

NOTE SUR 20

N° d'anonymat

**LICENCE PROFESSIONNELLE INDUSTRIES
CHIMIQUES ET PHARMACEUTIQUES
Option DM**

Année universitaire 2012/2013

1^{ère} session

Epreuve de Spectrophotométrie IR
UE 17

Correcteur de l'épreuve : Lionel GODIN

Durée de l'épreuve : 1 h
Documents non autorisés, tablette comprise
Calculatrice autorisée

1 - Instructions générales

- Ne pas dégrafer le fascicule
- Ecrire lisiblement
- Ne rien inscrire dans les marges
- Respecter les modalités de réponses proposées
- Toute fraude ou tentative de fraude fera l'objet de poursuites disciplinaires (décret n° 92-657 du 13 juillet 1992)

2 - Instructions particulières à l'épreuve

- Vérifier que le cahier est complet : il comporte 7 feuilles numérotées de 1 à 7, celle-ci comprise.

1ère PARTIE : THÉORIE

1ère question

(2 points)

Situe le domaine spectral du moyen infrarouge (MIR) en nombre d'onde $\bar{\nu}$ (exprimé en cm^{-1}), en longueur d'onde λ (exprimée en μm), en fréquence ν (exprimée en Hz) et en énergie (exprimée en eV).

Vous indiquerez, à chaque fois, les relations fondamentales utilisées pour passer d'une grandeur à l'autre.

On rappelle que $1 \text{ eV} = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$; $c = 3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$; $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

Réponse du candidat :

$$400 \leq \bar{\nu} \leq 4000 \text{ cm}^{-1}$$

$$2,5 \cdot 10^{-4} \leq \lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} \leq 2,5 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$$

$$2,5 \leq \lambda \leq 25 \mu\text{m}$$

$$\text{or } \lambda = \frac{c}{\nu} \Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow 1,2 \cdot 10^{13} \leq \nu \leq 1,2 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\text{d'après la relation de Planck : } E = \frac{hc}{\lambda} = h\nu$$

$$\Rightarrow 7,96 \cdot 10^{-21} \leq E \leq 7,96 \cdot 10^{-20} \text{ J}$$

$$\Rightarrow 0,0497 \leq E \leq 0,497 \text{ eV}$$

2ème question

(1,5 points)

Lors de l'absorption d'un rayonnement infrarouge par une molécule, celle-ci peut alors être soumise à divers types de vibration moléculaire.

En supposant que cette molécule possède un groupement CH_2 , citer les 6 modes de vibrations possibles pour ce groupement.

Réponse du candidat :

2 modes d'élongation symétrique et antisymétrique.

4 modes de déformation : cisaillement, balancement, rotation pure et torsion.

3^{ème} question

(2,5 points)

Les propriétés de la vibration d'élongation d'une molécule diatomique peuvent être décrites par un modèle mécanique classique constitué de deux masses m_A et m_B reliées par un ressort de constante de raideur k . Si l'on applique la seconde loi de Newton sur chacune des masses, on obtient le système d'équations (1) et (2) suivant :

$$\begin{cases} m_A \cdot \frac{d^2 x_A}{dt^2} = k(x_B - x_A) & (1) \\ m_B \cdot \frac{d^2 x_B}{dt^2} = -k(x_B - x_A) & (2) \end{cases}$$

En utilisant la variable réduite $q = x_B - x_A$, déterminer l'équation différentielle gouvernant le mouvement du système mécanique. En déduire l'expression de la fréquence de vibration ν_h de ce système en fonction de k et de μ la masse réduite du système. Calculer alors la fréquence de vibration de la molécule de monoxyde de carbone.

On donne : Les constantes de force de liaisons $k_{C-O} = 1853 \text{ N.m}^{-1}$;

La masse molaire du carbone et de l'oxygène : $M(C) = 12,0 \text{ g.mol}^{-1}$, et $M(O) = 16,0 \text{ g.mol}^{-1}$;
le nombre d'Avogadro : $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Réponse du candidat :

En effectuant (2) - (1) $\Leftrightarrow \frac{d^2(x_B - x_A)}{dt^2} = -k \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} \right) (x_B - x_A)$

on pose $q = x_B - x_A$ et $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$

on obtient l'éq. diff. : $\frac{d^2 q}{dt^2} + \frac{k}{\mu} q = 0$

eq. d'un oscillateur harmonique de fréquence

$$\nu_h = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Or, le cas de CO : $\mu = \frac{m_C m_O}{m_C + m_O} = \frac{m_C \times m_O}{N_A (m_C + m_O)}$

