



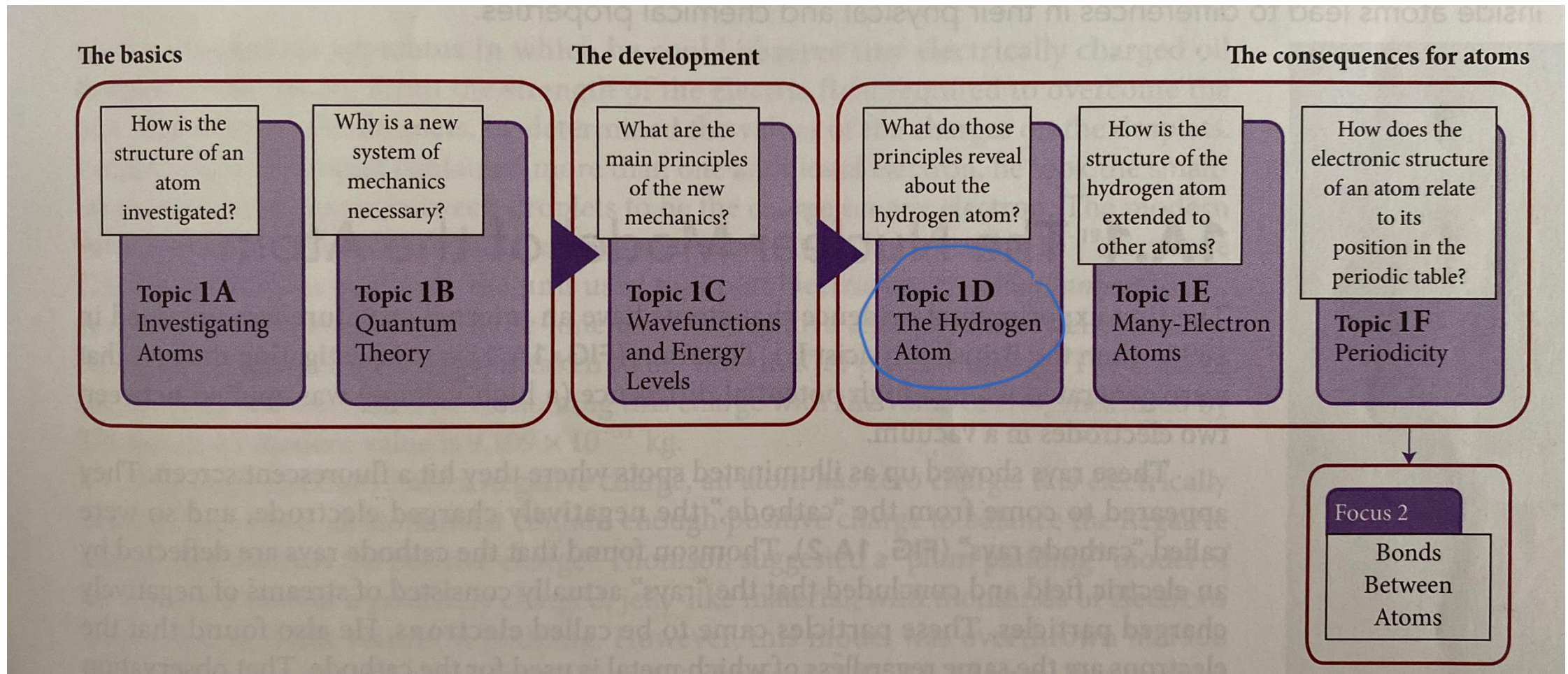
CH-110 Chime
Générale Avancée I

Prof. A. Steinauer
angela.steinauer@epfl.ch

L'atome d'hydrogène

Topic 1D

Overview Chapter 1 (Focus 1: Atoms)



Topic 1D.1 Les niveaux d'énergies

Topic 1D.2 Les orbitales atomiques

Topic 1D.3 Nombres quantiques, couches, sous-couches

Topic 1D.4 La forme des orbitales

Topic 1D.5 Spin de l'électron

Topic 1D.6 La structure électronique de l'hydrogène: un résumé

POURQUOI FAUT-IL CONNAITRE CES
SUJETS ?

- L'atome d'hydrogène est **l'atome le plus simple** et il est utilisé pour illustrer **les structures de tous les atomes**.
- Il est donc **central** à de nombreux concepts chimiques.

LES SUJETS QUE VOUS DEVRIEZ DÉJÀ
MAITRISER ?

- Les caractéristiques du **spectre atomique de l'hydrogène** (Topic 1A)
- Les concepts de **fonctions d'onde** et de **niveaux d'énergies** en mécanique quantique (Topic 1C)

1D L'atome d'hydrogène

Mise en place du concept

Dans le Topic 1A, nous avons rencontré cette équation

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), n_1 = 1, 2, \dots, \text{ and } n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$$

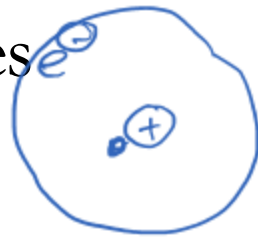
La constante de Rydberg, $R = 3.29 \times 10^{15} \text{ Hz}$

- D'où vient ce **pattern** et d'où viens la **valeur** de R ?
- L'exemple 1C.1 nous donne un indice : les raies spectres sont dues aux transitions entre les niveaux d'énergies autorisés de l'atome, la différence d'énergie est émise par un photon d'énergie $h\nu$
- **But de ce Topic:** construire un modèle de mécanique quantique de l'atome d'hydrogène en utilisant le fait que l'électron possède des propriétés d'onde, est décrit par une fonction d'onde et possède des niveaux d'énergie quantifiés.

Les niveaux d'énergies

Topic 1D.1

1D.1 Les niveaux d'énergies



Jusqu'ici...

- **Encore une fois:** un **électron** au sein d'un atome ressemble à une **particule** dans une boîte, dans le sens où il est confiné à une région de l'espace proche de l'atome, non pas par des **parois**, mais par l'**attraction électrostatique du noyau**.
- Il s'en suit que les **conditions de bords** s'appliquent aussi aux atomes.
- En résolvant l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène produira, de manière similaire, **des niveaux d'énergies discrets**.

1D.1 Les niveaux d'énergies

Les niveaux d'énergies autorisé pour l'électron dans l'atome d'hydrogène:

Pour obtenir l'expression pour les différents niveaux d'énergies de l'électron dans l'atome d'hydrogène il faut résoudre l'équation de Schrödinger. Considérez:

1. Le mouvement en trois dimensions.
2. À la place des parois, l'électron est soumis à un **potentiel de Coulomb** exercé par le noyau. L'énergie du potentiel de Coulomb pour un électron de charge $-e$ à une distance r du noyau de charge $+e$ est donnée par:

$$V(r) = \frac{(-e) \times (+e)}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

ϵ_0 : constante diélectrique

1D.1 Les niveaux d'énergies

Les niveaux d'énergies autorisés pour l'électron dans l'atome d'hydrogène:

Schrödinger a résolu son équation en utilisant ce potentiel:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Il a trouvé que les niveaux d'énergies autorisés pour l'électron dans l'atome d'hydrogène sont donnés par:

$$E_n = -\frac{hR}{n^2}$$

Fomule importante.
Savoir l'utiliser.

