

Examen

Durée : 2 heures

Aucun document ni calculatrice autorisé

Les deux parties sont indépendantes.

I Système électron-positron (35/60)

On considère le système formé d'un électron et d'un positron (tous les deux de spin $1/2$) plongés dans un champ magnétique uniforme $\vec{B} = B\vec{e}_z$ orienté suivant le vecteur unitaire \vec{e}_z définissant l'axe (Oz) du repère cartésien $Oxyz$.

La partie de l'hamiltonien dépendant de ces spins s'écrit alors :

$$H = A\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p + \frac{e\vec{B}}{mc} \cdot (\vec{S}_e - \vec{S}_p) \quad (1)$$

où \vec{S}_e et \vec{S}_p sont les opérateurs de spin associés, respectivement, à l'électron et au positron, et où m est la masse commune de ces particules.

On notera $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ (dans cet ordre) les vecteurs de la base standard de ces opérateurs. Pour construire la base \mathcal{B}_0 du produit tensoriel des espaces des états, on fera d'abord figurer les états de la base standard de \vec{S}_e puis ceux de \vec{S}_p . Ainsi, par exemple, $|+-\rangle = |+\rangle_e \otimes |-\rangle_p$ est l'état où l'électron a son spin "up" et le positron son spin "dow". La base \mathcal{B}_0 est donc (dans cet ordre) :

$$\mathcal{B}_0 = \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\} \quad (2)$$

On rappelle également, mais sans explication, les formules suivantes : $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$; $S_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle$

1. On considère tout d'abord le cas limite $A = 0$ et $B \neq 0$.
Est-ce que l'état $|+-\rangle$ est vecteur propre de H ? (justifier)
Si oui, quel est la valeur propre associée ?
Si non, quelles est la valeur moyenne de H dans cet état ?
2. On considère, à partir de maintenant, que $A \neq 0$ et $B \neq 0$.
Exprimer $\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$, puis H , en fonction de $S_{e\pm}$, $S_{p\pm}$, S_{ez} et S_{pz} .
3. Ecrire les matrices de S_{e+} , S_{e-} , et S_{ez} dans la base standard de \vec{S}_e .

4. Faire de même pour S_{p+} , S_{p-} , et S_{pz} dans la base standard de \vec{S}_p .
5. Déterminer l'effet de l'opérateur " $S_{e+}S_{p-} + S_{e-}S_{p+}$ " sur le ket $|++\rangle$, 1^{er} vecteur de base de \mathcal{B}_0 .
6. Déterminer l'effet de l'opérateur " $S_{e+}S_{p-} + S_{e-}S_{p+}$ " sur le ket $| - + \rangle$, 2^{ème} vecteur de base de \mathcal{B}_0 .
7. Déterminer la matrice de H dans la base \mathcal{B}_0 .
8. Cette matrice est-elle *diagonale par blocs* ? (justifier)
9. Calculer les valeurs propres de H .
10. Lesquelles sont dégénérées, et quel est leur degré de dégénérescence ?
11. Déterminer la limite $A \rightarrow 0$ de ces valeurs propres, et comparer à la question 1.
12. Déterminer la limite $B \rightarrow 0$ de ces valeurs propres.
13. On définit l'opérateur "composition de \vec{S}_e et \vec{S}_p " par :

$$\vec{S} = \vec{S}_e + \vec{S}_p \quad (3)$$

Quelles sont les valeurs propres possibles de \vec{S}^2 et S_z ? (justifier)

14. Ecrire la liste des vecteurs propres de la base standard \mathcal{B}_1 de \vec{S} (dans l'ordre de votre choix).
15. Exprimer $\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$ en fonction de \vec{S}^2 , \vec{S}_e^2 , et \vec{S}_p^2 .
16. Peut-on exprimer H en fonction uniquement des opérateurs \vec{S}^2 , \vec{S}_e^2 , \vec{S}_p^2 et S_z ? (justifier)
17. Exprimer la matrice de $H_A = A \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$ dans la base \mathcal{B}_1 .
18. Déterminer les valeurs propres de H_A .
19. On considère maintenant que le terme $H_B = \frac{e\vec{B}}{mc} \cdot (\vec{S}_e - \vec{S}_p)$ agit comme une perturbation par rapport à l'effet de H_A .
Déterminer les corrections au premier ordre de l'effet de H_B sur le spectre de H_A , et comparer à la question 13.

