

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](#)

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 ?

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](#)

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

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, DCl
- <http://ed.augie.edu/~wjdelfs/302sE6.html> : HCl
- <http://www.owl.net.rice.edu/~dodds/Files332/COspectroscopy.pdf> : CO (valeurs)

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?rev=1396264023

Last update: **2014/03/31 13:07**

