

# LC09 - Caractérisations par spectroscopie en synthèse organique (Lycée)

May 13, 2019

## Contents

<b>1</b>	<b>Spectroscopie UV-visible</b>	<b>3</b>
1.1	Le spectre UV-visible . . . . .	3
1.2	Couleur d'une solution : . . . . .	4
1.3	Expérience identification du colorant dans les bombons . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Spectroscopie infrarouge</b>	<b>5</b>
2.1	Le Spectre IR . . . . .	6
2.2	Expérience synthèse de l'ester de poire . . . . .	6
2.3	Liaisons H . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Spectroscopie de résonance magnétique nucléaire RMN</b>	<b>8</b>
3.1	Déplacement chimique . . . . .	8
3.2	Notion de déblindage . . . . .	9
3.3	Notion de protons équivalents . . . . .	9
3.4	Multiplicité et nombre de voisins . . . . .	10
3.5	Intégration . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Annexes :</b>	<b>13</b>
4.1	Mécanisme . . . . .	13
4.2	Specamp . . . . .	13
4.3	spectres IR . . . . .	13
4.4	RMN . . . . .	13
4.5	RMN interprétation . . . . .	13
4.6	Quelques questions . . . . .	14
4.7	(Loi de Beer Lambert) . . . . .	18

## Bulletin officiel :

- **UV-Visible :**

- lien entre spectre et couleur perçue.
- Mettre en oeuvre une méthode expérimentale pour caractériser une espèce colorée.

- **IR :**

- Identifier des groupes caractéristiques sur une molécule à l'aide de tableaux fournis.
- Connaître le nom de quelques fonctions caractéristiques
- Mise en évidence de liaisons H
- **RMN :**
  - déplacement chimique, intégration, multiplicité
  - identifier les groupes de H équivalents.
  - relier le spectre à une molécule donnée.

Bon courage !

### Références :

- Physique Chimie TS Bordass
- 

### Niveau : Lycée (1<sup>re</sup>S TS)

#### Prérequis :

- |  |   |
|--|---|
| • 1 <sup>re</sup> S, caractérisation par CCM.    | • Groupes caractéristiques                        |
| • liaisons H, électronégativité                  | • Formule développée/ écriture topologique        |
| • nom des domaines du spectre électromagnétique. | • quantification des niveaux d'énergie            |
| • Loi de Beer Lambert et Absorbance.             | • déplacements de doublets dans un mécanisme (TS) |

## Introduction

**Que ce soit bref.**

### (Généralités)

Lors de synthèses organiques il est nécessaire de pouvoir caractériser les produits obtenus. Pour cela des méthodes comme les CCM (chromatographie sur couche mince), les mesures de température de fusion ou d'indices de réfraction peuvent s'avérer très utiles comme nous l'avons déjà vu.

Aujourd'hui nous présentons de nouvelles méthodes d'analyse de composés chimiques très puissantes : les méthodes spectroscopiques.

**La spectroscopie est l'étude des systèmes par les propriétés spectrales des ondes électromagnétiques qu'ils émettent ou absorbent.**

L'interaction d'une onde électromagnétique avec le composé étudié nous permet en effet d'accéder à des informations sur la nature des molécules étudiées.

## (Spectroscopie d'absorption)

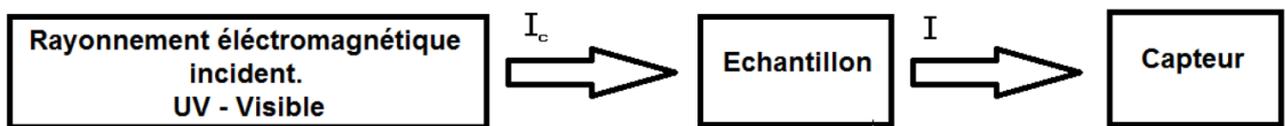
Comme on l'a déjà vu dans des cours précédents, l'énergie à l'échelle microscopique est quantifiée. Les objets peuvent changer de niveau d'énergie par absorption ou émission d'un **quantum d'énergie**. Parfois, il peut s'agir de photons<sup>1</sup>. Une petite précision, En spectroscopie on n'observe pas des pics mais des bandes ou raies.

## (Rappel : Notion d'absorbance)

Pour  $I_0(\nu)$  l'intensité d'une onde monochromatique de fréquence  $\nu$  envoyée sur un échantillon absorbant et  $I_t(\nu)$  l'intensité transmise, on a :

$$A(\nu) = -\log\left(\frac{I_t(\nu)}{I_0(\nu)}\right) \quad (2)$$

On remarque que les valeurs d'absorbance se situe entre 0 (l'échantillon n'absorbe pas) et l'infini



(l'échantillon absorbe toute l'onde incidente). En pratique, on se place à des concentration suffisamment faible pour que  $A \in [0; 3]$ . Lorsque l'on obtient le spectre d'absorption d'une solution, on peut le comparer à des spectres de références et vérifier leur correspondance. Cette méthode d'absorption est également utilisée pour réaliser des dosages : on peut déterminer la concentration d'une solution à l'aide de courbe d'étalonnage.

# 1 Spectroscopie UV-visible

## 1.1 Le spectre UV-visible

Il s'agit de la représentation du spectre d'absorption dans les gammes de fréquences visibles ( $\lambda \in [200 \text{ nm}, 400 \text{ nm}]$ ) et UV<sup>3</sup> ( $\lambda \in [400 \text{ nm}, 800 \text{ nm}]$ ).

## expérience réaliser le spectre d'absorption du bleu patenté des Schtroumpfs

On utilise un Spectrophotomètre<sup>4</sup> pour obtenir la courbe  $A(\lambda)$  d'une solution. Il est important que  $A < 3$  si non le spectro va saturer.

<sup>1</sup>Les photons sont les quanta correspondant au champ électromagnétique. Ils sont caractérisés par une énergie  $E$  liée à leur fréquence  $\nu$  par la relation de Plank<sup>2</sup> :

$$E = h \times \nu = h \times \frac{c}{\lambda} \quad (1)$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière dans le vide.

<sup>3</sup> $\approx 10^{-18}$  ou  $10^{-19} \text{ J} = 1$  ou  $10 \text{ eV}$  Ils correspondent à des transitions électroniques dans les niveaux de la molécule.

<sup>4</sup>Tout à l'heure, on a défini  $A$  pour des longueurs d'ondes monochromatiques. Le spectro fait varier lambda et prend la mesure. Il y a au moins deux méthodes :

Soit on fait tourner un prisme ce qui change la couleur de la lumière qui atteint un petit détecteur. La mesure est alors longue

ou alors, le prisme est fixe et décompose la lumière qui vient éclairer un détecteur étendu. La position du pixel sur le détecteur est alors caractéristique de la couleur de la lumière qui l'atteint. La mesure est "instantannée".

## Expérience :

### En préparation :

- découper les Schtroumpfs en morceaux en gardant les parties bleues.
- Les dissoudre dans 25 mL d'eau en chauffant.
- diluer le mélange obtenu jusqu'à ce que la solution soit assez claire (pour passer au spectro (tester en préparation qu'il n'y a pas saturation))

