

Série 2 : Exercices sur la spectroscopie IR

Exercice 1 :

Calculer le nombre d'onde en cm^{-1} des fonctions suivantes:

C–C ; C=O ; N=O ; C≡N;

Données : On suppose que les constantes des liaisons sont :

	C–C	C=O	N=O	C≡N
K 10^5 (dynes/cm)	5	18,4	15.3	15

Exercice 2

La résolution de l'équation de Schrödinger pour le rotateur rigide donne l'énergie rotationnelle E_J en joule pour la molécule diatomique C-O.

- Calculer les niveaux d'énergie rotationnelle en joule avec quatre chiffres significatifs pour $J = 1$ et $J = 2$.

Données : la longueur de la liaison 1,1283 Å.

Exercice 4

Dans l'acétone le niveau vibrationnel fondamental ($v = 0$) et le premier niveau vibrationnel excité ($v = 1$) avec une énergie de vibration de l'oscillateur C=O vibrant le long de l'axe de la liaison de l'ordre 20,5 KJ/mole.

- 1) Calculer la fréquence de la vibration de la liaison C=O ?
- 2) Déduire son nombre d'onde ?
- 3) Calculer la constante de force en dynes/cm de l'oscillateur C=O ?

Données : $c = 3 \times 10^{10}$ cm/s, $N_A = 6,023 \times 10^{23}$, $h = 6,6210^{-34}$ J/s.

Exercice 5

La distance N–O dans la molécule d'oxyde nitrique est de 115 pm.

- a. Calculez son moment d'inertie dans les systèmes C.G.S. et SI.
- b. Calculez l'énergie pour les niveaux de rotation $J = 1, 2, 3, 4$:
 - En ergs/molécule;
 - En cal/mole;
 - En joules/mole.
- c. Calculez, en nombre d'ondes, la fréquence de la raie d'absorption lorsque J passe de $0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 2$ et $2 \rightarrow 3$.

Données : 1 Joule = 10^7 erg = 0.23884 cal

Exercice 6

Calculer le degré d'insaturation des molécules suivantes : $\text{C}_5\text{H}_8, \text{C}_6\text{H}_{12}; \text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2, \text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2$.