II Spectre du monoxyde de carbone CO (25/60)

En première approximation, l'énergie d'une molécule diatomique est la somme d'une énergie, E_n , d'un oscillateur harmonique de masse m et de pulsation ω , et de l'énergie, E_j , d'un rotateur rigide de moment d'inertie I constant.

Pour la molécule de CO, la masse m est la masse réduite (on prendra $m = 1,1 \times 10^{-26}$ kg), tandis que nous poserons $I = mr^2$. On donne en outre la vitesse de la lumière dans le vide ($c = 3 \times 10^8$ m.s⁻¹), et la constante de Planck réduite $\hbar = 1,05 \times 10^{-34}$ J.s.

1. Rappeler ce que sont la masse réduite m et la longueur r .

2. Donner, en fonction du nombre quantique n et de ω , l'expression de l'énergie E_n . Le nombre quantique n est-il entier et/ou demi-entier, positif et/ou négatif ?
3. Justifier l'égalité $E_j = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2I}$. Le nombre quantique j est-il entier et/ou demi-entier, positif et/ou négatif ?
4. Nous supposons que les seules transitions possibles correspondent à des variations arbitraires de n et à des variation de j d'une unité : $j \rightarrow j+1$ ($\Delta j = +1$) ou $j \rightarrow j-1$ ($\Delta j = -1$). Nous noterons Δn la variation de n et Δj la variation de j . La valeur initiale de j sera notée j_0 .
Exprimer les nombres d'onde ($1/\lambda$ où λ est la longueur d'onde) du spectre d'absorption du monoxyde de carbone en fonction de Δn , j_0 et Δj .
5. Nous supposons la relation $2I\omega \gg \hbar$ et nous admettons que j_0 ne dépasse pas quelques unités. En déduire que les raies d'absorption sont observées au voisinage des nombres d'onde $\frac{N}{\lambda_0}$ où N est entier.
6. Dans le cas de la molécule de CO, nous prendrons $\frac{1}{\lambda_0} = 2170 \text{ cm}^{-1}$. Déduire de la valeur numérique de $\frac{1}{\lambda_0}$, la valeur numérique de ω .
7. Les Figures 1 et 2 présentent le spectre d'absorption de la molécule CO dans deux domaines de nombre d'onde différents. Considérons tout d'abord le spectre d'absorption de la Figure 1. Quelle est la valeur de N dans le cas de la figure 1 ?
8. Toujours sur ce dernier spectre, donner, en fonction de j_0 et Δj , l'expression des nombres d'onde, $\frac{1}{\lambda}$, des raies d'absorption. Donner le signe et la valeur de Δj . Exprimer la séparation, $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right|$, des raies d'absorption de la figure 1, en fonction de $I = mr^2$. Mesurer, sur la Figure 1, la valeur numérique de $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right|$.
9. Considérons maintenant le spectre d'absorption de la Figure 2. Quelle est la valeur de N dans le cas de la figure 2 ?
10. Toujours sur ce dernier spectre, donner l'expression, en fonction de j_0 et Δj , N et λ_0 , l'expression des nombres d'onde, $\frac{1}{\lambda}$, des raies d'absorption. Comparer $\frac{1}{\lambda}$ à $\frac{2}{\lambda_0}$. En déduire le signe et la valeur de Δj ainsi que la séparation $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_2 \right|$, des raies d'absorption de la figure 2. Mesurer, sur la Figure 2, la valeur numérique de $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_2 \right|$.
11. Donner deux estimations numériques de r à partir des résultats des questions II.8 et II.10. Commenter la cohérence des résultats.
12. Vérifier *a posteriori* la relation $2I\omega \gg \hbar$.

