

# LP n°28 : Spectroscopie IR. Notions sur la théorie classique et quantique des vibrations dans l'IR ; spectres de raies et spectres de bandes ; principes des spectromètres IR. (BTS chimiste)

## Prérequis :

- Mécanique classique
- Description quantique de l'atome
- Ondes électromagnétiques

## Bibliographie :

- Atkins
- Skoog instrumental
- Hollas
- Rouessac

**Introduction :** *Expérience* : KMnO<sub>4</sub> spectroscopie à réseau, amorçage de l'analogie UV-IR. Spectroscopie : interaction onde-matière. Spectre électromagnétique *Atkins p 244 Hollas p 35*

## I Étude de molécules diatomiques

### 1 Modèle classique de la liaison chimique

Modèle 1D pour une molécule diatomique, écriture des équations, intérêt de l'approximation harmonique *Atkins p 453*. Mécanique pour un système de deux points, apparition de la masse réduite, d'une fréquence caractéristique *Expérience* : masse oscillante au bout d'un ressort *Atkins p 454* règle de sélection sur le moment dipolaire. Analogie entre champ exciteur / GBF, moment dipolaire / longueur de liaison. Loi de Hooke. *Atkins p 45 Hollas p 133*

○ En pratique, on a un spectre ou on voit des transitions pour des fréquences données. *Hollas p 131*

### 2 Modèle quantique

Quantification des fréquences pour lesquelles il y a résonance.

#### a Spectre de vibration

*Hollas p 21* résonance pour transition. Le champ incident excite à la bonne fréquence, analogie avec le permanganate. Notion de résonance. Règle de sélection sur  $\nu$  *Hollas p 122*

○ domaine d'énergie en jeu on fait non seulement des transitions rotationnelles mais aussi des transition rotationnelles

#### b Spectre de rovibration

*Hollas p 95-130* règle de sélection, analogie avec la méca classique :  $E = \frac{1}{2}J\omega^2$  Explication des différents types de transition, expliquer que l'on zoom sur le pic principal. Explication de B, du modèle de rotateur rigide, parler rapidement de la contradiction apparente que l'on peut corriger. Avec B on remonte à R<sub>e</sub>. Exemple dans le *Hollas p 95* pour CO. Parler de branche P,Q,R

○ Diatomique, trop facile, en pratique, plus d'atomes.

## II Molécules polyatomiques

### 1 Complexité du problème

*Atkins p 460* Pour une molécule polyatomique : beaucoup plus de manière de vibrer, 3N degrés de liberté. *Hollas p 136* Un groupe d'atome peut résonner à une fréquence particulière. Intérêt du référentiel barycentrique. Définition d'un MNV *Atkins p 461*

### 2 Modes normaux de vibration

Décompte des MNV *Skoog 387* Application à CO<sub>2</sub>. Spectre de l'air *Skoog p 388*

○ L'appareillage doit tenir compte des espèces présentes dans l'air

## III Appareillage *Skoog instrumental*

### 1 Échantillon

*Skoog instrumental p 407* Domaine de transparence de KBr etc.. KBr hygroscopique.

### 2 Source

*Skoog instru p 389* Filament de Nernst.

○ La source fournit une lumière qu'il faut détecter

### 3 Détection

*Skoog instrumental p 390*

○ On a un phénomène de résonance pour une certaine fréquence

### 4 Étude fréquentielle

Monochromateur ou TF *Skoog instrumental p 392-399*, différence de prix, de coût etc..

**Conclusion :** Utilisation en chimie organique, Qualitatif aussi bien que quantitatif, coût des appareils qui diminue, utilisé pour détecter des molécules dans l'espace. Astrophysique *Hollas p 104*. Doppler : Hollas Rotateur et B *Hollas p 95*