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2}$$
 with $n = 1, 2, \dots$

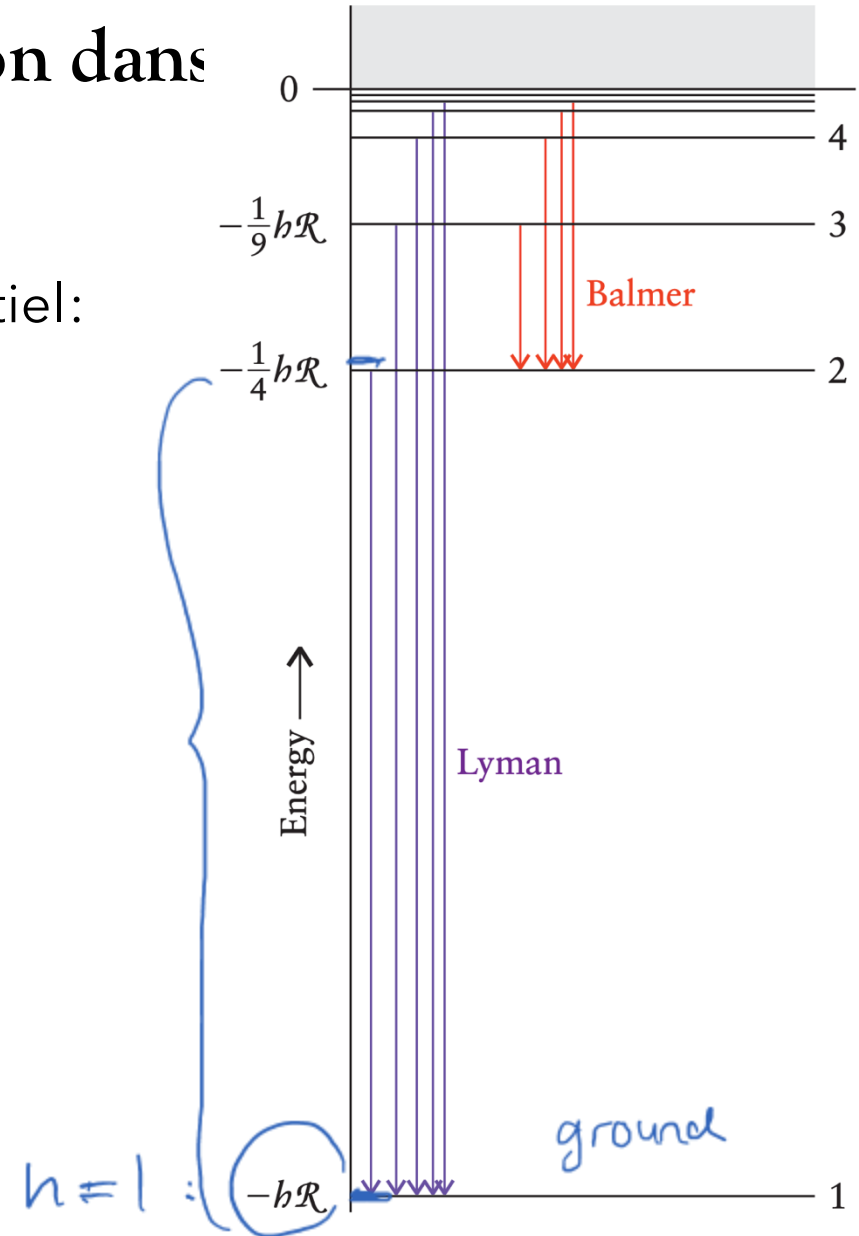


Figure 1D.1

1D.1 Les niveaux d'énergies

Que nous dit cette équation?

$$E_n = -\frac{hR}{n^2}$$

Formule importante.
Savoir l'utiliser.

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \text{ with } n = 1, 2, \dots$$

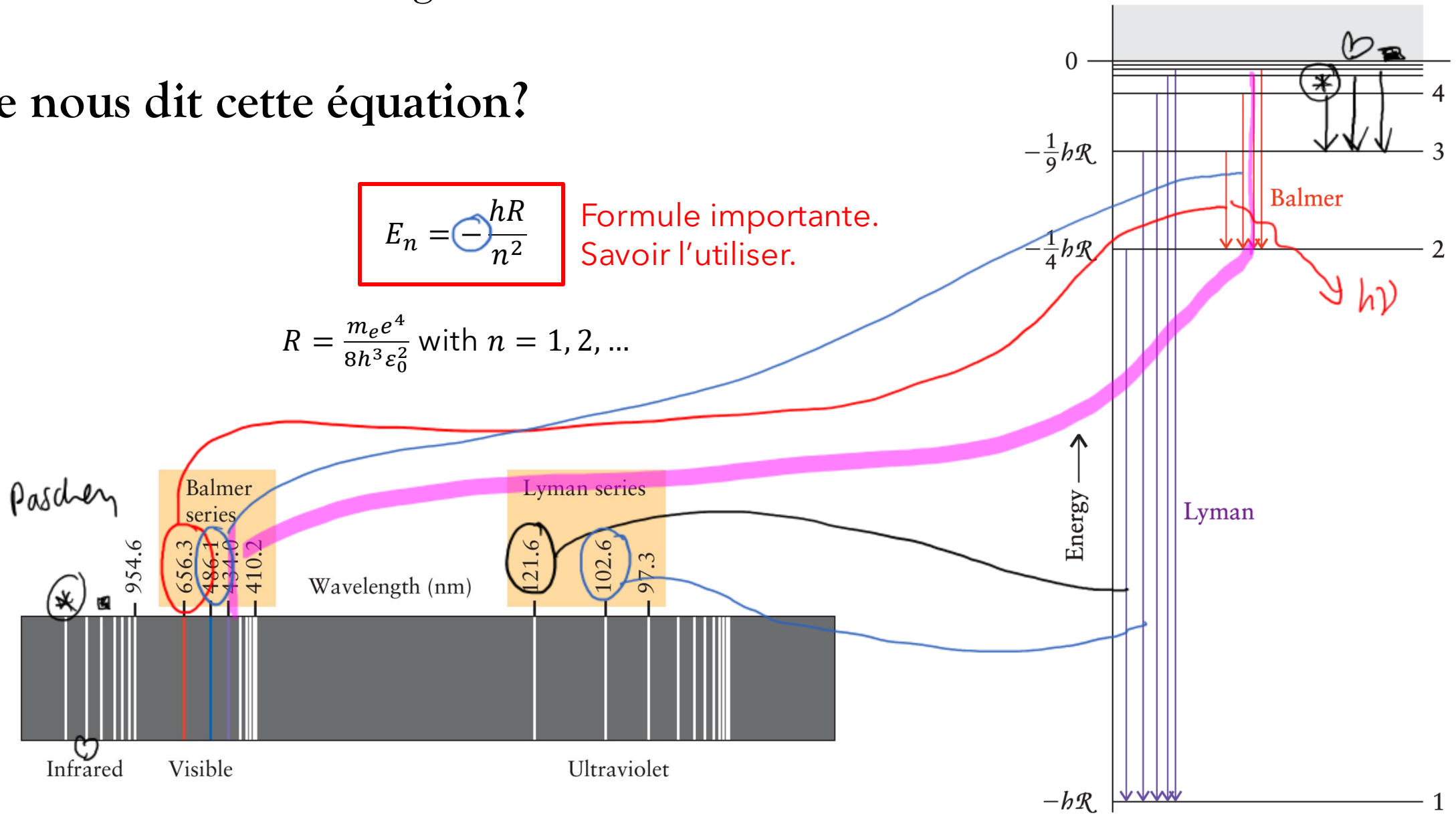


Figure 1D.1

1D.1 Les niveaux d'énergies

Que nous dit cette équation?

$$E_n = -\frac{hR}{n^2}$$

Formule importante.
Savoir l'utiliser.

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \text{ with } n = 1, 2, \dots$$

- Toutes les énergies sont **néglatives**: l'électron a une énergie plus basse loin du noyau, il faut fournir de l'énergie pour arracher un électron à un atome.
- Il existe un **nombre quantique**, n , similaire à celui de la particule dans la boîte. L'énergie est quantifiée, ne prend que des valeurs discrètes.
- n apparaît dans le **dénominateur**: si n augmente, les énergies des niveaux successifs augmente (devient moins négatifs). L'énergie tend vers zéro, l'électron est sur le point de **s'échapper** de l'atome.