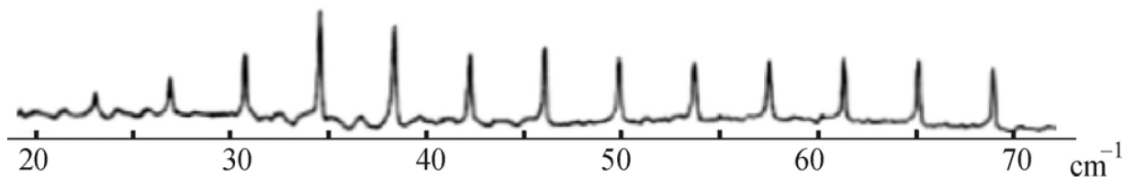


FIGURE 1 – Spectre en absorption du monoxyde de carbone entre 20 et 70 cm^{-1}

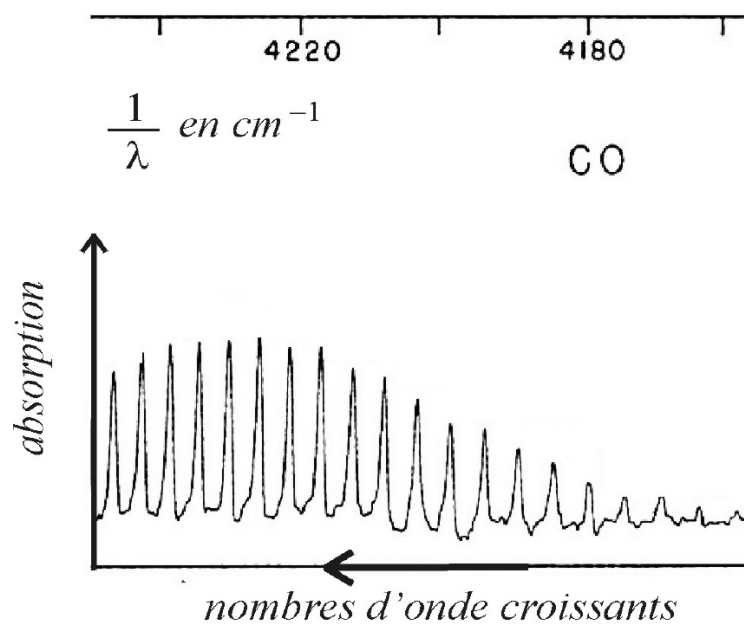


FIGURE 2 – Spectre en absorption du monoxyde de carbone vers 4200 cm^{-1}

Examen

Durée : 2 heures

Aucun document ni calculatrice autorisé

Les deux parties sont indépendantes.

III Système électron-positron (35/60)

1. On considère tout d'abord le cas limite $A = 0$ et $B \neq 0$.
Est-ce que l'état $|+-\rangle$ est vecteur propre de H ? (justifier)
Si oui, quel est la valeur propre associée ?
Si non, quelles est la valeur moyenne de H dans cet état ?

Dans ce cas, l'hamiltonien s'écrit $H = \frac{eB}{mc}(S_{ez} - S_{pz})$. Nous avons alors

$$\begin{aligned} H|+-\rangle &= \frac{eB}{mc} \left(\underbrace{S_{ez}|+-\rangle}_{=\frac{\hbar}{2}|+-\rangle} - \underbrace{S_{pz}|+-\rangle}_{=-\frac{\hbar}{2}|+-\rangle} \right) \\ &= \frac{e\hbar B}{mc} |+-\rangle \end{aligned}$$

Donc l'état $|+-\rangle$ est vecteur propre de H de valeur propre $\boxed{\frac{e\hbar B}{mc}}$.

2. On considère, à partir de maintenant, que $A \neq 0$ et $B \neq 0$.
Exprimer $\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$, puis H , en fonction de $S_{e\pm}$, $S_{p\pm}$, S_{ez} et S_{pz} .

