

L3 PHYSIQUE FONDAMENTALE
TRAVAUX PRATIQUES SUR ORDINATEURS DE PHYSIQUE QUANTIQUE

RAPPORT 3
~
ATOME D'HYDROGÈNE

ALEXANDRE FAURE et JULIEN DUPRE DE BAUBIGNY

2008 - 2009

Dans ce troisième rapport de mécanique quantique, nous proposons d'étudier l'atome d'hydrogène.

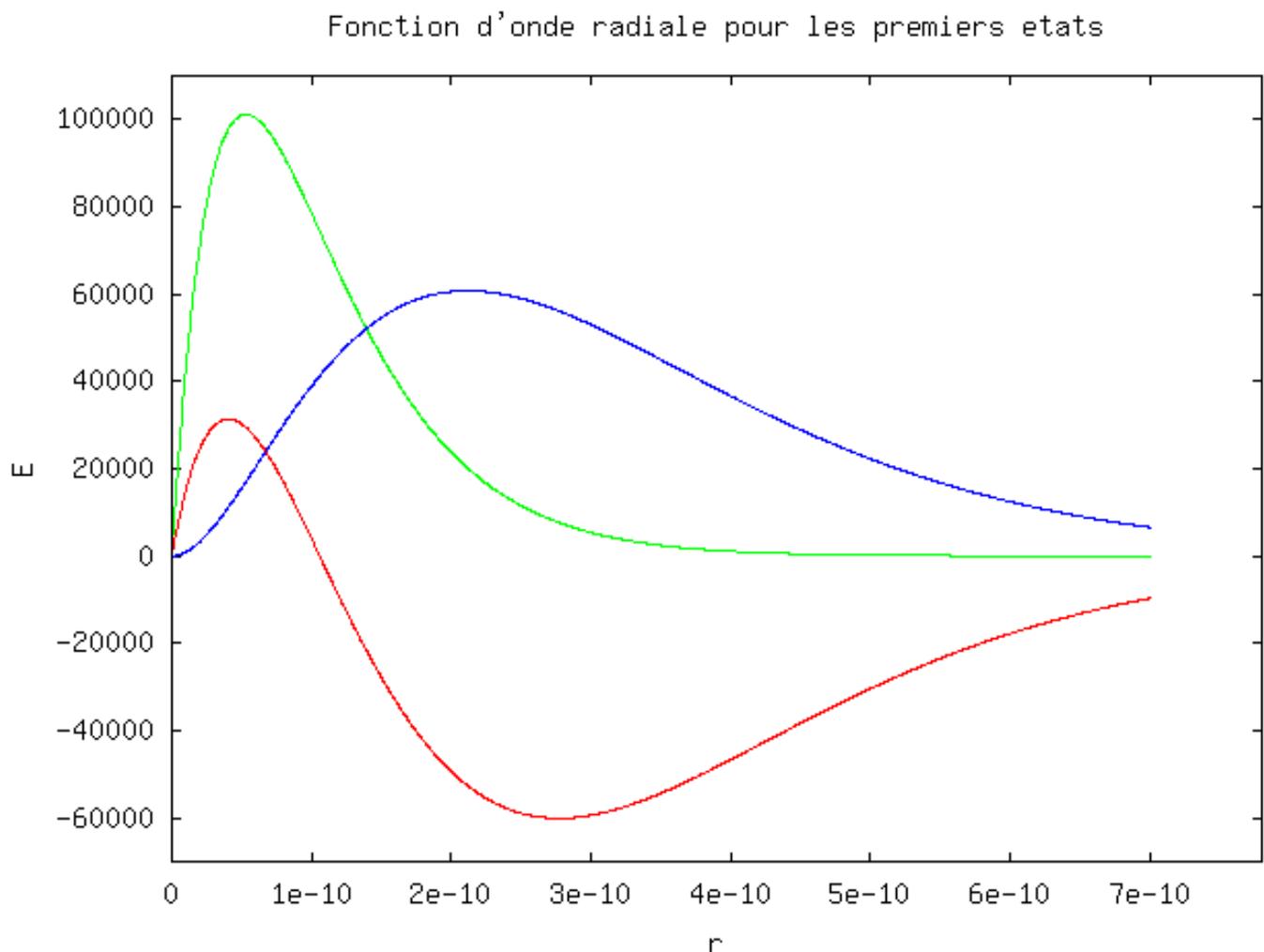
Nous considérerons donc la fonction d'onde en coordonnées sphériques. Par définition celle-ci peut s'écrire sous la forme d'une séparation de variables :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi)$$

