

# Energies

<http://culturesciences.chimie.ens.fr/content/introduction-%C3%A0-la-spectroscopie-uv-visible> **Extrait**

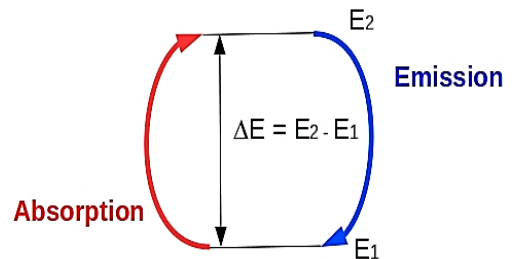
[...] A l'échelle atomique, la matière n'étant pas continue mais constituée d'assemblage de particules élémentaires, l'énergie ne l'est pas non plus et ne peut prendre que des valeurs discrètes. L'énergie totale d'un édifice atomique peut se mettre sous la forme de la somme suivante :

$$E = E_{\text{él}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{trans}}$$

$E_{\text{él}}$  représente l'énergie électronique,  $E_{\text{vib}}$  l'énergie vibrationnelle,  $E_{\text{rot}}$  l'énergie rotationnelle et  $E_{\text{trans}}$  l'énergie de translation du système. [...]

L'interaction électromagnétique caractérise l'aptitude d'un édifice atomique à voir son énergie modifiée par l'action d'un rayonnement électromagnétique. Soit un système atomique pouvant être caractérisé par deux niveaux énergétiques quantifiés  $E_1$  et  $E_2$  (avec arbitrairement  $E_1 < E_2$ ).

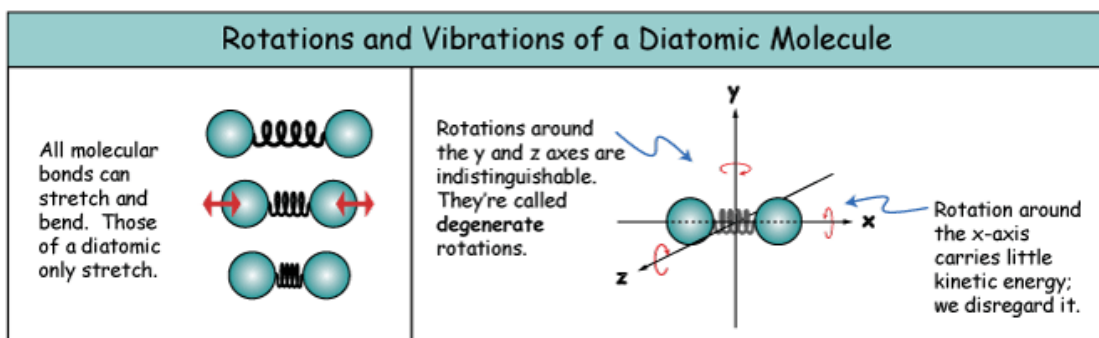
Si le rayonnement électromagnétique permet de passer du niveau  $E_1$  au niveau  $E_2$ , le système doit acquérir de l'énergie. On parle alors d'**absorption**. A contrario, le passage du niveau  $E_2$  au niveau  $E_1$  conduit à une libération d'énergie, il s'agit d'**émission**. L'absorption ou l'émission d'énergie se fait alors sous forme d'onde électromagnétique, dont l'énergie dépend fortement de l'ordre de grandeur de la différence d'énergie entre les deux états, notée  $\Delta E$ , et donc intrinsèquement de la nature des niveaux concernés.