D'une manière générale $\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p = S_{ex} \cdot S_{px} + S_{ey} \cdot S_{py} + S_{ez} \cdot S_{pz}$. Il faut ensuite utiliser les définitions

$$S_{e\pm} = S_{ex} \pm iS_{ey} \quad \text{et} \quad S_{p\pm} = S_{px} \pm iS_{py}$$

qui permettent d'écrire

$$\begin{aligned} S_{ex} &= \frac{S_{e+} + S_{e-}}{2} & S_{px} &= \frac{S_{p+} + S_{p-}}{2} \\ S_{ey} &= \frac{S_{e+} - S_{e-}}{2i} & S_{py} &= \frac{S_{p+} - S_{p-}}{2i} \end{aligned}$$

En introduisant ces égalités dans l'expression ci-dessus on obtient

$$\begin{aligned}
\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p &= S_{ex} \cdot S_{px} + S_{ey} \cdot S_{py} + S_{ez} \cdot S_{pz} \\
&= \frac{1}{4} (S_{e+} S_{p+} + S_{e+} S_{p-} + S_{e-} S_{p+} + S_{e-} S_{p-} \\
&\quad - S_{e+} S_{p+} + S_{e+} S_{p-} + S_{e-} S_{p+} - S_{e-} S_{p-}) + S_{ez} S_{pz} \\
&= \boxed{\frac{S_{e+} S_{p-} + S_{e-} S_{p+}}{2} + S_{ez} S_{pz}}
\end{aligned}$$

3. Ecrire les matrices de S_{e+} , S_{e-} , et S_{ez} dans la base standard de \vec{S}_e .

Les matrices s'écrivent

$$S_{e+} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_{e-} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_{ez} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

4. Faire de même pour S_{p+} , S_{p-} , et S_{pz} dans la base standard de \vec{S}_p .

Les matrices s'écrivent

$$S_{p+} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_{p-} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_{pz} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

5. Déterminer l'effet de l'opérateur " $S_{e+} S_{p-} + S_{e-} S_{p+}$ " sur le ket $|++\rangle$, 1^{er} vecteur de base de \mathcal{B}_0 .

Nous avons

$$\left(\underbrace{S_{e+}}_{=0} \underbrace{S_{p-}}_{=\hbar|-\rangle} + \underbrace{S_{e-}}_{=\hbar|-\rangle} \underbrace{S_{p+}}_{=0} \right) |++\rangle \boxed{= 0}$$

De même nous aurons

$$(S_{e+} S_{p-} + S_{e-} S_{p+}) |--\rangle \boxed{= 0}$$

6. Déterminer l'effet de l'opérateur " $S_{e+}S_{p-} + S_{e-}S_{p+}$ " sur le ket $|+-\rangle$, 2^{ème} vecteur de base de \mathcal{B}_0 .

Nous avons

$$\left(\underbrace{S_{e+}}_{=\hbar|+\rangle} \underbrace{S_{p-}}_{=\hbar|-\rangle} + \underbrace{S_{e-}}_{=|0\rangle} \underbrace{S_{p+}}_{=|0\rangle} \right) |+-\rangle = \hbar^2 |+-\rangle$$

De même nous aurons

$$(S_{e+}S_{p-} + S_{e-}S_{p+}) |+-\rangle = \hbar^2 |+-\rangle$$

7. Déterminer la matrice de H dans la base \mathcal{B}_0 .

Nous avons alors

$$H = \begin{pmatrix} \frac{A\hbar^2}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{A\hbar^2}{4} + \frac{e\hbar B}{mc} & \frac{A\hbar^2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{A\hbar^2}{2} & -\frac{A\hbar^2}{4} - \frac{e\hbar B}{mc} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A\hbar^2}{4} \end{pmatrix}$$

8. Cette matrice est-elle *diagonale par blocs* ? (justifier)

Cette matrice est diagonale par blocs.

9. Calculer les valeurs propres de H .

La valeur propre $\lambda_1 = \frac{A\hbar^2}{4}$ est évidente sur la diagonale. Il reste maintenant à diagonaliser la matrice centrale

$$H_A = \begin{pmatrix} -\frac{A\hbar^2}{4} + \frac{e\hbar B}{mc} & \frac{A\hbar^2}{2} \\ \frac{A\hbar^2}{2} & -\frac{A\hbar^2}{4} - \frac{e\hbar B}{mc} \end{pmatrix}$$