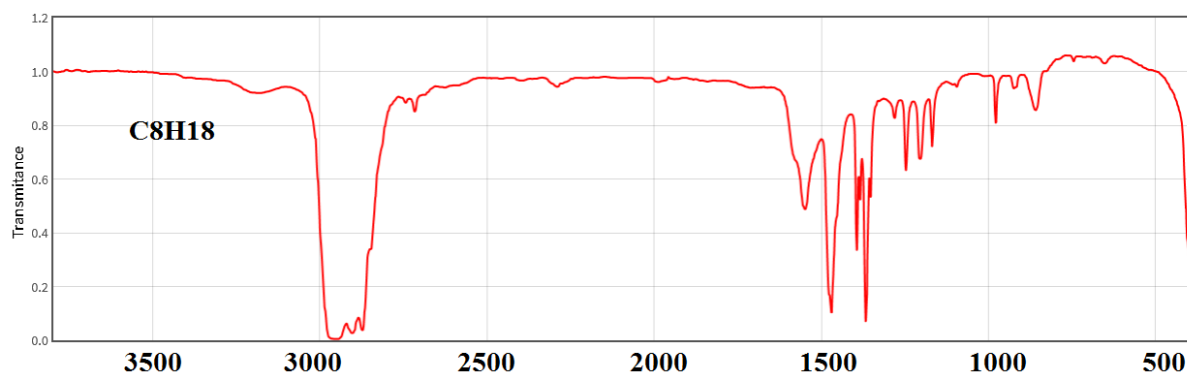
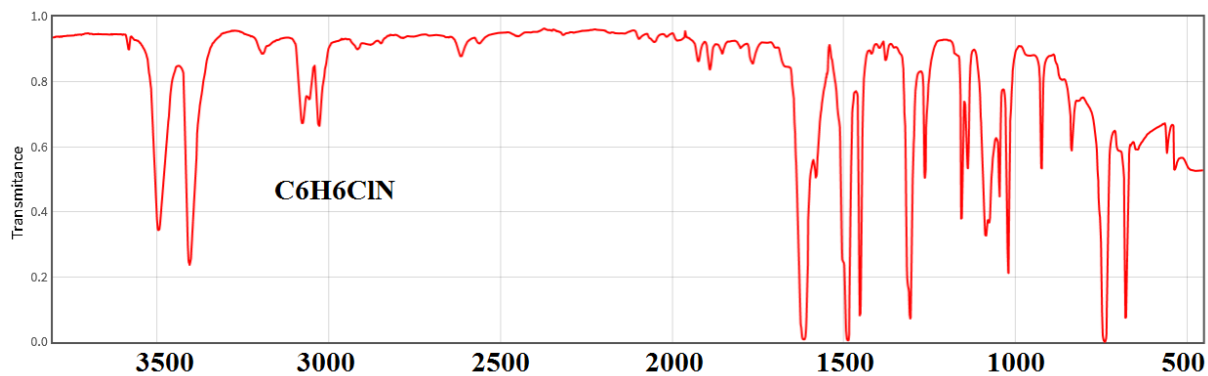
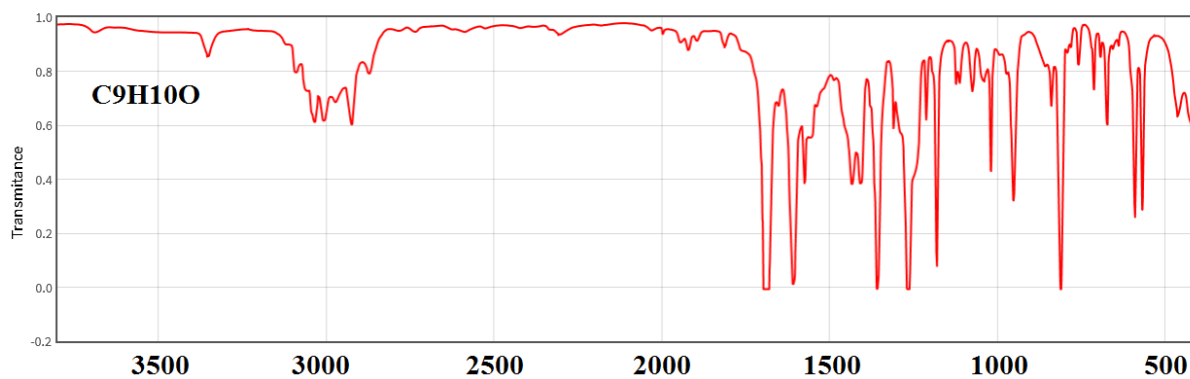
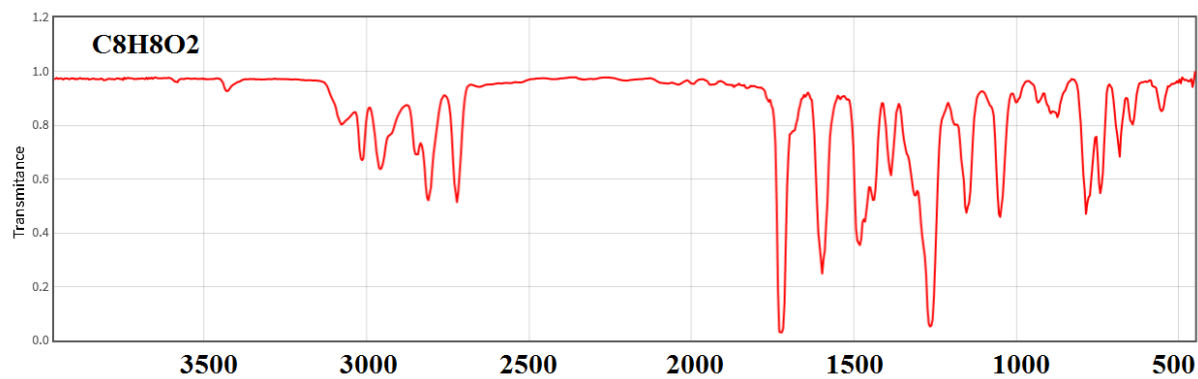
Représenter les molécules possibles ?

