Atome d'hydrogène

2 1] Hamiltonien $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ 0,5

Valeurs propres $\hat{H} : E_n = -\frac{13,6}{n^2}\,(eV)$ 0,5

$\hat{L}^2 : \ell(\ell+1)\hbar^2$ 0,5

$\hat{L}_3 : m\hbar$ 0,5

2 2) $n \in \mathbb{N}^*$; $0 \leq \ell \leq n-1$; $-\ell \leq m \leq +\ell$

2 3/ $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$ $\quad a_0 = 0{,}53\,\text{Å}$ fct normée C

Densité volumique 1 $\rho_{v\,1s}(r,\theta,\varphi) = |\psi_{1s}|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$

Densité radiale 1 $\rho_{r\,1s}(r) = \int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} \rho_{v1s}(r,\theta,\varphi)\, r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$

$= 4\pi r^2 \rho_{v1s}(r)$

2 4) $\langle r \rangle, \langle r^2 \rangle, \Delta r$

$\langle r \rangle$ 0,5 $= \int_0^\infty r\,\rho_{r1s}(r)\,dr = \frac{1}{\pi a_0^3}\cdot 4\pi \underbrace{\int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}}\,dr}_{\frac{3!}{(2/a_0)^4}} = \frac{3}{2}a_0$

$\langle r^2 \rangle$ 0,5 $= \int_0^\infty r^2\rho_{r1s}(r)\,dr = \frac{1}{\pi a_0^3} 4\pi \underbrace{\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}}\,dr}_{\frac{4!}{(2/a_0)^5}} = 3a_0^2$

$\rightarrow (\Delta r)^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \frac{3}{4}a_0^2 \Rightarrow \Delta r = \frac{a_0\sqrt{3}}{2}$ 1

2 5) Distance au noyau où la densité radiale de probabilité de présence est maximale.

$\frac{d\rho_{r1s}(r)}{dr} = \frac{4}{a_0^3}\, r\, e^{-\frac{2r}{a_0}}\left[1 - \frac{r}{a_0}\right] = 0$ 1

$\Rightarrow r = a_0$ 1

2 6) Nombres quantiques $n\,\ell\,m$ $\quad \begin{cases} n = 1 \\ \ell = 0 \\ m = 0 \end{cases}$ 2