



UE5C : Sciences Analytiques – Techniques spectrales

Introduction et généralités

université
PARIS-SACLAY

FACULTÉ DE
PHARMACIE

Ali TFAYLI

ali.tfayli@universite-paris-saclay.fr

Spectre, spectrométrie, spectroscopie

- **Spectre**: mesure l'interaction entre une radiation électromagnétique et le milieu (solide, solution, vapeur atomique) : spectre de réflexion, d'absorbance...⁽¹⁾
- **Spectrométrie**: associe une notion de mesure
- **Spectroscopie**: associe une notion d'examen visuel

Les interactions entre rayonnement et matière constituent l'objet d'une science appelée « spectroscopie ». Les méthodes analytiques spectroscopiques se basent sur la mesure de la quantité de rayonnement émis ou absorbé par les espèces moléculaires ou atomiques étudiées. ⁽²⁾

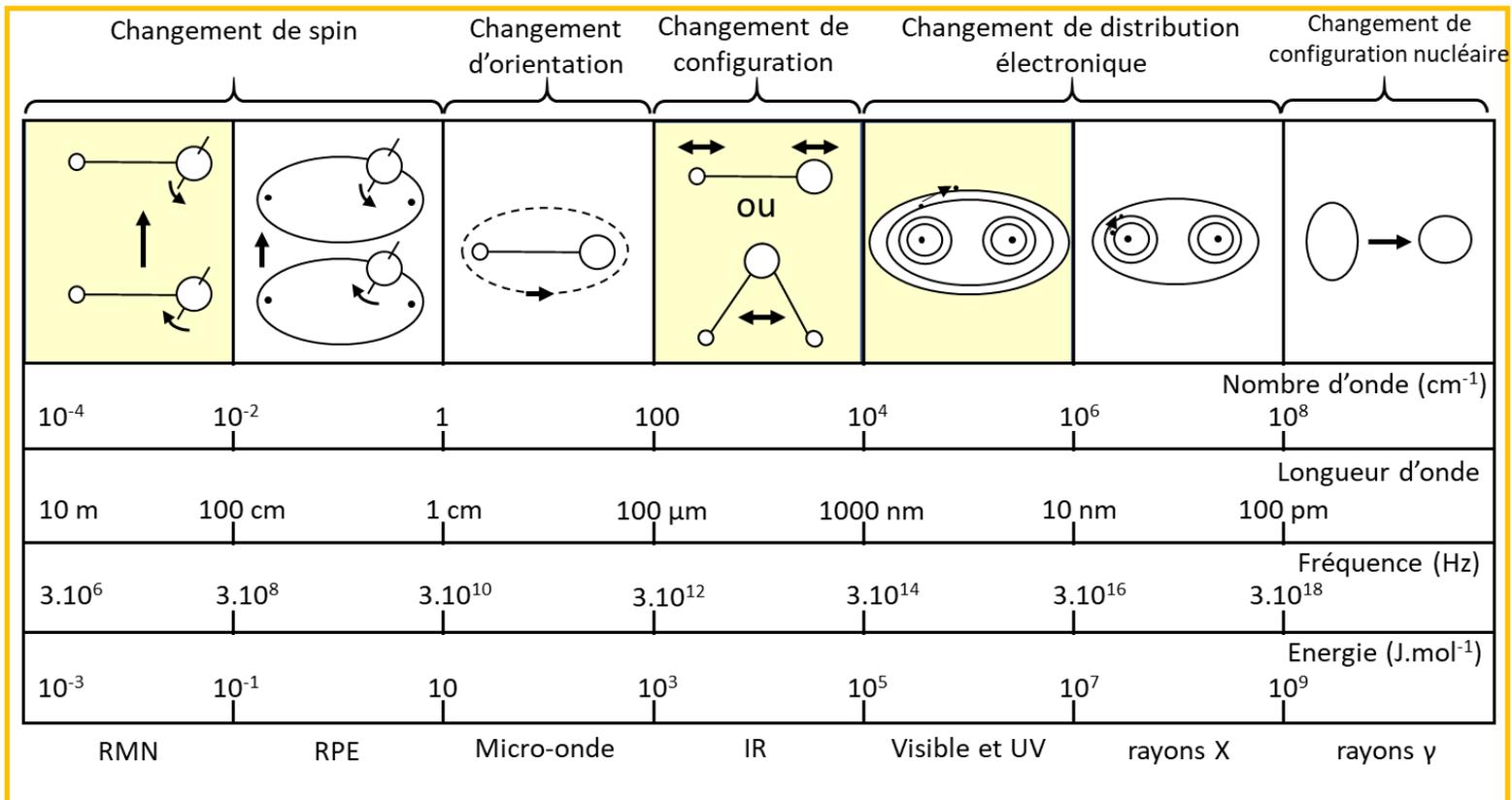
⁽¹⁾ <https://www.cnrtl.fr/definition/spectre>

