Université M^{ed} Khider de Biskra
Faculté des Sciences Exactes et Science de la Nature et de la Vie
2ème Master Chimie des Matériaux, Module : M.Q.C

Année universitaire : 23/2024
Département de science de la matière
Enseignant : Y. Boumedjane

Travaux Dirigés n^{0}1

Exercice 01

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

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

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

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 :

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

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 :

On considère la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène suivante :

$$\Psi_{2p_z}(r,\theta,\varphi)=N.\frac{r}{a_0}.\exp\left(\frac{-r}{2a_0}\right).\cos\theta,\quad a_0=\frac{\hbar^2}{m_e.e^2}$$

1. Rappeler brièvement la dénomination des nombres quantiques *n, l* et *m* des orbitales hydrogénoïdes. A quelles contraintes mathématiques doivent-ils obéir ?
2. A quels nombres quantiques correspondent-elles (justifier votre réponse) ?
3. Cette fonction d'onde décrit-elle un état excité ou l'état fondamental de l'atome d'hydrogène ?
4. Déterminer la constante de normalisation N de cette fonction, on donne :

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

Exercice 04

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.

Exercice 05 : (supplémentaire)

Dans un atome hydrogénoïde de numéro atomique Z, la fonction 1s a pour expression :

$$\Psi_{1s}(r) = 2.\sqrt{\frac{z^3}{a_0}}.\exp\left(\frac{-z.r}{a_0}\right).\frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e.e^2}$$

1. Rappeler brièvement les contraintes mathématiques des nombres quantiques n, l et m des orbitales hydrogénoïdes.
2. A quels nombres quantiques correspondent-elles (justifier votre réponse) ?

3. Montrer que la fonction 1s d'un atome hydrogénoïde est normalisée.
4. Quelle est la probabilité de présence de l'électron dans l'orbitale atomique 1s de l'hydrogène entre $r=a_0/2$ et $r=5a_0$?
5. Trouver la partie radiale R et la partie angulaire Y de la fonction 1s

   On donne :

$$\int_0^{\infty} x^2 e^{-K.x} dx = \frac{2}{K^3}, \; dv = r^2 dr.\sin\theta d\theta.d\varphi \text{ et } \left[\, 0 \le r \le \infty, \; 0 \le \theta \le \pi, \; 0 \le \varphi \le 2\pi \,\right]$$

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

Exercice 06 : (supplémentaire**)**

Systèmes avec plusieurs électrons

Vous avez deux électrons et deux spin-orbitales $\varphi(\vec{r}_1)\alpha(1), \varphi(\vec{r}_2)\beta(2)$,

1. Construisez le déterminant de Slater Φ.
2. Évaluer le déterminant de Slater.
3. Calculer $S_z\Phi = ?$. Notez que $S_z = S_{z_1} + S_{z_2}$.
4. Calculer $\langle \Phi | S_z | \Phi \rangle = ?$