### Devant le Jury :

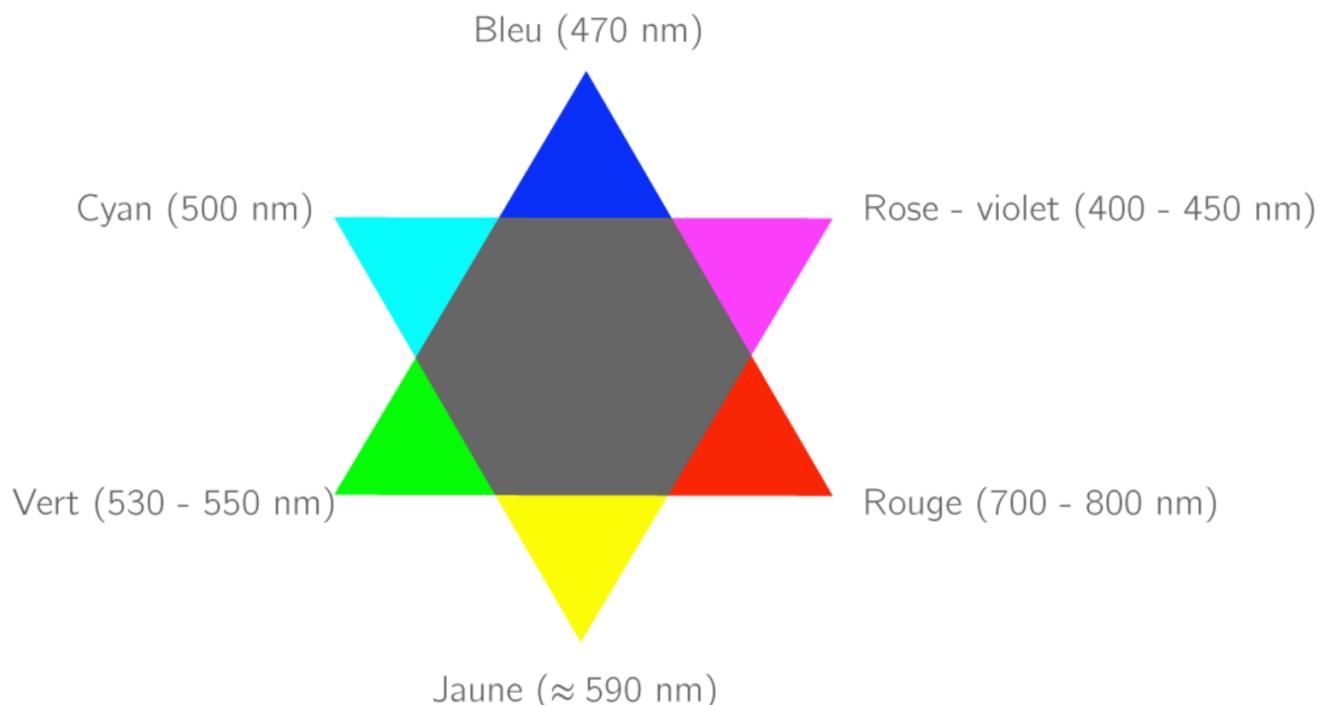
- On fait d'abord le blanc avec le solvant que l'on ne veut pas étudier (ici l'eau) **Le faire devant le Jury pour montrer aux enfants)**
- réaliser le spectre d'absorption du bleu pathenté des Schtroumpfs dilué.

Tr

On remarque que  $A(\lambda)$  a un maximum pour une valeur précise :  $\lambda_{max}$ . Quel est le sens physique et sensoriel de cette courbe ?

## 1.2 Couleur d'une solution :

La couleur d'une solution peut-être expliquée par son spectre dans le visible. En effet lorsqu'une solution absorbe les longueurs d'ondes du spectre associé à une couleur, la solution possède la couleur complémentaire de celle-ci.



Le complexe formé précédemment absorbe dans le vert, on peut ainsi expliquer sa couleur bleu. Mais on peut aller plus loin :

### 1.3 Expérience identification du colorant dans les bombons



#### Expérience :

##### En préparation :

- Préparer des solutions de divers colorants bleus pour qu'elles aient le même ordre de couleur que la solution de Schtroumpfs dilués. Pour cela, on dilue dans l'eau.
- Les colorants sont :
  - Bleu Patenté **E131**
  - Indigotine **E132**
  - Bleu Brillant **E133**
- réaliser et superposer leur spectre sur le même graphe.

**Devant le Jury**, on montre les solutions dont on compare visuellement les couleurs. A l'oeuil, c'est peine perdue pour voir la différence.

Comparer les spectres des trois "bleus différents" à celui obtenu pour les Schtroumpfs dilués. Reconnaître que c'est le bleu Patenté. Il faut comparer le  $\lambda_{max}$  et pas les valeurs d'absorbances !

Tr

Ici on a vu qu'on pouvait trouver grâce à la spectroscopie des informations utiles : La couleur d'une solution, voir sa concentration. **Ce sont des données à l'échelle macroscopique.** Peut-on descendre encore en échelle<sup>a</sup> ?

<sup>a</sup>Un lecteur averti se rendra bien sûr compte que pour les molécules organiques, on peut on peut estimer le nombre de doubles liaisons conjuguées en fonction de  $\lambda_{max}$ . C'est l'effet bathochrome. En général, on observe qu'à partir de 7 liaisons conjuguées, la molécule absorbe dans le visible.

## 2 Spectroscopie infrarouge

voir Physique Chimie Bordass TS p95

Ici, on s'intéresse à des longueur d'ondes plus élevées :  $\lambda \in [2500 \text{ nm}; 25000 \text{ nm}]$  : l'infrarouge. La différence fondamentale réside dans le fait que pour de telles longueurs d'onde, les ondes électromagnétiques interagissent avec les liaisons covalentes au sein de la molécule<sup>5</sup>.

Certains groupes caractéristiques donnent lieu à des bandes d'absorptions à des longueurs d'ondes caractéristiques. L'absorption issue de ces liaisons remarquables est tabulée et

<sup>5</sup> $\approx 10^{-20}$  ou  $10^{-19}$  J =  $10^{-1}$  ou 1 eV Les transitions concernées sont des modes vibrationnels ou rotationnels dans la molécule.

! l'analyse de spectres IR permet ainsi de déduire la présence ou non de groupes caractéristiques au sein des molécules qui constituent l'échantillon.

## 2.1 Le Spectre IR

On introduit la transmittance  $T$  et le nombre d'onde  $\sigma$  :

$$T = \frac{I}{I_0} \in [0, 1] \quad \sigma = \frac{1}{\lambda} \in [400 \text{ cm}^{-1}, 4000 \text{ cm}^{-1}] \quad (3)$$

plus adaptés<sup>6</sup> à l'étude des spectres IR.

Un spectre IR est ainsi la donnée de la transmittance en fonction du nombre d'onde. La zone du spectre pour laquelle  $\sigma \in [400 \text{ cm}^{-1}, 1500 \text{ cm}^{-1}]$  est appelée empreinte digitale. Nous ne nous intéresserons pas à cette zone dont la compréhension dépasse de loin le cadre de ce cours.

Le reste de la courbe contient les informations qui nous intéressent, en repérant et en caractérisant les bande d'absorption (position, longueur, intensité) on peut remonter, à l'aide des données tabulées, aux différentes liaisons présentes dans les molécules constituant l'échantillon (projection d'une table de données).

! Deux zones doivent se distinguer :

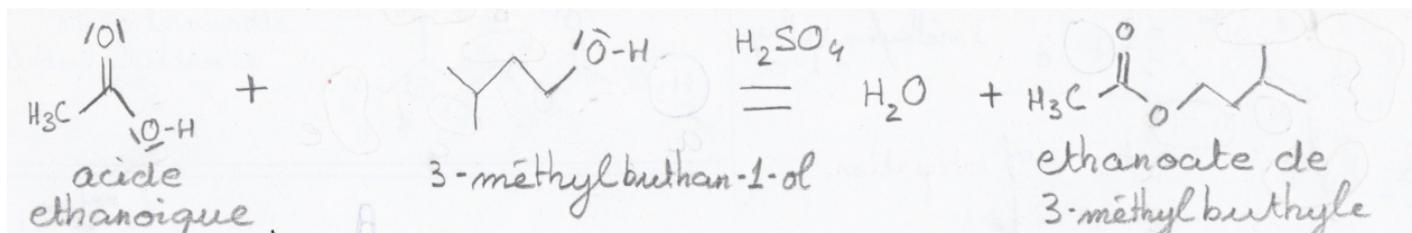
- $\sigma \in [400 \text{ cm}^{-1}, 1500 \text{ cm}^{-1}]$  : zone des empreintes digitales, véritable carte d'identité de la molécule, elle est spécifique à une molécule. Cependant, son **interprétation est très difficile**.
- $\sigma \in [1500 \text{ cm}^{-1}, 4000 \text{ cm}^{-1}]$  zone d'intérêt où on trouve les informations sur les **groupes caractéristiques** qui composent la molécule.

La **Table** est à cette adresse. Il faudra en recopier le tableau sur transparent. On affichera les spectres simulé au vidéoprojecteur simultanément.

Pour que tout se passe bien, on va travailler sur un exemple :

## 2.2 Expérience synthèse de l'ester de poire

On effectue la transformation chimique C'est une estérification :



<sup>6</sup>Il m'a été absolument impossible de trouver une source confirmant que c'est plus pratique.

## Expérience :

Florilège de chimie pratique p13 à 17. On peut le faire devant le Jury. Réaction.

