

PHYSIQUE ATOMIQUE
ET SPECTROSCOPIE OPTIQUE

GRENOBLE SCIENCES

Grenoble Sciences est un centre de conseil, expertise et labellisation de l'enseignement supérieur français. Il expertise les projets scientifiques des auteurs dans une démarche à plusieurs niveaux (référés anonymes, comité de lecture interactif) qui permet la labellisation des meilleurs projets après leur optimisation. Les ouvrages labellisés dans une collection de Grenoble Sciences correspondent à :

- ▶ des projets clairement définis sans contrainte de mode ou de programme,
- ▶ des qualités scientifiques et pédagogiques certifiées par le mode de sélection,
- ▶ une qualité de réalisation assurée par le centre technique de Grenoble Sciences.

Directeur scientifique de Grenoble Sciences

Jean BORNAREL, Professeur émérite à l'Université Grenoble Alpes

Pour mieux connaître Grenoble Sciences :
<https://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr>

Pour contacter Grenoble Sciences :
tél : (33) 4 76 51 46 95, e-mail : grenoble.sciences@ujf-grenoble.fr

LIVRES ET PAP-EBOOKS

Grenoble Sciences labellise des livres papier (en langue française et en langue anglaise) mais également des ouvrages utilisant d'autres supports. Dans ce contexte, situons le concept de pap-ebook. Celui-ci se compose de deux éléments :

- ▶ un **livre papier** qui demeure l'objet central,
- ▶ un **site web compagnon** qui propose :
 - des éléments permettant de combler les lacunes du lecteur qui ne posséderait pas les prérequis nécessaires à une utilisation optimale de l'ouvrage,
 - des exercices pour s'entraîner,
 - des compléments pour approfondir un thème, trouver des liens sur internet, etc.

Le livre du pap-ebook est autosuffisant et certains lecteurs n'utiliseront pas le site web compagnon. D'autres l'utiliseront et ce, chacun à sa manière. Un livre qui fait partie d'un pap-ebook porte en première de couverture un logo caractéristique et le lecteur trouvera la liste de nos sites compagnons à l'adresse internet suivante :

<https://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr/pap-ebooks-infos>

Grenoble Sciences bénéficie du soutien de la **région Auvergne-Rhône-Alpes** et du **ministère de l'Éducation nationale, de l'Enseignement supérieur et de la Recherche**. Grenoble Sciences est rattaché à l'**Université Grenoble Alpes**.

PHYSIQUE ATOMIQUE ET SPECTROSCOPIE OPTIQUE

Michel MOISAN
Danielle KÉROACK
Luc STAFFORD

The logo for EDP Sciences, featuring the lowercase letters 'edp' in a stylized, interconnected font, followed by the word 'sciences' in a clean, sans-serif typeface.

17, avenue du Hoggar
Parc d'Activité de Courtabœuf - BP 112
91944 Les Ulis Cedex A - France

PHYSIQUE ATOMIQUE ET SPECTROSCOPIE OPTIQUE

Cet ouvrage, labellisé par Grenoble Sciences, est un des titres du secteur Sciences de la Matière de la collection Grenoble Sciences d'EDP Sciences, qui regroupe des projets originaux et de qualité. Cette collection est dirigée par Jean BORNAREL, Professeur émérite à l'Université Grenoble Alpes.

Comité de lecture :

- ▶ Elie BELORIZKY, Professeur honoraire à l'Université Grenoble Alpes,
- ▶ Jean-Hugues FILLION, Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie, Paris,
- ▶ Pascal PARNEIX, Professeur à l'Université Paris-Sud,
- ▶ Signe SEIDELIN, Maître de conférences à l'Université Grenoble Alpes,
- ▶ José TEIXEIRA, Directeur de recherche au CNRS.

Cet ouvrage a été suivi par Stéphanie TRINE. Mise en page et figures : Danielle KÉROACK. L'illustration de couverture est l'œuvre d'Alice GIRAUD, d'après des éléments fournis par les auteurs (spectre, orbitales atomiques, niveaux d'énergie) et une photographie de tube à décharge d'Olivier LEVASSEUR. Les portraits des auteurs sont l'œuvre de la Faculté des arts et sciences, Université de Montréal.

