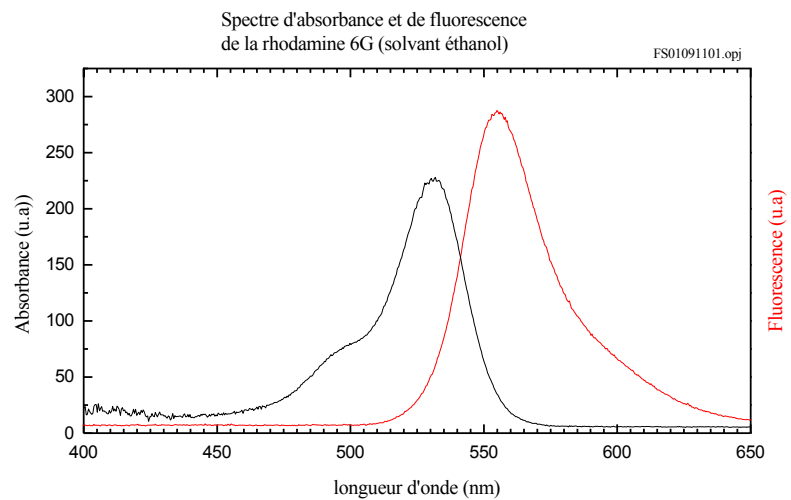
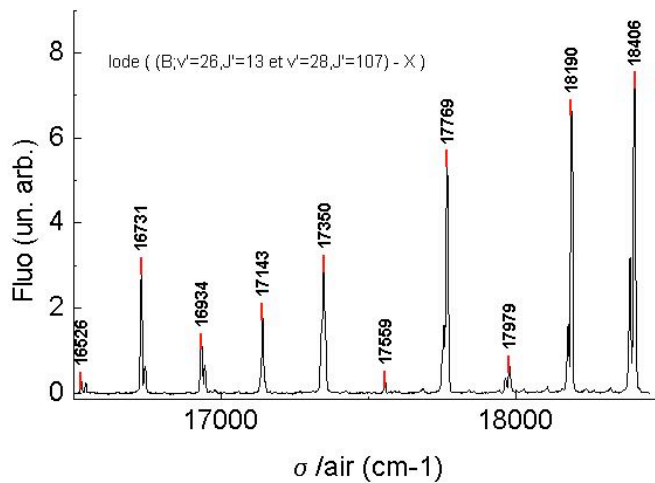


TRAVAUX PRATIQUES
DE
PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE
Bâtiment C de physique, salle 118



UNIVERSITE JOSEPH FOURIER DE GRENOBLE
Master Physique

TRAVAUX PRATIQUES DE PHYSIQUE ATOMIQUE ET MOLECULAIRE (Bât C, salle 118)

Ce cycle de TP a pour but de vous familiariser avec les notions suivantes :

- Spectroscopie d'absorption et d'émission.
- Niveaux d'énergie électronique, vibrationnels et rotationnels.
- Excitation optique et électronique.
- Désexcitation par fluorescence ou par relaxation et collisions.
- Effet laser.
- Modes de cavité optique, faisceau gaussien.
- Analyse de données expérimentales : calibration, ajustements par la méthode des moindres carrés...

Chaque groupe de TP est normalement constitué de 4 binômes. Le cycle comprend 3 séances de TP. Vous ne ferez donc que 3 sujets sur les 4 existants. Durant la première séance, chacun des binômes effectuera un des 4 TP, puis poursuivra par permutation circulaire pour les autres séances.

L'évaluation prendra en compte : i) la préparation et le déroulement des TP ; ii) une présentation orale de 15mn d'un des TP (tiré au sort), accompagnée d'une page (imprimée) résumant les résultats obtenus. Il s'agira, lors de la présentation orale, de présenter les objectifs généraux du TP et de mettre en valeur les résultats saillants. Des approfondissements portant sur des aspects du TP (théorie, applications, derniers développements scientifiques récents) peuvent être évoqués et seront appréciés.

T.P. n° 1 (p. 5) : SPECTRE DE FLUORESCENCE INDUITE PAR LASER : la molécule d'iode

Le spectre de fluorescence de la molécule d'iode est obtenu en excitant la molécule à l'aide de la raie verte d'un laser He-Ne ($\lambda=543,36509$ nm). Cette raie présente une coïncidence avec deux transitions électroniques entre l'état fondamental et l'état excité. On observera le spectre d'émission (fluorescence) résolu vibrationnellement, puis rotationnellement et on en déduira certaines constantes moléculaires, ainsi que le potentiel électronique de l'état fondamental.

T.P. n° 2 (p. 15) : ABSORPTION, FLUORESCENCE ET DUREE DE VIE : colorant organique et cristal de rubis

Dans une première partie on s'intéressera à l'absorption et la fluorescence de grosses molécules en solution, ici un colorant organique dans de l'eau.

Dans une deuxième partie, on étudiera l'absorption et la fluorescence d'un cristal de rubis excité par un laser à azote et à colorant pulsé. On mesure la durée de vie radiative d'un état excité du cristal.

T.P. n°3 (p. 23) : MESURE DE LA CONSTANTE DE RYDBERG

Le but de ce TP est d'estimer la valeur de la constante de Rydberg à partir de l'observation du spectre d'émission d'une décharge électrique dans de l'hydrogène. Il faudra pour cela identifier les raies correspondantes et les discerner des raies émises par des impuretés. Au passage, on se familiarisera avec un certain nombre de techniques d'analyse de données et de calibration.

T.P. n° 4 (p. 27) : LASER HELIUM-NEON

Ce TP consiste à comprendre le fonctionnement d'un laser dont le milieu amplificateur est un gaz ionisé. On étudiera le spectre du plasma, la structure spatiale et fréquentielle des modes longitudinaux et transverses.

Annexes (p. 39) : Sécurité laser ; ressources informatiques ; spectromètre à barrette CCD ; logiciels de traitement de données ; constantes physiques

FLUORESCENCE INDUITE PAR LASER DE LA MOLECULE I₂

On souhaite étudier le spectre de fluorescence, de la molécule ¹²⁷I₂ en phase gazeuse, induite par un laser HeNe émettant un rayonnement vert de $\lambda=543,365$ nm dans l'air, ce qui correspond à des photons d'énergie $18398,718$ cm⁻¹. Ces photons sont absorbés par des molécules se trouvant dans certains niveaux de rotation-vibration de l'état électronique fondamental, noté X, de symétrie 0^+_g ; à la suite de quoi ces molécules se trouvent excitées dans le niveau électronique noté B, de symétrie 0^+_u . Ces molécules excitées émettent alors des photons de fluorescence correspondants à une série de transitions de désexcitations radiatives vers différents niveaux rovibrationnels de l'état X.

Le but de ce TP est l'enregistrement puis l'analyse de ce spectre de fluorescence, qui va permettre de reconstruire le puits de potentiel de la molécule dans son état électronique fondamental X et en particulier, de déterminer l'énergie de dissociation et la longueur d'équilibre de la liaison chimique entre les deux atomes d'iode, dans l'état fondamental. En dehors de son intérêt pour la détection et l'identification de molécules, la spectroscopie moléculaire apparaît ainsi comme une méthode d'investigation très puissante de la matière, dont la structure microscopique et quantique se retrouve dans un certain nombre de propriétés macroscopiques.

L'analyse du spectre se fera en deux étapes : un premier enregistrement à "basse résolution", mais sur une gamme spectrale étendue permettra de révéler la structure vibrationnelle, sans résoudre les niveaux rotationnels ; un second enregistrement affiné nous permettra d'accéder à la structure rotationnelle propre à un niveau vibrationnel particulier. Ces données permettront de déterminer l'espacement des différents niveaux d'énergie de l'état X pour en déterminer les coefficients caractéristiques B , $h\omega_e$, $h\omega_e x_e$, qu'on reliera ensuite aux paramètres R_e , D et α du puits de potentiel (*cf.* l'introduction à la spectroscopie moléculaire – pages suivantes).

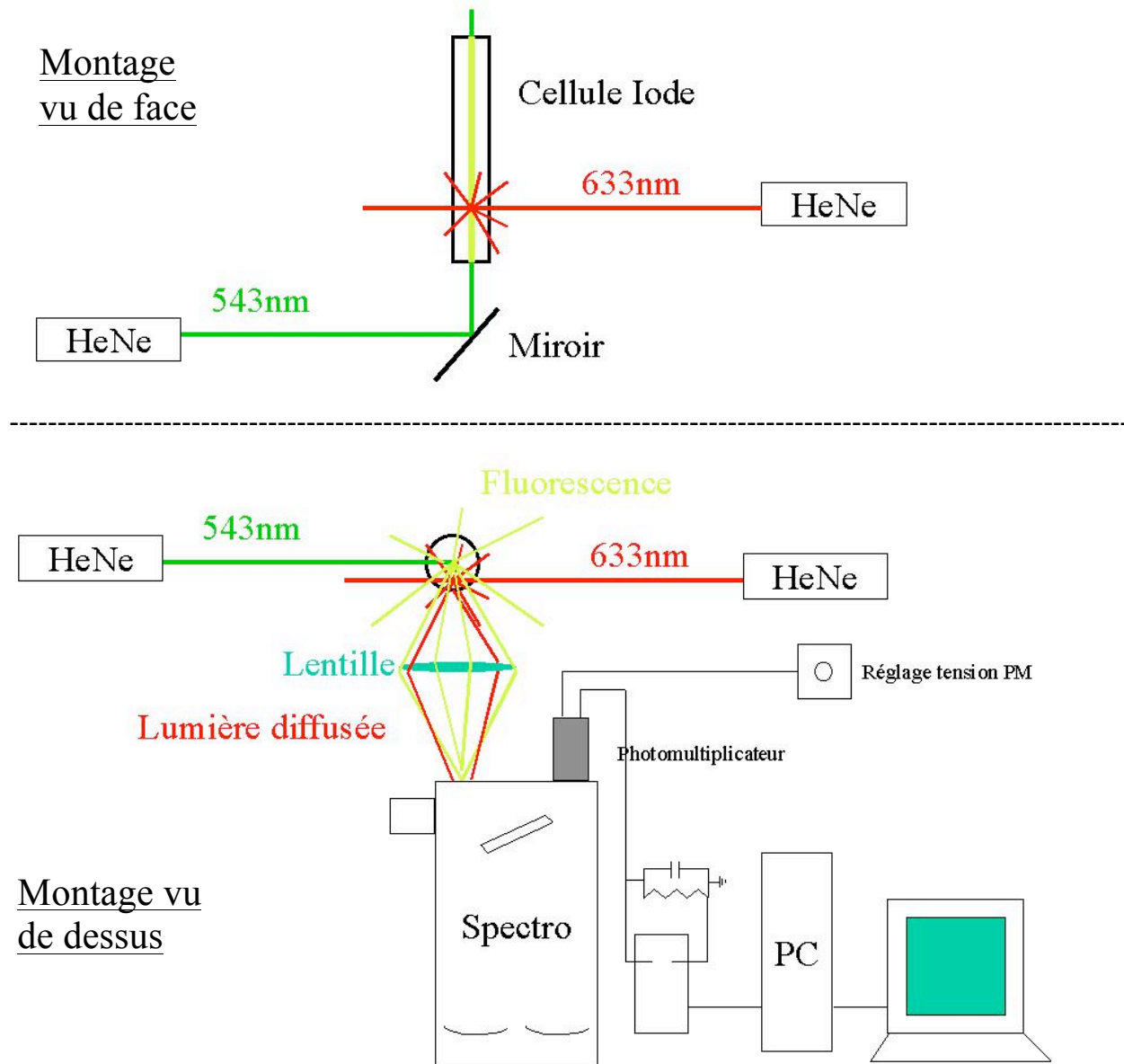
1. Montage expérimental

Le principe de l'expérience est extrêmement simple : un laser He-Ne vert éclaire une cellule contenant de la vapeur d'iode. On projette l'image de la fluorescence, émise le long du faisceau excitateur, sur la fente d'entrée d'un spectromètre à réseau. Le spectre de cette fluorescence est obtenu en enregistrant le signal détecté au moyen d'un photomultiplicateur placé devant la fente de sortie du spectromètre (ou monochromateur, dans le cas présent), à mesure qu'on fait défiler dans le temps la longueur d'onde transmise par le monochromateur. Ceci est réalisé au moyen d'un moteur qui entraîne la rotation du réseau autour d'un axe parallèle à ses traits. On dispose d'un système d'acquisition du signal sur l'ordinateur (logiciel *Synchronie*). Le spectre obtenu sera ensuite analysé au moyen d'un logiciel de visualisation et de traitement de données (*Kaleidagraph* ou mieux, *SciDAVis*). La calibration en longueur d'onde du spectre sera obtenue en repérant dans celui-ci les pics correspondants, à la longueur d'onde du laser vert provoquant la fluorescence et à celle d'un autre laser He-Ne émettant dans le rouge ($\lambda=632,8$ nm),

dont le rayonnement est simultanément reçu par le spectromètre en envoyant son faisceau sur les parois de la cellule d'iode en face de la fente d'entrée.

Matériel nécessaire :

Cellule cylindrique en pyrex contenant de la vapeur d'iode, pince, colonne de fixation ;
Laser He-Ne vert (543nm) avec support orientable et laser He-Ne rouge (633nm) ;
Miroir sur support, plaque de fixation à trous, lentille focale environ 15cm avec réglage latéral ;
Photomultiplicateur avec alim HT intégrée Hamamatsu contrôlée par potentiomètre externe ;
Spectromètre à réseau focale 800mm, équipé d'un réseau 1800 traits/mm blazé dans le visible, avec moteur d'entraînement du réseau ;
Voiles noirs en abondance, papier noir et ruban adhésif noir pour masquer la lumière parasite (à mettre autour du PMT, sur le spectro, autour du montage de fluorescence) ;
PC avec carte d'acquisition *Synchronie* + logiciels de dépouillement de données *Kaleidagraph* ou mieux, *SciDAVis*.



2. Questions préliminaires et réglages

- Allumer le laser vert et observer la fluorescence à l'œil : **commenter sa couleur par rapport à celle du laser**. Mettre en route le laser He-Ne rouge de sorte que son faisceau rase la paroi de la cellule d'iode côté spectromètre.
- **Estimer la distance focale et l'ouverture de la lentille de collection de la fluorescence**.
- Le courant provenant du tube photomultiplicateur (PMT) est débité dans une résistance de $1\text{ M}\Omega$ en parallèle avec une capacité de 100 nF : **quels sont les rôles de ces composants ?** En déduire quelle est la plus petite valeur raisonnable du pas d'échantillonnage temporel (un des paramètres d'acquisition à fixer sous *Synchronie*)
- Paramétrer l'acquisition des données sur le PC (logiciel *Synchronie*). Sélectionner la voie "EA0", choisir une gamme de tension d'entrée adaptée au signal venant du PMT (par ex. $\pm 2,5\text{ V}$, à modifier éventuellement par la suite) et un gain de 10. Le signal est converti en une valeur numérique au moyen d'un convertisseur analogique digital codant sur 12 bits la totalité de la gamme de tension (amplifié) : **quel nombre sera enregistré pour coder un signal de 1 volt en entrée ? Quelle est la variation minimale de signal qu'on est capable de détecter avec ce système ?**
- Vérifier que le PMT et l'entrée du monochromateur sont bien entourés des voiles noirs de façon à éviter la lumière parasite. Vérifier la présence d'un signal (par exemple en branchant le voltmètre numérique), en augmentant progressivement, à l'aide du potentiomètre, la haute tension appliquée au PMT. Faire fonctionner le moteur pas à pas actionnant le réseau pour se placer au voisinage de la raie du laser He-Ne vert : un compteur permet de se repérer approximativement (la longueur d'onde est affichée, de façon approximative, en angströms). Balayer à faible vitesse (par exemple 4 nm/min) et se placer sur le maximum de la première raie qui apparaît vers 543 nm (c'est la fluorescence à la même longueur d'onde que celle du laser). Si nécessaire (demander à l'enseignant) déplacer latéralement et très légèrement la lentille pour optimiser le signal.
- Enregistrer le profil de cette première raie (ce sera la raie la plus intense) pour différentes largeurs des fentes d'entrée et de sortie (valeurs identiques) du spectromètre : **quelle valeur choisir si on ne s'intéresse qu'à la structure vibrationnelle ?**
- On cherche à obtenir une petite dizaine de points par raie avec un temps de pose typique de 200 ou 250 ms par point. **Estimer alors la vitesse de balayage qu'il convient de choisir pour faire d'abord un enregistrement rapide de la structure vibrationnelle. Combien de points faut-il prendre pour couvrir la gamme spectrale qui va de la raie d'excitation verte jusqu'à 800 nm ?**

3. Analyse vibrationnelle

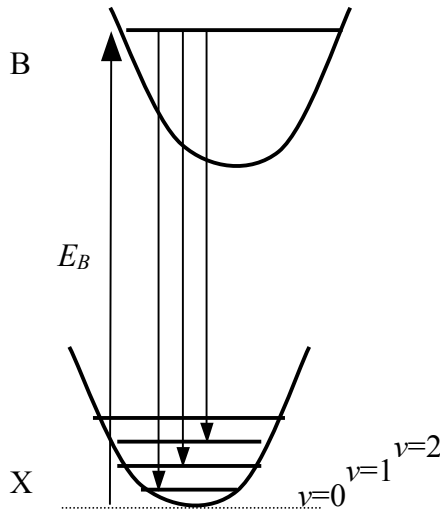
IMPORTANT : AVANT de lancer l'acquisition, désactiver l'économiseur d'écran, sinon l'écran va s'éteindre en cours de balayage et vous aurez l'air "nouille" !

