Examen 2025: Physique Atomique et Moléculaire

Mardi 09 décembre 2025

-- TOUT DOCUMENT ET OBJET CONNECTÉ EST INTERDIT –

1. Question de cours – le rapport gyromagnétique

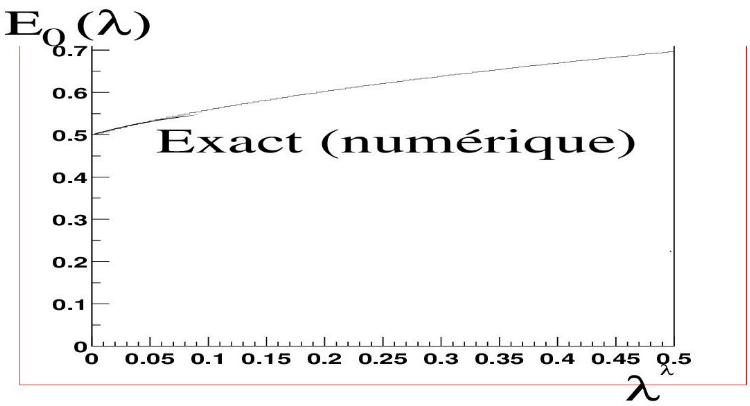
1. En mécanique classique, rappeler l'expression du moment cinétique $\vec{L}$ pour un électron de position $\vec{r}$ et de vitesse $\vec{v}$. Le moment magnétique associé à une boucle de courant circulaire de rayon r est $\vec{\mu} = \frac{1}{2}\vec{r} \wedge q\vec{v}$. Quelle est l'expression classique γ_{cl} du rapport gyromagnétique qui intervient dans la relation $\vec{\mu} = \gamma_{cl}\vec{L}$?
2. Quelle expérience célèbre a permis de mettre en évidence le spin 1/2 de l'électron ? Quelles sont les valeurs possibles de la projection du spin 1/2 sur un axe quelconque ?
3. Pour l'électron, la relation entre le moment magnétique et le spin est $\vec{\mu} = \gamma\vec{S}$, avec $\gamma = g\ \gamma_{cl}$ où g est appelé facteur de Landé ; ici g ~ 2 pour un électron libre. Soit $\pm\mu_B$ les valeurs de la projection de $\vec{\mu}$ sur un axe. Exprimer μ_B en fonction des données et déterminer son unité et ordre de grandeur.

2. Oscillations anharmoniques - théorie des perturbations.

On considère une particule sans spin à une dimension. Sa dynamique est décrite par le Hamiltonien $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$ avec $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}K\hat{q}^2$ qui est un oscillateur harmonique et un terme de 'perturbation' : $\lambda\hat{H}_1 = \lambda\hat{q}^4$ en supposant $\lambda \ll 1$.

Rappels sur l'oscillateur Harmonique : $\hat{H}_0|\varphi_n\rangle = \varepsilon_n|\varphi_n\rangle$ avec $n \in \mathbb{N}$, $\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ et $\omega = \sqrt{K/m}$. L'état fondamental normalisé est $\varphi_0(q) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} exp\left(-\frac{q^2}{2\sigma^2}\right)$ avec $\sigma = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$. On pourra utiliser $\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2}x^4dx = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$.

1. On note $E_n(\lambda) = \varepsilon_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$ l'énergie du niveau n de $\hat{H}$. Calculer la correction au premier ordre du niveau $n = 0$.
2. Dans le cas $\hbar = 1$, $m = 1$, $\omega = 1$, donner l'expression de la fonction $E_0(\lambda)$ obtenue dans le cadre de l'approximation de la question 1. Dessiner cette fonction sur la figure suivante que l'on recopiera sur la copie et qui représente $E_0(\lambda)$. Commenter.



3. Effet de la taille finie du proton

Le proton est composé de trois quarks. Il n'est pas ponctuel et présente un rayon typique $r_0 \approx 10^{-15}\ m$. Si l'on suppose que sa charge est distribuée uniformément dans une sphère de rayon r_0, un calcul d'électrostatique donne le potentiel d'interaction suivant pour l'électron (de masse m_e) :

$$V(r) = \begin{cases} +\dfrac{e^2}{2r_0}\left[\dfrac{r^2}{r_0^2} - 3\right] & \text{si} \quad r \leq r_0 \\ -\dfrac{e^2}{r} & si \quad r \geq r_0 \end{cases}.$$

La constante coulombienne est telle que $e^2 = q^2/4\pi\epsilon_0$, avec q la charge élémentaire et ϵ_0 la permittivité diélectrique du vide.