I/ Partie radiale

I.1/ Nous allons tracer la fonction d'onde radiale pour les premiers états. Les expressions sont données en annexe, et nous modifierons le programme en conséquence :

```
rR10=2*(1/a0)^(3/2)*exp(-r./a0).*r;
rR20=(1/2*a0)^(3/2)*2*(1-r./(2*a0)).*exp(-r./(2*a0)).*r;
rR21=(1/2*a0)^(3/2)*2/sqrt(3)*r/(2*a0).*exp(-r./(2*a0)).*r;
```



On calcul l'énergie des états correspondants grâce à la formule suivante :

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}, \text{ avec } R_y = 13,605$$

L'énergie de l'état $rR10$, c'est à dire l'état 1s ($n=1$ et $l=0$), est égale à -13,6 eV.

L'énergie de l'état $rR20$, c'est à dire l'état 2s ($n=2$ et $l=0$), est égale à -3,4 eV.

L'énergie de l'état $rR21$, c'est à dire l'état 2p ($n=2$ et $l=1$), est égale à -3,4 eV.

Les états 1s et 2s ne peuvent être dégénérés, par contre l'état 2p peut l'être : nous avons trois nombres quantiques tertiaires possible ($m=-1,0,1$), c'est à dire 3 orbitales p de même énergie si elles ne sont pas dégénérées, ou d'énergies différentes si elles sont dégénérées.

I.2/ Soit un atome dans l'état 1s.

(a) Calculons le maximum de la densité de probabilité de présence :

Soit $\rho(r) = r^2 |R_{n,l}(r)|^2$, la densité de probabilité de présence orbitale.

$$\text{Résolvons l'équation suivante : } \frac{d\rho(r)}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^3 2 e^{\frac{-2r}{a_0}} \right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{2}{a_0^3} \left(2r e^{\frac{-2r}{a_0}} - \frac{2r^2}{a_0} e^{\frac{-2r}{a_0}} \right) = 0$$

$$\text{or, } \frac{4}{a_0^3} \neq 0 \text{ et } e^{\frac{-2r}{a_0}} \neq 0. \text{ Il résulte :}$$

$$\Leftrightarrow r - \frac{r^2}{a_0} = 0, \text{ et avec } r \neq 0,$$

$$\Leftrightarrow 1 = \frac{r}{a_0} \Leftrightarrow r = a_0$$

Le maximum de la densité de probabilité se trouve donc en $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$

(b) Déterminons maintenant la probabilité pour que l'électron soit entre $0,9 a_0$ et $1,1 a_0$:

Soit la formule suivante nous permettant de calculer la probabilité que

$$\text{l' électron soit à une distance inférieure à } r_0 : P(r < r_0) = 1 - e^{\frac{-2r_0}{a_0}} - 2 \frac{r_0}{a_0} e^{\frac{-2r_0}{a_0}} - 2 \frac{r_0^2}{a_0^2} e^{\frac{-2r_0}{a_0}}$$

Calculons P pour $r_0 = 0,9 a_0$ et $r_0 = 1,1 a_0$:

$$P(1,1 a_0) = 0,377 \text{ et } P(0,9 a_0) = 0,269$$

$$\text{Il résulte } P = P(1,1 a_0) - P(0,9 a_0) = 0,377 - 0,269 = 0,108$$

Cette probabilité est donc égale à 0,108

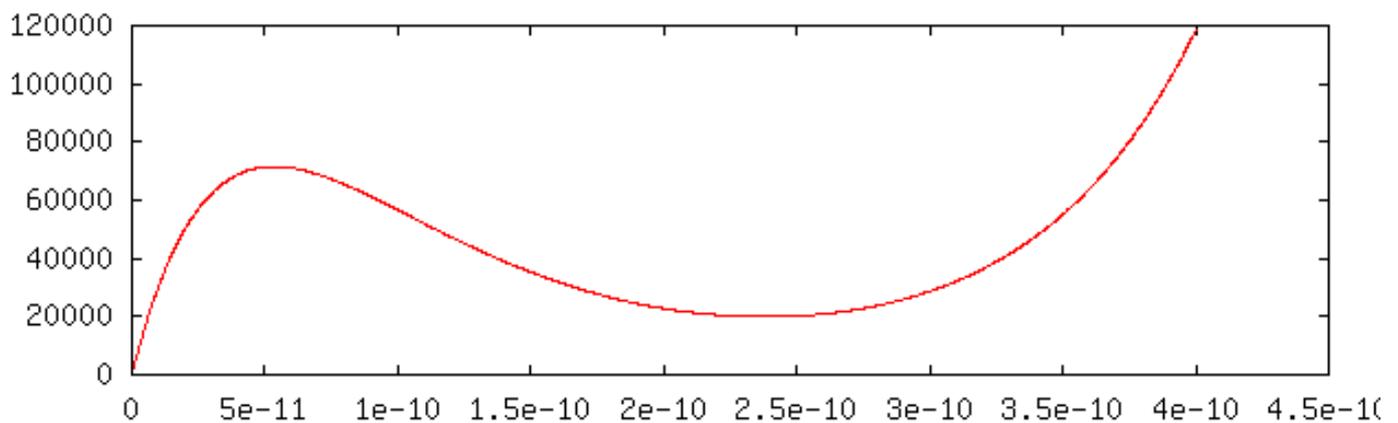
(c) Calculons finalement, la valeur moyenne de la position :

$$\text{Il vient trivialement, } \langle r \rangle_{1s} = a_0$$

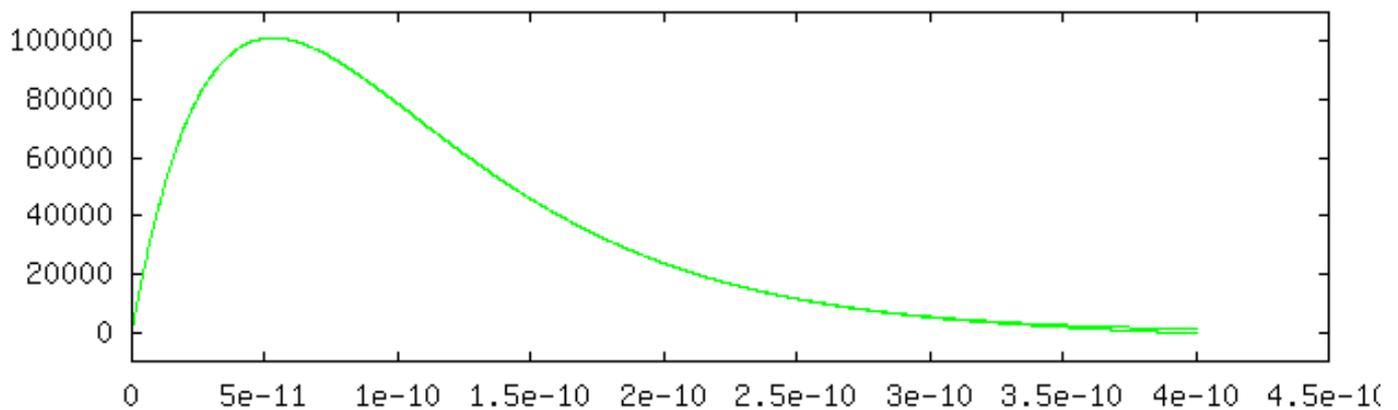
I.3/ On considère ici la fonction d'onde pour l'état 1s

On choisit comme paramètre : $n=1$; $l=0$; $E=-14$; $B=5$; $\text{Incr}=0.001$.

