

Examen 2020: Physique Atomique et Moléculaire

Vendredi 8 janvier 2021

-- TOUT DOCUMENT ET OBJET CONNECTÉ EST INTERDIT --

1. Question de cours

Expliquer brièvement le principe des méthodes de spectroscopie (absorption, émission) et détailler leur importance en physique atomique et moléculaire.

2. Atome de magnésium en couplage $L - S$

a. Donner la configuration électronique de l'état fondamental de l'atome de magnésium (12 électrons) ; en déduire les valeurs de L , S et J , et l'exprimer en notation spectroscopique ('termes'). Justifier le fait que l'on ne prenne en compte que les deux électrons les plus 'externes' pour faire ces calculs.

b. Il n'y a qu'un unique déterminant de Slater qui correspond à la configuration de l'état fondamental. Expliquer pourquoi, et donner explicitement son expression.

c. Sachant que le spin total est donné par $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, démontrer que le déterminant de Slater calculé en b) est fonction propre de S_z et donner la valeur propre associée. Commenter à l'aide des résultats obtenus en a).

d. Donner la configuration électronique du premier état excité, selon le schéma de Klechkowski, et en déduire les valeurs de L , S et J ; l'exprimer en notation spectroscopique.

e. Sachant que le Hamiltonien de spin-orbite s'écrit $H_{so} = \frac{A}{\hbar^2} \vec{L} \cdot \vec{S}$ avec $A > 0$, préciser la base dans laquelle ce Hamiltonien a une représentation diagonale ? Calculer l'expression associée de l'énergie et donner la structure fine de chacun des multiplets recensés en a) (état fondamental) et e) (état excité).

f. Considérant la transition de l'état excité vers le fondamental, quelles transitions sont permises parmi l'ensemble des multiplets ? On rappelle les règles de sélection $\Delta L = \pm 1$, $\Delta J = 0, \pm 1$, $\Delta S = 0$.

3. L'effet Zeeman de l'atome de silicium

a. Donner la configuration électronique de l'état fondamental de l'atome de silicium (14 électrons) ainsi que les multiplets correspondant à cette configuration et l'ordre énergétique en appliquant la règle de Hund.

b. Dans la suite, on considère l'effet spin-orbite dont le Hamiltonien est de formulation identique à précédemment. Calculer l'énergie associée pour chacun des multiplets.

c. Etablir un diagramme des niveaux énergétiques de ces multiplets, sans puis avec structure fine.

d. On applique maintenant un champ magnétique faible, qui revient à un décalage énergétique induit dit Zeeman donné par $\Delta E_Z = \mu_B g_J M_J B$, avec μ_B le magnéton de Bohr et un facteur de Landé valant $g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$. Exprimer les niveaux énergétiques pour chacun des états de structure fine en fonction de $\omega_0 = (\mu_B B)$

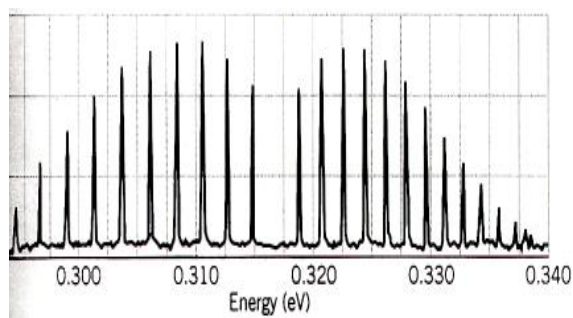
e. Expliquer comment l'application d'un champ magnétique permet de déterminer la valeur J des niveaux.

(T.S.V.P)

4. Spectroscopie ro-vibrationnelle de HBr:

Pour la molécule HBr , on trouve une raie d'absorption infrarouge à basse résolution qui correspond à la transition vibrationnelle $n = 0 \rightarrow n = 1$. A plus haute résolution, comme cela est visible sur la figure, on s'aperçoit en fait qu'elle est composée de deux groupes de raies *-presque-* équidistantes.

- Expliquer l'apparition de ces deux groupes de raies à haute résolution
- A partir des données fournies ci-dessous, évaluer l'énergie de la transition vibrationnelle.
- Estimer alors la valeur de la constante de rotation pour ces deux groupes de raies, et discuter brièvement l'origine de la différence observée. En prenant la moyenne, déduire la distance d'équilibre,
- En considérant la branche R (transitions $J \rightarrow J + 1$) et en supposant que l'intensité des raies observées est proportionnelle à celle de l'état initial, donner une estimation de la température de l'échantillon.



Position (eV)	Intensité (unit. Arb.)	Position (eV)	Intensité (unit. Arb.)
0.3018	9.8	0.3192	10.2
0.3037	11.4	0.3211	12.0
0.3063	12.3	0.3230	12.7
0.3086	12.8	0.3249	12.5
0.3108	13.1	0.3266	11.8
0.3130	12.0	0.3283	10.5
0.3151	10.3	0.3295	9.0

Données :

Masse du Brome : 80 u, de l'Hydrogène : 1 u avec la masse atomique $1 \text{ u} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.

$h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$, $1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $k_b = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.