Travaux Dirigés n^0 2 et 3

Exercice 01

Considérons le moment d'un électron autour d'un point fixe O origine du triade Oxyz, le moment cinétique $\vec{L}$ est donné par $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$.

1. Quelle sont les composantes L_x, L_y, L_z du vecteur $\vec{L}$ sur les axes Ox, Oy, Oz ?
2. Montrer que le laplacien Δ commute avec $\hat{L}_z$.
3. Montrer que la solution de l'équation $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \phi}{\partial \varphi} = m\hbar\phi$ donne des fonctions $\phi(\varphi) = ke^{im\varphi}$.
4. A partir des :

$$\hat{L}_x = \hbar/i\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \; ; \; \hat{L}_x = \hbar/i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \; ; \; \vec{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

- Retrouver ces expressions en coordonnées cartésiennes.

Exercice 02

On donne l'expression de l'orbitale 2S d'un système hydrogénoïde :

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

1- Déterminer le facteur de normalisation **N**
2- Donner l'expression de la densité de probabilité de présence volumique ainsi que de la densité de probabilité de présence radiale (r).
3- Calculer le rayon le plus probable
4- Calculer le rayon de la sphère nodale

On donne : $\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$

$$\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}, \quad dv = r^2 dr.\sin\theta d\theta.d\varphi \text{ et } [0 \le r \le \infty,\ 0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \varphi \le 2\pi]$$

Exercice 03

Soit la fonction d'onde hybride sp^2 suivante : $\Psi_{sp^2} = \Psi_{2s} - 2\Psi_{2p_0} + 4\Psi_{2p_{-1}}$

1. Normaliser cette fonction à l'unité
2. Vérifier que la fonction hybride est bien solution de l'équation de Schrödinger hydrogénoïde.
3. La fonction hybride est-elle fonction propre des opérateurs L^2 et L_z ?
4. Quelle est la valeur moyenne de l'énergie E, de L^2 et L_z dans l'état hybride ?

Exercice 04

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

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

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 $\frac{r}{2a_0}$.

Exercice 05

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

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

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**, on donne : $\int_0^\infty r^n e^{-ar}dr=\frac{n!}{a^{n+1}}$.
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 :

$$\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r}dr=\frac{n!}{\alpha^{n+1}},\quad dv=r^2dr.\sin\theta d\theta.d\varphi \text{ et } \left[0\le r\le\infty,\ 0\le\theta\le\pi,\ 0\le\varphi\le 2\pi\right]$$

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \text{et } \int_{r_1}^{r_2} r^n e^{-\alpha r}dr=-\frac{n!}{\alpha^{n+1}}\left[e^{-\alpha r}\sum_{k=0}^{n}\frac{(\alpha r)^k}{k!}\right]_{r_1}^{r_2}$$

Corrigé Type de Travaux Dirigés n⁰2 et 3

Exercice 02

On donne l'expression de l'orbitale 2S d'un système hydrogénoïde :

$$\Psi_{2s}(r) = N(2-k.r)\exp\left(-k.r/2\right), \quad k = \frac{z}{.a_0} \text{ et } a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

1. Je détermine le facteur de normalisation **N**

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

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

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

Les deux intégrales sont données comme:

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

$$\int_0^{2\pi} d\varphi = [\varphi]_0^{2\pi} = 2\pi$$

$$\Rightarrow 4\pi.N^2 \int_0^{+\infty} (2-k.r)^2.\exp(-k.r).r^2.dr = 1 \Rightarrow 4\pi.N^2 \int_0^{+\infty} \left(4r^2 - 4k.r^3 + k^2r^4\right)\exp(-k.r).dr = 1$$

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

$$\Rightarrow 4\pi.N^2\left[\frac{8}{k^3} - \frac{24}{k^3} + \frac{24}{k^3}\right] = 1 \Rightarrow 32\pi N^2 = k^3$$

$$\Rightarrow N = \sqrt{\frac{k^3}{32\pi}}$$

2. Je donne l'expression de la densité de probabilité de présence volumique ainsi que de la densité de probabilité de présence radiale (r).