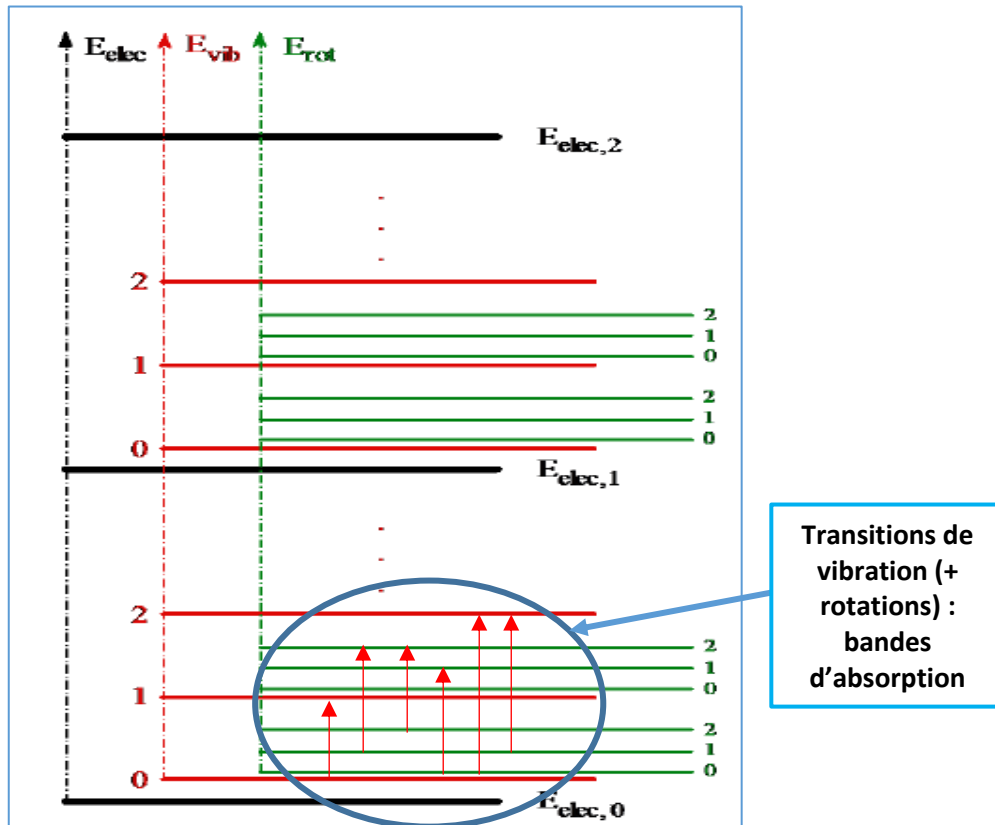
**Energie électronique  $E_{\text{él}}$**  : les électrons, mis en commun par des atomes pour former par exemple une liaison covalente dans une molécule, possèdent (comme dans l'atome isolé) une énergie. Cette énergie correspond au concept classique d'« énergie mécanique » (énergie cinétique + énergie potentielle électrique) mais s'exprime différemment dans le cadre de la mécanique quantique. Cette énergie est quantifiée, c'est-à-dire qu'elle ne peut prendre que certaines valeurs précises qui dépendent de la configuration moléculaire.

**Energie vibrationnelle  $E_{\text{vib}}$**  : les atomes impliqués dans un édifice atomique ont des mouvements de vibration, comparables à ceux d'un système masse – ressort pour les vibrations d'allongement. Ce type d'énergie est également quantifié mais avec des niveaux très inférieurs aux niveaux d'énergie électronique.

**Energie rotationnelle  $E_{\text{rot}}$**  : les atomes et groupes d'atomes ont évidemment aussi des mouvements de rotation. Ce type d'énergie est également quantifié mais avec des niveaux inférieurs aux niveaux d'énergie vibrationnels.



**Energie de translation  $E_{\text{trans}}$**  : une molécule, par exemple, est également en mouvement de translation global qui correspond, statistiquement, à l'énergie thermique. Cette énergie de translation n'est pas quantifiée.



Ordres de grandeur des différences d'énergie entre niveaux

$$\Delta E_{vib} \approx 5 \text{ à } 150 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

$$\Delta E_{rot} \approx 1 \text{ J.mol}^{-1} \text{ à } 5 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

$$E_{vibr} > E_{rot}$$

Transitions vibrationnelles : domaine du proche infrarouge (**spectroscopie IR**)

$$\lambda : 800 \text{ nm à } 20 \text{ }\mu\text{m}$$

Transitions rotationnelles : infrarouge lointain et microonde

$$\lambda : 20 \text{ }\mu\text{m à } 10 \text{ cm}$$