A.N : $\mu_{CO} = \frac{12,0 \cdot 10^{-3} \times 16,0 \cdot 10^{-3}}{6,02 \cdot 10^{23} \times 28,0 \cdot 10^{-3}} = 1,139 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$

et $\nu_h = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{1853}{1,139 \cdot 10^{-26}}} = 6,42 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$

2ème PARTIE : INSTRUMENTATION

4ème question

(1 point)

Il existe plusieurs méthodes pour enregistrer le spectre IR d'une substance. Les spectromètres ont en commun 4 éléments. Citer ces 4 éléments :

Réponse du candidat :

- ① Une source de radiation IR ;
- ② le dispositif de sélection des longueurs d'onde ;
- ③ le dispositif de positionnement de l'échantillon dans le faisceau ;
- ④ le détecteur et le système d'acquisition de données.

5ème question

(1,5 point)

Citer les deux types de spectrophotomètre IR principalement utilisés à l'heure actuelle.

Réponse du candidat :

Le spectrophotomètre dispersif qui permet d'obtenir un spectre en irradiant séquentiellement l'échantillon.
Le spectrophotomètre IRTF qui permet d'irradier simultanément l'échantillon sur tout le domaine spectral considéré.

6ème question

(2,5 points)

L'appareil le plus couramment utilisé dans le moyen infrarouge est le spectrophotomètre IRTF. Que veut dire l'acronyme IRTF ?

Préciser les principaux éléments constituant un tel appareil.

Réponse du candidat :

IRTF : InFraRouge à TransFormée de Fourier.
Cet appareil est constitué principalement d'une source IR, d'un interféromètre de Michelson, d'un compartiment échantillon et d'un détecteur.
Le système ne peut fonctionner sans un laser !

7^{ème} question**(1,5 points)**

Les appareils IRTF ne peuvent fonctionner sans laser He-Ne.
Quel est l'intérêt de ce laser ?

Réponse du candidat :

Le laser est un système de référence qui permet de déterminer le point de retard nul avec exactitude.
Il permet aussi d'échantillonner le signal reçu par le détecteur c'est-à-dire de le rendre lisible par le système informatique associé.
Le laser est aussi utilisé pour contrôler la vitesse de déplacement du miroir et la maintenir etc.

3^{ème} PARTIE : ÉCHANTILLONNAGE ET ANALYSE SPECTRALE**8^{ème} question****(1,5 point)**

Définir la notion de résolution spectrale.

Réponse du candidat :

La résolution peut s'exprimer en terme, de différence minimale du nombre d'onde de 2 raies que l'appareil est à même de séparer :

