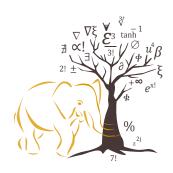
FACULTE

FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE DÉPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIÈRE

Module : Spectroscopie atomique et moléculaire Devoir à la maison

" Le hasard ne favorise que les esprits préparés ..." Louis Pasteur Chimiste et Physicien Français du XIX^e siècle



Il est demandé aux étudiants (es) de soigner la présentation. L'évaluation prend en considération la clarté des réponses

EXO 1 (8 pts)

On souhaite quantifier la concentration de deux composés A et B présents dans un mélange M. A cet effet, nous avons préparé des solutions de référence pour les composés A $(4.50\times10^{-3}~{\rm mol/L})$ et B $(4.50\times10^{-3}~{\rm mol/L})$ pris individuellement. Les absorbances ont été mesurées dans la gamme des longueurs d'onde 260 à 380 (nm). Les résultats de ces mesures spectrales sont regroupés dans le tableau ci-dessous :

Table 1 – Résultats des mesures

A_A^{ref} (u.a.)	A_B^{ref} (u.a.)	A_M (u.a.)
0.08	0.24	0.35
0.12	0.16	0.28
0.26	0.26	0.60
0.38	0.42	0.88
0.62	0.58	1.22
0.18	0.64	0.90
0.10	0.48	0.70
	0.08 0.12 0.26 0.38 0.62 0.18	$\begin{array}{c cccc} A_A & \text{(u.a.)} & A_B & \text{(u.a.)} \\ \hline 0.08 & 0.24 \\ 0.12 & 0.16 \\ 0.26 & 0.26 \\ 0.38 & 0.42 \\ 0.62 & 0.58 \\ 0.18 & 0.64 \\ \end{array}$

1. Démontrer la relation :

$$\underbrace{\left(\frac{A_M}{A_A^{ref}}\right)}_{Y} = \underbrace{\frac{C_B}{C_B^{ref}}}_{a} \times \underbrace{\left(\frac{A_B^{ref}}{A_A^{ref}}\right)}_{X} + \underbrace{\frac{C_A}{C_A^{ref}}}_{b} \tag{1}$$

- 2. Déterminer les paramètres de l'équation ci-dessus.
- 3. Calculer les concentrations des composés A et B dans le mélange.

On donne : la pente a et l'ordonnée à l'origine b sont déterminées à partir des formules :

$$a = \frac{n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \qquad b = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

EXO 2 (6 pts)

Nous souhaitons déterminer une courbe d'étalonnage avec cinq solutions d'acide acétyls -alicylique ayant les concentrations : 0.06 mg/mL, 0.08 mg/mL, 0.09 mg/mL, 0.11 mg/mL et 0.13 mg/mL. Le tableau ci-dessous regroupe les absorbances enregistrées à $\lambda = 274 \text{ nm}$.

Table 2 – Absorbances à $\lambda = 274 \, nm$

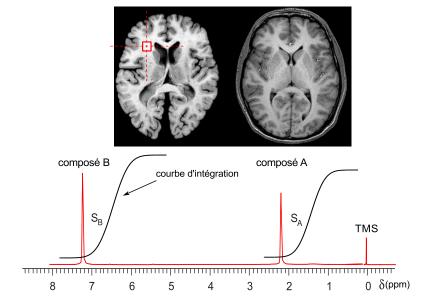
Concentration (mg/mL)	Absorbance $(u.a.)$
Étalon 1 (c_1)	0.295
Étalon 2 (c_2)	0.372
Étalon 3 (c_3)	0.418
Étalon 4 (c_4)	0.507
Étalon 5 (c_5)	0.598

- 1. Calculer la sensibilité de la méthode.
- 2. Calculer la limite de détection standard.
- 3. Calculer la limite de quantification standard.

On donne: $s_b = 1.15 \, 10^{-3} \, (u.a.)$

EXO 3 (6 pts)

La spectroscopie par résonance magnétique nucléaire, appliquée in vivo, permet de fournir des informations sur le métabolisme de cellules constituant les tissus. Pour pratiquer une autopsie, le médecin légiste a fait faire une spectroscopie RMN sur un cerveau Post mortem.



concepts théoriques développés lors des séances de cours.

Pour cela, le médecin légiste a prélevé un échantillon de matière blanche cérébrale (le cadre en rouge exprime le volume d'intérêt, voir la figure). L'échantillon prélevé a été dilué dans CDCl3 comme solvant. On observe sur le spectre RMN du proton de cet échantillon, deux signaux (deux résonances) à $\delta = 2.1\,ppm$ et à $\delta = 7.3\,ppm$, par rapport au TMS (signal de référence).

- 1. Montrer pourquoi ces deux composés n'ont pas la même valeur du déplacement chimique.
- 2. Calculer les concentrations (C_A et C_B) exprimées en pourcentages massiques de A et de B. Tenant compte du fait que le rapport des aires des deux signaux est représentatif du rapport n_A/n_B des nombres respectifs de molécules de A et de B.

On donne : $S_A = 111$ et $S_B = 153$ (unités arbitraires), $M_A = 58$ et $M_B = 78$ g/mol.

Fait, Le 30. 01. 2021

