

2. Exploitation des spectres : Application au dosage d'une espèce chimique par spectrophotométrie.

La loi de Beer-Lambert s'écrit : $A = kC$ ou $A = \epsilon \cdot c \cdot l$ avec ϵ : coefficient d'extinction molaire est exprimé en $L \cdot mol^{-1} \cdot cm^{-1}$
 Si l'on souhaite déterminer la concentration d'une solution colorée par spectrophotométrie, on choisit comme longueur d'onde, celle correspondant à l'absorption maximale. Elle est notée λ_{max} .

En effet, l'absorbance dépendant de la concentration selon la loi de Beer-Lambert, on a intérêt à régler le spectrophotomètre sur λ_{max} afin d'avoir la plus grande plage de variation possible de l'absorbance. Des valeurs de concentrations différentes seront ainsi plus facilement discernables.

III. Spectroscopie U.V.-Visible

1. Les rayonnements U.V.

La région ultraviolette du spectre s'étend de 10 à 400 nm.

Toutefois, les appareils d'analyse ne fonctionnent que pour des longueurs d'onde comprises entre [190 nm-400 nm].

2. Principe de la spectroscopie U.V.

L'absorption des radiations U.V. par une molécule entraîne des transitions électroniques.

Le retour de l'état excité à l'état fondamental a lieu avec une rémission de l'énergie absorbée.

Les groupements responsables de l'absorption sont appelés « groupements chromophores »

En spectroscopie U.V. les groupements qui absorbent ces radiations sont des groupements qui possèdent des doubles liaisons :

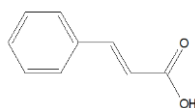
- Les alcènes : C=C
- Les amides : -CO-NH₂
- Le groupement nitro : -NO₂
- Les groupements carbonyles :
 - Aldéhyde : -CHO
 - Cétone : -CO-
- Le groupement carboxylique : -COOH

Remarque : les molécules organiques qui absorbent dans l'U.V. émettent dans une couleur complémentaire qui se situe également dans l'U.V. C'est pour cela qu'elles sont généralement transparentes.

3. Exploitation d'un spectre U.V.

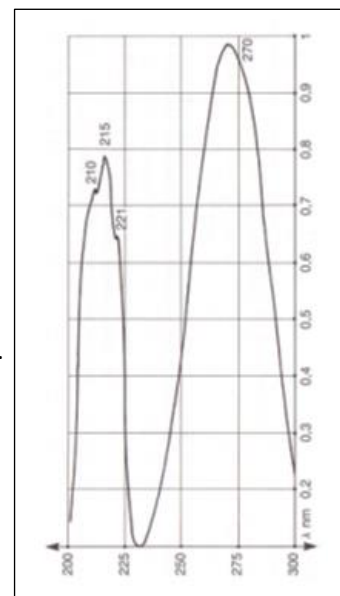
Le spectre de l'acide phényl-3-propénoïque dilué dans l'éthanol est fourni ci-dessous.

Sa formule est :



On souhaite effectuer un dosage par spectrophotométrie afin de déterminer sa concentration.

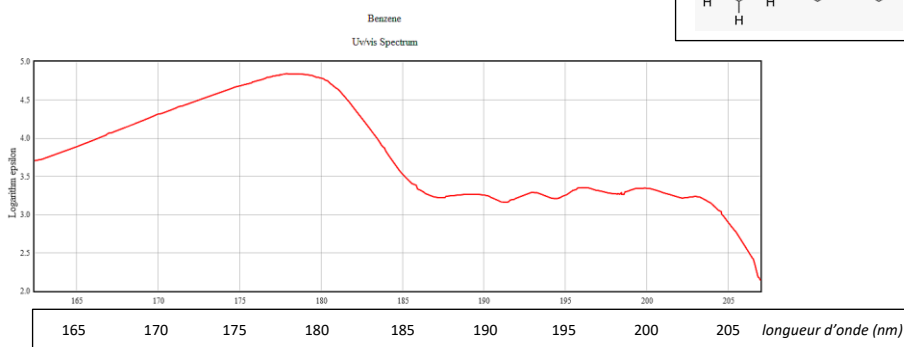
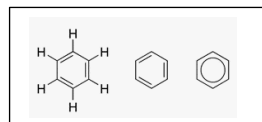
Source : Chavanne, Chimie organique expérimentale Belin.



