masse du ressort est nulle) figure (II.4)

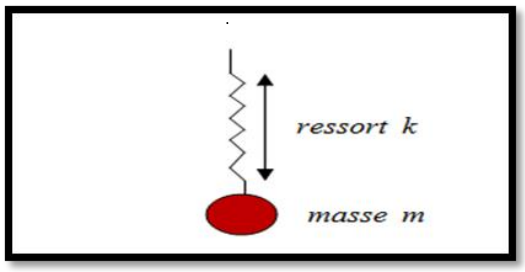


Figure (II.4) : Représentation d'une masse attachée à un ressort.

K représente la constante de raideur qui mesure la raideur de ressort, le déplacement de la particule par rapport à sa position d'équilibre r_0 est:

$$q = r - r_0 \qquad \textit{(II. 10)}$$

On applique la loi de Hooke

$$f = k\,(q = r - r_0) = k\,q \qquad \textit{(II. 11)}$$

$$\frac{dU}{dq} = -f = kq \qquad \textit{(II. 12)}$$

De l'équation (II. 12), on obtient l'énergie potentielle U :

$$U = \frac{1}{2} k\, q^2 \qquad \textit{(II. 13)}$$

En appliquant la deuxième loi de newton, on trouve :

$$f = m\frac{d^2q}{dt^2} = -kq \qquad \textit{(II. 14)}$$

L'équation différentielle du second ordre s'écrit sous cette forme :

$$\frac{d^2q}{dt^2} = \frac{-k}{m} q \qquad \textit{(II. 15)}$$

L'équation ***(II. 15)*** a pour solution :

$$q = q_0 \cos(2\pi\, \nu\, t + \omega) \qquad \textit{(II. 16)}$$

Pour les conditions initiales à t=0, la position de la mase est au maximum d'élongation $q = q_0$

$$\frac{d^2q}{dt^2} = -4\,\pi^2\,\nu^2\cos(2\pi\,\nu\,t+\omega) = 4\,\pi^2\,\nu^2 q \qquad \textit{(II. 17)}$$

En insérant cette égalité dans l'équation ***(II. 14),*** on obtient la fréquence :

$$4\,\pi^2\,\nu^2 m = k \qquad \textit{(II. 18)}$$

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \qquad \textit{(II. 19)}$$

II. 3.2.2 Cas d'une molécule diatomique*:*

Nous avons une molécule diatomique constituée de deux atomes (masses m_1 et m_2) attachées par une liaison comme montré dans la figure (II.5)

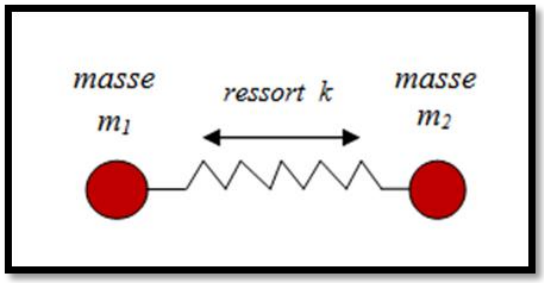


Figure (II.5) : Représentation d'une molécule diatomique

q est le déplacement des particules par rapport à ces positions d'équilibre, il est donné par la relation suivante *:*

$$q = r - r_{eq} \qquad \textit{(II. 20)}$$

r eq : c'est la longueur de liaison à l'équilibre.

r : la longueur instantanée.

On obtient une formule analogue au cas précédent :

$$\frac{m_1\,m_2}{m_1+m_2}\frac{d^2q}{d^2t} = -kq \qquad \textit{(II. 21)}$$

μ :la masse réduite ;calculée avec la formule :

$$\mu = \frac{m_1\, m_2}{m_1 + m_2} \qquad \textit{(II. 22)}$$

Dans ce modèle, la molécule possède une seule fréquence propre de vibration donnée par :

$$\nu_h = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \text{ (Exprimée en hertz (Hz ou } s^{-1}\text{)} \qquad \textit{(II. 23)}$$

La valeur obtenue peut être convertie en nombre d'onde :

$$\tilde{\nu}_h = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{\mu}}\, cm^{-1} \qquad \textit{(II. 24)}$$

II. 3.2.3. Oscillateur harmonique quantifié *:*

La résolution de l'équation de Schrödinger permet de trouver les niveaux d'énergie E_V de la molécule diatomique. Ces niveaux quantifiés sont repérés par un nombre quantique v voire la figure (II.6).

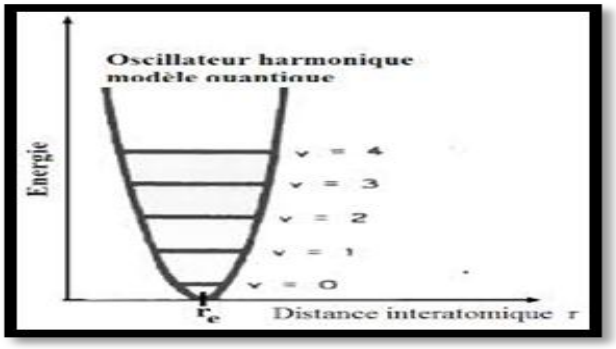


Figure (II.6) : Potentielle harmonique : Représentation idéale de l'énergie de liaison en fonction de la distance inter-atomique.

En utilisant le hamiltonien :

$$\mathbf{H\Psi(q) = E\Psi(q)} \qquad \textit{(II. 25)}$$

soit $$\left(\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2}kq^2\right) H\Psi(q) = E\Psi(q) \qquad \textit{(II. 26)}$$

On obtient :

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \text{ (en joules)} \qquad \textit{(II. 27)}$$

avec *V=1,2,3*

En utilisant la fréquence de l'oscillateur harmonique ***(II. 23)*** on trouve *:*

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\, h\, \nu_h \qquad \textbf{(II. 28)}$$

À (v = 0), l'énergie de vibration n'est pas nulle (représente la plus basse d'énergie)

Avec :

$\boldsymbol{\nu_h}$ *:* C'est la fréquence de l'oscillateur harmonique (donnée par la loi de Hooke)

v : un entier positif ou nul appelé nombre quantique vibrationnel.

La transition entre deux niveaux peut se faire lorsque ($\Delta \mathbf{v} = \pm 1$). Par exemple, une transition a lieu entre v=0 et v=1, et donc la différence d'énergie est $\Delta E_v = h\,\nu_h$ **[10]**.

II. 4 Vibration de groupe (Molécules poly atomiques) :

Pour une molécule linière avec N atomes, il y a **3N -5** modes normaux de vibration, et 3N-6 pour une molécule non linaire **[8]**.

II. 5. Les modes de vibrations *:*

En général, il existe deux types de vibrations moléculaires **[14]** :

- La première est appelée vibration d'élongation.
- le deuxième type est appelé vibration de déformation.

II. 5.1 .Vibration d'élongation :

Lorsque deux atomes se rapprochent et s'éloignent périodiquement le long de leur axe commun. La vibration d'élongation est divisée en deux parties qui sont représentées dans la **figure (II.7)** **[14]** :

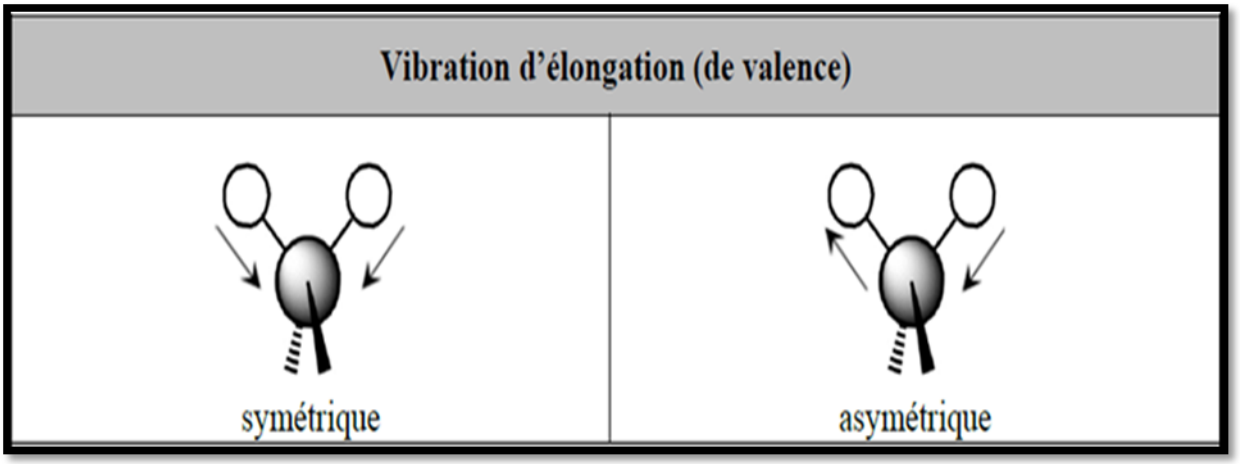


Figure (II.7) : Exemples de vibration d'élongation.

II. 5.2 .Vibration de déformation *:*

On observe cette vibration, lorsqu'il y a une modification dans les angles entre les liaisons. La vibration de déformation est divisée en deux parties qui sont représentées dans **figure (II.8)**.

