UNIVERSITE PAUL SABATIER
TOULOUSE III

STME : mention PHYSIQUE
M1 Parcours Sciences Physiques et Chimiques
2M80PC3E1

Année
2007/2008

PHYSIQUE ATOMIQUE ET SUBATOMIQUE

Partiel du 3 mars 2008

TOUT DOCUMENT INTERDIT – PARTIES INDEPENDANTES - DUREE 1H30

Partie 1 : Etude d'un état excité du tritium (10 pts)

L'atome de tritium est un isotope de l'hydrogène avec un noyau constitué d'un proton et de deux neutrons, autour duquel gravite un électron. Un neutron est une particule de même masse que le proton et de même spin. Dans tout le problème, on considéra la masse réduite μ du système noyau – électron.

1. Donner la valeur de la masse réduite μ ainsi que le rayon de Bohr associé : $a_\mu = a_0\ (m_e/\mu)$

$$\mu = \left[\sum_i^N \left(\frac{1}{m_i}\right)\right]^{-1}$$ ici $m_{Noy} = m_N + 2m_p \sim 3m_p$

$$\mu = \frac{3m_e m_p}{m_e + 3m_p} = \frac{m_e}{1+\frac{m_e}{3m_p}}$$ comme $m_p \gg m_e$ $\mu \sim m_e$ et $a_\mu \simeq a_0$ $(0{,}5\ 10^{-10}\ m)$

2. Donner l'expression des niveaux d'énergie du tritium en fonction du nombre quantique principal n, de μ, c et α. On précisera la nature et la valeur de ce dernier paramètre.

$$E_n = -\frac{m_e c^2 \alpha^2}{2} \frac{Z^2}{n^2}$$

$Z = 1$: chg du noyau
α : 1/137 constante de struct. fine
$m_e c^2$: nrj de masse de l'e^-
n : nb. quantique principale

3. Calculer l'énergie du niveau de configuration $3d$. Que représente d ? Quelle serait la valeur de cette énergie pour un atome d'hydrogène dans la même configuration ?

$3d$: $n = 3$ $E_3 = -13{,}6 \times \frac{1}{9} = -1{,}51\ eV$

d : nb. quantique orbitale comme $\mu = m_e$ $\hat{m}$ energie pour H

4. Les états quantiques correspondants à la configuration $3d$ sont-ils dégénérés ? Le cas échéant, donner la valeur de cette dégénérescence:

   a. en ne tenant pas compte du spin du noyau. Préciser la base des vecteurs associés.

$$\left\{ \left| 2, 3, \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \frac{1}{2}, \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} \right\rangle \right\}$$

car $l = 2$ $-2 < m_e < 2$
$s = \frac{1}{2}$ m_s $-\frac{1}{2} < m_s < \frac{1}{2}$
$D_g = (2l+1)(2s+1) = \cancel{4}\ 10$

   b. en tenant compte du spin du noyau. *On ne demande pas ici de décrire la base.*

$\sum I_N = I_{Noy} = \frac{3}{2} \Rightarrow d_g = (2l+1)(2s+1)(2I+1) = 40$

5. Calculer l'énergie de la transition radiative d'un état excité du tritium de configuration $3d$ vers un état de configuration $3p$. Commenter le résultat. Cette transition est cependant observable ; justifier succinctement ce fait expérimental.

Si on utilise (3) on trouve $\Delta E = 0 \Rightarrow E_{h\nu} = 0$!

Pourtant $3d \rightarrow 3p$ existe ! $\Rightarrow$ tenir compte des corrections Relativiste i.e W_{mv}, W_{SO}, W_D

$n=3$ — $\sum E$ $3d$, $3p$, $3s$ } levée de dg.

6. Quels sont les vecteurs de la base associés à la configuration *3p* si l'on ne tient pas compte du spin de noyau ?

$\underline{3P}$ $n=3$ $\ell=1$ $m_\ell = 0, \mp 1$ $|n, \ell, s, m_\ell\, m_s\rangle$

BASE : $\left|3\ 1 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}\right\rangle$ $\boxed{dg = 6}$

7. Que représentent les quantités Ψ, $\Psi\Psi^*$, $\Psi\Psi^*\, \delta^3 V$? Donner l'expression de la densité de probabilité de présence d'un électron dans la configuration $3p_0$?