Questions :

- a. A quelle longueur d'onde doit-on régler le spectrophotomètre ?
- b. Identifier les groupements susceptibles d'absorber les rayonnements U.V.
- c. Cette molécule possède-t-elle des liaisons conjuguées ?

4. Analyse d'un spectre U.V. Le cas du benzène C₆H₆



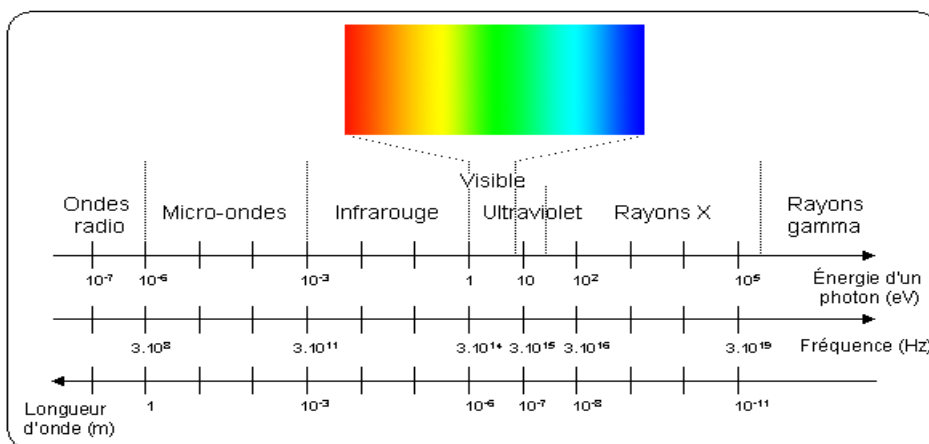
Comparer le spectre U.V. du benzène avec celui de l'acide phényl-3-propénoïque et interpréter.

Question : Comparer le spectre U.V. du benzène avec celui de l'acide phényl-3-propénoïque et interpréter.

IV. Spectroscopie I.R.

Vidéo : <https://www.youtube.com/watch?v=swvc0QL5RQ> (Spectroscopie – Maison de la Chimie)

1. Domaines d'étude de la spectroscopie I.R.



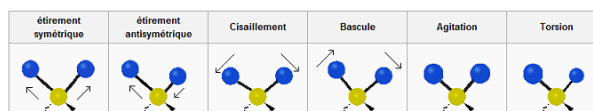
Question : Calculer l'énergie apportée par un photon de longueur d'onde 5,00 µm.

Données :

Célérité de la lumière dans le vide $c = 3,00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$ Constante de Planck $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ $1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$

I. La spectroscopie I.R.

1. Absorption dans l'I.R. et vibrations des liaisons covalentes.



La spectroscopie I.R. est une méthode utilisée pour déterminer les groupes fonctionnels présents dans une molécule.