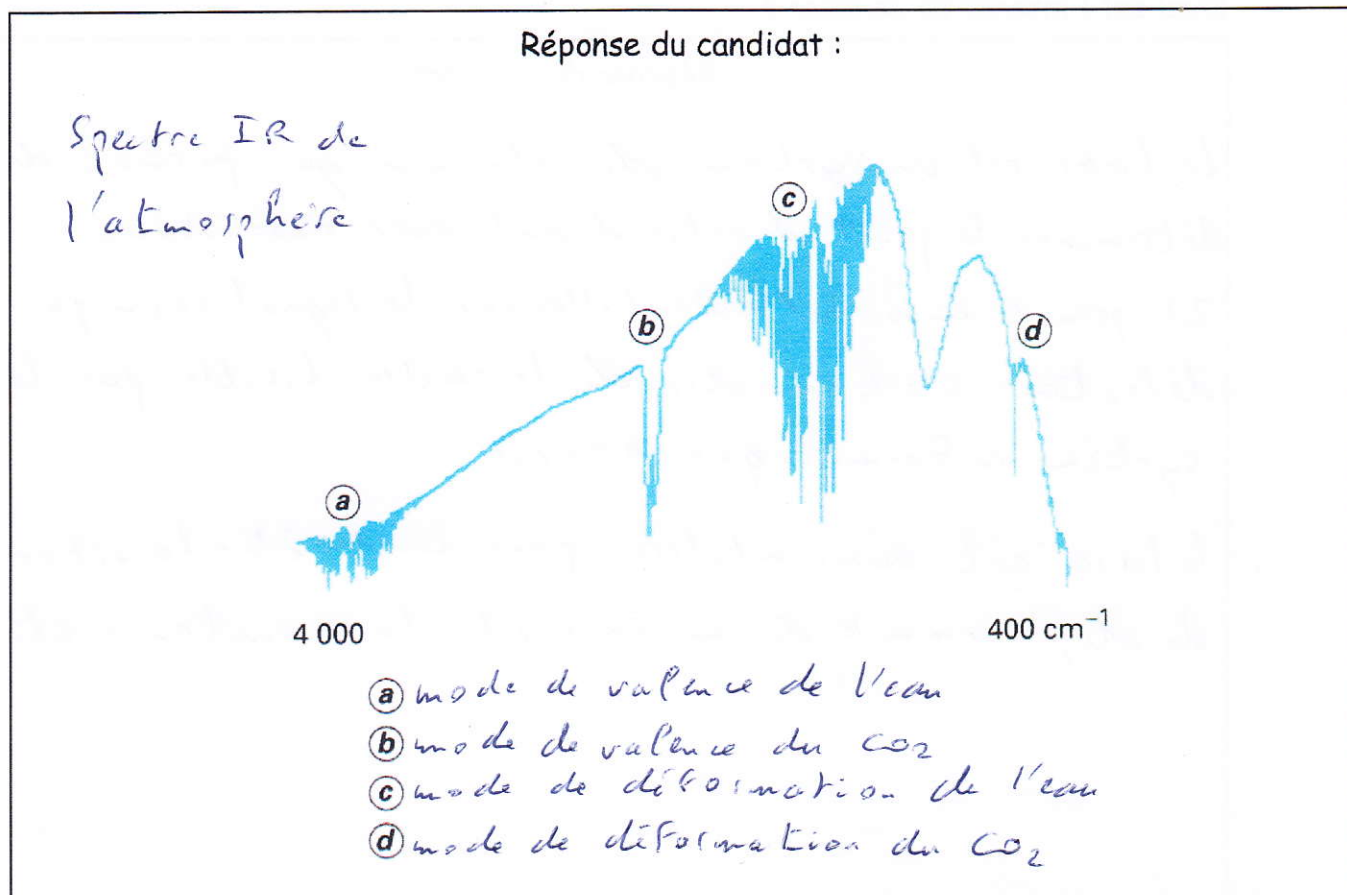
$$\Delta \bar{\nu} = \bar{\nu}_2 - \bar{\nu}_1$$

où $\bar{\nu}_1$ et $\bar{\nu}_2$ sont le nombre d'onde de 2 raies qui sont juste résolues.

9^{ème} question

(3 points)

Indiquer à quel composé correspond le spectre IR ci-dessous :



Préciser à quoi correspondent les modes de vibrations a, b, c et d.

10^{ème} question

(3 points)

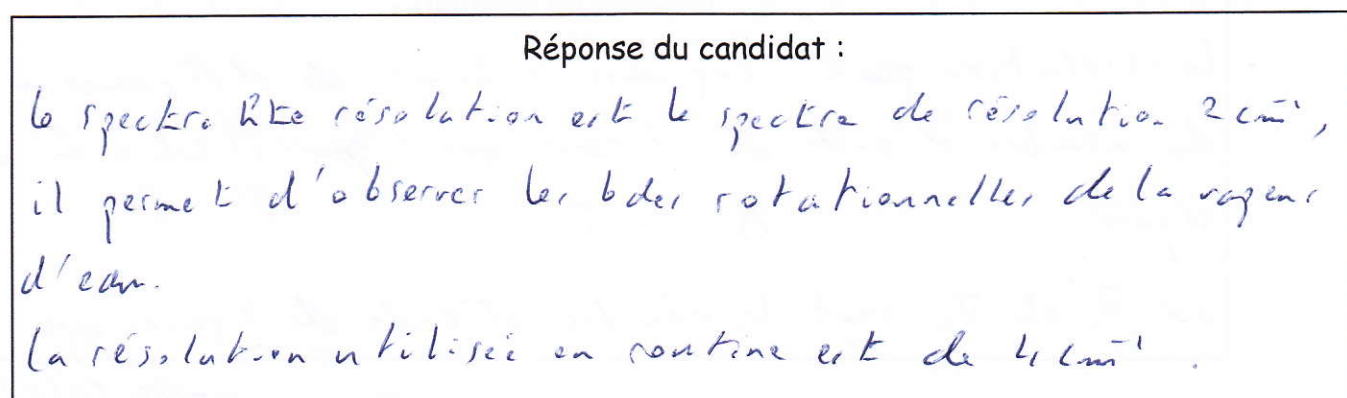
Un groupe d'étudiant a réalisé en pratique différents spectres de l'atmosphère à 3 résolutions différentes : $\Delta\bar{\nu} = 2 \text{ cm}^{-1}$, 8 cm^{-1} et 128 cm^{-1} . (spectres en page 7/7)

Or au moment de réaliser leur rapport, les spectres ont été mélangés.