Ψ : Fonction d'onde (PAS physique en G^{nl} complexe)

$\Psi\Psi^*$: densité de PROBA. elem de presence

$\Psi\Psi^* d^3V$: PROBABilité de Presence | $d^3P(r,\theta,\varphi) = R(r)\, r^2 dr\ Y(\theta,\varphi) \sin\theta\, d\theta d\varphi$

8. Quelle est la signification physique de la normalisation des fonctions d'ondes ? Calculer la valeur de K pour la fonction d'onde $\Psi(3p_0)$ en normalisant sa partie angulaire.

$$\int_V \Psi\Psi^* dV = 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle$$ l'électron est quelque part !

Normalisation de $Y(\theta,\varphi)$

$$\iint_{\varphi\ \theta} Y^* Y \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = 1$$

$$1 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \left(\frac{K\sqrt{\pi}}{27}\right)^2 \cos^2\theta \sin\theta\, d\theta$$

$$1 = 2\pi \left(\frac{\sqrt{\pi}}{27}\right)^2 \frac{K^2}{3} \left[-\cos^3\theta\right]_0^{\pi} = \frac{4\pi^2}{3\times 27^2} K^2$$

$$K^2 = \frac{3\times 27^2}{4\pi^2}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{K = \frac{\sqrt{3}}{2}\, \frac{27}{\pi}}$$

9. Donner les 3 distances qui correspondent aux valeurs extrémales de la densité de probabilité radiale pour l'orbitale $3p_0$. *On remarquera que:* $\frac{d^2(f(r)^2)}{dr^2} = 2f(r)\frac{df(r)}{dr}$

$$dP(r) = R^2(r)\, r^2\, dr \qquad f(r) = r\,R(r)$$

$$\left.\frac{d^2P(r)}{dr^2}\right|_{r=r_p} = 0 = 2r_p\left(R(r_p)\right)\frac{d}{dr}\left(r(R(r))\right)$$

1^er^ solution : $R(r_{p_1}) = 0 \iff \left(1 - \frac{Zr_1}{6a_0}\right) = 0 \iff \boxed{r_{p_1} = 6a_0}$

2^e^ Solution : $\left.\frac{d}{dr}\left(r R(r)\right)\right|_{r=r_p} = 0 = \frac{d}{dr}\left(r^2 - \frac{r^3}{6a_0}\right)e^{-r/3a_0}$

$$\iff \left(2r - \frac{r^2}{2a_0}\right)e^{-r/3a_0} - \frac{1}{3a_0}\left(r^2 - \frac{r^3}{6a_0}\right)e^{-r/3a_0} = 0$$

$$\iff 2r - \frac{r^2}{2a_0} - \frac{r^2}{3a_0} + \frac{r^3}{18a_0^2} = 0 \iff 0 = 36a_0^2 - \frac{5\times 18}{6a_0}a_0^2 + r^2 = 0$$

Soit $\boxed{r^2 - 15a_0 r + 36a_0^2 = 0}$ $\quad \Delta = 81a_0^2 \Rightarrow \begin{cases} \boxed{r_{2p} = 12a_0} \\ \boxed{r_{p_3} = 3a_0} \end{cases}$

10. Donner, sans la calculer, l'expression de la valeur moyenne de r en notation de Dirac ainsi que son pendant en notation intégrale.

$$\langle r \rangle = \frac{\langle \Psi_{3p_0} | r | \Psi_{3p_0} \rangle}{\langle \Psi_{3p_0} | \Psi_{3p_0} \rangle} = \frac{\iiint_V \Psi^* r \Psi\, d^3V}{\iiint_V \Psi \Psi^* d^3V}$$

Avec $d^3V = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$ et si Ψ_{3p_0} normalisée

$$\iint \Psi_{3p_0}^* \Psi_{3p_0}\, d^3V = 1$$

Données : *fonction d'onde de l'état $3p_0$,*

$$\Psi_{3p_0}(r,\theta,\varphi) = \frac{8\sqrt{2}}{3}\frac{Zr}{a_\mu}\left(1 - \frac{Zr}{6a_\mu}\right)\left[\exp\left(-\frac{Zr}{3a_\mu}\right)\right]Y(\theta,\varphi) \quad \text{et} \quad Y(\theta,\varphi) = \frac{K\sqrt{\pi}}{27}\cos(\theta)$$

avec Y(θ,φ) la partie angulaire de la fonction d'onde et K une constante positive.

