

Examen 2022 s2 : Physique Atomique et Moléculaire

06 juin 2023

-- 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. Effet Zeeman de l'atome de silicium

- 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.
- 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.
- Etablir un diagramme des niveaux énergétiques de ces multiplets, sans puis avec structure fine.
- 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 $\omega_0 = \mu_B B$.
- Expliquer comment l'application d'un champ B permet de déterminer la valeur J des niveaux.

3. Atome d'Hélium dans l'état fondamental

- On considère un ion He^+ . Les masse et charge de l'électron sont notées respectivement m_e et $-q$ ($q > 0$). La charge du noyau est Zq , avec Z entier. On pose $e^2 = q^2 / (4\pi\epsilon_0)$.
 - On désigne par $\Psi_{n, l, m}(\mathbf{r})$ la partie orbitale des états de l'électron d'énergie négative (états liés). Indiquer les observables associées aux deux nombres quantiques l et m , et les valeurs possibles de ces nombres.
 - Donner en fonction de Z et du rayon de Bohr $a_1 = \hbar^2 / (m_e e^2)$ l'expression de $\Psi_{n=1, l, m}(\mathbf{r})$, i.e. l'état fondamental de l'ion He^+ , sachant que la partie radiale s'écrit $2(Z/a_1)^{3/2} \exp(-Zr/a_1)$.
 - Rappeler sans démonstration comment varie avec Z l'énergie et la taille caractéristique de cet état fondamental.
- L'atome d'hélium est formé par un noyau de charge $Z=2$ et deux électrons. Dans cette question, on prend seulement en compte l'interaction coulombienne entre le noyau et chaque électron. On néglige en particulier la répulsion électrostatique entre les deux électrons. Le noyau est supposé infiniment lourd et immobile en $\mathbf{r} = 0$.
 - Ecrire le Hamiltonien \hat{H} des deux électrons. Le mettre sous la forme $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, où \hat{H}_i ($i = 1, 2$) fait intervenir les opérateurs position \mathbf{r}_i et impulsion \mathbf{p}_i de l'électron i .

(T.S.V.P)

- ii. Quelle est l'énergie E_f du niveau fondamental de \hat{H} dans cette approximation d'électrons indépendants ? En prenant en compte le principe de Pauli, donner la dégénérescence de ce niveau et l'expression du (ou des) état(s) propre(s) (orbital + spin).
- iii. On rappelle que $m_e e^4 / (2\hbar^2) = 13,6$ eV. En déduire la valeur numérique de E_f .
- c. On prend en compte l'interaction coulombienne entre les deux électrons : $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^2 / |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Calculer l'effet de V sur le niveau fondamental de \hat{H} au premier ordre de la théorie des perturbations. On donne l'intégrale $\iint \left(\frac{e^{-2(\rho_1 + \rho_2)}}{|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|} \right) d^3 \rho_1 d^3 \rho_2 = \frac{5\pi^2}{8}$ que l'on utilisera après avoir lié chaque \vec{r}_i à $\vec{\rho}_i$. Donner en électronvolts la valeur de l'énergie du niveau fondamental à cet ordre du calcul.
- d. En plus de sa charge $-q$, chaque électron possède un moment magnétique $-q\hbar / (2m_e)$.
 - i. Estimer la valeur de l'énergie d'interaction magnétique entre ces deux moments magnétiques. On ne cherchera pas à calculer les moyennes spatiales susceptibles d'apparaître et on se contentera de donner un ordre de grandeur de l'effet.
 - ii. Comparer l'énergie d'interaction magnétique entre électrons au terme d'interaction coulombienne. On utilisera $\epsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$ et on exprimera le rapport entre ces deux termes en fonction de la constante de structure fine $\alpha = e^2 / (\hbar c)$. Les effets magnétiques sont-ils importants ?
- e. La mesure expérimentale de l'énergie du niveau fondamental de l'atome d'hélium donne $E_f = -79$ eV. Comment ceci se compare-t-il aux prédictions du modèle précédent ? Comment pourrait-on améliorer la précision du calcul ?

4. Vibration et rotation des molécules CN et CN^+

On considère la rotation et la vibration des molécules CN et CN^+ .

- a. Calculer la masse réduite de ces deux molécules.
- b. La longueur de la liaison CN^+ est de $1,29$ Å. Calculer la position des premières raies du spectre d'absorption (branche R).
- c. En supposant une distribution de Boltzmann pour les états initiaux, calculer J_{\max} en fonction de la température, où J_{\max} est le nombre quantique de l'état de rotation le plus peuplé. En utilisant les résultats de la deuxième question, calculer J_{\max} pour $T = 300$ K et $T = 1000$ K. On rappelle la constante de Boltzmann $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J K⁻¹.
- d. Comparer les constantes de raideur pour les liaisons CN et CN^+ sachant que les ω valent respectivement $\tilde{\nu}_{vib1} = 2068$ cm⁻¹ et $\tilde{\nu}_{vib2} = 1580$ cm⁻¹.