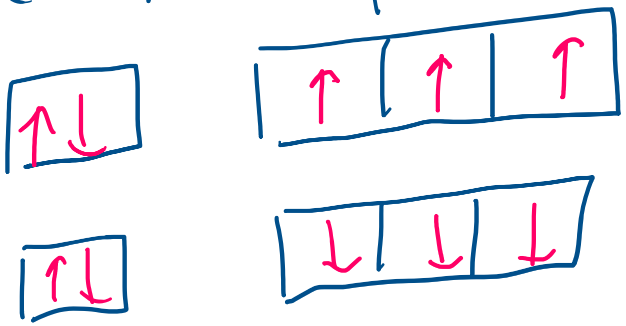
Exercice 1

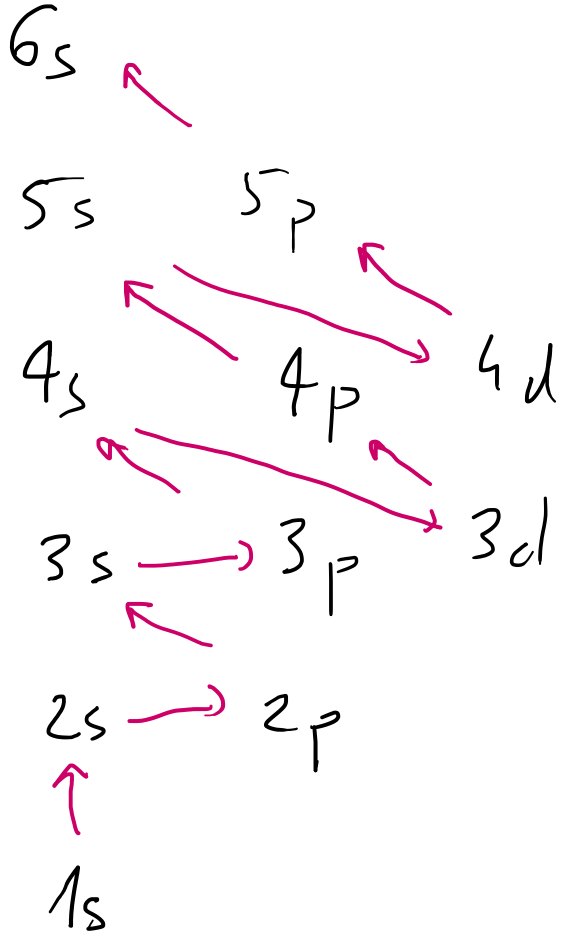
Déterminer la configuration électronique de l'état fondamental de B (Z = 5), P (Z = 15), Mn (Z = 25) et Mo (Z = 42). Préciser par un schéma le remplissage de la dernière couche.

B (Z = 5) : $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^1$ ∴ $[He](2s)^2(2p)^1$

P (Z = 15) : $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^3$

$[Ne] (3s)^2 (3p)^3$



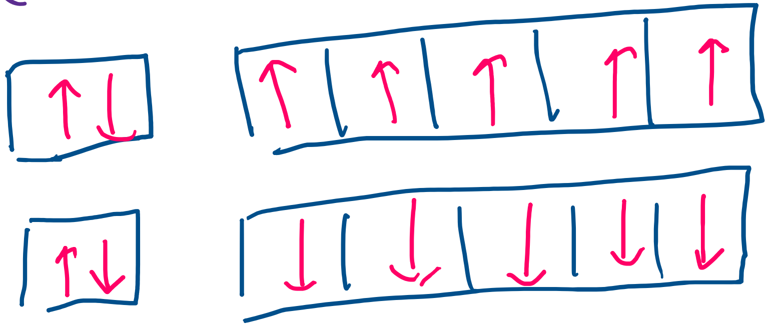


Exercice 1

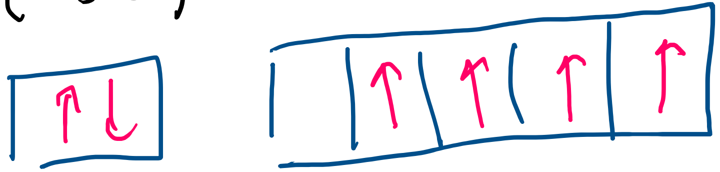
Déterminer la configuration électronique de l'état fondamental de B (Z = 5), P (Z = 15), Mn (Z = 25) et Mo (Z = 42). Préciser par un schéma le remplissage de la dernière couche.

