

# Mécanique quantique – L2

## TD 8 : Spectroscopie de la molécule HBr

Adrien Mahé – Sylvain Nascimbène

[http://www.phys.ens.fr/~nascimbene/td/td\\_index.html](http://www.phys.ens.fr/~nascimbene/td/td_index.html)

On modélise une molécule HBr par un atome d'hydrogène de masse  $m$  évoluant dans le potentiel  $V$  créé par un atome de brome supposé infiniment lourd. On suppose par ailleurs que le potentiel  $V$  est du type Lénard-Jones, à savoir :

$$V(r) = \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

où  $r$  désigne la distance brome-hydrogène.

1. On s'intéresse dans un premier temps au potentiel de Lénard-Jones.

- Donner les dimensions de  $\sigma$  et  $\epsilon$ .
- Montrer que le potentiel  $V$  possède un minimum en  $r = r_e$  que l'on calculera en fonction de  $\sigma$ .
- En déduire qu'au voisinage de  $r_e$ , on peut écrire :

$$V(r) \simeq V(r_e) + \frac{m\omega^2}{2}(r - r_e)^2.$$

où l'on exprimera  $V(r_e)$  et  $\omega$  en fonction de  $\sigma$  et  $\epsilon$ .

- Quelles sont les interprétations physiques de  $r_e$  et  $V(r_e)$ . En déduire leur ordre de grandeur, ainsi que celui de  $\omega$ . À quel domaine du spectre électromagnétique cette fréquence correspond-elle ?
2. Écrire le hamiltonien de l'atome d'hydrogène placé dans le potentiel  $V(r)$ . On rappelle qu'en coordonnées sphériques, on a :

$$\Delta\psi = \frac{1}{r} \partial_r^2 (r\psi) - \frac{\widehat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \psi,$$

où  $\widehat{L}$  désigne l'opérateur moment cinétique. Pourquoi le hamiltonien commute-t-il avec le moment cinétique ? En déduire la forme générale d'un état stationnaire  $\psi$ .

3. Écrire l'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction  $u = r\psi(r)$ . La linéariser au voisinage de  $r_e$ . À quelle condition ce développement est-il valable ?

*Indication* : On pourra évaluer  $\hbar/m\omega r_e^2$ .

4. Dédurre de la question précédente que les énergies propres sont de la forme :

$$E_{nl} = V(r_e) + \hbar\omega (n + 1/2) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_e^2}.$$

où  $n$  et  $l$  sont deux entiers. Quelle est la dégénérescence de ces états ?

5. On admet que par absorption d'un photon, la transition suit la "règle de sélection"  $\Delta l = \pm 1$ .

- Donner l'allure des spectres d'absorption pour  $\Delta n = 0$  puis  $\Delta n = 1$ . Préciser en particulier dans quel domaine du spectre électromagnétique ces transitions se produisent.
- Comparer le résultat de la question précédente au spectre expérimental de la figure ci-dessous. En déduire en particulier les valeurs de  $\omega$  et  $r_e$ .

