

Université Joseph Fourier
Master Physique et Ingénieries

**Physique Atomique et
Moléculaire, Spectroscopie**

Jacques DEROUARD, Professeur
Juin 2006

Table des matières

1	Introduction à la Physique Atomique	5
1.1	Qu'est-ce que la physique atomique?	5
1.1.1	Physique "de" l'atome	6
1.1.2	Physique "avec" des atomes	6
1.1.3	Applications (sciences fondamentales et appliquées)	6
1.2	Quelques développements récents	13
1.3	But de ce cours	14
1.4	Ouvrages généraux suggérés	15
2	Physique des atomes et des molécules: ordres de grandeur	16
2.1	Structure électronique	16
2.1.1	Taille des atomes	16
2.1.2	Niveaux d'énergie électroniques	17
2.2	Vibration et rotation des molécules	19
2.2.1	Vibration et liaison chimique	19
2.2.2	Rotation	22
2.2.3	Niveaux et Transitions "rovibroniques"	25
2.3	Interactions magnétiques	26
3	Le photon	28
3.1	Energie	28
3.2	Quantité de mouvement	30
3.2.1	Pression de radiation en électromagnétisme classique	30
3.2.2	Manifestations physiques et applications	31
3.2.3	Forces dipolaires et piégeage radiatif	33
3.3	Moment cinétique	35
3.3.1	Couple exercé par une onde électromagnétique	35
3.3.2	Interprétation quantique: spin du photon et états de polarisation de la lumière	37
3.3.3	Spin du photon, conservation du moment cinétique et règles de sélection lors de transitions radiatives	39
3.3.4	Moment cinétique orbital de la lumière et transitions multipolaires	40

4	Processus de transitions entre niveaux atomiques et moléculaires	42
4.1	Principaux schémas d'expériences de spectroscopie	43
4.1.1	Spectroscopie optique	43
4.1.2	Spectroscopies non optiques	46
4.2	Cinétique de désexcitation d'un niveau	46
4.2.1	Détermination expérimentale de la durée de vie d'un état excité	47
4.2.2	Désexcitation radiative	48
4.3	Processus collisionnels	48
4.3.1	Désexcitation collisionnelle	48
4.3.2	Transferts collisionnels	49
4.4	Notion de section efficace	49
4.4.1	Modèle classique	49
4.4.2	Définition plus formelle	49
4.4.3	Section efficace et taux de collision	52
4.5	Profils de raie	53
4.5.1	Profil "homogène" de Lorentz, largeur "naturelle"	54
4.5.2	Profil "inhomogène". Cas de l'effet Doppler	56
4.6	Processus d'interaction des atomes avec la lumière et cinétique d'évolution	58
4.6.1	Absorption	58
4.6.2	Emission spontanée	61
4.6.3	Emission stimulée	62
4.6.4	Effet laser	62
4.6.5	Relations entre coefficients d'Einstein	63
4.6.6	Sections efficaces	66
5	Atome d'hydrogène et "hydrogénoïdes"	67
5.1	Introduction	67
5.2	Rappels de quelques résultats de mécanique classique	68
5.3	Résultats de la mécanique quantique	70
5.3.1	Niveaux d'énergie	71
5.3.2	Fonctions d'onde radiales	72
5.3.3	Fonctions d'onde angulaire	76
5.3.4	Orbitales hybrides dirigées	78
5.4	Extension au cas des atomes alcalins et atomes de Rydberg: "concept de défaut quantique"	80
6	Atomes à plusieurs électrons	84
6.1	Hamiltonien d'un atome à p électrons: Approximation des électrons indépendants, potentiel effectif	84
6.2	Structure en couches. Configurations électroniques	87
6.2.1	Configuration fondamentale des atomes	87

6.2.2	Configurations électroniques excitées	92
6.2.3	Lien entre $Z_{eff}(r)$ et configuration électronique	92
6.3	Moment cinétique des configurations. Energie d'échange	99
6.3.1	Moments cinétiques et termes spectraux	99
6.3.2	Règle de Hund et énergie d'échange	100
7	Structure fine et interactions magnétiques	106
7.1	Introduction: structure fine des raies spectrale	106
7.2	Interaction spin-orbite: Atomes à 1 électron actif	108
7.2.1	Hamiltonien: cadre électrodynamique	108
7.2.2	Ordre de grandeur et lois d'échelle	109
7.2.3	Niveaux propres et états propres de l'énergie	111
7.3	Interaction spin-orbite: Atomes à plusieurs électrons	112
7.3.1	Hamiltonien	112
7.3.2	Niveaux propres: Approximation du "couplage LS"	112
7.3.3	Niveaux et états propres: Approximation du "couplage jj"	113
7.4	Influence du noyau, structure hyperfine et effets isotopiques	114
7.4.1	Effet de masse	114
7.4.2	Effet de volume	115
7.4.3	Spin et moment magnétique du noyau	115
7.4.4	Spin et moment quadrupolaire du noyau	117
7.5	Interaction avec un champ magnétique externe	118
7.5.1	Hamiltonien d'interaction	118
7.5.2	Niveaux et états propres de l'énergie en champ faible: effet Zeeman	119
7.5.3	Niveaux et états propres de l'énergie en champ fort: effet Paschen Back	121
7.5.4	Conclusion	122
8	Transitions radiatives. Intensités et règles de sélection	125
8.1	Introduction	125
8.2	Hamiltonien d'interaction champ-atome	126
8.2.1	Probabilités de transitions	126
8.2.2	Développement multipolaire du Hamiltonien	126
8.2.3	Termes dipolaire électrique et dipolaire magnétique: ordre de grandeur	127
8.3	Règles de sélection	128
8.3.1	Parité	128
8.3.2	Moment cinétique	130
8.3.3	Multiplicité et spin électronique	132
8.3.4	Moment orbital	133
8.3.5	Exemples	133
8.3.6	Quelques remarques sur les cas non traités	134

8.4	Aspects géométriques: polarisation et transitions radiatives, répartition angulaire de l'émission	135
8.4.1	Transitions radiatives par émission spontanée	135
8.4.2	Transitions radiatives par absorption ou émission induite	137
8.4.3	Conclusion	139