Travaux Dirigés n^{0}2

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 $\phi(\varphi) = k e^{im\varphi}$.
4. A partir des :

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

- Retrouver ces expressions en coordonnées cartésiennes.

Exercice 02

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 03

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

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

Exercice 04

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

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

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 :

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

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**, 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 $\mathbf{r=a_0}$ et $\mathbf{r=3a_0}$?
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 :

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

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