

Molécules diatomiques

méthode de liaison de valance

fonction d'onde d'essai :

$$\psi_{1S}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1)\varphi_{1S}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2) |\epsilon_1 = \uparrow\downarrow, \epsilon_2 = \uparrow\downarrow\rangle$$

$$\left\langle \psi_{\pm}^{S_1+} \right| H_e \left| \psi_{\pm}^{S_1t} \right\rangle = 2E_{1S} + \frac{J(R)}{1 \pm S^2} \pm \frac{K(R)}{1 \pm S^2}$$

$$J(R) > 0 \quad K(R) < 0$$

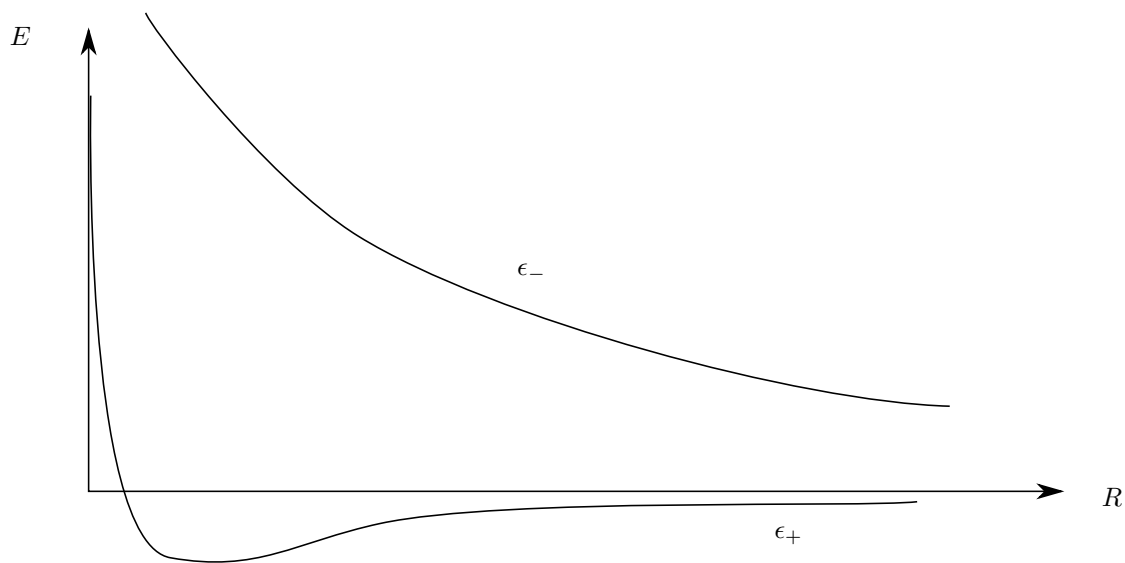


FIGURE 1 – Énergie des différents états

Classification des états moléculaire

$$L_z = L_{1z} + L_{2z} \quad : \text{Bon nombre quantique}$$

$$[L_z, H] = 0$$

(La molécule est invariante sous rotation autour de l'axe des z)

$$L_z |\psi\rangle = \pm \hbar \Lambda |\psi\rangle$$

Λ est la valeur absolue de la projection du spin en z

$$\begin{array}{ccccc} \Lambda & 0 & 1 & 2 \\ & \Sigma & \Pi & \Delta \end{array}$$

Pour H_2 (fondamental H-L)

$$\begin{array}{l} \psi_+^S \rightarrow {}^1\Sigma_g \quad \text{geralde, pair} \\ \psi_1^t \rightarrow {}^3\Sigma_u \quad \text{ungerald, impair} \end{array}$$

H_2 : Fonction d'onde d'essai pour l'orbitale moléculaire σ_g

$$\psi_{1s\sigma_g\epsilon}(\mathbf{r}) = \frac{\varphi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)\varphi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)}{\sqrt{2(1+S)}} |\epsilon\rangle$$

$$\Psi_{1s\sigma_\mu^*\epsilon} = [\quad - \quad] |\epsilon\rangle$$

$$L_z \psi_{S1\lambda\epsilon} = \pm \lambda \psi_{S1\lambda\epsilon}$$

$$\begin{array}{ccccc} \lambda & 0 & 1 & 2 \\ & \sigma & \pi & \delta \end{array}$$

$$H[1S^1] + H[1S^1] \rightarrow H_2[(1S_g)^2]$$

$$He[1S^2] + He[1S^2] \rightarrow He_2[(1s\sigma_g)^2, (1S_u^*)^2]$$

$$Li[1S^2, 2S^1] + Li[1S^2, 2S^1] \rightarrow Li_2[(1S\sigma_g)^2, (1S\sigma_u^*)^2, (2S_g)^2]$$

Li_2 existe

Be_2 n'existe pas

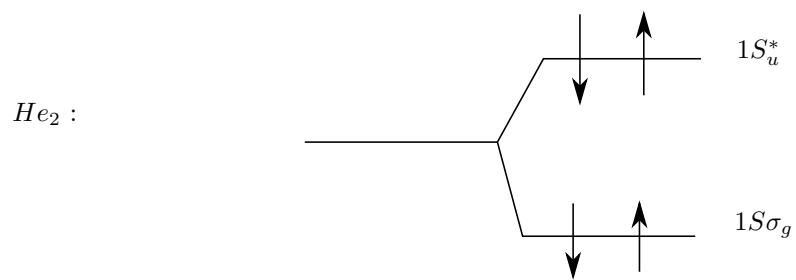


FIGURE 2 – niveaux hélium