Travaux Dirigés n^{0}1

Exercice 01

L'équation radiale de l'atome d'hydrogène dans l'état stationnaire, s'écrie comme suit :

$$\frac{d^2R_{n,l}(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_{n,l}(r)}{dr}+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_n+\frac{e^2}{r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\mathrm{R}_{n,l}(r)=0$$

Où *n* et *l* sont des nombres entiers positifs

1. Exprimer la probabilité de présence de l'électron en fonction de $R_{n,l}(r)$.
2. Une des solutions de l'équation radiale s'écrit : $R_{n,l}(r)=A\frac{r}{a_0}.e^{\frac{-r}{2a_0}}$
   i. Déterminer *l*, a_0 et E_n.
   ii. Calculer A. On donne : $\int_0^{\infty} r^n e^{-ar}dr=\frac{n!}{a^{n+1}}$
   iii. Tracer la probabilité de présence de l'électron en fonction de $\frac{r}{a_0}$.

Exercice 02

On considère un atome d'hydrogène dans l'état stationnaire suivant :

$$\Psi_{1s}(r)=N\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right), \qquad \mathrm{a}_0=\frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

1. Déduire les nombres quantiques **n, l** et **m**, caractérisant l'état Ψ_{1s} considéré.
2. Ecrire l'équation de Schrödinger de l'électron de l'atome d'hydrogène où $V(r)=-\frac{e^2}{r}$.
3. Déterminer les valeurs propres du système dans cet état.
4. Déterminer le facteur de normalisation **N.**
5. Quelle est la probabilité de présence de l'électron de l'atome d'hydrogène entre **r=a₀** et **r=3a₀** ?
6. Etudier et tracer la courbe de la densité de probabilité de présence radiale de l'atome d'hydrogène ($D(r)=\frac{dP}{dr}$) en fonction de r. En déduire la position probable de l'atome d'hydrogène.

On donne : $$\int_{r_1}^{r_2} r^n e^{-\alpha r}dr=-\frac{n!}{\alpha^{n+1}}\left[e^{-\alpha r}\sum_{k=0}^{n}\frac{(\alpha r)^k}{k!}\right]_{r_1}^{r_2}$$

Exercice 03

L'état fondamental de l'atome d'Helium avec interaction entre les électrons

1. Quelles orbitales sont occupés dans l'état fondamental de l'atome d'Helium.
2. Utilisez ces orbitales et construisez le déterminant de Slater Φ.
3. Calculez le déterminant et partagez la fonction afin d'obtenir un produit d'une fonction spatiale avec une fonction de spin.
4. Donnez l'opérateur Hamiltonien de l'atome d'Helium.
5. Donnez les contributions à l'énergie $\langle\Phi|H|\Phi\rangle=\langle 1s|-\frac{1}{2}\Delta|1s\rangle+...$ et démontrez que le résultat pour l'énergie de l'état fondamental que nous avons obtenu dans le cours est correct.