Série 2 : Exercices sur la spectroscopie IR

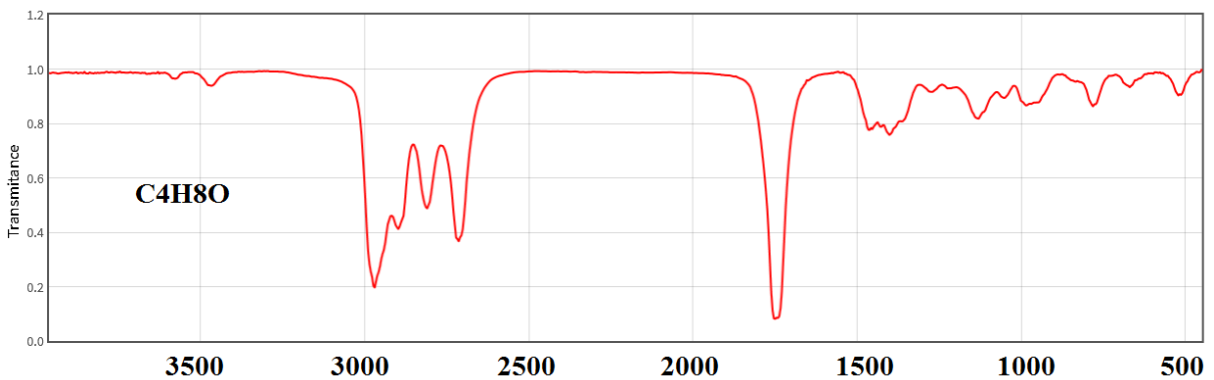
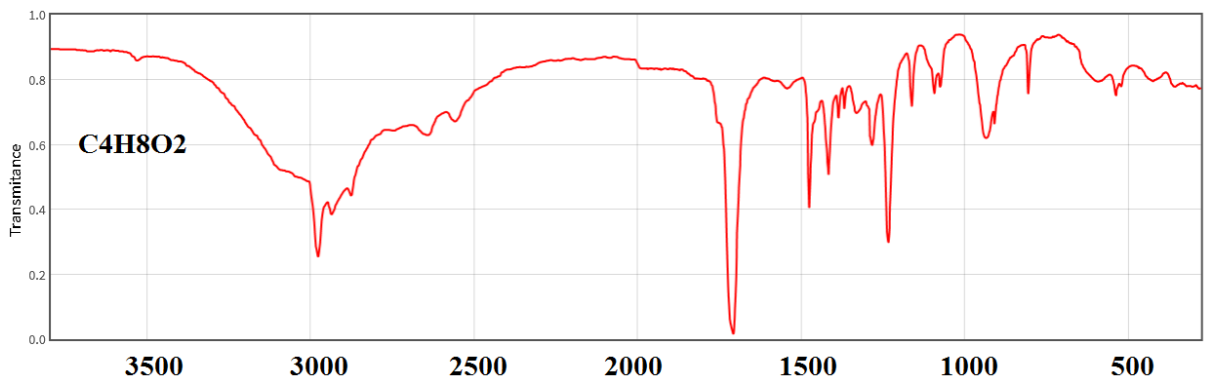
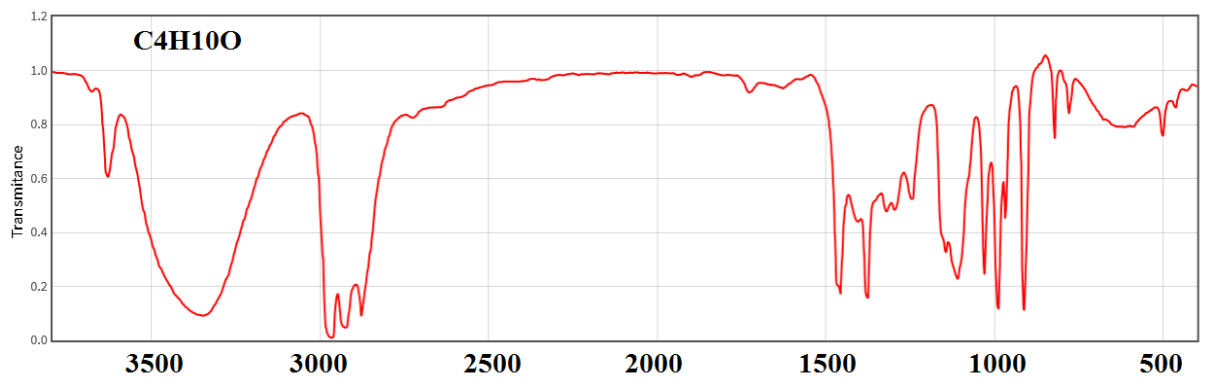
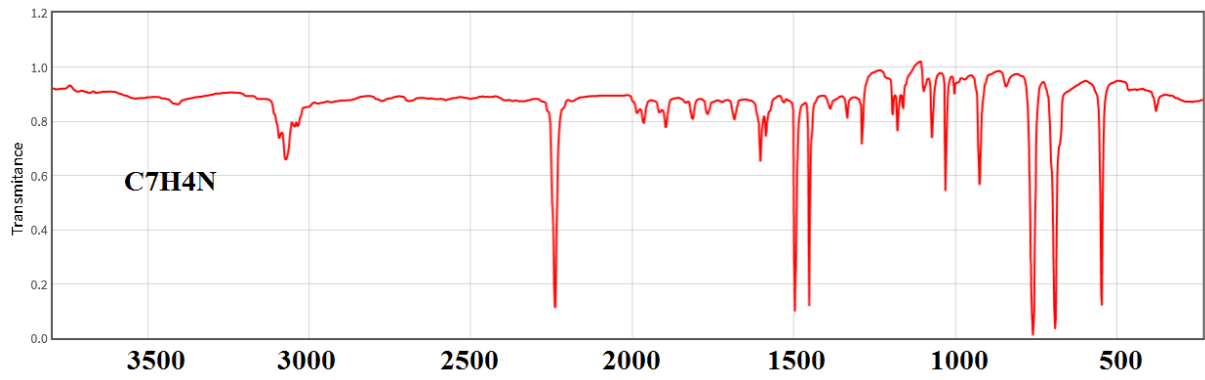
Exercice 7

Combien de modes de vibration existe-il dans les molécules suivantes : H_2O ; $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$; CCl_4 .

Exercice 6: Interpréter les courbes IR suivantes:



Série 2 : Exercices sur la spectroscopie IR



Série 2 : Exercices sur la spectroscopie IR

Liaison	Onde (cm-1)	Intensité
O-H	3650-3200	v (Forte et large)
	1430-1280	δ (Moyenne)
C-H	3300-2700	v (Moyenne)
	1420-1410	δ (Forte)
	995-985	δ (Forte)
N-H	3500-3300	v (Moyenne)
	1690-1640	δ (Forte)
C≡N	2260-2220	v (Moyenne)
C≡C	2260-2100	v (Faible-moyenne)
C=C	1680-1600	v (Moyenne)
C=N	1650-1550	v (Moyenne)
C=O	1780-1650	v (Forte)
C-N	1350-1020	v (Forte)
C-O	1250-1050	v (Forte)
C-C	1180-1080	v (Moyenne-faible)

BENZENES

Monosubstituted

Disubstituted

ortho

meta

para

Trisubstituted

1,2,4

1,2,3

1,3,5

combination bands