- Densité de probabilité de présence volumique

$$\frac{dP}{dV} = |\Psi_{2s}(r)|^2 = \frac{k^3}{32\pi}.(2-k.r)^2.\exp(-k.r)$$

- Densité de probabilité de présence radiale

$$D(r) = \frac{dP}{dr} = 4\pi.r^2.|\Psi_{2s}(r)|^2 = 4\pi.r^2.\frac{k^3}{32\pi}.(2-k.r)^2.\exp(-k.r) = \frac{k^3.r^2}{8}.(2-k.r)^2.\exp(-k.r)$$

3. Calcul le rayon le plus probable

$$D(r)=\frac{dP}{dr}=4\pi.r^2.\left|\Psi_{2s}(r)\right|^2=4\pi.r^2.\frac{k^3}{32\pi}.(2-k.r)^2.\exp(-k.r)=\frac{k^3}{8}.\left(4r^2-4k.r^3+k^2r^4\right)\exp(-k.r)$$

$$\frac{dD(r)}{dr}=0\Rightarrow\frac{k^3}{8}.\frac{d.\left(4r^2-4k.r^3+k^2r^4\right)\exp(-k.r)}{dr}=0$$

$$\Rightarrow\frac{k^3}{8}.\left[\left(8r-12k.r^2+4k^2r^3\right)-k.\left(4r^2-4k.r^3+k^2r^4\right)\right]\exp(-k.r)=0$$

$$\Rightarrow\frac{k^3}{4}.r.\left[(2-k.r)..\left(2-3k.r+\frac{k}{2}r^2\right)\right]\exp(-k.r)=0$$

Cinq solutions possibles: $r_1=0,\ r_2=\frac{2}{k},\ r_3=\frac{3+\sqrt{5}}{2},\ r_4=\frac{3-\sqrt{5}}{2}$ et $r_5=+\infty$

$r_1=0$ et $r_2=\frac{2}{k}$ sont des solutions des minima $D(r)=0$

$r_3=\frac{3+\sqrt{5}}{2},\ r_4=\frac{3-\sqrt{5}}{2}$ et $r_5=+\infty$ sont des solutions des maxima

4. Calcul le rayon de la sphère nodale

$$\frac{dD(r)}{dr}=0\ avec\ D(r)=0\Rightarrow r_2=\frac{2}{k}$$

Exercice 03

Soit la fonction d'onde hybride sp^2 suivante : $\Psi_{sp^2}=\Psi_{2s}-2\Psi_{2p_0}+4\Psi_{2p_{-1}}$

1. Normalisation cette fonction à l'unité

On applique la condition de normalisation: $\int_E\left|\Psi_{sp_2}\right|^2.dV=1$

On pose: $\Psi_{sp^2}=N\left(\Psi_{2s}-2\Psi_{2p_0}+4\Psi_{2p_{-1}}\right)$

$$\Rightarrow N^2(1+4+16)=1\Rightarrow N=\frac{1}{\sqrt{21}}=0.218$$

2. Vérifier que la fonction hybride est bien solution de l'équation de Schrödinger hydrogénoïde.

$$\hat{H}.\Psi_{sp^2}=E_2.\Psi_{sp^2}\Rightarrow\hat{H}.\Psi_{sp^2}=\hat{H}.N\left(\Psi_{2s}-2\Psi_{2p_0}+4\Psi_{2p_{-1}}\right)$$

$$\Rightarrow\hat{H}.N\left(\hat{H}.\Psi_{2s}-2\hat{H}.\Psi_{2p_0}+4\hat{H}.\Psi_{2p_{-1}}\right)=N\left(E_{2s}.\Psi_{2s}-2E_{2p_0}.\Psi_{2p_0}+4E_{2p_{-1}}.\Psi_{2p_{-1}}\right)$$