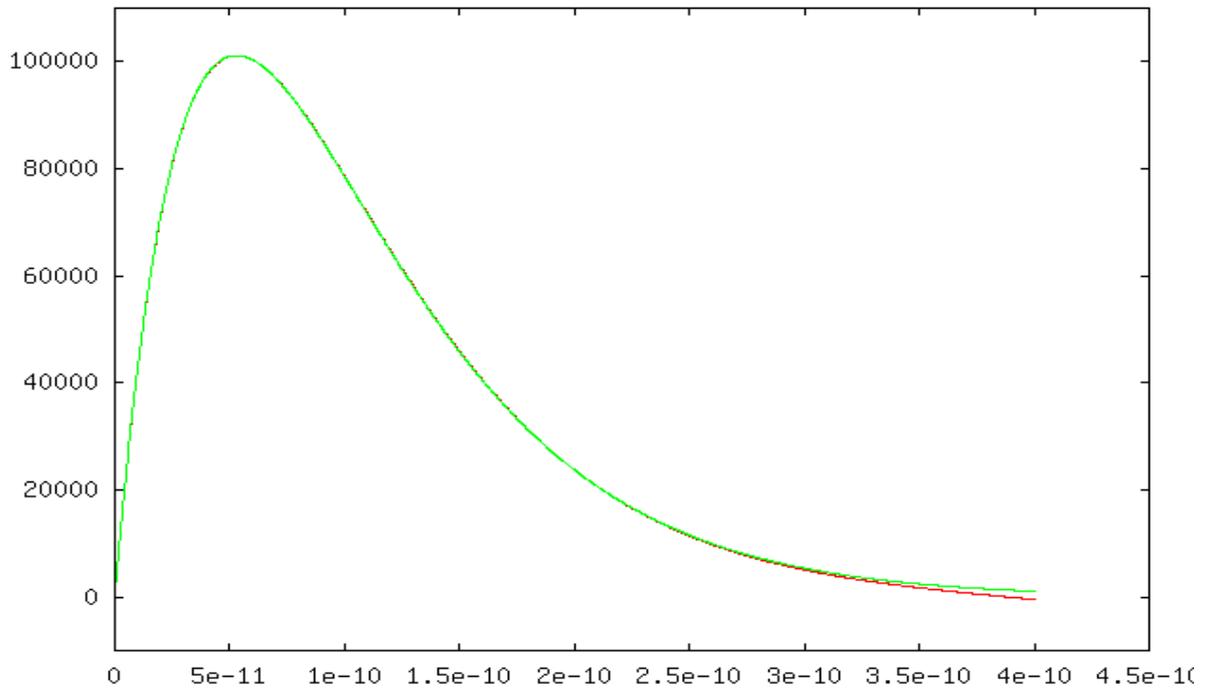
B désigne l'intervalle sur r sur lequel on calcule la fonction d'onde, E représente l'énergie de l'état de départ, et Incr indique le pas d'incrément.



$E = -13.585 \text{ eV}$



Le programme trouve une énergie $E = -13,585 \text{ eV}$, ce qui est très proche de $-13,6 \text{ eV}$!



La courbe **verte (théorique)** se superpose parfaitement avec la courbe **rouge (numérique)**, et de plus on observe que le maximum de la fonction d'onde radiale se situe aux alentours de $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$. (on rappelle que $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$)

II/ Partie angulaire

On obtient les fonctions $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ en résolvant les équations des valeurs propres des moments cinétiques L^2 et L_z . Nous avons en annexe les fonction orbitales $Y_{0,0}, Y_{1,0}, Y_{1,\pm 1}$.

On ne sait pas si ces fonctions caractérisent des états d'énergies différents !

En effet, l'état d'énergie est différent si le nombre quantique principal n est différent pour les fonctions orbitales. Or, les fonctions orbitales angulaires dépendent uniquement de l et m (pour un n donné).

On sait : $l < n$ et $-l \leq m \leq l$.

Des lors, $Y_{0,0}$ peut correspondre à n'importe quel état $n \geq 1$, et $Y_{1,0}$ et $Y_{1,\pm 1}$ à n'importe quel état $n \geq 2$.

Ces fonctions peuvent caractériser tous les états d'énergies, car elles ne dépendent pas explicitement de n . La dépendance de l implique la seule condition suivante : $l < n$.

Bonne année à vous ;)