

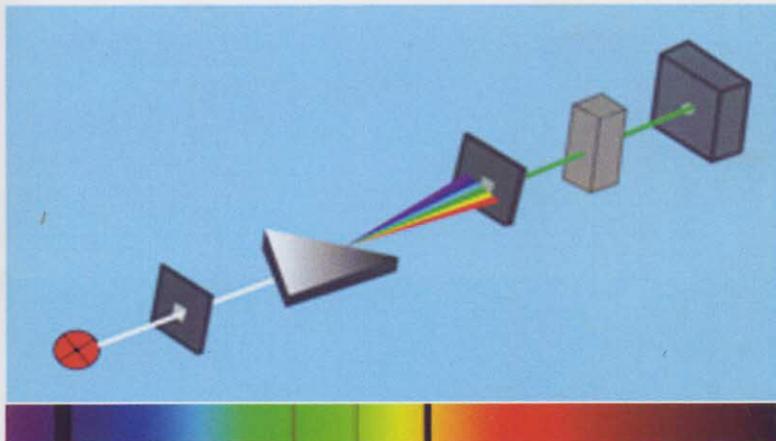
L M D/Ingénierie

SPECTROSCOPIE

ATOMIQUE et MOLECULAIRE

Dr.Lateffa BABA AHMED ROSTANE
Pr. Abdellatif BABA AHMED

COURS
EXERCICES CORRIGES



Spécialités : Physique, Chimie et Biomédicale

Licence, Master et Recherche



Table des matières

TABLE DES MATIERES	5
INTRODUCTION	11
CHAPITRE 1 : GENERALITES SUR LA SPECTROSCOPIE	13
1- Introduction	14
2- Définition de la Spectroscopie	15
3- Généralités sur les spectres électromagnétiques	21
4- Etude de la loi d'absorption : Loi de Beer-Lambert	23
5- Représentation du spectre d'absorption	25
6- Principe d'un spectroscope	26
7- Approximation de Born Oppenheimer	29
8- Équation de Schrödinger du mouvement des noyaux	33
Exercices	36
Solutions des Exercices	38
CHAPITRE 2 : SPECTROSCOPIE ELECTRONIQUE	47
I Spectroscopie atomique	48
1- Introduction	48
2- Etude du spectre de l'atome d'hydrogène	48
3- Spectroscopie des atomes alcalins	56
4- Spectroscopie des gaz rares	64
II Spectroscopie électronique des molécules diatomiques	71
1- Notion d'orbitale moléculaire	71
2- Molécule d'hydrogène H ₂	77
3- Molécules diatomiques homonucléaires : N ₂ ; Cl ₂ ; I ₂ ; O ₂	90
4- Molécules diatomiques hétéronucléaires	96
5- Application à la molécule CO	99
6- Symétrie des orbitales moléculaires	101
7- Termes pour les molécules diatomiques	103
8- Règles de sélection électroniques	112
Exercices et Problème	115
Solutions des Exercices et Problème	117

CHAPITRE 3 : SPECTROSCOPIE D'ABSORPTION	137
I Rotation des molécules diatomiques hétéronucléaires	138
1- Introduction	138
2- Modèle du rotateur rigide	138
3- Insuffisance du modèle du rotateur rigide : Modèle du rotateur non rigide	157
II Vibration des molécules diatomiques hétéronucléaires	160
1- Introduction	160
2- Équation de Schrödinger du mouvement de vibration des noyaux d'une molécule diatomique	161
3- Utilisation du modèle de l'oscillateur harmonique	162
4- Équation de Schrödinger d'une molécule diatomique dans l'approximation harmonique	165
5- Solutions de l'équation de Schrödinger	166
6- Règles de sélections	168
7- Etude du spectre théorique de vibration pure	170
8- Spectre expérimental de vibration	171
9- Modèle de l'oscillateur anharmonique	173
III Bande fondamentale de vibration	178
1- Introduction	178
2- Modèle de l'oscillateur harmonique et du rotateur rigide	178
3- Spectre expérimental de la bande fondamentale de vibration	186
4- Etude de l'intensité des raies	187
5- Modèle du couplage rotation – vibration	190
6- Etude d'un spectre expérimental	194
Exercices et Problèmes	195
Solutions des Exercices et Problèmes	200
CHAPITRE 4 : SPECTROSCOPIE DE DIFFUSION RAMAN	231
I Introduction à la spectroscopie moléculaire Raman	232
1- Généralités sur la Spectroscopie Raman	232
2- Interprétation du spectre expérimental	234
3- Interprétation du phénomène Raman	235
4- Règles de sélection dans la diffusion Raman	238
II Rotation Raman des molécules diatomiques	239

1- Etude théorique	239
2- Diagramme énergétique et spectre théorique	241
3- Spectre expérimental de rotation	243
III Vibration Raman des molécules diatomiques	244
1- Etude théorique	244
2- Bande Stokes de la vibration fondamentale	244
3- Diagramme énergétique et spectre théorique	246
4- Spectre expérimental de la bande Stokes de vibration de la molécule CO	247
5- Bande Anti Stokes de la vibration fondamentale	248
IV Etude d'un spectre expérimental Raman	250
Exercices et Problème	251
Solutions des Exercices et Problème	253
CHAPITRE 5 : SPECTROSCOPIE DE RESONNANCE MAGNETIQUE NUCLEAIRE RMN	271
1- Introduction	272
2- Notions théoriques sur la RMN	272
3- Principe du spectromètre RMN	278
4- Effet écran magnétique	280
5- Exemples de spectres RMN	292
6- Méthode générale pour identifier deux isomères	295
7- Méthode d'analyse d'un spectre RMN	299
Exercices et Problèmes	300
Solutions des Exercices et Problèmes	302
BIBLIOGRAPHIE	
INDEXE	

La spectroscopie moléculaire est plus riche et plus variée. On distingue la spectroscopie électronique, la spectroscopie d'absorption (rotation, vibration), la spectroscopie de diffusion, la résonance magnétique nucléaire RMN, la résonance magnétique électronique RPE...

La différence par rapport à la spectroscopie atomique vient du fait que l'énergie des transitions est susceptible de changer non seulement en faisant des transitions électroniques qui se produisent dans le domaine de l'ultraviolet et du visible, mais aussi pour des énergies plus faibles se situant dans l'infrarouge. Ainsi, certaines