

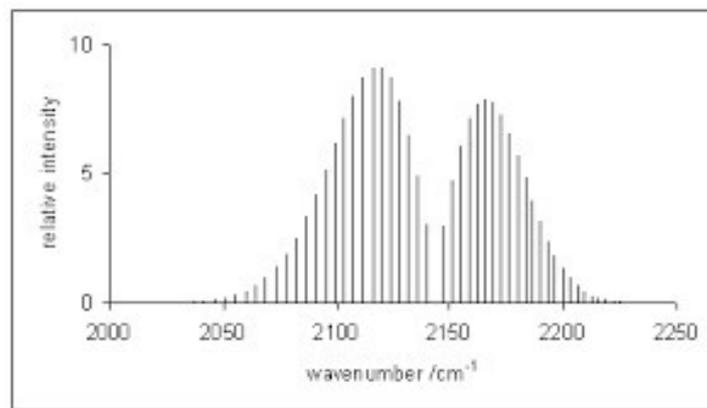
# Examen 2021: Physique Atomique et Moléculaire

Jeudi 6 janvier 2022

-- TOUT DOCUMENT ET OBJET CONNECTÉ EST INTERDIT --

## 1. Question de cours- spectroscopie ro-vibrationnelle de la molécule $CO$

- Expliquer à l'aide d'un schéma énergétique l'allure du spectre donné ci-dessous.
- Quelle quantité peut être estimée à partir de la séparation des raies ? Donner l'expression littérale correspondante.
- Expliquer la faible différence de séparation des raies autour de  $2050 \text{ cm}^{-1}$  et autour de  $2200 \text{ cm}^{-1}$ .
- Expliquer comment un tel spectre peut être utilisé pour estimer la température de l'échantillon, et donner l'expression littérale correspondante.



## 2. Effet Stark en champ fort sur le niveau $n = 2$ de l'atome $H$

On se propose d'étudier la modification des niveaux d'énergie d'un atome d'Hydrogène en interaction avec un champ électrique extérieur, supposé uniforme selon l'axe Oz, et dont le Hamiltonien, donné par  $W_S = e\mathcal{E}_0z$ , est petit devant le Hamiltonien  $H_0$  de l'atome non perturbé, de vecteur et valeur propres respectifs  $|n, l, m\rangle$  et  $E_n$ . On considère que le champ externe est d'amplitude suffisante pour que la structure fine du niveau  $n = 2$  puisse être négligée devant la contribution Stark.

- Justifier que l'on puisse négliger le spin de l'électron.
- Calculer le commutateur  $[z, L_z]$  puis  $[W_S, L_z]$ , et commenter quant au couplage induit par  $W_S$  entre états appartenant à différents espaces propres de  $L_z$ .
- Après avoir exprimé le Hamiltonien  $W_S$  dans un système de coordonnées adapté, calculer les éléments de matrice non-nuls  $\langle n, l, m | W_S | n', l', m' \rangle$  pour le niveau  $n = 2$ . On rappelle une intégrale radiale  $\int_0^\infty R_{2s}(r) r^3 R_{2p}(r) dr = 3\sqrt{3}a_0$ , ainsi que les harmoniques sphériques  $Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  et  $Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ .
- En se limitant au 1<sup>er</sup> ordre de la théorie des perturbations pour un système dégénéré, en déduire états propres et valeurs propres du niveau  $n = 2$  qui tient compte de la perturbation Stark.

(T.S.V.P)

### 3. Effet Zeeman de structure fine sur le niveau $n = 2$ de l'atome $H$

On place un atome  $H$  dans un champ magnétique extérieur uniforme  $\vec{B}_0$  colinéaire à l'axe  $Oz$ . Le Hamiltonien Zeeman linéaire est donné par  $W_Z = -\vec{B}_0 \cdot (\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S + \vec{\mu}_I)$ , où  $\vec{\mu}_L = \frac{-q}{2m_e} \vec{L}$ ,  $\vec{\mu}_S = \frac{-q}{2m_e} g_e \vec{S}$  et  $\vec{\mu}_I = \frac{q}{2M_p} g_p \vec{I}$  sont respectivement les moments magnétiques dipolaires orbitaux, de spin électronique et de spin nucléaire, avec la charge  $q > 0$  du proton, les masses  $m_e$  et  $M_p$  de l'électron et du proton et les facteurs de Landé  $g_e = 2$  de l'électron et  $g_p = 5,585$  du proton. En outre on posera les pulsations  $\omega_0 = \frac{q}{2m_e} B_0$  et  $\omega_n = \frac{-q}{2M_p} B_0$ .

- Exprimer  $W_Z$  en fonction de  $\omega$ ,  $\omega_h$  et des composantes de  $\vec{L}$ ,  $\vec{S}$  et  $\vec{I}$ . Peut-on simplifier ce Hamiltonien et si oui, sur quel critère ?
- Lorsque le champ magnétique est suffisamment faible, on peut utiliser les états propres  $|n, l, s, j, m_j\rangle$  issus du Hamiltonien de structure fine pour calculer l'action du Hamiltonien Zeeman. Le théorème de Wigner-Eckart appliqué à un opérateur vectoriel  $\vec{A}$  quelconque, ici un moment cinétique  $\vec{L}$  ou  $\vec{S}$ , est donné par :

$$\vec{A} = \frac{\langle n, l, s, j, m_j | \vec{A} \cdot \vec{J} | n, l, s, j, m_j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \vec{J}.$$

Etant rappelées les valeurs des commutateurs  $[J_x, A_x] = 0$ ,  $[J_x, A_y] = i \hbar A_z$  et  $[J_x, A_z] = -i \hbar A_y$ , montrer que  $W_Z$  peut se réécrire comme :

$$W_Z = \frac{\omega_0}{2j(j+1)} (Cj(j+1) + s(s+1) - l(l+1)) J_z,$$

avec une constante  $C$  dont on précisera la valeur.

- Calculer les corrections sur les états  $|n = 2, l, s, j, m_j\rangle$ .

### 4. 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.