En passant le mélange obtenu au spectrophotomètre infrarouge<sup>7</sup>, on sait que<sup>8</sup> :

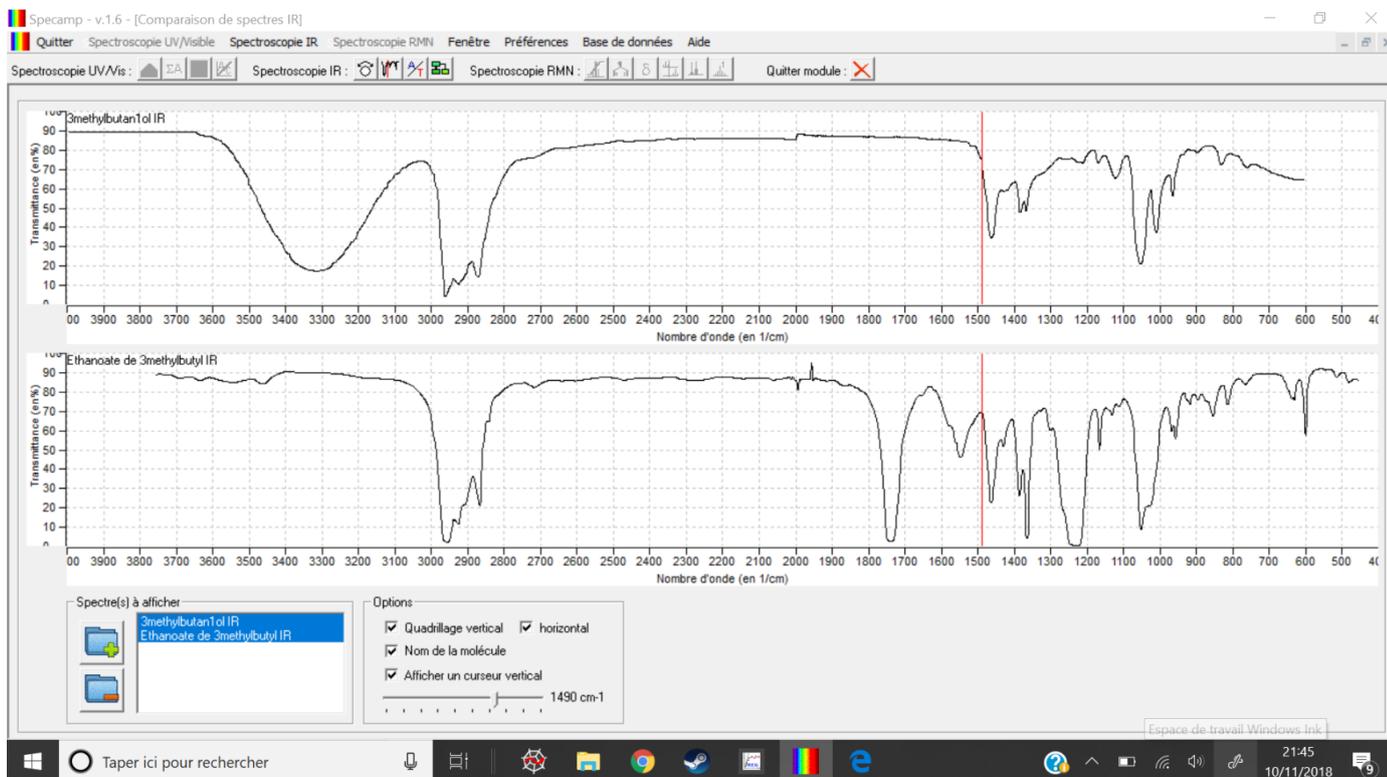


Figure 1: Spectres IR comparés de l'alcool et lester obtenus avec Specamp

Ce qui est vraiment flagrant, c'est la disparition de la **BANDE**<sup>9</sup> à gauche.

- le produit est pur notamment si la bande large<sup>10</sup> de l'alcool a disparu.

## 2.3 Liaisons H

On remarque que pour la liaisons  $O - H$ , deux valeurs sont tabulées (la valeur pour la liaison dite "liée" et la valeur pour la liaison dite "libre"). En effet jusqu'à présent on a toujours considéré que les molécules étaient seules.

Cependant, certaines observations s'expliquent en considérant les interactions inter-moléculaires. Lorsque le produit est susceptible de faire des liaisons hydrogène, la bande d'absorption liée à la liaison  $O - H$  s'en trouve modifiée<sup>11</sup>. On parle alors de liaison liée.

<sup>7</sup>Montrer les spectres simulés grâce au logiciel **Specamp**

<sup>8</sup>Je préconise de projeter une table de bandes caractéristiques et fonctions correspondantes sur transparent en même temps.

<sup>9</sup>pas de pic en IR

<sup>10</sup>large à cause de liaisons H avec le solvant.

<sup>11</sup>Le spectre IR dépend donc aussi de la concentration du produit (très dilué : peu de liaisons inter-moléculaire, pur : plus d'interactions possibles).

Tr

Conclusion, Par la spectroscopie, on obtient des données précieuses sur les **groupes** présents dans la molécule. Mais comment faire la différence entre le 3-méthylbutan-1-ol et un autre alcool à 5 carbones comme le pentan-1-ol ? (Montrer leurs spectres, ils sont semblables)

### 3 Spectroscopie de résonance magnétique nucléaire RMN

Physique et Chimie TS Bordass p111.

Pour cette partie, je recommande vivement de faire tout sur transparent à part les spectres si on arrive à faire marcher les logiciels. En particulier, entourer les groupes équivalents et remplir les tableaux.

#### 3.1 Déplacement chimique

Cette spectroscopie<sup>1213</sup> permet de remonter au squelette carboné de la molécule. Elle utilise une propriété intrinsèque<sup>14</sup> de certains noyaux atomiques comme le proton. Sur le spectre, on présente le déplacement chimique  $\delta$  qui s'exprime<sup>15</sup> repose sur des transitions de niveau d'énergies effectuées par les noyaux des atomes d'hydrogène en présence d'un rayonnement électromagnétique.

Les noyaux d'hydrogènes répondent à cette excitation en rayonnant un champ électromagnétique dont on peut mesurer la fréquence  $\nu$  qui dépend de leur environnement comme on le verra plus tard. On définit alors le **déplacement chimique**  $\delta$  qui tient compte de cette fréquence  $\nu$  de réponse :

$$\delta = 10^6 \times \frac{\nu - \nu_{ref}}{\nu_{machine}} \quad (5)$$

- Le terme  $\nu_{ref}$  permet de donner une valeur 0 commune à toutes les machines

<sup>12</sup>Les énergies typiques sont de l'ordre de  $10^{-6}$  eV ce qui donne des fréquences  $\approx 500$  MHz.

<sup>13</sup>Pour la théorie, voir **LP43 systèmes quantiques à deux niveaux**. En fait, l'environnement de H change leur facteur gyromagnétique  $\gamma$  ce qui change la fréquence de résonance; On excite avec un  $B_1$  en balayant les fréquences. La réponse de chaque atome  $H$  est alors visible.

<sup>14</sup>avoir un spin nucléaire non nul. On fait donc de la RMN du :  $^1H$ ,  $^{13}C$ ,  $^{17}O$ ,  $^{19}F$ ,  $^{31}P$ ,  $^{129}Xe$

<sup>15</sup>On peut réécrire :

$$\delta = 10^6 \times \frac{\omega - \omega_{ref}}{\omega_{machine}} \quad (4)$$

où  $\omega_{ref}$  est souvent pris comme étant le déplacement chimique du tétraméthylsilane  $SiC_4H_{12}$ . Il possède 12 protons équivalents qui n'ont aucun voisins puisque le  $Si$  est au milieu ce qui assure de voir un seul pic très visible.

On me dit dans l'oreillette que le TMS n'est plus utilisé. On préfère maintenant utiliser le pic du solvant qui est énorme. Dans le cas de l'eau, attention, il y a des liaisons H de partout ce qui donnerait un pic très étalé (gros pâté) dans le spectre qui noierait les pics qui nous intéressent. On utilise donc de l'eau deutérée aussi appelée eau lourde (car le deutérium ne fait pas de telles liaisons. Il reste toujours une petite portion d'eau normale pour donner la référence.)

$\omega_{machine}$  est ici pour normaliser puisque  $\omega_0$  la fréquence de résonance dépend du champ constant  $B_0$  imposé par la machine qui varie donc de machine en machine.

L'unité ainsi construite ne dépend pas de la machine.

- $\nu_{machine}$  sert à s'affranchir des propriétés techniques de la machines pour obtenir une grandeur universelle.

$\delta$  en *ppm* (parti par million). Il prend ses valeurs entre 1 et 14.

