

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 :

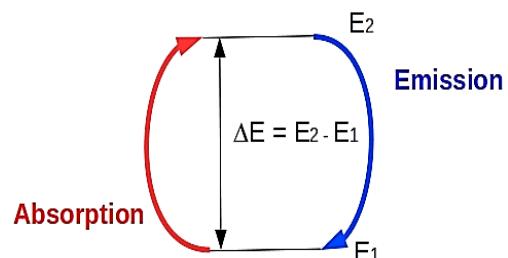
$$E = E_{\text{el}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{trans}}$$

E_{el} représente l'énergie électronique, E_{vib} l'énergie vibrationnelle, E_{rot} l'énergie rotationnelle et E_{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.

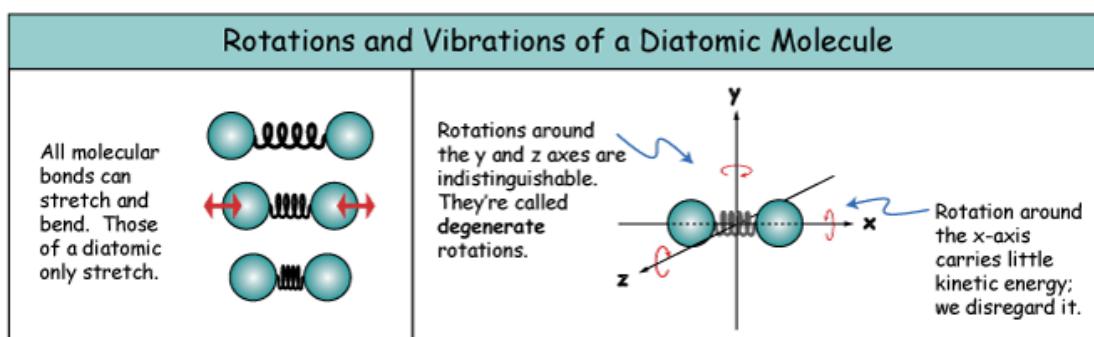
On parle alors d'**absorption**. A contrario, le passage du niveau E_2 au niveau E_1 conduit à une libération d'énergie, il s'agit d'**émission**. L'absorption ou l'émission d'énergie se fait alors sous forme d'onde électromagnétique, dont l'énergie dépend fortement de l'ordre de grandeur de la différence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



