

Chimie Quantique

(Durée : 2 heures, tous documents autorisés, Parties A, B indépendantes
mais il est fortement conseillé de traiter dans l'ordre)

Partie A – Couplage Spin-Orbite dans la famille du Carbone

A-1 Rappeler la nomenclature générale des termes spectraux. Pour quels types d'éléments de la configuration périodique s'applique-t-elle ?

A-2 Pour le cas général du couplage LS, dans quel ordre classez-vous les termes spectraux ?

A-3 Rappeler les deux méthodes d'obtention de la grandeur J. Cette grandeur explicite le couplage spin-orbite. Justifier cette terminologie en termes d'interactions.

A-4 Pour le cas général du couplage LS, dans quel ordre classez-vous les nouveaux termes provenant du couplage spin-orbite ?

A-5 La configuration électronique fondamentale pour les éléments X de la famille du Carbone est donnée par l'expression suivante :

$$X = [\text{Gaz Rare}] ns^2 np^2$$

Proposer le terme spectral LS **avec couplage spin-orbite** pour le cœur de Gaz Rare et pour la sous-couche ns^2 .

A-6 Proposer le terme spectral **sans couplage spin-orbite** correspondant à la configuration classique np^2 vérifiant le principe de Pauli et la règle de Hund. Comment appelle-t-on cet état ?

A-7 Durant les TD nous avons montré que nous avons deux autres termes spectraux pour la configuration np^2 . Ces deux termes supplémentaires sont 1S et 1D . Proposer un diagramme général des états pour les éléments X de la famille du Carbone. Vous appliquerez les règles de **A-2**.

A-8 Déénombrer le nombre de fonction de spin **et** d'espace (ou d'orbite) pour ces trois termes spectraux.

A-9 Déterminer les valeurs de J pour ces trois termes spectraux. Proposer une évolution du diagramme général des états pour les éléments X de la famille du Carbone **avec couplage spin-orbite**. Vous appliquerez les règles de **A-4**.

A-10 Est-il possible d'envisager une transition entre le terme fondamental de **A-6** et les termes spectraux supplémentaires de **A-7** ? On précise que les règles de sélection imposent pour une transition aucune variation du spin et une variation de plus ou moins une unité pour le moment angulaire.

Partie B – ^{17}O et Structure Hyperfine

L'oxygène possède 17 isotopes connus de nombre de masse variant de 12 à 28. Trois d'entre eux sont stables, ^{16}O , ^{17}O et ^{18}O . Le premier est ultra-majoritaire dans la nature (99,75 %).

L'oxygène 17, noté ^{17}O (0,038 %), est l'isotope de l'oxygène dont le nombre de masse est égal à 17. Son noyau atomique compte 8 protons et 9 neutrons avec un spin nucléaire de $I=5/2$.

B-1 La configuration électronique fondamentale pour les éléments Y de la famille de l'oxygène est donnée par l'expression suivante :

$$Y = [\text{Gaz Rare}] ns^2 np^4$$

Proposer le terme spectral LS **avec couplage spin-orbite** pour le cœur de Gaz Rare et pour la sous-couche ns^2 .

B-2 Proposer le terme spectral **sans couplage spin-orbite** correspondant à la configuration classique np^4 vérifiant le principe de Pauli et la règle de Hund. Comment appelle-t-on cet état ?

B-3 Que remarquez-vous si vous comparez avec votre résultat à **A-6** ? Est-ce logique ?

B-4 Pour cet unique terme spectral, proposer les valeurs de J associées. Proposer un positionnement énergétique de ces multiplets. Vous appliquerez les règles de **A-4**.

Le résultat de B-4 est la structure fine qui résulte du couplage entre L et S pour donner J. La structure hyperfine résulte d'une nouvelle interaction du même type entre J et le spin nucléaire I pour donner F.

B-5 Proposer les valeurs de F associées à chacun des termes de la structure fine de **B-4**. Vous positionnerez vos termes avec F croissant.

B-6 Sachant d'une part que le spin nucléaire de ^{16}O est nul et d'autre part que les transitions entre les niveaux de cette structure hyperfine sont positionnées dans les radiofréquences, expliquer l'intérêt pratique de la structure hyperfine de ^{17}O ?

Question Bonus :



On vous sert un cocktail à base de Curaçao dans un verre haut et étroit. Le verre qui constitue le verre est d'un rouge rubis très soutenue.

Le Curaçao est une liqueur bleue. Son nom a pour origine l'île de Curaçao, île des Antilles néerlandaises. Cette liqueur fabriquée à l'origine par les Hollandais est composée d'écorces, issues généralement de petites oranges vertes amères ou bigarades. En fait, le curaçao peut revêtir différentes couleurs telles que le bleu brillant (grâce au colorant alimentaire E133), l'orange, l'ambré, le vert ou le rouge. Le fait qu'il contienne du bleu brillant, un puissant colorant bleu, lui confère la particularité de colorer l'urine.

Dans le cas du Curaçao bleu, quelle est la couleur du verre de cocktail ? Justifier votre réponse. Est-ce très différent pour le Curaçao rouge ? Expliquer succinctement !

[Tapez ici]