- Lancer enfin l'acquisition du spectre, avec les réglages effectués précédemment. Lorsque c'est terminé, le sauvegarder sous forme d'un fichier texte ("TAB") : il faut préciser au logiciel que l'on veut enregistrer les deux colonnes t et $EA0$ (cliquer dans « ajouter » lorsque la fenêtre d'enregistrement se présente). Vérifier que le fichier texte existe : l'éditer et vérifier que son contenu correspond bien à ce qu'on attend.

- Charger le fichier texte du spectre avec le logiciel d'analyse *SciDAVis* ou *Kaleidagraph*. Commencer par calibrer le spectre : repérer les positions des deux raies des lasers He-Ne vert et rouge ; transformer alors, par une opération linéaire, les temps (dans la colonne des abscisses) en longueurs d'onde. Ensuite, transformer cette échelle de longueurs d'onde en énergies (il sera commode d'avoir le spectre en fonction du nombre d'onde en cm^{-1}).
- Identifier chacune des raies du spectre de fluorescence** du niveau excité dans l'état B par le niveau vibrationnel d'arrivée (noté ν) dans le puits de potentiel de l'état fondamental X et établir un tableau du type :

<u>Niveau d'arrivée</u>	<u>Energie de la transition</u>	<u>Energie vibrationnelle relative</u>
$\nu=0$	$E_B - E(\nu=0)$	0
$\nu=1$	$E_B - E(\nu=1)$	$E(\nu=1) - E(\nu=0)$
$\nu=2$	$E_B - E(\nu=2)$	$E(\nu=2) - E(\nu=0)$

Etc... où les énergies, E_B et $E(\nu)$, sont exprimées en cm^{-1} et sont mesurées par rapport au fond du puits de l'état fondamental X.



- En tirer les valeurs des coefficients** $\hbar\omega_e$ et $\hbar\omega_e x_e$, qui décrivent la position des niveaux

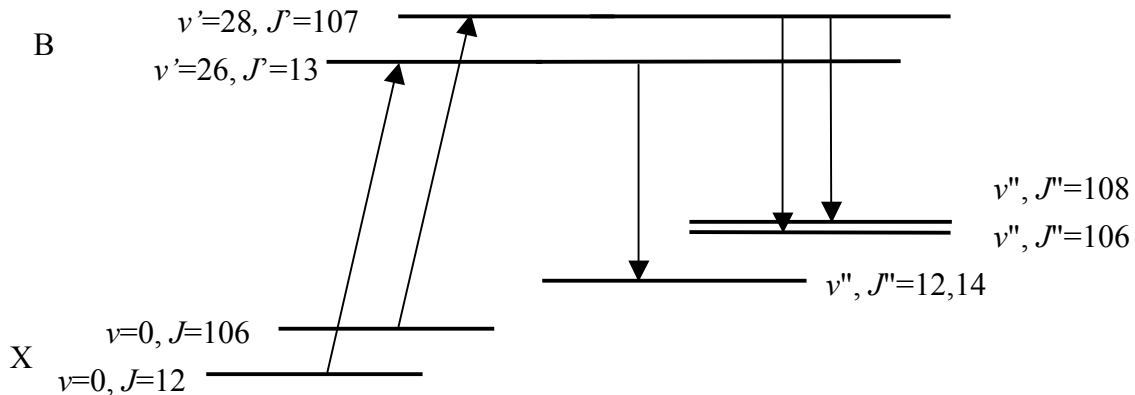
vibrationnels selon la fonction :
$$E(\nu) = \hbar\omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2$$

4. Analyse rotationnelle

- Reprendre les réglages précédents (fentes, vitesse, temps de pose) pour effectuer un enregistrement (beaucoup) plus long en résolvant la structure rotationnelle (fermer les fentes à environ 200 ou 250 μm). Quel temps durera cette acquisition ?**
- Observer ce spectre : il comporte plusieurs raies. Sachant que la longueur d'onde du laser d'excitation coïncide avec les transitions $(X, \nu=0, J=12) \rightarrow (B, \nu'=26, J'=13)$ et $(X, \nu=0, J=106) \rightarrow (B, \nu'=28, J'=107)$, on peut interpréter la structure de ce spectre comme une série de transitions de fluorescence du type $(B, \nu'=26, J'=13) \rightarrow (X, \nu'', J'')$ et $(B, \nu'=28, J'=107) \rightarrow (X, \nu'', J'')$, où $\nu''=0, 1, 2, \dots$ avec $J''=12$ et 14 pour les premières, et $J''=106$ et

108 pour les secondes (pour des transitions dipolaires électriques, les transitions $J=J''$ sont interdites et J et J'' ne peuvent différer de plus d'une unité).

Remarques : i) les transitions rotationnelles de $J'=13$ vers $J''=12$ et $J''=14$ sont toujours confondues, car la résolution du spectromètre est insuffisante pour les résoudre ; ii) le jeu des constantes de rotation et de vibration dans les états X et B sont telles que les deux transitions d'excitation coïncident exactement, mais il n'en est pas de même des deux transitions en émission vers $v'' \neq 0$: $(B, v'=26, J'=13) \rightarrow (X, v'', J''=12)$ et $(B, v'=28, J'=107) \rightarrow (X, v'', J''=106)$. Celles-ci vont se décaler progressivement l'une par rapport à l'autre au fur et à mesure que v'' augmente (évidemment, elles coïncident pour $v''=0$). Cela se manifeste par l'évolution de la position relative des raies rotationnelles au sein du triplet $J''=12, 14, J''=106$ et $J''=108$.



- **Extraire du spectre la valeur de la constante rotationnelle B**, sachant que les niveaux d'énergie rotationnels (correspondant à un même état vibrationnel) s'expriment par $E_{rot} = B[J''(J''+1)]$ dans l'état X.

5. Synthèse

- **A partir des valeurs de B, $h\omega_e$ et $h\omega_e x_e$, déterminer l'énergie de dissociation de la molécule d'iode (D), la valeur de la distance d'équilibre de la liaison I-I (R_e) et le paramètre α .**
- **Pour finir, tracer le puits de potentiel dans l'état X en fonction de la distance internucléaire.**
- **S'il reste du temps, mettre en évidence la variation de la constante de rotation B avec le niveau vibrationnel v**

Compléments de spectroscopie moléculaire

I - Notions générales sur les molécules diatomiques.

Une molécule diatomique est formée de 2 noyaux et d'un ensemble d'électrons. On appelle R la distance entre les deux noyaux, θ et ϕ les coordonnées angulaires de l'axe internucléaire par rapport au repère du laboratoire, et \vec{r}_i les coordonnées des électrons des noyaux. Comme pour les atomes on étudie séparément le mouvement du centre de masse et le mouvement des particules (noyaux et électrons) par rapport au centre de masse. Les 6 coordonnées de 2 noyaux se séparent donc en 3 coordonnées du centre de masse.

L'Hamiltonien général étant "insoluble" on traite séparément le mouvement des électrons et des noyaux car les électrons étant beaucoup plus légers que les noyaux, leurs mouvements sont beaucoup plus rapides. L'espace étant supposé isotrope, (pas de champ extérieur) l'énergie de la molécule ne dépend pas de l'orientation de l'axe internucléaire par rapport au labo, donc de θ, ϕ .

Du point de vue du formalisme tout ceci revient à dire que l'espace des coordonnées des particules qui forment la molécule est un produit direct de 4 sous-espaces qui dépendent respectivement des :

- 3 coordonnées du centre de masse,
- $3n$ coordonnées des n électrons \vec{r}_i ,
- 1 distance internucléaire R ,
- 2 coordonnées angulaires de l'axe internucléaire (θ, ϕ). (Pour être complet, il faudrait rajouter les spins des électrons et des noyaux).

La fonction d'onde de la molécule s'écrit alors :

$$\psi = \psi_{elec}(\vec{r}_i) \cdot \psi_{vib}(R) \cdot \psi_{Rot}(\theta, \phi)$$

On a oublié volontairement la partie associée aux coordonnées du centre de masse.

Cette séparation des variables correspond à l'approximation de Born Oppenheimer.

$\psi_{elec}(\vec{r}_i)$ est la fonction d'onde électronique qui ne dépend que des coordonnées des électrons, R étant considéré comme un paramètre et non une variable dynamique. Il faut noter que, contrairement au cas des atomes le potentiel n'est plus central mais de symétrie cylindrique.

$\psi_{vib}(R)$ est la fonction d'onde vibrationnelle qui ne dépend que de la variable dynamique R .

$\psi_{Rot}(\theta, \phi)$ est la fonction d'onde rotationnelle qui ne dépend que de θ et ϕ comme variable dynamique, mais aussi de R comme paramètre.

A cette approximation, les valeurs propres de l'énergie de la molécule sont :

$$E = E_{elec} + E_{vib} + E_{Rot}$$

On devrait également ajouter l'énergie cinétique du centre de masse qui n'est pas quantifiée, la molécule étant libre. L'énergie électronique, étant due à l'attraction de Coulomb entre électrons et noyaux, est du même ordre de grandeur que celle des atomes : quelques électrons volts.

II - Etude de la vibration.

On est ramené à l'étude du mouvement d'une seule "particule" ayant pour masse la masse réduite des deux noyaux $\left(\frac{1}{M} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)$ et se déplaçant dans un potentiel à une dimension $V(R)$ qui résulte d'une part de la répulsion des deux noyaux et d'autre part de l'attraction créée par les électrons dans le cas d'une orbitale liante. Ce potentiel est différent pour chaque configuration électronique. On ne sait pas calculer à priori d'expression correcte de $V(R)$ mais seulement des approximations. L'énergie pour les deux cas limites $R \rightarrow 0$ et $R \rightarrow \infty$ tend respectivement vers ∞ et vers une constante qui n'est autre que la somme des énergies des deux atomes formant la molécule. Lorsque deux atomes se rapprochent, il y a deux cas possibles :

1. L'énergie augmente, les deux atomes se repoussent ; il n'y a pas formation de molécule.
2. L'énergie diminue et passe donc obligatoirement par un minimum pour lequel $R = R_e$ qui est la distance d'équilibre de la molécule.

A - Approximation harmonique

La courbe de potentiel au voisinage du minimum possède forcément une parabole osculatrice qui s'écrit $V(R) = \frac{1}{2}K(R - R_e)^2$.

Les valeurs propres de l'équation de Schrödinger sont données pour ce type de potentiel par :

$$E(v) = \hbar\omega_e(v + 1/2) \quad v \text{ entier } > 0$$

avec $\omega_e = \sqrt{\frac{K}{M}}$.

B - Approximation de Morse

Morse a proposé une forme analytique qui rend compte de l'asymétrie du potentiel réel :

$$V(R) = D\left[1 - e^{-\alpha(R-R_e)}\right]^2$$

lorsque $R \rightarrow \infty$, $V(R) \rightarrow D$ qui est l'énergie de dissociation de la molécule, c'est à dire l'énergie qu'il faut fournir pour éloigner à l'infini les deux atomes. Un développement limité de $V(R)$ montre immédiatement que $D\alpha^2 = \frac{1}{2}K = \frac{1}{2}M\omega_e^2$.

Les énergies propres de ce potentiel peuvent être calculées analytiquement et sont données par :

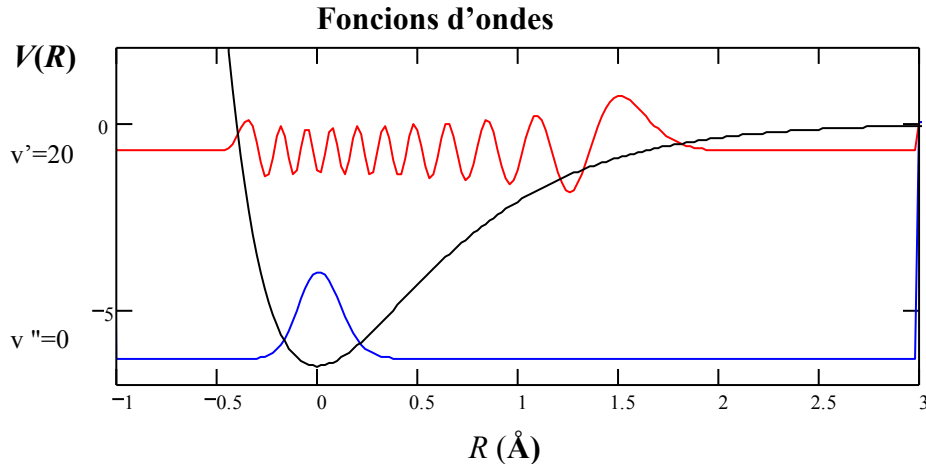
$$E(v) = \hbar\omega_e(v + 1/2) - \hbar\omega_e x_e(v + 1/2)^2$$

avec $\omega_e = \sqrt{\frac{2D\alpha^2}{M}}$ et $\omega_e x_e = \frac{\hbar\alpha^2}{2M}$ (x_e est un paramètre sans dimension).

d'où l'on tire : $D = \frac{\hbar\omega_e}{4x_e}$ et $\alpha = \sqrt{\frac{2M\omega_e x_e}{\hbar}}$

Remarque : on exprime très souvent l'énergie $\hbar\omega_e$ (et même, par abus, ω_e) en cm^{-1} . Pour la plupart des molécules $\hbar\omega_e$ est de l'ordre de 500 à 3000 cm^{-1} (équivalent à des énergies de 1 à 0,4 eV).

La figure ci-dessous montre un potentiel de Morse et les fonctions d'onde correspondants à l'état fondamental $v=0$ et à un état excité pour lequel $v=20$



Pour $v=20$, la probabilité de présence est max au bord, en accord avec le comportement classique d'un ressort. C'est une illustration de la limite classique aux grands nombres quantiques. En revanche, le comportement de $v=0$ est totalement contraire au comportement classique puisque la probabilité est maximum au centre.

III - Etude de la rotation.

Dans le cas d'une molécule diatomique on peut approximer la molécule à un rotateur rigide dont les énergies propres sont données par :

$$E = B[J(J + 1)]$$

où J entier, est la valeur propre du moment cinétique et où $B = \frac{\hbar^2}{2I}$ avec $I = M\langle R^2 \rangle$.

I : moment cinétique.

Ordre de grandeur : $M = 1$ à 100 uma, $\langle R^2 \rangle \approx 1 \text{ \AA}^2 \Rightarrow B = 10$ à 0,1 cm^{-1} (10^{-3} à 10^{-5} eV).

IV - Transitions radiatives.

Le changement d'état d'un atome ou d'une molécule peut être radiatif (émission ou absorption d'un photon) ou non radiatif (collision). On peut montrer qu'il existe une probabilité de transition entre deux états si certains opérateurs (dipolaire électrique surtout et accessoirement dipolaire magnétique, quadripolaire électrique, etc...) ont un élément de matrice non nul entre ces deux états. L'opérateur dipolaire électrique $\vec{d} = \sum_i q_i \vec{r}_i$ (\vec{r}_i coordonnées des électrons) a la symétrie

d'un vecteur. \vec{d} n'agit que sur les coordonnées électroniques et doit être exprimé dans le repère

du laboratoire qui est celui de l'observateur (et du faisceau laser provoquant les transitions), alors que la fonction d'onde électronique est exprimée dans le repère de la molécule, lequel tourne par rapport au laboratoire, de sorte que $\vec{d}_{lab} = R(\theta, \phi)\vec{d}_{mol}$ où $R(\theta, \phi)$ est un opérateur de rotation.

A - Règles de sélection

Pour déterminer les règles de sélection des transitions dipolaires électriques, c'est-à-dire déterminer entre quel état ψ' et quel autre état ψ'' une transition est possible, il faut connaître la valeur de :

$$\langle \psi' | \vec{d}_{lab} | \psi'' \rangle$$

Cet élément de matrice peut se décomposer en tenant compte du fait que ψ est un produit de fonction électronique, vibrationnelle et rotationnelle :

$$\langle \psi' | \vec{d}_{lab} | \psi'' \rangle = \langle \psi'_{elec} | \vec{d}_{mol} | \psi''_{elec} \rangle \langle \psi'_{vib} | \psi''_{vib} \rangle \langle \psi'_{rot} | R(\theta, \phi) | \psi''_{rot} \rangle$$

Le 1^{er} terme nécessite l'analyse des symétries des états propres électroniques de la molécule (théorie des groupes), ce qui sort du cadre de cet enseignement.

Le 2^{ème} terme ne fait pas apparaître de règle de sélection particulière car $\langle \psi'_{vib} | \psi''_{vib} \rangle$ est une intégrale de recouvrement.

Le 3^{ème} terme conduit aux règles de sélection : $\Delta J = +1, 0, -1$ qui correspond respectivement aux raies *P*, raies *Q* et raies *R* ($\Delta J = 0$ est interdit pour une molécule diatomique).