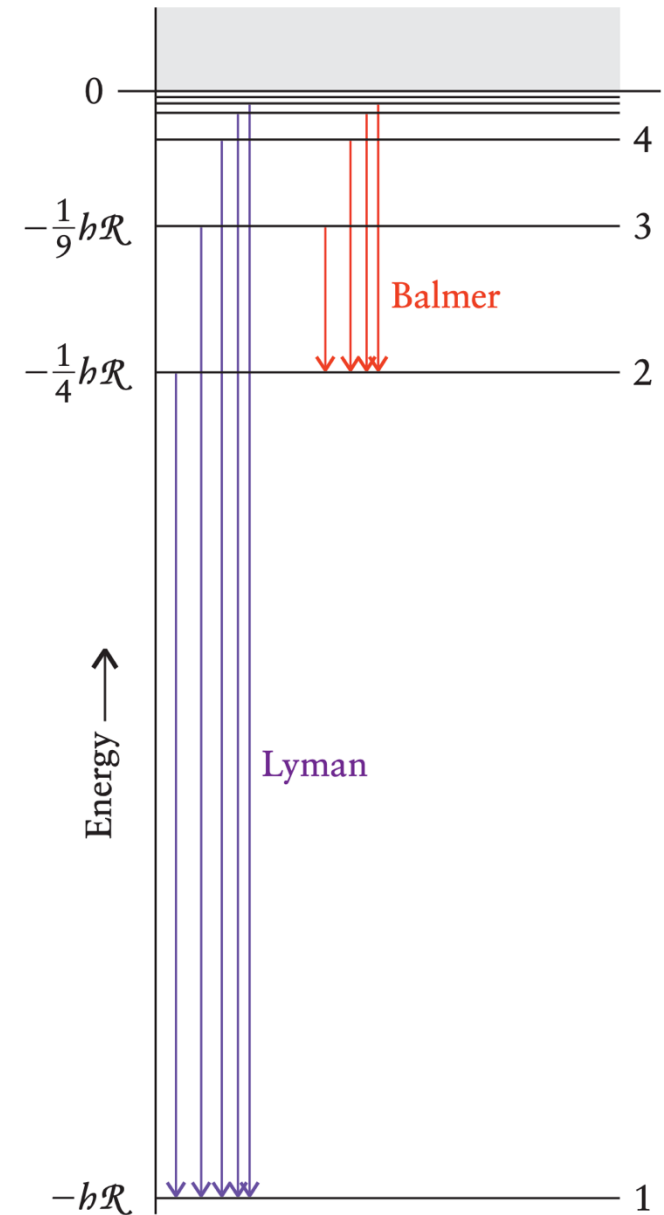


Figure 1D.1

1D.1 Les niveaux d'énergies

Relation avec la condition de fréquence de Bohr

Condition de fréquence de Bohr:

$$h\nu = \Delta E$$

À remplacer dans l'équation précédente. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, si l'électron passe d'un niveau d'énergie n_2 à un niveau d'énergie n_1 , alors:

$$h\nu = \Delta E = \left(-\frac{hR}{n_2^2}\right) - \left(\frac{hR}{n_1^2}\right) = hR \left\{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right\} \text{ with } n_1 = 1, 2, \dots, n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$$

Que l'on peut comparer à l'équation de Rydberg précédente:

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \text{ with } n_1 = 1, 2, \dots, n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$$

1D.1 Les niveaux d'énergies

En fin de compte cela fait sens

Vous pouvez désormais comprendre :

- Les séries de Lyman, par exemple, qui sont le produit des transition allant d'un niveau $n_2 = 2, 3, 4, 5 \dots$ et finissant toutes au niveau $n_1 = 1$
- Les séries de Balmer: $n_2 = 3, 4, 5 \dots$ to $n_1 = 2$

La constante de Rydberg

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} = 3.29 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

- Imaginez Schrödinger calculant cette constante!

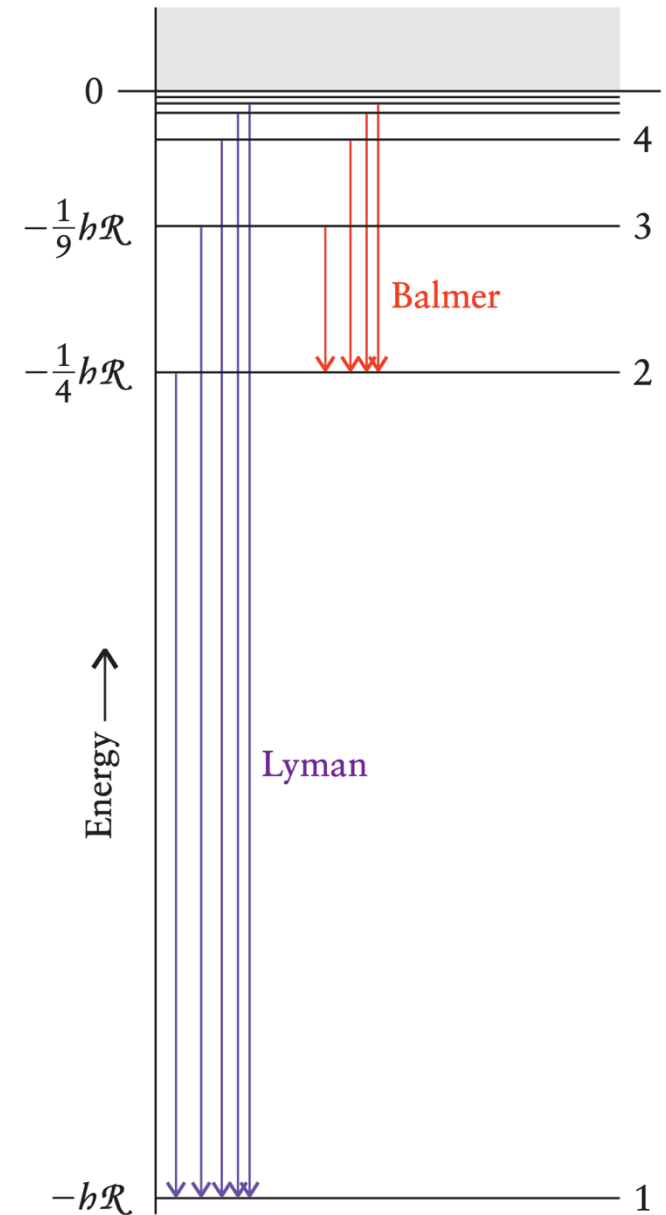


Figure 1D.1

1D.1 Les niveaux d'énergies

En fin de compte cela fait sens

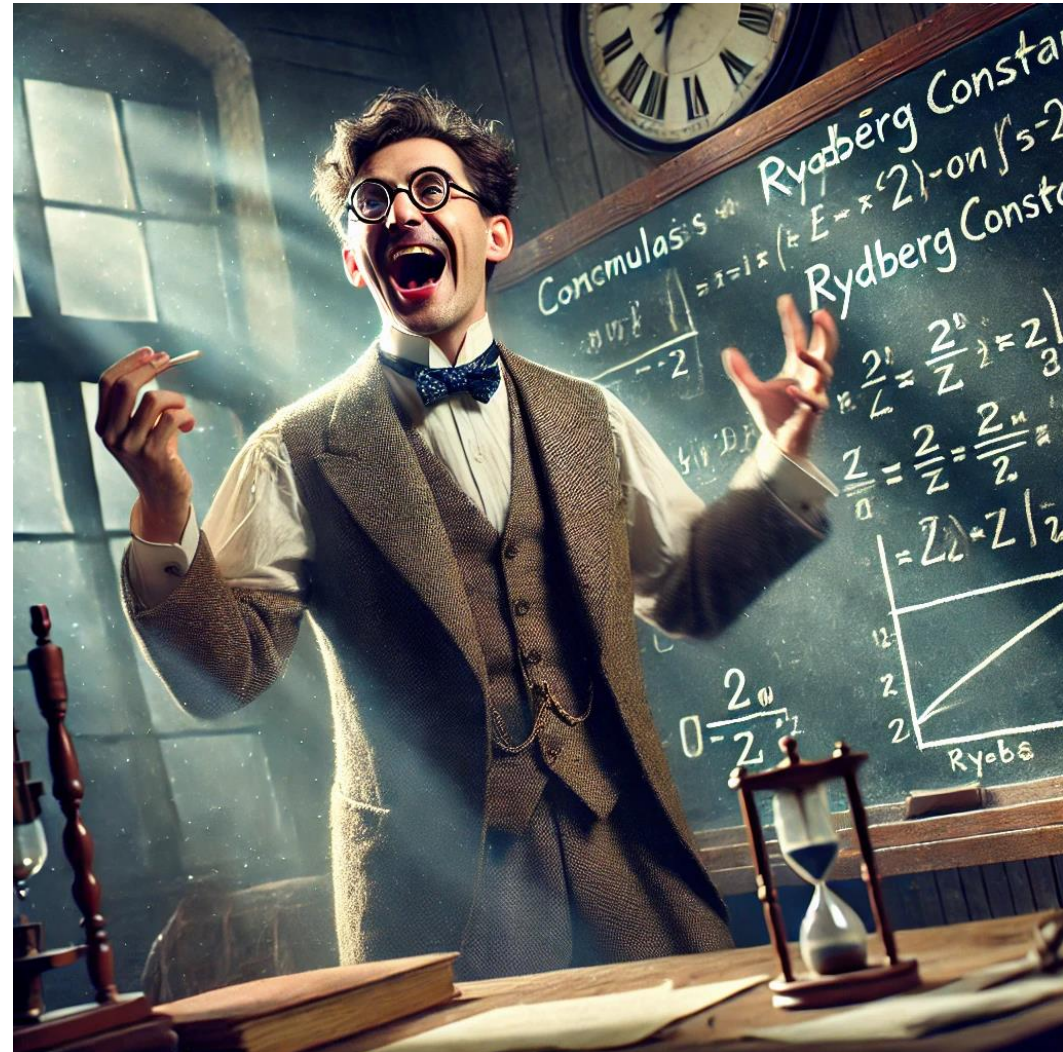


Image source: ChatGPT (2024)
Schrödinger's Eureka Moment.

