

# Examen 2017: Physique Atomique et Moléculaire

Vendredi 22 décembre 2017

-- TOUT DOCUMENT ET OBJET CONNECTÉ INTERDIT --

---

## 1. Question de cours

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, les états  $2s$  et  $2p$  sont dégénérés en énergie. En revanche, dans des atomes multiélectroniques, décrits dans le cadre du modèle du potentiel central, cette dégénérescence est levée. Expliquer brièvement l'origine de cette levée de dégénérescence dans ce dernier cas, et donner l'ordre énergétique attendu.

## 2. Etude de l'atome de *Calcium* ( $Z=20$ )

- Etablir le diagramme de Klechkowski pour le *Calcium*, et donner la configuration électronique de cet atome dans l'état fondamental.
- Seuls les électrons externes seront considérés. Définir ce qu'est le couplage  $LS$ , donner les nombres quantiques  $L$  et  $S$  pour les deux électrons externes du *Calcium* à l'état fondamental ainsi que le terme spectroscopique associé.
- Donner la valeur de  $S_z$ , projection du spin total sur l'axe de quantification des  $z$ .
- Donner explicitement le déterminant de Slater  $|D\rangle$  des deux électrons externes et qui correspond à cet état fondamental. Montrer qu'il est antisymétrique par rapport à l'échange des deux électrons. Déterminer la symétrie des parties spatiale et de spin par échange des particules.
- En utilisant la relation de superposition  $S_z = S_z(1) + S_z(2)$ , calculer le ket  $S_z |D\rangle$ , et le comparer avec c).
- Ecrire pour la première configuration excitée du *Calcium* les 4 multiplets associés en couplage  $LS$  ainsi que les valeurs des moments  $J$  correspondantes.
- Donner l'expression et la valeur de la dégénérescence de chaque niveau  $J$ . En déduire la dégénérescence totale associée à cette configuration.

## 3. Etude de l'atome de *Carbone* ( $Z=6$ )

- Donner la configuration électronique de l'état fondamental de l'atome de *Carbone*, et donner les multiplets correspondant à cette configuration ainsi que l'ordre énergétique en appliquant les règles de Hund.
- Dans la suite, on considère la structure fine, avec le Hamiltonien  $H_{SF} = a \vec{L} \cdot \vec{S}$  ( $a > 0$ ). Donner la base dans laquelle ce hamiltonien est diagonal, et calculer l'énergie associée à ce Hamiltonien pour chacun des multiplets.
- Etablir un diagramme des niveaux énergétiques des multiplets.

**T.S.V.P**

### 3. Spectre de l'atome de *Germanium* ( $Z = 32$ )

- Donner la configuration électronique de l'état fondamental de l'atome de *Germanium*. Comme exception de la règle de Klechkowski, la sous-couche  $3d$  est remplie avant la sous-couche  $4s$ .
- Déterminer les termes spectroscopiques (multiplets) de la configuration fondamentale, avec les  $J$  associés.
- On considère l'excitation électronique du *Germanium* à partir de sa configuration fondamentale et qui correspond à la transition d'un électron  $4p$  vers une sous-couche  $5s$ . Ecrire cette configuration excitée.
- Déterminer les termes spectroscopiques associés à cette configuration ainsi que les niveaux  $J$ .
- En supposant que les orbitales de cœur englobent toutes les sous-couches internes jusqu'à la  $4s^2$  incluse, et que la charge effective 'vue' par l'électron  $5s$  est  $Z_{5s}^* = 3,34$  et celle par un électron  $4p$ ,  $Z_{4p}^* = 3,44$ , calculer l'énergie du photon issu de la transition dipolaire  $4p5s \rightarrow 4p^2$  dans le cadre des particules dites indépendantes. S'agit-il d'un photon visible, UV, X ou infrarouge ?
- Sachant que cette transition s'effectue entre les multiplets recensés précédemment, combien de raies comporte-t-elle ? Les règles de sélection sont rappelées :  $\Delta S = 0$ ,  $\Delta J = 0 \pm 1$  avec la transition  $0 \rightarrow 0$  interdite.

### 4. Spectroscopie rovibrationnelle d'une diatomique

- Pour une molécule diatomique, représenter qualitativement l'allure d'un spectre rovibrationnelle. Donner ensuite des ordres de grandeurs.
- Expliquer quelle quantité moléculaire peut être extraite par la séparation des raies, et faire le lien entre avec la séparation des raies.
- Expliquer qualitativement comment le spectre rovibrationnelle d'une molécule diatomique permet de déduire la température de l'échantillon mis en jeu.

---

Rappel de quelques données :

$$R = 13,6 \text{ eV} = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J (constante de Rydberg)}$$

$$h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J s (constante de Planck)}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1} \text{ (célérité de la lumière dans le vide).}$$