

Travaux dirigés - Physique Atomique (2016-2017)

4 : Atomes à deux électrons

FK

Mercredi 21 septembre 2016

1 Estimation simple de l'énergie de liaison d'atomes à deux électrons

- Ecrire l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hélium et indiquer la signification physique de chacun des termes
- On néglige tout d'abord l'interaction entre les deux électrons. Calculer l'énergie de l'état fondamental de He. Comparer à la valeur expérimentale -79.0 eV. Même chose pour l'ion C^{4+} (valeur expérimentale -882 eV). Expliquer pourquoi l'erreur relative est plus faible dans le cas du carbone. Calculer l'énergie de première ionisation dans les deux cas
- Calculer l'énergie de répulsion entre les électrons de l'hélium à partir des données précédentes et comparer avec une estimation faite à partir d'un modèle de type Bohr.

2 Spin d'une paire d'électrons

- Soit \vec{S} la somme des spins de 2 électrons, calculer l'action des opérateurs S_z et \vec{S}^2 sur les fonctions de spin $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\rangle$. On rappelle que dans le cas d'un électron, dans la base naturelle des spins, S_x est représenté par la matrice $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ et S_y par la matrice $\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
- Identifier les fonctions propres des opérateurs
- Parmi ces fonctions, lesquelles sont physiquement acceptables ?
- Construire à partir de ces quatre fonctions une base mieux adaptée.

3 Etats excités des atomes à deux électrons

L'utilisation de la théorie de perturbation pour l'évaluation de l'influence du potentiel d'interaction entre les deux électrons conduit à deux termes correctifs pour l'énergie, appelés respectivement intégrale de Coulomb directe et intégrale d'échange. On considère un atome dans un état $1s2n$.

- A partir des fonctions d'onde individuelle de chacun des électrons, construire une fonction d'onde symétrique et une fonction d'onde antisymétrique pour la paire. Construire les fonctions d'onde complètes en ajoutant le spin
- A partir d'une analyse perturbative donner l'expression intégrale de la différence d'énergie entre les deux états dit *para* et *ortho*. Le calcul pour $1s2p$ donne 0.21 eV
- Faite une estimation de l'énergie d'un état simplement excité en utilisant l'hypothèse d'écrantage et comparer aux valeurs expérimentales données dans le tableau ci-dessous.
- A partir des données du tableau, calculer les valeurs de l'intégrale directe (J) et de l'intégrale indirecte (K) introduite dans l'étude perturbative et commenter les résultats.

config.	Term	E (eV)
$1s^2$	1S	-24,588
$1s2s$	3S	-4,769
$1s2s$	1S	-3,972
$1s2p$	3P	-3,624
$1s2p$	1P	-3,370
$1s3s$	3S	-1,870
$1s3s$	1S	-1,668
$1s3p$	3P	-1,581
$1s3p$	1P	-1,501
$1s3d$	3D	-1,5139
$1s3d$	1D	-1,5143

FIGURE 1 – Niveaux d'énergie par rapport au niveau fondamental de H^+

4 Autoionisation de l'hélium

Un atome d'hélium est excité par absorption de lumière du niveau fondamental vers le niveau $2s4p$.

- Déterminer la longueur d'onde de la lumière utilisée en faisant une estimation de l'énergie du niveau de départ
- Trouver la vitesse de l'électron émis lorsque l'atome s'autoionise en un ion H^+ dans son état fondamental.