

① $n = 3.$

18 states

n	l	s	j	m_j	States
3	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	$3 s_{1/2}$
3	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	$3 p_{1/2}$
3	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\pm \frac{3}{2}$	$3 p_{3/2}$
"	"	"	"	$\pm \frac{1}{2}$	
3	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\pm \frac{3}{2}$	$3 d_{3/2}$
"	"	"	"	$\pm \frac{1}{2}$	
3	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\pm \frac{5}{2}$	$3 d_{5/2}$
"	"	"	"	$\pm \frac{3}{2}$	
"	"	"	"	$\pm \frac{1}{2}$	

② a) n levels different

- $(3s_{1/2}, 3p_{1/2})$ $\Delta E_{m,j} = E_{3,1/2}$
- $(3p_{3/2}, 3d_{3/2})$ 3 n levels different $E_{3,3/2}$
- $(3d_{5/2})$ $E_{3,5/2}$

b) $Z = 1, mc^2 \alpha^4 \approx 1,45 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \quad n = 3$

$+ \frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{2n^3} \approx +2,685 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$

$$\Delta E_{3,1/2} = +2,685 \cdot 10^{-5} \left[\frac{3}{12} - \frac{2}{1+1} \right] \approx -2,01 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

$$\Delta E_{3,3/2} = 2,685 \cdot 10^{-5} \left[\frac{3}{12} - \frac{2}{3+1} \right] \approx -0,671 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

$$\Delta E_{3,5/2} = 2,685 \cdot 10^{-5} \left[\frac{3}{12} - \frac{2}{5+1} \right] \approx -0,223 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

$$\frac{-13,6}{3}$$

$$12,5$$

3

$$a) \hat{H}_z |n, l, s, j, m_j\rangle \equiv g_j \frac{\mu_B}{\hbar} B \hat{J}_z |n, l, s, j, m_j\rangle$$

$$\Delta E_z = \langle n, l, s, j, m_j | \hat{H}_z |n, l, s, j, m_j\rangle$$

$$\Delta E_z = g_j \mu_B B m_j$$

$$b) \text{ pour } 3d_{5/2}, m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}$$

$$j = \frac{5}{2}, l = 2 \quad (s = \frac{1}{2}) \Rightarrow g_j = 1 + \frac{\frac{5}{2} \cdot \frac{7}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - (2 \cdot 3)}{5 \left(\frac{7}{2}\right)}$$

$$g_j = 1 + \frac{\frac{35}{4} + \frac{3}{4} - \frac{24}{4}}{\frac{70}{4}} = 1 + \frac{14}{70} = 1 + \frac{1}{5}$$

$$g_j = \frac{6}{5}, \quad \mu_B B = 5,8 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

pour
1 Tesla

$$\begin{cases} \Delta E_z = \pm 3,48 \cdot 10^{-5} \text{ eV} & (m_j = \pm \frac{1}{2}) \\ \Delta E_z = \pm 1,04 \cdot 10^{-4} \text{ eV} & (m_j = \pm \frac{3}{2}) \\ \Delta E_z = \pm 1,74 \cdot 10^{-4} \text{ eV} & (m_j = \pm \frac{5}{2}) \end{cases}$$

$$1,74 \times 1,6$$

$$\begin{array}{r} 1064 \\ 174 \\ \hline 2484 \end{array}$$

10 -23

Correction du même ordre de grandeur ou plus grande que la correction de structure fine ! Contraire aux hypothèse.

$$c) \text{ Avec } \Delta E_{SF} \approx 0,5 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

$$\Rightarrow \mu_B B \leq 0,5 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

$$\text{soit } B \leq \frac{0,5 \cdot 10^{-6}}{5,8 \cdot 10^{-5}} \approx 0,0086 \text{ T}$$

3 a) $1s^2 2s^2 2p^2$

$p^2: \begin{matrix} l_1=1 & l_2=1 & \Rightarrow L=0,1,2 \\ s_1=1/2 & s_2=1/2 & \Rightarrow S=0,1 \end{matrix} \left. \begin{matrix} 1S_0, 3P_{0,1,2}, 1D_2 \end{matrix} \right\}$