Partie : effet de taille du TRITIUM

Distribution de charge $\rho = \frac{3q}{4\pi R_p^3}$ $\Rightarrow$ effets sur niveaux 2s et 2p

1) Levée partielle de dégénérescence sur niveau d'énergie (n, ℓ) $\Rightarrow$ $2s / 2p$

2) $V(r) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r}$ $r \geq R_p$ $\Rightarrow U(r) = \frac{-q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{-e^2}{r}$

$V(r) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2R_p}\left(3 - \frac{r^2}{R_p^2}\right)$ $r < R_p$ $\Rightarrow U(r) = \frac{-q^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2R_p}\left(3 - \frac{r^2}{R_p^2}\right)$

$= \frac{-e^2}{2R_p}\left(3 - \frac{r^2}{R_p^2}\right)$

Hamiltonien $H_{tf} = T + U = \frac{P^2}{2m} + U(r)$

$r \geq R_p$ $H_{tf} = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = H_0$ $\Rightarrow W = 0$ pour $r \geq R_p$

$r < R_p$ $H_{tf} = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{2R_p}\left(3 - \frac{r^2}{R_p^2}\right)$

3) $W = 0$ pour $r \geq R_p$

$W = H_{tf} - H_0 = \cancel{\frac{P^2}{2m}} - \frac{e^2}{2R_p}\left(3 - \frac{r^2}{R_p^2}\right) - \left(\cancel{\frac{P^2}{2m}} - \frac{e^2}{r}\right) = \underbrace{-\frac{3e^2}{2R_p}}_{\text{cste}} + \left(\frac{e^2}{r} + \frac{e^2 r^2}{2R_p^3}\right)$

pour $r < R_p$

4) $\Delta E = \langle \psi | W | \psi \rangle$

$$\Delta E = \underbrace{\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_\ell^{m*}(\theta,\varphi)\, Y_\ell^{m}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi}_{\text{partie angulaire } = 1} \int_0^{R_p} R_{n\ell}^*(r)\, W(r)\, R_{n\ell}(r)\, r^2 dr$$

$$= \int_0^{R_p} |R_{n\ell}(r)|^2 W(r)\, r^2 dr = \langle R_{n\ell}(r) | W(r) | R_{n\ell}(r) \rangle$$

$2s$ $\qquad \Delta E_{2s} \simeq \int_0^{R_p} \frac{1}{2a_\mu^3} W(r) r^2 dr$

$$= \frac{1}{2a_\mu^3} \int_0^{R_p} \left[-\frac{3e^2 r^2}{2R_p} + e^2 r + \frac{e^2 r^4}{2R_p^3} \right] dr$$

$$= \frac{1}{2a_\mu^3} \left\{ \left[-\frac{e^2 r^3}{2R_p} \right]_0^{R_p} + \left[\frac{e^2 r^2}{2} \right]_0^{R_p} + \left[\frac{e^2 r^5}{10 R_p^3} \right]_0^{R_p} \right\}$$

$$= \frac{1}{2a_\mu^3} \left\{ \cancel{-\frac{e^2 R_p^2}{2}} + \cancel{\frac{e^2 R_p^2}{2}} + \frac{e^2 R_p^2}{10} \right\} = \frac{e^2 R_p^2}{20\, a_\mu^3} \left(= \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{20} \frac{R_p^2}{a_\mu^3} \right)$$

$$= \frac{e^2 R_p^2}{20 a_\mu^3} = \frac{e^2 R_p^2 \mu e^2}{2 \times 10 \times a_\mu^2 \times \hbar^2} = \frac{E_I}{10} \left(\frac{R_p}{a_\mu} \right)^2 = \frac{E_I}{10} \left(\frac{R_p}{a_0} \right)^2$$

AN: $\Delta E_{2s} = \frac{13{,}6}{10} \left(\frac{1{,}5\ 10^{-5}}{0{,}53} \right)^2 \sim 1{,}09\ 10^{-9}\ \mathrm{eV}!$ $\Rightarrow$ fortement négligeable.

$/ \frac{13{,}6}{4} \sim 3{,}4\,\mathrm{eV}$

$\Delta E_{2p} \simeq 0$