

Cours d'introduction à la chimie quantique

Chapitre 4 : Atome hydrogénoïde

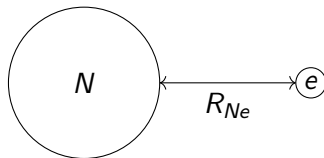
Partie 1 : Fonction radiale

François Dion

2020

Le système

Un atome de type hydrogénoïde possède un seul électron (atome d'hydrogène, ions He^+ , Li^{2+} , etc.) Le système est donc un électron et un proton en interaction



L'interaction entre le proton (charge Ze et l'électron (charge e) se décrit par

$$V_{Ne} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

où e est la charge de l'électron, Z est la charge du noyau, ϵ_0 est la permittivité du vide et r est la distance qui sépare l'électron du noyau

On s'intéresse ici à l'électron en interaction avec le proton. Ce dernier est vu comme une charge immobile. On traitera en premier lieu la fonction radiale. L'hamiltonien est

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$