MQ1-TD

Correction

MQ1 — 09 Orbitale atomique 1s (CCINP PC 2019)

L'exercice consiste en l'étude d'un potentiel en coordonnées sphériques, hors-programme. Dans le cours seuls les potentiels unidimensionnels sont abordés.

1) Une particule quantique est décrite par sa fonction d'onde, dont le module carré donne sa densité de probabilité de présence.

2) $|\varphi(\vec{r})|^2\,\mathrm{d}V$ est la probabilité de trouver l'électron dans le volume élémentaire $\mathrm{d}V$ autour de $\vec{r}$.

3) Ce facteur est un facteur de normalisation. L'électron se trouve forcément quelque part donc

$$\iiint_{\text{espace}} |\varphi_{1s}(\vec{r})|^2\,\mathrm{d}V = 1$$

4) Utilisons l'équation de Schrödinger, à l'aide de l'expression du laplacien et du potentiel coulombien

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m\,r^2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\,\frac{\mathrm{d}\varphi_{1s}(r)}{\mathrm{d}r}\right) - \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r}\,\varphi_{1s}(r) = E_{1s}\,\varphi_{1s}(r)$$

Calculons le laplacien

$$\frac{1}{r^2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\,\frac{\mathrm{d}\varphi_{1s}(r)}{\mathrm{d}r}\right) = -\frac{1}{r^2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{r^2}{r_0}\,\varphi_{1s}(r)\right) = -\frac{1}{r^2}\left(\frac{2\,r}{r_0} - \frac{r^2}{r_0^2}\right)\varphi_{1s}(r) = \left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{r\,r_0}\right)\varphi_{1s}(r)$$

alors l'équation de Schrödinger est

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{r\,r_0}\right)\varphi_{1s}(r) - \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r}\,\varphi_{1s}(r) = E_{1s}\,\varphi_{1s}(r)$$

Puisque $\varphi_{1s}(r)$ n'est jamais nulle, on a

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{r\,r_0}\right) - \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r} = E_{1s}$$

Cette équation est vraie **quelque soit** r. En regardant sa limite pour $r \to \infty$, on trouve

$$E_{1s} = -\frac{\hbar^2}{2\,m\,r_0^2} = -\frac{m\,e^4}{8\,h^2\,\varepsilon_0^2}$$

en utilisant l'expression du rayon de Bohr.

5) $|\varphi_{1s}(r)|^2$ est la densité volumique de probabilité de présence en un point $\vec{r}$, tandis que $P(r)$ est la densité linéïque de présence à une distance r du noyau, donc sur la sphère de rayon r. Il faut ainsi intégrer sur la sphère de rayon r la densité volumique de probabilité de présence

$$P(r) = \oiint_{S(r)} |\varphi_{1s}(r)|^2\,\mathrm{d}S = |\varphi_{1s}(r)|^2 \oiint_{S(r)} \mathrm{d}S = 4\,\pi\,r^2\,|\varphi_{1s}(r)|^2$$

et on identifie effectivement

$$P(r) = 4\,\frac{r^2}{r_0^3}\,\exp\left(-\frac{2\,r}{r_0}\right)$$

6) La courbe est visiblement asymétrique, donc la moyenne n'a pas de raison d'être atteinte en son maximum $r = r_0$.