En résumé, dans un spectre, on n'aura de transition possible qu'entre états satisfaisant certaines règles de sélection.

B - Energie des transitions

Une transition entre un état initial E'_o, v', J' (par convention l'état d'énergie la plus haute), et un état final E''_o, v'', J'' (par convention l'état d'énergie la plus basse), aura comme énergie :

$$\Delta E = [E'_o - E''_o] + [E_{v'} - E_{v''}] + [E_{J'} - E_{J''}]$$

où E_o, E_v, E_J sont respectivement les énergies électronique, vibrationnelle et rotationnelle.

On a : $[E'_o - E''_o] \gg [E_{v'} - E_{v''}] \gg [E_{J'} - E_{J''}]$.

On peut considérer trois cas :

$$E'_o = E''_o$$

et $E_{v'} = E_{v''}$

$$E'_o = E''_o$$

$$E'_o \neq E''_o$$

Transitions purement
rotationnelles

Transition vibrationnelle
(et rotationnelle)

Transition électronique
(et vibrationnelle et
rotationnelle)

Ondes centimétriques et
millimétriques

Infrarouge

Ultraviolet à
l'infrarouge

• **Bibliographie:**

Spectroscopie
Physical Chemistry
Spectra of Diatomic Molecules

J.M. Hollas
P.W. Atkins
G. Herzberg

Dunod, 1998
Oxford, 1994
Van Nostrand Reinhold 1950

ABSORPTION ET FLUORESCENCE

Molécule organique et cristal de rubis

Matériel (voir compléments plus bas) :

Spectro Ocean Optics USB + fibre optique (avec le logiciel *OOIBase32* ou *SpectraSuite*)

Lampe à incandescence

PC avec carte d'acquisition et logiciel d'acquisition *Synchronie*

Imprimante

Cuve parallélépipédique, en silice, remplie d'une solution aqueuse de rhodamine

Cristal de rubis synthétique, collé sur une tige

Laser à azote et module laser à colorant sur plateforme élévatrice

Prisme à réflexion totale + lentille focale environ 50mm

Filtre rouge

Banc optique

Lentille focale environ 50mm

Supports optiques

Monochromateur à réseau H20, fentes 1 à 2mm

Tube photomultiplicateur (PMT) et alimentation HT 1 kV

Oscilloscope

BUT DE L'EXPERIENCE

L'objectif est de se familiariser avec les processus d'absorption et de fluorescence. Les matériaux que l'on étudiera seront : un colorant en solution, la rhodamine 6G et un cristal de rubis. La source d'excitation de la fluorescence sera un laser à colorant, ou une lampe à incandescence, ou le laser à azote. D'autres expériences libres pourront être envisagés sur ce thème selon le temps disponible.

1. ETUDE DU SPECTRE D'ABSORPTION ET DE FLUORESCENCE DU COLORANT

1.a On commencera par étudier le spectre d'absorption de la rhodamine 6G, puis son spectre de fluorescence. Utiliser pour cela le spectromètre à fibre optique et comme source la petite lampe à incandescence. Le laser à azote peut aussi être utilisé pour la fluorescence, mais *dans ce dernier cas, pour des raisons de sécurité, le montage est à réaliser par l'enseignant (laser UV, classe 4) en prenant les précautions nécessaires pour que le faisceau reste confiné (disposer des écrans) et ne puisse toucher la peau.*

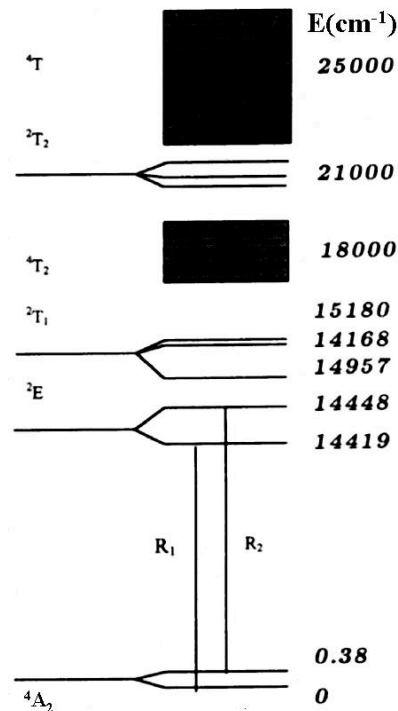
Représenter les spectres absorption et de fluorescence sur le même graphe. Expliquez vos résultats.

1.b Mettre en place le laser à colorant et enregistrer son spectre d'émission pour différentes positions de la vis micrométrique commandant le réseau interne au laser. **Attention** : pour ne pas saturer la barrette de photodiodes, ne pas envoyer le faisceau laser directement sur la fibre du spectromètre à barrette, mais faire cette mesure par réflexion sur une surface blanche. Mesurer la

gamme de longueur d'onde sur laquelle le laser peut être accordé. Comparer avec le spectre de fluorescence du colorant.

2. ETUDE DU SPECTRE D'ABSORPTION ET DE FLUORESCENCE DU RUBIS

Le rubis est un cristal d'alumine (Al_2O_3), dopé avec des ions de chrome (Cr^{3+}). Notez que lorsque l'alumine est dopé avec des ions titane Ti^{3+} , on a un cristal de Saphir Titane, utilisé dans les lasers du même nom. Les niveaux d'énergie des ions chromes sont représentés sur la figure ci-dessous.



Les ions chrome Cr^{3+} se placent en substitution de l'aluminium dans un cristal de Al_2O_3 ($\text{Al}^{3+}\text{O}^{2-}$).

Les niveaux du chrome ionisé 3^+ sont classifiés, dans le cadre de la théorie des groupes, à l'aide d'une notation associée aux représentations irréductibles du groupe de symétrie du cristal. La notation est du type $^N L_i$ avec $N = (2S+1)$ où S est le nombre quantique de spin et L une lettre (E, T, A, ...) qui définit la symétrie spatiale de la fonction d'onde. La partie gauche de la figure correspond aux états du chrome (3^+) dans une première approximation. La partie de droite correspond aux mêmes états, compte tenu de l'interaction avec le champ cristallin de l'interaction spin-orbite. Les deux états associés respectivement à $2E$ (état excité) et $4A_2$ (état fondamental) forment des doublets dits de Kramers ayant respectivement une séparation de $29,14 \text{ cm}^{-1}$ et $0,38 \text{ cm}^{-1}$. La largeur des raies étant de l'ordre de 12 cm^{-1} à la température ambiante, seul la séparation des niveaux de

l'état excité peut être résolu. A basse température, la largeur de raie est réduite (elle est de $0,1 \text{ cm}^{-1}$ à 20 K).

2.a Mesure du spectre d'absorption du rubis

- Quelles sont les niveaux peuplés à température ambiante ?
- Vers quelles longueurs d'ondes s'attend-on à voir des raies et des bandes d'absorption ?
- Enregistrer un spectre d'absorption (avec toujours comme source, la petite lampe à incandescence) dans le domaine spectral intéressant et retrouver l'échelle des niveaux d'énergie de la figure ci-dessus. Résout-on les raies d'absorption R_1 et R_2 ? Comparer la largeur de la raie autour de 14435 cm^{-1} avec la largeur de raie d'émission du laser observée au §1.b lorsque le réseau interne au laser est positionné à peu près au centre de la gamme d'accordabilité (pour comparer les spectres et "zoomer" sur un petit intervalle spectral il peut être nécessaire de sauver l'enregistrement ("save-processed spectra", puis utiliser le répertoire "temp") sous forme ASCII et l'éditer ensuite avec un logiciel graphique type *SciDAVis*).

2.b Mesure du spectre de fluorescence

L'excitation optique se fait par un laser à colorant pompé par azote.

Vérifier que la gamme de longueurs d'onde émise par le laser correspond à la transition 4A_2 vers 4T_2 .

Observer la fluorescence du cristal à l'œil et enregistrer le spectre de fluorescence. Le spectre est-il résolu ? Comparer ce spectre au spectre d'absorption.

L'état 4T_2 forme un continuum très large. Les ions chrome Cr^{3+} relaxent très rapidement (10^{-12} s) vers l'état 2E par des processus non radiatifs. Les ions chrome Cr^{3+} dans l'état 2E fluorescent vers l'état 4A_2 . La transition ${}^2E \rightarrow {}^4A_2$ correspond à un changement d'état de spin, ce qui est interdit en première approximation, ce qui se traduit par une faible probabilité de transition par unité de temps et donc par une grande durée de vie (de l'ordre de la ms) de l'état excité 2E .

On rappelle que les états $S = 1/2$ sont des doublets ($2S+1 = 2$) et que les états $S = 3/2$ sont des quadruplets ($2S+1 = 4$). Ils n'existent que pour les atomes ou les molécules ayant un nombre impair d'électrons. Si le nombre d'électrons est pair, on a des états $S = 0$ qui sont des singulets et des états $S = 1$ qui sont des triplets. Les transitions singulet-triplet sont également interdites.

2.c Mesure de la durée de vie de l'état excité

- Mettre en place un montage optique permettant de mesurer la durée de vie de l'état excité et enregistrer le déclin de la fluorescence. Attention, l'intensité du faisceau d'excitation est de plusieurs ordres de grandeurs supérieure à l'intensité de fluorescence ! Pour la filtrer on va utiliser un monochromateur. Aligner le montage en se servant du spot laser provenant d'une réflexion sur une face du cristal incliné à 45° . Il faut que ce spot passe dans la fente d'entrée du monochromateur. Agir sur la position du cristal, son inclinaison et la position de la lentille de focale 5cm. Enlever le boîtier du PMT (HT coupée !), enlever la fente de sortie du

monochromateur et ajuster sa longueur d'onde pour que ce faisceau réfléchi soit transmis et visible à l'œil nu. Remettre la fente, tourner le cristal perpendiculairement au faisceau incident et replacer le PMT en disposant un chiffon noir pour limiter la lumière parasite. Mettre l'alimentation HT en route avec la tension minimum $\sim 200\text{V}$ (interrupteur en position "HT") et observer le signal de lumière laser diffusée en synchronisant l'oscilloscope avec le laser (débrancher éventuellement le T BNC connecté sur le boîtier interfacé avec le PC)

- On observe alors un déclin exponentiel avec un temps caractéristique dans la gamme de la μs . Le laser délivrant des impulsions de l'ordre de quelques ns, comment expliquer cette observation ? (la résistance de charge à l'extrémité du câble BNC relié à l'anode du PMT est $20\text{ k}\Omega$).
- Ajuster maintenant l'indication de longueur d'onde du monochromateur à la valeur correspondant à la fluorescence et augmenter avec précaution la HT ($\sim 700\text{V}$), jusqu'à observer le signal de fluorescence. Démarrer *Synchronie* et régler la voie EA0 comme source de déclenchement, en utilisant le signal de Trigger provenant du laser (« Réglage des paramètres » > « Acquisitions » : niveau 0,2 ; sens montant). Le signal est connecté, par exemple, sur la voie EA1. Dans « Acquisition », sélectionner « Ajouter des courbes », pour garder en mémoire toutes les acquisitions successives et pouvoir les moyenner. Choisir une base de temps adaptée pour échantillonner suffisamment le déclin et le voir dans sa totalité.
- Relancer plusieurs fois l'acquisition pour enregistrer une bonne demi-douzaine de déclins ; ensuite, dans le tableur, créer une colonne qui contiendra la valeur moyenne des déclins, voire une deuxième qui correspondra aux fluctuations (bruit), sous la forme d'un écart type de la valeur moyenne (si les données ont été préalablement été sauveées, toutes ces opérations pourront être également effectuées dans un $2^{\text{ème}}$ temps).
- Après avoir créer une nouvelle fenêtre où est tracée la courbe de déclin moyenne, il est possible d'ajuster des déclins exponentiels avec le logiciel *Synchronie* (dans « Traitements », sélectionnez « Modélisation » pour réaliser des ajustements avec une fonction utilisateur à rentrer, comme $Ae^{-X/B}$). Il est cependant conseillé de sauveer les données dans un fichier ASCII et d'utiliser ensuite un bon logiciel d'analyse de données comme *SciDAVis* pour en déduire le temps caractéristique de déclin (ajustement numérique sur une exponentielle décroissante).
- Tourner le cristal de 90° et voir si la durée de vie dépend de l'orientation du rayonnement incident par rapport aux axes du cristal. En effet, il existe *a priori* trois directions non équivalentes. Ainsi, suivant l'orientation du champ laser par rapport aux axes cristallographiques, les différents niveaux fluorescents ne sont pas peuplés avec la même efficacité. Si leurs durées de vie diffèrent légèrement, on observera une apparente variation de la durée de vie "globale" (alors qu'en fait, il faudrait faire des ajustement multi-exponentiels, avec des facteurs pré-exponentiels qui dépendent de l'orientation). On peut également faire varier la durée de vie "globale" en chauffant le cristal (dans ce cas, l'effet est dû à un changement d'équilibre de Boltzmann).

Matériels disponibles

LE LASER ACCORDABLE POMPE PAR UN LASER A AZOTE

Attention à vos yeux ! Ne pas regarder le faisceau directement dans l'axe.

LE LASER A AZOTE

Le laser à azote est constitué d'une cavité optique et d'un milieu amplificateur qui est un plasma d'azote obtenu en excitant par une décharge électrique de l'azote à basse pression. La transition du laser à azote se produit entre l'état $C^3\Pi_u$ ($v = 0$) et l'état $B^3\Pi_u$ ($v = 0$) de N_2 . La différence d'énergie est de l'ordre de 30000 cm^{-1} (3.5 eV) (la longueur d'onde associée est de 337,1 nm). L'excitation de l'état $C^3\Pi_u$ se fait depuis l'état fondamental, par une décharge électrique pulsée très brève. La fréquence de répétition est variable (1 à 20 Hz). L'énergie lumineuse par pulse est de l'ordre de 0.1 millijoule. Le rendement est typiquement de l'ordre du %. La durée d'un pulse est de 3 nanosecondes.

- **Quelle est la puissance instantanée du laser ? En déduire l'ordre de grandeur du champ électrique lorsqu'on focalise le faisceau avec un rayon de ceinture (waist) de 0,1 mm.** Les dimensions du faisceau laser, de section rectangulaire, sont de 3 mm par 8 mm. La divergence angulaire (dans deux directions perpendiculaires) est de 2mrad \square 8 mrad. **Comparer ces valeurs avec le laser He-Ne.**

LE LASER A COLORANT ACCORDABLE

Le laser à colorant est un laser constitué d'un miroir de sortie et d'un réseau, ce qui permet d'avoir une cavité accordable en longueur d'onde. Le milieu amplificateur est un liquide, ici un colorant dissout dans de l'éthanol. Le colorant est une molécule organique polyatomique de N atomes, N étant typiquement de l'ordre de 15 à 30. Les niveaux de vibration (3N-6 modes de vibration) associés à chaque état électronique sont très nombreux et forment un quasi-continuum. Le laser à azote excite les molécules, initialement dans l'état fondamental S_0 , vers l'état excité S_1 . Les molécules "relaxent" non radiativement vers le bas du potentiel de l'état S_1 puis fluorescent vers l'état fondamental ou relaxent de manière non radiatives vers l'état triplet T_1 . Les densités des niveaux dans les différents états étant très grande (quasi-continuum), les spectres d'absorption et de fluorescence seront des bandes spectrales larges (voir figure ci-dessous et vos résultats !). Ceci explique pourquoi on peut, d'une part exciter le colorant avec des photons émis par le laser à azote et, d'autre part, obtenir l'effet laser pour toute une plage de longueur d'onde. C'est la cavité optique qui sélectionne la longueur d'onde de l'émission laser.