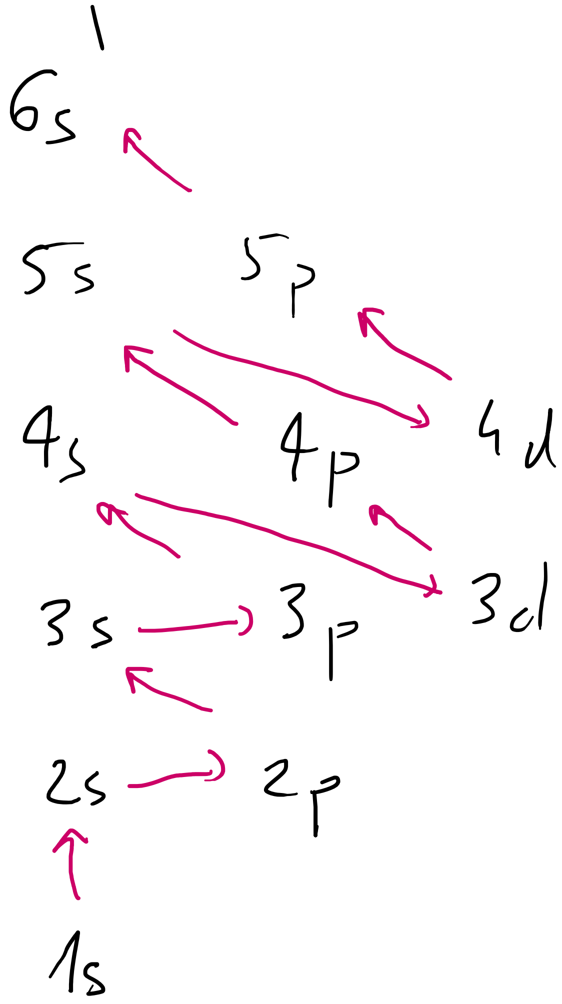
Mn (Z=25) : $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(4s)^2(3d)^5$

$[Ar](4s)^2(3d)^5$



Mo (Z=42) : $[Kr](5s)^2(4d)^4$





Exercice 2

Les affirmations suivantes relatives à un électron d'un atome, dont l'énergie est définie par les nombres quantiques n = 5 et m = 2, sont-elles exactes ? Justifier.

a) cet électron est obligatoirement dans un état fondamental ;

b) cet électron peut se trouver dans une sous-couche d ;

c) cet électron peut présenter un nombre de spin $m_s = -½$

a. FAUX $n = 5$ $m = 2$

état fondamental = état de + basse énergie

b- Oui $m = 2 \Rightarrow l \geq 2$ $(cm - m_l \leq l \leq m_l)$

Si $l = 2 \Rightarrow$ ss-couche d

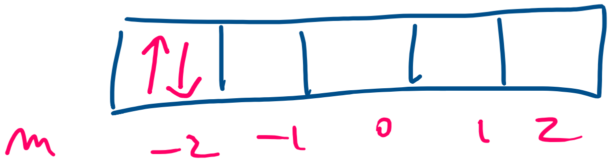
c- Oui $m_s = +1/2$ ou $-1/2$

Exercice 3

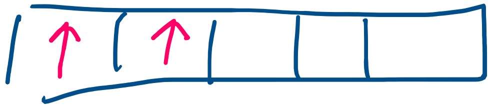
Indiquer si pour deux électrons <u>non appariés</u> d'un même atome, situés dans une <u>sous-couche 4*d*</u>, les séries suivantes de valeurs des nombres quantiques sont possibles ? Justifier.

a) électron 1 $n = 4 ; l = 2 ; m = -2 ; m_s = ½$
électron 2 $n = 4 ; l = 2 ; m = -2 ; m_s = -½$

⇒ 2e⁻ appariés ⇒ NON

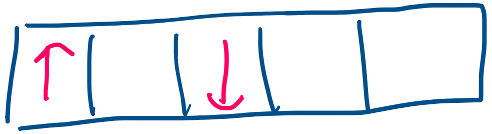


b) électron 1 $n = 4 ; l = 2 ; m = -2 ; m_s = ½$
électron 2 $n = 4 ; l = 2 ; m = -1 ; m_s = ½$



⇒ OUI

c) électron 1 $n = 4 ; l = 2 ; m = -2 ; m_s = ½$
électron 2 $n = 4 ; l = 2 ; m = 0 ; m_s = -½$