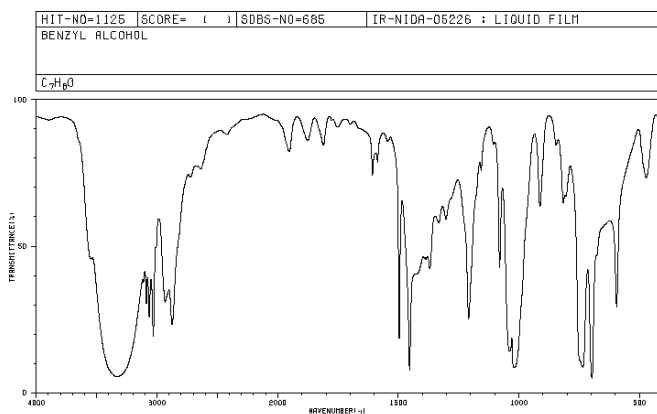
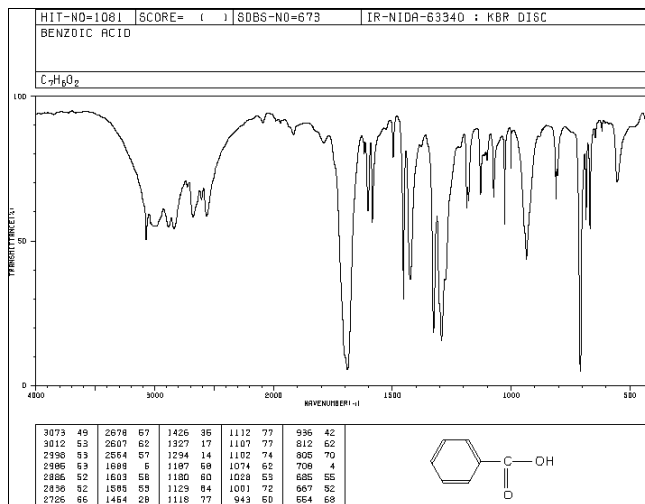
Liaison	Groupe d'atomes caractéristique	Fonction ou famille	Nombre d'onde (cm ⁻¹)	Intensité	
O – H (libre)	Hydroxyle C-OH	Alcool	3 580 – 3 670	Forte	et fine (en phase gazeuse)
O – H (liée par liaison H)	Hydroxyle C-OH	Alcool	3 200 – 3 400	Forte	et large (en phase liquide)
	Carboxyle -COOH	Acide carboxylique	3 200 – 3 400	Forte	
N – H	C – NH –	Amine, amide	3 100 – 3 500	Moyenne	
C – H	Cycle benzénique - C ₆ H ₅	Composés aromatiques	3 030 – 3 080	Moyenne	
		Alcane	2 810 – 3 000	Forte	
		Alcène	3 000 – 3 100	Moyenne	
C = O	Carbonyle	Aldéhyde, cétone	1 650 – 1 730	Forte	
	Carboxyle	Acide	1 680 – 1 710	Forte	
	CO-O-C	Ester	1 700 – 1 740	Forte	
	CO-N	Amide	1 650 – 1 700	Forte	
C = C		Alcène	1 625 – 1 680	Moyenne	
C – O		Alcool, acide, ester	1 050 – 1 450	Forte	
C – C		Alcane	1 000 – 1 250	Forte	
C – Cl		Chloroalcane	700 – 800	Forte	
C – Br		Bromoalcane	600 – 750	Forte	
C – I		Iodoalcane	500 – 600	Forte	

2. Exemples de spectres I.R.

Spectres I.R. de l'acide benzoïque, de l'alcool benzylique et du benzaldéhyde.

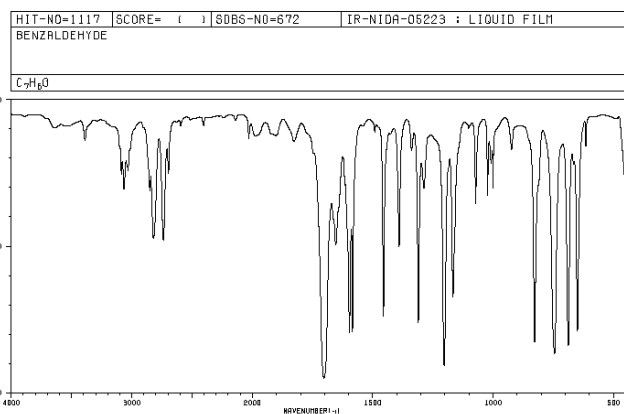
Questions : Observer les spectres ci-dessous et répondez aux questions suivantes.

- Quelles sont les grandeurs portées chaque axe ?
- Qu'indique le tableau de données ?
- Retrouver des points communs et les différences dans les spectres ci-dessous.
-



3326	6	1962	79	1497	18	1090	41	806	64
3088	29	1878	84	1454	7	1039	13	736	8
3065	24	1811	61	1370	41	1018	8	696	4
3031	18	1607	72	1332	66	913	60	696	27
2932	29	1593	79	1303	57	846	81	473	70
2875	22	1587	77	1209	73	817	62		
2419	84	1644	81	1157	72	812	64		

OCc1ccccc1



3086	72	1981	84	1697	20	1204	8	826	16
3065	86	1918	84	1584	20	1169	31	746	13
3031	72	1809	84	1466	25	1073	62	666	16
2860	86	1901	84	1391	47	1023	64	667	74
2820	50	1828	81	1339	79	1008	74	650	20
2736	90	1783	4	1311	23	1001	65	615	81
2696	72	1654	40	1288	68	924	79	467	72

O=Cc1ccccc1