Rotation de molécules biatomiques

On s'intéresse à la rotation de molécules biatomiques homo-nucléaires ou hétéro-nucléaires, et à la relation entre la température et les taux d'occupations des états de différentes énergies.

Les états et énergies

Cf. le cours de mécanique quantique pour l'écriture et la résolution de l'équation de Schrödinger.

- Discuter de ces différentes façons d'écrire les niveaux d'énergie :

$E_{rot} = J(J+1) \frac{h^2}{8 \pi^2 I} \ \ \ \ \ J=0,1,2,... \,$

$E_{rot} = J(J+1) \frac{\hbar^2}{2 \mu r_{0}^2} \ \ \ \ \ J=0,1,2,... \,$

$E_{rot} = J(J+1) k_B \theta_{rot} \ \ \ \ \ J=0,1,2,... \,$

$E_{rot} = J(J+1) h c B_{rot} \ \ \ \ \ J=0,1,2,... \,$

Plusieurs états correspondent à un même niveau d'énergie. La dégénérescence est liée au nombre quantique de rotation : $g = 2J + 1$

- Expliciter la définition du moment d'inertie et la relier aux paramètres mécaniques d'une molécule biatomique.

Propriétés thermodynamiques

Les propriétés thermodynamique peuvent se déduire en utilisant le cadre de l'ensemble canonique.

- Écrire la somme d'état pour une mole de rotateurs, montrer comment le calcul peut être simplifié, avec quelle hypothèse ?
- Expliciter le calcul de $Z_{I rot}$
- Proposer des expressions pour (en ce qui concerne la rotation) l'énergie libre de Helmholtz, l'entropie, l'énergie et la capacité calorifique

Discuter de l'applicabilité des expressions proposées pour les molécules suivantes (la distance de liaison est donnée entre parenthèses) :

- HCl (127.4 pm)
- CO (112.8 pm)
- H_2, HD, D_2 (73 pm)
- O_2, $O_{16}O_{18}$ (121 pm)

Molécules homo- et hétéro-nucléaires : quelle différence ?

From:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/ - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:rotation_molecules_biatomiques?rev=1395735801

Last update: **2014/03/25 09:23**