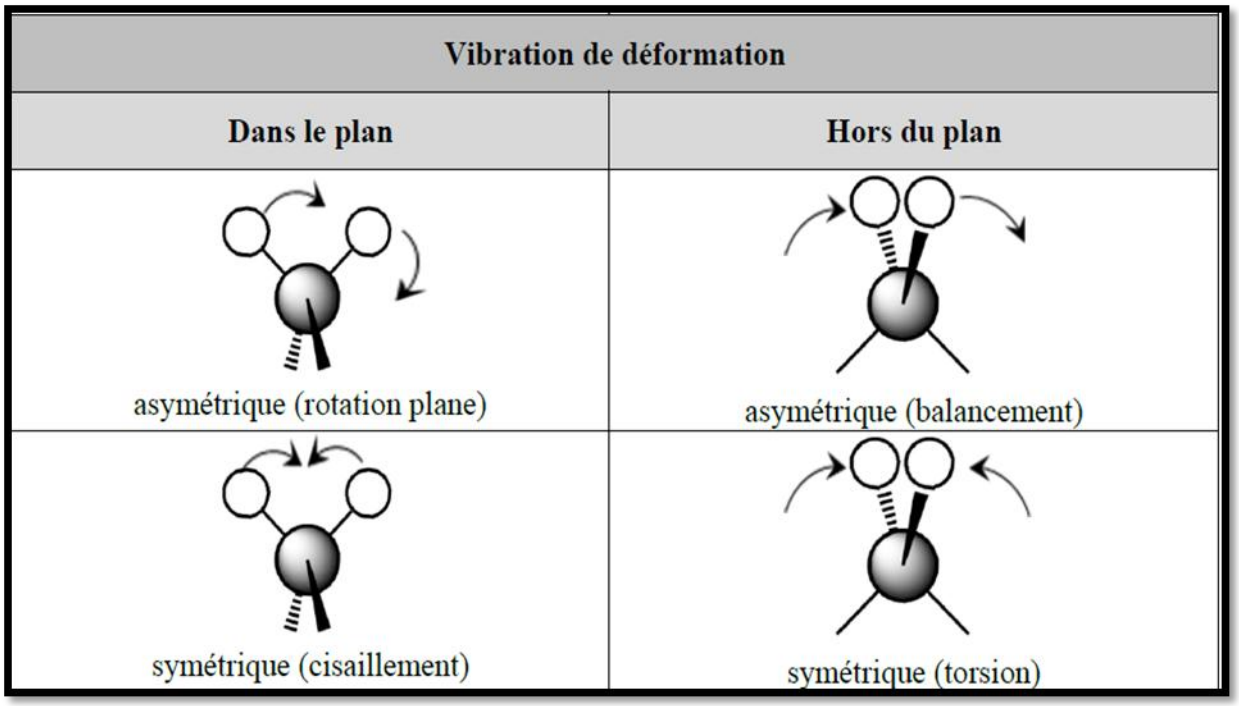


Figure (II.8) : Exemple de vibration de déformation.

II.6 Conclusion :

Ce chapitre présente les notions théoriques de la spectroscopie infrarouge, qui est l'une des techniques les plus utilisées et les plus connues. Cette technique utilise la région infrarouge du spectre électromagnétique, pour l'étude des propriétés vibrationnelles de la molécule et aussi pour l'identification des molécules. La méthode expérimentale et les résultats obtenus par cette méthode seront présentés dans les chapitres (II, IV).

Bibliographies

[1] PELLETIER.M, « Application de la spectroscopie infrarouge à l'étude de

L'organisation de l'eau aux interfaces : Le cas des phyllosilicates 2 : 1 », Thèse de doctorat, l'Institut National Polytechnique de Lorraine, (1999).

[2] Valérie Genot, Laurent Bock, Pierre Dardenne, Gilles Colinet, « L'intérêt de la spectroscopie proche infrarouge en analyse de terre » (synthèse bibliographique), Biotechnol. Agron. Soc. Environ. 2014 18(2), 247-261.

[3]Laurent SERVANT, Gwenaëlle Le BOURDON, Thierry BUFFETEAU, « Comprendre la spectroscopie infrarouge: principes et mise en œuvre », Université Bordeaux 1 Institut des sciences moléculaires Groupe de spectroscopie moléculaire,

(2011).

[4] Anne Perrin Martine Souques, « Champs électromagnétiques, environnement et santé »Springer-Verlag France, (2010).

[5] BERTRAND .D, DUFOUR. E, « La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques », Paris : Lavoisier, (2006).

[6] FATELA. L, « Utilisation de la spectroscopie proche infrarouge comme un outil pat pour la quantification de substances en solution »,(2012). [en ligne] disponible sur URL : https://dumas.ccsd.cnrs.fr/dumas-00764264/document(consulte le :07 /03/2018).

[7] Croizer .M, « Applicateurs destinés aux études d'effets biologiques des ondes électromagnétiques sub-nanosecondes », Thèse de doctorat, Université de Limoges ,2015.

[8] Michael Hollas. J, « Spectroscopie .cours et exercice », paris, (1998).

[9] AISSOU .S, GUESSABI. N « Étude expérimentale et théorique des propriétés

Structurales, électroniques et vibrationnelles du DL-Histidine », Mémoire de Master, Université de Médéa, (2018).

[10]Dominique Bertrand .Eric Dufour coordonnateurs, « La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques », paris, (1992).

[11] GHORZI. W, « Elaboration d'un réseau de polymère acrylique par photo polymérisation UV : caractérisation par spectroscopie infrarouge, et suivi de la cinétique de gonflement dans des solvants », Mémoire de Master, Université de Tlemcen, (2014).

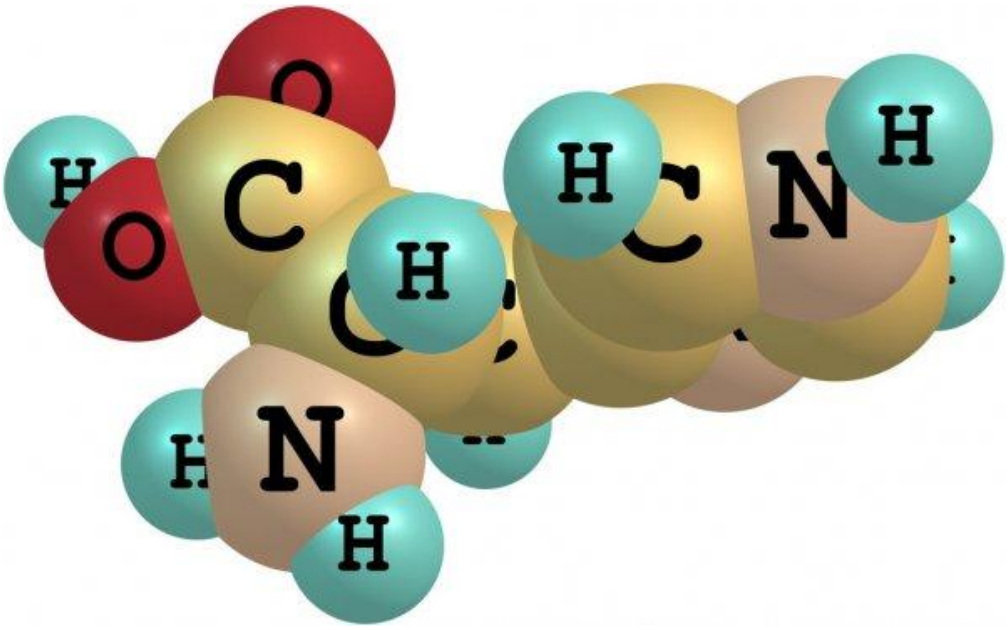
[12] YOUNSIOUI .M, ZEMOURI .D, « Etude de l'adsorption du Nikel divalent sur le chitosane, optimisation par plan d'expérience », Mémoire de Master, Université de Bejaia, (2019).

[13] ZINET. I, « Caractérisation du minerai de Phosphate par les Méthodes Physico-Chimique », Université de Oum El Bouaghi, (2013).

[14] BOUKHARI. A, « Spectroscopie : Rappels de cours, exercices et problèmes corrigés », Université de Annaba, (1999).

CHAPITRE III

TECHNIQUES EXPÉRIMENTALES



CHAPITRE III : TECHNIQUES EXPÉRIMENTALES

III.1 Introduction :

Le but de ce chapitre est d'expliquer les différentes procédures expérimentales utilisées dans cette étude, et de présenter une description de la technique qui repose principalement sur la spectroscopie infrarouge ainsi que la méthode de la préparation de l'échantillon.

III.2 Spectroscopie IR :

III.2.1. Sspectrometer à transformée de Fourier (FT-IR) :

