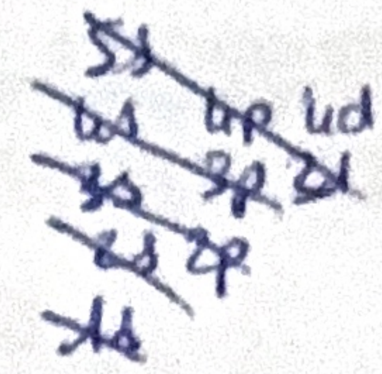
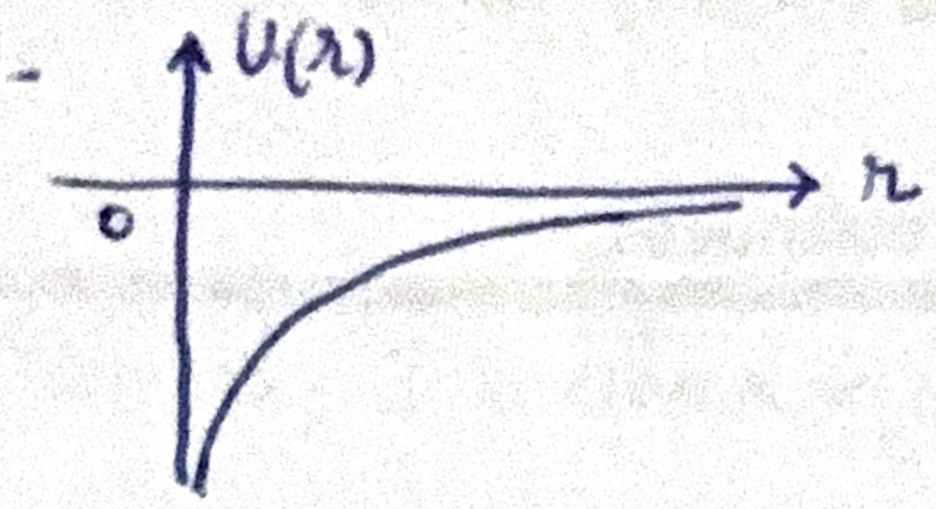
Atomes de Rydberg circulaires



1). $[Rb] : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 (5s^1)$

Rb est ds la 1ère colonne de la CPE

↳ Rb ∈ à la famille des alcalins

2). 

$U(r) < 0$

$\vec{F} = -\underbrace{\frac{dU}{dr}}_{<0} \vec{u_r}$ F° attractive exercée par le "noyau" ↳ écranté par les e⁻ de ♡ sur l'e- de valence

3). quand $r \to 0$ aucun e- de ♡ n'écrante la charge du noyau

$\to Z(r\to 0) = Z$

quand $r \to +\infty$ $\underbrace{\text{tous les e- de ♡}}_{= \text{les } (Z-1) \text{ e- de ♡}}$ écrante la charge du noyau

$\to Z(r \to +\infty) = Z - (Z-1) = 1$

4). analyse dim° $[a_0] = L$ $[\hbar] = [E_{P\acute{e}lec}] . T = \frac{[Q^2] . T}{[4\pi\varepsilon_0] . L} = \frac{[Q^2]}{[\varepsilon_0] . L} . T$ (↳ J.s)

$[\hbar] = M . L^2 . T^{-2} . T = M . L^2 . T^{-1}$ (en J.s)

$[q] = \frac{[Q^2]}{[\varepsilon_0]}$ et $[m_e] = M$

$[\hbar] = [\text{énergie}] . T$

$[q] = [\text{énergie}] . L$

$[\text{énergie}] = M . L^2 . T^{-2} \Leftrightarrow M = [\text{énergie}] . L^{-2} . T^2$

$\Big\} [q] . M = [\text{énergie}]^2 . T^2 . L^{-1}$

$[a_0] = L = \frac{[\hbar^2]}{M^a . [q]} \to \alpha = 2 \quad \beta = -1 \quad \gamma = -1.$

$a_0 = \hbar^2 q^{-1} m_e^{-1} = \frac{\hbar^2}{q m_e} = 5{,}26 . 10^{-11} m$

5). e- excité donc r élevé $\Rightarrow Z = 1$ d'où $U(r) = -\frac{q}{r}$

6). syst $\{e^-\}$ étudié ds $\mathcal{R}$ lié au noyau galiléen

BdF : $\vec F = -\vec{grad}\, U = -\frac{q}{r^2}\vec{u_r}$ avec $\vec{u_r} = \frac{\vec{OM}}{r}$ O centre du noyau.