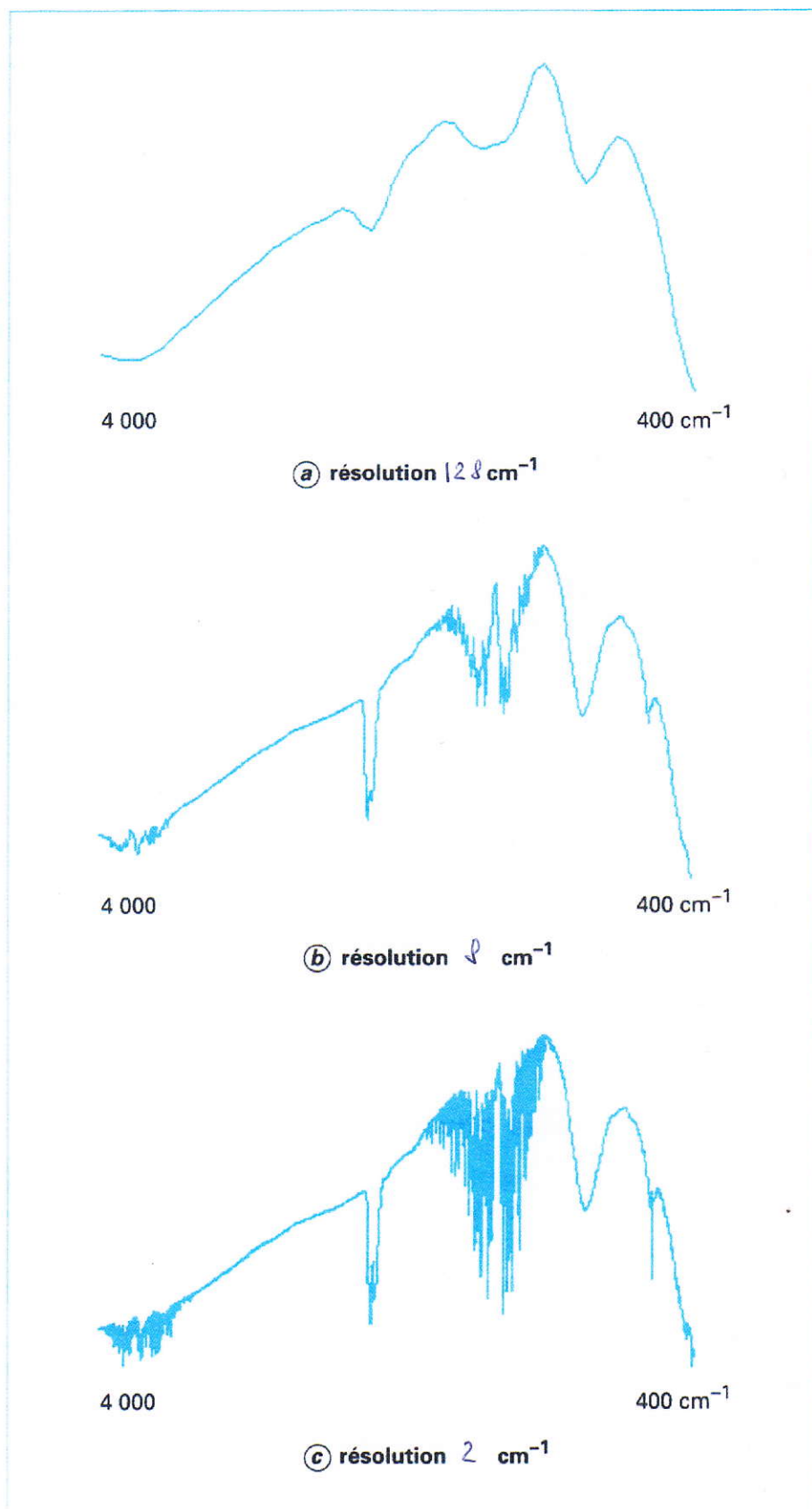
Attribuer la résolution spectrale au spectre correspondant.

Quel est le spectre haute résolution et que permet-il d'observer que ne permettent pas d'observer les deux autres ?

Préciser, quel est en routine, la résolution classiquement utilisée.



Réponse du candidat :



Influence de la résolution sur le spectre infrarouge de l'air