Mais d'un problème où cas d'hydrogènoide, on a : $E_{2s}=E_{2p_0}=E_{2p_{-1}}=E_2=-3{,}4\,\mathrm{e.V}$

$$\Rightarrow\hat{H}.\Psi_{sp^2}=\hat{H}.N\left(E_{2s}.\Psi_{2s}-2E_{2p_0}.\Psi_{2p_0}+4E_{2p_{-1}}.\Psi_{2p_{-1}}\right)=E_2..\Psi_{sp^2}$$

Ψ_{sp^2} est bien fonction propre de $\hat{H}$

3. La fonction hybride est-elle fonction propre des opérateurs $L2\ et\ Lz$?

On utilise la même démarche que pour la question 4

On a : $\hat{L}^2.\Psi = l(l+1)\hbar^2.\Psi$

$\hat{L}^2.\Psi_{sp^2} = .N*0*\Psi_{2s} - 2N*2\hbar^2*\Psi_{2p_0} + 4N*2\hbar^2*\Psi_{2p_{-1}} \neq const\Psi_{sp^2}$

La fonction.Ψ_{sp^2} n'est pas fonction propre de lopérateur $\hat{L}^2$

On a : $\hat{L}_z.\Psi = m\hbar.\Psi$

$\hat{L}_z.\Psi_{sp^2} = .N*0*\Psi_{2s} - 2N*0*\Psi_{2p_0} + 4N*(-\hbar)\Psi_{2p_{-1}} \neq const\Psi_{sp^2}$

La fonction.Ψ_{sp^2} n'est pas fonction propre de lopérateur $\hat{L}_z$

4. Les valeurs moyennes de l'énergie E, de L^2 et L_z dans l'état hybride ?

$$\overline{L}^2 = \int_E \Psi^*_{sp^2}.\hat{L}^2.\Psi_{sp^2}dV \text{ et } \left\langle \Psi_{sp^2} \middle| \Psi_{sp^2} \right\rangle = 1 \text{ (la condition est vérifiée dans la question1)}$$

$$\overline{L}^2 = \int_E \left(N*\Psi^*_{2s} - 2N*\Psi^*_{2p_0} + 4N*\Psi^*_{2p_{-1}} \right)\left(-2N*2\hbar^2*\Psi_{2p_0} + 4N*2\hbar^2*\Psi_{2p_{-1}} \right)dV$$

$$\overline{L}^2 = 4N^2*2\hbar^2 + 16N^2*2\hbar^2 = 40N^2.\hbar^2$$

$$\Rightarrow \overline{L}^2 = 40N^2.\hbar^2$$

Même calcul pour $\overline{L}_z$, on trouve :

$$\overline{L}_z = -16N^2.\hbar$$

Exercice 04

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

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

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

1. J'exprime la probabilité de présence de l'électron en fonction de $R_{n,l}(r)$

   On écrit que la probabilité de présence de l'électron dans tout l'espace est égale à l'unité

   Le potentiel centrale dépend de $r \Rightarrow \int_E |\Psi(r,\theta,\varphi)|^2.dV(r,\theta,\varphi) = 1$ et $dV(r,\theta,\varphi) = r^2.\sin\theta.drd\theta.d\varphi$

   Où : $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r).Y_l^m(\theta,\varphi)$

   On déduit que : $\int_0^{+\infty} .|R_{n,l}(r)|^2.r^2.dr.\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta.d\theta d\varphi = 1$

   On compte tenu de la normalisation de la partie angulaire de la fonction d'onde :

   $$\Rightarrow \int_0^{+\infty} |R_{n,l}(r)|^2.r^2.dr = 1$$

   Par définition, on écrit la probabilité de présence de l'électron par unité de longueur :

   $$P(r) = |R_{n,l}(r)|^2.r^2, \text{ d'où : } \int_0^{+\infty} P(r).dr = 1$$

. 2. Une des solutions de l'équation radiale s'écrit : $R_{n,l}(r) = A\frac{r}{a_0}e^{\frac{-r}{2a_0}}$