LMC / à O fixe ds $\mathcal{R}$: $\frac{d\vec{\mathcal{L}}}{dt} = \vec{\mathcal{M}}_O(\vec F) = \vec{OM}\wedge\vec F = \vec 0$

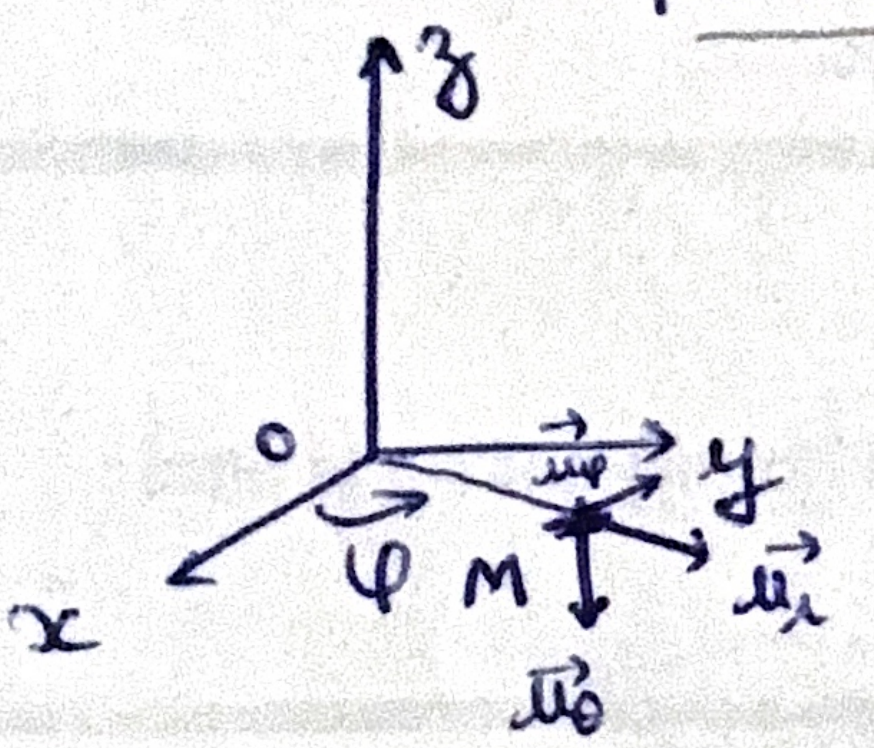
ainsi $\boxed{\vec{\mathcal{L}} = \vec{cst}}$

On a $\vec{\mathcal{L}} = \vec{OM}\wedge m_e\vec v$ avec $\vec{\mathcal{L}} = \underbrace{m_e C}_{cst}\vec{u_z}$

ainsi $\forall t$ $\vec{OM} \in$ au plan $\perp$ $\vec{\mathcal{L}}//\vec{u_z}$ et contenant O.

$\Rightarrow$ le mvt de l'e- est plan

plan du mvt = plan $\perp$ $\vec{\mathcal{L}}//\vec{u_z}$ et contenant O = plan Oxy



$$\vec{\mathcal{L}} = r\vec{u_r}\wedge m_e\frac{d(r\vec{u_r})}{dt}$$
$$= r\vec{u_r}\wedge m_e(\dot r\vec{u_r} + r\dot\varphi\vec{u_\varphi})$$
$$= m_e r^2\dot\varphi\vec{u_z}$$

d'où $\boxed{\mathcal{L} = m_e r^2\dot\varphi}$

7). LPM : $\frac{dE_m}{dt} = P^{nc} = 0$ pas de forces non cons.