### 3.2 Notion de déblindage

Les électrons des liaisons covalentes dans lesquelles est impliqué l'atome d'hydrogène ont la propriété d'amoinrir l'effet de l'excitation et donc de changer la fréquence de réponse du noyau. On parle alors de blindage. Si au contraire, un *H* est appauvri en électrons, on parle de dé-blindage.

#### ! Vocabulaire : dé-blindage

| Un *H* est d'autant plus déblindé qu'il est proche d'un atome électronégatif.

En effet, moins il verra en moyenne ses électrons et plus il sera sensible au champ magnétique qu'on lui applique, et aura alors un grand déplacement chimique. Regardons pour l'acide méthanoïque :

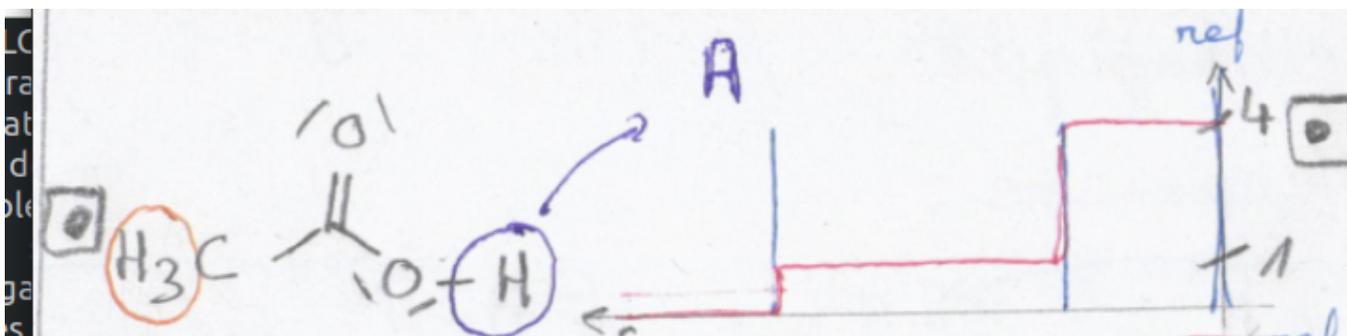


Figure 2: RMN de l'acide éthanoïque. Ne pas montrer la courbe d'intégration (rouge) pour l'instant

Il y a deux signaux dont un plus déplacé que l'autre. Ce dernier correspond bien au groupe A proche de *O* très électronégatif.

De plus, on voit que si il y a quatre *H* dans la molécule, on n'observe que deux pics. Comme ces deux pics ont des  $\delta$  différents, ils ont aussi des dé-blindés différents. L'un d'eux, très déplacé, est donc le *H* de l'hydroxyle et l'autre pic peu déplacé vient donc de la réponse du  $CH_3$  terminal. Donc :

#### ! Position des pics :

- Les protons répondent par groupes.
- Le déplacement chimique est d'autant plus grand que le groupe est déblindé.

### 3.3 Notion de protons équivalents

On prend l'alcool et on entoure les groupes de protons équivalents :

On remarque qu'on a des pics plus forts mais moins déplacés. **Et surtout qu'on a moins de groupes de pics que de H dans la molécule.**

Ceci est du au fait que les protons qui ont le même environnement (car portés par le même atome où pour des raisons de symétrie) renvoient un signal équivalent, au même  $\delta$ .

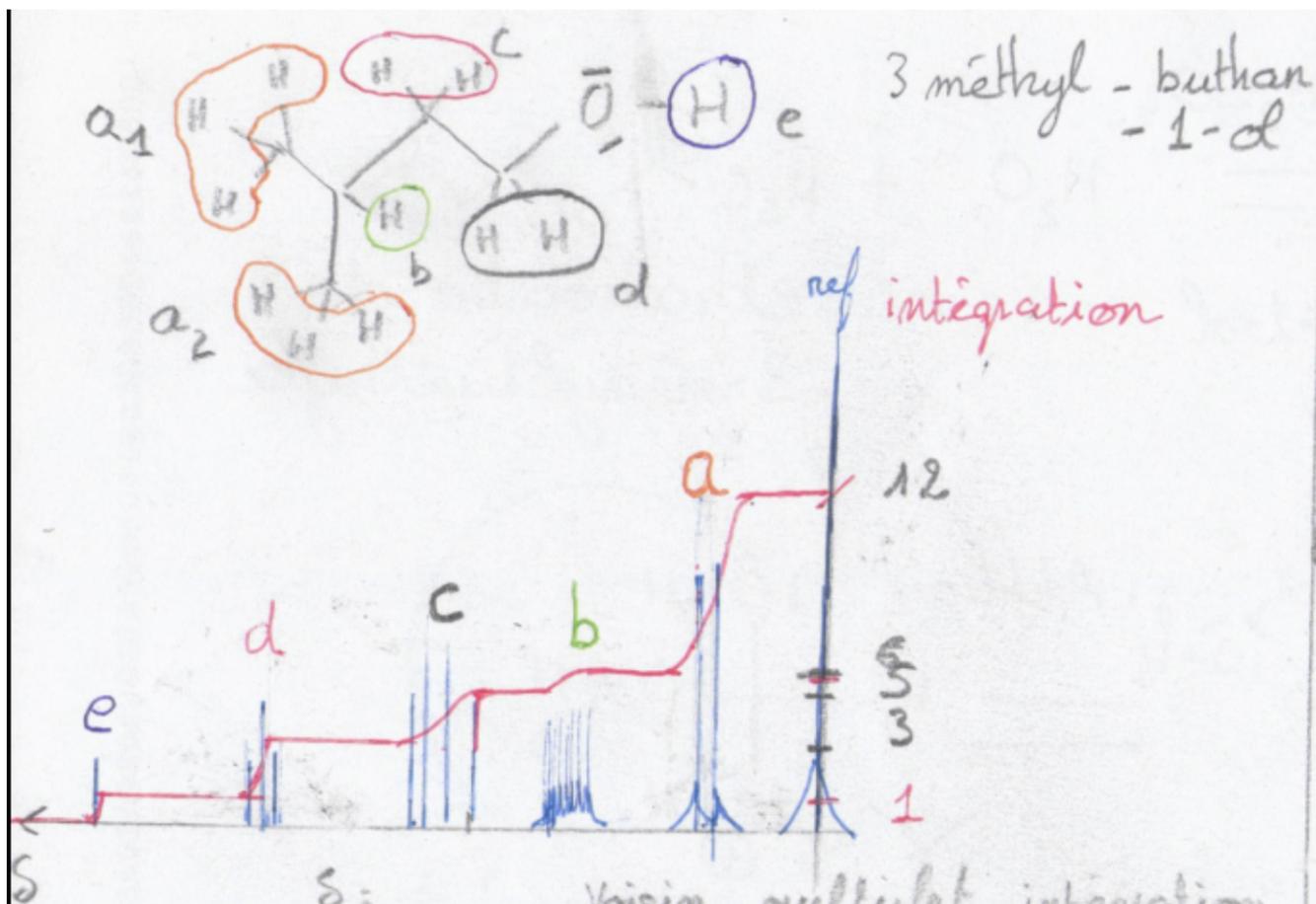


Figure 3: RMN de l'alcool. Ne pas montrer la courbe d'intégration (en rouge)

**! Position des pics :**

Des protons sont dits équivalents si ils ont le même environnement, c'est à dire le même nombre de liaisons les séparant des atomes très électronégatifs.

On insiste sur les 6H du "dimethyl" ( $a_1$  et  $a_2$ ) qui ne sont pas sur le même atome et renvoient un même multiplet.

**3.4 Multiplicité et nombre de voisins**

**! Définition : H voisins**

On appelle **voisins d'un groupe de protons équivalents**, les H portés par les atomes immédiatement adjacents à l'atome portant ledit groupe<sup>a</sup>.

<sup>a</sup> Puisqu'ils sont équivalents, on ne compte les voisins qu'une seule fois si besoin. (La question ne se pose pas ici.

