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 : $g = 2J + 1$, car un second nombre quantique m est tel que $-J \leq m \leq J$

- 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)

Distributions des états

Envisager des molécules biatomiques dans des conditions de température particulières, et esquisser une liste des niveaux, contributions à la somme d'état, distribution des niveaux, et en donner une représentation :

- du dihydrogène à 300 K
- du dioxygène à 300 K
- une molécule et température telle que $T = 2 \theta_{rot} / ln(2)$; Dans ces conditions particulières,
    - donner le rapport entre les probabilités des états $J=0 ,m=0$ et $J=5 ,m=3$
    - donner le rapport entre les probabilités d'être au niveau 0 et $30 k_B \theta_{rot}$
    - dresser la liste pour les 6 premiers niveaux pour en déduire les termes de la somme d'état, l'énergie la plus probable, l'état le plus probable. Analyser la valeur de la somme d'état par rapport à l'approximation “haute température”. Est-ce un problème de n'avoir considéré que 6 niveaux ?

Analyse du spectre de rotation Raman du dioxygène

Cette analyse, dans son principe, permet de mesurer à distance la température de l'échantillon de gaz étudié, ainsi que la longueur de la liaison atomique !

Le spectre de rotation en spectroscopie Raman du dioxygène O_2 révèle des transitions particulières, pour lesquelles $\Delta J \pm 2$. Pour d'autres raisons, liées à la symétrie et l'indiscernabilité des atomes, les niveaux de rotation occupés sont les niveaux J impairs.

- Exprimer ΔE, et l'expliciter pour utiliser des mesures spectroscopique en nombres d'ondes.

Observations :

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=1395738658

Last update: **2014/03/25 10:10**