$\Rightarrow E_m = cste = E_c + E_p = \frac{1}{2}m_e v^2 + U(r)$

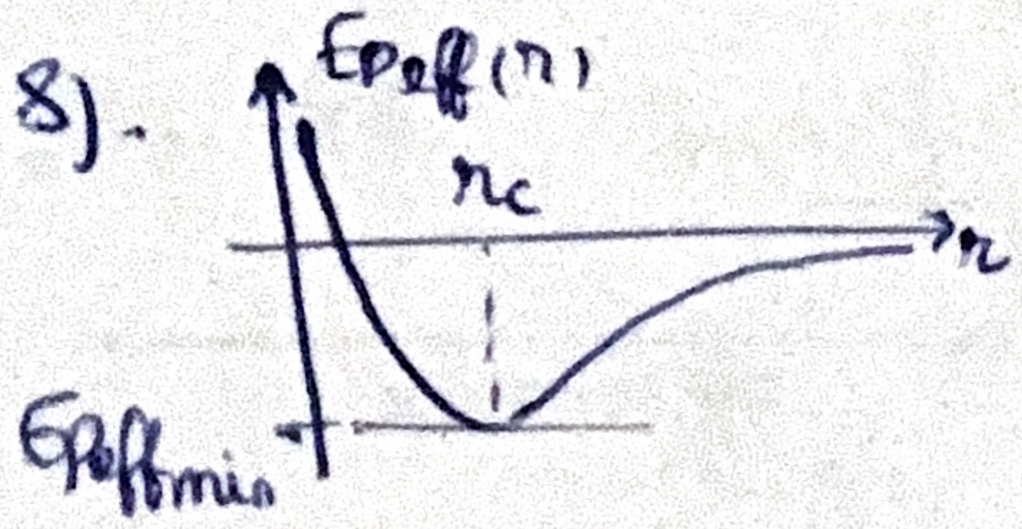
$\Leftrightarrow E_m = \frac{1}{2}m_e(\dot r^2 + r^2\dot\varphi^2) + U(r)$

on a $\boxed{\dot\varphi = \frac{\mathcal{L}}{m_e r^2}}$

$\Rightarrow E_m = \frac{1}{2}m_e\dot r^2 + \frac{1}{2}\cancel{m_e}\frac{\mathcal{L}^2}{m_e^{\cancel{2}} r^2} + U(r).$

$\Rightarrow \boxed{E_{peff}(r) = \frac{1}{2}\frac{\mathcal{L}^2}{m_e r^2} - \frac{q}{r}}$

8).



pour une trajectoire circulaire $r = r_c = cste \Rightarrow \dot r = 0$

$\Rightarrow E_m = E_{peff}(r_c)$

1 seule valeur de r accessible $r = r_c$

$\Rightarrow E_{peff}(r_c) = \min E_{peff}$.

On a r_c tel que $\frac{dEp_{eff}}{dr}(r_c) = 0$.

$$-2\frac{1}{2}\frac{\mathcal{L}^2}{m_e r_c^3} + \frac{q}{r_c^2} = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{\mathcal{L}^2}{m_e} = q r_c$$

$$\Leftrightarrow r_c = \frac{\mathcal{L}^2}{q \cdot m_e} \quad \text{avec } a_0 = \frac{\hbar^2}{q m_e} \Leftrightarrow \frac{1}{q m_e} = \frac{a_0}{\hbar^2}$$

ainsi $\boxed{r_c = \frac{\mathcal{L}^2}{\hbar^2} \cdot a_0}$.

9). On réinjecte $\Psi = \phi \cdot \chi$ ds l'éq^{e} de Schrödinger :

$$i\hbar \phi \cdot \frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\chi \Delta\phi - \frac{q}{r} \cdot \phi\chi.$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{i\hbar \frac{d\chi/dt}{\chi}}_{f^{c}\text{ de } t} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\Delta\phi}{\phi} - \frac{q}{r}}_{f^{c}\text{ de } r}$$

homogène à une énergie

$\mapsto$ énergie : cste commune

$$\Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{d\chi}{dt} = E \cdot \chi & \longrightarrow \frac{d\chi}{dt} + \frac{iE}{\hbar}\chi = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\phi - \frac{q}{r}\phi = E\phi & \end{cases}$$

$$\downarrow$$

$$\chi = \underset{\text{cste.}}{A} \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)$$

10). L'e⁻ ne s'échappe pas du noyau $\rightarrow$ état lié $\rightarrow E_m < 0$ } considérat^{o} classiques

$\rightarrow$ $E < 0$.

11). n nb quantique pal fixé

$\Rightarrow \ell \in [\![0, n-1]\!]$

12). Q7 $\quad E_m = \frac{1}{2}m_e \dot{r}^2 + \frac{1}{2}\frac{\mathcal{L}^2}{m_e r^2} - \frac{q}{r}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dr^2} \qquad \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_e r^2} \Rightarrow \boxed{\mathcal{L}^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)}.$$

$\mathcal{L}^2_{max} = \hbar^2 (n-1)n$ avec $n = 5$ pour l'e- le ⊕ excité de Rb.