⁽²⁾ Chimie analytique: Skoog, West, Holler, Crouch. De BOECK, 3^{ème} édition, ISBN: 9782804190712, Juin 2015

Notions générales des méthodes spectrales

Spectroscopie et spectrométrie

- **Optiques:** utilisent une onde lumineuse (spectrophoto~~photo~~métrie)
- De **radiofréquence:** utilisent la composante électromagnétique de l'onde (RMN, RPE)
- De **masse:** permet de mesurer la masse des composés



C.N. Banwell, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, 3rd edition, New York; McGraw-Hill 1983, P7



UE5C : Sciences Analytiques – Techniques spectrales



FACULTÉ
DE PHARMACIE

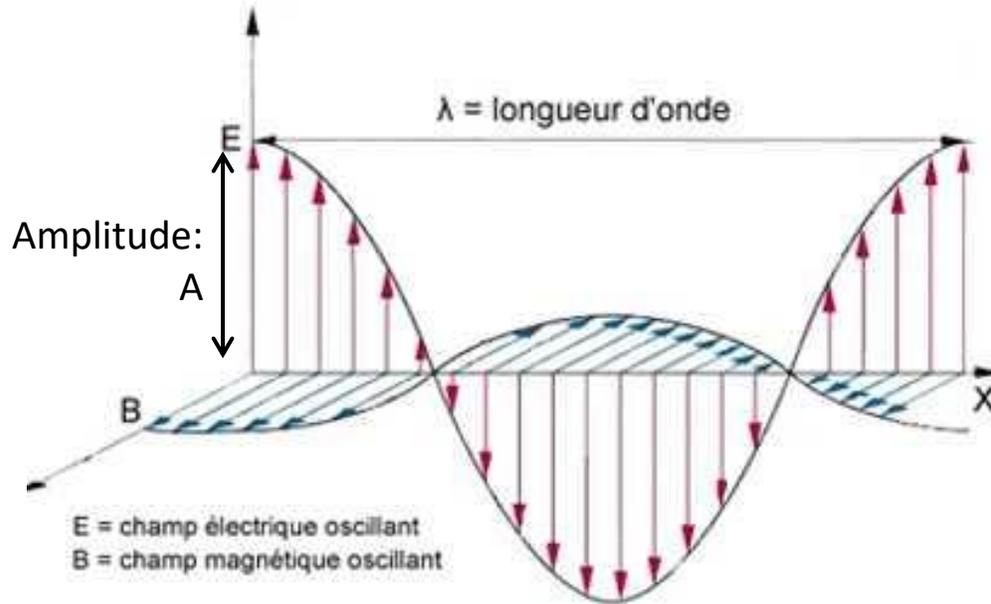
université
PARIS-SACLAY

Spectroscopies / spectrométries Optiques

Notions générales des méthodes spectrales

Propriétés du rayonnement électromagnétique

Propriétés des ondes



Longueur d'onde: distance entre deux maxima (nm) $\lambda = C \cdot p$

Vitesse de la lumière $C = 3,00 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1} = 3,00 \cdot 10^{10} \text{ cm.s}^{-1}$

