2. le rayon R de la sphère sur laquelle la densité de présence électronique est maximum

La densité radiale de présence électronique $D_{1s}(r)$ sur une sphère de rayon r est donnée

$$D_{1s}(r) = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2$$

$$= \frac{4r^2}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

La vartiation de $D_{1s}(r)$ en fonction de r est tracée sur la **fig. 2**

Le maximum de $D_{1s}(r)$ est obtenu pour :

$$\frac{dD_{1s}(r)}{dr} = 0$$

$$= \frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(2r - \frac{2r^2}{a_0}\right)$$

Cette expression s'annule pour r = 0, ce qui correspond au minimum $D_{1s}(r) = 0$

t pour $r = a_0$, correspondant au maximum de $D_{1s}(r)$.

e rayon R de la sphère sur laquelle la densité de présence électronique est maximum es

$$\boxed{R = a_0}$$ Cette sphère est l'orbite de Bohr.

le rayon moyen de l'orbitale 1s est donné par

$$\langle r_{1s} \rangle = \langle \psi_{1s} | r | \psi_{1s} \rangle$$

$$\langle r_{1s} \rangle = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

$$\langle r_{1s} \rangle = \frac{4}{a_0^3} \cdot \frac{3a_0^4}{8} \Longrightarrow \boxed{\langle r_{1s} \rangle = \frac{3}{2} a_0}$$

La comparaison

$$1 = 4\pi {N_{1s}}^2 a_0^3 \Longrightarrow N_{1s} = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

Donc $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$

2ème méthode : On peut utiliser aussi $d\tau = r^2 dr sin\theta d\theta d\varphi$

$$\langle \psi_{1s} | \psi_{1s} \rangle = 1 = {N_{1s}}^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2\frac{r}{a_0}} dr \int_0^{\pi} sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$1 = {N_{1s}}^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2\frac{r}{a_0}} [cos\theta]_0^{\pi} [\varphi]_0^{2\pi} = 4\pi {N_{1s}}^2 \frac{2!}{(2Z)^3} = \frac{\pi {N_{1s}}^2}{Z^3}$$

$$\Longrightarrow N_{1s} = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}$$

1. La densité de présence (ou probabilité de présence) est donnée par :

$$p_{1s}(r) = \psi_{1s}^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2\frac{r}{a_0}}$$

$p_{1s}(r)$ est maximum pour $\boldsymbol{r = 0}$, sur le noyau de l'atome

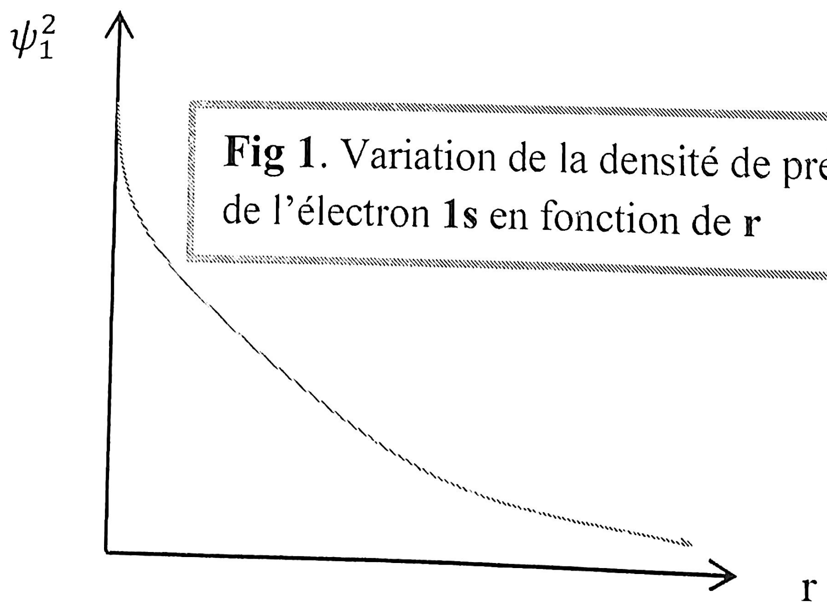

Fig 1. Variation de la densité de présence de l'électron **1s** en fonction de **r**

Exercice 3.2

1. L'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène est $\psi_{1s}=N_{1s}e^{-\frac{r}{a_0}}$

La constante N_{1s} est obtenue par normalisation :

$\int \psi_{1s}{}^{*}\psi_{1s}dv = 1 = \langle\psi_{1s}|\psi_{1s}\rangle = 1$ selon Dirac. 1s est une sphère $V=\frac{4}{3}\pi r^3 \Rightarrow dV = 4\pi r^2 dr$

On tient compte l'intégrale $\int_0^\infty x^n\, e^{-ax}dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$ $(a > 0)$.

$\int \psi_{1s}{}^{*}\psi_{1s}dv = 1$

$$1 = 4\pi N_{1s}{}^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\frac{r}{a_0}}\, dr$$