On peut retrouver facilement qu'une matrice de la forme

$$\begin{pmatrix} \alpha + \beta & \gamma \\ \gamma & \alpha - \beta \end{pmatrix}$$

a pour valeurs propres $\lambda_{\pm} = \alpha \pm \sqrt{\beta^2 + \gamma^2}$. Dans notre cas nous obtenons les deux valeurs

propres $\lambda_{2,3} = -\frac{A\hbar^2}{4} \pm \sqrt{\frac{A^2\hbar^4}{4} + \frac{e^2\hbar^2 B^2}{m^2 c^2}}$

10. Lesquelles sont dégénérées, et quel est leur degré de dégénérescence ?

La valeur propre λ_1 est dégénérée deux fois, les valeurs propres $\lambda_{2,3}$ ne sont pas dégénérées.

11. Déterminer la limite $A \rightarrow 0$ de ces valeurs propres, et comparer à la question 1.

La valeur propre $\lambda_1 \rightarrow 0$ et les valeurs propres $\lambda_{2,3} \rightarrow \pm \frac{e\hbar B}{mc}$ dont les états propres sont les vecteurs $\{|+-\rangle, |-+\rangle\}$ comme trouvé dans la première question.

12. Déterminer la limite $B \rightarrow 0$ de ces valeurs propres.

Dans ce cas, nous n'avons plus que deux valeurs propres, $\frac{A\hbar^2}{4}$ dégénérée trois fois et $-\frac{3A\hbar^2}{4}$ non dégénérée.

13. On définit l'opérateur "composition de \vec{S}_e et \vec{S}_p " par :

$$\vec{S} = \vec{S}_e + \vec{S}_p \quad (4)$$

Quelles sont les valeurs propres possibles de \vec{S}^2 et S_z ? (justifier)

Les valeurs propres $\hbar^2 s(s+1)$ de \vec{S}^2 prennent toutes les valeurs s comprises entre $\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right|$ et $\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$ par pas de un, soit les valeurs $s = 0$ non dégénérée et $s = 1$ dégénérée trois fois.

Les valeurs propres de S_z valent $\hbar m_s$ où m_s peut prendre les valeurs $+1, 0$ et -1 , la seconde étant dégénérée deux fois et les autres non dégénérées.

14. Ecrire la liste des vecteurs propres de la base standard \mathcal{B}_1 de \vec{S} (dans l'ordre de votre choix).

Les vecteurs propres sont les vecteurs

$$\underbrace{|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle}_{|sm_s\rangle}, |00\rangle$$

15. Exprimer $\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$ en fonction de \vec{S}^2 , \vec{S}_e^2 , et \vec{S}_p^2 .

Comme démontré dans *Big Bang Theory*, on développe

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 &= (\vec{S}_e + \vec{S}_p)^2 = \vec{S}_e^2 + \vec{S}_p^2 + \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p + \vec{S}_p \cdot \vec{S}_e \\ &= \vec{S}_e^2 + \vec{S}_p^2 + 2\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \end{aligned}$$

car \vec{S}_e et \vec{S}_p commutent puisqu'ils opèrent sur des états physiques indépendants. On en déduit

$$\boxed{\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p = \frac{\vec{S}^2 - \vec{S}_e^2 - \vec{S}_p^2}{2}}$$

16. Peut-on exprimer H en fonction uniquement des opérateurs \vec{S}^2 , \vec{S}_e^2 , \vec{S}_p^2 et S_z ? (justifier)

Non si $B \neq 0$, car l'opérateur $S_{ez} - S_{pz}$ ne peut s'exprimer en fonction des quatre opérateurs ci-dessus.

