STME : mention PHYSIQUE
M1 Parcours Sciences Physiques et Chimiques
EM8PCEA2E2 – Année 2014-2015

EXAMEN TERMINAL DE PHYSIQUE ATOMIQUE ET SUBATOMIQUE

mai 2015 - Durée 1h30
TOUT DOCUMENT INTERDIT – PARTIES INDEPENDANT

Les parties A et B sont indépendantes

A – l'Azote N (10 pts)

A1) Donner le configuration électronique (nl) de l'Azote neutre dans l'état fondamental.

Réponse : $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$

Les constantes d'écran individuelles σ_ι 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 etc.
	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

A2) En utilisant le tableau ci-dessus, déterminer les charges Z_2^* et Z_1^*effective vue 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.

*Réponse : 1 electron 2p ou 2s voit 4 électrons dans n=2 et 2 électrons dans n=1 soit s2p,(2s,sp)=0.35*4 + 0.85*2 soit Z2*=7-3.1 -7=3.9. Un electron 1s voit 1 autre electron 1s => Z1*=7-0.35=6.65*

A3) 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 demi eV pré). En déduire l'énergie d'ionisation et comparer au 14.53eV mesuré expérimentalement.

Réponse :
Etot(N)=-5*13.6*(Z2*)²/2² - 2*13.6*(Z1*/1)²=-1461.422eV (Z2=3.9, Z1=6.65)
Z2(n+)=(7-2*0.85-3*0.35)=4.25*
*E(tot N+)= -4*13.6*(Z2*)²/4 – 2*13.6*Z1*=-1448.5 eV*

A4) En déduire la longueur d'onde en nm du photon qu'il faut envoyer pour ioniser l'Azote. De quel type de rayonnement agit-il ?

Réponse :
Ei ~13eV => l=1240/13=100 nm => UVC

A5) En couplage LS quels sont les termes spectroscopiques et la base |LSJ> associés à N^+. Donner la base des états |LSJ> associé.

Réponse :

|0, 0, 0> : $^1S_0$

|1,1,0> $^3P_0$; |1,1,1> $^3P_1$;|1,1,2> $^3P_2$

|0,2,2> $^1D_2$

A6) Déterminer les écarts en énergie δE_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 $J|LSJ\rangle=J(J+1)\hbar^2|LSJ\rangle$). Faire un diagramme d'énergie.

Réponse :

On doit calculer $\delta Ej= \langle LSJ|A_{2p}\, L.S|LSJ\rangle =A_{2p} \langle LSJ|J^2-L^2-S^2|LSJ\rangle$ Les L=1 et S=1 sont les mêmes :

$\delta Ej= A_{2p}(J(J+1) - 4)\, \hbar^2$

$\delta E2= + 2\hbar^2 A_{2p}$

$\delta E1= - 2\hbar^2 A_{2p}$

$\delta E0= - 4\hbar^2 A_{2p}$

A7) Le couplage LS modifie-t-il la position des singulet ^1S et ^1D de N^+. Faire un diagramme des niveaux |LSJ> dans N^+.

Réponse : Non. J=0 S=0 L=0 dE(1S) = 0 et J=2 L=2 S=0 alors dE=k(J(J+1)-L(L+1))=0.*

B – Transition dipolaire électrique

B1 - traitement quantique de l'interaction (6pts)

Le Hamiltonien d'interaction dipolaire électrique entre atome d'hydrogène et un photon de polarisation z s'écrit :

$$W_{DE} = -\frac{eE_0}{m\omega}\hat{P}_z \sin(\varpi t)$$

Où e et m sont la charge et la masse de l'électron, E_0 l'amplitude du champ électrique associé au photon suivant la direction z, et ω la pulsation propre du photon incident. (Rappel : ε=hc/λ=ħω. $\widehat{P_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$).