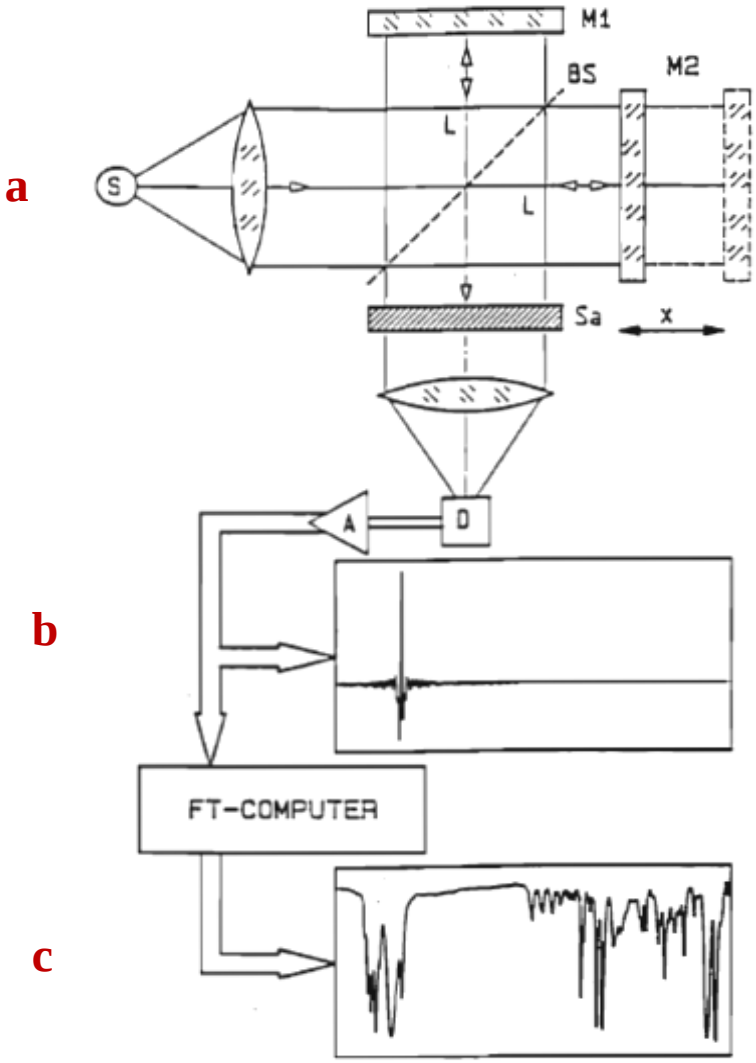
Afin de faire l'enregistrement du spectre d'absorption infrarouge (IR), nous utilisons le spectromètre à transformée de Fourier (Figure III.1), ce spectromètre est utilisé pour l'enregistrement des spectres IR pour des échantillons solides **[1]**. Il est basé sur l'utilisation du l'interféromètre de Michelson, et se compose des éléments suivants **[2] :**

(a)Schéma d'un interféromètre de Michelson :

- **(S)** source de radiation.
- **(BS)** séparateur de faisceau.
- **(X)** déplacement du miroir.
- **(Sa)** échantillon .
- **(O)**Détecteur.
- **(L)** distance parcourue par le faisceau.
- **(A)** amplificateur.
- **(M1)** miroir fixe.
- **(M2)** miroir mobile

(b) signal enregistré par le détecteur.

(c) Spectre obtenu



Figure(III.1) : Schéma spectromètre à transformée de Fourier,

(a) : Schéma d'un interféromètre de Michelson.

(b) : signal enregistré par le détecteur.

(c) : Spectre obtenu.

III.2.2 Spectromètre utilisé :

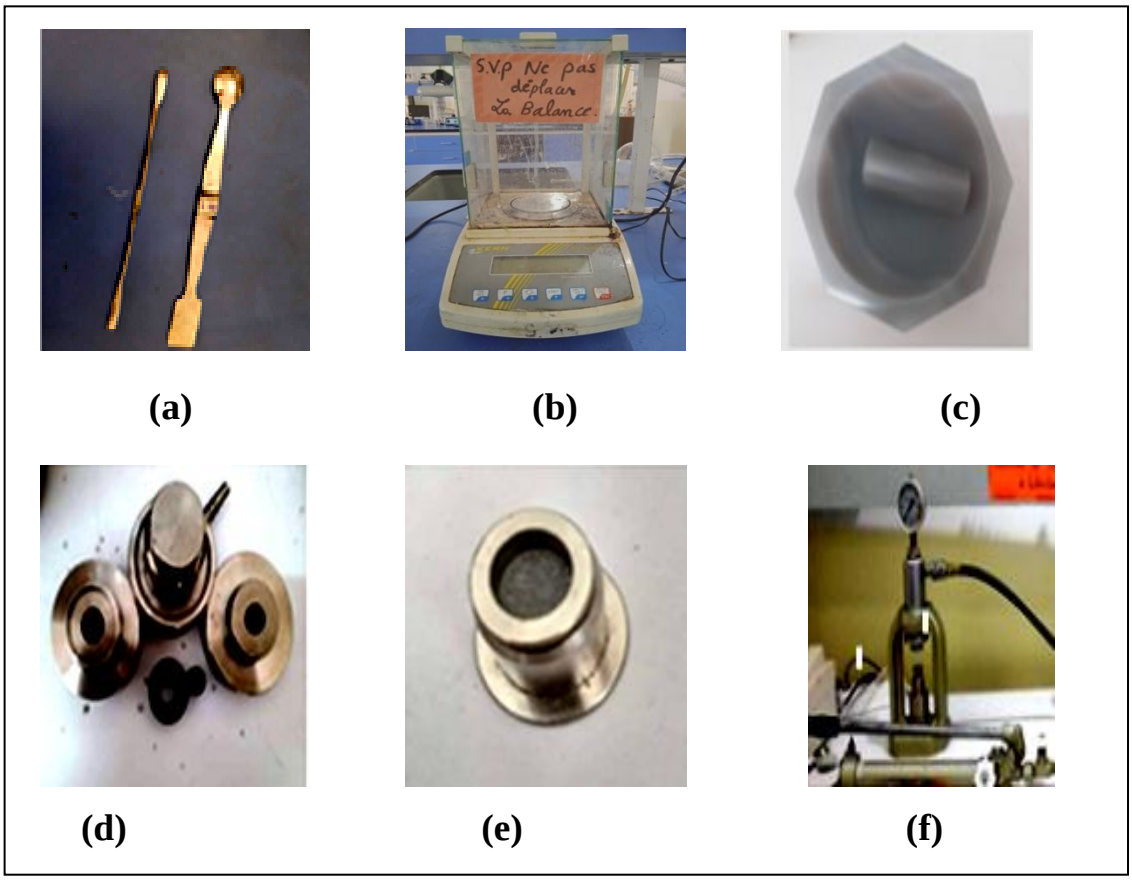
L'experience a été réalisée à l'université de Médéa par un spectrométre de type SHIMADZU- FTIR 8400. (Voir la figure **III.2**).



Figure(III.2) : Image de spectromètre TF- IR utilisé dans notre travail.

III.3 Matériels utilisés

Les outils utilisés pour commencer l'expérience sont les suivants :



Figure(III.3) : Matériels utilisés.

(a) : Spatules

(b) : Balance électronique.

(c) : Mortier et pilon.

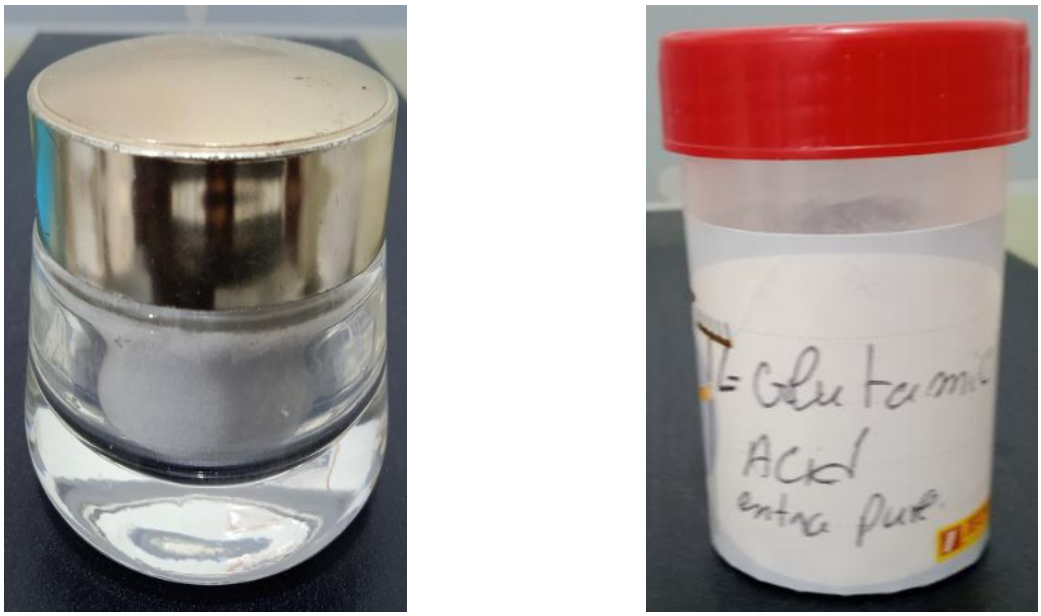
(d) : Moules de pastillage.

(e) : Porte d'échantillon.

(f) : Un manomètre

III.4 Produits utilisés

Les produits que nous avons utilisés dans notre travail expérimental sont montrés dans la figure (III.4).



(a) Bromure de potassium (KBr) **(b)** l'acide glutamique

Figure (III.4):Produits utilisés

- l'acide glutamique($C_5H_9NO_4$) [3], sa masse molaire est 147.13 g/mol [4] .

- le bromure de potassium (KB_r), sa masse molaire est 119.002$\pm$ 0.001 g/mol [Br 67.14%, K 32.86%] **[5].**

III.5. Méthode de préparation

La préparation de l'échantillon est passée par des étapes qui peuvent être résumées comme suit :

Premièrement : A l'aide d'une Balance électronique nous avons pesé une quantité de 0.02 **g** de l'acide glutamique et une quantité de 1.5 **g** de KB r

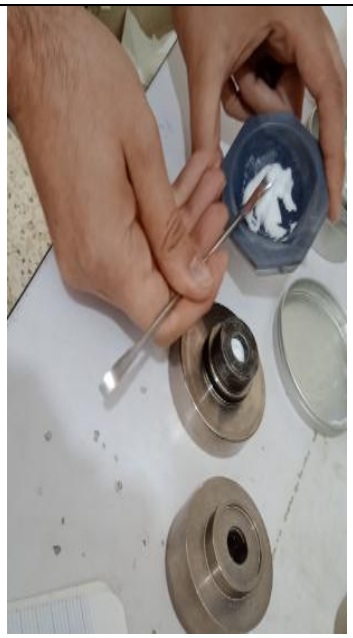
(1% échantillon et 99% KB r).