2.1 Détermination de *l*, a_0 et E_n.
On calcul les dérivés, où :

$$\frac{dR_{n,l}(r)}{dr} = \frac{d\left(A\frac{r}{a_0}e^{\frac{-r}{2a_0}}\right)}{dr} = \frac{A}{a_0}.\frac{d\left(r.e^{\frac{-r}{2a_0}}\right)}{dr} = \frac{A}{a_0}.\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{\frac{-r}{2a_0}}$$

$$\frac{d^2R_{n,l}(r)}{dr^2} = \frac{A}{a_0}.\frac{d\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{\frac{-r}{2a_0}}}{dr} = \frac{A}{4a_0^2}.(r-4a_0)e^{\frac{-r}{2a_0}}$$

En reportant dans l'équation radiale, on trouve :

$$\left\{\left[\left(\frac{2.m}{\hbar^2}.E_n + \frac{1}{4a_0^2}\right)\right]r^0 + [2-l(l+1)].r^{-2} + \left[-\frac{2}{a_0} + \frac{2.m}{\hbar^2}.e^2\right]r^{-1}\right\}\frac{A}{a_0}.r.e^{\frac{-r}{2a_0}} = 0$$

Cette équation est vérifiée pour tout valeur de r si :

$$\begin{cases} -\frac{2}{a_0} + \frac{2.m}{\hbar^2}.e^2 = 0 \Rightarrow a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \\ \frac{2.m}{\hbar^2}.E_n + \frac{1}{4a_0^2} = 0 \Rightarrow E_n = -\frac{m_e e^4}{8.\hbar^2} \\ 2-l(l+1) = 0 \Rightarrow l = -1(\text{éliminée})\text{ et } l = 1 \end{cases}$$

2.2 Calcul A. On donne : $\int_0^{\infty} r^n e^{-ar}dr = \frac{n!}{a^{n+1}}$

La constante A est déduit de la normalisation :

$$\int_0^{+\infty}|R_{n,l}(r)|^2.r^2.dr = 1,\text{ et } R_{n,l}(r) = A\frac{r}{a_0}e^{\frac{-r}{2a_0}} \Rightarrow \frac{A^2}{a_0^2}\int_0^{+\infty}r^4e^{\frac{-r}{a_0}}.dr = 1$$

$$\Rightarrow \frac{A^2}{a_0^2}.\left(\frac{4!}{\left(\frac{1}{a_0}\right)^5}\right) = 1 \Rightarrow A^2 = 24a_0^3$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{24a_0^3}$$

2.3 Traçage la probabilité de présence de l'électron en fonction de $-\frac{r}{a_0}$.

$$\text{On a : } dP = r^2.\left|R_{n,l}(r)\right|^2.dr \Rightarrow D(r) = \frac{dP}{dr} = r^2.\left|R_{n,l}(r)\right|^2 = \frac{A^2}{a_0^2}.r^4 e^{\frac{-r}{a_0}}$$

$$D^{/}(r) = \frac{A^2}{a_0^2}\left(.r^4 e^{\frac{-r}{a_0}}\right)^{/} = -\frac{A^2}{a_0^3}.r^3(.r - 4a_0)e^{\frac{-r}{a_0}}$$

$$D^{/}(r) = 0 \Rightarrow -\frac{A^2}{a_0^3}.r^3(.r - 4a_0)e^{\frac{-r}{a_0}} = 0 \Rightarrow \begin{cases} r = 0 \\ r = 4a_0 \\ r = +\infty \end{cases}$$

$r = 0 \Rightarrow D(r) = 0$

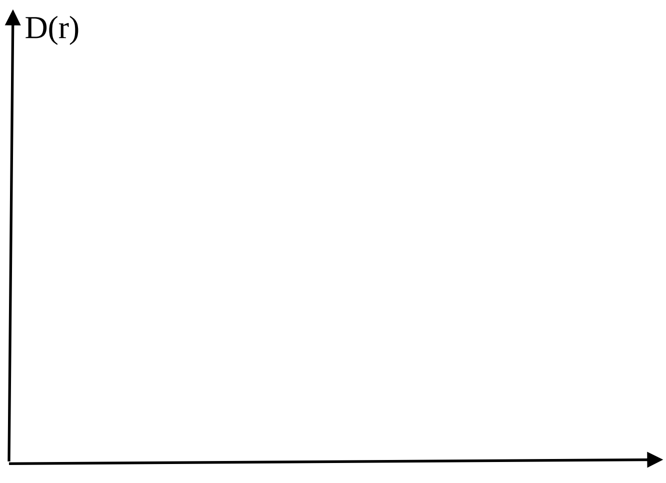
$r \to +\infty \Rightarrow \lim_{r\to+\infty} D(r) = 0$

