Questions de cours

• $$\vec{\mu_e} = -\mu_B \frac{\vec{l}}{\hbar}$$ μ_B défini >0

$$\mu_B = \frac{|q_e|\hbar}{2m_e}$$

Energie d'interaction $W = -\vec{\mu_e}\cdot\vec{B}$,

2. Systèmes hydrogenoïdes et effet de taille fini des noyaux

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

$$= \left(\frac{4a_0}{Z}\right)\int_0^\infty x^3 e^{-2x}\,dx$$

$$= \left(\frac{4a_0}{Z}\right)\left(\frac{3!}{2^4}\right) = \frac{3}{2}\left(\frac{a_0}{Z}\right)$$

$$\langle r\rangle_{2s} = \int_0^\infty r^3 R_{20}^2(r)\,dr = 4\int_0^\infty \left(\frac{Zr}{2a_0}\right)^3\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}}\,dr$$ $x = \frac{Zr}{2a_0}$, $dr = \frac{2a_0}{Z}dx$

$$= \left(\frac{8a_0}{Z}\right)\cdot\int_0^\infty x^3(1-x)^2 e^{-2x}\,dx$$

$$= \left(\frac{8a_0}{Z}\right)\int_0^\infty (x^3-2x^4+x^5)\,e^{-2x}\,dx$$

$$= \left(\frac{8a_0}{Z}\right)\left(\frac{3!}{2^4} - 2\cdot\frac{4!}{2^5} + \frac{5!}{2^6}\right)$$

$$= \left(\frac{8a_0}{Z}\right)\left(\frac{6-24+30}{16}\right) = 6\left(\frac{a_0}{Z}\right)$$

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

c) $$\Delta E_{tf} = \int_0^\infty W(r) r^2 R_{nl}^2(r)\,dr = \frac{Ze^2}{r_0}\int_0^{r_0} r^2 R_{nl}^2(r)\,dr + Ze^2\int_0^{r_0} r R_{nl}^2(r)\,dr$$

$$\approx \left(\frac{Ze^2}{r_0}\right)R_{nl}^2(r_0)\int_0^{r_0} r^2\,dr + Ze^2 R_{nl}^2(r=0)\int_0^{r_0} r\,dr$$

$$= R_{nl}^2(r=0)\left(-\frac{Ze^2}{r_0}\cdot\frac{r_0^3}{3} + Ze^2\cdot\frac{r_0^2}{2}\right) = R_{nl}^2(r=0)\,\frac{Ze^2 r_0^2}{6}$$

$$R_y = \frac{e^2}{2a_0}$$

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

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

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

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)), $\Delta E_{tf}(1s) > \Delta E_{tf}(2s)$

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

Effet Stark

a. $W_S = -\vec{D}.\vec{\mathcal{E}} = q\,z\,\mathcal{E} = q\,\mathcal{E}\,r\,\cos\theta$

$\langle n\ell, m_\ell | H_0 | n\ell', m'_\ell\rangle = E_n\,\delta_{\ell,\ell'}\,\delta_{m_\ell,m'_\ell}$

$\langle n\ell, m_\ell | W_S | n\ell', m'_\ell\rangle \equiv q\,\mathcal{E}\,\langle R_{n,\ell}|r|R_{n,\ell'}\rangle\,\langle Y_\ell^{m_\ell}|\cos\theta|Y_{\ell'}^{m'_\ell}\rangle$

$\langle Y_0^0|\cos\theta|Y_0^0\rangle = 0;\quad \langle Y_1^{m_\ell}|\cos\theta|Y_1^{m'_\ell}\rangle = 0$

$\langle Y_0^0|\cos\theta|Y_1^{\pm 1}\rangle = 0;\quad \langle Y_0^0|\cos\theta|Y_1^0\rangle = 1/\sqrt{3}$

$\langle R_{2,0}|r|R_{2,1}\rangle = -3\,a_0\,\sqrt{3}$

$\langle 2s|W_S|2s\rangle = 0;\quad \langle 2p|W_S|2p\rangle = 0$

$\langle 2s|W_S|2p, m_\ell = \pm 1\rangle = 0;\quad \langle 2s|W_S|2p, m_\ell = 0\rangle = -3\,a_0\,q\,\mathcal{E}$ ....

$\hbar\omega_S = 3\,a_0\,q\,\mathcal{E} = 2,5 \times 10^{-27}\,\mathrm{J} = 1,6 \times 10^{-8}\,\mathrm{eV}$

$\omega_S = 2,5 \times 10^{-27}\,\mathrm{J}/1,054 \times 10^{-34}\,\mathrm{Js} = 2,4 \times 10^{7}\,\mathrm{s}^{-1}$ ....

b. 4 états. Les états $|2p, m_\ell = \pm 1\rangle$ sont états propres dégénérés de $H_0 + W_S$ avec valeur propre :

$\langle 2p, m_\ell = \pm 1|(H_0 + W_S)|2p, m_\ell\rangle = E_2$

$E_2 = -Ry/4 = -5,45 \times 10^{-19}\,\mathrm{J} = -3{,}4\,\mathrm{eV}$. ....

Les deux autres états propres résultent de la diagonalisation de la matrice $H_0 + W_S$ dans le sous-espace 2x2 des états $|2s\rangle$ et $|2p, m_\ell = 0\rangle$:

$|\psi_+\rangle = (1/\sqrt{2})\,[|2s\rangle + |2p, m_\ell = 0\rangle]\,;\quad E_+ = E_2 - \hbar\omega_S$ ....

$|\psi_-\rangle = \left[1/\sqrt{2})\,(|2s\rangle - |2p, m_\ell = 0\rangle\right]\,;\quad E_- = E_2 + \hbar\omega_S$ ....