

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 ?
- 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

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.owlnet.rice.edu/~dodds/Files332/COspectroscopy.pdf> & <http://www.owlnet.rice.edu/~dodds/valeurs pour le CO>

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=1457513423

Last update: 2016/03/09 09:50