Cette fonction s'annule en maxima pour $r = 4a_0$

Tableau de variation :

r	0	$4a_0$	$+\infty$
$D^{/}(r)$	+		-
$D(r)$	0 ↗	$8.83a_0^5$	↘ 0

La courbe :



Exercice 05

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

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

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

   On a : $n \in N^*, 0 \le l \le n-1$ et $-l \le m \le +l$

   $\Psi_{1s}(r) = \Psi_{n,l,m}(r) \Rightarrow n = 1, l = 0(s)$ et $m = 0$

2. Ecrire l'équation de Schrödinger de l'électron de l'atome d'hydrogène où $V(r) = -\frac{e^2}{r}$

   On a dans le potentiel central (V(r) en fonction de r) et l = 0 (on prend uniquement la partie radiale)

   $$\Rightarrow \hat{H}.\Psi_{1s}(r) = E_1\,\Psi_{n,l,m}(r) / \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2.m}\Delta(r) + V(r), \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \text{et } V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

   $$\Rightarrow \hat{H}.\Psi_{1s}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2.m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{e^2}{r}\right).\Psi_{1s}(r) = E_1\,\Psi_{n,l,m}(r)$$

3. Déterminer les valeurs propres du système dans cet état.

$$\text{On a : } \hat{H}.\Psi_{1s}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2.m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{e^2}{r}\right).\Psi_{1s}(r) \overset{?}{=} E_1\,\Psi_{n,l,m}(r)$$

$$\text{On a : } \hat{H}.\Psi_{1s}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2.m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{e^2}{r}\right).\Psi_{1s}(r) = -\frac{\hbar^2}{2.m} * I.\Psi_{1s}(r) - II.\Psi_{1s}(r)$$

$$I.\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right).\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\left(N\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\right)}{dr}\right). = \left(\frac{-2}{a_0 * r} + \frac{1}{a_0^2}\right)\Psi_{1s}(r)$$

$$I.\Psi_{1s}(r) = \left(\frac{-2}{a_0 * r} + \frac{1}{a_0^2}\right)\Psi_{1s}(r) = \left(\frac{-2}{a_0^2} + \frac{1}{a_0^2}\right)\Psi_{1s}(r) = \frac{-1}{a_0^2}.\Psi_{1s}(r) / \left(r = a_0, n = 1 \text{ et } z = 1\right)$$

$$II.\Psi_{1s}(r) = \frac{e^2}{r}N\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) = \frac{e^2}{a_0}\Psi_{1s}(r) =$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2.m} * I.\Psi_{1s}(r) - II.\Psi_{1s}(r) = -\frac{\hbar^2}{2.m} * \left(\frac{-1}{a_0^2}\right) * .\Psi_{1s}(r) - \frac{e^2}{a_0} * \Psi_{1s}(r) = \left(\frac{\hbar^2}{2.m.a_0^2} - \frac{e^2}{a_0}\right) * \Psi_{1s}(r) = E_{1s} * \Psi_{1s}(r)$$

$$\Rightarrow E_{1s} = \left(\frac{\hbar^2}{2.m.a_0^2} - \frac{e^2}{a_0}\right) \text{et } a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

$$\Rightarrow E_{1s} = \frac{-m_e e^4}{2.\hbar^2}$$

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

Le potentiel centrale dépend de $r \Rightarrow \int_E \left|\Psi(r,\theta,\varphi)\right|^2 .dV(r,\theta,\varphi) = 1$ et $dV(r,\theta,\varphi) = r^2.\sin\theta.drd\theta.d\varphi$