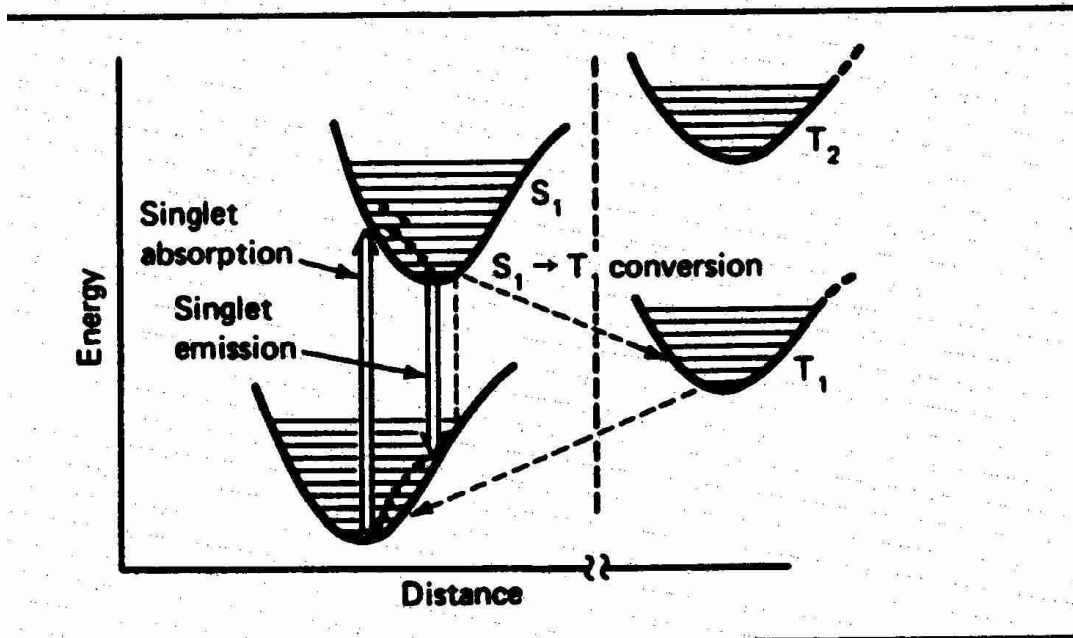
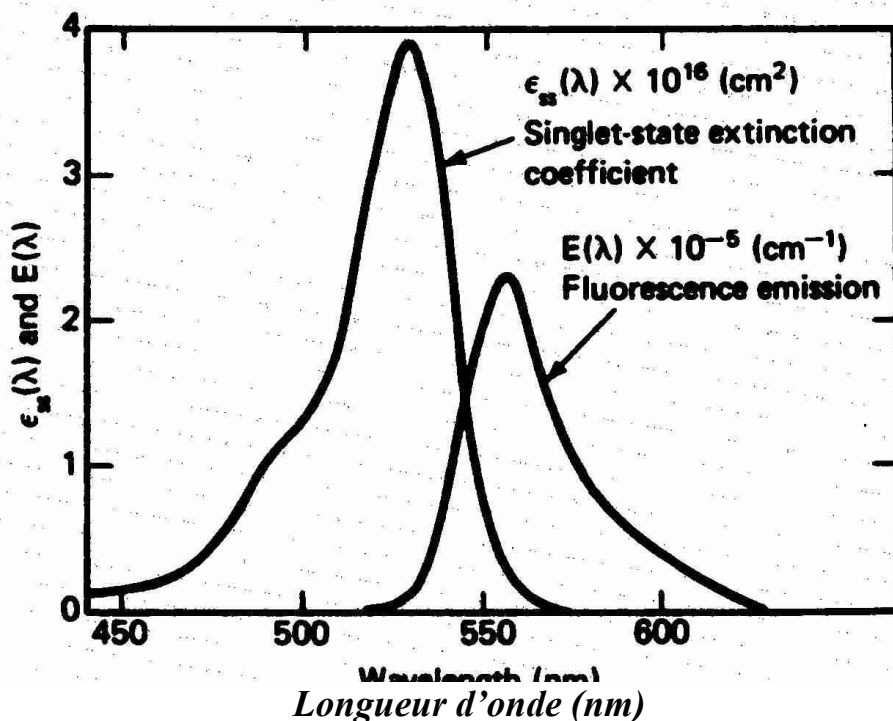


Diagramme d'energie typique pour un colorant
Ref: Laser Electronics J.T. Verdeyen p 323



Il existe une grande variété de colorants (plus de 100 commercialement disponibles) qui permettent de couvrir continuellement le spectre de l'U.V. (0,35 μm) à l'I.R. (1 μm). Les familles de colorants les plus utilisées sont les coumarines (bleu-vert), les rhodamines (jaune-rouge) et les

oxazines (rouge). De plus, il est possible de faire du doublage et du mixage de fréquence (optique non linéaire) pour étendre la plage de longueur d'onde.

LE MONOCHROMATEUR A FENTE

Le spectromètre à fente pourra servir à isoler la raie de fluorescence du rubis. Un PMT de grande sensibilité sert de détecteur. Veiller à mettre l'alimentation HT du PMT en attente lorsque celui-ci est exposé à la lumière ambiante.

ACQUISITION DES DONNEES

Un PC muni d'une carte d'acquisition permet d'enregistrer les signaux de fluorescence et de faire fonctionner le logiciel du spectromètre à barrette CCD (*OOIBase32* ou *SpectraSuite*). Un autre logiciel, *Synchronie*, est utilisé pour l'acquisition des déclin.

LE SPECTROMETRE A BARRETTE CCD

Cf. l'annexe correspondante

LOGICIEL GRAPHIQUE DE TRAITEMENT DES DONNEES *SciDAVis*

Cf. l'annexe correspondante pour l'exploitation des résultats (ajustement d'exponentielle, tracé de courbe...).

Mesure de la constante de Rydberg

Le but de ce TP est d'estimer, avec le plus de précision possible, la valeur de la constante de Rydberg à partir de l'observation du spectre d'émission d'une décharge électrique dans de l'hydrogène. Au passage on se familiarisera avec un certain nombre de techniques d'analyse de données (cf. K. Protassov, « Probabilités et incertitudes », PUG 1999).

1. Matériel

Il se réduit à :

-une lampe spéciale comprenant un tube capillaire rempli d'hydrogène à basse pression, dans lequel on établit une décharge par l'application d'une haute tension. Ce dispositif a pour propriété de favoriser l'émission de raies à partir des atomes plutôt qu'à partir des molécules ;

Attention : éteindre la lampe dès que les spectres sont enregistrés, car sa durée de vie est limitée !

-un spectromètre avec barrette CCD intégrée (USB 2586), connecté à un micro-ordinateur via le port USB (voir son utilisation en annexe) ;

-une fibre optique ;

-une lampe spectrale à vapeur de mercure.

2. Expérience

Placer une extrémité de la fibre optique en face de la lampe, l'autre étant connectée au spectromètre. Activer le logiciel *OOIBase32* (ou *SpectraSuite*). Régler le temps d'exposition et/ou reculer la fibre de façon à ne pas saturer le signal (qui doit rester inférieur à 4000). On peut éventuellement sommer plusieurs spectres pour augmenter le rapport signal sur bruit en renseignant la fenêtre "average". Vérifier que l'éclairage ambiant de la salle ne se mélange pas à celui de la lampe.

Pour analyser le spectre obtenu, il faut le figer en cliquant dans l'icône représentant un appareil photo ("snapshot") : curieusement la saisie de donnée se poursuit et le logiciel ne répond qu'après chaque transfert de données. Pour ne pas être gêné pendant le dépouillement, il est alors conseillé de modifier les paramètres d'acquisition : fixer le temps d'exposition à 100 ms et prendre "average"=1.

Repérer une petite dizaine de raies les plus intenses et pointer leur position moyenne en nm en utilisant le curseur et le zoom (il est conseillé d'examiner le spectre par plages de 100nm, en prenant pour échelle verticale 1000 afin de distinguer les petites raies). Estimer l'incertitude sur le pointé (en principe, elle vaut une fraction de la largeur de raie, mais dans le cas présent, comme il y a peu de bruit, elle est au maximum égale au pas d'échantillonnage). Pouvez-vous d'ailleurs imaginer une méthode d'analyse de données qui augmente, au delà du pas d'échantillonnage, la précision avec laquelle on détermine la position d'une raie ? Cette méthode pourrait servir pour la suite du TP...

3. Analyse

Les longueurs d'onde de la série de Balmer sont données par la loi bien connue :

$$\frac{1}{\lambda}(\text{cm}^{-1}) = R_y \times \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

avec n entier et où R_y désigne la constante de Rydberg qu'on se propose de déterminer. En prenant comme valeur approchée $R_y = 110000 \text{ cm}^{-1}$, identifier les raies de l'hydrogène. Un certain nombre de raies n'appartiennent pas au spectre d'émission de l'hydrogène atomique, mais à celui de l'oxygène, dont la présence est inévitable à l'état de traces dans le gaz. Vérifier ceci en comparant avec les données bibliographiques fournies (un petit écart de longueur d'onde, de l'ordre de $\pm 2 \text{ nm}$ est possible).

Effectuer un ajustement numérique (utiliser un logiciel d'analyse de données, par exemple *SciDAVis* ou *Kaleidagraph* - voir l'annexe correspondante) des données disponibles, pour en déduire une première valeur expérimentale de R_y , en précisant notamment :

- L'incertitude sur les ordonnées (qui peuvent être choisies comme étant λ ou $1/\lambda$) ;
- le nombre de paramètres ajustables et le nombre de degrés de liberté ;
- la valeur du χ^2 réduit.

L'ajustement est-il satisfaisant ? **Il peut être intéressant d'analyser et de tracer les écarts entre les valeurs calculées des ordonnées et les valeurs mesurées, en fonction de n ou de $1/4 - 1/n^2$.**

4. Calibration du spectromètre

En fait la calibration en longueur d'onde l'appareil n'est en général pas parfaite : par exemple, comparer les valeurs des longueurs d'onde des raies tabulées de l'oxygène atomique avec les valeurs affichées par le spectromètre. Enregistrer le spectre d'émission de la lampe spectrale à vapeur de mercure, dont les raies d'émission tabulées peuvent être, comme pour l'oxygène, comparer aux longueurs d'ondes mesurées avec le spectromètre (par curiosité, comparer ce spectre avec celui des tubes fluorescents éclairant la pièce).

Effectuer alors une recalibration du spectromètre, de la façon suivante :

Etablir une liste de raies identifiées (mercure) ;

Dresser une correspondance $\lambda_{\text{mesurée}}(i) - \lambda_{\text{tabulée}}(i)$;

En tirer, par ajustement numérique des paramètres A et B , une représentation de la calibration du spectromètre du type :

$$\lambda_{\text{corrigée}} = A + B \times \lambda_{\text{mesurée}}$$

Considérer ensuite les écarts $\lambda_{\text{tabulée}}(i) - [A+B \times \lambda_{\text{mesurée}}(i)]$. S'il y a des points aberrants, recommencer l'ajustement en les éliminant, après avoir vérifié qu'il n'y a pas eu d'erreur de frappe lors de la saisie des données.

5. Conclusion

5.a

En déduire un nouveau jeu de valeurs corrigées pour les longueurs d'onde de l'hydrogène atomique. Refaire l'ajustement numérique sur la constante de Rydberg, redéterminer le χ^2 réduit et donner finalement votre détermination expérimentale du Rydberg avec une estimation de son incertitude. Comparer avec la valeur connue.

5.b

L'indice de l'air vaut environ 1,0003 dans la gamme du visible. Comment cela peut-il affecter la mesure, et comment peut-on corriger la valeur trouvée ?

Compléments : tables de calibration

OXYGEN

O I

Ground State

$1s^2 2s^2 2p^4 \ ^3P_2$

Ionization Potential

13.614 eV = 109836.7 cm^{-1}

Allowed Transitions

List of tabulated lines:

Wavelength [Å]	No.	Wavelength [Å]	No.	Wavelength [Å]	No.
811.37	9	5435.16	40	7943.15	14
877.804	5	5435.76	40	7947.20	14
877.885	5	5436.83	40	7947.56	14
878.979	5	6046.4	41	7950.83	14
879.027	5	6106.5	34	7952.18	14
879.108	5	6155.99	32	7981.97	27
879.553	5	6156.78	32	7982.3	27
936.011	10	6158.19	32	7982.41	27
988.581	3	6242.5	15	7987.00	27
988.658	3	6259.6	36	7987.34	27
988.777	3	6269.4	35	7995.12	27
990.132	3	6453.64	37	8073.7	19
990.120	3	6454.48	37	8221.84	13
990.799	3	6456.01	37	8227.64	13
999.494	6	6653.78	24	8230.01	13
1025.77	8	7002.1	33	8232.99	13
1027.42	8	7156.80	17	8235.31	13
1028.16	8	7194.6	21	8446.5	12
1152.16	4	7254.4	38	8508.63	22
1217.64	7	7471.36	20	8820.45	16
1302.17	2	7473.23	20	9260.88	28
1304.87	2	7476.45	20	9262.73	28
1306.04	2	7477.21	20	9265.99	28
1355.61	1	7479.06	20	9391.2	18
1358.52	1	7480.66	20	11287	29
3947.29	25	7771.96	11	11295.0	30
4368.30	26	7774.18	11	11297.5	30
5328.98	39	7775.40	11	11302.2	30
5329.59	39	7886.31	23	13164	31
5330.66	39	7939.49	14		

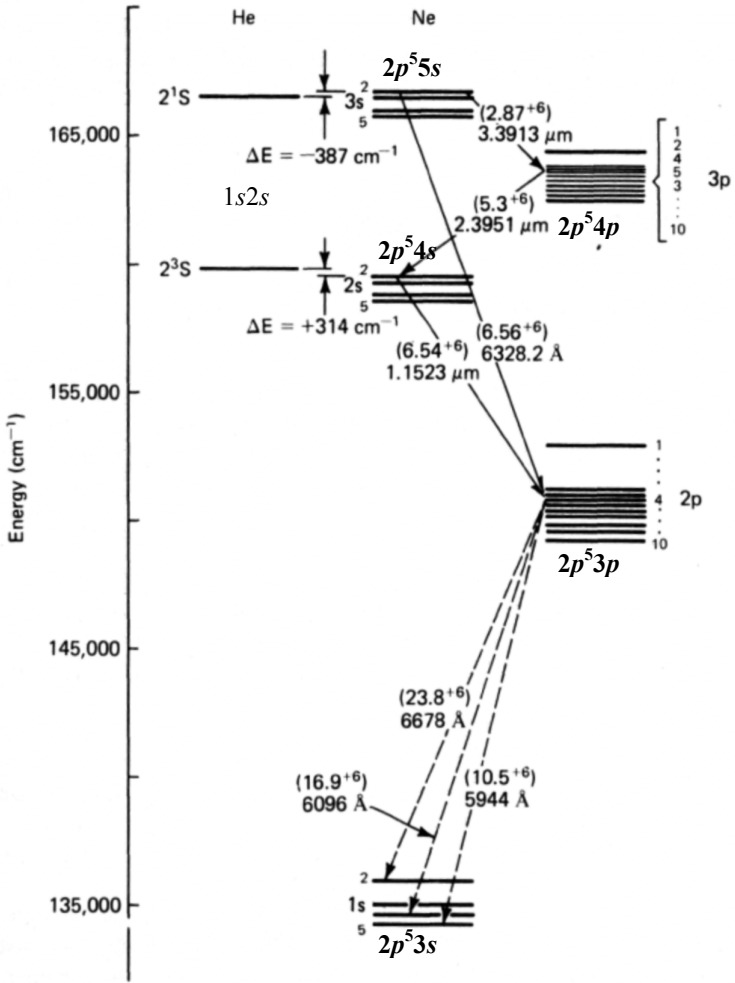
Table 1 Usable Wavelengths of Spectral Calibration Lamps

Lamp Type (Model No.)					
Hg(Ar) (6035)	Hg(Ne) (6034)	Xenon (6033)	Argon (6030)	Neon (6032)	Krypton (6031)
Wavelength (nm)					
184.9	253.65	418.0	294.3	585.25	427.4
187.1	296.73	419.3	415.9	594.48	432.0
194.2	302.15	433.1	420.1	607.43	435.5
253.65	312.57	439.6	427.7	609.62	457.7
265.4	313.15 ¹	444.8	476.5	614.31	461.9
284.8	313.18 ¹	446.2	488.0	616.36	465.9
302.2	365.02	473.4	696.54	621.73	473.9
312.57 ¹	404.66	480.7	738.40	626.65	476.6
313.15 ¹	435.84	483.0	750.39	630.48	483.2
313.18 ¹	546.07	508.1	751.47	633.44	557.0
320.8	576.96	529.2	763.51	638.30	587.1
326.4	579.07	531.4	772.38 ¹	640.11 ¹	758.74
345.2	614.31*	554.0	772.42 ¹	640.22 ¹	760.15
365.02	638.30*	541.9	794.82	650.65	769.45
404.66	640.11 ¹ *	547.2	801.48	653.29	769.45
435.84	640.22 ¹ *	597.7	811.53	659.90 ¹	785.48
546.07	650.65*	603.6	826.45	660.29 ¹	805.95
576.96	703.24*	605.1	840.82	667.83	810.44
579.07	1013.98	609.8	842.46	671.70	811.29
615.0	1128.74	659.5	912.3	692.95	819.00
1014.0	1357.02**	680.5	922.4	703.24	826.32
1357.0	1367.35**	699.1	965.8	717.39	829.81
1692.0	1529.58	823.2	1047.1	724.52	829.81
1707.3	1688.15**	828.0	1331.3	743.89	850.9
1711.0	1692.02**	834.7	1336.7	783.9	877.7
	1694.20**	840.9	1371.8	792.7	829.9
	1707.28**	881.9	1694.0	793.7	975.2

LASER HELIUM NEON

I - THEORIE ET DESCRIPTION DU LASER

Un tube cylindrique contient un mélange d'Hélium (90 %) et de Néon (10 %) à une pression de quelques torrs (1 atmosphère = $1,013 \cdot 10^5$ Pa = 760 torrs). Une décharge électrique continue provoque l'excitation par bombardement électronique d'atomes d'hélium, en particulier dans les états 1S et 3S de longue durée de vie (états métastables).



On trouve sur la gauche du graphe les deux termes, singulet et triplet, issus de la configuration excitée de l'He ($1s2s$), peuplée par bombardement électronique. Les niveaux de la colonne centrale sont ceux de la série ($2p^5ns$) du néon, avec $n = 3, 4$ et 5 ; la colonne de droite est celle des niveaux ($2p^5np$) du néon, avec $n = 3$ et 4 (la notation spectroscopique un peu particulière sur le graphe, $1s, 2s, 3s, 2p, 3p$, est due à Paschen). On constate que chaque niveau $2p^5ns$ est d'énergie inférieure au niveau correspondant $2p^5np$, ce qui se comprend puisque les orbitales ns sont plus pénétrantes et donc plus liées que les orbitales np . On peut en outre aisément vérifier qu'à chaque configuration ($2p^5ns$) du néon correspondent 4 niveaux $^{2S+1}P_J$ et qu'à chaque configuration ($2p^5np$) correspondent 10 niveaux $^{2S+1}L_J$.

