

Spectres de rotation-vibration de molécules biatomiques

Rappels sur les comportements isolés de vibration et rotation

Vibration :

- niveaux d'énergie régulièrement espacés de dégénérescence $g=1$
- température caractéristique grande (par rapport à la température ambiante), par exemple 2000 - 3000 K

Rotation :

- niveaux $E_{\text{rot}} = J(J+1) k_B \theta_{\text{rot}}$ $J=0,1,2,\dots$, dégénérescence $g = 2J + 1$
- température caractéristique petite (par rapport à la température ambiante), par exemple 1 - 10 K

Spectre IR de HCl

Spectre du chlorure d'hydrogène mesuré sur un FTIR BRUKER IFS-113v à l'UMONS en 1990 dans une cellule à gaz

Données sources : https://github.com/didiervillers/physical-chemistry/tree/master/IR_spectra_biatomic

Questionnement :

- Expliquer ce que représente le spectre mesuré (axes, unités, valeurs indiquées,...)
- Si on considère le spectre précis, expliquer :
 - la multitude de pics
 - leur répartition en deux parties à plus petit et plus grand nombre d'ondes
 - leur répartition en deux familles de pics très proches les uns des autres
 - l'évolution générale des amplitudes de ces pics
- Quelles grandeurs mécaniques peut-on obtenir en analysant les raies.
 - Proposer une méthode pour obtenir ces valeurs.
 - Calculer ces valeurs, au moins approximativement.
- Schématiser les spectres équivalents qui auraient été mesurés à une température plus faible et à une température plus élevée.
 - Comment pourrait-on démontrer que le spectre a été mesuré à température ambiante ?
- Discuter de la variation de la longueur de liaison avec le niveau de vibration, et en particulier de la validité du modèle harmonique pour la liaison d'une molécule biatomique. Considérer le [Potentiel de Morse](#), et l'approximation harmonique.
 - Expliciter les différences $(R_j - P_j)$ et $(R_j - P_{j+2})$

Spectre IR du CO

Spectre du monoxyde de carbone mesuré sur un FTIR BRUKER IFS-113v à l'UMONS en 1990 dans une cellule à gaz

Question : peut-on, dans l'article suivant, vérifier que la mesure présentée à la figure 8 a été effectivement effectuée à $T = 50^{\circ}\text{C}$?

- [Misconceptions in the Exploding Flask Demonstration Resolved through Students' Critical Thinking](#) Rick Spierenburg, Leon Jacobse, Iris de Bruin, Daan J. van den Bos, Dominique M. Vis, and Ludo B. F. Juurlink, J. Chem. Educ., 2017, 94 (9), pp 1209–1216 DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00281

Références

- http://en.wikipedia.org/wiki/Rotational-vibrational_spectroscopy
- [Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules](#), ChemWiki UC Davis
- http://rkt.chem.ox.ac.uk/tutorials/rotation/rot_spectra.html, avec des applets de simulation
- [Simple Acid Vapor Method for Production of HCl and DCI Gas for IR Spectroscopy](#) Han Jung Park, Neethu M. Kurien, and Thomas R. Rybol, J. Chem. Educ., 2018, 95 (12), pp 2293–2297 DOI: 10.1021/acs.jchemed.8b00431
- [A Simplified Technique for the Collection of an HCl/DCI Gas Mixture](#) Nicholas Bigham, Michael Denchy, and Jeb Kegerreis, J. Chem. Educ., 2018, 95 (12), pp 2298–2300 DOI: 10.1021/acs.jchemed.8b00702
- [Total Chemical Footprint of an Experiment: A Systems Thinking Approach to Teaching Rovibrational Spectroscopy](#) Paul D. Cooper, Jacob Walser, J. Chem. Educ. 2019, 96(12), 2947-2951 DOI: 10.1021/acs.jchemed.9b00405
- [Why does band heads arise in vibrational-rotational spectra?](#)

Autres spectres, pour comparaison

- <http://inside.mines.edu/~dwu/classes/CH351/CH351-F04/lab/lab3.html> : HCl
- <http://ed.augie.edu/~smkessle/HClconcl.htm> : HCl, HBr, DCI
- <http://ed.augie.edu/~wjdelfs/302sE6.html> : HCl
- <http://www.owl.net.rice.edu/~dodds/Files332/COspectroscopy.pdf> & <http://www.owl.net.rice.edu/~dodds/valeurs pour le CO>
- [High Resolution Spectra of Carbon Monoxide, Propane and Ammonia for Atmospheric Remote Sensing](#)

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

Permanent link: https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:rotation_vibration_molecules_biatomiques

Last update: 2022/05/20 14:39



