

Corrigé type d'Epreuve de moyen durée de 1^{er} Semestre de M.Q.C

Nom :

Prénom :

Groupe :

$$\text{On donne : } V(r) = -\frac{K.e^2.Z}{r} ; \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) ; \int_0^\infty r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{a^{n+1}} \text{ et } E_n = -\frac{K^2.e^4.m_e.Z^2}{2.\hbar^2.n^2}$$

Exercice 01 : (12 pts)

On considère un atome d'hydrogène dans le premier état excité ; a pour expression :

$$\Psi(r) = N.(1 - K * r).e^{-K.r} \text{ et } K = 1/2.a_0$$

1. Donner les relations mathématiques reliant les nombres quantiques n , l et m des orbitales hydrogénoïdes.

On a $n \in \mathbb{N}^*$; $0 \leq l \leq n-1$; $-l \leq m \leq +l$ et $s = \pm 1/2$ **(2pts)**

A quels nombres quantiques correspondent-elles (justifier votre réponse) ? **(1pt)**

$n=2$ correspond au premier état excité ; la fonction d'onde ne dépend que de la partie radiale $\Rightarrow$

$l=0$; $m=0$ et $s=+1/2$

3. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi(r)$ **(3pts)**

On applique la condition de normalisation : $\int_E |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 dV(r, \theta, \varphi) = 1$ et $dV(r, \theta, \varphi) = r^2 \cdot \sin \theta \cdot dr d\theta d\varphi$

$$\Rightarrow N^2 \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi_{2s}(r)|^2 \cdot r^2 \cdot \sin \theta \cdot dr d\theta d\varphi = 1 \Rightarrow N^2 \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (1 - K * r)^2 \cdot \exp(-2K.r) \cdot r^2 \cdot \sin \theta \cdot dr d\theta d\varphi = 1$$

$$\Rightarrow N^2 \int_0^{+\infty} (1 - K * r)^2 \cdot \exp(-2K.r) \cdot r^2 \cdot dr \int_0^\pi \sin \theta \cdot d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

Les deux intégrales sont données comme :

$$\int_0^\pi \sin \theta \cdot d\theta = [-\cos \theta]_0^\pi = -(-1 - 1) = 2 \text{ et } \int_0^{2\pi} d\varphi = [\varphi]_0^{2\pi} = 2\pi$$

$$\Rightarrow 4\pi \cdot N^2 \int_0^{+\infty} (1 - K * r)^2 \cdot \exp(-2K.r) \cdot r^2 \cdot dr = 1 \Rightarrow 4\pi \cdot N^2 \int_0^{+\infty} (r^2 - 2K * r^3 + K^2 * r^4) \exp(-2K.r) \cdot dr = 1$$

$$\Rightarrow 4\pi \cdot N^2 \int_0^{+\infty} (r^2 - 2K * r^3 + K^2 * r^4) \exp(-2K.r) \cdot dr = 4\pi \cdot N^2 \left[\frac{2 * 1}{(2K)^3} - 2 * K * \frac{3 * 2 * 1}{(2K)^4} + K^2 * \frac{4 * 3 * 2 * 1}{(2K)^5} \right] = 1$$

$$4. \Rightarrow 4\pi \cdot N^2 \left[\frac{2}{8K^3} - \frac{3}{4 * K^3} + \frac{3}{4 * K^3} \right] = 1 \Rightarrow \pi N^2 = K^3 \Rightarrow N = \sqrt{\frac{K^3}{\pi}} = \sqrt{\frac{1}{8 * a^3 * \pi}}$$

4. Ecrire l'équation de Schrödinger correspondante à ce système en U.a

$$\hat{H}.\Psi(r)=E.\Psi(r); \hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta(r) - \frac{1}{r} \text{ et } \Delta(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d}{dr}$$

On a : (2pts)

$$\Rightarrow \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d}{dr} \right) - \frac{1}{r} \right) \Psi_{2;0;0}(r) = E_2 \cdot \Psi_{2;0;0}(r)$$

5. Déduire l'énergie du premier état excité de l'atome d'hydrogène en U.a et en e.V

$$E_{2s} = -\frac{1}{2 \cdot (2)^2} = -\frac{1}{8} \text{ U.a}$$

On a ; pour n=2 : (2pts)

$$\text{et } E_{2s} = -\frac{1}{8} * 27.2 = -3.4 \text{ e.V}$$

6. Calculer l'énergie d'ionisation du premier état excité de l'atome d'hydrogène en e.V

On a ; pour n=2 : $E_i(H) = E_\infty - E_2 = 0 - (-3.4) = 3.4 \text{ e.V}$ (2pts)

Exercice 02 : (08 pts)