Figure 1 : Niveaux d'énergie de l'hélium et du néon dans le fonctionnement du laser (d'après Laser Electronics Joseph Verdeyen Prentice-Hall International Ed.1989 p326)

Par collision avec l'hélium excité dans l'état 2^1S , le néon est porté dans la configuration excitée ($2p^55s$).



Le néon excité relaxe, entre autres, vers la configuration $2p^53p$ en émettant un photon à 632,816 nm (d'autres transitions sont cependant possibles). Le niveau inférieur $2p^53p$, de plus courte durée de vie que $2p^55s$, d'où l'inversion de population et l'effet laser, décline à son tour vers $2p^53s$ et relaxe à son tour par collision. On crée ainsi une inversion de population entre les niveaux ($2p^55s$) et ($2p^53p$) du néon, phénomène qui, conjugué avec celui de l'émission stimulée, permet d'obtenir une amplification dans le milieu (ici les atomes de néon). Une cavité résonnante permet au milieu amplificateur de fonctionner en oscillateur, c'est l'effet Laser. Pour que cet effet existe, il faut que les pertes (de la cavité, du milieu amplificateur) soient inférieures au gain du milieu amplificateur.

La largeur spectrale de la raie à 632,8 nm est essentiellement due à l'effet Doppler que l'on calculera avec $T = 300\text{ K}, 400\text{ K}, 500\text{ K}$, sachant que l'isotope le plus abondant du Néon est le ^{20}Ne . La durée de vie de l'état excité étant de l'ordre de quelques dizaines de ns, on vérifiera que la largeur naturelle est négligeable devant la largeur Doppler.

On rappelle que le profil de raie dans le cas d'un élargissement Doppler est:

$$g(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D} \left(\frac{\text{Ln}2}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\text{Ln}2 \left(\frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D} \right)^2} \text{ avec } \int_0^{\infty} g(\nu) d\nu = 1$$

où la demi largeur à mi-hauteur est donnée par :

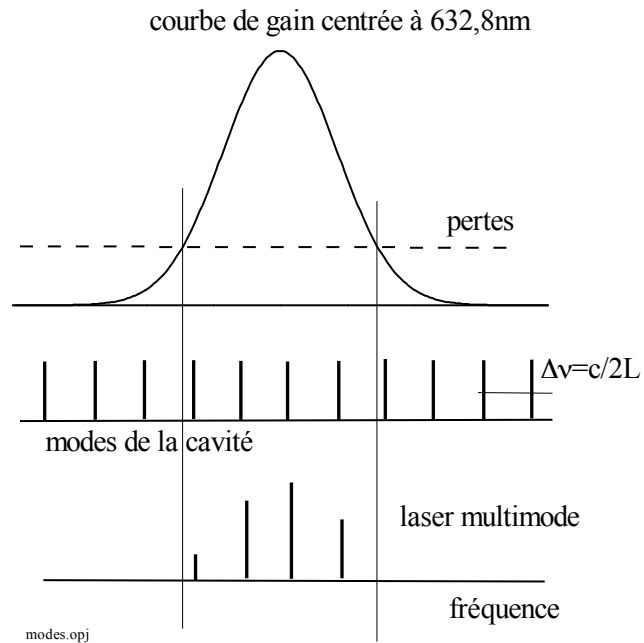
$$\Delta\nu_D = \nu_0 \sqrt{\frac{2\text{Ln}2RT}{Mc^2}}$$

avec, T la température en K, M la masse molaire et $R = 8,314\text{ Joule}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, la constante molaire du gaz parfait.

Le tube cylindrique dans lequel se fait la décharge est fermé à l'extrémité arrière par un miroir qui réfléchit pratiquement toute la lumière à 632,8 nm, grâce à un revêtement multidiélectrique dont le coefficient de réflexion atteint 99,9 %. A l'autre extrémité, le tube est fermé par une fenêtre transparente placée à incidence de Brewster ($\tan i = n$, soit $i \cong 57^\circ$ pour du verre d'indice $n \cong 1,5$) afin de minimiser les pertes par réflexion. L'onde émise par le laser a alors une polarisation dans le plan d'incidence de la fenêtre de Brewster (c'est-à-dire verticale dans l'expérience).

La cavité laser est constituée d'un miroir arrière qui a un coefficient de réflexion ≈ 1 et d'un miroir de sortie avant avec un coefficient de réflexion = 98,5 %. Le miroir avant est indépendant du tube à décharge afin de pouvoir changer la longueur de la cavité L . Ce miroir avant est sphérique concave avec un rayon de courbure R . Afin de pouvoir étudier plusieurs types de configuration de cavité on a le choix entre $R = 30$ cm, 45 cm ou 60 cm.

Figure 2 : Profil Doppler et structure en modes typique du laser Hélium-Néon.



I.1. - MODES DE CAVITES

La structure en mode d'une cavité électromagnétique est obtenue en résolvant les équations de Helmholtz dans un repère soit cartésien soit cylindrique. Les modes sont alors un produit d'une gaussienne et de polynômes d'Hermite dans le premier cas et d'une gaussienne et de polynômes de Laguerre dans le second cas. Les modes sont indicés par trois entiers q , m et n .

I.1.a - Modes transversaux

On utilise le terme de modes transversaux dès que l'un des indices m ou n est différent de zéro, l'indice q est extrêmement grand, de l'ordre de 10^6 . La répartition transversale de l'amplitude de l'onde électromagnétique dans la cavité (et donc pour le faisceau de sortie) est décrite par un produit de deux polynômes. En coordonnées cartésiennes le champ électromagnétique s'écrit alors [1, 2, 6] :

$$E_{m,n,q} = \frac{w_0}{w_z} H_m(x) \cdot H_n(y) e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)}} e^{\left[-\frac{r^2}{w^2(z)} - i\Phi_{mn}(r,z) \right]}, \text{ où}$$

$$\Phi_{mn}(r,z) = kz - (m+n+1) \arctan\left(\frac{z}{z_r}\right) + \frac{kr^2}{2R(z)}$$

avec : $k = \frac{2\pi}{\lambda}$; $H_0(x) = 1$; $H_1(x) = 2x$; $H_2(x) = 4x^2 - 2$;

Le mode **T.E.M._{q00}** (Transverse Electrique et Magnétique), **est dit fondamental** et sa dépendance en x et y , pour une distance z fixée, est donnée par :

$$e^{-\frac{x^2+y^2}{w(z)^2}}$$

qui est une gaussienne de demi largeur $w(z)$ à $1/e$, avec :

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_R^2}} = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda z}{\pi w_0^2}\right)^2},$$

le rayon transverse du faisceau en z . $w(z=0) = w_0$, est la valeur minimale du rayon transverse en $z = 0$ et est appelée rayon de ceinture (waist) [1].

$z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda}$ est appelée longueur de Rayleigh et représente la distance, autour de $z = 0$, sur laquelle le diamètre du faisceau change peu [$w(z_R) = \sqrt{2}w_0$].

Le faisceau de sortie est divergent et à grande distance $z \gg z_r$ on a $w(z) \cong \frac{\lambda z}{\pi w_0}$, ce qui correspond à une demi-ouverture angulaire de :

$$\theta = \frac{w(z)}{z} = \frac{\lambda}{\pi w_0}.$$

Notons enfin $R(z) = z \left[1 + \frac{z_R^2}{z^2} \right] = z \left[1 + \left(\frac{\pi w_0^2}{\lambda z} \right)^2 \right]$, le rayon de courbure de la surface d'onde en z .

I.1.b - Modes longitudinaux

La cavité étant un tube fin, on peut en première approximation, ne considérer que la structure en modes longitudinaux $m = n = 0, q \neq 0$. La phase du champ électrique sur un aller-retour du faisceau dans la cavité étant un multiple de 2π , la longueur de la cavité est un nombre entier de demi-longueurs d'onde, c'est à dire $L = q \lambda/2$ d'où $q = 2L/\lambda \sim 10^6$.

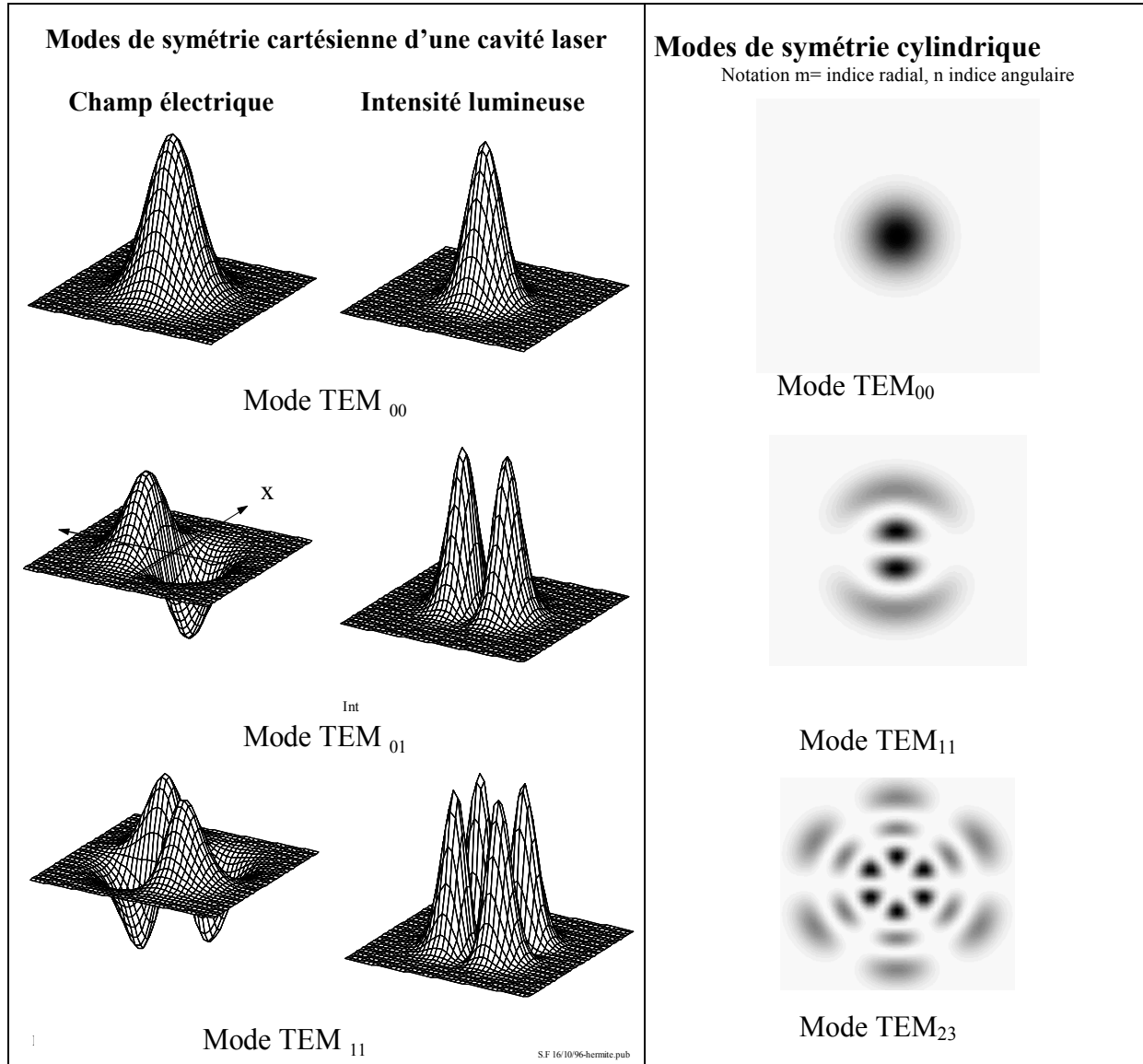


Figure 3 : modes transverses TEM_{m,n}, en symétrie cartésienne et cylindrique

Pour une cavité de longueur $L = 1$ mètre et $\lambda = 632,8$ nm, on a $q \approx 1,58 \cdot 10^6$:

On vérifie aisément que la séparation en fréquence entre deux modes consécutifs (q et $q+1$) est $\Delta\nu = c/2L$ (indépendante de λ), ce qui correspond à 150 Mhz pour $L = 1$ mètre. Compte tenu de la largeur de raie Doppler (~ 1400 MHz), on observera que plusieurs modes longitudinaux peuvent coexister. L'effet laser ne se produisant que lorsque le gain est supérieur à un seuil, on a une distribution en modes représentée au bas de la Figure 2.

La répartition de l'intensité lumineuse (en $w.m^{-2}$) pour le mode fondamental est donnée par :

$$I(x, y, z) = \frac{2P}{\pi w(z)^2} \exp\left[-\frac{2r^2}{w(z)^2}\right]$$

avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ et P la puissance totale du faisceau (l'intensité intégrée). Les distributions transversales d'intensité associées au modes T.E.M._{q,m,n} sont représentées sur la figure 3 pour quelques modes d'Hermite-Gaus et Laguerre-Gauss pour $m, n \leq 3$.

Expérimentalement, on observe des modes transverses de symétrie rectangulaire ou cylindrique suivant les réglages optiques et la géométrie des défauts de la cavité .

Ouvrages spécialisés sur lasers

- [1] D. Dangoisse, D. Hennequin, V. Zehnlé-Dhaoui, Dunod 1998 (*)
- [2] A. YARIV, "Quantum Electronics", New-York, Wiley, 3ème édit., 1989.(**)
- [3] K. SHIMODA "Introduction to laser physics" Springer 1986.(*)
- [4] A.E. SIEGMAN, "Lasers" Oxford Press (***)
- [5] J.T. VERDEYEN, " Laser Electronics", Prentice-Hall International 1989 (**)
- [6] L. TARASSOV, "Physique des processus dans les générateurs de rayonnement optique cohérent", MIR Moscou, 1981 (**)
- [7] William.T. SILFVAST, "Laser Fundamentals", Cambridge University Press (**)

Niveau de lecture facile (*) à plus difficile (***)

II. - TRAVAIL A EFFECTUER

Matériel disponible

- ✓ Un laser He-Ne à cavité externe (1 miroir fixe, milieu amplificateur, 1 miroir amovible)
- ✓ Jeu de miroirs laser de réf : L01001 $R = 30$ cm ; L01002 $R = 45$ cm ; L01012 $R = 60$ cm)
- ✓ Un spectromètre de poche type OCEAN-OPTICS (voir notice)
- ✓ Un interféromètre de Fabry Perot balayable d'intervalle spectral libre (ISL = 1,5 GHz)
- ✓ Un oscilloscope à mémoire
- ✓ Une platine de translation horizontale avec une monture supportant une lame de rasoir
- ✓ Un PC pour le traitement des données (logiciel *SciDAVis*)
- ✓ Un objectif de microscope, des miroirs, des supports d'optique.

Vous avez entre les mains du matériel optique et électronique onéreux, prenez-en soin.

II.1. - Etude spectroscopique du milieu amplificateur du laser

Relevez le spectre émis par le plasma constituant le milieu amplificateur du laser (mais sans que le laser oscille) à l'aide du spectromètre OCEAN-OPTICS. Identifiez les raies atomiques à l'aide des tables de longueur d'onde données en complément. Le spectromètre est-il correctement calibré ?

Pouvez-vous observer ce spectre lorsque vous placez le miroir de sortie de façon à faire osciller le laser ?

II.2 Etude de la distribution spectrale du faisceau laser

- Observer, à l'aide d'un analyseur de modes (Fabry-Perot confocal et balayable) ayant un intervalle spectral libre de 1,5 GHz, les modes longitudinaux (c'est à dire pour le mode transverse TEM_{q00}) pour différentes longueurs de la cavité laser. Le spectre des modes du laser n'est à peu près stable que lorsque la cavité est alignée de sorte qu'il n'y a pas de modes transverses excités. La puissance émise est alors en pratique fortement réduite.
- Le spectromètre OCEAN-OPTICS serait-il utilisable pour analyser la distribution spectrale du rayonnement laser ?
- Vérifier la loi en $\Delta\nu = \frac{c}{2L}$ pour plusieurs valeurs de L . Pour plus de précision utiliser l'oscilloscope à mémoire et son curseur.
- Mesurer la largeur spectrale totale pour laquelle le gain du laser compense les pertes.
- Observer et commenter le spectre du laser (structure en fréquence des modes), à l'aide de l'analyseur de modes, lorsque le laser est multimode transverse.

II.3 – Etude de la géométrie du faisceau laser

- Aligner le miroir de sortie de façon à obtenir l'effet laser.
- Visualiser sur un écran différents modes transverses grossis par l'objectif de microscope.
- Observer et quantifier le mieux possible la divergence angulaire pour un mode TEM₀₀. Quel est le diamètre du faisceau à une distance de 1 kilomètre ? Quelle est la distance de Rayleigh, z_R ?
- Dans le cas d'un mode TEM₀₀, caractériser, par la méthode du rasoir, le rayon $w(z)$ à $1/e^2$ de l'axe du faisceau (voir les compléments).
- Compte-tenu de la distance de Rayleigh et de l'endroit où la mesure de $w(z)$ a été effectuée ($z=0$ correspond à position du miroir de fond de cavité optique supposé plan), déterminer la taille minimum w_0 du faisceau (le waist). Ce waist est elle compatible avec la divergence mesurée ?