1D.1 Les niveaux d'énergies

Il est possible de généraliser le modèle à d'autres ions mono-électronique

Schrödinger a été capable de généraliser son équation

$$E_n = -\frac{hR}{n^2}$$

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2} \text{ avec } n = 1, 2, \dots$$

À d'autres système mono-électronique tel que He^+ ou encore C^{5+} .

Pour un noyau de nombre atomique Z and et de charge Ze , les niveaux d'énergies sont donnés par:

$$E_n = -\frac{Z^2 hR}{n^2} \text{ with } n = 1, 2, \dots$$

Formule importante.
Savoir l'utiliser.

Note:

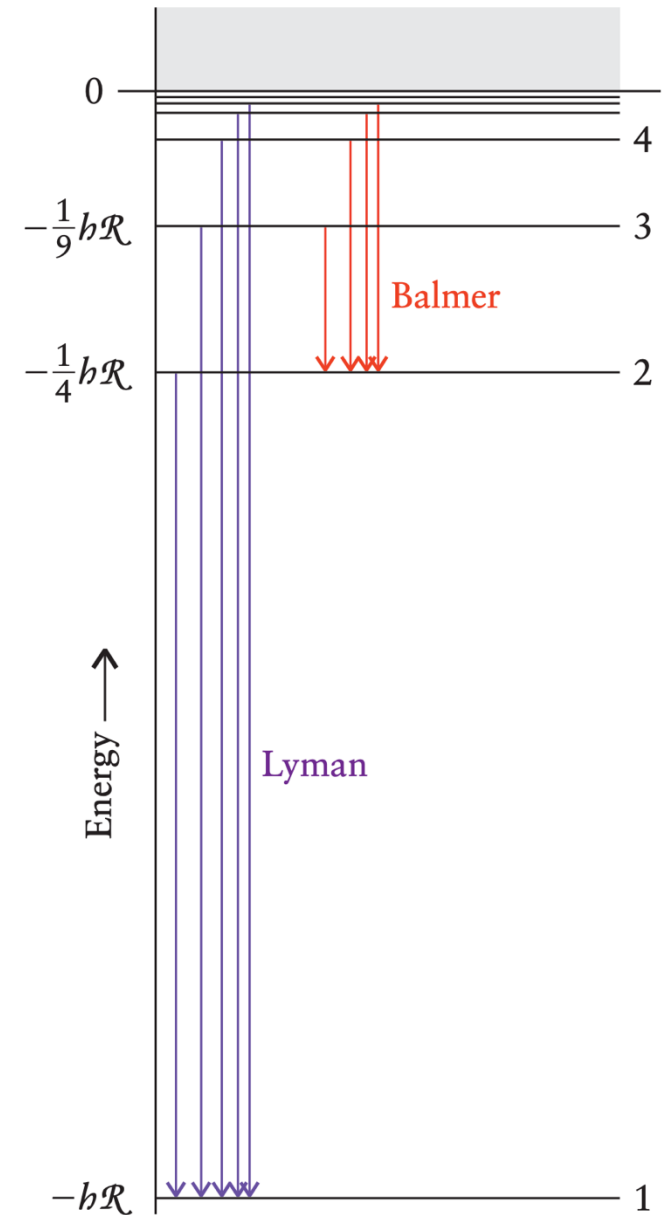
Plus la charge nucléaire Z est grande \rightarrow plus basse (plus négative) est l'énergie de l'électron \rightarrow plus l'attraction au noyau est forte.

Cette équation peut-être utiliser pour les ions mono-électronique; pour les systèmes à plusieurs électrons voir Topic 1E.

1D.1 Les niveaux d'énergies

Les points importants

- $n = 1$: \rightarrow état fondamental avec énergie $E = -hR$
- Excitation: lorsqu'un électron absorbe un photon \rightarrow il va a un niveau d'énergie avec une plus grande valeur de n
- Ionisation: $n \rightarrow \infty$; l'électron est retiré
- L'énergie d'ionisation de H (depuis l'état fondamental) = $hR = 2.18 \times 10^{-17} J = 13.6 eV$
- Tous surplus d'énergie est convertie en énergie cinétique pour l'électron.



1D.1 Les niveaux d'énergies

Résumé

Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont définis le nombre quantique principale, $n = 1, 2, \dots$, et forme une série convergente, comme sur l'image 1D.1. Les raies spectrales sont le fruit des transitions entre les différents niveaux d'énergie.

Orbitales Atomiques

Topic 1D.2

1D.2 Orbitales Atomiques

La fonction d'onde et les orbitales atomiques

La fonction d'onde d'un électron au sein d'un atome est appelée une orbitale atomique.

$|\psi|^2$: densité de probabilité de trouver l'électron dans une certaine région de l'espace

Pour l'atome H: nuage centré sur le noyau; plus la région est dense = plus grande est la probabilité



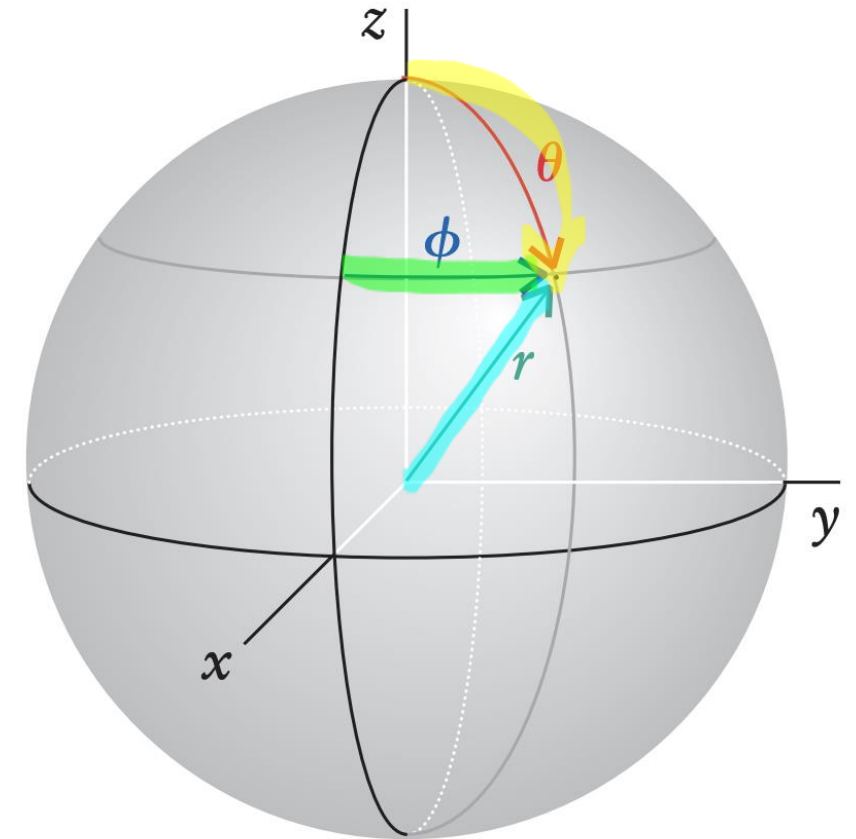
Image source: ChatGPT (2025)
Glossy Hydrogen Balloon Orbitals.

