

$$\begin{aligned} \bullet \quad E_c &= \frac{1}{2} m_1 V_1^2 + \frac{1}{2} m_2 V_2^2 = \frac{1}{2} m_1 (\omega r_1)^2 + \frac{1}{2} m_2 (\omega r_2)^2 \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{(m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2)}_I \omega^2 \end{aligned}$$

I : le moment d'inertie

Par conséquent :

$$E_c = \frac{1}{2} I \omega^2$$

Dans le système de centre de gravité

$$\begin{cases} r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} r \\ r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} r \end{cases}$$

On sait que:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2 = \mu r^2$$

μ : la masse réduite

Calculons maintenant le moment cinétique de cette molécule diatomique :

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \sum \vec{r}_i \wedge \vec{p}_i = \vec{r}_1 \wedge m_1 \vec{v}_1 + \vec{r}_2 \wedge m_2 \vec{v}_2 \\ &= r_1 m_1 v_1 + r_2 m_2 v_2 \\ &= r_1 m_1 (\omega r_1) + r_2 m_2 (\omega r_2) \\ &= (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega \end{aligned}$$

$$L = I \omega$$

Rappelons que l'énergie cinétique de rotation en mécanique classique pouvait s'exprimer en fonction du moment cinétique :

$$\Rightarrow E_{rot} = \frac{L^2}{2I}$$

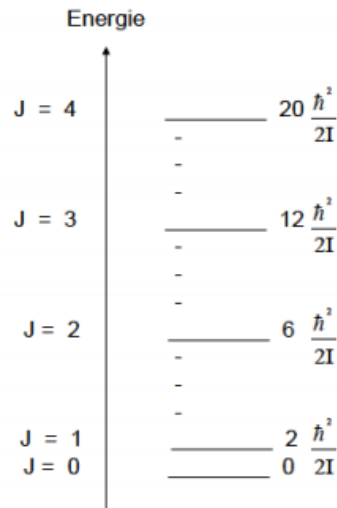
- **En mécanique quantique:** le moment cinétique d'un système microscopique (électron atome, molécule etc...) est quantifié :

$$L^2 = \hbar^2 J(J + 1) \quad \text{avec } J = 0, 1, 2$$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$; la constante de Planck

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I} = \hbar^2 J(J + 1)$$

- Le diagramme de niveaux d'énergie de la molécule en rotation apparaît comme une série de lignes horizontales représentant les niveaux possibles

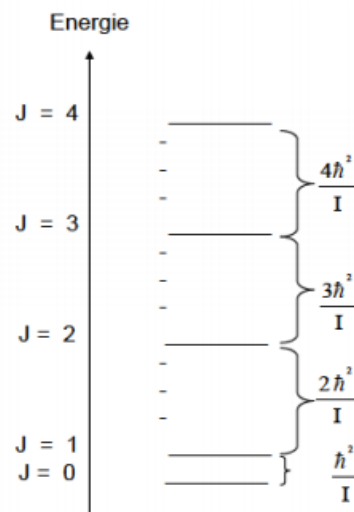


- L'écart entre deux niveaux consécutifs est donc :

$$\Delta E_j^{J+1} = E(J + 1) - E(J)$$

$$\Delta E_j^{J+1} = \frac{\hbar^2}{I} (J + 1)$$

L'écart croit donc suivant une suite arithmétique de progression $\frac{\hbar^2}{I}$



- En spectroscopie de rotation, l'énergie de rotation E peut aussi s'écrire sous la forme de :

$$E_j = hcBJ(J + 1)$$

c la célérité de la lumière et B est la constante de rotation moléculaire

$$B = \frac{h}{8\pi^2Ic}$$

$$\Delta E_j^{J+1} = 2hcB(J + 1)$$

Rappelons que l'énergie E peut s'écrire sous la forme de :

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\Delta E = hc\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_0}\right) = 2hcB$$

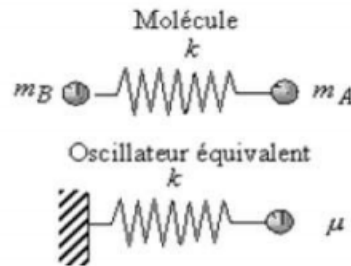
L'écart entre deux raies est dans ce cas égal à :

$$\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_0}\right) = 2B$$

- Le spectre de rotation pure de la plupart des molécules se trouve dans le domaine des microondes de haute énergie à la limite de l'infrarouge lointain compte tenu de la faible valeur du moment d'inertie I .

