

Fonction & Intégration Numérique

Normalisation de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène dans l'état 1s

Dans ce TD on s'intéresse à l'atome d'hydrogène dans son état fondamental 1s. On donne pour cela l'expression de la fonction d'onde en coordonnées sphériques pour la densité de probabilité de présence de l'électron dans l'atome où a_0 est le rayon de Bohr et vaut : $a_0 = 0.51 \times 10^{-10} \text{m}$

$$\varphi_{1s} = \rho_0 e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Préparation :

A partir de la fonction d'onde de l'état en coordonnées sphériques montrer que la fonction densité de probabilité de présence radiale s'écrit :

$$\rho(r) = 4\pi r^2 \rho_0^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

Avec $dP(r) = \rho(r)dr$

On ne connaît pas la valeur de ρ_0 dans cette expression. Son calcul peut être mené à la main par une double intégration par partie. La méthode proposée ici consiste à obtenir la réponse de façon purement numérique. A tracer le graphe de la fonction et vérifier que le rayon de Bohr correspond bien au maximum de probabilité de présence radiale [terme qu'il faudra expliquer].

1 Tracé de la fonction

1a - Fonction densité de probabilité

Écrire une fonction **densiteZero**(r) qui prend le rayon r en argument et renvoie la valeur de l'expression suivante :

$$d_0(r) = r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

1b - Listes des abscisses et des ordonnées

Écrire une fonction **mesAbscisses**(a, b, N = 10) qui renvoie une **liste de N abscisses de a à b inclus**, ainsi qu'une fonction **mesOrdonnees**(fonction, listeAbscisses) qui prend en argument la fonction à évaluer (ici densiteZero) ainsi que la liste des abscisses auxquelles on l'évalue.

Combien y a-t-il d'intervalles si l'on échantillonne la fonction en N-points ?

Cette démarche très générale est valide pour tout tracé de fonction.

Rq : Ne pas confondre l'abscisse a de [a, b] et le rayon de Bohr a_0 qui se trouve dans [a,b].

1c - Tracé de la fonction non normalisée

Vérifier vos fonctions python en traçant la fonction **densiteZero** dans une fenêtre graphique.

2 Partie intégrale numérique

2a - Intégrale sur un intervalle

Écrire une fonction **integrale**(fonction, a, b, N) qui calcule l'intégrale de la densité Zero sur un intervalle [a, b] quelconque avec un découpage en N tronçons. Vous pouvez intégrer par la méthode des rectangles ou des trapèzes ou les deux si le temps le permet. Votre fonction doit s'appuyer sur les fonctions mesOrdonnées et mesAbscisses.

Rq : On partira de base sur des intervalle

2b - Normalisation de la fonction d'onde

On sait que la probabilité que l'électron soit « quelque part » vaut 1. Ce qui se traduit par l'intégrale suivante de la densité de probabilité normalisée :

$$1 = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho_0^2 e^{-2a_0 r} dr$$

Écrire une fonction **normalisation**(ordonnee, kappa = 1) qui prend en argument la listes des ordonnées de la fonction à normaliser ainsi qu'un facteur kappa de normalisation.

Dans notre cas le facteur kappa sera simplement l'inverse de l'intégrale précédente car l'intégrale de « kappa fois la fonction » doit valoir 1.

Ceci n'est toutefois valide que pour un choix raisonnable de a et de b. On peut prendre a = 0 mais impossible numériquement d'avoir b infini. Comment choisir b ?

Justifier à partir du graph de la fonction densitéZero que b = 10.a₀ suffit à avoir une intégrale raisonnablement précise. Vous pourriez bien sûr choisir b plus grand, est-ce forcément une bonne idée ? A quelle condition ?

1c - Tracé de la fonction normalisée !

Tracer la fonction d'onde une fois normalisée. Commenter les valeurs obtenues en abscisses et en ordonnées. Ces Ordres De Grandeur vous semblent-ils cohérent ?

Rq : on Peut aussi choisir N très grand pour calculer l'intégrale avec précision et prendre un autre N plus petit pour le tracé qui ne demande pas plus de 100 points pour un rendu graphiquement correct.

3 Etude du maximum

3a - Recherche du maximum

Écrire une fonction de recherche(x, y) qui prends en argument les listes d'abscisses et d'ordonnées de la fonction normalisée, et qui renvoie les coordonnées du maximum dans un tuple.

3b - Rayon de Bohr

Commenter la valeur du rayon obtenu pour l'abscisse du maximum de probabilité. Quelle est la signification physique de ce maximum de probabilité, sachant que l'on est en coordonnées sphériques ?

3c - Représentation du maximum

A partir de ces coordonnées ajouter un cercle rouge sur le maximum de la courbe, ainsi que des lignes en tirets : verticale vers son abscisse et horizontale son ordonnée.