17. Exprimer la matrice de $H_A = A\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$ dans la base \mathcal{B}_1 .

Nous avons

$$\begin{aligned}\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p |11\rangle &= \frac{\vec{S}^2 - \vec{S}_e^2 - \vec{S}_p^2}{2} |11\rangle = \left(\hbar^2 - \frac{3\hbar^2}{8} - \frac{3\hbar^2}{8} \right) |11\rangle = \frac{\hbar^2}{4} |11\rangle \\ \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p |10\rangle &= \frac{\hbar^2}{4} |10\rangle \\ \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p |1-1\rangle &= \frac{\hbar^2}{4} |1-1\rangle \\ \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p |00\rangle &= \frac{\vec{S}^2 - \vec{S}_e^2 - \vec{S}_p^2}{2} |00\rangle = \left(0 - \frac{3\hbar^2}{8} - \frac{3\hbar^2}{8} \right) |00\rangle = -\frac{3\hbar^2}{4} |00\rangle\end{aligned}$$

On trouve donc la matrice

$$H_A = \begin{pmatrix} \frac{A\hbar^2}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A\hbar^2}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A\hbar^2}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3A\hbar^2}{4} \end{pmatrix}$$

18. Déterminer les valeurs propres de H_A .

Comme à la question 13 on retrouve les valeurs propres $\frac{A\hbar^2}{4}$ trois fois dégénérée et $-\frac{3A\hbar^2}{4}$ non dégénérée.

19. On considère maintenant que le terme $H_B = \frac{e\vec{B}}{mc} \cdot (\vec{S}_e - \vec{S}_p)$ agit comme une perturbation par rapport à l'effet de H_A . Déterminer les corrections au premier ordre de l'effet de H_B sur le spectre de H_A , et comparer à la question 13.

Considérons tout d'abord la valeur propre non dégénérée de H_A , $-\frac{3A\hbar^2}{4}$, qui correspond à l'état $|00\rangle$. Au premier ordre, la correction en énergie vaut

$$\begin{aligned}\langle 00|H_B|00\rangle &= \frac{eB}{mc} \langle 00|S_{ez} - S_{pz}|00\rangle = \frac{eB}{mc} \left(\frac{\langle + - | - \langle - + |}{\sqrt{2}} \right) (S_{ez} - S_{pz}) \left(\frac{|+ - \rangle - |- + \rangle}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \frac{e\hbar B}{4mc} (\langle + - | - \langle - + |) (|+ - \rangle + |- + \rangle - |+ - \rangle - |- + \rangle) \\ &= 0\end{aligned}$$

Donc pas de correction en énergie au premier ordre sur l'état $|00\rangle$.

Pour la valeur propre trois fois dégénérée il faut chercher les valeurs propres de la matrice H_B restreinte au sous espace propre $s = 1$.

$$\begin{aligned}H_B|11\rangle &= \frac{eB}{mc} (S_{ez} - S_{pz})|++\rangle = 0 \\ H_B|1-1\rangle &= \frac{eB}{mc} (S_{ez} - S_{pz})|--\rangle = 0 \\ H_B|10\rangle &= \frac{eB}{mc} (S_{ez} - S_{pz}) \left(\frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \frac{e\hbar B}{2\sqrt{2}mc} (|+-\rangle - |-+\rangle + |+ - \rangle - |- + \rangle) \\ &= \frac{2\hbar B}{mc} |00\rangle\end{aligned}$$

La matrice H_B restreinte au sous espace propre $s = 1$ est donc identiquement nulle et il n'y a pas de correction au premier ordre en énergie de la valeur propre $\frac{A\hbar^2}{4}$. C'est logique, dans la formule des valeurs propres obtenues à la question 10, les termes sous la racines sont quadratiques. Au premier ordre en x , $\sqrt{1+x^2} = 1$.

IV Spectre du monoxyde de carbone CO (25/60)

1. Rappeler ce que sont la masse réduite m et la longueur r .

$m = \frac{m_C \times m_O}{m_C + m_O}$. La longueur r est la distance entre C et O. Elle dépend de l'état de rotation (allongement dû à la force centrifuge), mais en première approximation on peut considérer que $r = \text{cte}$.

2. Donner, en fonction du nombre quantique n et de ω , l'expression de l'énergie E_n . Le nombre quantique n est-il entier et/ou demi-entier, positif et/ou négatif ?

E_n est l'énergie d'un oscillateur harmonique qui suit la quantification $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ où n est entier positif ou nul.

3. Justifier l'égalité $E_j = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2I}$. Le nombre quantique j est-il entier et/ou demi-entier, positif et/ou négatif ?