Faisons un tableau pour l'acide éthanoïque et pour L'éthanol. On fait les tableaux corrélant le groupe de proton, la multiplicité et le nombre de voisins du groupe :

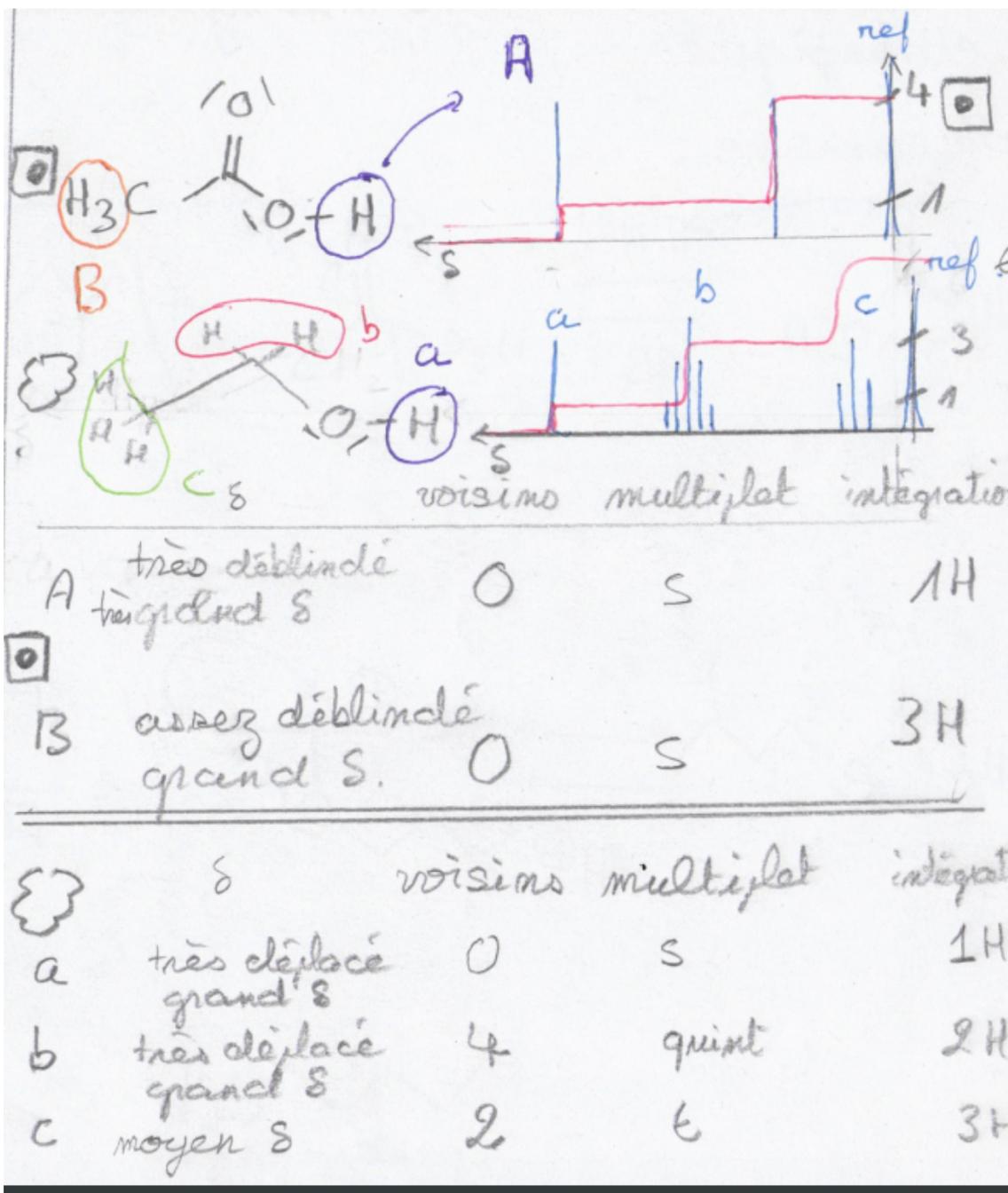


Figure 4: RMN de l'éthanol et l'acide éthanoïque. Attention les tableaux ne sont pas dans l'ordre. J'ai indexé les tableaux avec un nuage et un carré pour avoir la correspondance.. Ne pas montrer la courbe d'intégration (en rouge).

**! Multiplicité :**  
 On remarque que chaque groupe de pic est corrélé au nombre de H voisins du groupe<sup>a</sup> suivant :

$$M_{multiplicite} = N_{voisins} + 1 \quad (6)$$

<sup>a</sup>Il est très amusant de voir que leur amplitudes relative suit les coefficients binomiaux donnés par le triangle de Pascal : pour un triplet : 1 2 1. Pour un quadruplet : 1 3 3 1 ...

### 3.5 Intégration

La courbe d'intégration nous renseigne sur le nombre de H qui participent au groupe de pic.

**! Position des pics :**  
 la hauteur relative de ses palier indique les proportions relatives de H dans les différents groupes.

Regarder pour s'en convaincre le spectre de L'éthanol.

Il est important de faire remarquer que l'intégration des groupes de protons équivalents s'ajoute. Ainsi le diméthyl de notre alcool compte pour un seul groupe de 6 H. On a bien eu raison de les considérer équivalents. Enfin,

- re-montrer le spectre de notre alcool, 3-methylbutan-1-ol. Associer les pics aux groupes de protons équivalents qu'on a déjà identifiés.
- Montrer ensuite en quoi il est différent du pentane-1-ol.
- Insister sur le fait que cela permet de connaître la structure, comprendre le squelette de la molécule. On peut utiliser ce transparent pour résumer toute la RMN.

## Conclusion

Au cours de cette leçon nous avons étudié 3 types de spectroscopie.

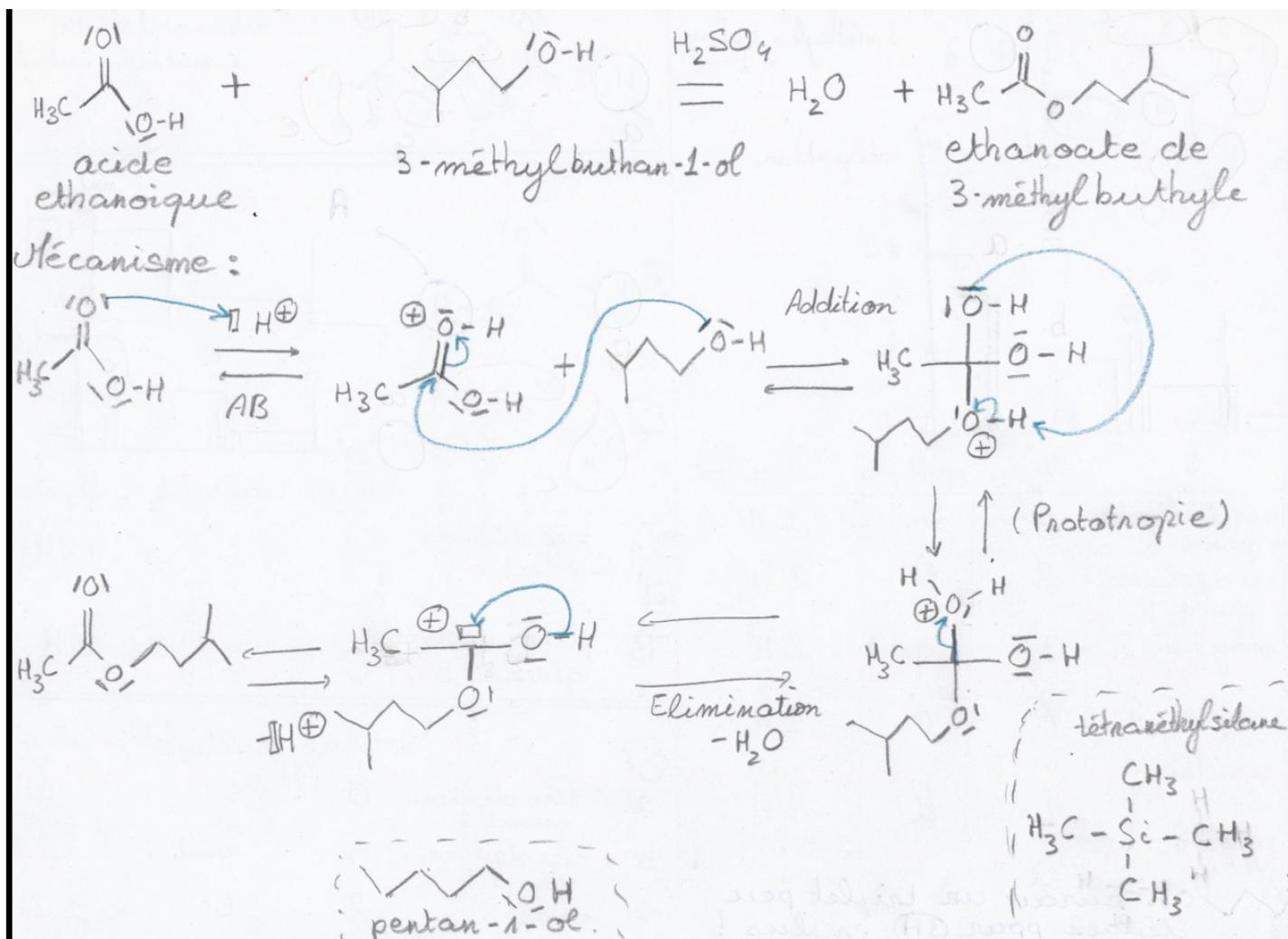
Spectroscopie UV-Visible	Absorbance, couleur, dosage spectrophotométrique
Spectroscopie IR	Liaisons au sein de la molécule et groupes caractéristiques
Spectroscopie RMN	Squelette carbonné et formule développée de la molécule

Chacune apporte des informations différentes elles sont donc complémentaires. Il faut donc souvent les combiner. La découverte de la spectroscopie comme technique de caractérisation non destructive a permis de grandes avancés par exemple dans l'étude des mécanismes. En effet si l'on parvient à isoler un intermédiaire réactionnel on peut alors le caractériser et valider ou invalider un mécanisme proposé.