Le mélange de ces quantités est placé dans un mortier et bien broyé pour avoir un mélange homogène **figure(III.5)**



Figure(III.5) : Méthode de broiement

Deuxièmement : cette étape nous permet de fabriquer la pastille pour effectuer la mesure, le mélange homogène a été placé dans un porte d'échantillon de manomètre, de pression suivi d'une augmentation de la pression à (60kN) figure(III.6).



(1)



(2)



(3)



(4)



(5)



(6)

Figure(III.6) : Préparation de pastille

Finalement : la pastillé a été placé dans le porte-échantillon du spectromètre FT-IR pour enregistrer le spectre IR de l'acide glutamique. La figure **(III.7)** montre cette étape.

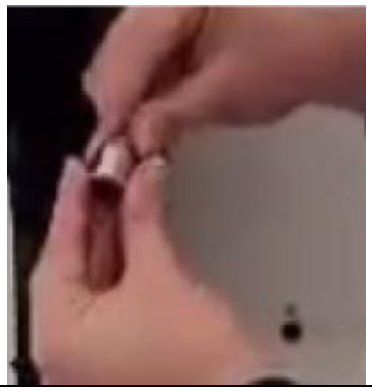
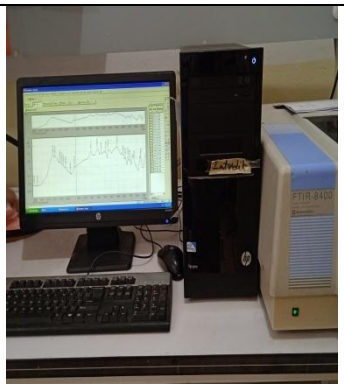
		
(7)	**(8)**	**(9)**

Figure (III.7) : Les étapes suivies pour la mesure du spectre IR

III.6 Conclusion :

Ce chapitre montre les expériences et le protocole expérimental suivis pour enregistrer le spectre IR de l'acide glutamique ainsi que la description du matériel utilisé et son principe de fonctionnement. La technique de la spectroscopie infrarouge montrée dans ce chapitre permet d'obtenir des informations sur les modes de vibrations de la molécule **é**tudiée dans ce travail (voir le chapitre **IV**).

Bibliographies

[1] GHORZI.W, « Elaboration d'un réseau de polymère acrylique par photo polymérisation UV: caractérisation par spectroscopie infrarouge, et suivi de la cinétique de gonflement dans des solvants », Mémoire de master, Université de Tlemcen, (2014).

[2] BOGRAH .A, « Cholesterol sur les structures secondaires des protéines du photo système », Mémoire de master, Université du Québec à Trois-Rivières,

(1998).

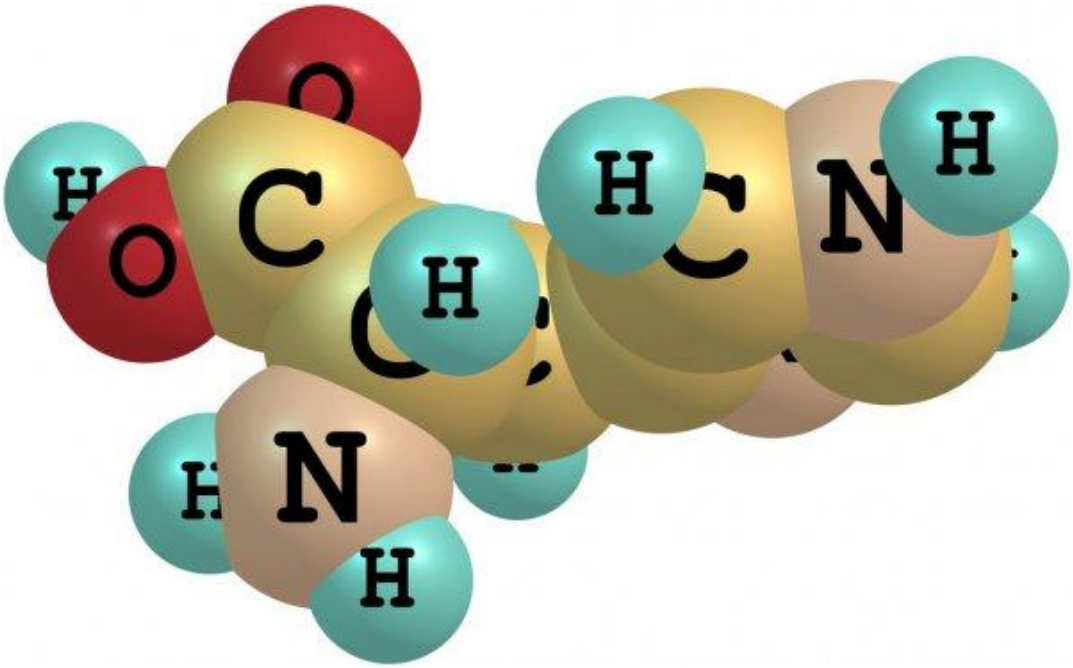
[3] DEPPENWEILER .A, « Le glutamate mono sodique comme exhausteur de gout : confiance ou mefiance ? », Thèse de Doctorat**,** Université de Victor Segalen Bordeaux 2, (2014).

[4]MEKHATRI .D, « Synthèse de Nouveaux Matériaux à porosité Controlée », Thèse de Doctorat, Université d'Oran, (2020).

[5]BENALI. A, YKHELEF. K, « Spectroscopie vibrationnelle et propriétés optiques du D-fructose », Mémoire de master, Université de Médéa, (2020).

CHAPITRE IV

RÉSULTATS ET DISCUSSION



CHAPITRE IV : RÉSULTATS ET DISCUSSION

DÉTAILS DE CALCULS

IV.1 Introduction :

Dans ce chapitre, nous présenterons les différents résultats théoriques basés sur les calculs DFT (la théorie de la fonctionnelle de la densité). Ces résultats sont obtenus par le programme CASTEP **[1]**. Une partie expérimentale est aussi réalisée par la spectroscopie IR afin d'étudier les propriétés, structurales, électroniques, vibrationnelles et mécaniques de l'acide glutamique. L'ensemble de ces résultats sont analysés et comparés dans ce chapitre.

IV.2 Le logiciel CASTEP

Parmi un grand nombre de codes de calculs basés sur la DFT, il existe le code CASTEP **(**Cambridge Serial Total Energy Package**)** qui est considéré comme un programme de simulation commercialisés par Accelrys, développé à l'origine par Payne et al en 1988 [1]. Ce programme est très employé en physique de solide, parce qu' 'il permet le calcul des propriétés physiques. Ce programme utilise des conditions périodiques, des bases d'ondes planes et des pseudos potentiels pour calculer l'énergie totale d'un système **[2,3]**.

IV .3 Propriétés structurales

IV .3 .1 Optimisation géométrique :

C'est la première étape réalisée dans le calcul théorique, elle consiste à trouver la géométrie qui correspond à l'énergie minimale de la molécule pour obtenir une structure énergétique très stable **[2]**.

Paramètres d'entrée :

Les paramètres géométriques initiaux sont indispensables pour le calcul, et ces paramètres peut être générés à partir du chier CIF (Crystallographic Information File) tels que**:**

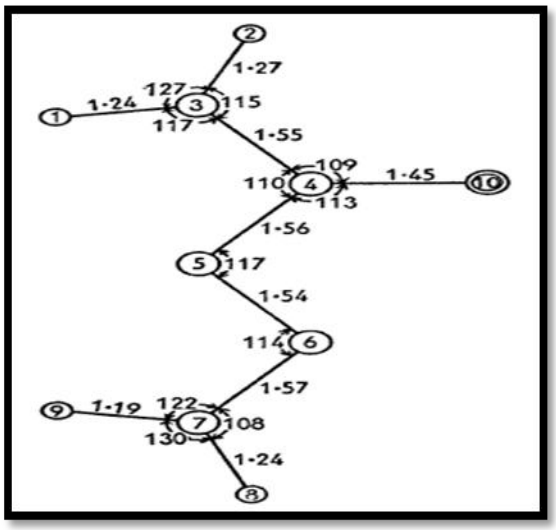
- Le système cristallin, réseau de bravais, groupe d'espace.
- Les paramètres de la maille (**a, b, c, α, β, γ**).
- Les positions des atomes.

Le tableau(IV.1**)** résume les principales données cristallographiques et structurales de la molécule de l'acide glutamique.

Tableau (IV.1): Données cristallographiques de l'acide glutamique.

Molécule	Acide glutamique
Formule chimique	$C_5H_9NO_4$
Masse molaire (g/mol)	147.13
Système	Orthorhombique
Groupe d'espace	P 2_1 2_1 2_1
a (A°)	7.068
b (A°)	10.277
c (A°)	8.755
α=β=γ	90
Z	4
V (A°)3	635.944

La structure moléculaire de la molécule de l'acide glutamique établies par la diffraction des rayons x (DRX) est représentée dans la figure (IV.1)**[4] .**



Figure(IV.1): Structure moléculaire expérimentale resaluée par la DRX [5].

IV.4 Calcul dans l'état solide :

A partir de code CASTEP, nous avons effectué des calculs à l'état solide. On a utilisé l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE). Les critères de convergence sont fixés à: une énergie de 5.10^{-6} eV/atome, une force maximale de 0.01 eV/Å, une contrainte maximale de 0.02 G Pa et un maximum de déplacement de 5.10^{-4}Å .l'énergie de coupure ($cutoff\ énergie$) a été fixée à 380 eV. L'échantillonnage de la ZB était 2×2×2 points.

La maille cristalline de la molécule de l'acide glutamique optimisée à l'état solide par CASTEP est représentée dans la figure(IV.2).