Compléments

Table de longueurs d'onde des principales raies de l'Hélium et du Néon (en Å)

HELIUM, Z = 2					
He I, ionization potential 24,586 eV			584,334	500	21,22
20581,30	10000	21,22	537,030	200	23,09
18696,94	1500	23,74	522,213	80	23,74
18685,96	3600	23,74	He II, ionization potential 54,414 eV		
17002,38	1800	23,73	6560,099	100	52,90
10830,337	25000	20,96	5411,524	50	53,30
10830,248	15000	20,96	4685,682	300	51,01
10829,088	5000	20,96	3203,104	200	52,24
7065,190	2500	22,72	2733,32	100	52,90
6678,151	1000	23,07	2511,22	50	53,30
5875,966	1000	23,07	1640,474	10	48,37
5875,621	7500	23,07	1640,332	5	48,37
4471,479	1000	23,73	1215,171	5	51,01
3888,648	5000	23,01	303,783	500	40,81
3187,745	200	23,71	256,317	150	48,37
2945,106	100	24,03	243,027	70	51,01

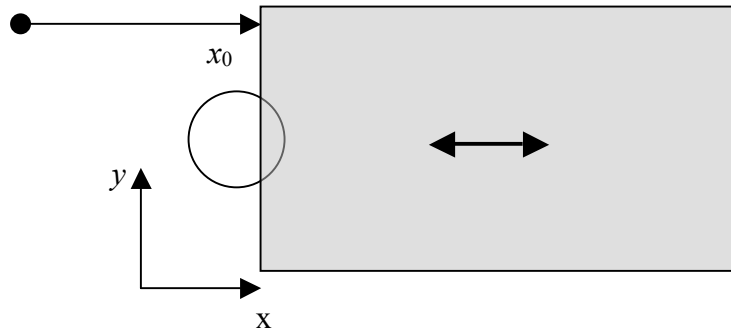
NEON, Z=20

8783,7539	1000	20,14
8780,6223	1200	20,05
8681,9216	500	20,04
8679,4898	500	20,14
8654,3837	1500	20,14
8634,6472	600	20,05
8495,3591	500	20,03
8377,6062	800	20,03
8300,3248	600	20,05
7245,1665	1000	18,38
7173,9380	1000	18,57
7032,4128	1000	18,38
6929,4672	1000	18,63
6598,9529	1000	18,72
6402,2460	2000	18,55
6382,9914	1000	18,61
6334,4279	1000	18,57
6266,4950	1000	18,69
6217,2813	1000	18,61
6163,5939	1000	18,72
6143,0623	1000	18,63
6074,3377	1000	18,71
6029,9971	1000	18,72
5975,5340	600	18,69
5881,8950	1000	18,72
5852,4878	2000	18,96
5764,4188	700	20,70
5400,5616	2000	18,96
5343,2834	600	20,70
5341,0938	1000	20,70
5330,7775	600	20,71
4957,0335	1000	21,11
4884,9170	1000	21,11
4827,3444	1000	21,95
4788,9270	1000	21,14
4715,3466	1500	21,18
4712,0660	1000	21,18
4710,0669	1000	21,01
4708,8619	1200	21,01
4704,3949	1500	21,02
4537,7545	1000	21,11
3593,5263	500	20,30
3520,4714	1000	20,37
3472,5706	500	20,19
3417,9031	500	20,30
3369,9069	700	20,30
3369,8076	500	20,30
3057,388	300	20,90
2982,663	300	20,77
2974,714	300	20,78
2675,64	200	21,30
2675,24	200	21,30
2647,42	200	21,30
743,721	12	16,67
735,892	30	16,85
629,729	6	19,69
626,819	6	19,78
618,668	5	20,04

615,623	5	20,14
Ne II, ionization potential 41,079 eV		
4428,54	6	37,55
4409,30	7	37,65
4397,94	6	37,55
4391,94	7	37,62
4379,50	6	37,63
4290,40	6	37,62
4219,76	6	37,54
3777,16	8	30,55
3766,29	8	30,52
3734,94	7	30,55
3727,08	9	31,18
3713,084	10	31,12
3709,64	7	30,57
3694,197	10	30,52
3664,112	9	30,55
3542,90	7	34,86
3355,05	7	30,93
3334,87	10	30,88
3323,75	7	31,51
3297,74	7	30,93
3218,21	8	34,74
2955,73	7	31,36
1938,827	8	34,25
1930,033	8	34,28
1916,081	10	34,25
1907,494	8	34,28
462,388	14	26,91
460,725	15	26,91
447,813	8	27,78
446,252	8	27,78
407,136	8	30,55
405,852	9	30,55
Ne III, ionization potential 63,742 eV		
2678,64	25	44,23
2677,90	30	44,23
2613,41	12	48,53
2610,03	15	48,53
2595,68	20	43,72
2593,60	30	43,72
2590,04	40	47,73
2412,94	12	49,37
2412,73	15	49,37
2263,21	12	54,01
2216,07	15	54,12
2213,76	12	54,13
2163,77	15	49,46
2095,54	20	54,16
2092,44	12	54,16
2089,43	15	54,17
491,050	9	25,33
490,310	7	25,40
489,501	10	25,33
488,868	7	25,44
488,103	8	25,40
379,308	7	35,89

Mesure du profil du faisceau laser (mode TEM₀₀) par la "méthode du rasoir" ("sliding edge method")

Le principe de la méthode consiste à couper partiellement le faisceau laser se propageant suivant Oz à l'aide d'un écran perpendiculaire au faisceau et à enregistrer la puissance transmise en fonction de la position du bord de l'écran (on utilisera pour cela une lame de rasoir). Supposons que la lame face écran entre $x = x_0$ et $x = +\infty$.



Dans le cas d'un faisceau TEM₀₀ de profil gaussien, de rayon $w_z = w(z)$ et de puissance totale P , la puissance transmise $P(x_0)$ est donc :

$$P(x_0) = \int_{-\infty}^{x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2P}{\pi w_z^2} e^{-\frac{2(x^2+y^2)}{w_z^2}} dx dy = \frac{2P}{\pi w_z^2} \int_{-\infty}^{x_0} e^{-\frac{2x^2}{w_z^2}} dx \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2y^2}{w_z^2}} dy$$

où w_z caractérise le rayon du faisceau à l'abscisse z . $P(x_0)$ peut se réécrire sous la forme :

$$P(x_0) = \frac{2P}{\pi w_z^2} \times \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{w_z}{2} [1 + \operatorname{erf}(\sqrt{2}x)] \times \sqrt{\frac{\pi}{2}} w_z = \frac{P}{2} [1 + \operatorname{erf}(\sqrt{2}x)]$$

avec $x = x_0/w_z$ et erf la fonction erreur, qui est la primitive d'une gaussienne :

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$$

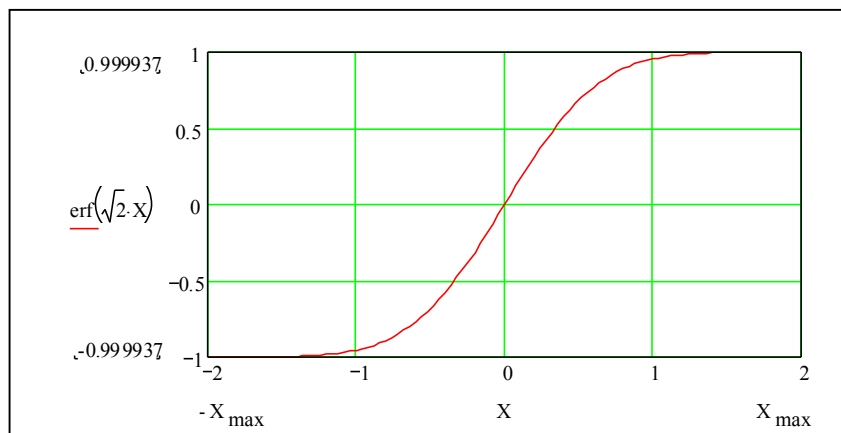


Figure 4 :
fonction erreur erf

Ce profil est bien celui qu'on obtient lorsqu'on déplace la lame de rasoir : pour x très petit (en pratique $x_0 \ll -w_z$), la totalité du faisceau est coupée par la lame de rasoir et la puissance transmise est nulle ; celle-ci commence à augmenter quand x_0 devient de l'ordre de $-w_z$; quand la lame est au milieu du faisceau ($x = 0$, c'est à dire $x_0 = 0$), la moitié de la puissance est transmise ; *etc.* On utilisera un logiciel d'analyse de données comme *SciDAVis* pour ajuster $P(x_0)$ et déduire w_z de la largeur de $P(x_0)$, son amplitude n'apportant pas d'information utilisable. Notez qu'on pourrait aussi dériver la fonction $P(x_0)$ pour obtenir le profil d'intensité en x et l'ajuster avec une gaussienne, ce qui serait pédagogiquement intéressant, mais tout à fait équivalent sur le plan numérique.

Analyseur de modes laser

L'analyseur de modes laser est basé sur un interféromètre Fabry-Perot commandé par une alimentation haute tension ajustable et balayable dans le temps. L'analyseur est équipé d'une photodiode que l'on relie à un oscilloscope pour visualiser le spectre du laser. L'interféromètre Fabry-Perot utilisé a un intervalle spectral libre de 1,5GHz. Il est constitué de deux miroirs diélectriques se faisant face. Un des miroirs est fixé sur un élément piézo-électrique qui permet, par l'application d'une tension électrique, la variation de la distance entre les miroirs de quelques micromètres autour de sa valeur moyenne d (Figure 5). Dans le cas de miroirs plan parallèles espacés d'une distance d fixe entre les miroirs, le Fabry-Perot transmet toutes les fréquences optiques multiples de l'intervalle spectral libre de l'interféromètre $ISL = c/2d$. Le spectre est répété de manière périodique avec une période égale à ISL . Ainsi, connaissant cette période, il est possible d'en déduire la distance entre deux raies à l'intérieur du spectre étudié.

Dans le cas présent l'interféromètre est de type "confocal", constitué de deux miroirs sphériques de rayon r égaux très proches de d . On montre alors que l' ISL est très proche de $c/4d$ (*cf.* par exemple W. Demtröder, *Laser Spectroscopy*, Springer 1996).

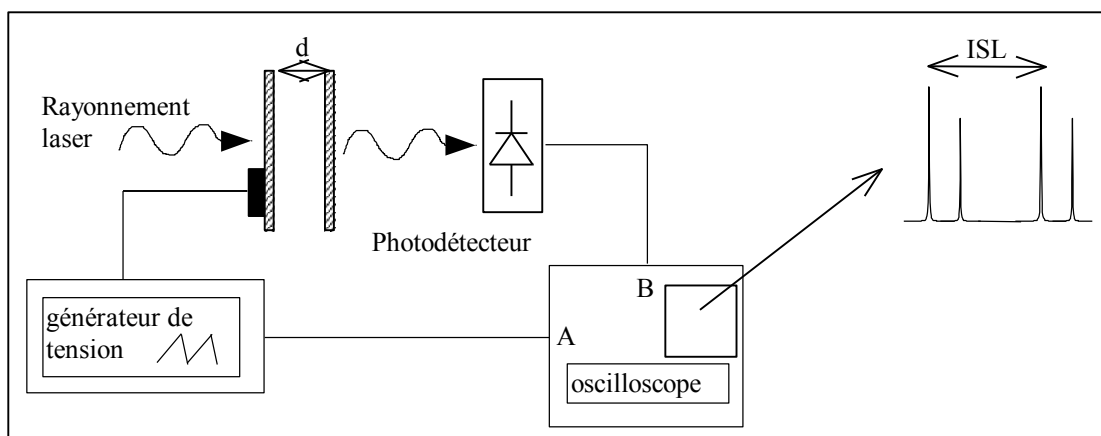


Figure 5 : principe de visualisation du spectre optique d'un rayonnement laser avec un interféromètre Fabry-Perot.

Utilisation de l'oscillo à mémoire "Hameg" pour l'analyse des modes du laser

Le fonctionnement de cet oscillo est déroutant, car la plupart des touches activent 4 fonctions : on commute entre 2 d'entre elles en appuyant un **coup bref** sur la touche, et on commute entre les 2 autres en appuyant un **coup long** !

-La rampe de tension ("ramp out") délivrée par le boîtier de commande de l'analyseur de modes est normalement connectée à la prise BNC latérale de l'analyseur. Pour la visualiser, prélever le signal qu'on envoie sur l'entrée "ch1" de l'oscillo, le signal de la photodiode intégrée à l'analyseur de mode amplifié par le boîtier ("detector out") étant connecté à l'entrée "ch2" (la photodiode est connectée à l'entrée "detector in" du boîtier). Mettre alors en route boîtier et oscilloscope et presser la touche "autoset" de l'oscillo. On peut alors voir l'effet des différents boutons de commande du boîtier d'alimentation de l'analyseur de modes.

-passer en déclenchement externe en branchant la sortie "scope trig out" sur "external trig" et l'activer en appuyant **brièvement** sur la touche "trig" pour passer de "ch1" à "ext".

-mettre la base de temps à environ 2ms/carreau. Ajuster le bouton "amplitude" du boîtier de commande de l'analyseur pour que le balayage excède l'intervalle spectral libre de l'analyseur et qu'on puisse voir ainsi deux motifs spectraux des modes du laser. Optimiser l'injection du faisceau laser dans l'analyseur pour avoir des pics aussi intenses et fins que possible.

-passer en mode enregistrement numérique de la trace en pressant **longuement** la touche "hold" en haut à droite de la façade de l'oscillo. On doit allumer la fonction "RFR" de "store mode".

-appuyer sur la touche "PTR" (juste au dessus de "hold") plusieurs fois **brièvement** pour centrer le spectre sur l'écran.

-pour figer le spectre appuyer **brièvement** sur la touche "hold".

-pour activer les curseurs appuyer **longuement** sur la touche ch1/ch2 en dessous de l'écran. Sélectionner l'un ou l'autre des deux curseurs (barres verticales) en appuyant **brièvement** sur la touche I/II. On déplace alors le curseur correspondant avec le bouton "cursor" juste en dessous du milieu de l'écran. Positionner les curseurs sur deux pics du spectre. Appuyer plusieurs fois **brièvement** sur la touche I/II pour faire afficher l'indication " Δt " en bas à droite de l'écran: c'est le temps qui sépare les deux positions du curseur suivant la base de temps réglant le balayage en X sur l'écran.

Annexes

(à lire avant la première séance de TP)

Page 37	Annexe 1 : Sécurité laser
Page 38	Annexe 2 : Utilisation des ressources informatiques
Page 39	Annexe 3 : Le spectromètre à barrettes CCD
Page 40	Annexe 4 : Utilisation des logiciels de traitement de données SciDavis et Kaleidagraph
Page 44	Annexe 5 : Modélisation de données expérimentales
Page 48	Annexe 6 : Quelques constantes physiques usuelles en physique atomique

Annexe 1 : Sécurité laser



Classes de sécurité (indiquée par une étiquette sur le laser) :

- ☞ **Classe 1** : lasers non dangereux pour l'œil quelles que soient les conditions d'observation.
- ☞ **Classe 2** : lasers émettant dans le visible et pour lesquels le réflexe palpébral (réflexe de clignement de l'œil égal à 250 ms) intervient pour protéger l'œil d'une exposition accidentelle au laser. Cette classe 2 prolonge la classe 1 et les lasers visibles de cette classe sont non dangereux pour l'œil, si celui-ci n'est pas maintenu dans le faisceau plus de 250 ms. (puissance $P < 1 \text{ mW}$)
- ☞ **Classe 3A** : cette classe regroupe les lasers non dangereux pour l'œil nu, mais potentiellement dangereux si on les observe à travers une optique grossissante. ($1 \text{ mW} < P < 5 \text{ mW}$)
- ☞ **Classe 3B** : lasers dangereux pour l'œil nu (et encore plus si le laser passe par une optique grossissante), mais les réflexions diffuses (rayonnement diffusé par un obstacle situé sur le trajet du faisceau) du laser sont sans danger. La lésion cutanée est prévenue par une sensation de picotement ou d'échauffement. ($5 \text{ mW} < P < 0,5 \text{ W}$)
- ☞ **Classe 4** : lasers les plus intenses qui sont très dangereux pour l'œil nu y compris en réflexion diffuse, ainsi que les lasers pouvant induire des dommages sur la peau. ($P > 0,5 \text{ W}$)

*En TP, vous utiliserez le plus souvent des lasers de **classe 2 ou 3A**, de puissance nominale 1 mW maximum, donc non dangereux si votre réflexe palpébral est actif et si vous ne regardez pas le faisceau à travers une optique grossissante. Même s'il n'y a pas de grand danger avec ces lasers, vous devez apprendre à manipuler proprement : orientez toujours le faisceau vers un écran, attention aux réflexions parasites, à ne pas mettre la tête dans le faisceau en vous penchant (en particulier quand vous faites des mesures sur écran). Coupez l'alimentation du laser ou obturez le faisceau quand il ne sert plus.*

Remarque : la puissance indiquée sur l'étiquette de sécurité figurant sur le tube laser n'est pas la puissance nominale du laser (celle-ci est indiquée dans la notice). Il s'agit seulement de la gamme de puissance correspondant à la classe de sécurité.