L'énergie d'un système de deux particules peut se scinder en deux termes, le terme d'élongation étudié ci-dessus, et l'énergie de rotation qui vaut $\frac{\vec{J}^2}{2I}$, de manière analogue à $\frac{\vec{P}^2}{2m}$ pour l'énergie cinétique totale, où \vec{J} est le moment cinétique du système. En physique quantique, les valeurs propres de \vec{J}^2 valent $\hbar^2 j(j+1)$. Le nombre quantique j est nécessairement un entier positif ou nul, car pour une rotation de 2π , la fonction d'onde totale du système doit être invariante, ce qui n'est pas le cas pour les valeurs de j demi-entières.

4. Nous supposons que les seules transitions possibles correspondent à des variations arbitraires de n et à des variation de j d'une unité : $j \rightarrow j+1$ ($\Delta j = +1$) ou $j \rightarrow j-1$ ($\Delta j = -1$). Nous noterons Δn la variation de n et Δj la variation de j . La valeur initiale de j sera notée j_0 .

Exprimer les nombres d'onde ($1/\lambda$ où λ est la longueur d'onde) du spectre d'absorption du monoxyde de carbone en fonction de Δn , j_0 et Δj .

L'énergie du photon absorbé vaut $E_{\text{photon}} = \hbar\omega\Delta n + \frac{\hbar^2}{2I} \times [(2j_0 + 1)\Delta j + 1] > 0$ avec $\Delta n = n_{\text{fin}} - n_{\text{ini}}$ et $\Delta j = j_{\text{fin}} - j_{\text{ini}} = \pm 1$, tandis que $j_0 = j_{\text{ini}}$. Le nombre d'onde du photon vaut donc $\frac{1}{\lambda} = \frac{E_{\text{photon}}}{2\pi\hbar c}$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\omega}{2\pi c} \times \Delta n + \frac{\hbar}{4\pi c I} \times [(2j_0 + 1)\Delta j + 1] > 0$$

avec Δn entier quelconque et $j_0 = 0, 1, 2, \dots$ mais Δn , Δj et j_0 sont tels que $\frac{1}{\lambda} > 0$.

5. Nous supposons la relation $2I\omega \gg \hbar$ et nous admettons que j_0 ne dépasse pas quelques unités. En déduire que les raies d'absorption sont observées au voisinage des nombres d'onde $\frac{N}{\lambda_0}$ où N est entier.

La relation $\frac{\hbar}{4\pi cI} \ll \frac{\omega}{2\pi c}$ est satisfaite. Pour les petites valeurs de j_0 , le spectre est donc caractérisé par des nombres d'onde $\frac{1}{\lambda} \sim \frac{\omega}{2\pi c} \times \Delta n$; la relation $\boxed{\frac{1}{\lambda} \sim \frac{N}{\lambda_0}}$ est donc justifiée pour $\Delta n > 0$ avec $N = \Delta n$ et $\frac{1}{\lambda_0} = \frac{\omega}{2\pi c} = 2170 \text{ cm}^{-1}$.

6. Dans le cas de la molécule de CO, nous prendrons $\frac{1}{\lambda_0} = 2170 \text{ cm}^{-1}$. Déduire de la valeur numérique de $\frac{1}{\lambda_0}$, la valeur numérique de ω .

La relation $\frac{1}{\lambda_0} = \frac{\omega}{2\pi c}$ donne $\boxed{\omega = 2\pi c \times \frac{1}{\lambda_0} = 4,1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}}$.

7. Les Figures 1 et 2 présentent le spectre d'absorption de la molécule CO dans deux domaines de nombre d'onde différents. Considérons tout d'abord le spectre d'absorption de la Figure 1. Quelle est la valeur de N dans le cas de la figure 1 ?

Le cas de la figure 1 correspond à $\frac{1}{\lambda} \sim 50 \text{ cm}^{-1}$ soit $\frac{1}{\lambda} \ll \frac{1}{\lambda_0}$ ou encore $\Delta n = 0$. C'est le cas des petits nombres d'onde, soit $\boxed{N = 0}$.