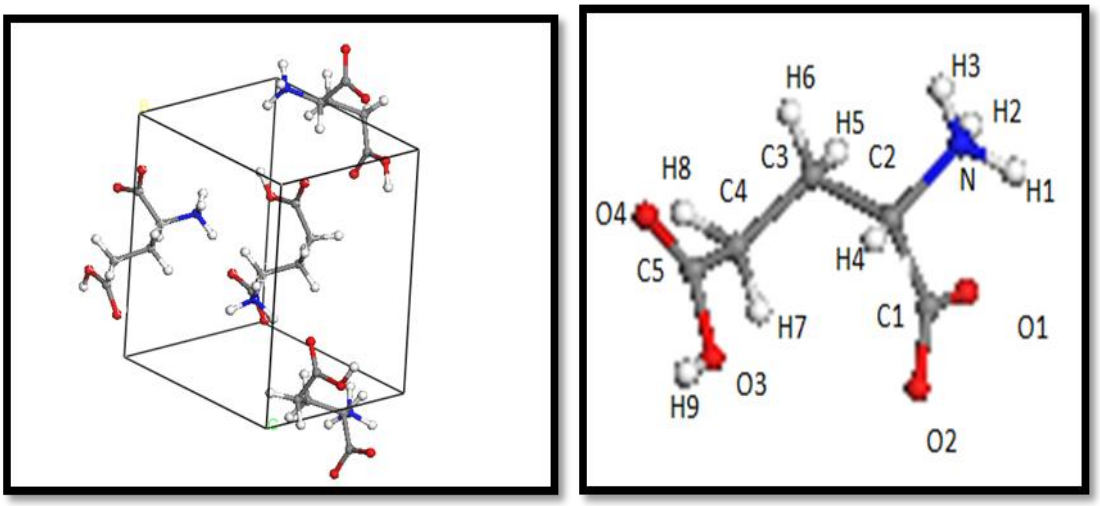


Figure (IV.2): Maille cristalline de l'acide glutamique optimisée a l'état solide par CASTEP.

Le Tableau (IV.2) représente une comparaison entre les paramètres cristallographiques expérimentaux et ceux obtenus par les calculs DFT.

Tableau IV.2: Comparaison entre les paramètres cristallographiques calculés et expérimentaux

Paramètre de maile	Expérimentale	Théorique
a (A°)	7.068	7.053077
b (A°)	10.277	10.248037
c (A°)	8.755	8.784252
α=β=γ	90	90
Volume(V) $(A°)^3$	635.944	634.927460

On remarque à partir de ce tableau qu''il y a un bon accord entres les valeurs expérimentales et celle obtenues théoriquement.

IV.5 Comparaison entre les structures moléculaires expérimentales et calculées

Les tableaux (IV.3**, IV.4, IV.5)** regroupent les résultats de notre calcul DFT concernant les longueurs de liaison, les angles de liaison et angles de torsion, respectivement. Les paramètres géométriques calculés sont comparés avec ceux obtenus expérimentalement.

Tableau (IV.3): Longueurs de liaison (Å) calculées par la DFT en utilisant le code CASTEP.

N°	Distance	Expérimental (A°)	Calculs DFT (état solide)(A°)	Erreur relative %
1	C1- C2	1.526	1.535	0.58
2	C2-C3	1.533	1.531	0.13
3	C3-C4	1.533	1.534	0.06
4	C4-C5	1.499	1.504	0.33
5	C1-O1	1.242	1.260	1.45
6	C1-O2	1.279	1.289	0.81
7	C1-N	2.242	2.458	9.63
8	C2-N	1.494	1.492	0.13
9	C2-O1	2.374	2.402	0.83
10	C2-O2	2.385	2.409	1.01
11	C4-O3	2.266	2.375	4.81
12	C5-O3	1.323	1.433	8.31
13	C5-O4	1.213	1.246	2.72
14	O1-O2	2.235	2.262	1.21
15	O2-O3	3.344	3.398	1.61
16	O3-O4	2.221	2.255	1.53
Erreur relative moyenne %			2.19%	

D'après les résultats montré dans le tableau (**IV.3)**, on peut remarquer que l'accord entre les longueurs de liaison obtenues expérimentalement et celles calculées par la DFT est bon. Nous distinguons trois observations importantes **:**

- Une erreur relative moyenne de (2.19**%)**.
- Une erreur relative maximale est constatée pour la longueur de liaison **C1-N (9.63%)**.
- On observe une erreur relative minimale (accord parfait 0.06 %) pour la liaison **C3-C4**

De la même manière, nous avons effectué une comparaison entre les valeurs théoriques des angles de liaison et des angles de torsion avec celles trouvées par l'expérience à partir de la diffraction.

Tableau(IV.4) : Les angles de liaison (°) calculées expérimentalement.

N°	Angle de liaison (°)	Expérimental (°)	Calculs DFT (état solide)(°)	Erreur relative %
1	**O1-C1-O2**	**125.483**	**125.043**	**0.35**
2	**O1-C1-C2**	**117.777**	**118.14**	**0.31**
3	**O2-C1-C2**	**116.739**	**116.772**	**0.03**
4	**O3-C5-O4**	**122.180**	**122.751**	**0.52**
5	**O4-C5-C4**	**124.018**	**126.101**	**1.72**
6	**N-C2-C1**	**107.952**	**108.579**	**0.61**
7	**N-C2-C3**	**108.466**	**108.442**	**0.02**
8	**C1-C2-C3**	**112.330**	**112.726**	**0.41**
9	**C2-C3-C4**	**114.187**	**115.100**	**0.82**
10	**C3-C4-C5**	**111.888**	**112.66**	**0.72**
11	**C4-C5-O4**	**124.018**	**123.101**	**0.74**
Erreur relative moyenne %	**0.62%**			

Pour les angles de liaison **Tableau (IV.4)**, aussi on remarque que les résultats obtenus expérimentalement et ceux calculés par la DFT sont proches, et on a estimé **:**

- Une erreur relative moyenne de **0,62%.**
- Une erreur relative maximale est constatée pour l'angle de liaison **O4-C5-C4 (1.72%).**

On observe

- Une erreur relative minimale (accord parfait 0.02%) pour l'angle de liaison **N-C2-C3**.

Tableau (IV.5) : Angles de torsion calculés et obtenus expérimentalement

N	Angle de torsion	EXP	Calcule DFT (°)	Erreur relative %
1	O1-C1-C2-N	-50.442	-52.216	3.52
2	O2-C1-C2-C3	-110.480	-111.863	1.25
3	O3-C5-C4-C3	-104.918	-104.573	0.33
4	O4-C5-C4-C3	73.994	74.337	0.46
5	C1-C2-C3-C4	59.192	59.155	0.06
6	C2-C3-C4-C5	68.834	68.085	1.09
7	N-C2-C3-C4	178.432	179.407	0.55
8	N-C2-C1-O2	129.980	127.964	1.55
Erreur relative moyenne%	**1.10%**			

Les angles de torsion calcules sont proches de ceux observés expérimentalement.

- Une erreur relative moyenne de 1.10**%.**
- Une erreur relative maximale de 3.52**%** correspond à l'angle de torsion O1-C1-C2-N.
- Une erreur relative minimale de 0.06 correspond à l'angle de torsion .C1-C2-C3-C4.

IV.6. Les propriétés électroniques :

IV.6.1 Structure des bandes :

La théorie des bandes est un modèle très utile pour décrire le comportement des matériaux (semi-conducteurs, les métaux et les isolants). Il permit de déterminer les énergies des électrons dans un solide **[6]**, les niveaux d'énergie indépendants se rassemblent pour

former des bandes d'énergies. Ils sont séparés par des zones interdites appelées « gap énergétiques ». Ces bandes énergétiques sont généralement représentées sur un diagramme vertical, avec des énergies croissantes **[7].**

On distingue trois bandes énergétiques principales :

- **La bande de valence BV** : à la température T=0 k, elle est complètement remplie d'électrons et se situe en dessous du niveau de Fermi.
- **La bande de conduction B_C:** à la température T=0 k, cette bande est vide d'électrons et se situe au-dessus du niveau de Fermi.
- **La bande interdite (bande de Fermi) :** elle se situe entre le haut de la bande de

Valence et le bas de la bande de conduction. Cette bande est caractérisée par une largeur E_G appelée gap, elle est calculée comme suit :

$$E_g = \varepsilon_c - \varepsilon_v \qquad \text{(IV.1)}$$

ε_c : l'énergie de la B_C

ε_v ; l'énergie de la B_V

A une température plus élevée, la conductivité augment, ce qui conduit à un mouvement thermique des atomes, c'est à dire il y a un déplacement des électrons [8].

Suivant la largeur de la bande interdite (gap) et la position de niveau de Fermi, on peut déterminer la nature et les propriétés des matériaux [7 ,9)].

Le niveau de Fermi peut se trouver dans trois cas :

- si le niveau de Fermi est situé approximativement au milieu de la bande de conduction, le matériau peut être classé comme un conducteur.
- si le niveau de Fermi se situe au milieu de la bande interdite ; entre la bande de valence et la bande de conduction, le matériau est un semi-conducteur et son énergie de gap est inférieur à 5 eV.
- Si le niveau de Fermi est situé au milieu de la bande interdite, et la bande interdite a une largeur beaucoup plus grande que celle des matériaux semi-conducteur, alors le matériau est un semi-conducteur à un gap direct, et son gap est grand ($E_g < 5$ eV) **[8,9].**

La Figure (IV.3) représente les diagrammes des bandes d'énergie de différents matériaux.

