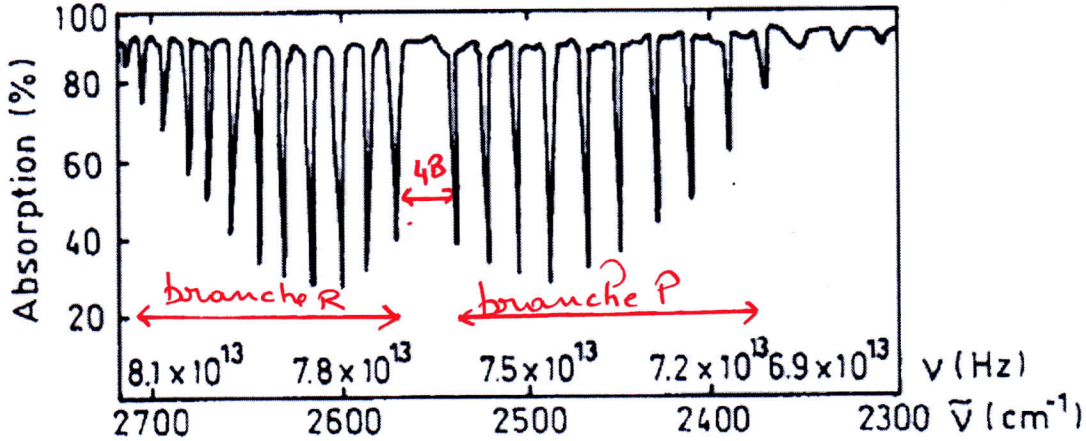


Solution de l'exercice N° 5

(Série de TD N° 4 : Spectroscopie Infrarouge)

Exercice N°5



1) Il s'agit du spectre rotation-vibration de la molécule HCl.

2) Le spectre est constitué d'un gap de largeur = 4B. Ce gap correspond à la transition interdite :

$$v=0, J=0 \rightarrow v=1, J=0$$

En plus, ce spectre comporte 2 branches R et P. Ces 2 branches sont constituées de raies équidistantes, la distance entre 2 raies consécutives = 2B

B : cte de rotation.

3/ Règle de sélection :

$$\Delta v = 1$$

J : nombre quantique de rotation

$$\Delta J = \pm 1$$

v : " " " " " vibration

4/ L'énergie totale de la molécule :

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{vibration}} + E_{\text{rotation}} \quad (\text{puisque c'est un gaz})$$

$$E_{\text{tot}} = E_v + E_R$$

$$E_{\text{tot}} = h\nu_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) + hcB J(J+1)$$

h : cte de Planck

c : vitesse de la lumière

ν_0 : fréquence de vibration à l'équilibre

B : cte de rotation

v : nombre quantique de vibration (entier ≥ 0)

J : " " " rotation "

le terme spectral

$$\bar{\nu} = \frac{E_{\text{rot}}}{hc} = \bar{\nu}_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) + B \bar{\nu} (\bar{\nu} + 1)$$

$\bar{\nu}_0$: nombre d'onde de vibration à l'équilibre

5/ à partir du graphique le gap = $4B = 0.8 \text{ cm}^{-1}$
échelle:

$$\begin{array}{l} 2.5 \text{ cm}^{-1} \longrightarrow 100 \text{ cm}^{-1} \\ 0.8 \text{ cm}^{-1} \longrightarrow x \end{array} \quad \Rightarrow \quad x = 4B = 32 \text{ cm}^{-1} \Rightarrow B = 8 \text{ cm}^{-1}$$

$$B = 800 \text{ m}^{-1}$$

Calcul du moment d'inertie:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 c I}$$

$$\Rightarrow I = \frac{h}{8\pi^2 c B} = 3.468 \cdot 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 = I$$

Calcul de la longueur de liaison r_0 (Å):

$$I = \mu r_0^2 \Rightarrow r_0 = \sqrt{\frac{I}{\mu}} \quad \text{avec } \mu = \text{la masse réduite de la molécule}$$

$$\mu = \frac{m_H m_{Cl}}{(m_H + m_{Cl}) N_A} = 1.614 \cdot 10^{-24} \text{ g} = 1.614 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\Rightarrow r_0 = 1.46 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1.46 \text{ \AA}$$

6/ Calcul de $\bar{\nu}_0$ (cm^{-1}):

on sait que la 1^{ère} branche R se situe à (voir le cours)

$$\Delta \bar{\nu} = \bar{\nu}_0 + 2B$$

d'après le graphique cette 1^{ère} raie se situe à 2540 cm^{-1}

$$\Rightarrow \Delta \bar{\nu} = 2540 \text{ cm}^{-1} = \bar{\nu}_0 + 2B$$

$$\Rightarrow \bar{\nu}_0 = 2524 \text{ cm}^{-1}$$

Calcul de la constante de force k :

$$\bar{\nu}_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow k = (\bar{\nu}_0 2\pi c)^2 \mu \Rightarrow k = 364.95 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$$