

## Correction

### Questions de cours:

- Les molécules  $H_2$  et  $Cl_2$  n'absorbent pas le rayonnement infrarouge parce qu'ils n'ont pas un moment dipolaire.
- La différence entre les techniques spectroscopiques d'absorption et ceux d'émission c'est que le premier type exploite les propriétés d'absorption optique du matériau cible tandis que le deuxième type exploite la lumière émise par le matériau après excitation.
- Oui, la position des pics Auger change lorsque nous changerons la longueur d'onde des rayons X utilisés.
- Oui, la spectroscopie Raman est adéquate pour les molécules sans moment dipolaire comme  $N_2$  et  $O_2$ .
- Non, la photoluminescence ne peut être utilisée pour étudier les métaux purs et dopés.
- Les grandeurs électroniques caractéristiques d'un matériau donné qui peuvent être déduites d'une mesure UPS ou XPS sont l'énergie de Fermi et le travail de sortie.

### Exercice 1:

- La fréquence de vibration fondamentale :

On a :  $\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$  (model harmonique)

$$k = 97.8 \frac{eV}{\text{\AA}^2} = 1569.69 \frac{J}{m^2} \left( \frac{N}{m} \right)$$

$\mu$  est la masse réduite de la molécule  $^{14}N^{16}O$  et elle est donnée par:

$$\mu = \frac{m_N m_O}{m_N + m_O} = \frac{16 \times 14}{30} = 7.466 \frac{g}{mole} = 12.3946 \cdot 10^{-27} Kg$$

Donc ;

$$\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{1569.69}{12.3946 \cdot 10^{-27}}} = 5.6638 \cdot 10^{13} \text{ Hz} = 1887.94 \text{ cm}^{-1}$$

2. La fréquence de vibration d'élongation de la molécule  $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$  :

On a pour  $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$  :  $\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$  et pour  $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$  :  $\nu'_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k'}{\mu'}}$

Donc

$$\frac{\nu'_e}{\nu_e} = \sqrt{\frac{\mu k'}{\mu' k}}$$

Comme nous avons supposé que  $k' = k$ , nous trouvons que :  $\frac{\nu'_e}{\nu_e} = \sqrt{\frac{\mu}{\mu'}}$

$$\mu' = \frac{m_N m_O}{m_N + m_O} = \frac{16 \times 15}{31} = 7.742 \frac{g}{mole} = 12.8516 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$$

Ce qui nous donne :

$$\frac{\nu'_e}{\nu_e} = \sqrt{\frac{7.466}{7.742}} = 0.982 \rightarrow \nu'_e = 1853.98 \text{ cm}^{-1}$$

3. La longueur d'onde Raman de la molécule  $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$  :

$$\nu_e = 1887.94 \text{ cm}^{-1} \rightarrow \lambda_{NO} = 5296.778 \text{ nm}$$

$$\lambda_0 = 532 \text{ nm} \rightarrow \nu_0 = \frac{1}{\lambda_0} = 18796.99 \text{ cm}^{-1}$$

$$\text{Diffusion Stokes : } E_d = E_0 - h\nu_e \rightarrow \frac{hc}{\lambda_d} = \frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda_{NO}} \rightarrow \frac{1}{\lambda_d} = \frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda_{NO}}$$

$$\text{Donc : } \nu_d = 18796.99 \text{ cm}^{-1} - 1887.94 \text{ cm}^{-1} = 16909.05 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda_d = 591.399 \text{ nm}$$

$$\text{Diffusion anti-Stokes : } E_d = E_0 + h\nu_e \rightarrow \frac{hc}{\lambda_d} = \frac{hc}{\lambda_0} + \frac{hc}{\lambda_{NO}} \rightarrow \frac{1}{\lambda_d} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda_{NO}}$$

$$\text{Donc : } \nu_d = 18796.99 \text{ cm}^{-1} + 1887.94 \text{ cm}^{-1} = 20684.93 \text{ cm}^{-1}$$

$$\lambda_d = 483.443 \text{ nm}$$

4. la fréquence de la raie d'absorption pour les transitions de rotation  $J: 1 \rightarrow 2$  et  $2 \rightarrow 3$ .

On a :  $E = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) = BJ(J+1)$

$E(J=1) = 2B$ ,  $E(J=2) = 6B$ , et  $E(J=3) = 12B$

$$B = \frac{h^2}{8\pi^2 I} = \frac{h^2}{8\pi^2 \mu r_0^2} = 3.381 \cdot 10^{-23} \text{ J} = 1.7026 \text{ cm}^{-1}$$

La transition  $J: 1 \rightarrow 2$  :

$$\Delta E = E(J=2) - E(J=1) = 6B - 2B = 4B = 6.8104 \text{ cm}^{-1} = 2.0429 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

La transition  $J: 2 \rightarrow 3$  :

$$\Delta E = E(J=3) - E(J=2) = 12B - 6B = 6B = 10.2156 \text{ cm}^{-1} = 3.0643 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$$

## Exercice 2:

$m/z = 72$  : pic moléculaire :  $C_5H_{12} \rightarrow C_5H_{12}^+ + e^-$ .

$m/z = 43$  :  $C_3H_7$  :  $C_5H_{12} \rightarrow C_3H_7^+ + C_2H_5^*$

$m/z = 57$  :  $C_4H_9$  :  $C_5H_{12} \rightarrow C_4H_9^+ + CH_3^*$

$m/z = 29$  :  $C_2H_5$  :  $C_5H_{12} \rightarrow C_2H_5^+ + C_3H_7^*$

$m/z = 28$  :  $C_2H_4$  :  $C_4H_9 \rightarrow C_2H_4^+ + C_2H_5^*$