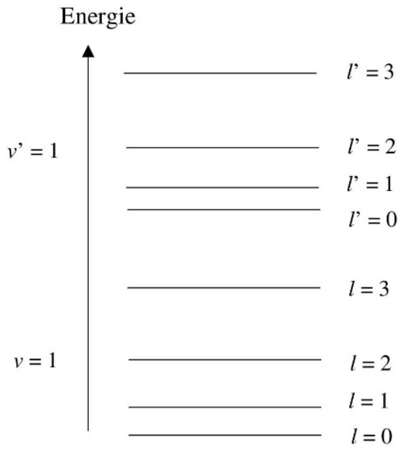
1. On écrit le Hamiltonien sous la forme $\hat{H}' = \hat{H} + \hat{W}$ où $\hat{H}$ est le Hamiltonien non perturbé de l'atome d'hydrogène (qui correspond à $r_0 = 0$) et $\hat{W}$ la correction due à la taille finie et non nulle du proton. Donner l'expression de $\hat{W}$ en fonction de e^2, r_0 et r.
2. Calculer l'élément de matrice $\langle \Psi_\beta | \hat{W} | \Psi_\beta \rangle$, avec $\Psi_\beta = \left(\frac{\beta}{\pi^{1/3}}\right)^{3/2} exp(-\beta r)$ une fonction d'essai normalisée et $\beta = \frac{m_e e^2}{\hbar^2} = \frac{1}{a_0}$ un paramètre ajustable dont la valeur optimale est obtenue par l'extrêmalisation de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène $\frac{dE(\beta)}{d\beta} = 0$ dans le cadre d'une méthode variationnelle ($\hbar$ constante de Planck réduite et a_0 rayon de Bohr). On pourra faire l'approximation $e^{-2r/a_0} \approx 1$ dans la calcul de l'élément de matrice.
3. Montrer que l'énergie variationnelle tenant compte de la taille finie du proton $E'(\beta)$ (qui correspond au Hamiltonien $\hat{H}'$) prend la forme $E'(\beta) = E(\beta) + \frac{2}{5} e^2 r_0^2 \beta^3$; $E(\beta)$ correspond à l'énergie variationnelle du Hamiltonien $\hat{H}$ non perturbé.
4. Calculer le nouveau rayon de Bohr a_0' pour l'atome d'hydrogène à proton de taille finie ; on pourra s'appuyer sur la méthode variationnelle mentionnée plus haut. L'électron est-il alors en moyenne plus proche ou plus loin du proton qu'en absence de la correction ? Estimer l'ordre de grandeur de l'effet sachant que $a_0 = 0{,}5$ Å.

4. Règles de sélection et spectre d'absorption

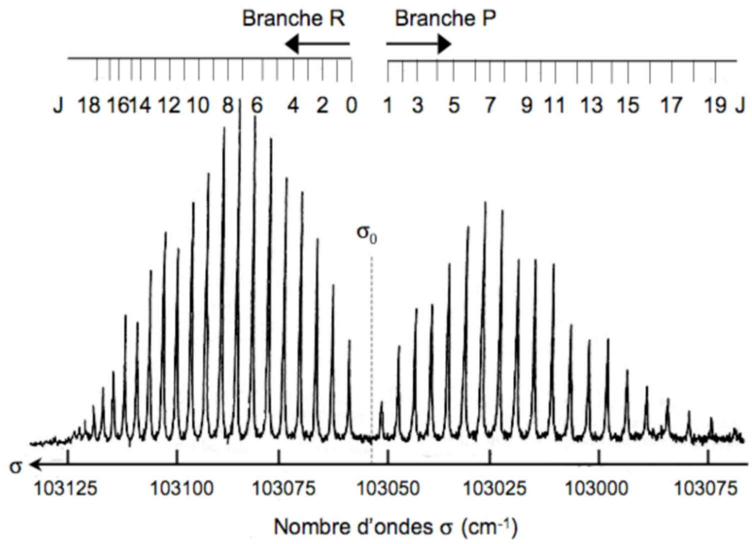
L'interaction entre le rayonnement électromagnétique et les degrés de liberté de rotation et vibration de la molécule se fait via l'opérateur de moment dipolaire qui peut s'écrire $\hat{\vec{d}} = (d_0 + d_1\hat{r})\vec{e}_r$ avec $\vec{e}_r$ le vecteur unitaire le long de l'axe de la molécule. Les transitions correspondant à l'absorption du champ ont des probabilités faisant intervenir les éléments de matrice de la projection de $\hat{d}$ selon l'axe z du champ soit $\langle v', l', m' | (d_0 + d_1\hat{r}) \cos\theta [v, l, m\rangle$, avec la notation $\Psi_{v,l,m} = \langle r, \theta, \varphi | v, l, m)$ et v le nombre quantique de vibration.

1. Décomposer les éléments de matrice ci-dessus comme un produit de deux éléments de matrices n'agissant respectivement que sur les $\{[v\rangle\}$et que sur les $\{[l, m\rangle\}$.
2. On rappelle que pour l'oscillateur harmonique on peut écrire $\hat{r} \propto (a^+ + a)$, avec a^+ et a les opérateurs de création et d'annihilation. Montrer que les transitions possibles doivent satisfaire la condition $v' - v = -1, 0, +1$.
3. On peut montrer que $\langle l', m' | \cos\theta [l, m\rangle = [g_{l,m}\delta_{l',l-1} + h_{l,m}\delta_{l',l+1}]\delta_{m,m'}$ où les $g_{l,m}$ et $h_{l,m}$ sont des facteurs numériques. En déduire les valeurs possibles de $l' - l$.
4. Sur le diagramme de la figure ci-dessous gauche, tracer par des flèches les transitions possible entre niveaux de v différents.

5. Sur la figure ci-dessous droite, interpréter l'allure du spectre et les échelles d'énergies représentées en fonction de $\hbar\omega$ et B.



Niveaux d'énergie $E_{v,l}$



Spectre de rotation-vibration de la molécule de CO à température ambiante