

Exercice 1

1. Calculer les valeurs d'énergie, exprimées en Joule, correspondant aux niveaux de vibration $v = 0, 1, 2,$ et 3 de la molécule HF (fluorure d'hydrogène).
2. Quelle est la valeur de l'élongation maximale de la liaison pour l'état fondamental ($v=0$) ?
La comparer à la valeur de la longueur de liaison.

$$k = 966 \text{ N/m}$$

$$r_0 = 0,0917 \text{ nm (distance interatomique)}$$

Exercice 2

1. Calculer la valeur de la constante de force pour la vibration d'élongation de la liaison C=O produisant une absorption à 1715 cm^{-1} .
2. Même question pour la vibration de la liaison simple C-O produisant une absorption à 1050 cm^{-1} .

Exercice 3

On considère une vibration d'élongation C-H donnant lieu à une absorption à 3100 cm^{-1} .

- Quelle sera la valeur du nombre d'onde de l'absorption correspondante de son homologue deutérié? (On considère que la valeur de la constante de force est la même dans les deux cas).

Exercice 4

Un monoxyde diatomique a une énergie de vibration située à 1876 cm^{-1} et une constante de force de 1550 N/m . Identifiez la molécule en question.

Exercice 5

Attribuer les nombres d'onde aux liaisons qui leur conviennent.

Nombres d'onde : 450 cm^{-1} ; 1000 cm^{-1} ; 1100 cm^{-1} ; 3030 cm^{-1} ; 750 cm^{-1} ; 600 cm^{-1}

Liaisons : C-H; C-I; C-C; C-F; C-Br; C-Cl

Solution série 5

EX. 1

$$1. E_v = h \nu_{\text{vib}} \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad ; \quad \nu_{\text{vib}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$k = 966 \text{ N/m}$$

$$\mu = \frac{m_H \times m_F}{m_H + m_F} \\ = \frac{M_H \times M_F}{M_H + M_F} \times \frac{10^{-3}}{N}$$

سریع

$$M_H = 1 \text{ g/mole} \equiv 6,023 \times 10^{23} \text{ atomes de H present 1 g.}$$

$$m_H = \frac{M_H}{N} \text{ (en g)} \quad \text{1 atome de H pèse ?}$$

$$m_H = \frac{M_H}{N} \times 10^{-3} \text{ (en kg)}$$

A.N

$$\mu_{\text{H-F}} = 1,578 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\nu_{\text{vib}} = \frac{1}{2 \times 3,14} \sqrt{\frac{966}{1,578 \times 10^{-27}}} = 1,245 \times 10^{14} \text{ Hz.}$$

Donc :

$$E_v = 8,249 \times 10^{-20} \left(v + \frac{1}{2} \right) \text{ [Joule]}$$

v	0	1	2	3
E_v (Joule)	$4,125 \times 10^{-20}$	$1,237 \times 10^{-19}$	$2,062 \times 10^{-19}$	$2,887 \times 10^{-19}$

2) Etat fondamental : $v=0 \rightarrow E_0 = 4,125 \times 10^{-20}$ Joule

$$E_0 = \frac{1}{2} k (r_{\text{max}} - r_0)^2 \Rightarrow (r_{\text{max}} - r_0) = \sqrt{\frac{2E_0}{k}} = \sqrt{\frac{2 \times 4,125 \times 10^{-20}}{966}}$$

$$r_{\text{max}} - r_0 = 0,009 \text{ nm}$$

$$\text{comparaison : } \frac{r_{\text{max}} - r_0}{r_0} = \frac{0,009}{0,0917} = 0,1 \approx 10\%$$

Ex. 2

$$1. \bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow k = \mu (2\pi \bar{\nu} c)^2$$

$$\mu = \frac{m_c \times m_o}{m_c + m_o} \times \frac{10^{-3}}{N} = 1,14 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

$$k_{C=O} = 1190 \text{ N/m}$$

2. m chose

$$k_{C-O} = 446 \text{ N/m}$$

on remarque que:

$$k_{C=O} > k_{C-O}$$

c'est logique!

Ex. 3

$$\mu_{C-H} = \frac{m_c \times m_H}{m_c + m_H} \times \frac{10^{-3}}{N} = 1,53 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\Rightarrow k_{C-H} = \mu_{C-H} (2\pi c \bar{\nu})^2 = 523 \text{ N/m}$$

$$\mu_{C-D} = \frac{m_c \times m_D}{m_c + m_D} \times \frac{10^{-3}}{N} = 2,85 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

k est identique pour les deux cas, on en déduit que:

$$\bar{\nu}_{C-D} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = 2275 \text{ cm}^{-1}$$

on remarque que $\bar{\nu}_{C-H} > \bar{\nu}_{C-D}$ (effet de la masse)

$$3100 \text{ vs. } 2275$$

ط حنطة:

نك حط أن فرقا كتليا واحدا مسبب اختلافاً واضحاً بين $\bar{\nu}_{C-H}$ و $\bar{\nu}_{C-D}$

نقله من 3100 إلى 2275 cm^{-1} .

فائدة: "تصب الكتلة دوراً هاماً في تحديد ترددات الامتصاص"

Ex. 4

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow \bar{\nu}^2 = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \times \frac{k}{\mu} \Rightarrow \mu = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{k}{\bar{\nu}^2}$$

Un monoxyde diatomique : X-O

$$\mu_{X-O} = 2,815 \times 10^{-19} \times \frac{1550}{(187600)^2} ;$$

$$\mu_{X-O} = 1,2395 \times 10^{-26} \quad (\text{SI}) \quad \text{--- (1)}$$

$$\mu_{X-O} = \frac{M_X \times M_O}{M_X + M_O} \times \frac{10^{-3}}{N} \quad \text{--- (2)}$$

de (1) et (2) وبعد التبسيط

$$M_X = 13,98 \simeq 14$$

$M = 14 \Rightarrow M = N \Rightarrow X-O \equiv N-O$ et l'oxyde est **NO** (monoxyde d'azote).

Ex. 5

			$\bar{\nu}$
C-H	→	3030 cm^{-1}	→ 1
C-C	→	1100 cm^{-1}	→ 12
C-F	→	1000 cm^{-1}	→ 19
C-Cl	→	750 cm^{-1}	→ 35,5
C-Br	→	600 cm^{-1}	→ 80
C-I	→	450 cm^{-1}	→ 126

fin série 5.