Annexe 2 : Utilisation des ressources informatiques de la plate-forme optique

Lors de ces TP, nous vous demandons de vous familiariser avec l'usage de l'outil informatique, pour acquérir des données, les traiter ou les présenter.

Tous les PC des salles de TP sont sur le réseau E (Enseignement). Ils sont nommés *DescartesX* ($X = n^{\circ}$ du PC). Pour travailler sur ces PC, vous devez utiliser votre login personnel et votre mot de passe, qui vous sont donnés lors de votre inscription.

Sur ces PC, vous trouverez différents logiciels, entre autres :

Caliens pour la barrette CCD

OOIBase 32 ou *Spectrasuite* pour le spectromètre à CCD

Kaleidagraph, *SciDAVis* et *Synchronie* pour le traitement des données (courbes, modélisations, ...)

Powerpoint (et sa version libre *Impress*) pour réaliser votre diaporama (soutenance orale)

Photofiltre pour le traitement d'images

Vous avez aussi accès à internet mais n'en abusez pas ! En dehors des heures de TP, vous pouvez accéder sur demande à ces PC.

- Impression :

Vous disposez d'une imprimante laser dans la salle de TP C114 : **PHY-DESCARTES2**.

En cas de problème sur cette imprimante, vous pouvez utiliser PHY-DESCARTES en salle C117.

Pour installer l'imprimante : allez dans le menu « démarrer » - paramètres » - « imprimantes », cliquez sur « ajout d'imprimante » - « suivant », tapez le nom de l'imprimante (\\STYX\PHY-DESCARTES2) ou cherchez son nom dans la liste (PHY-DESCARTES2 est sur E\STYX).

- Sauvegarde des données :

Vous devez sauvegarder vos données **uniquement dans votre espace Perso** sur le serveur Sarado (accessible depuis le poste de travail), et non sur le disque dur du PC. Ainsi, vous évitez de polluer les disques durs des PC et vos données pourront être consultées (par vous uniquement) sur n'importe quelle machine connectée au réseau E. Un fichier mis sur le disque dur peut être effacé à tout moment par n'importe qui !

Quand vous avez terminé, n'oubliez pas de fermer votre session de travail (menu « Démarrer »). Inutile d'éteindre le PC en fin de séance.

Annexe 3 : LE SPECTROMETRE A BARRETTE CCD

Spécifications constructeur : (OCEAN OPTICS Inc.)

<http://www.oceanoptics.com/products/usb2000.asp>

The USB2000-FL Spectrometer for fluorescence is pre-set to cover the 360-1000 nm wavelength range. It features a 200 μm entrance slit and an L2 Detector Collection Lens.

Detector: 2048-element linear silicon CCD array

Effective range: 200-1100 nm

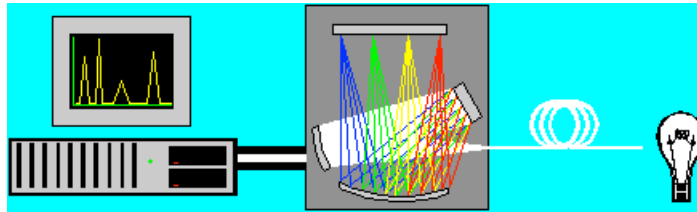
Dynamic range: 2×10^8

Sensitivity : 86 photons/count;
 2.9×10^{-17} joule/count
 2.9×10^{-17} watts/count (for 1-second integration)

Signal-to-noise: 250:1 (at full signal)

Dark noise: 2.5-4.0 (RMS)

Resolution: $\sim 0.3 \text{ nm}$ -10.0 nm FWHM (depends on groove density of grating and diameter of fiber or width of slit)



Logiciel : OOIBase32 Spectrometer Operating Software (est également installé le logiciel SpectraSuite, assez intuitif et dont la notice n'est pas donnée ci-dessous)

On commence par régler la durée d'exposition en fonction de l'intensité du signal, de façon à utiliser au mieux toute l'échelle verticale sans saturer le système (en pratique éviter de dépasser 3000 coups car au delà la réponse de l'appareil n'est plus proportionnelle à l'intensité lumineuse). On peut aussi choisir le nombre de spectres sur lequel le logiciel calcule une valeur moyenne ("*Average*") pour diminuer le bruit. Attention, lors d'une accumulation le logiciel paralyse l'ordinateur qui alors refuse toute commande: en cas de fausse manœuvre (exemple *Average*=1000) il n'y a plus qu'à faire CTRL-ALT-SUPPR...

Pour figer un spectre, se mettre en mode "*Snapshot*" (icône appareil photo). Pour les mesures, on dispose d'un curseur, icône "*Toggle cursor*" qu'on déplace avec les flèches et qui fournit l'indication en bas à gauche de l'écran: valeur de λ , n° de pixel et intensité correspondante. On peut enregistrer le spectre sous forme d'un fichier ASCII: "*File-Save-Processed*" ou icône disquette.

Pour mesurer un spectre d'absorption, on doit commencer par enregistrer deux spectres:
-un spectre d'obscurité ("*Spectrum-save dark*" icône ampoule noire) obtenu en cachant la lumière venant de la source lumineuse (ce spectre contient la lumière parasite et le signal d'obscurité du détecteur). On peut alors retirer ce signal parasite de tout signal enregistré en cliquant sur l'icône "*Substract dark spectrum*" (ampoule noire avec 2 traits).
-un spectre de référence ("*Spectrum-save refrence*" icône ampoule jaune) obtenu en l'absence de l'objet dont on veut mesurer l'absorbance (ce spectre contient la courbe d'émission de la source, la réponse du réseau, du détecteur, l'atténuation de la cuve, du solvant...).

En cliquant sur les icônes "*T*" et "*A*" qui deviennent actives le logiciel calcule et affiche en temps réel la transmittance $T = (\text{spectrum-dark}) / (\text{reference-dark})$ ou l'absorbance $A = -\log_{10} T$. Attention, il y a un facteur $\ln 10 = 2,30$ entre l'absorbance A et le coefficient d'absorption α (défini par $I_{transmis} = I_{incident} e^{-\alpha d}$).

Il est possible de choisir l'échelle du spectre obtenu en cliquant sur l'icône "*Set scale*" (2 flèches rouge orthogonales).

Annexe 4 : Utilisation des logiciels de traitement de données

SciDAVis 0.2.3 (logiciel libre, installé sur la plate-forme optique)

- Installer le logiciel à partir du site <http://scidavis.sourceforge.net/> ; veiller à la bonne installation de Python (quitte à le faire vous même, si le logiciel d'installation de *SciDAVis* n'y arrive pas) ; le fichier python26.dll doit notamment se trouver dans le répertoire SciDAVis)



- Ouvrir en cliquant sur l'icône
- Vous pouvez créer un nouveau tableau de données (initialement vierge), en allant dans le menu « Fichier » > « Nouveau » > « Table », ou bien en tapant « Ctrl T » : par défaut le nom du tableau est Table 1, Table 2, *etc.*, mais vous pouvez changer ce nom en allant dans le menu « Fenêtre », puis « Renommer ».
- Par défaut également, ce tableau contient 2 colonnes, 1[x] et 2[y]. Vous pouvez également changer les noms et types des données de chaque colonne (X, Y, Z, Y error ...), en faisant un clic droit sur la barre supérieure de la colonne choisie. « Set column(s) as » permet de choisir entre X (abscisse), Y (ordonnée), yEr (écart type de la mesure, utilisé comme barre d'erreur) , *etc.* On peut insérer, rajouter des colonnes à droite, *etc.* et réaliser d'autres actions.
- On peut rentrer les données à la main dans le tableau, ou les importer d'un fichier ASCII existant en utilisant la commande " Fichier – Import ASCII" (ou bien directement avec « Ctrl K »)
- Pour rentrer automatiquement des données dans une colonne, avec une formule, sélectionner la colonne et entrer la formule dans l'onglet « Formula » de la feuille située sur la droite (ex : 3*col("vitesse")+1). Mettre à jour le calcul en faisant « Apply ». Les autres onglets de cette feuille sont faciles d'utilisation.
- Il est également possible de sauver dans un fichier ASCII le contenu d'un tableau (menu « Fichier », puis « EXPORT ASCII »)
- Pour tracer un graphe, sélectionner la colonne [y] voulue (ou un ensemble de colonnes, en cliquant dans le coin en haut à gauche du tableau) puis faire clic droit et choisir « Plot » et sélectionner le type de tracé : typiquement « Ligne » pour des segments joignant les points, ou « Nuage » pour des points marqués par des symboles. Par un double-clic sur une courbe, on accède au menu « Plot details », qui permet de modifier les paramètres des tracés (« Nuage », « Ligne », couleurs, *etc.*).
- Dans la fenêtre graphe, en double cliquant sur le bouton en haut à gauche (numéroté 1, 2 *etc.*, en fonction du nombre de tracés, ou « Planches », qu'il y a dans la fenêtre graphe), vous pouvez ajouter ou enlever des courbes dans un graphe ; le bouton « Plot association » permet, après avoir sélectionné un tracé particulier, de choisir ou de modifier les variables qui seront en abscisses, en ordonnées, les barres d'erreur, *etc.*
- Pour réaliser un ajustement numérique, par la méthode des moindres carrés, des données représentées sur le graphe, avec des fonctions de base (polynome, exponentielle, Boltzmann, gaussienne, lorentzienne, *etc.*), le plus simple consiste à passer par « Analyse », puis « Quick fit ». Les valeurs des paramètres trouvés avec leurs incertitudes et la valeur du χ^2 réduit (Chi^2/doF) sont données dans la fenêtre Results Log (au dessus du graphe). Par défaut, les écarts types utilisés comme incertitudes de mesures sont les valeurs contenues dans la colonne yEr à droite de la colonne Y.
- « Fit wizard », permet de personnaliser l'ajustement, avec un choix plus étendu de fonctions ou en construisant la fonction utilisée. Pour ce faire, entrer dans « Name » le nom de la nouvelle fonction que vous voulez écrire et dans le champ « Parameters » les paramètres dont elle va dépendre. Ecrire la fonction dans la fenêtre principale, en utilisant notamment comme briques de base les fonctions de la catégorie Built-in ou Basic (ne pas oublier de faire « Save »). La fonction créée apparaîtra ainsi dans la liste « User defined ». Sélectionnez la fonction d'ajustement en cochant la case « user function » (ou « Fit using built-in function » si vous l'avez prise dans cette liste) et cliquez sur « Fit >> ». Une nouvelle fenêtre s'ouvre, qui permet de choisir les valeurs initiales de paramètres (ou de les bloquer à des valeurs choisies), de sélectionner l'algorithme d'ajustement (on conseille la technique Levenberg Marquardt qui est très utilisée), de définir divers intervalles et de choisir les incertitudes de mesures : aucunes, c'est à dire $\sigma=1$ partout pour « Errors unknown » ; « Associated » qui correspond à la colonne de droite utilisée par défaut par « Quick fit » ; « Statistical » ($\sigma = \sqrt{x}$) ; « Arbitrary data set » pour prendre les valeurs dans une colonne à définir.

"KALEIDAGRAPH" pour débiter (logiciel non libre, installé sur la Plate forme Optique)

Charger un fichier :

File>Import>Text

Les premières lignes du fichier apparaissent dans une fenêtre qui s'ouvre

Sélectionner le nombre de lignes à sauter dans le fichier (lignes de texte de commentaires)

Sélectionner le format des délimiteurs entre données (espace, tab, virgule...).

Si les nombres sont sous forme décimale « européenne » du genre 126,675 il faut commencer par aller dans « Data »> « Column format » et sélectionner la forme 1 234,56 Attention au nombre de digits. J'ai constaté que dans le cas d'un grand nombre de digits (>9), les derniers digits du nombre lu sont différents du nombre dans le fichier (et ceci même en sélectionnant « double » pour le type dans column format) !!!

Pour tracer le fichier sous forme de graphique :

Gallery>(type de tracé)

Une fenêtre s'ouvre pour sélectionner les colonnes du fichier de données qui seront assignées aux axes X et Y

N.B. Je ne sais pas comment superposer plusieurs graphes l'un sous forme de ligne continue, l'autre sous forme de symboles ?

Pour définir une colonne sous forme d'une fonction mathématique prenant les valeurs d'autres colonnes comme variables:

Window>Formula entry

Editer la formule. Exemple $c2=c1+c0$

Puis "Run"

Pour lisser un fichier de données :

Sélectionner la fenêtre du fichier de données. Clic droit « append columns ». Puis «Macro »>Smooth, et sélectionner la colonne à lisser, la colonne dans laquelle le résultat va être stocké, le nombre de points suivant lequel le lissage va s'effectuer.

Pour dériver un fichier de données :

Cf ci-dessus, avec « Macro »> »Derivative ».

Pour effectuer un ajustement numérique :

-cas d'une fonction courante (polynôme, exponentielle, log...)

Sélectionner la fenêtre plot, puis « Curve fit »>(fonction à fiter)

-cas d'une fonction un peu moins courante

Aller dans « file »> « Import »> « Append Macros » et sélectionner un fichier de macros dans le dossier

Kaleidagraph>Examples>Macros> (Pour un fit de courbe de gauss, sélectionner le fichier « peaks.eqn »)

Ensuite il faudra retracer la courbe expérimentale à ajuster (Gallery>(type de tracé)...), puis aller dans « Curve fit »

> « General » et sélectionner la fonction (par exemple gaussfit pour un fit par une gaussienne). Sélectionner

« Define » et changer les valeurs initiales des paramètres, qui par défaut sont fixées à 1 (« m1=1 ;m2=1 ;m3=1 ;...)

Dans le cas d'un fit par une gaussienne si on met m1=0 ça ne marche pas...

-cas d'une fonction quelconque

Il faut la définir, c'est possible, il faut définir la macro définissant la fonction et la sauver dans un fichier, consulter la rubrique « aide »...

"KALEIDAGRAPH" - compléments

Remplir un tableau de données (*data 1*)

Donner un nom à chaque colonne (par exemple : « angle(°) », « lambda (nm) », ...) : aller dans « Data – Column Format » ou double-clicquer sur une des cellules de la 1^{ère} ligne du tableau (notées par défaut A, B, C, ...).

Réaliser des opérations mathématiques sur les colonnes : utiliser la fenêtre « Formula Entry » (si elle n'apparaît pas, aller dans « Windows – Formula Entry »). Les différentes colonnes sont notées c0, c1, c2, ... Entrer la formule

(par exemple, $c2 = c0+3*c1$) puis cliquer sur « *Run* ». Si par la suite, vous modifiez une des valeurs du tableau, il faudra relancer le calcul pour en tenir compte.

Tracer un graphique : Aller dans le menu « *Gallery – Linear – Scatter* » et sélectionner la (ou les) variable(s) X et la (ou les) variable(s) Y. Un graphique apparaît. Les paramètres peuvent être modifiés dans le menu « *Plot* » ou en double-cliquant directement sur l'élément que l'on veut modifier (par exemple, pour changer l'échelle, double-cliquer sur l'un des deux axes). Si vous modifiez les données du tableau, vous pouvez mettre à jour le graphique en cliquant sur le symbole en haut à droite du data. Si vous voulez ajouter ou retirer une variable sur le graphique, vous devez le retracer : aller dans le menu « *Gallery* », modifier les variables si nécessaire, cliquer sur « *Plot* » pour créer un nouveau graphique ou sur « *Replot* » pour modifier le graphique existant.

Masquer : Si certains points expérimentaux vous semblent aberrants, vous pouvez les ignorer momentanément en les masquant (menu *Functions – Mask* ou *Unmask*).

Ajouter des barres d'erreur : Pour ajouter des barres d'erreur sur le graphique, aller dans le menu « *Plot – Error Bars* » et indiquer la valeur de l'erreur associée à la variable X et/ou Y. Cela peut être une valeur relative fixe (*% of value*), une valeur absolue fixe (*fixed value*) ou une valeur variable suivant le point expérimental, qui doit alors être préalablement indiquée dans l'une des colonnes du tableau (sélectionner *Data Column*).

Faire une modélisation : Une fois le graphique tracé, vous pouvez modéliser les données expérimentales par une fonction de votre choix : aller dans le menu « *Curve Fit* » et sélectionner l'une des fonctions prédéfinies (*Linear*, *Polynomial*, ...) ou aller dans le menu « *General – Fit 1* » pour définir une nouvelle fonction. Sélectionner la variable à modéliser, puis cliquer sur « *Define* ». Taper l'expression de la fonction modèle, en notant M0 la variable et m1, m2, ... les paramètres de la modélisation (par exemple, $m1*\exp(-M0^2/m2^2)$ pour une gaussienne). Si la modélisation échoue, réessayer en donnant une première estimation des paramètres (syntaxe : $m1*\exp(-M0^2/m2^2)$; m1 = 2 ; m2 = 4). S'il indique « *singular coefficient matrix* », recommencez avec des paramètres de départ légèrement différents. Pour valider un modèle et obtenir l'incertitude sur les paramètres de la modélisation, voir l'annexe suivante.