Pour étudier l'hydrogène dans son état fondamental, on choisit la fonction d'essai $\Psi(\alpha)$ telle que :

$$\Psi(\alpha) = N \cdot \exp(-\alpha \cdot r)$$

1. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi(\alpha)$ (2pts)

On applique la condition de normalisation : $\int_E |\Psi(r, \theta, \varphi)|^2 dV(r, \theta, \varphi) = 1$ et $dV(r, \theta, \varphi) = r^2 \cdot \sin \theta \cdot dr d\theta d\varphi$

$$\Rightarrow N^2 \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi_{2s}(r)|^2 \cdot r^2 \cdot \sin \theta \cdot dr d\theta d\varphi = 1 \Rightarrow N^2 \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp(-2\alpha \cdot r) \cdot r^2 \cdot \sin \theta \cdot dr d\theta d\varphi = 1$$

$$\Rightarrow N^2 \int_0^{+\infty} \exp(-2\alpha \cdot r) \cdot r^2 \cdot dr \int_0^\pi \sin \theta \cdot d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

Les deux intégrales sont données comme :

$$\int_0^\pi \sin \theta \cdot d\theta = [-\cos \theta]_0^\pi = -(-1 - 1) = 2 \text{ et } \int_0^{2\pi} d\varphi = [\varphi]_0^{2\pi} = 2\pi$$

$$\Rightarrow 4\pi \cdot N^2 \int_0^{+\infty} \exp(-2\alpha \cdot r) \cdot r^2 \cdot dr = 1 \Rightarrow 4\pi \cdot N^2 \left[\frac{2 \cdot 1}{(2\alpha)^3} \right] = 1 \Rightarrow \pi N^2 = \alpha^3 \Rightarrow N = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}$$

2. Calculer l'énergie moyenne en fonction de α et en U.a (3pts)

On a :

$$\bar{E} = \frac{\langle \Psi(\alpha) | \hat{H} | \Psi(\alpha) \rangle}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle} \text{ et } \langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle = 1 \text{ (la condition de normalisation est vérifiée)}$$

La fonction $\Psi(\alpha)$ est en fonction de la partie uniquement radiale; donc ne dépend que de la partie radiale de l'opérateur :

$$\bar{E} = \langle \Psi(\alpha) | \hat{H} | \Psi(\alpha) \rangle \text{ et } \hat{H} = \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d}{dr} \right) - \frac{1}{r} \right) \text{ et } \frac{d\Psi(\alpha)}{dr} = -\alpha \cdot \Psi(\alpha) \text{ et } \frac{d^2\Psi(\alpha)}{dr^2} = \alpha^2 \cdot \Psi(\alpha)$$

$$\bar{E} = 4\pi \cdot N^2 \int_0^{+\infty} r^2 \cdot \left(-\frac{1}{2} \left(\alpha^2 + \frac{2}{r} \cdot \alpha \right) - \frac{1}{r} \right) \exp(-2\alpha \cdot r) \cdot dr$$

$$\Rightarrow \bar{E} = 4\pi \cdot N^2 \int_0^{+\infty} \left(-\frac{\alpha^2 \cdot r^2}{2} \cdot (\alpha - 1) \cdot r \right) \exp(-2\alpha \cdot r) \cdot dr$$

$$\Rightarrow \bar{E} = 4\pi \cdot N^2 \left(-\frac{\alpha^2}{2} \cdot \frac{2 \cdot 1}{(2\alpha)^3} + (\alpha - 1) \cdot \frac{1}{(2\alpha)^2} \right) = 4\pi \cdot \frac{\alpha^3}{\pi} \left(-\frac{\alpha^2}{2} \cdot \frac{2 \cdot 1}{(2\alpha)^3} + (\alpha - 1) \cdot \frac{1}{(2\alpha)^2} \right)$$

$$\Rightarrow \bar{E} = \left(-\frac{\alpha^2}{2} + (\alpha - 1) \cdot \alpha \right) = \frac{\alpha^2}{2} - \alpha$$

3. Pour quelle valeur de α , l'énergie est-elle minimale ?

$$\bar{E}_{\min} = \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{\alpha^2}{2} - \alpha \right) = 0 \Rightarrow (\alpha - 1) = 0 \Rightarrow \alpha = 1 \quad \text{(1pt)}$$

4. Calculer la valeur de l'énergie minimale en U.a et en e.V

$$\bar{E}_{\min}(\alpha = 1) = \left(\frac{1^2}{2} - 1 \right) = -\frac{1}{2} = -0.5 \text{ U.a} \quad \text{(2pts)}$$

$$\text{et } \bar{E}_{\min}(\alpha = 1) = -0.5 \cdot 27.2 = -13.6 \text{ e.V}$$

Bonne Chance