

1. Question de cours

Stem-Gerlach: • deflexion d'un jet d'atomes par un champ magnétique inhomogène

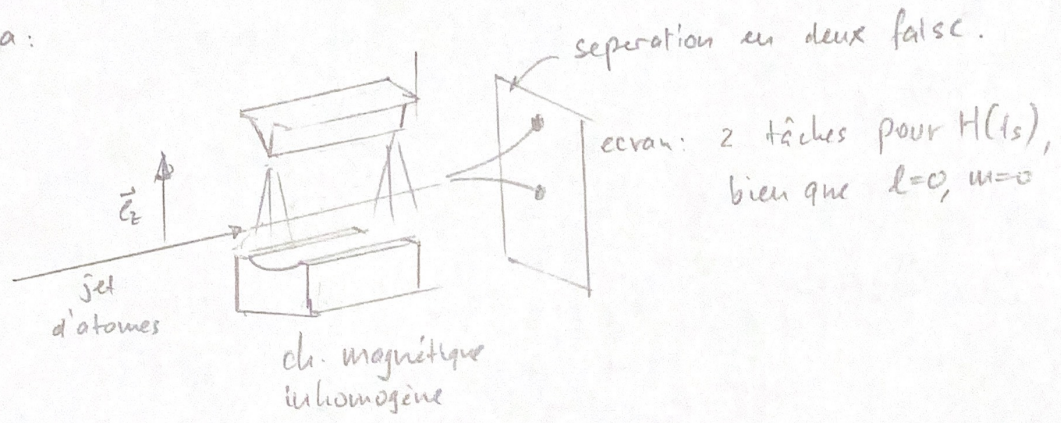
• interaction: $W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, $\vec{\mu}$ mom. magnétique
pour $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ $W = -\mu_z \cdot B_z$

• pour mom. magnétique associé au mvnt orb.
 $\mu_z \sim L_z$ ($\mu_z = -\frac{\mu_B}{\hbar} L_z$)

• force: $F_z = -\frac{\partial W}{\partial z} \sim L_z$ donc $\sim m$,
avec l entier $\Rightarrow m$ entier
pour état $1s \Rightarrow m=0$, pas de deflexion

• mais résultat St-G: separation en 2 raies

schéma:



2. Systèmes hydrogénoïdes et effet de taille fini des noyaux

(2)

$$\begin{aligned}
 a) \langle r \rangle_{1s} &= \int_0^{\infty} r^2 R_{10}^2(r) dr = 4 \int_0^{\infty} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}} dr \quad \text{avec: } x = \left(\frac{Zr}{a_0}\right), \quad dr = \left(\frac{a_0}{Z}\right) dx \\
 &= \left(\frac{4a_0}{Z}\right) \int_0^{\infty} x^3 e^{-2x} dx \\
 &= \left(\frac{4a_0}{Z}\right) \left(\frac{3!}{2^4}\right) = \frac{3}{2} \left(\frac{a_0}{Z}\right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle r \rangle_{2s} &= \int_0^{\infty} r^2 R_{20}^2(r) dr = 4 \int_0^{\infty} \left(\frac{Zr}{2a_0}\right)^3 \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr \quad x = \frac{Zr}{2a_0}, \quad dr = \frac{2a_0}{Z} dx \\
 &= \left(\frac{8a_0}{Z}\right) \int_0^{\infty} x^3 (1-x)^2 e^{-2x} dx \\
 &= \left(\frac{8a_0}{Z}\right) \int_0^{\infty} (x^3 - 2x^4 + x^5) e^{-2x} dx \\
 &= \left(\frac{8a_0}{Z}\right) \left(\frac{3!}{2^4} - 2 \cdot \frac{4!}{2^5} + \frac{5!}{2^6}\right) \\
 &= \left(\frac{8a_0}{Z}\right) \left(\frac{6 - 24 + 30}{16}\right) = 6 \left(\frac{a_0}{Z}\right)
 \end{aligned}$$

$$b) H_{eff} = T - \frac{Ze^2}{r} + V(r) \quad \text{avec } V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } r > r_0 \\ -\frac{Ze^2}{r} + \frac{Zc^2}{r_0} & \text{pour } r \leq r_0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
 c) \Delta E_{eff} &= \int_0^{r_0} W(r) r^2 R_{nl}^2(r) dr = \frac{Ze^2}{r_0} \int_0^{r_0} r^2 R_{nl}^2(r) dr + Ze^2 \int_0^{r_0} r R_{nl}^2(r) dr \\
 &\approx \left(\frac{Ze^2}{r_0}\right) R_{nl}^2(r_0) \int_0^{r_0} r^2 dr + Ze^2 R_{nl}^2(r_0) \int_0^{r_0} r dr \\
 &= R_{nl}^2(r_0) \left(-\frac{Ze^2}{r_0} \cdot \frac{r_0^3}{3} + Ze^2 \cdot \frac{r_0^2}{2}\right) = R_{nl}^2(r_0) \frac{Ze^2 r_0^2}{6}
 \end{aligned}$$