1D.2 Orbitales Atomiques

Coordonnée sphérique

L'atome est comme une sphère (3D):

- r est le **rayon**, la distance au noyau
- θ (theta) est la **colatitude**, l'angle partant des valeurs positives de l'axe z (le «pôle nord»), similaire à la «latitude» géographique (nord ou sud)
- ϕ (phi) est l'**azimuthe**, l'angle autour de l'axe z , similaire à la «longitude» géographique (est ou ouest)

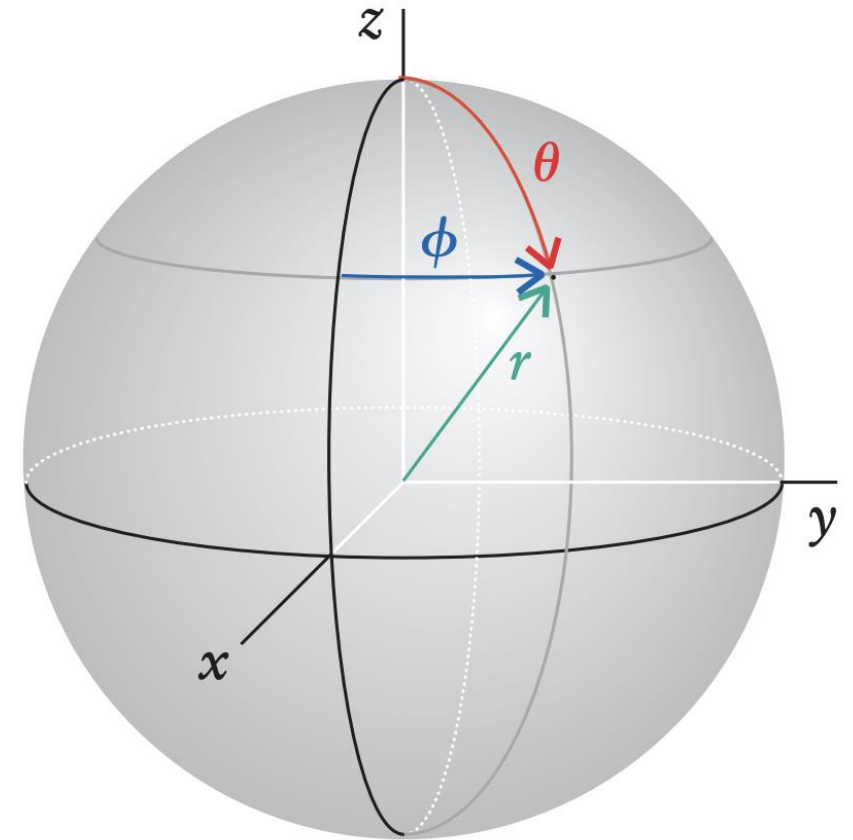


1D.2 Orbitales Atomiques

Coordonnée sphérique

Le lien suivant pour permet de visualiser les déplacements en fonction de r , θ , and φ

https://mathinsight.org/spherical_coordinates



1D.2 Orbitales Atomiques

La fonction d'onde et les orbitales atomiques

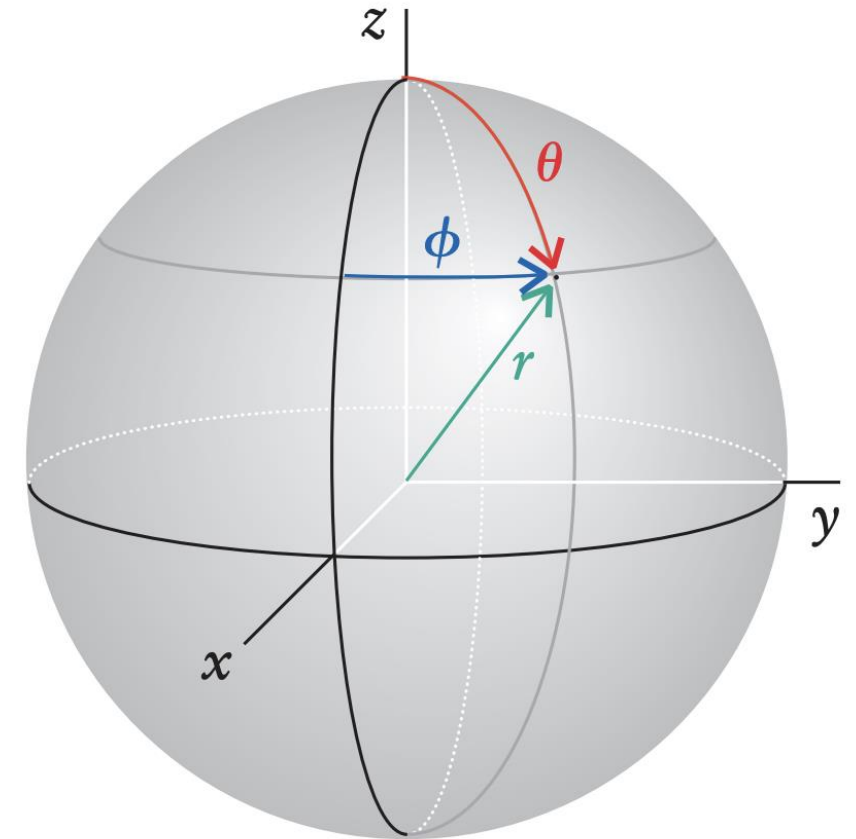
Chaque fonction d'onde dépend de ces trois coordonnés:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times Y(\theta, \phi)$$

→ Produit de la partie radiale $R(r)$ et angulaire $Y(\theta, \phi)$.

$R(r)$: **fonction d'onde radiale**, exprime la variation en fonction de la distance au noyau.

$Y(\theta, \phi)$: **fonction d'onde angulaire**, exprime la variation en fonction des angles θ et ϕ .



1D.2 Orbitales Atomiques

L'orbitale de l'état fondamentale de l'hydrogène ($n = 1$)

- Fonction d'onde:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

- a_0 : Rayon de Bohr (52.9 pm)
- **Symétrie sphérique**: indépendante de θ et ϕ , de même valeurs dans toutes les directions
- **Décroissance exponentielle**: La densité de probabilité est maximale à proximité du noyau (pour $r = 0$, $e^0 = 1$)
- Contrairement à la particule dans la boîte: pas de parois pour contraindre l'électron mais **l'attraction au noyau** décroît avec la distance.

1D.2 Orbitales Atomiques

TABLE 1.2 Hydrogenlike Wavefunctions* (Atomic Orbitals), $\psi = RY$

(a) Radial wavefunctions			(b) Angular wavefunctions		
n	l	$R_{nl}(r)$	l	" m_l " [†]	$Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	0	0	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	1	x	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\phi$
	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$		y	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \sin\phi$
3	0	$\frac{2}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(3 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{2Z^2r^2}{9a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$	2	z	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$
	1	$\frac{2}{9\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right) e^{-Zr/3a_0}$		xy	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \sin 2\phi$
	2	$\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$		yz	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta \sin\theta \sin\phi$
				zx	$\left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta \sin\theta \cos\phi$
				$x^2 - y^2$	$\left(\frac{15}{16\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos 2\phi$
				z^2	$\left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2\theta - 1)$

→ double-check

Voir les deux prochaines slides!

*Note: In each case, $a_0 = 4\pi\epsilon_0^2/m_e e^2$, or close to 52.9 pm; for hydrogen itself, $Z = 1$.

†In all cases except $m_l = 0$, the orbitals are sums and differences of orbitals with specific values of m_l .

1D.2 Orbitales Atomiques

Addition: Des parties radiales et angulaires à l'orbite à l'état fondamental

Ce que nous faisons ici: nous prenons la partie radiale $R_{nl}(r)$ et la partie angulaire $Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$ du tableau, et les multiplions pour obtenir la fonction d'onde $\psi(r, \theta, \phi)$. Pour l'état fondamental de l'hydrogène ($n = 1, l = 0, m_l = 0$) cela donne:

$$\psi(r, \theta, \phi) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \times \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Etape 1: Regrouper les constantes:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \left[2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \times \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right) \right] e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Etape 2: Simplifier le facteur par 2 et $\sqrt{4\pi}$:

$$\frac{2}{\sqrt{4\pi}} = \frac{2}{2\sqrt{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

1D.2 Orbitales Atomiques

Addition: Des parties radiales et angulaires à l'orbite à l'état fondamental

Etape 3: Collecter les puissances de a_0

$$\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}$$

Le coefficient devient:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \times \left(\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

Etape 4: Ecrire le résultat final

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Evaluation: Cette équation est la même que celle de la slide 24. OK.