La vibration de la molécule diatomique

- Le mouvement vibrationnel d'une molécule peut être comparé - approximativement a un oscillateur harmonique



Suivant la théorie de la mécanique quantique, L'énergie de vibration est exprimée en nombre d'onde

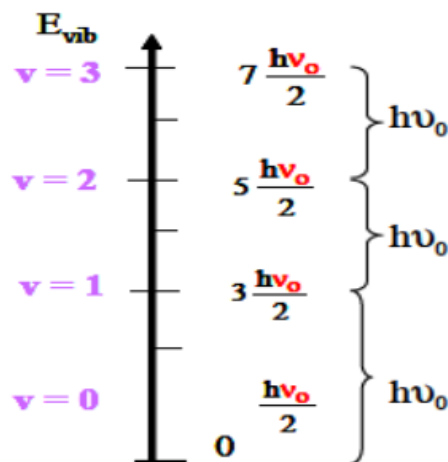
$$E(v) = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) = h\nu_0\left(v + \frac{1}{2}\right)$$

ν_0 est la fréquence propre du système. l'énergie d'un oscillateur quantique dans l'état fondamental ($v = 0$) n'est pas nulle :

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu_0$$

- la différence d'énergie entre les niveaux de vibration de la molécule est constante et vaut :

$$\Delta E_{vib} = E_{v+1} - E_v = h\nu_0$$



• Couplage rotation-vibration

Les transitions vibrationnelles se produisent en conjonction avec les transitions rotationnelles.

$$E_{vib,rot} = E_{vib} + E_{rot}$$
$$h\nu_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) + hcBJ(J + 1)$$

Spectroscopie atomique :

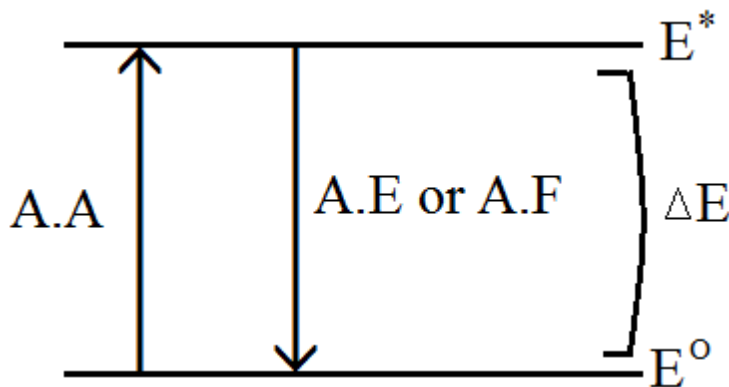
Les atomes ne peuvent ni tourner ni osciller, les transferts électroniques ne se produisent donc que lorsqu'ils absorbent ou émettent de l'énergie. Spectres linéaires, et que le spectre atomique inclut l'émission ou l'absorption d'atomes, ce qui signifie qu'il existe deux techniques dans les spectres atomiques:

- Technologie d'absorption atomique (**A.A**)
- Technologie des émissions atomiques (**A.E**)

Base théorique

Le spectre atomique dépend de l'excitation des atomes et de leur transfert de l'état stable à l'état excité, puis de leur retour.

L'état stable s'accompagne en général de trois phénomènes : l'absorption atomique, l'émission atomique et la fluorescence atomique.



A.F : Fluorescence atomique

E^0 : état stable

E^* : état excité

ΔE : différence d'énergie

(A.A) Spectre d'absorption atomique : méthode spectroscopique permettant de calculer et d'estimer un élément ou un groupe d'éléments en mesurant une quantité.

Absorption du faisceau de résonance de cet élément après son passage à travers sa vapeur atomique

(A. E) Spectre d'émission atomique : lorsque les atomes sont excités par l'énergie thermique, la lumière émise est mesurée lorsque les atomes reviennent de

De l'état excité E^* à l'état stationnaire E^0