Ces techniques nous seront bien utiles lorsque l'on abordera les synthèses organiques dans la suite.

## 4 Annexes :

### 4.1 Mécanisme



### 4.2 Specamp

C'est un logiciel gratuit téléchargeable [ici](#). Il y a aussi plein de tutoriels sur la page. Les fichiers .JDX pour l'alcool et l'ester sont dans l'archive de la leçon.

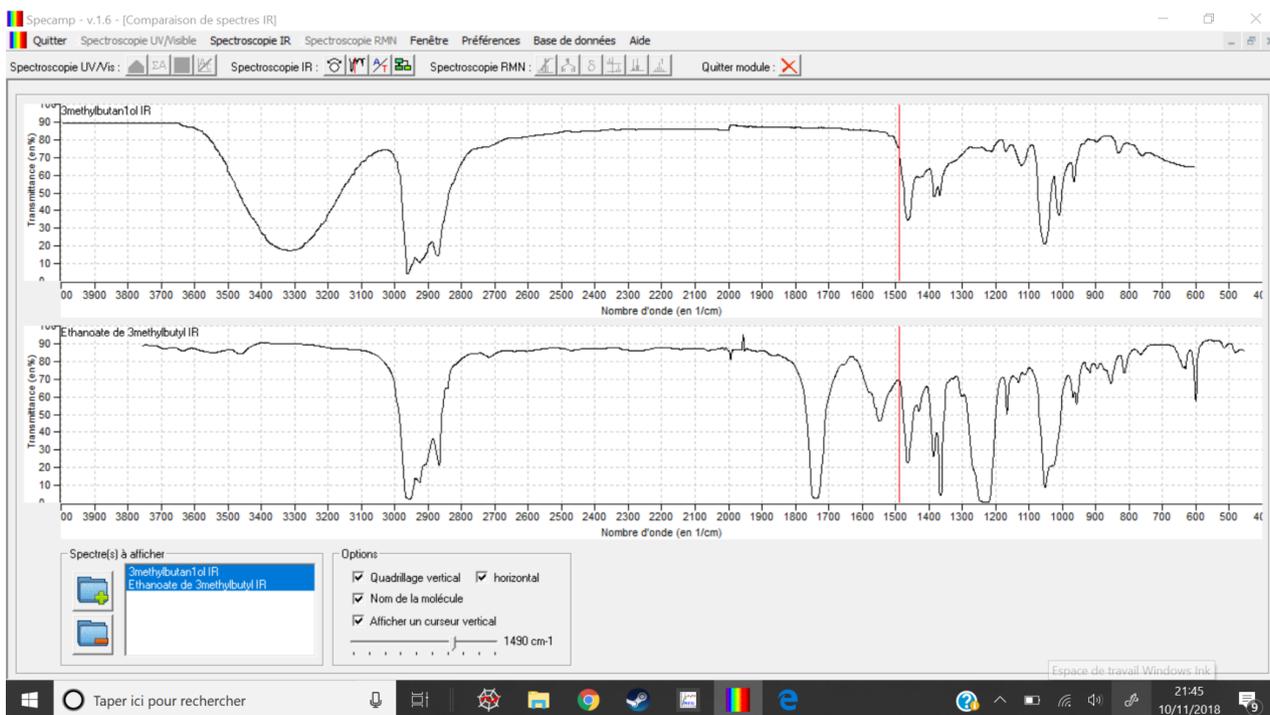
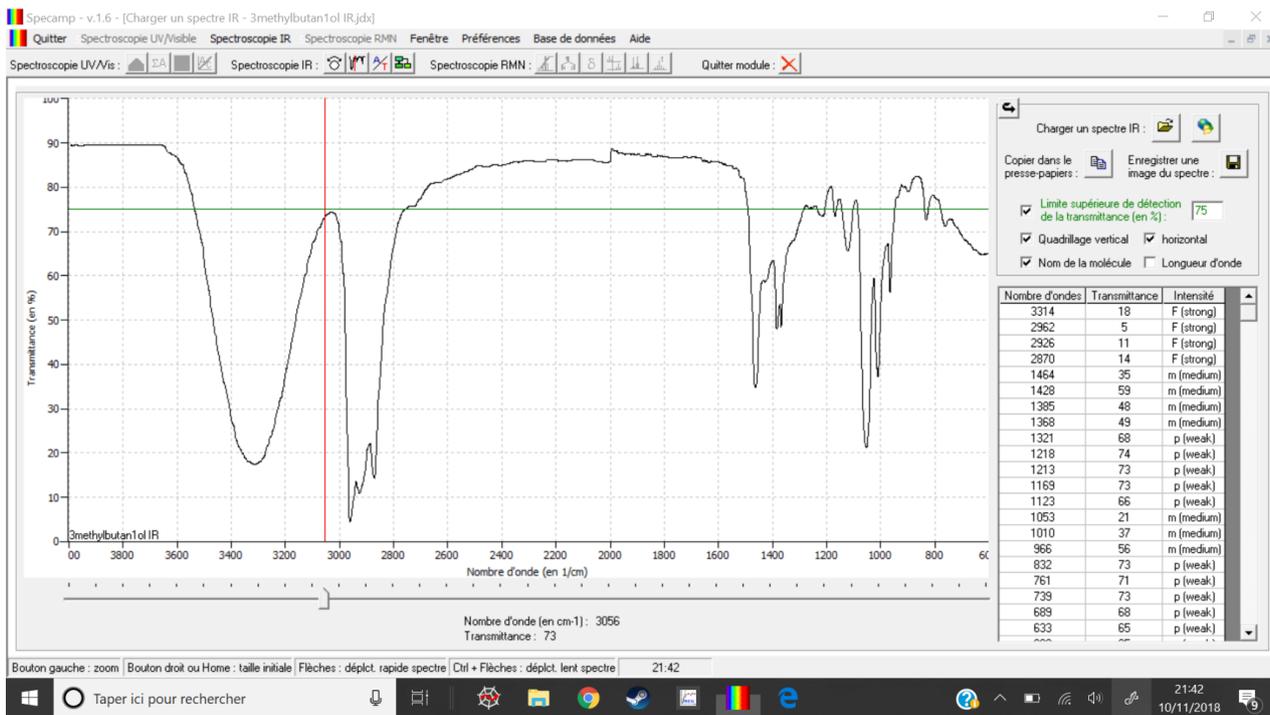
On montre des captures d'écran de Nathan qui s'en est servi.