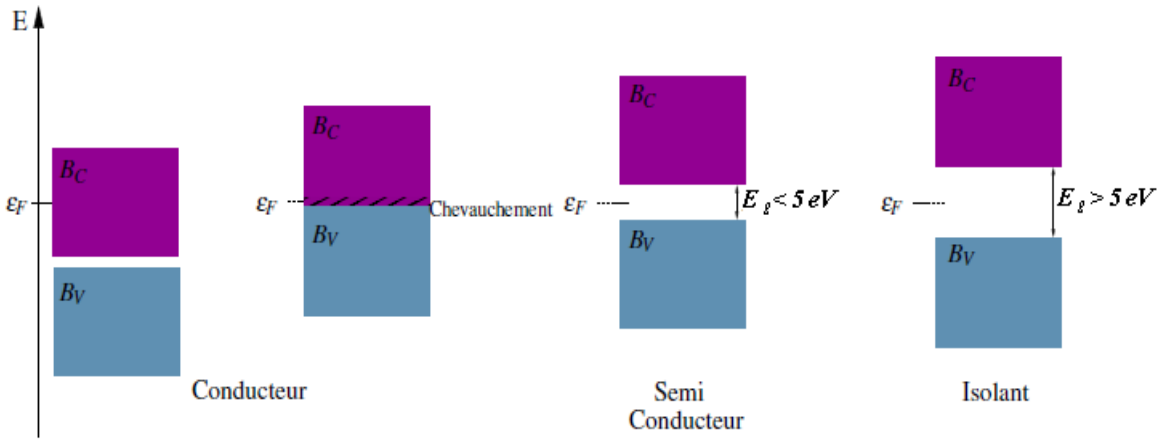
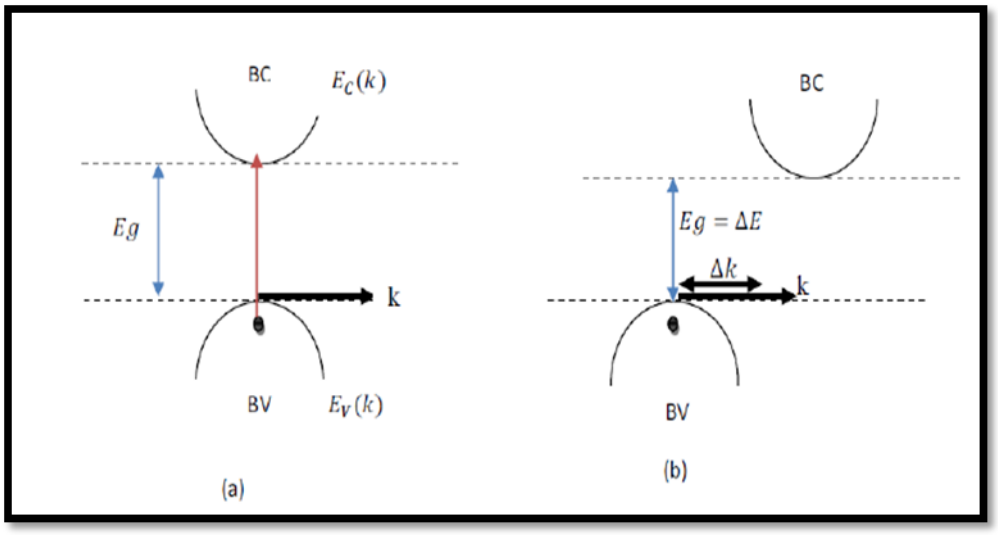


Figure (IV.3) : Diagramme des bandes d'énergie pour un conducteur (à gauche), un semi-conducteur (au centre) et un isolant (à droite). B_C : bande de conduction**,**

B_V **:** bande de valence**,** ε_F **:** niveau de Fermi et E_g**:** gap**.**

Il existe deux types de semi-conducteurs :

- **semi-conducteurs à un gap direct** : si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au même point (même vecteur d'onde $\vec{k}$) voire la figure (IV.4 .**a**) . Une transition électronique entre la bande haute de la bande de valence et le bas de la bande de conduction peut être observée lorsqu'un électron acquière une énergie égale à E_g.
- **semi-conducteurs à un gap indirect** : si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde $\vec{k}$, voire la figure(IV.4**b**) **[10].**

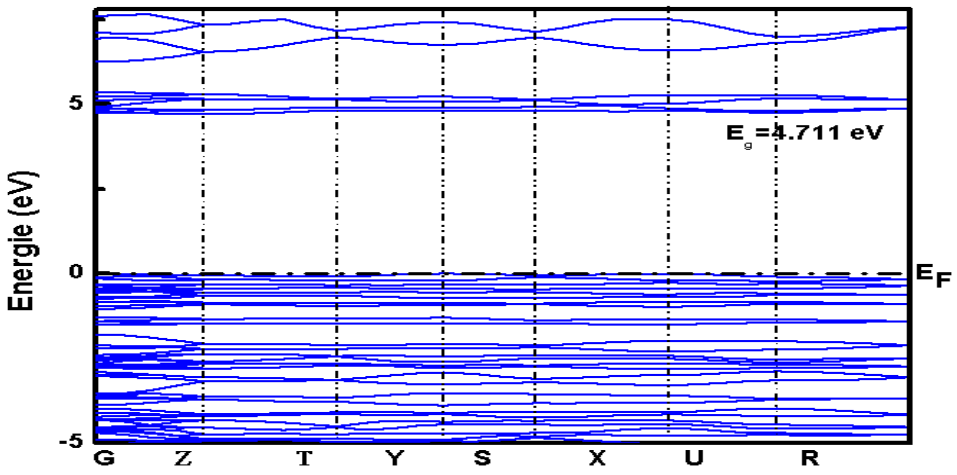


Figure(IV.4) : (a) semi-conducteur à gap direct, (b) semi-conducteur à gap indirect

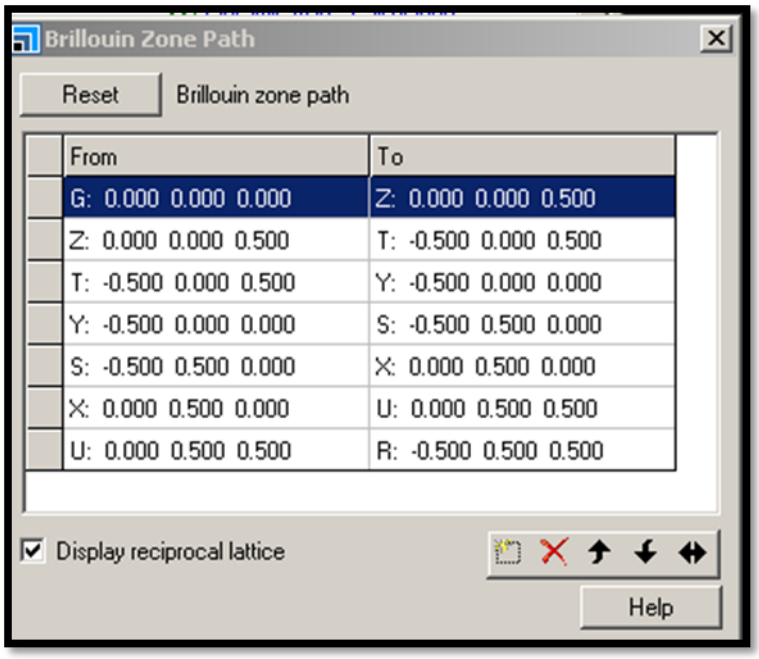
IV.6.2 Structure des bandes électroniques de la molécule de l'acide glutamique

La structure des bandes électroniques de l'acide glutamique est représentée dans la figure(IV.5). Cette figure a été réalisée par les calculs DFT pour obtenir l'énergie de gap de cette molécule. La valeur calculée est 4.711 eV, les points de haute symétrie de la première zone de Brillouin (G, Z, T, Y, S, X, U, R) sont définis dans la figure (**IV.6)**.

La structure de la molécule de l'acide glutamique montre les points de hautes symétries, ils sont représentés dans la figure **(V.7).**



Figure(IV.5) : Structure de bandes électroniques pour l'acide glutamique.



Figure(IV.6): Les points des hautes symétries qui obtenir par CASTPE.

Le point **G** situé dans le centre de la première zone de Brillouin : a les coordonnées (0.0.0).

D'après la valeur de l'énergie de gap (4.711 eV), on peut conclure que le cristal de l'acide glutamique se comporte comme un semi-conducteur à gap direct comme montré dans la **figure(IV.5).**

IV.6.3 Première zone de Brillouin

La première zone de Brillouin est définie comme une maille primitive dans l'espace réciproque. Dans cette zone les états propres sont caractérisés par un vecteur d'onde $\vec{k}$ dans la maille primitive.

La première zone de Brillouin du cristal de l'acide glutamique est montrée sur la **figure(IV.7)**.