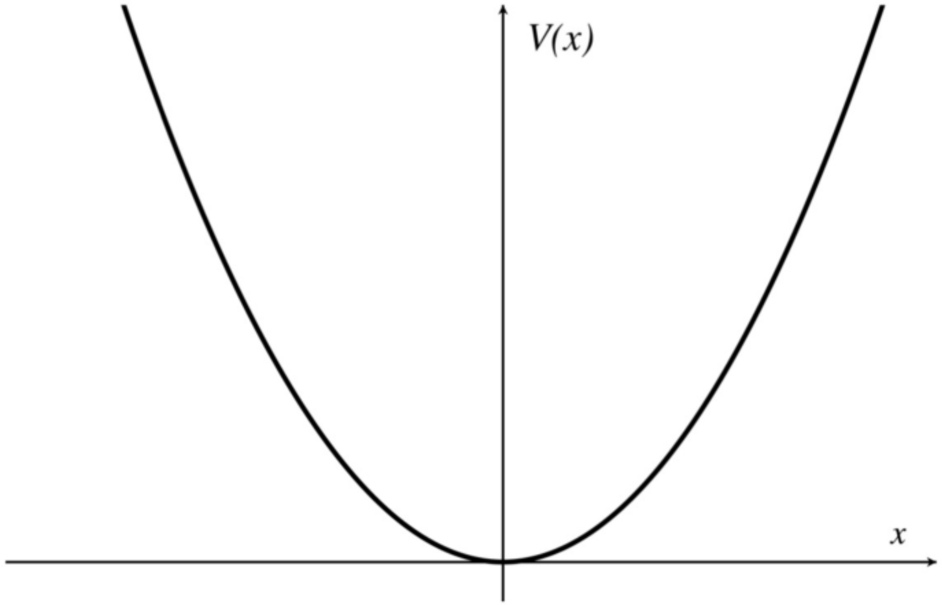
⇒ OUI

d) électron 1 $n = 4 ; l = 2 ; m = -2 ; m_s = ½$
électron 2 $n = 4 ; l = 2 ; m = -2 ; m_s = 0$

⇒ NON

$m_s = 0$ est impossible

On considère le cas d'une particule de masse m dans le puits monodimensionnel schématisé ci-dessous où le potentiel V(x) est égal à x^2.



1) Montrer que l'hamiltonien d'un tel système s'écrit $\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x^2$

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ $\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$

$\hat{V} = V(x) = x^2$

$\Rightarrow \hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + x^2$

2) Montrer que la fonction $\psi(x) = Ne^{\left(-\frac{kx^2}{2}\right)}$ est fonction propre de l'opérateur hamiltonien si $k = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$. En déduire l'expression de l'énergie totale E. On supposera par la suite que cette fonction décrit l'état fondamental de la particule.

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right) N e^{-\frac{kx^2}{2}}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx}\left(N e^{-\frac{kx^2}{2}}\right) + x^2 N e^{-\frac{kx^2}{2}}$$

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-\frac{kx^2}{2}}\right) = -\frac{2xk}{2} e^{-\frac{kx^2}{2}} = -kx\, e^{-\frac{kx^2}{2}}$$

2) Montrer que la fonction $\psi(x) = Ne^{\left(-\frac{kx^2}{2}\right)}$ est fonction propre de l'opérateur hamiltonien si $k = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$. En déduire l'expression de l'énergie totale E. On supposera par la suite que cette fonction décrit l'état fondamental de la particule.

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-\frac{kx^2}{2}}\right) = -\frac{2xk}{2}e^{-k\frac{x^2}{2}} = -kx\,e^{-\frac{kx^2}{2}}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-\frac{kx^2}{2}}\right) = \frac{d}{dx}\left(-kx\,e^{-\frac{kx^2}{2}}\right) = -k\,e^{-\frac{kx^2}{2}} + \left(-kx\,e^{-\frac{kx^2}{2}}\right)\cdot(-kx)$$

$$= -k\,e^{-\frac{kx^2}{2}} + k^2x^2\,e^{-\frac{kx^2}{2}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-kNe^{-\frac{kx^2}{2}} + k^2x^2Ne^{-\frac{kx^2}{2}}\right) + x^2Ne^{-\frac{kx^2}{2}} =$$

