

15/06/2020

Corrigé TD 4 (Série A)

Atome à plusieurs électrons

Exercice 1:

1. Les termes spectraux du niveau $l=1, S=\frac{1}{2}$.

Le terme spectral est défini par:

$$2S+1 \quad L \quad J$$

avec:

l : nombre quantique orbital

S : nombre quantique du spin

J : nombre quantique total

$|l-S| \leq J \leq l+S$

Donc: $l=1, S=\frac{1}{2} \Rightarrow \frac{1}{2} \leq J \leq \frac{3}{2}$

$\Rightarrow J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ est P

$l=1 \Rightarrow$ l'état atomique est P

$2S+1 \Rightarrow 2 \times \frac{1}{2} + 1 = 2$ ①

Les termes spectraux possible sont:

$${}^2P_{\frac{1}{2}}, {}^2P_{\frac{3}{2}}$$

2. Le nombre quantique total J :

Or le terme spectral ${}^2D \Rightarrow$ l'état atomique est D \Rightarrow le nombre quantique orbital $l=2$.

$$\text{et } 2S+1=2 \Rightarrow S=\frac{1}{2}$$

$$\bullet |k-S| \leq J \leq k+S \Rightarrow \frac{3}{2} \leq J \leq \frac{5}{2}$$
$$\Rightarrow J = \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \Rightarrow {}^2D_{\frac{3}{2}}, {}^2D_{\frac{5}{2}}$$

3. Termes spectraux P^1P^1 :

$P^1P^1 \Rightarrow$ dans cet atome on a deux électrons, le premier sur une sous couche P et le second est aussi sur une sous couche P.

1^{ere} e⁻: sous couche P $\Rightarrow l_1=1, s_1=\frac{1}{2}$ (spin d'électron $s=\frac{1}{2}$)

2^{eme} e⁻: sous couche P $\Rightarrow l_2=1, s_2=\frac{1}{2}$.

on cherche S, L et J \Rightarrow on a: $|l_1-l_2| \leq L \leq l_1+l_2$
(voir le cours) ②