13). $r_C = \frac{\mathcal{L}^2}{\hbar^2} a_0 \Rightarrow r_{C max} = n(n-1)\, a_0$.

14). $\frac{du(r)}{dr} = \frac{d\rho}{dr} \cdot \frac{du}{d\rho} = \frac{1}{a_0} \cdot \frac{du}{d\rho}$

$\Rightarrow \frac{d^2u}{dr^2} = \frac{1}{a_0^2} \cdot \frac{d^2u}{d\rho^2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{a_0^2} \cdot \frac{d^2u}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1) \cdot u}{2m_e\, \rho^2 \cdot a_0^2} - \frac{q \cdot u}{\rho a_0} = E \cdot u.$$

d'ap Q4

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\left(\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)\cdot u}{\rho^2} + \frac{\cancel{2m_e}\, \cancel{a_0}}{\cancel{\hbar^2}} \frac{\cancel{q}\cdot u}{\rho}\right) = E\, u$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \cdot u + \frac{2u}{\rho} = -2a_0 \cdot \frac{1}{q} \cdot E \cdot u$$

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} + \underbrace{\frac{2a_0 E}{q}}_{-\varepsilon}\right) \cdot u = 0.$$

$$\varepsilon = -\frac{2a_0 E}{q} \qquad \Rightarrow E_0 = \frac{q}{2a_0} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \times 2a_0}.$$

$$= -\frac{E}{E_0}$$

en eV : $E_0 = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 \times 2a_0}$ eV. $= 13{,}7$ eV (Rydberg)

15). $d^3P = |\Psi|^2 \cdot dV = |A|^2 |\Phi|^2 \cdot dr\, r d\theta\, r\sin\theta d\varphi$

$$dP = |A|^2 \int_r^{r+dr} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left(|\Phi(r',\theta,\varphi)|^2 \cdot r'^2 dr' \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \right)$$

16) $dP = \int_r^{r+dr} \frac{dP}{dr} \cdot dr \qquad \frac{dP}{dr} = \iint_{\theta\,\varphi} |\Phi(r,\theta,\varphi)|^2 \cdot r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \cdot |A|^2.$

$\frac{dP}{dr}$ max $\Leftrightarrow \frac{d^2P}{dr^2} = 0$.

$$\frac{dP}{dr} = \int_\theta \int_\varphi \underbrace{A(n)^2}. \underbrace{\left(-\frac{r}{a_0}\right)^{2(n-1)}} . \sin^{2(n-1)}\theta \ \underbrace{e^{-2r/na_0}} \ \underline{r^2} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \, . |A|^2$$

$$= A(n)^2 . \left(\frac{r}{a_0}\right)^{2(n-1)} e^{-2r/na_0} \ r^2 \underbrace{\int_\theta \int_\varphi \sin^{2n-1}\theta \, d\theta d\varphi}_{K} . \times |A|^2$$

$$\frac{d^2P}{dr^2} = A(n)^2 . \frac{e^{-2r/na_0}}{a_0^{2(n-1)}} \left(-\frac{2}{na_0} r^{2n} + 2n \, r^{2n-1}\right) \times |A|^2 \times K.$$

$\frac{d^2P}{dr^2} = 0 \Leftrightarrow$

$$\cancel{2}n \, r^{2n-1} = \frac{\cancel{2}}{na_0} r^{2n}$$

$$n^2 a_0 = r^{2n-2n+1}$$

$\Leftrightarrow \underline{r = n^2 a_0}.$

dist. e- - noyau la + probable d'autant ⊕ élevée que n est élevé
i.e énergie élevée.

17). $r_{50} = (50)^2 . a_0 = 1{,}39 . 10^{-7}$ m
↳ élevé → atomes géants
/à taille typique d'un atome $\sim 10^{-10}$ m.

18) proba de pce max pour $\theta = \frac{\pi}{2}$ → idem méca classique e- ds plan Oxy
dispersé ? $\frac{\Delta r}{r} = \Delta\theta \simeq 0{,}1$ plutôt faible → e- plutôt localisé : trajectoire circulaire de rayon r.