$$\text{donc pour } 1s: \Delta E_{eff}(1s) = 4 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{Ze^2 r_0^2}{6} = \frac{8}{6} \left(\frac{Zr_0}{a_0}\right)^2 \frac{Ze^2}{2a_0} = \frac{8}{6} \left(\frac{Zr_0}{a_0}\right)^2 Z^2 R_{10}$$

$$\text{donc pour } 2s: \Delta E_{eff}(2s) = \frac{1}{4} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{Ze^2 r_0^2}{6} = \frac{1}{24} \left(\frac{Zr_0}{a_0}\right)^2 \frac{Ze^2}{2a_0} = \frac{1}{24} \left(\frac{Zr_0}{a_0}\right)^2 Z^2 R_{20}$$

$$\text{donc pour } 2p: \Delta E_{eff}(2p) = 0$$

d) • seul les états "s" sont modifiés, car $R_{nl}(r_0) = 0$ pour $l \neq 0$

• plus l'électron est proche du noyau, plus l'état est affecté

(voir résultat (a)), $\Delta E_{eff}(1s) > \Delta E_{eff}(2s)$

• la dég du modèle de Bohr pour 2s, 2p est levée par la part.

3. Atome d'hydrogene (avec spin de l'electron) et corr relativistes

- a) pour $n=3$, on a :
- $l=0, m=0, m_s = \pm 1/2$
 - $l=1, m=0, \pm 1, m_s = \pm 1/2$
 - $l=2, m=0, \pm 1, \pm 2, m_s = \pm 1/2$

base decouplee :

$$\left. \begin{aligned} |n=3, l=0, m=0; s=1/2, m_s = \pm 1/2 \rangle & \quad (2) \\ |n=3, l=1, m=0, \pm 1, s=1/2, m_s = \pm 1/2 \rangle & \quad (6) \\ |n=3, l=2, m=0, \pm 1, \pm 2, s=1/2, m_s = \pm 1/2 \rangle & \quad (10) \end{aligned} \right\} (12)$$

pour $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$, on a :

- $l=0, s=1/2 \Rightarrow j=1/2$
- $l=1, s=1/2 \Rightarrow j=1/2, 3/2$
- $l=2, s=1/2 \Rightarrow j=3/2, 5/2$

base couplee :

$$\left. \begin{aligned} |n=3, l=0, s=1/2, j=1/2, m_j = \pm 1/2 \rangle & \quad 3s_{1/2} \quad (2) \\ |n=3, l=1, s=1/2, j=1/2, m_j = \pm 1/2 \rangle & \quad 3p_{1/2} \quad (2) \\ |n=3, l=1, s=1/2, j=3/2, m_j = \pm 3/2, \pm 1/2 \rangle & \quad 3p_{3/2} \quad (4) \\ |n=3, l=2, s=1/2, j=3/2, m_j = \pm 3/2, \pm 1/2 \rangle & \quad 3d_{3/2} \quad (4) \\ |n=3, l=2, s=1/2, j=5/2, m_j = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2 \rangle & \quad 3d_{5/2} \quad (6) \end{aligned} \right\} (18)$$

b) $H_{so} = A_{nl} (\vec{l} \cdot \vec{s}) = \frac{A_{nl}}{2} (j^2 - l^2 - s^2)$, base adoptee : base couplee

$\Delta E_{so} = \langle n l s j m_j | H_{so} | n l s j m_j \rangle$

$l=0$: $\Delta E_{so} (3s_{1/2}) = \frac{A_{30}}{2} (\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 0 - \frac{3}{4}) = 0$

$l=1$:

- $\Delta E_{so} (3p_{1/2}) = \frac{A_{31}}{2} (\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 1 \cdot 2 - \frac{3}{4}) = -A_{31} = -(\frac{1}{54}) (m c^2 \alpha^4) (\frac{1}{3}) = -9 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$
- $\Delta E_{so} (3p_{3/2}) = \frac{A_{31}}{2} (\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - 1 \cdot 2 - \frac{3}{4}) = \frac{1}{2} A_{31} = 4.5 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$

$l=2$:

- $\Delta E_{so} (3d_{3/2}) = \frac{A_{32}}{2} (\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - 2 \cdot 3 - \frac{3}{4}) = -\frac{3}{2} A_{32} = -(\frac{3}{2}) (\frac{1}{54}) (m c^2 \alpha^4) (\frac{1}{5}) = -2.6 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$
- $\Delta E_{so} (3d_{5/2}) = \frac{A_{32}}{2} (\frac{5}{2} \cdot \frac{7}{2} - 2 \cdot 3 - \frac{3}{4}) = A_{32} = (\frac{1}{54}) (m c^2 \alpha^4) (\frac{1}{5}) = 1.1 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$

c) $\Delta E_{sf} (3s_{1/2}) = (\frac{1}{54}) (m c^2 \alpha^4) \cdot (\frac{1}{4} - 1) = -\frac{1}{72} (m c^2 \alpha^4) = -2 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$