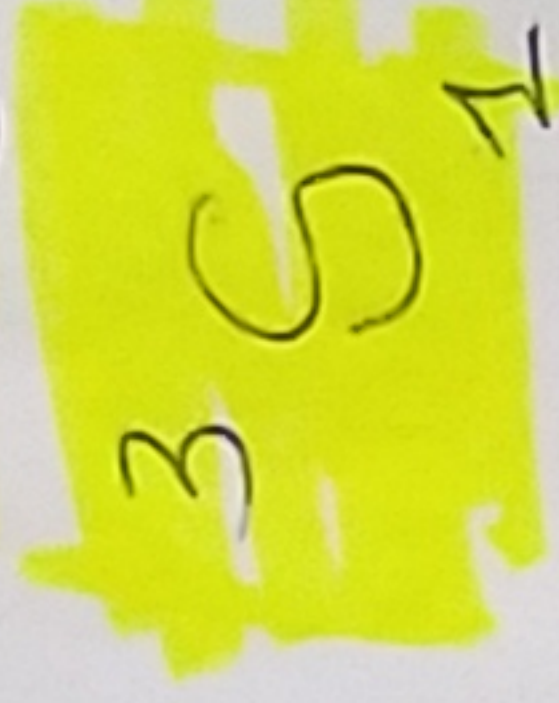
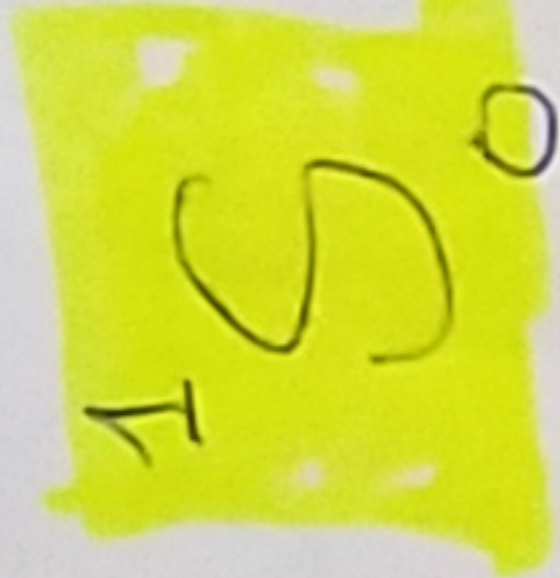
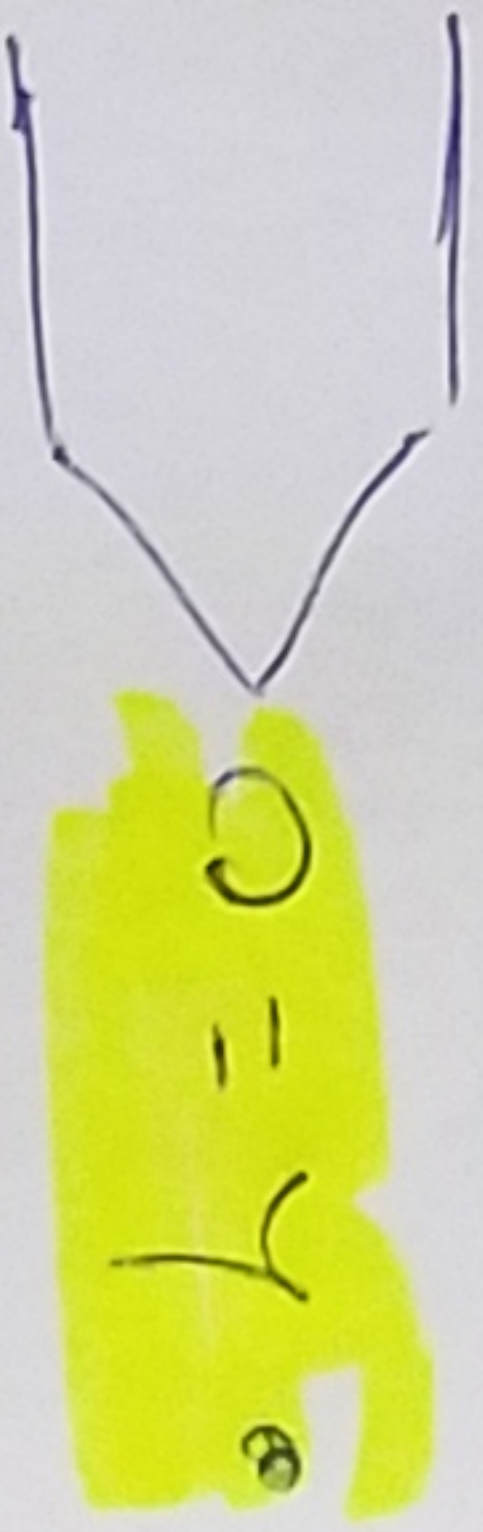
$$\Rightarrow 0 \leq l \leq 2 \Rightarrow L = 0, 1, 2.$$

et la même manière pour le spin total

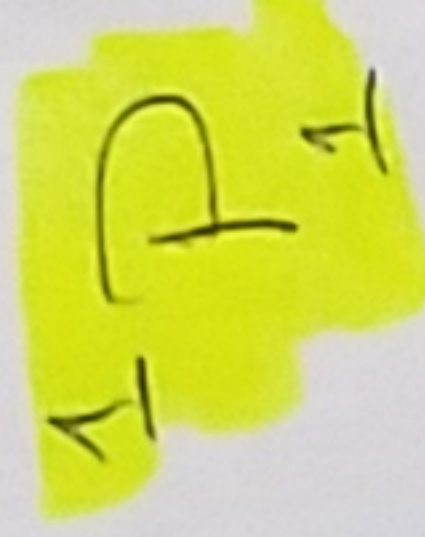
$$|\Delta_1 - \Delta_2| \leq S \leq \Delta_1 + \Delta_2 \Rightarrow 0 \leq S \leq 1$$