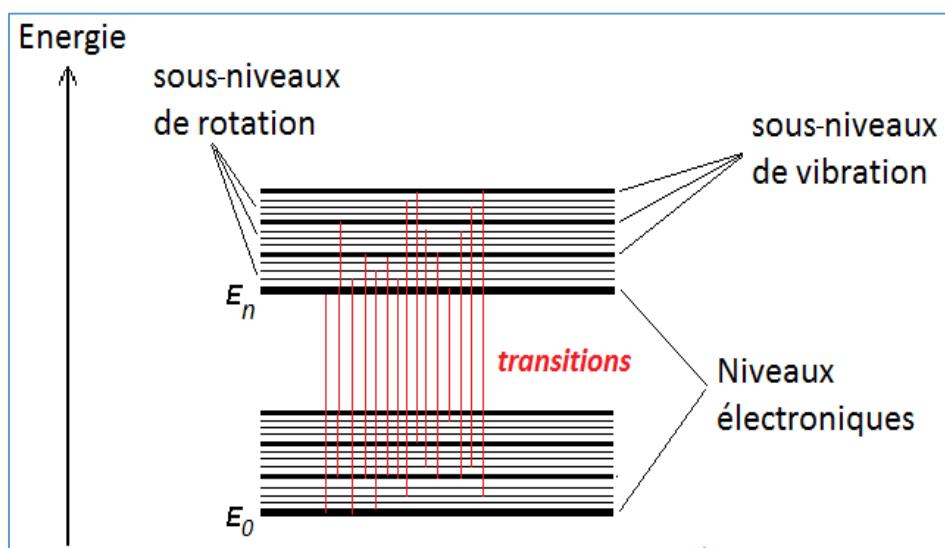
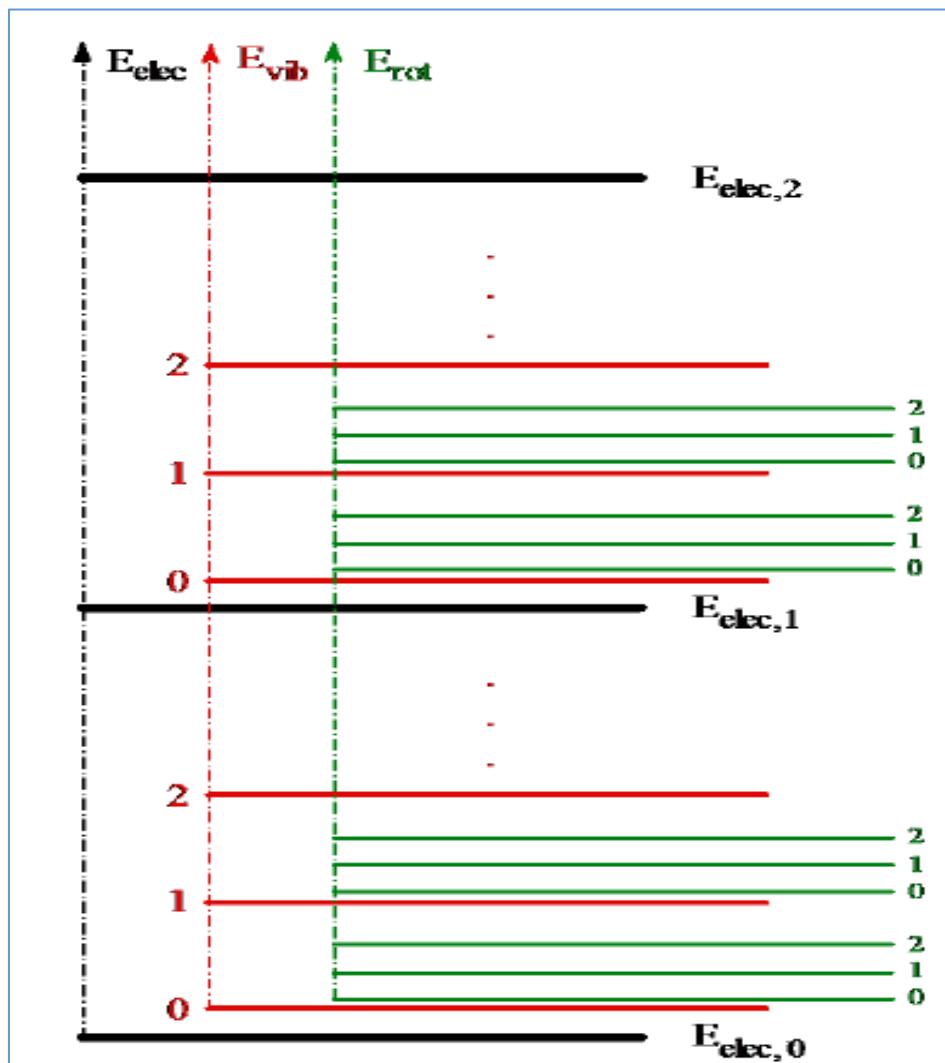
Energie électronique E_{el} : les électrons, mis en commun par des atomes pour former par exemple une liaison covalente dans une molécule, possèdent (comme dans l'atome isolé) une énergie. Cette énergie correspond au concept classique d'« énergie mécanique » (énergie cinétique + énergie potentielle électrique) 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_{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_{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_{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

$$\Delta E_{\text{elec}} \approx 150 \text{ à } 2500 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

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

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

$$E_{\text{elc}} >> E_{\text{vibr}} >> E_{\text{rot}}$$