1D.2 Orbitales Atomiques

Exemple du tableau 1.2

- Par exemple, une orbitale $2p_x$ ($n = 2, l = 1, \ll m_l \gg = x$) pour l'hydrogène ($Z = 1$) est

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \underbrace{R_{2,1}(r)} \times \underbrace{Y_{1,x}(\theta, \phi)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \times \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(\theta) \cos(\phi)$$

1D.2 Orbitales Atomiques

Résumé

La distribution d'un électron au sein d'un atome est une décrite par une fonction d'onde connue sous le nom de: orbitale atomique



Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

Topic 1D.3

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

Trois nombres quantiques pour l'atome d'hydrogène

Lorsque l'on résout l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène, **trois nombres quantiques** sont nécessaires pour définir toutes les fonctions d'ondes du système:

1. Le nombre quantique principal n définit **la taille** et **l'énergie** de l'orbitale
2. Le nombre quantique l définit sa **forme**
3. Le nombre quantique m_l définit **l'orientation dans l'espace**

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

1. Nombre quantique principal n

Nombre quantique principal n définit **la taille et l'énergie** de l'orbitale, toutes les orbitales avec le même nombre quantique n ont la même énergie, et appartiennent à la même **couche** de l'atome.

main shell

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

2. Le nombre quantique azimutal l

Le nombre quantique l défini la **forme**:

Il peut prendre les valeurs suivantes:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$



Les orbitales avec un nombre quantique principale n sont divisées en sous-couches l :

Pour $n = 1$: il y a qu'une sous-couche $l = 0$

For $n = 2$: il y a deux sous-couches $l = 0, 1$

For $n = 3$: il y a trois sous-couches $l = 0, 1, 2$

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

Les orbitales s, p, d

$l = 0$: orbitale s (origine: les raies spectrales des orbitales s décrites comme "sharp")

$l = 1$: orbitale p (origine: les raies spectrales des orbitales p décrites comme "principal")

$l = 2$: orbitale d (origine: "diffuse")

Value of l	0	1	2	3
Orbital type	s	p	d	f

Des valeurs plus grande de l sont possible (les orbitales g, h, ...) sont possibles, mais pas souvent utilisées en pratique.

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

2. Nombre quantique azimutal l

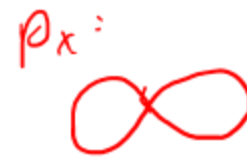
Le nombre quantique azimutal (l) peut être utilisé pour calculer le moment angulaire (L) d'un électron:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

- s ($l=0$): $L = 0$ (ne circule pas autour du noyau, est distribué équitablement autour du noyau)
- p ($l=1$): $L = \sqrt{2}\hbar$
- d ($l=2$): $L = \sqrt{6}\hbar$
- f ($l=3$): $L = \sqrt{12}\hbar$

L est la mesure de la vitesse (en terme classique) à laquelle l'électron se déplace autour du noyau.

1D.4 La Forme des Orbitales



Analogie: le moment angulaire d'une balle attachée à un fil.

Imaginez une balle attachée à un fil, représentant un électron dans une orbitale p. Lorsque vous faites tourner la balle en cercle, elle acquiert un certain moment angulaire. Le plus rapidement vous la faites tourner, le plus loin du centre du cercle elle sera poussée. Si vous essayez de la ramener vers le centre, cela s'avéra de plus en plus difficile; la tension dans le fil et le mouvement de la balle la pousse naturellement à une certaine distance du noyau, similaire à une orbitale p avec un moment angulaire non-nul.

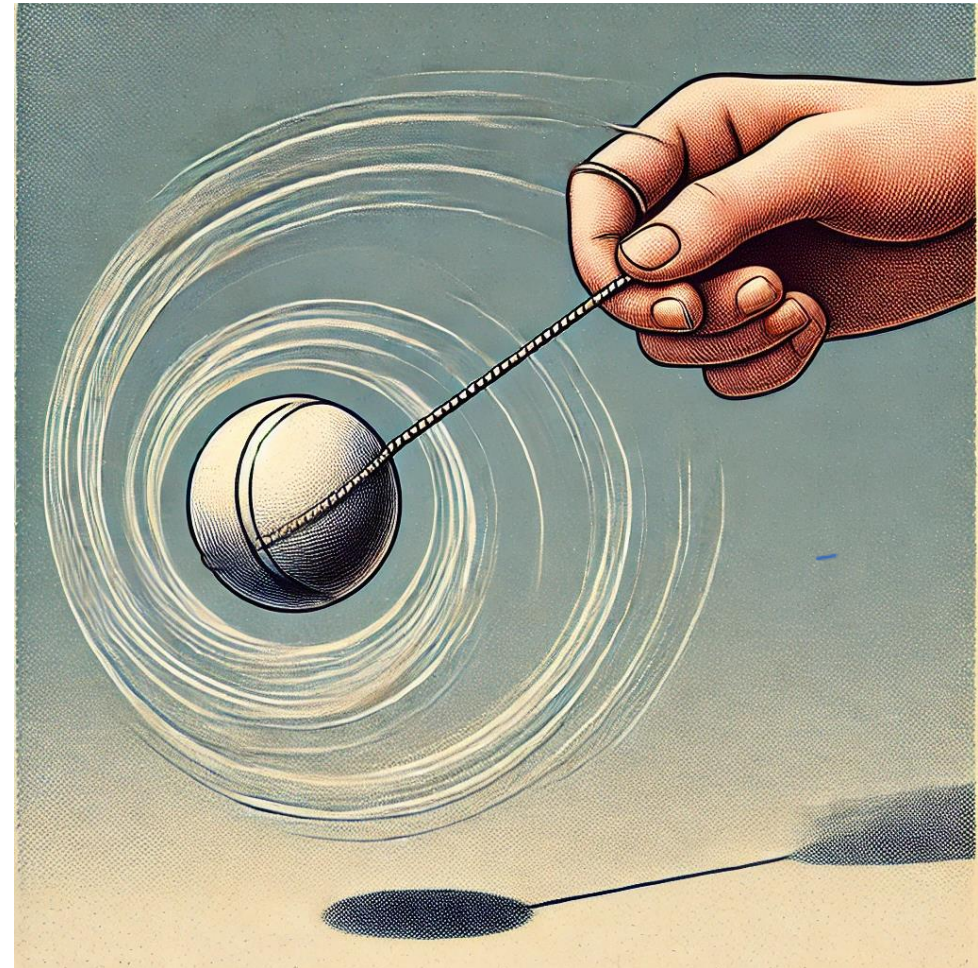


Image source: ChatGPT (2024).
Angular Momentum of Ball on a String.

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

3. Le nombre quantique magnétique m_l

Permet de distinguer **les orbitales individuelles** appartenant à la même sous-couche.

Peut prendre des valeurs positives et négatives:

$$m_l = l, l - 1, \dots, -l$$

E.g.

- Orbitale p avec $l = 1$ et $m_l = +1, 0, -1$
- Orbitale d avec $l = 2$ et $m_l = +2, +1, 0, -1, -2$

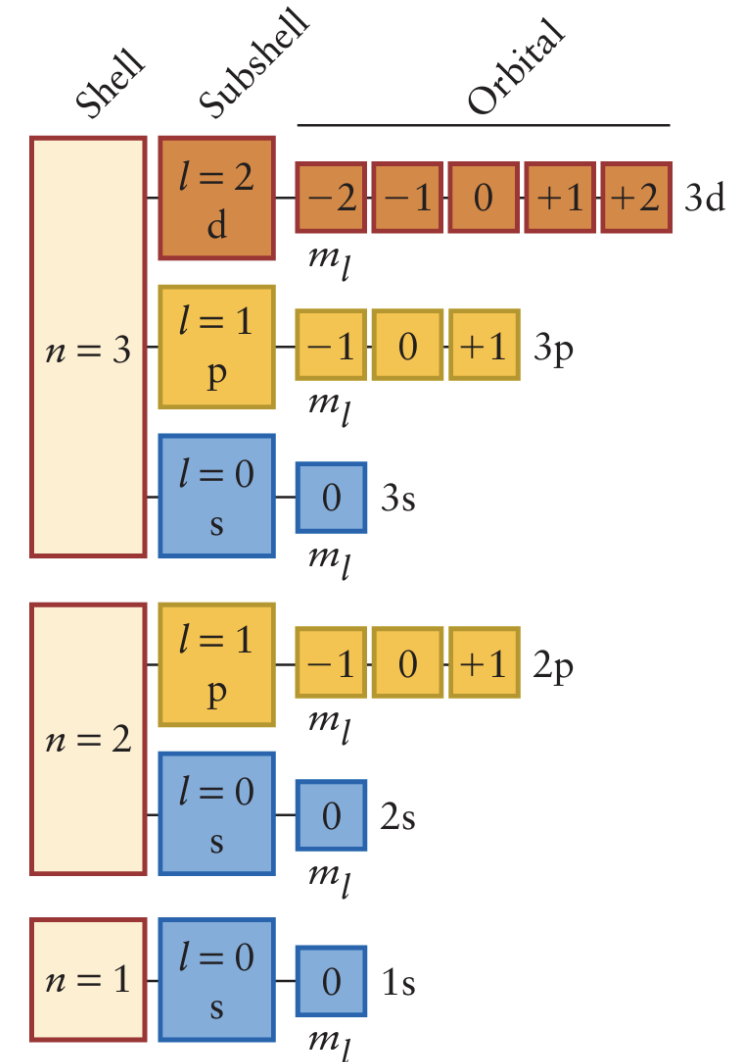


Figure 1D.3

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

3. Le nombre quantique magnétique m_l

- Décrit l'orientation **du mouvement de l'électron dans l'orbitale**
- $m_l = +1$: circule dans un sens; $m_l = -1$: la direction opposé
- $m_l = 0$: l'électron ne circule pas autour de l'axe (distribution symétrique)