$$\Rightarrow S = 0, 1.$$

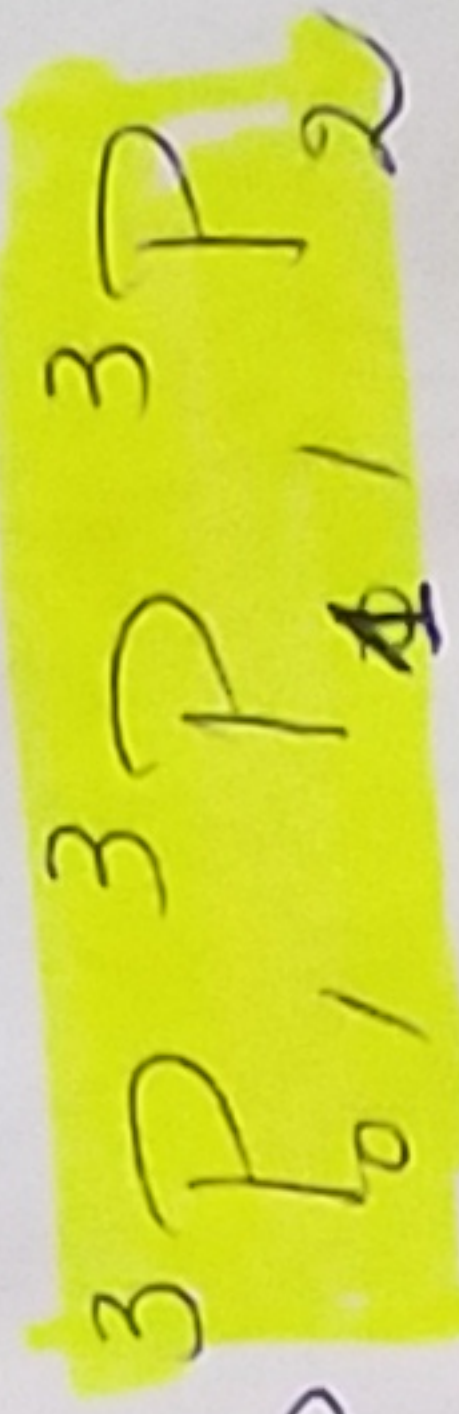
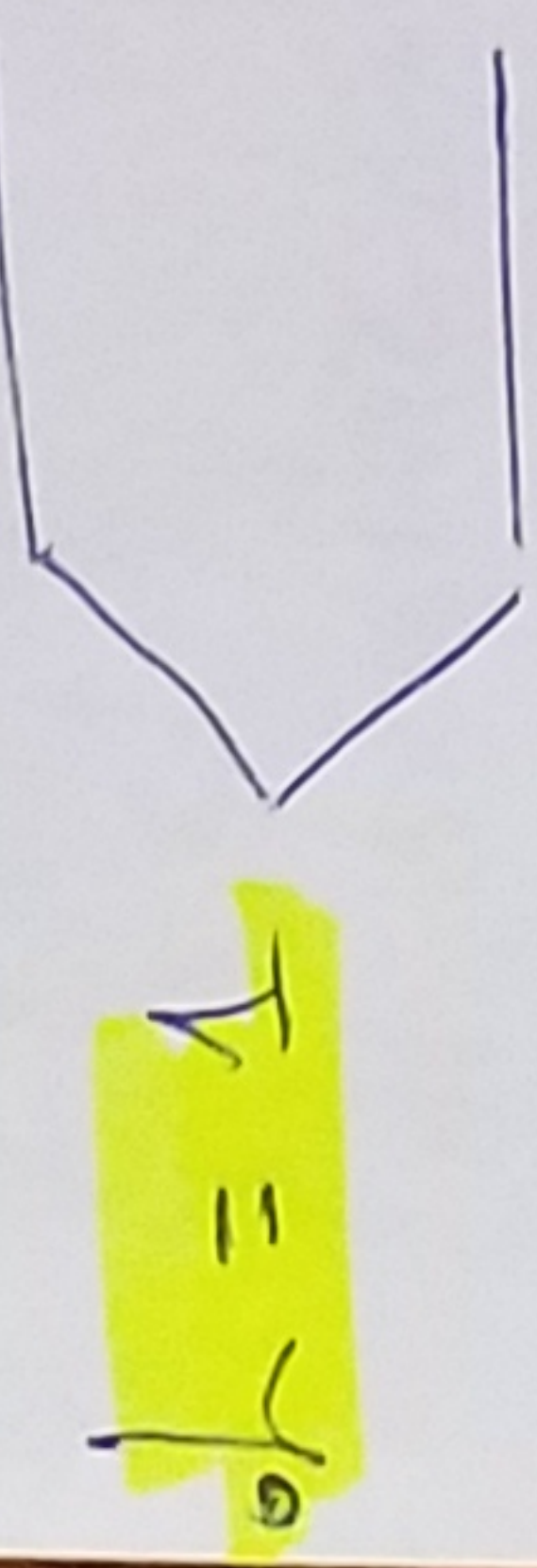
$$S = 0 \Rightarrow \Upsilon = 0 \Rightarrow$$