Sauvegarder les données : Vous pouvez sauvegarder indépendamment les tableaux (*File - Save Data As*) et les graphiques (*File – Save Graph As*). Si vous avez uniquement sauvegardé le graphique, vous pouvez retrouver le tableau de données correspondant en cliquant sur le petit tableau symbolisé dans le coin en haut à droite de la fenêtre graphique. Pensez à faire une sauvegarde régulièrement.

Annexe 5 : Modélisation de données expérimentales

Le problème :

On dispose d'un relevé de n valeurs expérimentales (x_i, y_i) et leurs incertitudes $(\Delta x_i, \Delta y_i)$
(les erreurs systématiques ne sont pas traitées ici).

On cherche à faire 2 choses :

1 – valider un modèle.

On veut répondre à la question suivante : la loi de variation $y(x)$ observée expérimentalement peut-elle, compte tenu des incertitudes, se représenter par la fonction modèle f ?

2 – trouver les k coefficients de la fonction modèle f et leur incertitude.

Par exemple, si $f(x) = ax + b$, on veut trouver les coefficients (a, b) et leur incertitude $(\Delta a, \Delta b)$.

La réponse à ces questions dépend bien sûr de la dispersion des points expérimentaux autour de la fonction modèle, mais aussi de la valeur des incertitudes de mesure : si on réalise une mesure très précise, il sera plus difficile de trouver une fonction modèle représentant correctement les points expérimentaux, mais une fois la fonction trouvée, l'incertitude sur ses paramètres sera faible.

Si les incertitudes expérimentales sont connues, les logiciels de traitement de données (*Synchronie, Kaleidagraph, ...*) utilisent en général la méthode du « χ^2 » qui consiste à chercher les k coefficients (a, b, \dots) de la fonction f choisie qui minimisent la quantité :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\sigma_i^2}$$

où σ_i est la variance liée à l'incertitude sur le point (x_i, y_i) . On voit qu'il s'agit d'une somme pondérée : plus un point expérimental est précis, plus son influence est importante.

La minimisation de cette fonction par le logiciel conduit à l'affichage des résultats suivants :

- paramètres optimum de la fonction f : $a \pm \Delta a, b \pm \Delta b, \dots$

- validation du choix de la fonction f : χ^2 ou $C_m = \chi^2 / (n-k)$

C_m est appelé critère d'optimisation de la modélisation, ou χ^2 réduit. Le facteur de normalisation, $n - k$, est le nombre de degrés de liberté. On peut comprendre le sens de cette normalisation du χ^2 , en considérant le cas limite de deux points ajustés par une droite : si les deux paramètres a et b de la droite sont laissés variables lors de l'optimisation, on trouvera évidemment $\chi^2 = 0$, mais le χ^2 réduit sera indéterminé, signifiant qu'on ne peut rien dire en ce qui concerne la validité du modèle ; si on impose (pour des raisons physiques) à la droite de passer par l'origine, alors le nombre de degrés de liberté devient égal à 1 et le χ^2 réduit peut être évalué. On peut considérer que le choix de la fonction modèle f est correct si :

$\chi^2 \approx n-k$, ou $C_m \approx 1$ (l'erreur sur χ^2 est $\Delta\chi^2 = \sqrt{2(n-k)}$)

Une valeur trop importante du χ^2 signifie que le modèle n'est pas valide (ou que les incertitudes ont été sous-évaluées). Une valeur trop faible signifie que les incertitudes ont été surévaluées.

Remarque : Les logiciels donnent aussi souvent le coefficient de régression linéaire R ou l'écart quadratique moyen E (moyenne du carré des écarts entre les points expérimentaux et la fonction f). Ces deux coefficients ne dépendent que de la dispersion des points expérimentaux autour de f , pas de leur précision. Ils ne permettent donc pas de valider le modèle ni d'obtenir la précision sur les coefficients de la fonction f .

- Utilisation du logiciel Synchronie :

Si on utilise une fonction prédéfinie, ou si on ne précise pas les incertitudes Δx et Δy , le logiciel affiche seulement les valeurs des coefficients a, b, \dots et l'écart quadratique E .

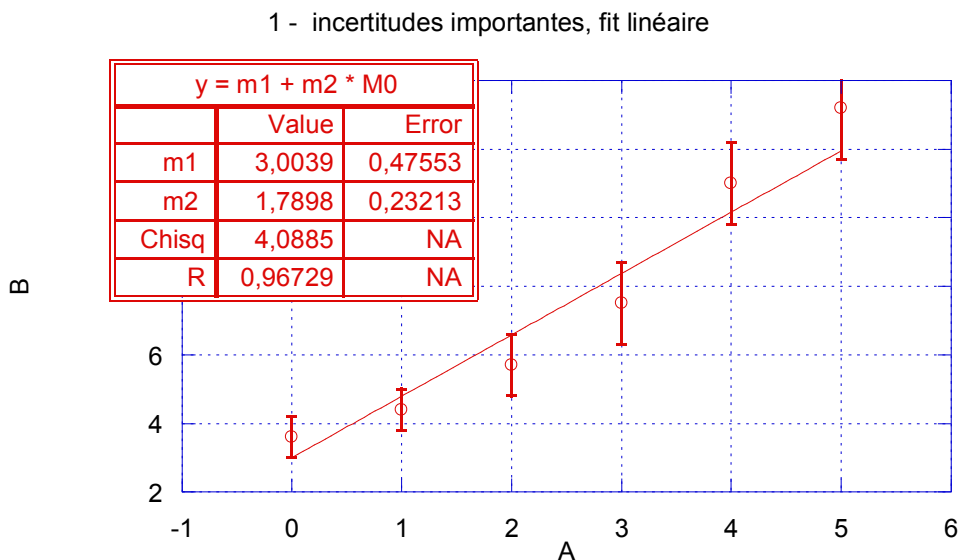
Pour obtenir la valeur des incertitudes sur les coefficients $\Delta a, \Delta b, \dots$ ainsi que le critère d'optimisation C_m , il faut choisir une fonction utilisateur (sélectionner : *autre fonction*) et entrer les valeurs des incertitudes Δx et Δy (identiques pour tous les points). Le logiciel réclame alors une estimation des paramètres a, b, \dots pour l'aider dans sa modélisation. Si les estimations de ces paramètres ne sont pas assez précises, il est possible que la modélisation échoue. Seuls les paramètres *actifs* sont affinés. Si, alors que tous les paramètres sont *actifs*, la modélisation échoue, recommencer en rendant *actifs* les paramètres un par un.

- Utilisation des logiciels SciDAVis et KALEIDAGRAPH : voir ci-dessus

Exemple : les quatre courbes suivantes ont été tracées sur *Kaleidagraph* avec $n = 6$ points de mesure, identiques dans tous les cas. Les barres d'erreur tracées correspondent aux poids σ_i utilisés pour la modélisation : elles sont trois fois plus faibles dans les cas 2 et 3 que dans le cas 1 et 4.

Cas 1 : Grandes barres d'erreur, modélisation par une droite.

On trouve $\chi^2 = 4,0885$ au lieu de la valeur idéale $6 - 2 = 4$ (avec une erreur $\approx 2,8$). La modélisation est donc bonne. Par contre, on voit que les coefficients de la droite sont donnés avec une précision assez médiocre (par exemple, la pente est donnée avec une précision de 13 %).

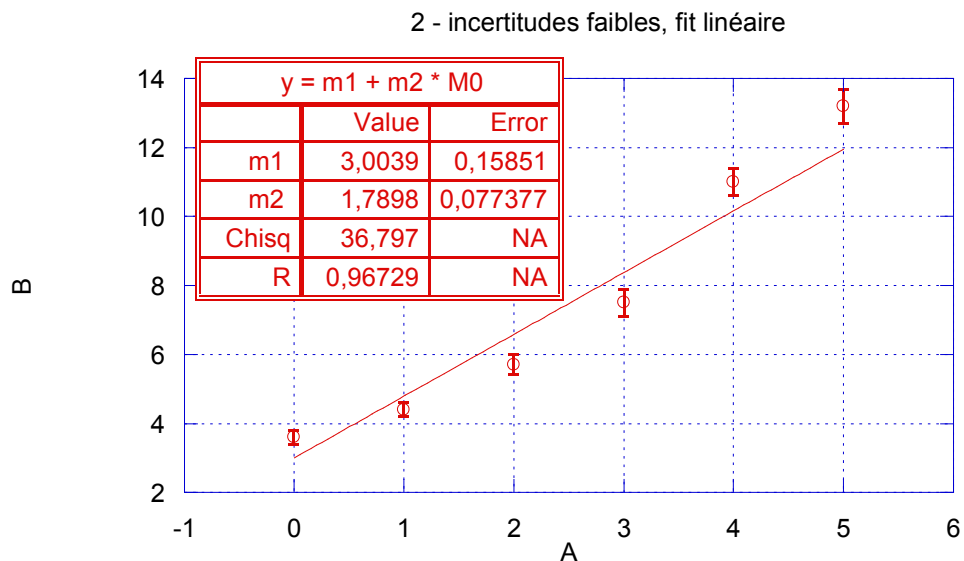


Cas 2 : Faibles barres d'erreur, modélisation par une droite.

On trouve $\chi^2 = 36,797$ au lieu de la valeur idéale $6 - 2 = 4$ (avec une erreur $\approx 2,8$).

La modélisation est donc maintenant mauvaise (une mesure précise est plus difficile à modéliser), bien que les coefficients de la droite soient donnés avec une assez bonne précision (par exemple, la pente est maintenant donnée avec une précision de 4 %). On voit dans cet exemple que pour valider un modèle, il ne faut pas se fier à la précision des coefficients de la modélisation : seule la valeur du χ^2 (ou du C_m) peut valider le choix de la fonction modèle.

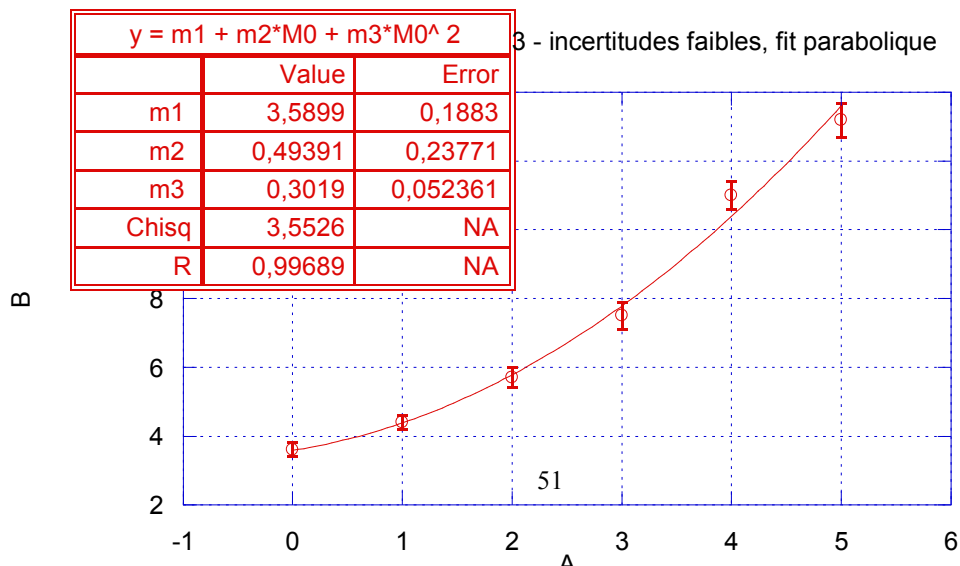
Remarquez aussi que le coefficient de régression R est le même dans les cas 1 et 2 (il est indépendant des incertitudes) : ce coefficient ne peut pas non plus renseigner sur la validité de la modélisation.



Cas 3 : Faibles barres d'erreur, modélisation par une parabole.

On trouve $\chi^2 = 3,5526$ au lieu de la valeur idéale $6 - 3 = 3$ (avec une erreur $\approx 2,4$).

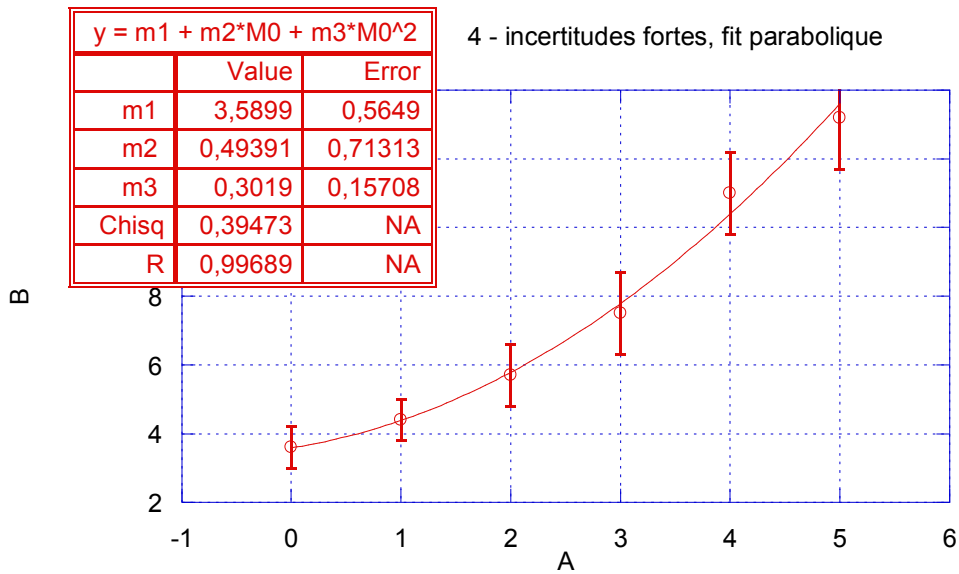
La modélisation par une parabole est donc bonne : on peut dire que les résultats expérimentaux sont bien représentés par une loi parabolique, compte tenu des incertitudes expérimentales (dans le cas 1, les incertitudes étant plus importantes, une loi linéaire suffisait).



Cas 4 : Grandes barres d'erreur, modélisation par une parabole.

On trouve $\chi^2 = 0,39473$ au lieu de la valeur idéale $6 - 3 = 3$ (avec une erreur $\approx 2,4$).

Ici, la valeur du χ^2 est plutôt faible, ce qui signifie que la modélisation est valide mais peu sensible : la parabole convient, mais pas mieux que la droite ! D'ailleurs, on peut noter que l'incertitude sur les paramètres de la modélisation est très grande.



Annexe 6 : quelques constantes physiques usuelles en physique atomique

(Physics Vade Mecum 2nd edition, American Institute of Physics, 1986)

Constante de Planck	$h=(6,6260755\pm 0,000005).10^{-34}$ J.s $\hbar = h / 2\pi=(1,05457266\pm 0,0000006).10^{-34}$ J.s
Vitesse de la lumière	$c=(2,99792458).10^8$ m/s
Charge de l'électron	$e=(1,60217733\pm 0,000007).10^{-19}$ C
Constante de structure fine	$\alpha = e^2 / \hbar c=(7,29735308\pm 0,0000003).10^{-3}$ $1/\alpha=(137,0359895\pm 0,0000006)$
Nombre d'Avogadro	$N_0=(6,0221367\pm 0,000004).10^{23}$
Constante de Boltzmann	$k_B=(1,380658\pm 0,00001).10^{-23}$ J/°K
Masse de l'électron	$m=(9,1093897\pm 0,0000054).10^{-31}$ kg $=(5,4857990\pm 0,000034).10^{-4}$ uma
Unité de masse atomique	$uma=(1,6605402\pm 0,000001).10^{-27}$ kg
Masse du proton	$M_p=(1,6726231\pm 0,000001).10^{-27}$ kg $=(1,00727661\pm 0,00000008)$ uma
Masse du neutron	$M_n=(1,6749286\pm 0,000001).10^{-27}$ kg $=(1,0086649\pm 0,0000004)$ uma
Rayon de Bohr	$a_0 = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{mc} = (5,291772490\pm 0,00000023).10^{-11}$ m
Potentiel d'ionisation non relativiste de l'hydrogène pour un proton de masse infinie	$R_{inf}=(13,6056981\pm 0,000004)$ eV
Constante de Rydberg pour un proton de masse infinie	$R_{inf}=(109737,31534\pm 0,00012)$ cm ⁻¹
Constante de Rydberg pour l'hydrogène	$R_H=(109677,576\pm 0,012)$ cm ⁻¹
Magnéton de Bohr	$\mu_B=e \hbar / (2m)=(9,2740154\pm 0,0000032).10^{-24}$ J/T $\equiv 14,00$ GHz/Tesla
Rapport gyromagnétique du proton	$\gamma_p=(2,67522128\pm 0,00000008).10^8$ rd/s.T ⁻¹ $\equiv 42,5774691$ MHz/T
Fréquence associée à 1 ev	$(2,417966\pm 0,000008).10^{14}$ Hz
Nombre d'onde associé à 1 ev	$(8065,5410\pm 0,0024)$ cm ⁻¹
Longueur d'onde associée à 1 ev	$(1,23984244\pm 0,00000037)$ μm
Température associée à 1 ev	$(11604,45\pm 0,1)$ °K