

Examen 2016: Physique Atomique et Moléculaire

Mercredi 4 janvier 2017
TOUT DOCUMENT INTERDIT

I) Atome de magnésium en couplage L-S

Dans tout ce qui suit, on néglige les effets liés au spin du noyau et on considère que le magnésium est correctement décrit par le modèle du couplage L-S.

La configuration de l'état fondamental de l'atome de magnésium s'écrit $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$.

a) Recenser les multiplets correspondant à cette configuration et aux configurations « excitées » (3s,4s) et (3s,3p). Justifier le fait que l'on ne prenne en compte que les deux électrons les plus « externes » pour faire ces calculs.

b) Sachant que le hamiltonien de structure fine s'écrit: $H_{SF} = A_{(L,S)} \mathbf{L.S}$, préciser la base dans laquelle cet hamiltonien est diagonal, calculer l'expression de l'énergie associée et donner la structure fine de chacun de multiplets recensés en a) (valeurs de L , S , J et positions relatives des niveaux de structure fine, $A_{(L,S)}$ est positif).

Expérimentalement, on observe un 'triplet' de transitions entre deux multiplets issus des configurations étudiées ci-dessus (longueurs d'onde: 518,37 nm, 517,27 nm et 516,74 nm).

c) Quels sont les multiplets mis en jeu? Justifier. Préciser l'état initial et l'état final pour chacune des transitions.

d) A partir des longueurs d'onde expérimentales, calculer la valeur numérique de $A_{(L,S)}$ pour le multiplet concerné.

e) Comparer le rapport des écarts en énergie expérimentaux avec les valeurs théoriques. Conclure sur la validité du couplage L-S.

Règles de sélection à appliquer ici : $\Delta S = 0$; $\Delta L = \pm 1$; $\Delta J = 0, \pm 1$

Constantes utiles : $h \sim 6,62 \times 10^{-34}$ Js, $c \sim 3 \times 10^8$ ms⁻¹

II) Configuration électronique et termes spectroscopiques de titane

On considère l'atome de titane (Ti), avec 22 protons, 26 neutrons et 22 électrons.

a) Avec les règles de Klechkowski, déterminer la configuration électronique de l'atome de titane dans l'état fondamental.

b) Déterminer les termes spectroscopiques pour cette configuration électronique en couplage Russell-Saunders (couplage L-S). Donner les nombres quantiques J associés à chaque de ces termes.

c) Parmi les termes ainsi formés, déterminer l'état fondamental en appliquant les règles de Hund, et le couplage spin orbite de la forme $H_{so} = a \mathbf{L.S}$ avec $a > 0$.

Rappel notation spectroscopique:

L=	0	1	2	3	4
lettre	S	P	D	F	G

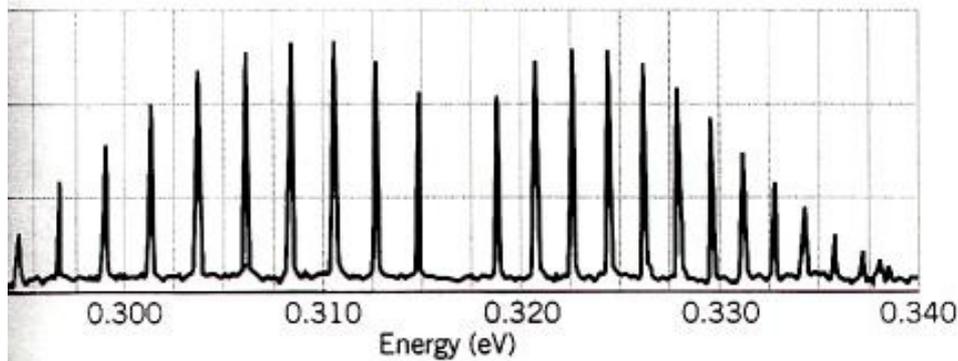
III) Spectroscopie rovibrationnelle de *HBr*

Pour la molécule *HBr*, on trouve à basse résolution une raie d'absorption infrarouge qui correspond à la transition vibrationnelle $n = 0 \rightarrow n = 1$. A plus haute résolution, on s'aperçoit qu'elle est composée de deux groupes de raies (presque) équidistantes, appelés « branche P » et « branche Q » (voir figure).

a) Expliquer l'apparition de ces deux groupes de raies à haute résolution

b) A partir des données ci-dessous, estimer la valeur de la constante de rotation pour ces deux groupes de raies, déduire la distance d'équilibre, et discuter brièvement l'origine de la différence observée.

Spectre d'absorption de *HBr* à haute résolution



Positions des raies observées -en cm^{-1} - ($\Delta\tilde{\nu} = \frac{\Delta E}{hc}$)

2574.7613	
2590.5201	2541.8369
2605.8031	2524.6840
2620.5928	2507.0842
2634.8894	2489.0480
2648.6791	2470.5823

Données :

Masse du Brome : 80 u,

Masse de l'hydrogène : 1 u,

Unité de masse atomique : $1u = 1.66 \times 10^{-27}$ kg,

Constantes utiles : $h \sim 6,62 \times 10^{-34}$ Js, $c \sim 3 \times 10^8$ ms⁻¹.