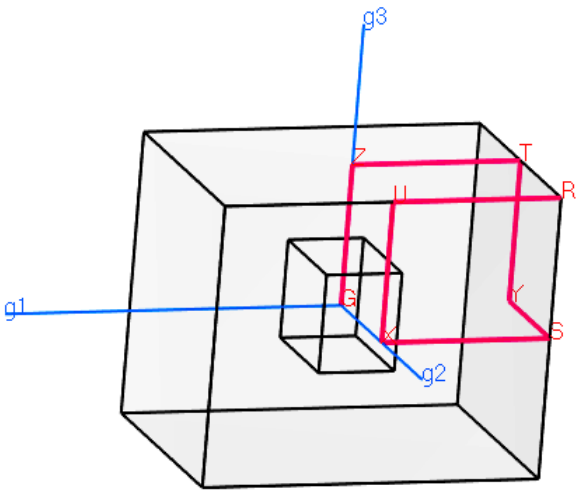


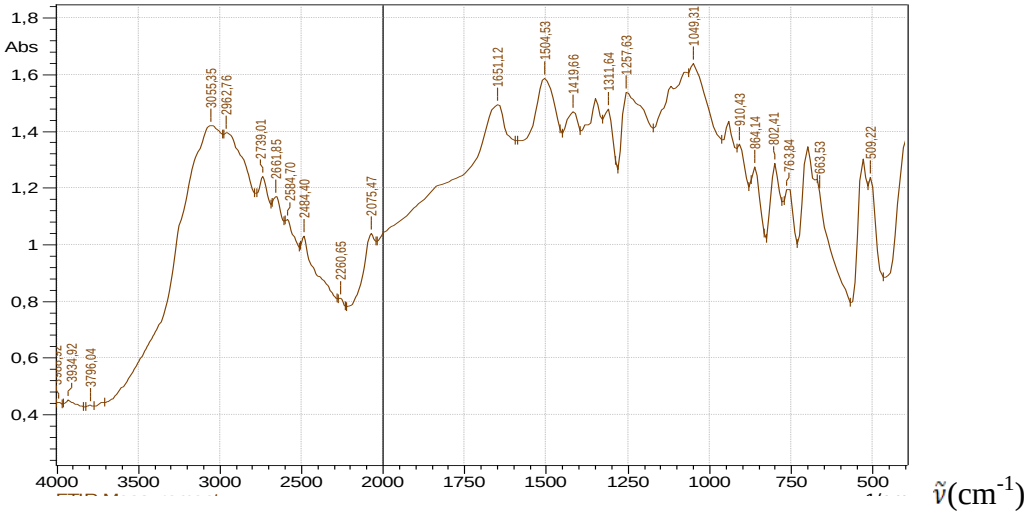
Figure (IV.7): La première zone de Brillouin pour un réseau orthorhombique de l'acide glutamique.

La structure de bande a été calculée selon des lignes spéciales reliant les points de haute symétrie (G, Z, T, Y, S, X, U, R) dans la première zone de Brillouin **[11].**

IV.7 Propriétés vibrationnelles de l'acide

IV.7.1 Spectre IR expérimental

Le spectre IR qui correspond à la molécule de l'acide glutamique a été enregistré dans la température ambiante dans la région 400-4000 cm^{-1} par le spectromètre de type (FTIR-8400) est représenté dans la figure (IV.8).



Figure(IV.8): Spectre IR expérimental de l'acide glutamique

IV.7.2 Attribution des modes de vibration

La molécule de l'acide glutamique possède 19 atomes, ce qui correspond à 3N -6 = 51 degrés de liberté, et donc la molécule possède aussi 51 modes propres de vibration.

Le tableau (IV.6) regroupe les fréquences observées expérimentalement ainsi que l'attribution de chaque fréquence un mouvement de la molécule.

Tableau. (IV.6). Comparaison entre les fréquences calculées et expérimentales avec leurs attributions.

N°	Fréquences Expérimentales (cm^{-1})	Fréquences Expérimentales (cm^{-1}) [12]	Attribution des modes de vibration[12]
1	3055.35	3060	d'élongation (ν) (N-H)
2	2962.76	2970	d'élongation (ν_{as}) CH_2
3	2739.01	2748	d'élongation (ν) (C-H)
4	2661.85	2660	d'élongation (ν) (C-H)
5	1651.12	1652	d'élongation (ν_{as}) (C=O)
6	1504.53	1500	déformation (δ_s) NH^{+3}
7	1419.66	1420	d'élongation (ν_s) COO^-
8	1311.64	1318	déformation (γ) CH_2
9	1257.63	1265	déformation (γ) CH_2
10	1049.31	1062	déformation (γ) NH^{+3}
11	910.43	917	déformation (γ) CH_2
12	864.14	871	d'élongation (ν) (C-C)
13	802.41	812	déformation (δ) OH
13	763.84	763	déformation (δ) OH
14	663.53	673	déformation (γ) COO^-
15	509.22	506	déformation (δ) COOH

(ν) : élongation, **(ν_{as})** : élongation asymétrie

(δ) : déformation dans le plan **(ν_s) :** élongation symétrique

(γ) : déformation hors du plan

Apres l'attribution de toutes les bandes observées dans le spectre, nous allons mentionner les types de bandes indiqués dans le Tableau. (IV.6)

- ***Vibration N-H***

La molécule de l'acide glutamique possède deux types de vibration **d'élongation N-H**:

-Le premier type est appelé vibration d'élongation (ν): cette vibration est composée de deux modes : des vibrations symétriques et asymétriques. Dans cette étude, on observe les vibrations d'élongation (ν NH) à **3055 cm^{-1}**.

-Le deuxième type est appelé vibrations de déformation, cette vibration est composée de deux types :

Déformation dans le plan (δ NH). Cette vibration qui est liée dans notre cas à la fréquence observée à **1504.53 cm^{-1}**.

Déformation hors du plan (γ NH), elle correspond à la fréquence observée à **1049 cm^{-1}**

- ***Vibration (C-H)***

La liaison C-H est caractérisée par deux types de vibration

- vibration d'élongation dans le plan (δ CH) appartient à une gamme située entre 2962.76 et 2661 **cm^{-1}**

-vibrations de déformation hors du plan (γ CH)qui sont observées aux fréquences (1311.64**,** 1257.63 **et** 910.43 **cm^{-1}**).

- ***Vibration (C=O)***

Les vibrations d'élongation de la liaison C=O sont observées expérimentalement à 1651.12 **cm^{-1}** pour une vibration asymétrique **(ν_{as})**, et à 1419.66 **cm^{-1}** pour un vibration symétrique **(ν_{s}).**

- ***Vibration (C-C)***

- Dans la **figure(IV.8), la** vibration d'élongation (ν C-C) est liée à la fréquence observée à 864.14 **cm^{-1}**.

- ***Vibration (OH)***

Les vibrations de déformation (δ) de la liaison O-H sont observées à 802.41, et 763.84 **cm^{-1}.**

- ***Vibration (COOH)***

- Vibration de déformation (δ COOH) qui est lié à la fréquence observée à 509.22**cm^{-1}.**

-Vibration d'élongation (ν C-C) qui est lié à la fréquence observée à 864.14 **cm^{1}**.

IV.8 Les propriétés mécaniques :

L'objectif de cette partie est de comprendre le comportement du cristal de l'acide glutamique en variant la pression hydrostatique. Donc, l'impact de la pression appliquée sur les forces de liaison entre les atomes sera étudié **[8]**. Cette étude est importante car elle nous permet d'accéder aux propriétés mécaniques du cristal étudié.

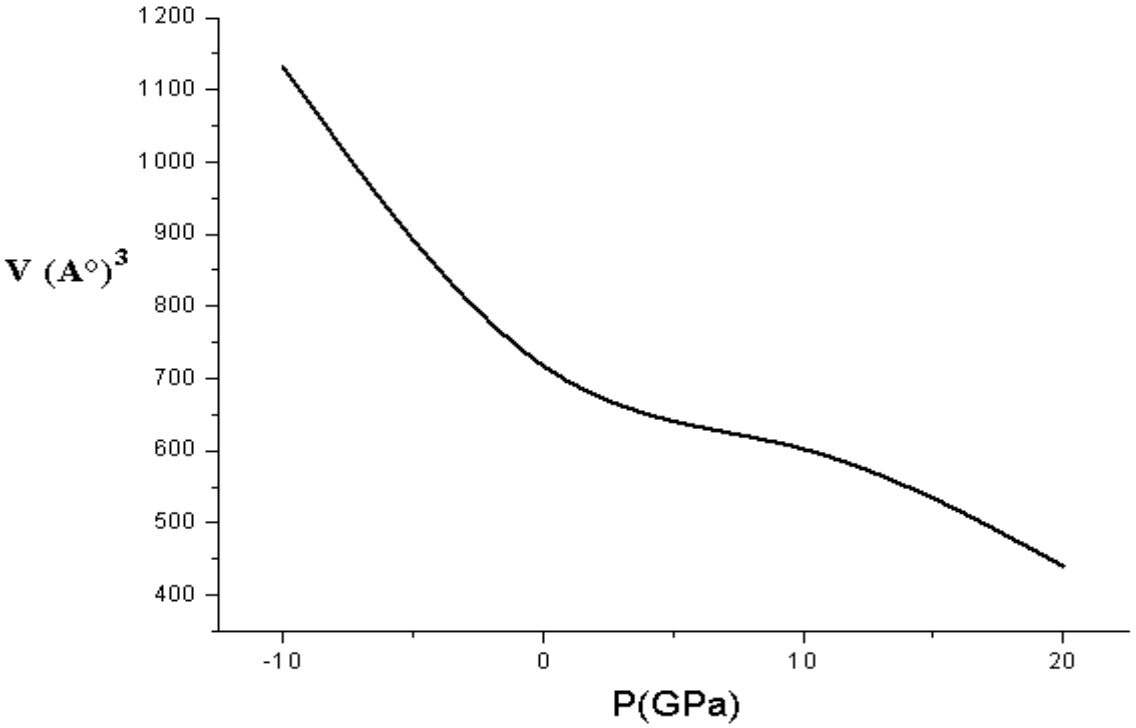
IV.8.1 L'effet de la pression hydrostatique sur les paramètres structuraux

Afin de savoir comment se comporte les paramètres du réseau sous l'effet de la pression hydrostatique sur le cristal de l'acide glutamique, on a calculé les paramètres cristallographiques a, b et c pour chaque valeur de pression hydrostatique. Ces valeurs variant de -10 à 20 GPa (avec un pas =10 GPa). Le volume de la maille calculé en fonction de la pression est représenté dans le **Tableau. (IV.7).**

Tableau. (IV.7): Effet de la pression sur les paramètres de la maille

Pression (GPa)	***a (A°)***	***b (A°)***	***c (A°)***	***Volume $(A°)^3$***
-10	8.120	13.124	10.661	1130.781
00	7.053077	10.248037	8.784252	634.927
10	7.0552	10.2542	8.7730	634.686
20	5.434	9.966	8.130	440.282

Basé sur les résultats de nos calculs. La variation du volume en fonction de la pression est représentée dans la **Figure (IV.9).**



Figure(IV.9) : La variation de volume en fonction de la pression pour l'acide glutamique.