OUVRAGES LABELLISÉS SUR DES THÈMES PROCHES (CHEZ LE MÊME ÉDITEUR)

La mécanique quantique. Problèmes résolus. Tomes I et II (V.M. Galitski, B.M. Karnakov & V.I. Kogan) • Outils mathématiques à l'usage des scientifiques et ingénieurs (E. Belorizky) • Mécanique. De la formulation lagrangienne au chaos hamiltonien (C. Gignoux & B. Silvestre-Brac) • Problèmes corrigés de mécanique et résumés de cours. De Lagrange à Hamilton (C. Gignoux & B. Silvestre-Brac) • Relativité générale et astrophysique, problèmes et exercices corrigés (Denis Gialis & François-Xavier Désert) • Méthodes numériques appliquées pour le scientifique et l'ingénieur (J.-P. Grivet) • Analyse numérique et équations différentielles (J.-P. Demailly) • Description de la symétrie. Des groupes de symétrie aux structures fractales (J. Sivardière) • Symétrie et propriétés physiques. Du principe de Curie aux brisures de symétrie (J. Sivardière) • Approximation hilbertienne. Splines, ondelettes, fractales (M. Attéa & J. Gaches) • Introduction à la mécanique statistique (E. Belorizky & W. Gorecki) • Analyse statistique des données expérimentales (K. Protasov) • Magnétisme : I Fondements, II Matériaux (sous la direction d'E. du Trémolet de Lacheisserie) • Spectroscopie de résonance paramagnétique électronique. Fondements (P. Bertrand) • Spectroscopie de résonance paramagnétique électronique. Applications (sous la direction de P. Bertrand) • Spectroscopies infrarouge et Raman (R. Poilblanc & F. Crasnier) • Supraconductivité. Introduction (P. Mangin & R. Kahn) • Plasmas collisionnels (M. Moisan & J. Pelletier) • Éléments de Biologie à l'usage d'autres disciplines. De la structure aux fonctions (P. Tracqui & J. Demongeot) • L'air et l'eau (R. Moreau) • Turbulence (M. Lesieur) • En Physique, pour comprendre (L. Viennot) • Naissance de la Physique (M. Soutif) • Minimum Competence in Scientific English (S. Blattes, V. Jans & J. Upjohn) • Sous les feux du Soleil (J. Liliensten & J. Bornarel)

et d'autres titres sur le site internet
<https://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr>

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos	1
Remerciements	5
Symboles et abréviations	7
Constantes physiques	13
Chapitre 1. Notions de base et terminologie	15
1.1. Paramètres et caractéristiques des spectres	15
1.1.1. Diagramme des niveaux d'énergie d'un atome	15
1.1.2. Spectre de raies, spectre moléculaires et continuum	17
1.1.3. Profil de raie	25
1.1.4. Fond continu des spectres	35
1.2. Longueur d'onde : étalon et précision	40
1.3. Coefficient d'absorption et épaisseur optique d'un milieu	43
1.4. Règles de sélection des transitions entre niveaux d'énergie et notation .	45
1.4.1. Transitions radiatives permises et interdites	45
1.4.2. Aperçu des notations désignant l'état d'excitation d'un atome	47
1.5. Excitation et désexcitation d'un atome (molécule) en phase gazeuse ..	51
1.5.1. Mécanismes mettant en jeu des photons	51
1.5.2. Mécanismes collisionnels	54
1.6. Excitation et désexcitation des atomes dans les solides	55
1.7. Spectres expérimentaux de l'atome d'hydrogène	57

Chapitre 2. Modèle de BOHR et ses améliorations	61
2.1. Moment cinétique en mécanique classique	61
2.2. Modèle de BOHR de l'atome d'hydrogène	63
2.2.1. Point de départ de BOHR : RUTHERFORD	64
2.2.2. Postulats de BOHR	65
2.2.3. Calcul du rayon des orbites quantifiées et de leur énergie	66
2.2.4. Conclusion sur le modèle de BOHR (première version)	72
2.3. Excitation des atomes par collisions électroniques : expérience de FRANCK et HERTZ	73
2.3.1. Principes de l'expérience et montage	73
2.3.2. Résultats expérimentaux	74
2.3.3. Conclusion	79
2.4. Modèle de BOHR-SOMMERFELD	79
2.4.1. Dérivation du postulat de BOHR sur la quantification du moment cinétique orbital	79
2.4.2. Améliorations à la quantification de l'atome hydrogénoïde suivant WILSON et SOMMERFELD	83
2.4.3. Correction relativiste de SOMMERFELD (structure fine)	90
2.4.4. Principe de correspondance	91
2.4.5. Bilan et critique du modèle de BOHR-SOMMERFELD	94
2.5. La dualité onde-corpuscule	96
Chapitre 3. Propriétés quantiques de l'atome à un électron	99
3.1. Électron dans un potentiel coulombien	100
3.1.1. Équation de SCHRÖDINGER stationnaire	100
3.1.2. Séparation de la fonction d'onde de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire	102
3.1.3. Valeurs permises des nombres quantiques	107
3.1.4. Densité de présence de l'électron	110
3.2. Atome à un électron en périphérie d'une configuration orbitale de gaz rares	116

