

TD Spectre de vibration

Série N°3

Exercice – 1

Le spectre de rotation-vibration de l'oxyde de carbone comporte dans le proche infrarouge une bande intense dans la région de $2100\text{-}2200\text{ cm}^{-1}$. Avec un appareil de basse résolution on obtient la série de raies suivantes : $2124, 2128, 2132, 2136, 2140, 2148, 2152, 2156, 2160\text{ cm}^{-1}$.

- a- Déterminez le moment d'inertie, la distance internucléaire et la fréquence de vibration de la molécule CO.
- b- Déterminez la valeur de la constante de distorsion centrifuge de la même molécule.

Exercice – 2

Le spectre de vibration de la molécule HCl est composé d'une bande très intense (bande fondamentale) située à $2885,9\text{ cm}^{-1}$, et d'un certain nombre de bande faiblement intenses situées à $5668,0\text{ cm}^{-1}$, $8346,9\text{ cm}^{-1}$, $10923,1\text{ cm}^{-1}$ et $13396,5\text{ cm}^{-1}$.

1. Montrer que l'utilisation du modèle de l'oscillateur harmonique ne permet pas d'interpréter ce spectre .

Indexer chacune des bandes du spectre dans le cadre du modèle de l'oscillateur anharmonique .

2. L'expression de l'énergie (exprimée en cm^{-1}) du niveau vibrationnel V , pour un oscillateur anharmonique étant donnée par :

$$\bar{E}_V = \left(V + \frac{1}{2}\right) \bar{\nu}_e - \bar{\nu}_e x_e \left(V + \frac{1}{2}\right)^2$$

Calculer $\bar{\nu}_e$ et la constante d'anharmonicité.

3. L'énergie de la dissociation de la molécule à l'équilibre , peut être estimée par la formule de Mors $D_e = \frac{hc\bar{\nu}_e^2}{4\bar{\nu}_e x_e}$. L'énergie D_0 de la liaison est égale à $D_0 = D_e - E_0$, E_0 étant l'énergie de l'état fondamentale de vibration .

Calculer D_e et D_0 en eV.

4. Déterminer l'ordre de grandeur du nombre quantique V_1 du dernier niveau de vibration de la molécule (avant sa dissociation).

