

Devoir du 1^{er} Semestre de M.Q.C

Nom :

Prénom :

Groupe :

Exercice 01 : (05 pts)

On considère d'un ion hydrogénoïde de numéro atomique Z dans l'état stationnaire suivant :

$$\Psi_{1s}(r) = N \exp\left(-\frac{Z.r}{a_0}\right), \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

1. Dédurre les nombres quantiques **n**, **l** et **m**, caractérisant l'état Ψ_{1s} considéré

.....
.....
.....

2. Quelle est la signification physique de $|\Psi_{1s}(r)|^2$?

.....
.....

3. Déterminer le facteur de normalisation N ; On donne : $\int_0^{+\infty} r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{a^{n+1}}$

.....
.....
.....
.....
.....

4. Ecrire l'équation de Schrödinger de l'électron de l'ion de Lithium en u.a où $V(r) = -\frac{Ke^2.Z}{r}$

.....
.....
.....

5. Pourquoi ce orbitale est-elle appelée "fonction propre" ?

.....
.....

6. Déterminer la valeur propre de cette orbitale en u.a et on a : $\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right)$

.....

.....
.....
.....
.....
.....
Exercice 02 : (05 pts) : L'état fondamental de l'atome de Lithium avec interaction entre les électrons

1) Quelles orbitales sont occupés dans l'état fondamental de l'atome de Lithium

.....
.....
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 de Lithium en u.a

.....
.....
5) Donnez les contributions à l'énergie $\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \langle 1s | -\frac{1}{2} \Delta | 1s \rangle + \dots$

..... **BONNE CHANCE**