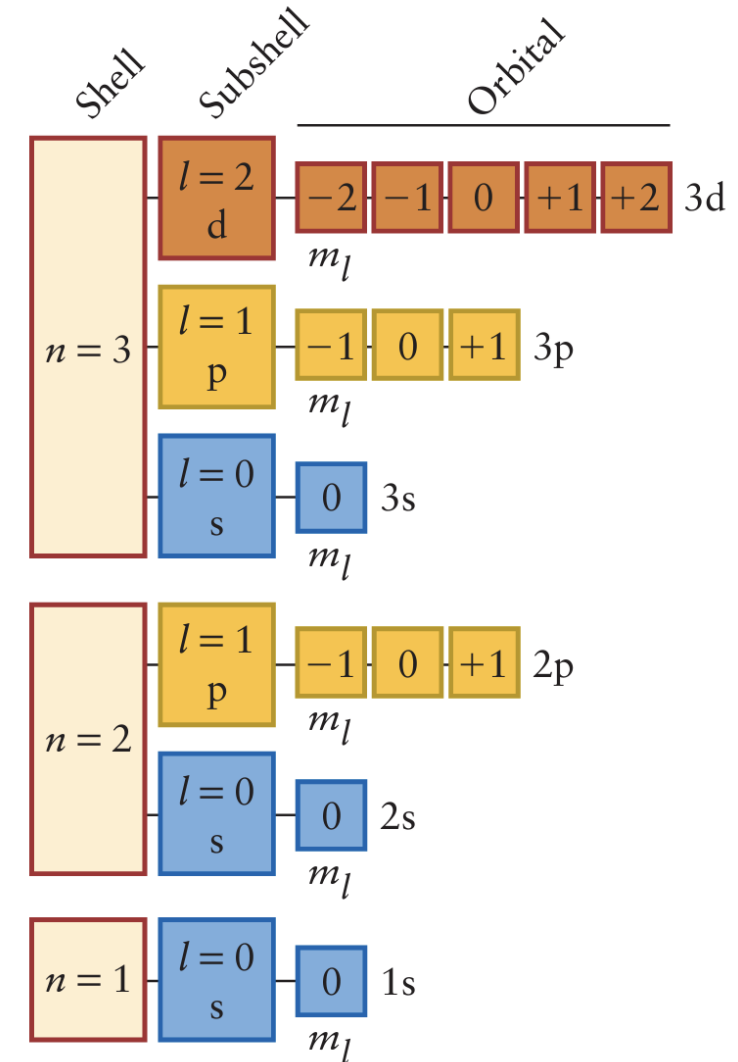


Figure 1D.3

1D.3 Nombres quantiques, Couches, and Sous-couches

Résumé

Les orbitales atomiques sont définies par les nombres quantiques n , l , et m_l et appartiennent à une couche et une sous-couche.

TABLE 1.3 Quantum Numbers for Electrons in Atoms

Name	Symbol	Values	Specifies	Indicates
principal	n	$1, 2, \dots$	shell	size
orbital angular momentum*	l	$0, 1, \dots, n - 1$	subshell: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ s, p, d, f, g, ...	shape
magnetic	m_l	$l, l - 1, \dots, -l$	orbitals of subshell	orientation
spin magnetic	m_s	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	spin state	spin direction

Chapter 1D.5:



*Also called the azimuthal quantum number.

La Forme des Orbitales

Topic 1D.4

1D.4 La Forme des Orbitales

Orbitales s

- Chaque orbitale est défini par trois nombres quantiques n, ℓ, m_ℓ ("l'adresse" de l'électron).
- Exemple: l'état fondamentale de l'hydrogène $\rightarrow n = 1, \ell = 0, m_\ell = 0 \rightarrow$ l'**orbitale 1s**
- Chaque couche possède une orbitale s, nommée ns (1s, 2s, 3s ...).

1D.4 La Forme des Orbitales

Les orbitales s ont une symétrie sphérique

Les orbitales s ne dépendent pas des angles θ et ϕ : **symétrie sphérique**

- **Orbitale 1s:** Densité de probabilité à $(r, \theta, \phi) = |\psi_{1s}|^2$:

$$\Psi^2(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

- La densité de probabilité du nuage de la 1s s'étend indéfiniment, mais au-delà de **~250 pm** les chances de trouver l'électron est négligeable → l'atome est effectivement très petit.

1D.4 La Forme des Orbitales

Les orbitales s ont une symétrie sphérique

Densité électronique élevée au niveau du noyau : dans une orbitale s, la probabilité au niveau du noyau est différente de zéro.

Raison : avec $\ell = 0$, il n'y a pas de barrière de moment cinétique qui empêche l'électron de s'approcher du noyau.

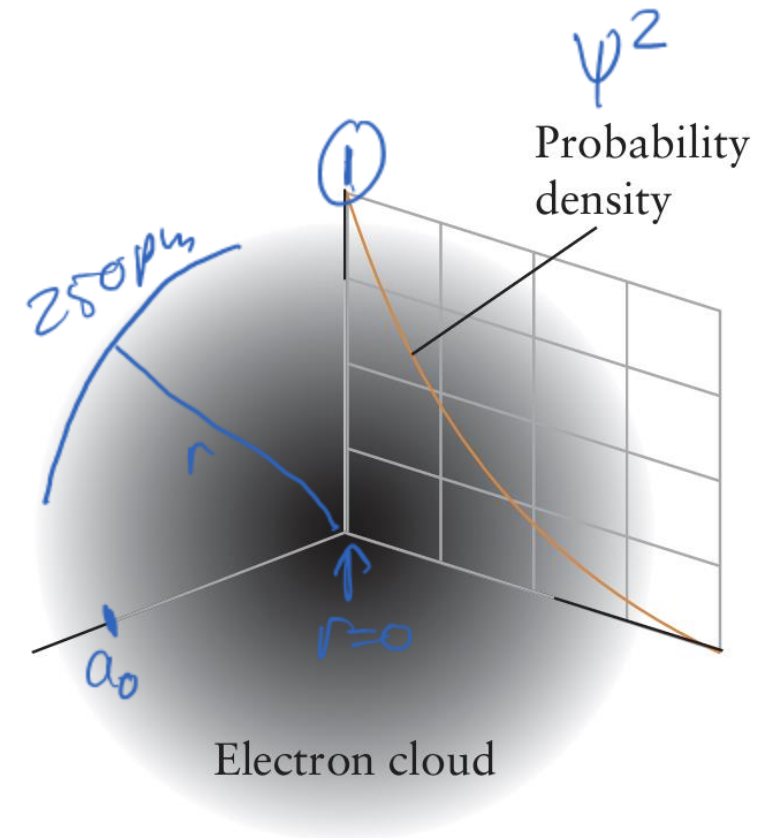


Figure 1D.4

1D.4 La Forme des Orbitales

Exemple 1D.1: Calculer la probabilité de trouver l'électron à une certaine distance du noyau

Supposez que l'électron se trouve dans une orbitale 1s.

Quel est **la probabilité** de trouver l'électron dans une petite région à une **distance a_0** du noyau **relativement** à la probabilité de trouver l'électron exactement **à la position du noyau** ?

Première vue: une plus faible probabilité (décroissance exponentielle)

Mode de solution: comparer les probabilités aux deux positions: le rapport du carré des fonctions d'ondes à chaque position.