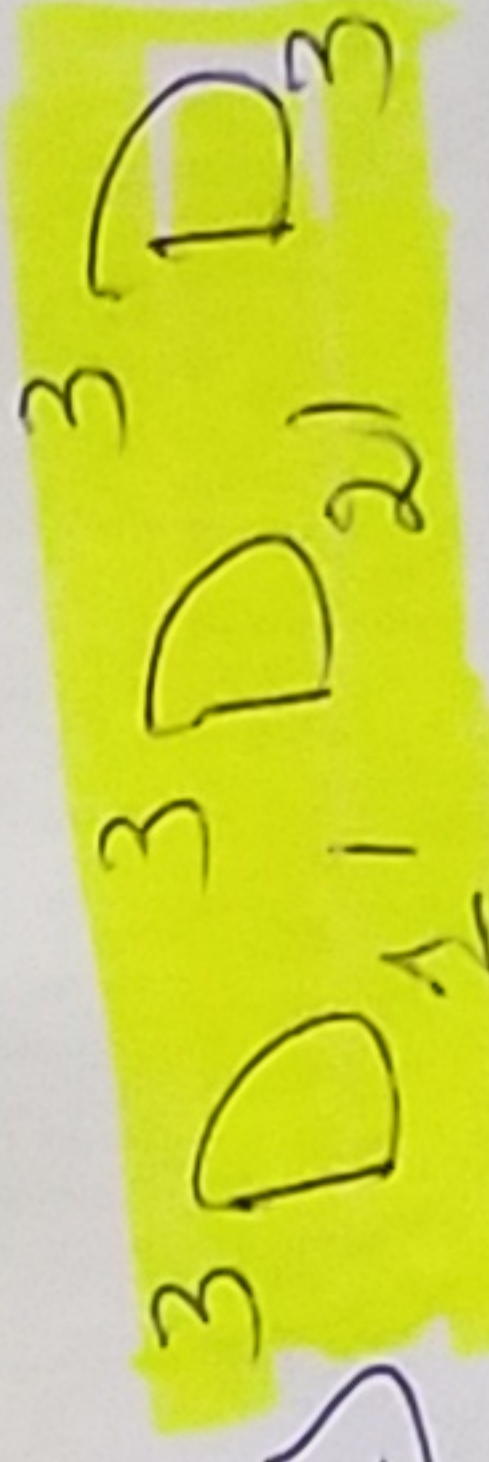
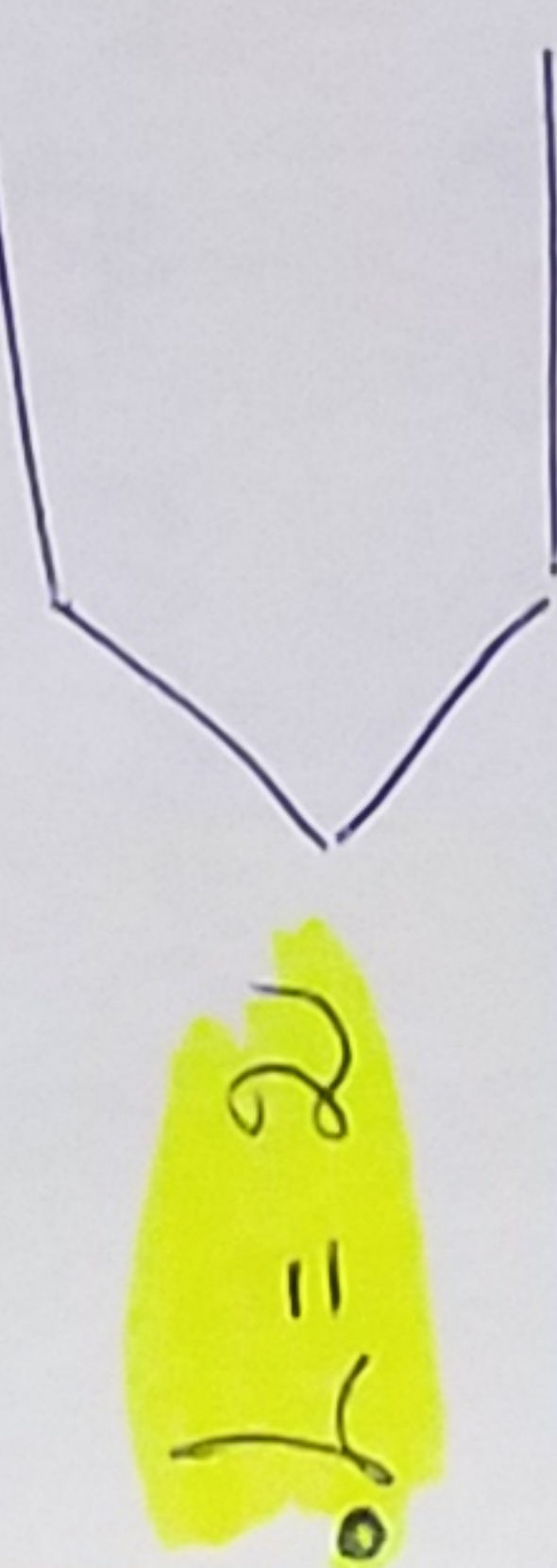
$$S = 1 \Rightarrow \Upsilon = 1 \Rightarrow$$