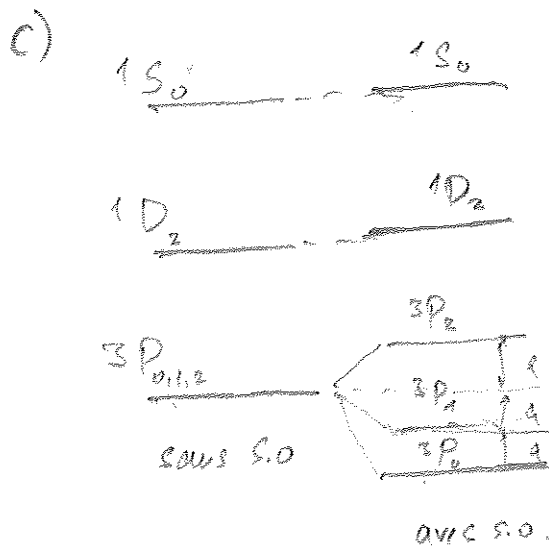
e^- equivalents: L et S pair seulement

Hund: $3P < 1D < 1S$

b) base couplée: $|L, S, J, M_J\rangle$

$$\begin{aligned} \Delta E &= a \langle L S J M_J | \vec{L} \cdot \vec{S} | L S J M_J \rangle \\ &= \frac{a}{2} \langle L S J M_J | \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 | L S J M_J \rangle \\ &= \frac{a}{2} \cdot \hbar^2 (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \end{aligned}$$

- $3P_0: \Delta E = -2a$
- $3P_1: \Delta E = -a$
- $3P_2: \Delta E = a$
- $1D_2: \Delta E = 0$
- $1S_0: \Delta E = 0$



d)

$$\Delta E_z = \omega_0 g_J M_J$$

$3P_0: \Delta E_z = 0$

$3P_1: \Delta E_z = \frac{3}{2} \omega_0 M_J, M_J = 0, \pm 1$

$3P_2: \Delta E_z = \frac{3}{2} \omega_0 M_J, M_J = 0, \pm 1, \pm 2$

$1D_2: \Delta E_z = \frac{7}{6} \omega_0 M_J, M_J = 0, \pm 1, \pm 2$

$1S_0: \Delta E_z = 0$

e) $1S_0, 3S_1, 1P_1, 3P_{0,1,2}, 1D_2, 3D_{1,2,3}$: $2e^- p$, non equivalents

1. Les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique sont donnés par (4.2.26), à savoir :

$$E_n = \hbar \omega_v \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

avec $\omega_v = (k/m)^{1/2}$. Les niveaux d'énergie rotationnels sont donnés par (6.4.8), soit :

$$E_l = \hbar^2 l(l+1)/2I \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

où $I = \mu r^2$, μ étant la masse réduite de la molécule. Les niveaux d'énergie de vibration-rotation sont donc :

$$E_{n,l} = \hbar \omega_v \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad (4)$$

On obtient un diagramme des niveaux schématisé sur la figure 14.11. Les niveaux rotationnels sont espacés proportionnellement à 2, 6, 12, 20, par rapport au niveau $l = 0$.

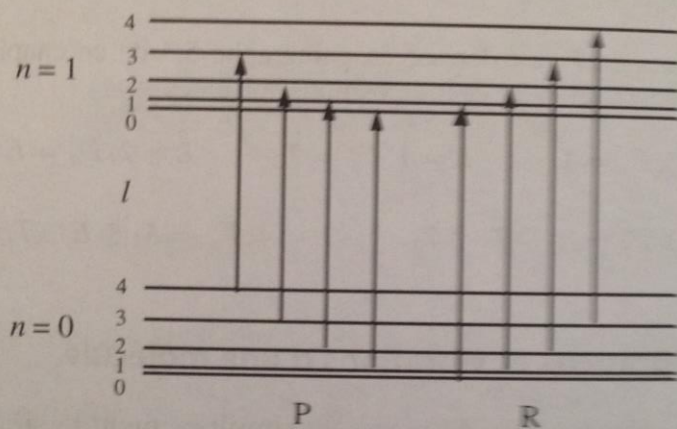


Figure 14.11

2. Pour $\Delta n = 1$ et $\Delta l = 1$, les fréquences ν des transitions $n = 0 \rightarrow n = 1$ sont telles que :

$$h\nu_+ = E_{1,l+1} - E_{0,l} = \hbar \omega_v + \hbar^2(l+1)/I \quad ; \quad l = 0, 1, 2, 3, 4 \quad (5)$$

Le groupe des transitions correspondant à $\Delta l = 1$ est appelé la *branche R* du spectre. C'est le nombre quantique rotationnel de l'état inférieur qui sert à désigner les raies de la *branche R*.

Dans le cas $\Delta n = 1$ et $\Delta l = -1$, on obtient :

$$h\nu_- = E_{1,l} - E_{0,l+1} = \hbar \omega_v - \hbar^2(l+1)/I \quad ; \quad l = 0, 1, 2, 3, 4 \quad (6)$$

Ce groupe de raies forme la *branche P* du spectre. Pour quelques molécules, des transitions correspondant à $\Delta l = 0$ sont également permises. Lorsqu'il existe, ce groupe de raies forme la *branche Q*.