### 4.3 spectres IR

La [Table](#)

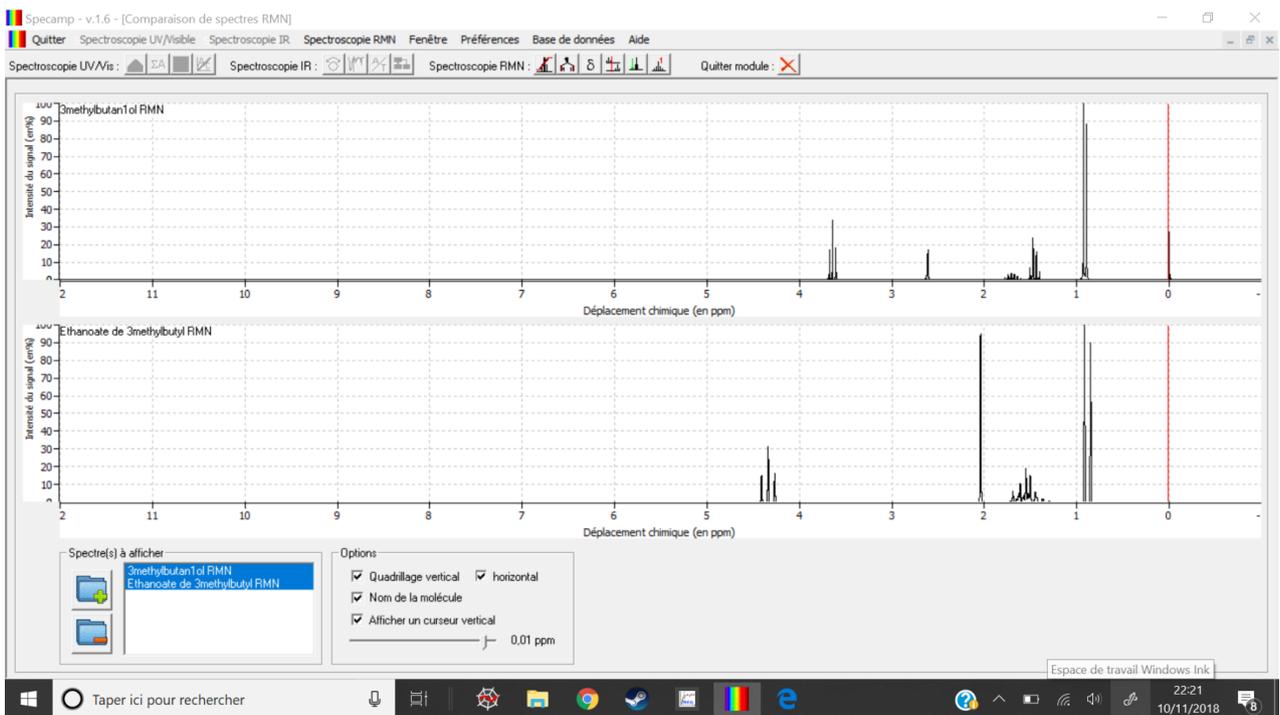
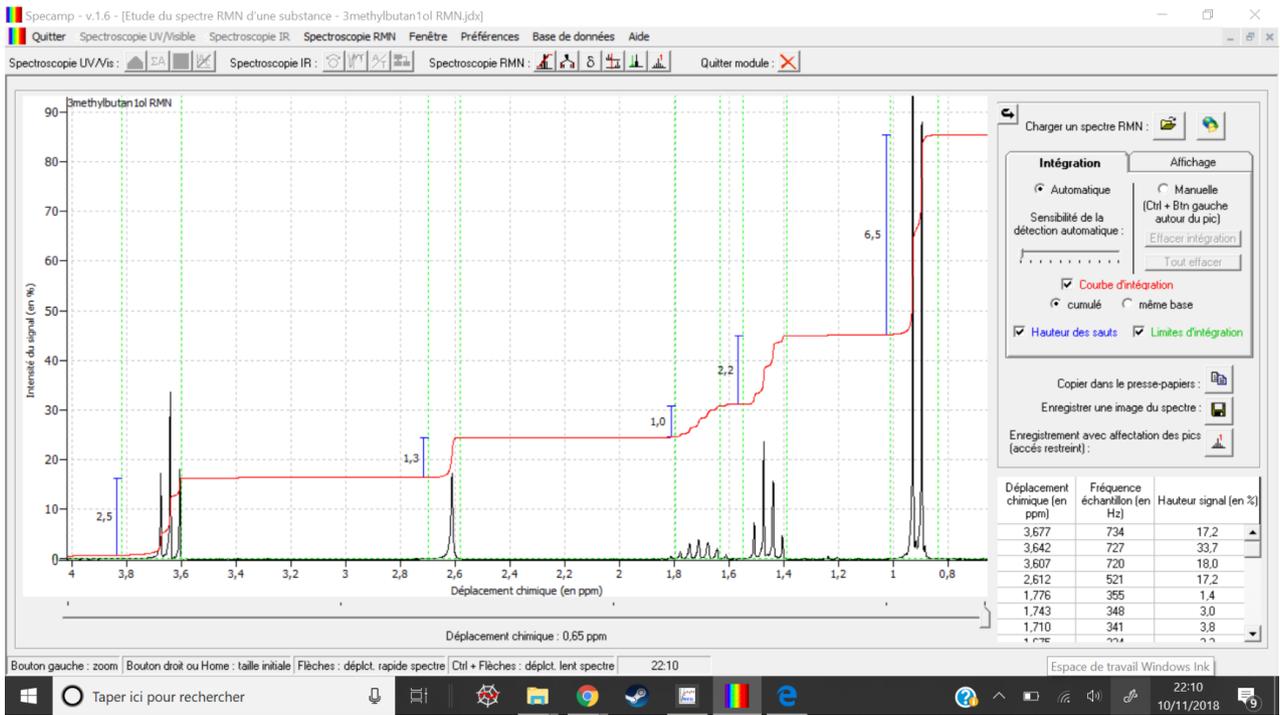
### 4.4 RMN

### 4.5 RMN interprétation



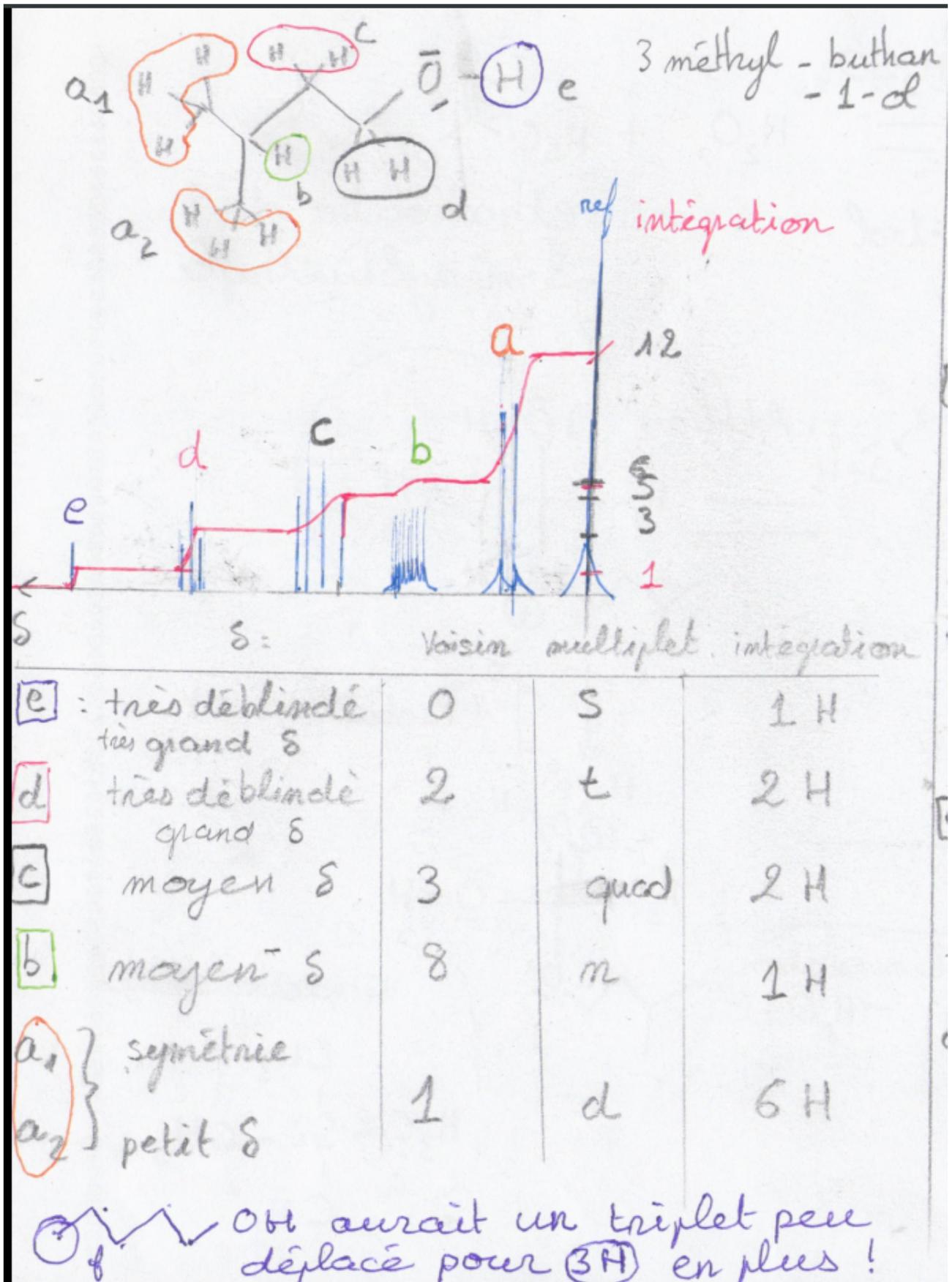
## 4.6 Quelques questions

- Quand est abordé la spectro au lycée ? UV-visible en première. Non en seconde. En première, Loi de Wien avant Beer-Lambert.
- Différence spectromètre/spectrophotomètre ? Spectromètre c'est le principe général, photo pour UV-visible
- OdG des énergies mises en jeu ?
- D'autres spectroscopies que ça ? Spectrométrie de masse, champ magnétique sépare des