19). $\phi = \underbrace{\frac{1}{r} u(r)} Y(\theta,\varphi) = \underbrace{A(n) \left(-\frac{r}{a_0}\right)^{n-1}} (\sin\theta)^{n-1} e^{i(n-1)\varphi} \underbrace{\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)}$

$u(\rho) = A(n) . \underset{a_0 . \rho}{\overset{\shortparallel}{r}} . (-\rho)^{n-1} \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right)$ → à réinjecter ds I.2
avec $l(l+1) = (n-1)n$

19). $\Phi(M) = \frac{1}{r} u(r) Y(\theta,\varphi) = A(n) \left(-\frac{r}{a_0}\right)^{n-1} (\sin\theta \, e^{i\varphi})^{n-1} e^{-r/na_0}$

$u(r) = A(n) (-r)^{n-1} \underbrace{r}_{-(-r)} a_0^{1-n} e^{-r/na_0} = A(n)(-r)^n (-1) a_0^{1-n} e^{-r/na_0}$

$r = a_0 \rho$

$u(\rho) = -A(n) (-a_0\rho)^n a_0^{1-n} e^{-r/na_0}$

$u(\rho) = -A(n) a_0 (-\rho)^n e^{-\rho/n}$

$u(\rho) = -(-1)^n A(n) a_0 \rho^n e^{-\rho/n}$

$u(\rho) = (-1)^{n+1} A(n) a_0 \rho^n e^{-\rho/n}$

On réinjecte $u(\rho)$ ds I.2 : • $\frac{du}{d\rho} = (-1)^{n+1}A(n)a_0 e^{-\rho/n}\left[n\rho^{n-1} - \frac{1}{n} \rho^n\right]$

$\frac{d^2u}{d\rho^2} = (-1)^{n+1}A(n)a_0 e^{-\rho/n}\left[n(n-1)\rho^{n-2} - \frac{1}{n} n\rho^{n-1} - \frac{1}{n}\left(n\rho^{n-1} - \frac{1}{n}\rho^n\right)\right]$

$\frac{d^2u}{d\rho^2} = (-1)^{n+1}A(n)a_0 e^{-\rho/n}\left[n(n-1)\rho^{n-2} - 2\rho^{n-1} + \frac{1}{n^2}\rho^n\right]$

• $-\frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho) = -\frac{(n-1)n}{\rho^2}(-1)^{n+1}A(n)a_0\rho^n e^{-\rho/n}$

↑ l max ⇒ $l = n-1$

$-\frac{l(l+1)}{\rho^2}u(\rho) = -n(n-1)(-1)^{n+1}A(n)a_0\rho^{n-2}e^{-\rho/n}$

• $\frac{2}{\rho}u(\rho) = 2\cdot(-1)^{n+1}A(n)a_0\rho^{n-1}e^{-\rho/n}$

⇒ $\varepsilon u(\rho) = (-1)^{n+1}A(n)a_0e^{-\rho/n}\left[\cancel{n(n-1)\rho^{n-2}} \cancel{-2\rho^{n-1}} + \frac{1}{n^2}\rho^n\right]$

$\cancel{- n(n-1)\rho^{n-2}(-1)^{n+1}A(n)a_0e^{-\rho/n}}$

$\cancel{+(-1)^{n+1}A(n)a_0e^{-\rho/n}\cdot 2\rho^{n-1}}$

$= (-1)^{n+1}A(n)a_0e^{-\rho/n}\cdot\left[\frac{1}{n^2}\rho^n\right]$

$= \underbrace{(-1)^{n+1}A(n)a_0\rho^ne^{-\rho/n}}_{u(\rho)}\cdot\frac{1}{n^2}$ ⇒ $\varepsilon = \frac{1}{n^2}$

$E = -\mathcal{E}_0\cdot\varepsilon = -\frac{\mathcal{E}_0}{n^2}$ idem énergie des niveaux de l'atome d'H. ok car syst $\{1e^-\}$ soumis au champ $\vec{E}$ d'une charge $q = +e$

20) $\nu_{al} = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_{51}-E_{50}}{h} = \frac{\mathcal{E}_0}{h}\left(\frac{1}{50^2}-\frac{1}{51^2}\right) = 5{,}1.10^{10}$ Hz $\rightarrow \lambda_{al} = \frac{c}{\nu_{al}} = 5{,}9$ mm

ondes cm / hyperfréq. / μondes → $R_{1/2}$.