D'après la figure **(IV.9)** ; lorsque la pression augmente, le volume de la maille diminue, il y a donc une relation inversement proportionnelles entre ces deux paramètres (voir la relation).

$$PV=k \qquad \text{(IV.2)}$$

$$P = \frac{1}{V} \qquad \text{(IV.3)}$$

k : représente une constante.

Il est remarquable qu'il existe une relation inversement proportionnelle entre le volume et la pression, c'est –à-dire que les distances intermoléculaires diminuent en raison de la pression appliquée **[13]**.

IV.9 Conclusion

Ce chapitre présente une étude théorique et expérimentale des propriétés structurelles, électroniques, vibrationnelles et mécaniques de l'acide glutamique.

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons présenté les résultats de l'optimisation géométrique pour le cristal de l'acide glutamique. Les paramètres géométriques calculés ont été comparés avec les résultats expérimentaux. Nous avons remarqué qu''il y a un bon accord pour les longueurs de liaison (**2.19%**), les angles (**0.62%**) et les angles de torsion (**1.10%**).

Dans la deuxième partie, les propriétés électroniques de l'acide glutamique ont été étudiées théoriquement. D'après les calculs réalisés par CASTEP, un gap énergétique de 4.711eV est obtenu. Ce résultat montre que le cristal est un semi-conducteur.

Dans la troisième partie, les propriétés vibrationnelles ont été étudiées expérimentalement par la spectroscopie IR. Les vibrations de déformation δ OH sont attribuées aux bandes observées, à 802.41 et 763.84 cm^{-1}**.**

Dans la quatrième partie, les propriétés mécaniques ont été étudiées théoriquement, nous avons étudié l'effet du la pression hydrostatique sur le volume.

Bibliographies

[1] STEWART J. CLARK, MATTHEW D. SEGALL, CHRIS J. PICKARD, PHIL J. HASNIPM, MATT I. J. PROBERT, KEITH REFSON AND MIKE C. PAYNE, Z.KRISTALLOGR. 220 (2005) 567.

[2] MISSOUM.R, « Etude Ab initio des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés de Zintl Ba2P7X (X = Cl;Br;I) », Thèse de doctorat, Université de Setif, (2020).

[3] SAOUDI. A, « Étude des Propriétés Structurales, Élastiques, Électroniques, Optiques et Thermodynamiques des Composés CaSrTt(Tt = Si, Ge, Sn et Pb). », Thèse de doctorat, Université de Setif, (2014).

[4] Fleck.M , Petrosyan A.M, « Salts of Amino Acids, Crystallization, Structure and Properties », University of Viennas,pringre International Publishing

Switzerland,(2014).

[5] SAKUTARO .HIROKAWA « A New Modification of l –Glutamic Acide and its Crystal Structure **»** , Osaka University ,(1955).

[6] BERBER. M, **«** Etude des nanostructures lasers à base de nitrures

D'antimoniures GaNSb/AlGaIn NSb **»,** Thèse de doctorat, Université de Sidi Bel Abbes, (2014).

[7] SAEDDINE .S, « Etude des propriétés structurales et électroniques du

Composé KAlSe2 », Mémoire de master, *Université de* M'SILA, (2017).

[8] SALAME .B, « Mesure de Charges dans les Matériaux Semi-conducteurs et les Métaux avec une Méthode Élasto-électrique », Thèse de doctorat, Université de Paris, (2015).

[9] ABDERRAHMANE.L, SAOUDI .F Z, « Propriétés électroniques et analyse vibrationnelle de l'acide benzoïque », Mémoire de master, Université de Médéa, (2020).

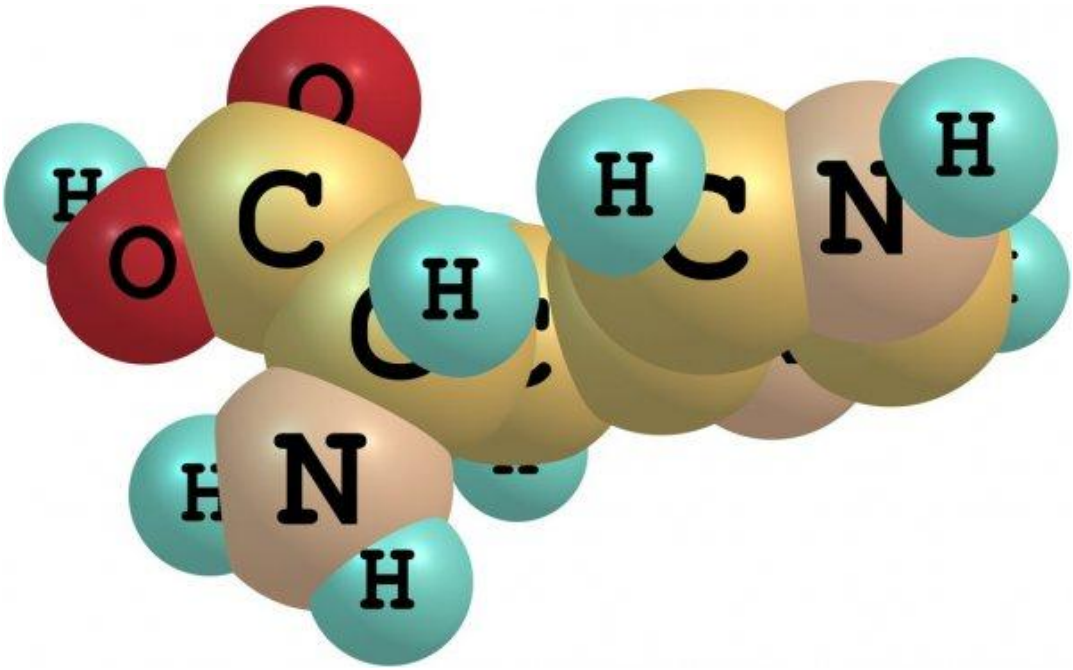
[10] MECHAI .F, « Etude et simulation des structures photovoltaïques à base de chalcogénures de métaux de transition MX2 (M = W, Mo; X = S, Se) », Mémoire de master, Université de Tizi-Ouzou, (2016).

[11] BELOUASSAA.S « Origine du ferromagnétisme et de demi-métallicité des composés binaires AN (A = Ca, Sr) dans la phase rock-salt: calculs ab-initio », Mémoire de master, Université de Médéa, (2020).

[12] R. S. KRISHNAN, V. N. SA NKARANARAYANAN, « Ram and infrared spectra of amino acide **»,** Indian Institute of Science, *973.*

[13] https:// learnchemisty 12.com. document (consulte le :25 /06/2021).

CONCLUSION GÉNÉRALE



Conclusion générale

Ce travail a été réalisé pour étudier les propriétés structurelles, électronique, vibrationnelles et mécaniques de la molécule de l'acide glutamique. Les principales conclusions peuvent être résumées comme suit :

- En ce qui concerne les propriétés structurelles : nous avons commencé par une optimisation géométrique, il est observé qu'il existe un bon accord entre les paramètres de maille calculés et les paramètres observée par la diffraction du rayon X.
- Il y a aussi un bon accord pour les distances, les angles et les angles de torsion calculés et observés expérimentalement. Une erreur relative maximale est constatée pour la longueur de liaison **C1-N (9.63%)**. Une erreur relative minimale (accord parfait 0.02%) pour l'angle liaison **N-C2-C3**. Une erreur relative minimal de (0.06 **%**) correspond à l'angles de torsion C1-C2-C3-C4.
- Pour les propriétés électroniques : la structure de bande a été calculée selon des lignes spéciales reliant les points de haute symétrie (G, Z ,T,Y,S,X,U,R) dans la première zone de Brillouin. La structure de bandes montre que le cristal étudié est un semi-conducteur car il possède un gap de 4.771eV.
- En ce qui concerne les propriétés vibrationnelles : nous avons conclu qu''il existe deux types de vibrations :.
- Le première est appelée vibration d'élongation et le second type est appelé vibration de déformation. La liaison C-H qui est caractérisée par deux types de vibration
- Par exemple, les vibrations d'élongation dans le plan (δ CH) appartient à une gamme située entre 2962.76 et 2661 **cm^{-1}**
- Les vibrations de déformation hors du plan γ CH qui sont observées pour les fréquences 1311.64**,** 1257.63 **et** 910.43 **cm^{-1}).**
- Les vibrations d'élongation de la liaison C=O sont observées expérimentalement à 1651.12 **cm^{-1}** pour une vibration asymétrique **(ν_{as}),** et à 1419.66 **cm^{-1}** pour une vibration symétrique **(ν_{s}).**

- En ce qui concerne les propriétés mécaniques : nous avons étudié l'effet de la pression sur le volume de la maille, nous avons conclu qu''il existe une relation inversement proportionnelle entre eux. c'est –à-dire lorsque nous augmentons la valeur de la pression, le volume de la maille diminue. Donc la pression influe sur les paramètres des mailles.