Fréquence: nb. d'oscillations par seconde du vecteur champ électrique (Hz = s^{-1}):

$$\nu = C/\lambda$$

Période: le temps séparant le passage entre 2 maxima (s)

$$p = 1/\nu$$

Nombre d'onde $\bar{\nu}$ (cm^{-1}): une autre manière de décrire un rayonnement électromagnétique:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{C}$$

Nature corpusculaire de la lumière

* Un quantum désigne un grain en latin: au pluriel quanta

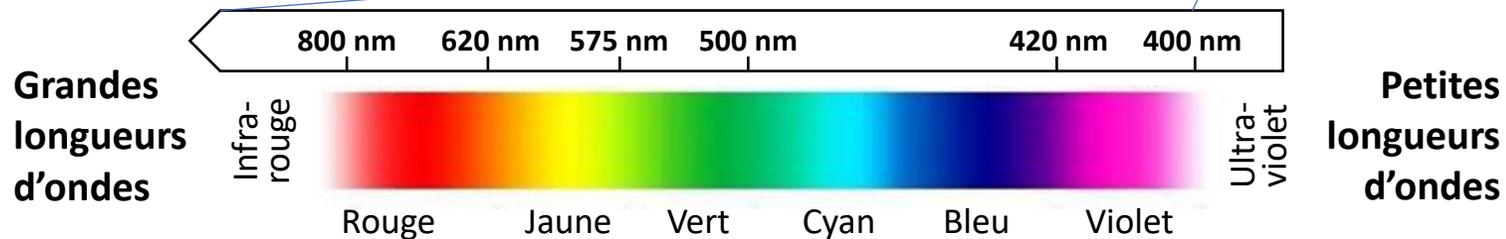
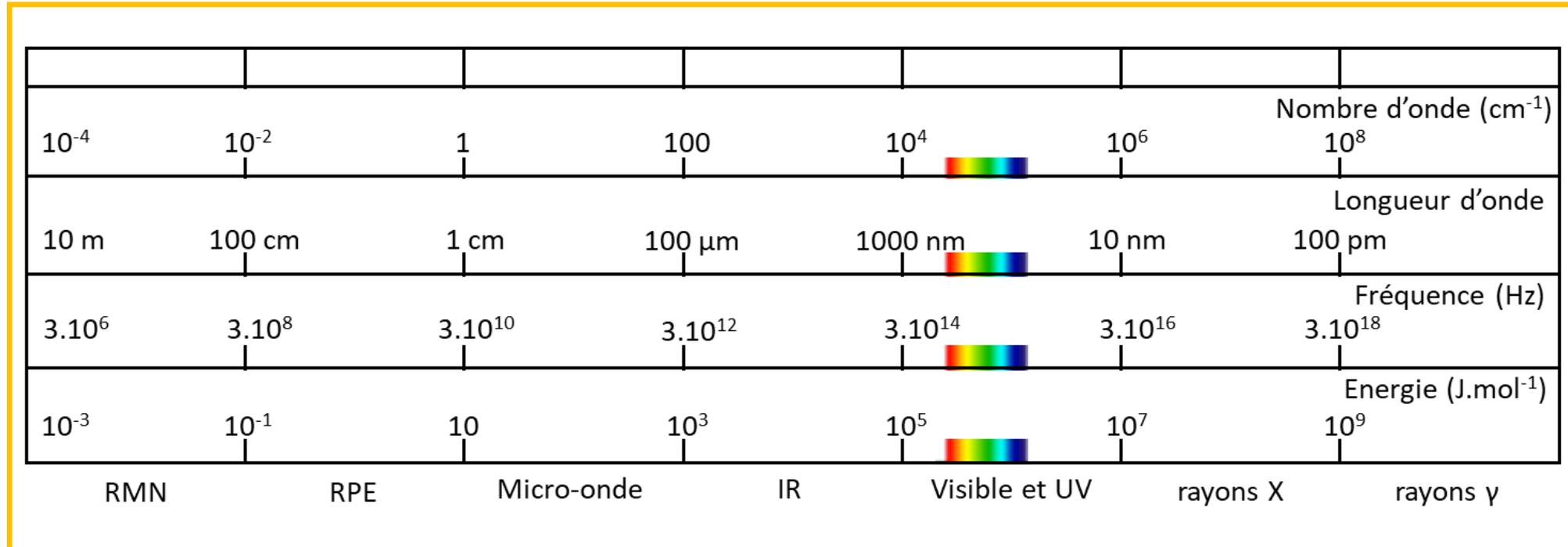
L'énergie d'un photon (ou quantum*) est liée à sa longueur d'onde, sa fréquence et son nombre d'onde

h : constante de Planck ($6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$)

