

# Examen 2023 s2 : Physique Atomique et Moléculaire

10 janvier 2024

-- TOUT DOCUMENT ET OBJET CONNECTÉ EST INTERDIT --

**Données :** on rappelle l'énergie d'un hydrogénoïde dans l'état quantique  $n$  :  $E_n = -\frac{E_I Z^2}{n^2}$ , avec  $E_I$  le potentiel d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

## 1. Question de cours

1. On considère l'addition de deux moments angulaires telle que  $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ . Montrer que  $\vec{J}$  est également un moment angulaire.
2. Décrire l'origine physique du terme de contact dans la correction de structure hyperfine.

## 2. Structure hyperfine

Nous allons considérer l'interaction du spin nucléaire  $\vec{I}$  ( $I = 1/2$ ) d'un atome hydrogénoïde ( $Z = 53$ ) avec le moment total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ , de nombre quantique principal  $n = 3$ . Le Hamiltonien d'interaction du système s'écrit  $\hat{H} = \hat{H}_0 + k\vec{I} \cdot \vec{J} + \hat{A}$ . L'opérateur  $\hat{A}$  est un opérateur de couplage entre les états hyperfins du système. Il agit donc sur le moment total  $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$  du système, et est défini par  $\hat{A}|F\rangle = \hbar^2(F - 2)|F + 1\rangle - (F - 1)\hbar^2|F - 1\rangle$ .

1. Quelle(s) interaction(s) est (sont) prise(s) en compte dans  $\hat{H}_0$  ? Dans  $k\vec{I} \cdot \vec{J}$  ?
2. Donner, dans la base  $|nLSJ\rangle$  la liste des vecteurs propres de  $H_0$  associés à  $n = 3$ . Combien d'états quantiques  $m_j$  sont associés à chaque vecteur  $|nLSJ\rangle$  ? Est-ce compatible avec le nombre d'électrons possible associé au remplissage complet de chaque couche  $L$  ?
3. Donner l'expression de l'énergie  $E_0$  associée à  $\hat{H}_0$  en fonction de la constante de structure fine  $\alpha$ , de  $Z$ , de  $n$  et de l'énergie au repos de l'électron  $m_e c^2$ . La calculer pour  $n = 3$ . Dans ce qui suit, nous nous intéresserons uniquement aux états  $J = 3/2$ .
4. En introduisant le nombre quantique  $F$ , donner la base des vecteurs  $|IJF\rangle$  associés à  $J = 3/2$ . Sont-ils vecteurs propres de  $\hat{H}_0$ , de  $k\vec{I} \cdot \vec{J}$ , de  $\hat{H}$  ? Justifier.
5. Donner l'expression de  $k\vec{I} \cdot \vec{J}$  en fonction de  $\vec{F}^2$  puis calculer les valeurs propres de la somme  $\hat{H}_0 + k\vec{I} \cdot \vec{J}$  en fonction de  $E_0$ ,  $\hbar$  et  $k$  pour les états propres  $|IJF\rangle$ . On rappelle l'expression  $F^2|F\rangle = \hbar^2 F(F+1)|F\rangle$ .
6. Calculer les quatre éléments de matrices associés à  $\hat{A}$  dans la base des vecteurs  $|IJF\rangle$ .
7. Diagonaliser la matrice associée à  $\hat{A}$  pour en déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de manière à rendre la matrice associée à  $\hat{H}$  diagonale. On n'oubliera pas la normalisation des états.

(T.S.V.P)

### 3. L'azote N

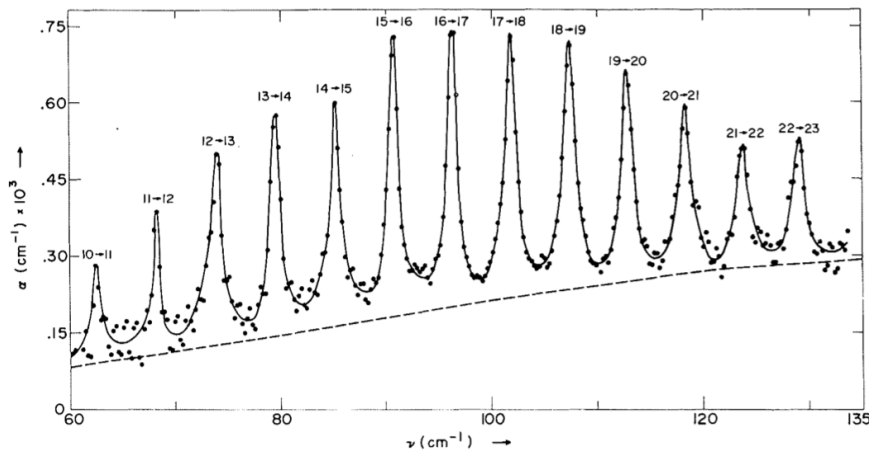
1. Donner la configuration électronique ( $nl$ ) de l'azote neutre dans l'état fondamental.

Les constantes d'écran individuelles  $\sigma$  des électrons  $s$  ou  $p$  sont récapitulées dans le tableau ci-dessous :

Electron d'origine	Contribution des autres électrons				
	$n-2, n-3$ ...	$n-1$	$n$		$n+1, n+2$ ...
	$s, p$	$s, p$	$s$	$p$	$s, p$
$s$	1	0,85	0.35	0.35	0
$p$	1	0.85	0.35	0.35	0

- En utilisant le tableau ci-dessus, déterminer les charges  $Z_2^*$  et  $Z_1^*$  effectives vues par un électron de la couche  $n = 2$  et  $n = 1$  respectivement pour l'azote neutre. Même question pour  $N^+$  ; on notera  $Z^{2+*}$  et  $Z_1^{+*}$  les deux valeurs correspondantes.
- Calculer l'énergie de l'état fondamental de l'azote neutre et de l'ion  $N^+$ . Détailler le calcul et faire l'application numérique approchée au 1/2-eV près. En déduire l'énergie d'ionisation et la comparer au 14,53 eV mesurés expérimentalement.
- En déduire la longueur d'onde (en nm) du photon qu'il faut utiliser pour ioniser l'azote. De quel type de rayonnement agit-il ?
- En couplage  $LS$  quels sont les termes spectroscopiques et la base  $|LSJ\rangle$  associés à  $N^+$ . Donner la base des états  $|LSJ\rangle$  associé.
- Déterminer les écarts en énergie  $\delta E_J$  par rapport à  $H_0$  de chaque état du triplet  $P$  de l'azote  $N^+$  lié à l'interaction spin-orbite (on notera  $A_{2p}$  la valeur de la partie radiale identique pour le triplet et on rappelle que  $J^2|LSJ\rangle = \hbar^2 J(J+1)|LSJ\rangle$ ). Faire un diagramme d'énergie.
- Le couplage  $LS$  modifie-t-il la position des singulets  $^1S$  et  $^1D$  de  $N^+$  ? Faire un diagramme des niveaux  $|LSJ\rangle$  dans  $N^+$ .

### 4. Spectroscopie rotationnelle



Pourquoi arrive-t-on à mesurer le spectre rotationnel de cette molécule sphérique qui en principe ne comporte pas de moment dipolaire ?