3.3. Définition et propriétés du moment cinétique	119
3.3.1. Définition et axiomatique	119
3.3.2. Relations entre les valeurs propres de \hat{J}^2 et celles de \hat{J}_z	120
Chapitre 4. Spectroscopie de l'atome à deux électrons	127
4.1. Principe d'indiscernabilité des particules : symétrie des fonctions d'onde	129
4.2. Application du principe d'indiscernabilité	130
4.2.1. Mode d'expression de la symétrie de la fonction d'onde	131
4.2.2. Cas d'électrons interagissant, sans corrélation position-spin	133
4.2.3. Fonctions de spin pour deux électrons en faible corrélation de spin	133
4.3. Énergie des niveaux singulet et triplet de l'hélium	135
Chapitre 5. Atomes à plusieurs électrons	143
5.1. Insuffisance du principe d'exclusion de PAULI	144
5.2. Équation de SCHRÖDINGER ; approximation de HARTREE-FOCK	145
5.2.1. Expression de l'énergie potentielle répulsive	147
5.2.2. Algorithme du calcul auto-cohérent	148
5.2.3. Énergie potentielle moyenne et charge effective	153
5.2.4. Propriétés de la partie radiale R_{nl} de la fonction d'onde	154
5.3. Configuration orbitale des éléments du tableau périodique	160
5.3.1. Précisions sur la désignation d'une configuration orbitale	160
5.3.2. Habillage en orbitales des différents éléments du tableau périodique	162
5.3.3. Examen des résultats du remplissage du tableau périodique	165
5.4. Addition de moments cinétiques : modèle vectoriel	168
5.5. Niveaux d'approximation de l'hamiltonien suivant les différents types de couplage	170
5.5.1. Couplage $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$	173
5.5.2. Couplage $j - j$	189
5.5.3. Couplage (j, l) dit de RACAH	193
5.5.4. Structure hyperfine et moment cinétique nucléaire	198

Chapitre 6. Interaction rayonnement-matière	201
6.1. Probabilité de transition radiative spontanée	201
6.2. Émission stimulée et absorption	205
6.3. Théorie classique de LORENTZ du rayonnement EM par les atomes ...	206
6.3.1. Absorption	207
6.3.2. Émission	214
6.4. Interaction rayonnement-matière : théorie semi-quantique	218
6.4.1. Hamiltonien tenant compte de l'incidence du rayonnement EM sur l'atome	219
6.4.2. Solution de l'hamiltonien par une méthode de perturbation	220
6.4.3. Probabilité de transition indépendante du temps	226
6.4.4. Expression des coefficients d'EINSTEIN	227
6.4.5. Probabilité de transition spontanée	228
6.4.6. Règles de sélection pour les transitions dipolaires électriques	229
6.4.7. Règles de sélection pour les transitions dipolaires magnétiques et quadripolaires électriques	234
6.5. Rayonnement EM dans un système en équilibre thermodynamique : le corps noir	235
6.6. Intensités du spectre d'émission dans un milieu en équilibre thermodynamique : loi de BOLTZMANN	244
6.7. Intensités du spectre d'émission dans un milieu hors équilibre thermodynamique	248
6.8. Coefficient d'absorption optique	251
6.8.1. Coefficient d'absorption optique $k_\nu(\nu)$ intégré sur la largeur de raie	251
6.8.2. Cas d'un ensemble d'atomes obéissant à une distribution en vitesse de MAXWELL-BOLTZMANN	255
6.8.3. Coefficient global d'absorption	256
Exercices du chapitre 1	261
Exercices du chapitre 2	271
Exercices du chapitre 3	297
Exercices du chapitre 4	315

Exercices du chapitre 5	327
Exercices du chapitre 6	373
Annexes	385
A1. Énergie totale de l'électron dans l'atome d'hydrogène	385
A2. Niveaux d'énergie d'une molécule et nombres quantiques	387
A3. Notation des systèmes moléculaires des décharges dans N_2	396
A4. Notation en couplage $L \cdot S$ des états d'énergie des molécules diatomiques homonucléaires	399
A5. Séparation minimale de deux raies : critère de RAYLEIGH	402
A6. Structure fine de l'atome d'hydrogène dans la série de BALMER	404
A7. Piégeage du rayonnement dans un milieu à T_{gaz} inhomogène	406
A8. Principe de la convolution de deux profils spectraux	408
A9. Continuum de recombinaison des hydrogénoïdes	412
A10. Rayonnement de freinage (<i>Bremsstrahlung</i>)	414
A11. Transfert radiatif à travers un milieu gazeux	416
A12. Loi de KIRCHOFF dans un milieu en équilibre thermique	418
A13. Fluorescence et résonance : reconstitution des niveaux d'un atome ...	420
A14. Effet ZEEMAN	423
A15. Postulats de la mécanique quantique	425
A16. He I : série de termes singulet et série de termes triplet	429
A17. Illustration de la méthode de perturbation stationnaire pour un état non dégénéré	431
A18. Champ magnétique créé par la charge électrique du noyau dans le repère de l'électron	432
A19. Lien des coefficients d'EINSTEIN B_{ij} avec ceux de MILNE \bar{B}_{ij}	434
A20. Variante du calcul du coefficient d'absorption optique	435
A21. Coefficient d'absorption optique intégré dans le cas d'une raie élargie par effet DOPPLER	436
Postface	439
Bibliographie	441
Index	445