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu}$$

Notions générales des méthodes spectrales

Gamme spectrale et énergie des photons



Spectroscopies optiques moléculaires

Niveaux énergétiques d'une molécule

Les mesures spectroscopiques utilisent l'interaction rayonnement-matière pour obtenir des informations sur un échantillon

Energie moléculaire:

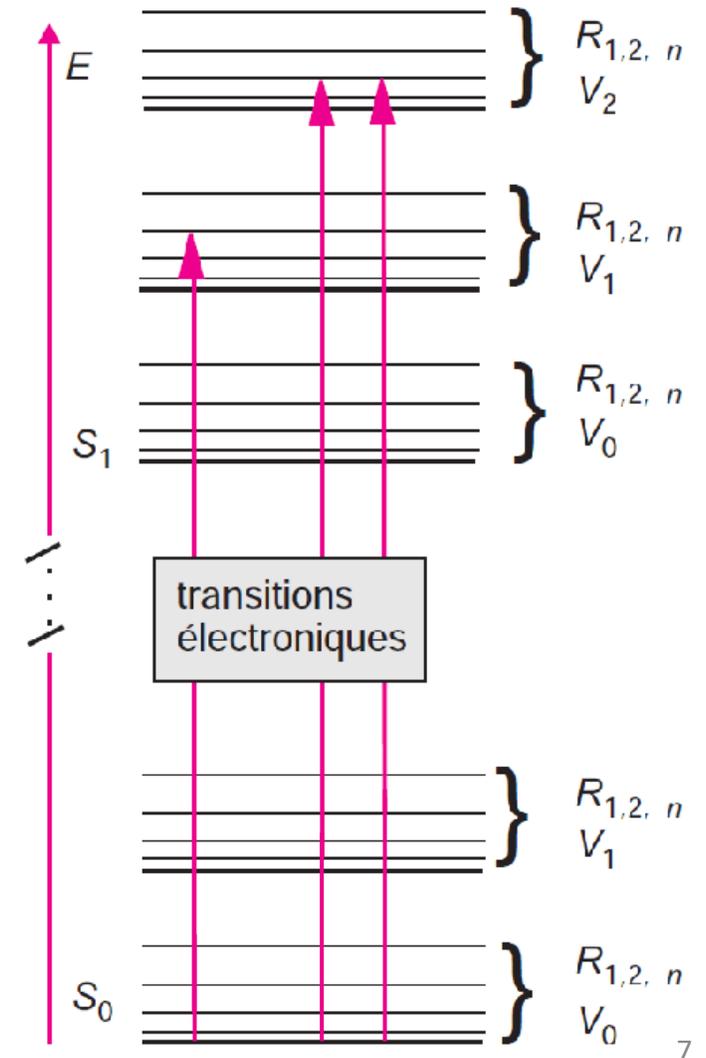
$$E_{\text{totale}} = E_{\text{électronique}} + E_{\text{vibrationnelle}} + E_{\text{rotationnelle}}$$

Niveaux quantifiés:

État fondamental -> état excité

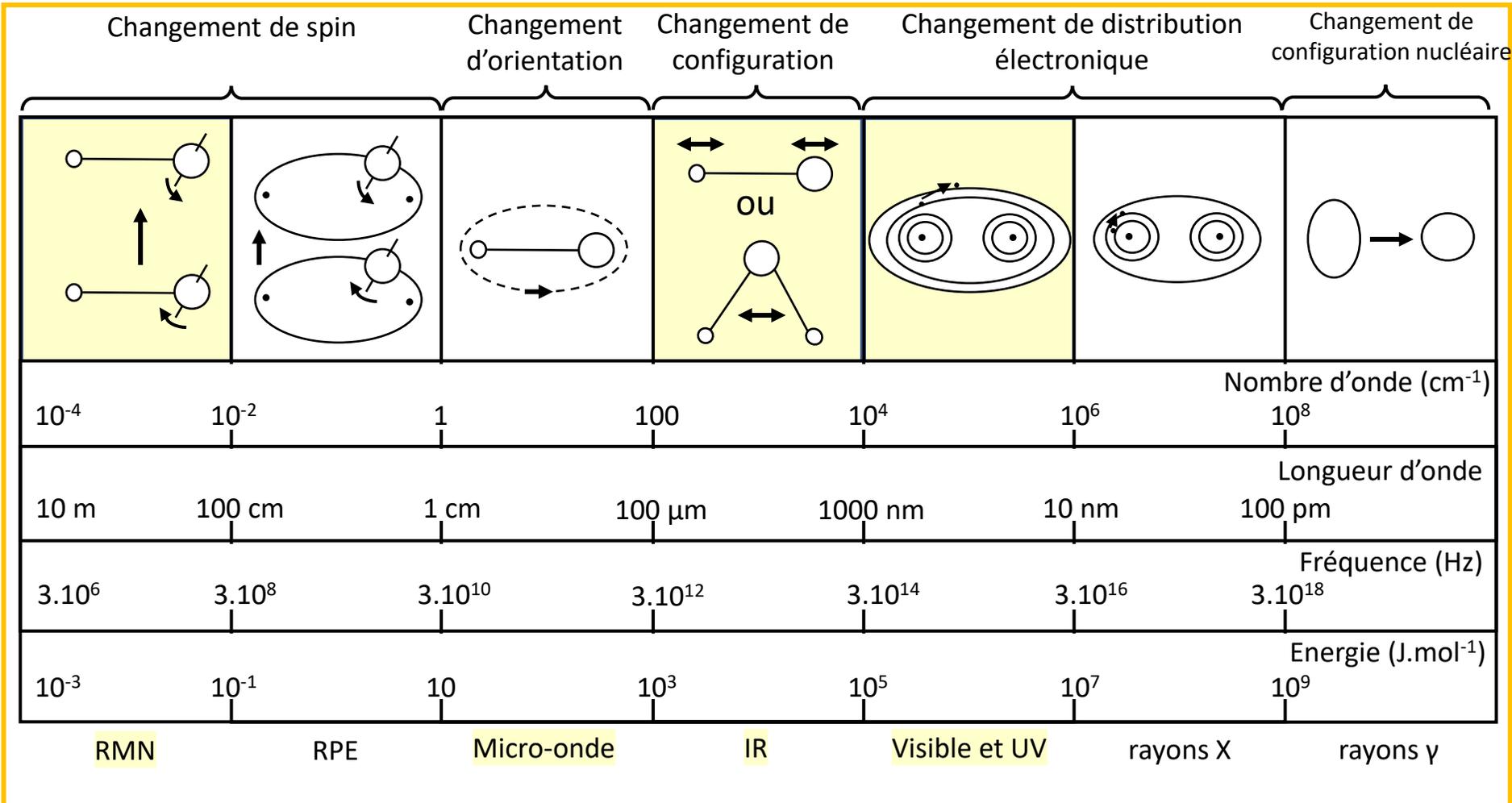
Chaque niveau électronique contient:

- Plusieurs sous-niveaux vibrationnels
- qui contiennent plusieurs sous-niveaux rotationnels



Spectroscopies optiques moléculaires

Interaction rayonnement / matière



Ondes radio: faible énergie
 → Résonance Magnétique Nucléaire

Micro-ondes:
 → rotation des molécules

Infra rouge:
 → déformation et élongation des liaisons interatomiques
 → Énergie de vibration

Visible (400-800nm) et ultraviolet (190-400 nm)
 → transitions électroniques