

Exercice III-6 : Orbitale atomique**Énoncé**

Soit l'orbitale d'un atome hydrogénoïde donnée en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) :

$$\Phi = A \cdot (Zr/a_0) \cdot \exp [- (Zr/2a_0)] \cdot \cos \theta$$

où Z est le numéro atomique du noyau, a_0 le rayon de Bohr et A une constante.

- 1- Quelle est la symétrie de Φ ? A-t-elle des surfaces nodales ? Si oui, lesquelles ?
- 2- Quelle est la dimension de Φ ?
- 3- Donner la définition de la densité électronique au point M .
- 4- Etude de la densité de probabilité de présence électronique.
 - 4a- Donner en fonction de r l'expression de la densité électronique D_{M_0} le long de l'axe Oz ($\theta = 0$).
 - 4b- Pour quelle valeur de r est-elle maximale ?
 - 4c- Comment varie ce maximum quand Z varie de 1 à 5 ?
 - 4d- Tracer l'allure de la courbe $D_{M_0}(r)$ pour Z fixé.

Correction :

- 1- Symétrie de révolution autour de l'axe Oz ;

Surface nodale = plan xOy ($\theta = \pi/2$)

Remarque :

La surface nodale est la surface pour laquelle l'OA s'annule en changeant de signe ; la densité de probabilité est donc nulle, l'électron décrit par cette OA n'a aucune « chance » de se situer dans cette partie de l'espace !)

- 2- Φ sans dimension ;

Φ^2 inversement proportionnelle à un volume ; il s'agit d'une densité de probabilité de présence.

- 3- Densité électronique au point M :

$$D = \frac{dP}{dV} = |\Phi|^2 .$$

4a- $D_{M_0} = A^2 \frac{Z^2 \cdot r^2}{a_0^2} \exp\left(-\frac{Z \cdot r}{a_0}\right)$

4b- Valeur de r maximale lorsque $\frac{dD}{dr} = 0$ soit $r = \frac{a_0}{2 \cdot Z}$.

Il s'agit d'une expression logique, à relier au rayon de l'atome qui varie comme l'inverse de Z !

- 4c- Quand Z varie de 1 à 5, r diminue (interaction noyau-électron plus importante).