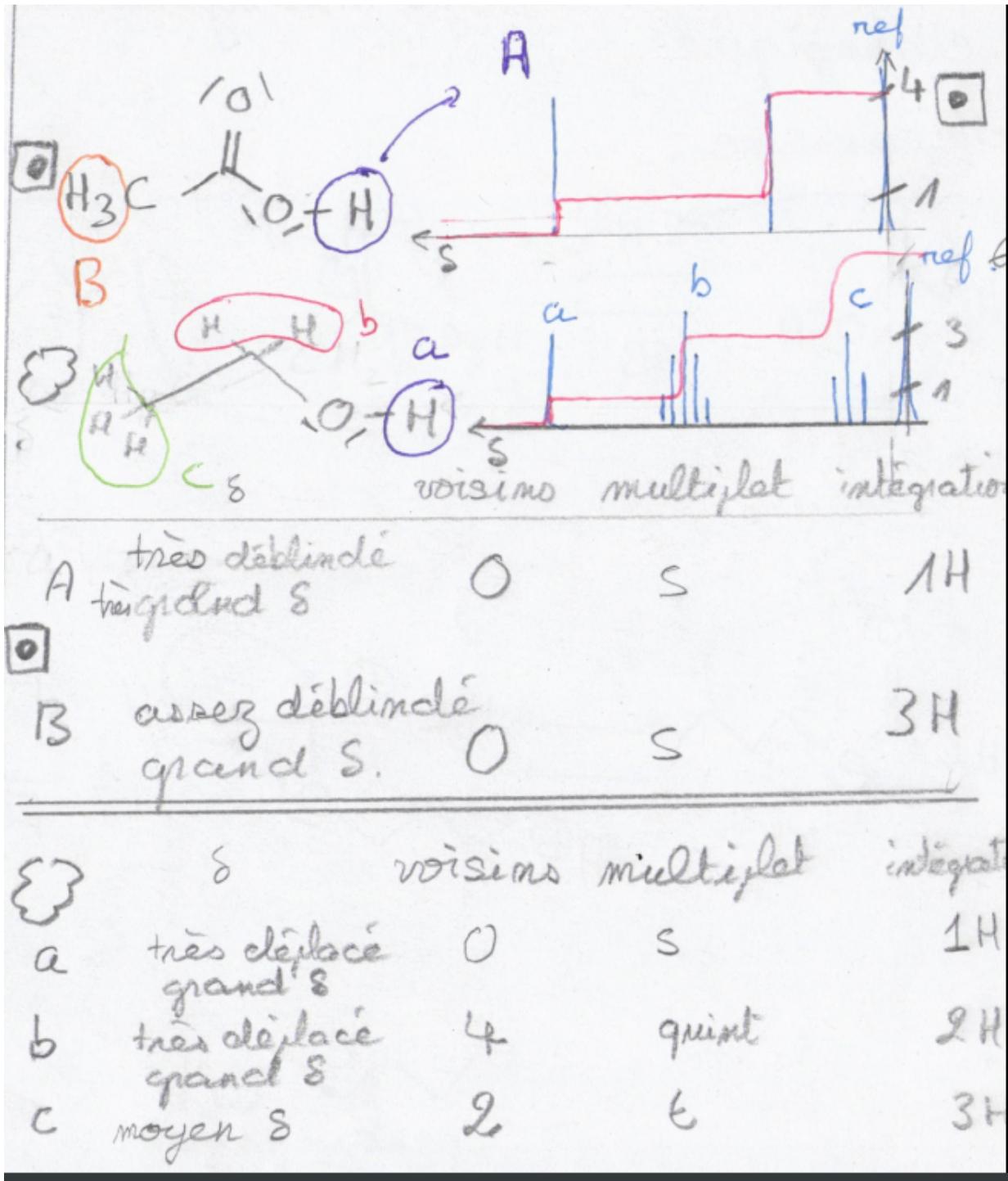


fragments d'une molécule en fonction de la masse. Donne masse molaire notamment.

- Avantage de spectroscopie par rapport aux titrages ? Temps de réponse. Spectro pas destructive. Lien avec détermination de mécanismes ? On peut utiliser des méthodes de pompe-sonde optique pour des infos mécanistiques. Si non, on peut marquer les atomes (mettre un isotope) dans un groupe. Ceci change la réponse, en particulier en RMN. On peut alors deviner où part l'atome.
- Spectro UV-visible La lampe c'est quoi dedans ? Quartz-iode
- Principe spectrophotomètre ? Quels éléments ? Source lumineuse de lumière blanche,



réseau qui décompose la lumière, passe par l'échantillon et capteur CCD qui relève l'intensité lumineuse en fonction de la position sur le CCD.



- Cuves en quel matériau ? Toujours ? Plastique, pas toujours, c'est juste moins cher. Dans l'UV ça marcherait pas, le plastique absorbe. on utilise des cuves en quartz.
- Hypothèses Beer Lambert ? concentration faible pour pas d'interaction entre molécules. Pas de suspension, homogène, et mono-chromatique.
- Placée à  $\lambda_{max}$  : pourquoi ? Meilleure sensibilité et moindre incertitude. Montrer à un élève ? Au maximum, variation de A assez faible, alors que sinon on a une variation de A plus importante.
- Quand y'a beaucoup de liaisons conjuguées, ça absorbe dans le visible » : comment on

appelle cet effet ? Bathochrome.

- Pourquoi liaisons conjuguées déplace  $\lambda$  dans le rouge ? Abaisse les niveaux d'énergie : par mésomérie, l'électron est libre de se ballader sur toutes les liaisons conjuguées; C'est comme si il était dans une boîte plus grande.
- Couleur perçue = complémentaire de absorbée » : avec un mélange ? On aura un combinaison des couleurs. Deux bandes d'absorption vert et jaune ? absorption dans le bleu, selon l'intensité des bandes.
- Qu'est-ce qu'il se passe quand on envoi IR sur molécule ? Absorption avec modèle du ressort pour modéliser les liaisons ...
- Combien de types de vibrations ? Élongation (IR), déformation.  $CO_2$  en a 4.
- RMN : Règle des n+1 ? Nombre de pics (multiplicité) = nombre de voisins + 1. 2 voisins ? 3 pics. Voisins définis par la liaison entre deux carbones..
- Distance entre deux pics ? Constante de couplage. Dépend de quoi ? Des voisins vus. Dépend du champ appliqué ? On se limite à quel couplage ? Les H de part et d'autre d'une C=C.

#### 4.7 (Loi de Beer Lambert)

Pour une substance absorbant la longueur d'onde  $\lambda$  peu concentrée, à la concentration  $C$ , on a<sup>16</sup> :

$$A(\lambda) = \epsilon(\lambda) C l \quad (7)$$

- $\epsilon$  : le coefficient d'extinction molaire en  $L mol^{-1} cm^{-1}$ . Il est spécifique de l'espèce considérée<sup>17</sup>.
- $l$  : la largeur de cuve en  $cm$
- $C$  : la concentration de la solution en  $mol L^{-1}$

Cette loi est de plus additive. En effet, pour un mélange d'espèces colorées dont les grandeurs sont indexées par 1, 2, ...etc :

$$A(\lambda) = \epsilon_1(\lambda) C_1 l + \epsilon_2(\lambda) C_2 l + \dots etc \quad (8)$$



#### Expérience :

En préparation, pour plusieurs concentrations, mesurer l'absorbance de solutions de bleu de patenté.

<sup>16</sup>1852 pour la formulation actuelle par Beer

<sup>17</sup> Hors Programme : En fonction des changements de parité, la conservation du moment cinétique en fait car le photon part avec un  $\pm 1$ , certaines transitions sont interdites ( $\epsilon < 50$ ) et d'autres sont permises ( $\epsilon > 50$ )