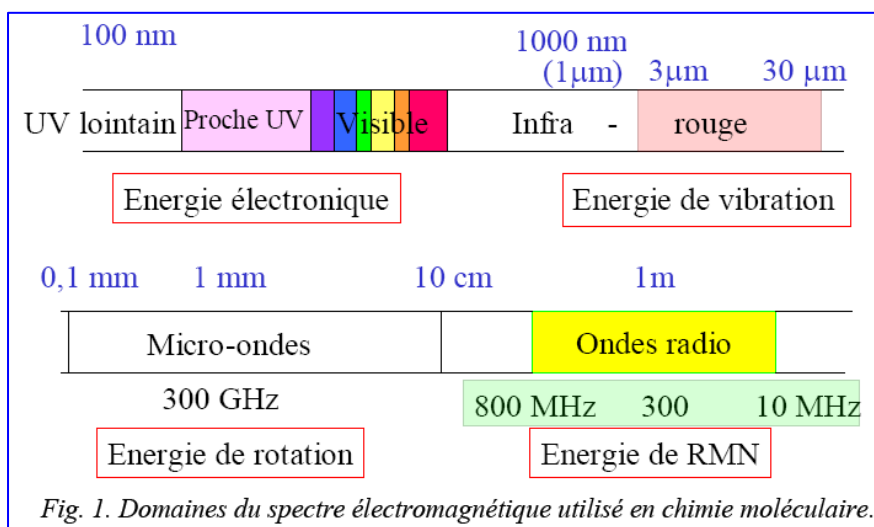


Domaines de spectroscopie moléculaire

<https://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/chaquin/9.Spectro1.pdf>

[Extrait adapté]

La figure 1 présente le spectre électromagnétique limité à ses parties utiles en spectroscopie moléculaire. En partant des courtes longueurs d'onde, dans le domaine proche UV-visible les quanta $h\nu$ correspondent aux variations d'énergie électronique de la molécule. L'unité usuelle de cette région est le nm. Le spectre visible s'étend de 400 nm (violet) à 800 nm (rouge) environ. On trouve ensuite le « proche IR », peu utilisé en pratique, puis la région de 3 μm environ à 30 μm , dans laquelle les quanta correspondent aux variations d'énergie de vibration. L'unité usuelle dans ce domaine est le μm ou plus souvent le nombre d'onde en cm^{-1} . Le domaine des micro-ondes, de longueurs allant du cm au mm correspond aux échanges d'énergie de rotation. Enfin, les ondes de radiofréquence (englobant le domaine utilisé par la radio en modulation de fréquence) habituellement caractérisée par leur fréquence en MHz correspondent aux échanges d'énergie magnétique d'interaction des noyaux placés dans un champ magnétique intense (de l'ordre du Tesla). C'est donc le domaine de la RMN.



Transitions énergétiques moléculaires

L'énergie totale d'une molécule est la somme des **énergies électroniques, énergie de translation, de vibrations et de rotations** (on ne tient pas compte ici des énergies nucléaires). **L'énergie de translation**, correspondant à l'énergie thermique, **n'est pas quantifiée**. Le tableau ci-dessous correspond aux **transitions entre les niveaux énergétiques des trois formes d'énergie moléculaires quantifiées**.

E	=	E _e	+	E _v	+	E _r
		Niveaux électroniques		Vibration des noyaux		Rotation autour d'un axe
Ordres de grandeur		ΔE_e		ΔE_v		ΔE_r
Energie (eV)		5		0,1 à 0,5		$5 \cdot 10^{-3}$
Energie par mole ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)		500		10 à 50		0,5
Longueur d'onde $\lambda(\text{m})$		$250 \cdot 10^{-9}$		$2,5 \text{ à } 12,4 \cdot 10^{-6}$		$12,4 \cdot 10^{-3}$
Nombre d'onde $\sigma (\text{cm}^{-1})$		$40 \cdot 10^3$		600 à 4000		80
Domaine spectral		UV - Visible		IR		IR lointain – micro-ondes