

Physique Atomique et Moléculaire

M1 physique fondamentale/astrophysique 2012-2013

Examen, session 2

2 heures, 2 pages, 3 sections, 10 questions, (40 points)

Mardi 18 juin 2013

aucun autre document n'est autorisé

A. Question cours

Au cours l'opérateur de l'interaction hyperfine dans un atome d'hydrogène a été développé:

$$\hat{H}^{\text{HFS}} = \frac{g_p e^2}{2m_0 m_p c^2 r_{ep}^3} \overset{(2)}{\vec{\ell}_e \cdot \vec{s}_p} - \frac{g_p e^2}{2m_0 m_p c^2} \left\{ -\frac{8\pi}{3} \overset{(2)}{\delta^{(3)}(\vec{r}_{ep})} \vec{s}_e \cdot \vec{s}_p + \frac{\vec{s}_e \cdot \vec{s}_p}{r_{ep}^3} - \frac{\overset{(2)}{\vec{s}_e} (3\vec{r}_{ep} \otimes \vec{r}_{ep}) \overset{(2)}{\vec{s}_p}}{r_{ep}^5} \right\}. \quad (1)$$

Discutez brièvement la physique de chaque terme de cet opérateur. L'opérateur, comment a-t-il été obtenu? (2)

(9 p)

B. Problème: Théorie atomique

Soit un atome de brome simplement ionisé, Br^+ ($Z = 35$, 34 électrons).

- (3) 1. Utiliser les moyens introduits au cours pour déterminer la configuration électronique de l'état fondamental électronique (on suppose que les moyens sont applicables à un simple ion aussi).
- (6) 2. Déterminez ensuite en couplage de Russell-Saunders les termes spectroscopiques pour cette configuration électronique (sans interaction spin-orbite, puis incluant interaction spin-orbite).
- (4) 3. Postulez l'ordre énergétique pour l'ensemble des termes Russell-Saunders, incluant le couplage spin-orbite. Justifiez votre ordre physiquement!

(13 p)

C. Problème: Théorie moléculaire

On suppose de connaître un diagramme de corrélation pour les orbitales atomiques de l'atome d'azote (N) et l'atome d'hydrogène (H) ainsi que pour les orbitales moléculaires de la molécule NH (voir figure 1).

- (2) 1. Déterminez la configuration électronique attendue pour l'état fondamental moléculaire utilisant le schéma de Figure 1. (Indication: Remplissez les orbitales moléculaires en accord avec un critère énergétique et le principe de Pauli.)
- (4) 2. Déterminez les termes spectroscopiques en couplage $\Lambda - S$ pour la configuration électronique moléculaire, en n'utilisant que les deux électrons d'énergie la plus élevée.
- (3) 3. Postulez le terme pour l'état électronique fondamental et justifiez physiquement votre choix.
- (4) 4. Formulez des déterminants de Slater pour la partie externe à deux électrons de ce terme spectroscopique moléculaire. (Indication: On cherche des fonctions propres de spin!)

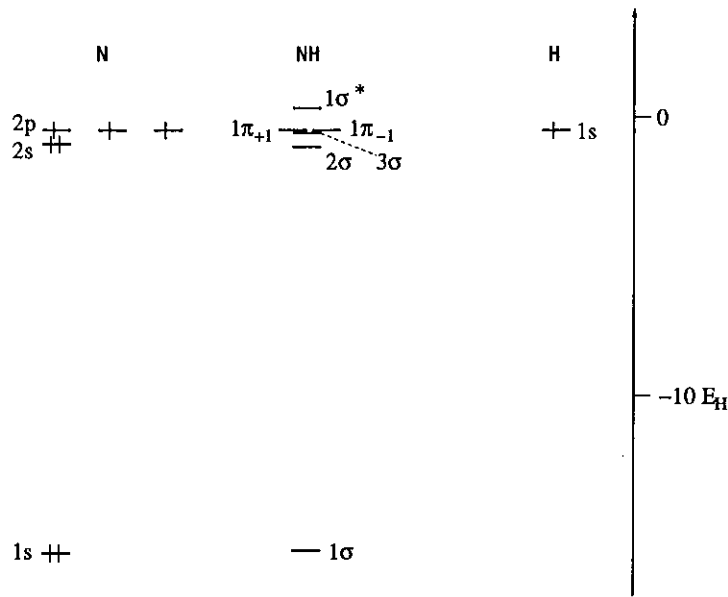


Figure 1: Schéma des orbitales atomiques et moléculaires comme résultat d'un calcul Hartree-Fock utilisant des bonnes bases atomiques. Les énergies sont à l'échelle. Notation moléculaire: $n\lambda_{m_\ell}$ partie spatiale d'une orbitale.