1. Ecrire le Hamiltonien (représentation opérateur) H_0 de l'électron dans le champ coulombien du proton.

$$H_0 = -\frac{P^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

2. Soit |n,l,ml > un état propre de H_0 quel est en fonction du nombre quantique n l'énergie de cet état (on donnera l'expression la constante en fonction de la constante de structure fine).

$$H_0|\mathrm{n,l,ml}> = E_n|\mathrm{n,l,ml}> = -\frac{\alpha^2 m_e c^2}{2\mathrm{n}^2}|\mathrm{n,l,ml}>$$

3. Donner la valeur du commutateur $[\hat{z}, \hat{P_z}] = \hat{z}\widehat{P_z} - \widehat{P_z}\hat{z}$ (détailler le calcul)

$$[\hat{z}, \hat{P_z}]\Psi(\mathrm{z}) = (\hat{z}\widehat{P_z} - \widehat{P_z}\hat{z})\Psi(\mathrm{z}) = -i\hbar(z\frac{\partial\Psi(\mathrm{z})}{\partial z} - \frac{\partial(\mathrm{z}\Psi(\mathrm{z}))}{\partial z} = i\hbar\Psi(\mathrm{z})$$
$$=> [\hat{z}, \hat{P_z}] = i\hbar$$

On considère les états électroniques initiaux et finaux notés |i> et |f> associée à l'absorption par l'électron d'un photon et tels que $\widehat{H}_0|i> = \varepsilon_i|i>$ et $\widehat{H}_0|f> = \varepsilon_f|f>$.

4. Quelle est la fréquence ω' du photon émis ou absorbé lors de la transition |i> –>|f>

$$\frac{|E_i - E_f|}{\hbar} = \varpi'$$

On peut montrer que $< i|\hat{z}|f > = \frac{-i}{m\omega'} < i|\hat{P_z}|f >$

5. En déduire l'expression de $< i|W_{DE}|f >$ en fonction de $< i|\hat{z}|f >$ de ω' et de E_0.

$$< i|W_{DE}|f > = -\frac{eE_0}{m\varpi}\sin(\varpi t) < i|P_z|f > = -\frac{iE_0\varpi'}{\varpi}\sin(\varpi t) < f|z|i >$$

B2 - Application (4pts)

Soit les états propres d'un atome d'hydrogène définis par les fonctions d'ondes suivantes :

$$\psi(ns) = R_{nl}(r)\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \rightarrow |n\ 0\ 0> \text{ et } \psi(np0) = R_{nl}(r)\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta) \rightarrow |n\ 1\ 0>$$

En calculant **explicitement** la valeur de $< nl0|W_{DE}|n'l0 >$, montrer que les transitions (ns –> n's) et (np –> n'p) sont interdites i.e $< nl0|W_{DE}|n'l0 > = 0$ et que les transitions (ns –> n'p) sont autorisées i.e que $< nl0|W_{DE}|n'l'0 >$ est non nul. (On remarquera pour cela que z=r*cos(θ) et on notera $A_{nn'}$ le résultat de l'intégrale radiale)

Réponse : Il faut calculer $< f|z|i > = < f|rcos(\theta)|i >$

ns,ns' : (1pt)

$< n\,0\,0\,|\,rcos(\theta)|n^{'}0\,0 >= \int_r \; R_n(r)^* r R_{n^{'}}(r)\,r^2 dr \iint_{\theta,\varphi} \frac{\cos(\theta)}{4\pi} \sin(\theta)\,d\theta d\varphi = A_{00} * c^{te} *$ $[-cos^2(\theta)]_0^{\pi}$=0

np,np' (1pt)

$< n\,1\,0\,|\,rcos(\theta)|n^{'}1\,0 >= \int_r \; R_n(r)^* r R_{n'}(r)\,r^2 dr \iint_{\theta,\varphi} \frac{3\cos^3(\theta)}{4\pi} \sin(\theta) d\theta d\varphi = A_{00} * c^{te} *$ $[\cos^4(\,\theta)]_0^{\pi}$=0

ns,np (1pt)

$< n\,0\,0\,|\,rcos(\theta)|n^{'}1\,0 >= \int_r \; R_n(r)^* r R_{n^{'}}(r) r^2\,dr \iint_{\theta,\varphi} \frac{\sqrt{3}}{4\pi} cos^2(\theta) \sin(\theta)\,d\theta d\varphi =$ $A_{nn^{'}} \frac{\sqrt{3}}{2} \int_0^{\pi} cos^2(\theta) \sin(\theta)\,d\theta = A_{nn^{'}} \frac{\sqrt{3}}{2} [-\frac{1}{3}\cos^3(\,\theta)]_0^{\pi} = \frac{A_{nn^{'}}}{\sqrt{3}}$ non nul