$$S = 0 \Rightarrow \Upsilon = 1 \Rightarrow$$



$$S = 0 \Rightarrow \Upsilon = 2 \Rightarrow$$



$$S = 1 \Rightarrow \Upsilon = 1, 2, 3 \Rightarrow$$

Exercice 2:

1. L'Hamiltonien de l'atome Lithium $Z=3$

$$H = E_c + E_p$$

on prend uniquement les interactions électrostatiques

entre les électrons et noyau et entre les électrons eux.

(3)

Dans ce cas, le Hamiltonien est devient:

$$H = \sum_{i=1}^3 H_i = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_3} \nabla_3^2 \right)}_{\text{Energie cinétique}} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{13}} - \frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{23}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{13}}$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{23}}$$

2] L'énergie dans ce cas dépend de n et $l \Rightarrow E_{n,l}$

(m : nombre quantique principal.)

(l : nombre quantique orbital.)

$$E_{li}(m,l) = - \frac{Z_{\text{eff}}^2 \cdot 13,6}{n^2}$$

L'énergie est donnée par:

Z_{eff} : représente la charge effective (Méthode de Slater)

3] La fonction d'onde de l'atome Li

La fonction d'onde est:

$$\psi_{li} = \psi_{li}^r(r_1, r_2, r_3) \cdot \psi_{li}^{\theta, \phi}(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \theta_3, \phi_3) \cdot \psi_{li}^z(z_1, z_2, z_3) \cdot \psi_{li}^y(y_1, y_2, y_3) \cdot \psi_{li}^x(x_1, x_2, x_3)$$

(voir le cours.)

(A)

La constante de Slater et la charge effective Z_{eff}

la configuration électronique de l'atome Lithium $Z=3$

$$\text{Li } (Z=3): 1s^2 2s^1$$

D'après Slater, on a deux groupes

$$N_{hi} = n_{1s} + n_{2s} \quad (\text{a la constante de Slater ou la constante d'écran})$$

• électron $1s$: un électron $1s$ est écranté par l'autre

$$\text{électron } 1s: N_{1s} = 1 \times 0,31 = 0,31$$

• électron $2s$: 1 électron $2s$ est écranté par 2 électrons

$$N_{2s} = 2 \times 0,85 = 1,7$$

$$\Rightarrow N_{hi} = 0,31 + 1,70 = 2,01$$

représente la constante d'écran ou Slater totale de l'atome Li .

La charge effective:

$$\text{trav: } Z_{\text{eff}} = Z - \sum_{i=1}^2 a_i$$

$$Z_{\text{eff}} = 3 - a_{1s} - a_{2s}$$

$$Z_{\text{eff}} = 3 - 2,01 = 0,99$$

$$Z_{\text{eff}} = 0,99$$

⑥