Orbitales atomiques

F. Kany. ISEN-Brest. La Croix-Rouge.

Définitions

Tracer les premières orbitales de l'atome d'hydrogène. On précisera, en particulier, à quelle distance du noyau (exprimée en unité a_0) se trouve la probabilité maximale de trouver l'électron pour les orbitales $1s$, $2s$, $2p$, $3s$ et $3d$.

On donne les parties radiales et angulaires des premières fonctions d'onde.

Orbitale	$R_{n,\ell}(r)$	$Y(\theta,\varphi)$
$1s$	$R_{1,0} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.2.e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$2s$	$R_{2,0} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{2\sqrt{2}}.(2-\frac{r}{a_0}).e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$2p_x$	$R_{2,1} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{2\sqrt{6}}.\frac{r}{a_0}.e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}.\sin\theta.\cos\varphi$
$2p_y$	$R_{2,1} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{2\sqrt{6}}.\frac{r}{a_0}.e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}.\sin\theta.\sin\varphi$
$2p_z$	$R_{2,1} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{2\sqrt{6}}.\frac{r}{a_0}.e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}.\cos\theta$
$3s$	$R_{3,0} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{3}}.\left(6-\frac{4.r}{a_0}+\frac{4.r^2}{9.a_0^2}\right).e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$3p_z$	$R_{3,1} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{6}}.\frac{2.r}{3.a_0}.\left(4-\frac{2.r}{3.a_0}\right).e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}.\cos\theta$
$3d_{z^2}$	$R_{3,2} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{30}}.\frac{4.r^2}{9.a_0^2}.e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}.(3\cos^2\theta-1)$
$3d_{xy}$	$R_{3,2} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{30}}.\frac{4.r^2}{9.a_0^2}.e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}.\sin^2\theta.\sin(2\varphi)$
$3d_{xz}$	$R_{3,2} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{30}}.\frac{4.r^2}{9.a_0^2}.e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}.\sin(2\theta).\cos\varphi$
$3d_{yz}$	$R_{3,2} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{30}}.\frac{4.r^2}{9.a_0^2}.e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}.\sin^2\theta.\sin\varphi$
$3d_{x^2-y^2}$	$R_{3,2} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}.\frac{1}{9\sqrt{30}}.\frac{4.r^2}{9.a_0^2}.e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}}.\sin^2\theta.\cos(2\varphi)$