2) Montrer que la fonction $\psi(x) = Ne^{\left(-\frac{kx^2}{2}\right)}$ est fonction propre de l'opérateur hamiltonien si $k = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$. En déduire l'expression de l'énergie totale E. On supposera par la suite que cette fonction décrit l'état fondamental de la particule.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k \underbrace{Ne^{-\frac{kx^2}{2}}}_{\psi(x)} + k^2x^2 \underbrace{Ne^{-\frac{kx^2}{2}}}_{\psi(x)}\right) + x^2 \underbrace{Ne^{-\frac{kx^2}{2}}}_{\psi(x)} =$$

$$= \frac{k\hbar^2}{2m}\psi - \frac{k^2\hbar^2x^2}{2m}\psi + x^2\psi$$

ψ est fonction propre de H si $\hat{H}\psi = \text{scalaire} \times \psi$

$$\Leftrightarrow -\frac{\hbar^2k^2x^2}{2m}\psi + x^2\psi = 0 \Leftrightarrow \frac{\hbar^2k^2}{2m} = 1$$

$$\Leftrightarrow k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \Leftrightarrow k = \pm\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$$

2) Montrer que la fonction $\psi(x) = Ne^{\left(-\frac{kx^2}{2}\right)}$ est fonction propre de l'opérateur hamiltonien si $k = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$. En déduire l'expression de l'énergie totale E. On supposera par la suite que cette fonction décrit l'état fondamental de la particule.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k\underbrace{Ne^{-\frac{kx^2}{2}}}_{\psi(x)} + k^2x^2\underbrace{Ne^{-\frac{kx^2}{2}}}_{\psi(x)}\right) + x^2\underbrace{Ne^{-\frac{kx^2}{2}}}_{\psi(x)} =$$

$$= \frac{k\hbar^2}{2m}\psi - \frac{k^2\hbar^2x^2}{2m}\psi + x^2\psi$$

$$\hat{H}\psi = E\psi = \frac{k\hbar^2}{2m} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{2m} = \boxed{\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} = E}$$

3) Normer cette fonction d'onde. On donne $\int_{-\infty}^{\infty} e^{(-ax^2)} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{kx^2}{2}} \cdot e^{-\frac{kx^2}{2}} dx$$

$$= N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-kx^2} \cdot dx = \sqrt{\frac{\pi}{k}} \cdot N^2 = 1$$

donc $N^2 = \sqrt{\frac{k}{\pi}} \iff N = \pm \left(\frac{k}{\pi}\right)^{1/4}$

Par la suite, on choisit $N = \left(\frac{k}{\pi}\right)^{1/4}$ par commodité

4) Soit $\phi(x)$ une autre fonction propre de l'opérateur hamiltonien. Que dire de $\langle\psi|\phi\rangle$

Les fonctions propres de $\hat{H}$ sont orthonormées

$$\Rightarrow \langle\psi|\phi\rangle = \begin{cases} 1 \text{ si } \psi = \phi \\ 0 \text{ si } \psi \neq \phi \text{ (orthogonalité)} \end{cases}$$

5) Calculer pour l'état fondamental <x>. Commenter.

$$\langle x \rangle = \frac{\langle \psi | x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \langle \psi | x | \psi \rangle$$ car normée

$$\int_{-\infty}^{\infty} N^2 e^{-kx^2} x \, dx = \left[N^2 \frac{e^{-kx^2}}{2} \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

$\Rightarrow$ la position moyenne de la particule se trouve au centre du puits en $x = 0$

6) Déterminer la limite inférieure du produit $\Delta x\, \Delta p_x$. Le résultat vérifie-t-il le principe d'incertitude de Heisenberg ? On donne :

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

$$\Delta C = \sqrt{\langle C^2\rangle - \langle C\rangle^2}$$

$$\Delta A \Delta B \geqslant \frac{1}{2i}\left|\left\langle\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]\right\rangle\right|$$

$$\Delta x\, \Delta p_x \geqslant \frac{1}{2i}\left|\left\langle\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right]\right\rangle\right|$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] f = \hat{x} \cdot \hat{p}_x f - \hat{p}_x \cdot \hat{x} f$$

$$= x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) f + i\hbar\frac{d}{dx}(x \cdot f)$$

$$= -i\hbar x f' + i\hbar f + i\hbar x f' = i\hbar f$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \qquad \Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{1}{2i}\left|\langle i\hbar\rangle\right| \Leftrightarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}$$