Pour une 1s: $\psi(r, \theta, \phi)$ devient $\psi(r)$

Question d'étudiant: *Comment trouver la probabilité à une distance x qui n'est pas un multiple de a_0 ?*

Réponse: *Vous n'en avez pas encore besoin, mais en général, il suffit d'insérer x dans $\psi^2(r)$; pour obtenir la probabilité totale dans une région, il faut intégrer $|\psi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr$ sur cette plage.*

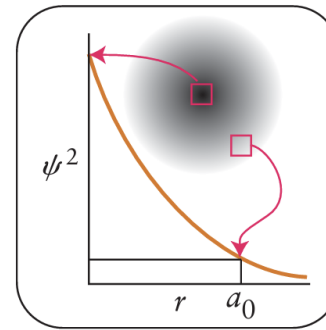
1D.4 La Forme des Orbitales

Exemple 1D.1: Calculer la probabilité de trouver l'électron à une certaine distance du noyau

SOLVE

The ratio of the probability that the electron is found at the nucleus or at $r = a_0$ is:

$$\frac{\text{Probability density at } r = a_0}{\text{Probability density at } r = 0} = \frac{\psi^2(a_0)}{\psi^2(0)}$$



From $\psi^2(r, \theta, \phi) = (1/\pi a_0^3) e^{-2r/a_0}$,

$$\frac{\psi^2(a_0)}{\psi^2(0)} = \frac{(1/\pi a_0^3) \overbrace{e^{-2a_0/a_0}}^{e^{-2}}}{(1/\pi a_0^3) \underbrace{e^0}_1} = e^{-2} = 0.14$$

Evaluate As expected, the probability of finding the electron in a small region at a distance a_0 from the nucleus is lower than at the nucleus itself: the probability is only 14% of that of finding the electron in a region of the same volume located at the nucleus.

A $r = 2a_0$:

$$\Psi^2(r) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2 \times 2a_0}{a_0}}$$

Le rapport est:

$$e^{-4} = 0.018$$

A $r = 3a_0$:

$$\Psi^2(r) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2 \times 3a_0}{a_0}}$$

Le rapport est:

$$e^{-6} = 0.0025$$

1D.4 La Forme des Orbitales

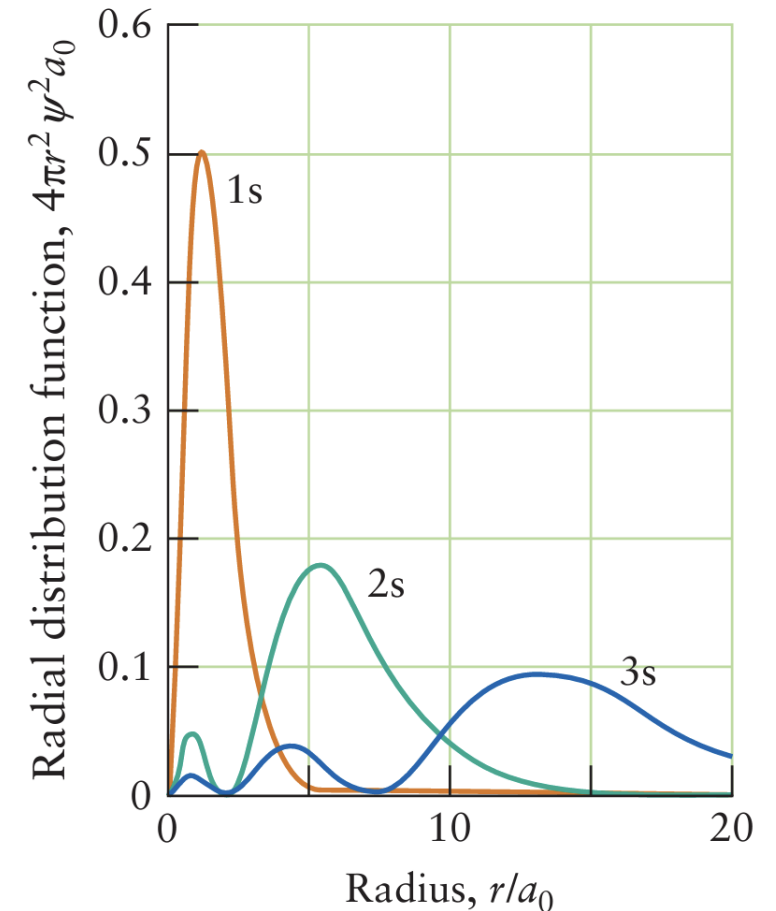
Pourquoi avons nous besoin de la fonction d'onde radiale

- $|\psi|^2$: densité de probabilité à un point (r, θ, ϕ) .
- Pour connaître la probabilité à une **distance r dans toutes les directions**, on utilise **la fonction de distribution radiale (orbitales s)**:

$$P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2$$

- **Interprétation**: probabilité de trouver un electron dans une fine couche entre r et $r + \delta r$.
- **Analogie**: Densité de population de la Terre : nulle à l'intérieur du rayon terrestre, elle augmente à la surface et diminue au-dessus.

Figure 1D.5

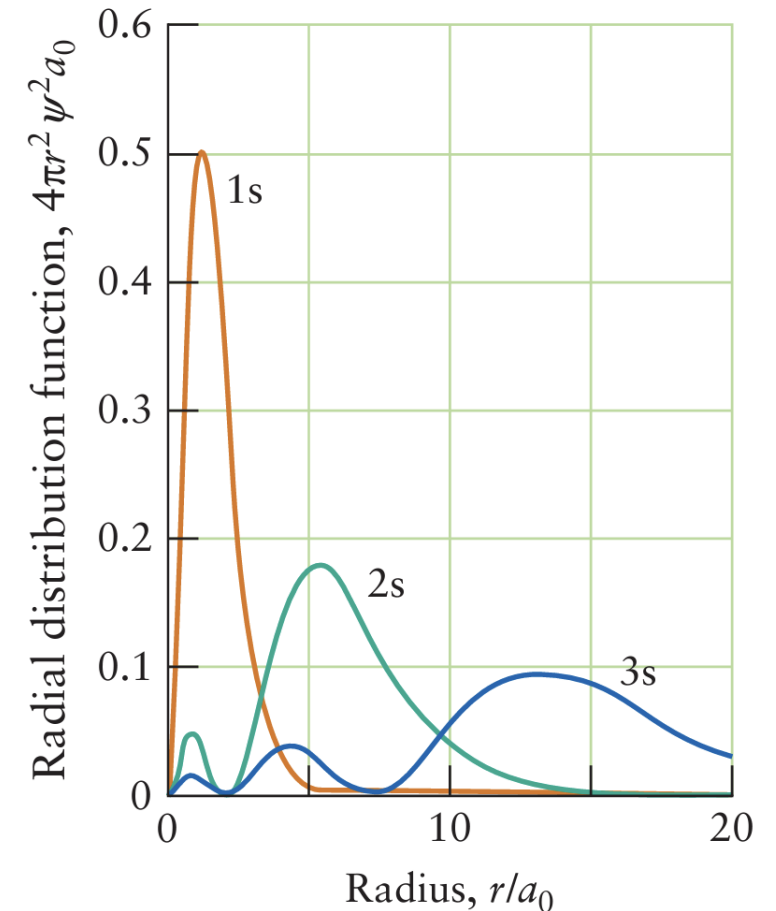


1D.4 La Forme des Orbitales

La densité de probabilité vs. la distribution radiale distribution

Figure 1D.5

- La fonction d'onde elle-même vous indique, par le biais de $\psi^2(r, \theta, \phi)\delta V$, la probabilité de trouver l'électron **dans le petit volume δV à un emplacement particulier** spécifié par r, θ , et ϕ .
- La fonction de distribution radiale vous indique, par le biais de $P(r)\delta r$, la probabilité de trouver l'électron n'importe où dans **une couche sphérique** entre r et $r + \delta r$



1D.4 La Forme des Orbitales

La fonction de distribution radiale

Distribution radiale au niveau du noyau

- $P(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2$ est **nulle à $r = 0$** pour toutes les orbitales (volume de la couche = 0).
- Pour les **orbitales s**, $|\psi(0)|^2$ is nonzero, mais en multipliant par r^2 cela donne $P(0) = 0$.

Forme de $P(r)$ pour la 1s

- Lorsque r augmente:
 - $4\pi r^2$ augmente (plus grande couche)
 - $|\psi(r)|^2$ décroît
- Produit → augmente depuis 0, pics, puis décroît à 0.
- Maximum au **rayon de Bohr** a_0 = distance la plus probable d'un électron 1s.

Figure 1D.5