5. L'opérateur perturbatif de l'effet Zeeman pour le cas d'un champ suffisamment fort soit

$$(4) \quad \hat{H}_{\text{Zee}}^{(1)} = -\frac{\gamma_e}{c} \vec{B} \cdot \sum_{i=1}^2 \left(\hat{\ell}(i) + 2\hat{s}(i) \right), \quad (2)$$

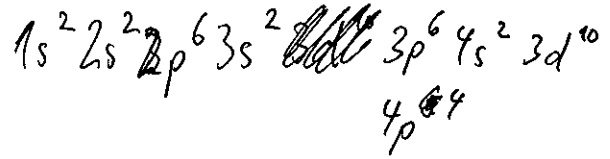
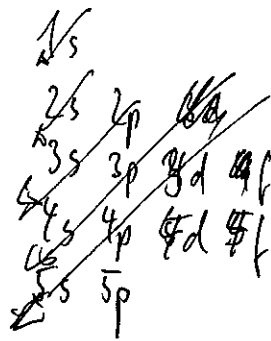
avec $\vec{B} := B_3 \cdot \vec{e}_3$. L'axe de symétrie de la molécule soit x_3 . Calculez explicitement l'effet Zeeman pour les états $|(\Lambda - S)_{M_S}\rangle$, utilisant le(s) déterminant(s) de Slater obtenus ci-dessus. On suppose l'orthonormalité des orbitales moléculaires et le cas quasi-atomique, donc $\pi_+ \approx p_{m_\ell=+1}$ et $\pi_- \approx p_{m_\ell=-1}$.

(1) 6. Visualisez votre résultat schématiquement.

(18 p)

rank 35
~~Br~~ Br^+ ($z = 35$, $\#e^- = 34$)

Madelung:



p^4

$\Rightarrow$

1	0	-1
1	1	1

 (3)

1	1	1
---	---	---

 (3)

1	1	1
---	---	---

 (3)

1	1	1
---	---	---

 (6)



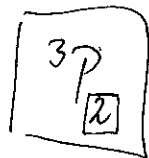
$m_L \backslash m_s$	1	0	-1
2	+		
1	+	+	+
0	+	+	+
-1	+	+	+
-2	+		

Termes RS : $^1D, ^3P, ^1S$

$\rightarrow$ état fond.?

+ couplage spin-orbite : $^1D_2, ^3P_{2,1,0}, ^1S_0$

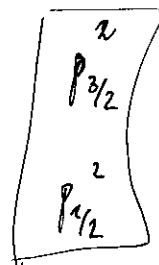
$\rightarrow$ état fondamental?



pourquoi?

(règle Hund 3)

$m_j = \frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2}$
 $+$ $+$ $-$ $-$



$p_{1/2}^1 p_{3/2}^2 \Rightarrow J=0$

$\Rightarrow m_j \in \{2, 1, 0, -1, -2\}$

$\Rightarrow J=2, J=0$

$p_{1/2}^1 p_{1/2}^1 \Rightarrow m_j \in \{2, 1, 0, -1, -2\} \Rightarrow J=2, 1$

3.5 Zeeman

$$\hat{H}_{Zee} = -\frac{\gamma_e}{c} B_3 \cdot \left(\sum_{i=1}^2 \hat{\ell}_3(i) + 2\hat{S}_3(i) \right)$$

$$\begin{aligned} {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\pi_+(1) \alpha(1) \pi_-(2) \alpha(2) - \pi_+(2) \alpha(2) \pi_-(1) \alpha(1) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\pi_+(1) \pi_-(2) - \pi_-(1) \pi_+(2) \right] \alpha(1) \alpha(2) \end{aligned}$$

$${}^3\bar{\Sigma}_{M_S=0} = \frac{1}{2} \left[\pi_+(1) \pi_-(2) - \pi_-(1) \pi_+(2) \right] \left[\alpha(1) \beta(2) + \beta(1) \alpha(2) \right]$$

$${}^3\bar{\Sigma}_{M_S=-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\pi_+(1) \pi_-(2) - \pi_-(1) \pi_+(2) \right] \beta(1) \beta(2)$$

Théorie des perturbations à l'ordre 1 :

$$\langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} | \hat{H}_{Zee} | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} \rangle = -\frac{\gamma_e}{c} B_3$$

$$\begin{aligned} &\left[\langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} | \hat{\ell}_3(1) | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} \rangle + \langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} | \hat{\ell}_3(2) | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} \rangle \right. \\ &\quad \left. + 2 \langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} | \hat{S}_3(1) | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} \rangle + 2 \langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} | \hat{S}_3(2) | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} \rangle \right] \end{aligned}$$

$$= -\frac{\gamma_e}{2c} B_3 \left[(1+1) \hbar \langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=1} \rangle - 2\hbar + \hbar + \hbar \right] = -\frac{\hbar \gamma_e}{c} B_3$$

$$\langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=0} | \hat{H}_{Zee} | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=0} \rangle = -\frac{\gamma_e}{4c} B_3 \left[2\hbar - 2\hbar + \hbar - \hbar - \hbar + \hbar \right] = 0$$

$$\langle {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=-1} | \hat{H}_{Zee} | {}^3\bar{\Sigma}_{M_S=-1} \rangle = -\frac{\gamma_e}{2c} B_3 \left[2\hbar - 2\hbar - \hbar - \hbar \right] = \frac{\hbar \gamma_e}{c} B_3$$

3.6 visualisation :