8. Toujours sur ce dernier spectre, donner, en fonction de j_0 et Δj , l'expression des nombres d'onde, $\frac{1}{\lambda}$, des raies d'absorption. Donner le signe et la valeur de Δj . Exprimer la séparation, $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right|$, des raies d'absorption de la figure 1, en fonction de $I = mr^2$. Mesurer, sur la Figure 1, la valeur numérique de $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right|$.

$N = \Delta n = 0$ étant fixé, on en déduit $\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar}{4\pi c I} \times [(2j_0 + 1) \Delta j + 1] > 0$. Les relations $\frac{1}{\lambda} > 0$ et $\Delta j = \pm 1$ avec $j_0 \in \mathbb{N}$ impliquent $\boxed{\Delta j = +1}$. On en déduit $\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar}{2\pi c I} \times (j_0 + 1)$. Deux nombres d'onde voisins correspondent aux valeurs j_0 et $j_0 \pm 1$ soit

$$\boxed{\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right| = \frac{\hbar}{2\pi c I}}$$

On mesure $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right|$ sur la figure 1. On trouve $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_1 \right| = \frac{65 - 23}{11} \boxed{= 3,8 \text{ cm}^{-1}}$

9. Considérons maintenant le spectre d'absorption de la Figure 2. Quelle est la valeur de N dans le cas de la figure 2 ?

Le cas de la figure 2 correspond à $\frac{1}{\lambda} \sim \frac{2}{\lambda_0}$, d'où $\boxed{N = 2}$.

10. Toujours sur ce dernier spectre, donner l'expression, en fonction de j_0 et Δj , N et λ_0 , l'expression des nombres d'onde, $\frac{1}{\lambda}$, des raies d'absorption. Comparer $\frac{1}{\lambda}$ à $\frac{2}{\lambda_0}$. En déduire le signe et la valeur de Δj ainsi que la séparation $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_2 \right|$, des raies d'absorption de la figure 2. Mesurer, sur la Figure 2, la valeur numérique de $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_2 \right|$.

$N = \Delta n = 2$ étant fixé, on en déduit $\frac{1}{\lambda} = \frac{2}{\lambda_0} + \frac{\hbar}{4\pi c I} \times [(2j_0 + 1) \Delta j + 1] > 0$. Cependant sur la figure 2 on remarque $\frac{1}{\lambda} < \frac{2}{\lambda_0}$ d'où $\frac{\hbar}{4\pi c I} [(2j_0 + 1) \Delta j + 1] < 0$. Cette

relation n'est possible que pour $\Delta j = -1$, compte tenu des conditions $\Delta j = \pm 1$ avec $j_0 \in \mathbb{N}$. On en déduit $\frac{1}{\lambda} = \frac{2}{\lambda_0} - \frac{\hbar}{2\pi c I} j_0$. Deux nombres d'onde voisins correspondent aux valeurs j_0 et $j_0 \pm 1$ soit

$$\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_2 \right| = \frac{\hbar}{2\pi c I}$$

On mesure sur la figure 2 dix intervalles pour 40 cm^{-1} . On trouve $\left| \Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right)_2 \right| \sim 4 \text{ cm}^{-1}$.

11. Donner deux estimations numériques de r à partir des résultats des questions II.8 et II.10. Commenter la cohérence des résultats.

La question II.8 donne $r = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi c m |\Delta(1/\lambda)_1|}} = 0,115 \text{ nm}$. La question II.10 donne $r = 0,112 \text{ nm}$. Ainsi, les résultats sont cohérents (la différence n'excède pas 3%).

Remarquons que les intervalles sur la figure 2 s'élargissent vers la droite. C'est dû à l'effet de la déformation centrifuge. Il faut donc se limiter aux faibles valeurs de j_0 c'est à dire aux transitions les plus intenses car les niveaux de j élevés sont moins peuplés (thermiquement) que les niveaux de petits j .

12. Vérifier *a posteriori* la relation $2I\omega \gg \hbar$.

Avec $\frac{\hbar}{2\pi c I} \sim 3,8 \text{ cm}^{-1}$ il vient $\frac{\hbar}{I} = 7,3 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} \ll 4,1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} = \omega \Rightarrow 2I\omega \gg \hbar$.