$\Delta E_{sf} (3p_{1/2}) = -1 \cdot \dots = -2 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$

$\Delta E_{sf} (3p_{3/2}) = (\frac{1}{54}) (m c^2 \alpha^4) (\frac{1}{4} - \frac{1}{2}) = -\frac{1}{108} (m c^2 \alpha^4) = -1,34 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$

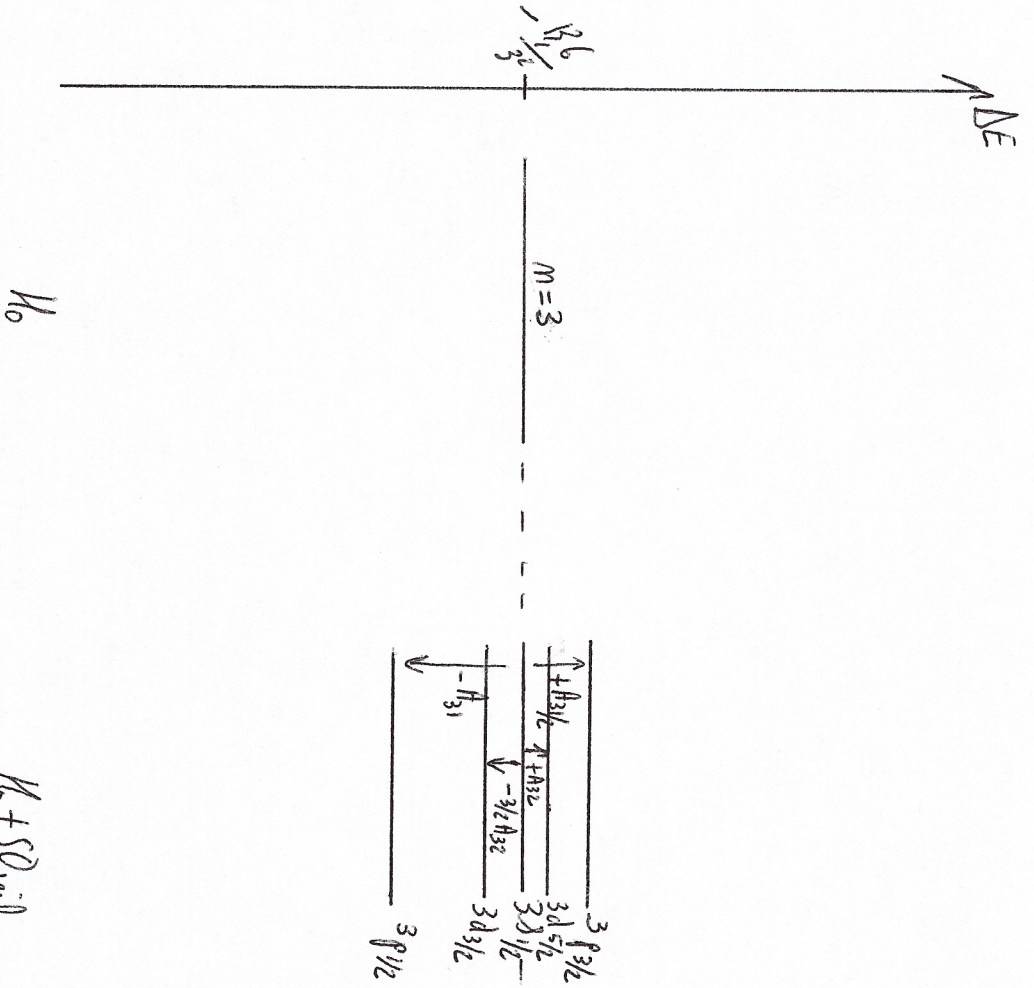
$\Delta E_{sf} (3d_{3/2}) = -1 \cdot \dots = -1,34 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$

$\Delta E_{sf} (3d_{5/2}) = (\frac{1}{54}) (m c^2 \alpha^4) (\frac{1}{4} - \frac{1}{3}) = -\frac{1}{648} (m c^2 \alpha^4) = -2,2 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$

d) voir feuille suivante

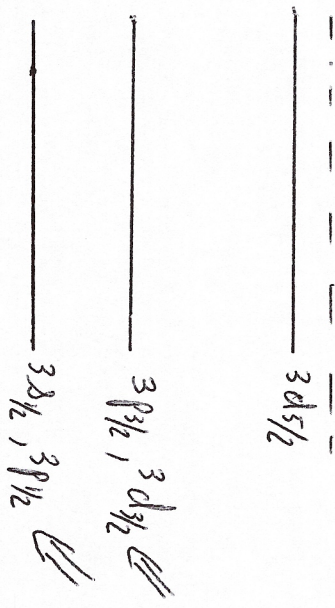
$\frac{3}{12} - \frac{4}{12} = -\frac{1}{12}$

d) *Störpa energetique*



$N_0 + SD_{\text{pas}}$

$N_0 + SF_{\text{global}}$



Lesse possible de ces.