Où : $\Psi_{1s}(r,\theta,\varphi) = \Psi_{1s}(r)$

On déduit que : $\int_0^{+\infty} .\left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .r^2.dr.\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \sin\theta.d\theta d\varphi = 1$

et $\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \sin\theta.d\theta d\varphi = 4\pi$

On compte tenu de la normalisation de la partie partie de la fonction d' onde :

$$\Rightarrow 4\pi * N^2 \int_0^{+\infty} \left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .r^2.dr = 1 \Rightarrow 4\pi * N^2 \int_0^{+\infty} r^2.\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right).dr = 1$$

$$\Rightarrow 4\pi * N^2 \int_0^{+\infty} r^2.\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right).dr \Rightarrow 4\pi * N^2 * \left(\frac{2}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3}\right) = 1$$

$$\Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}} \Rightarrow \Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

5. la probabilité de présence de l'électron de l'atome d'hydrogène entre **r=a₀** et **r=3a₀** :

On a : $dP = \left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .dV(r,\theta,\varphi)$ et $dV(r,\theta,\varphi) = r^2.\sin\theta.drd\theta.d\varphi$

$$dP = \left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .r^2.dr.\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta.d\theta d\varphi \text{ et } \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta.d\theta d\varphi = 4\pi$$

Donc : $dP = 4\pi.\left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .r^2$

$$\Rightarrow \int_{r=a_0}^{r=3a_0} dP = 4\pi.\int_{r=a_0}^{r=3a_0}\left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 r^2.dr$$

$$\Rightarrow P(a_0,3a_0) = 4\pi.\int_{r=a_0}^{r=3a_0}\left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 r^2.dr = N^2.4\pi.\int_{r=a_0}^{r=3a_0}\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)r^2.dr$$

$$\Rightarrow P(a_0,3a_0) = \frac{4}{a_0^3}\int_{r=a_0}^{r=3a_0}\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)*r^2.dr$$

$$\Rightarrow P(a_0,3a_0) = \frac{4}{a_0^3}\left(-\frac{2}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3}\right)\left[e^{\left(-\frac{2}{a_0}*3a_0\right)}\left(\frac{6^0}{0!}+\frac{6^1}{1!}+\frac{6^2}{2!}\right) - e^{\left(-\frac{2}{a_0}*a_0\right)}\left(\frac{2^1}{0!}+\frac{2^1}{1!}+\frac{2^2}{2!}\right)\right]$$

$$\Rightarrow P(a_0,3a_0) = (-1)\left[e^{(-6)}(1+6+18) - e^{(-2)}(1+2+2)\right] = 5e^{(-2)} - 25e^{(-6)} = 0{,}6147$$

$$\Rightarrow P(a_0,3a_0)\% = 61{,}47\%$$

6. Etude et traçage 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 a : $dP = \left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .dV(r,\theta,\varphi)$ et $dV(r,\theta,\varphi) = r^2.\sin\theta.drd\theta.d\varphi$

$$D(r) = \frac{dP}{dr} = \left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .r^2.\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta.d\theta d\varphi \text{ et } \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta.d\theta d\varphi = 4\pi$$

Donc : $D(r) = 4\pi.\left|\Psi_{1s}(r)\right|^2 .r^2 = \frac{4}{a_0} * r^2 * \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$

$$\Rightarrow D'(r) = \frac{4}{a_0}*\left[r^2 * \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)\right]' = \frac{-8*r}{a_0^2}(r-a_0)*\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) = 0 \Rightarrow \begin{cases} r = 0 \\ r = a_0 \\ r = +\infty \end{cases}$$

$r = 0 \Rightarrow D(r) = 0$

$r \to +\infty \Rightarrow \lim_{r\to+\infty} D(r) = 0$

Cette fonction s'annule en maximum pour $r = a_0$

Tableau de variation :

r	0		a_0		$+\infty$
$D'(r)$		+		-	
$D(r)$	0	$\nearrow$	$0{,}5a$	$\searrow$	0

La courbe :