

Chapitre 3 : Les Orbitales Atomiques

- Définitions et notions devant être acquises à l'issue de ce chapitre: Fonction d'Onde | Case Quantique, Orbitales Atomiques (s, p, d et f), Equation de Schrödinger, Principe d'exclusion de Pauli, Règle de Hund, Principe d'Incertitude d'Heisenberg, Probabilité de Présence, Densité Volumique de Probabilité, Densité Radiale de Probabilité, Nombre Quantique Principal, Nombre Quantique Secondaire, Moment Cinétique Orbital, Spin de l'Electron, Règle de l'Octet, Approximation de Born-Oppeinheimer, Condition de Normalisation, Opérateur Hamiltonien, Dégénérescence d'Energie, Levée de Dégénérescence, Fonction Angulaire, Fonction Radiale, Puits de Potentiel, Sous-Couche Electronique, Surface d'Isodensité, Surface Nodale,
- COURS** Quel est le nombre maximum d'électrons que peut contenir un niveau d'énergie défini par le nombre quantique n ?
- [S7]** a) On suppose que la position d'un électron est connue avec une précision de 5pm. Quelle est l'incertitude minimale sur sa vitesse ?
b) On suppose à présent que la vitesse de l'électron est connue avec une précision de $1,0 \text{ mm.s}^{-1}$; quelle est l'incertitude minimale sur sa position (Problème d'unité à démontrer : $1\text{J} = 1\text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$) ?
c) Supposons qu'on désire localiser la position d'un électron avec une fourchette d'imprécision de $5.0 \cdot 10^{-11}\text{m}$, qui représente quelques pour cent du gabarit d'un atome. En se basant sur le principe d'incertitude de Heisenberg, estimer l'incertitude qui devra correspondre à la vitesse de cet électron. Si l'électron se déplace à la vitesse de $3.05 \cdot 10^7 \text{ m.s}^{-1}$, quelle fraction de cette vitesse l'incertitude concerne-t-elle ?
- COURS** Donner les représentations spatiales schématiques et les signes des parties angulaires des orbitales atomiques suivantes : $3p_z$, $3d_{x^2-y^2}$, $3d_{xy}$, $3d_z^2$.
- [S8]** Quelle est la probabilité pour l'électron d'un atome d'hydrogène à l'état fondamental de se trouver à une distance du noyau inférieure à a_0 (on donne : $\int x^2 e^{-bx} dx = -\frac{1}{b^3} e^{-bx} (b^2 x^2 + 2bx + 2)$) ?
- Quelle est la probabilité de présence de l'électron dans l'état fondamental entre deux sphères concentriques de rayon $0,5 a_0$ et $1,5a_0$ (on donne : $\int x^2 e^{-bx} dx = -\frac{1}{b^3} e^{-bx} (b^2 x^2 + 2bx + 2)$) ?
- COURS** Quelle valeur prend la fonction $\psi(n,l,m)$ sur le noyau lorsque $n=1$, $l=0$ et $m=0$? Que vaut la densité radiale de probabilité de présence dans ces mêmes conditions ?
- COURS** Schématiser les densités de probabilité de présence des différentes orbitales atomiques de l'atome d'hydrogène en indiquant les signes des fonctions d'onde correspondantes.
- COURS** Etude des orbitales atomique 1s, 2s et 3s des atomes hydrogénoïdes 1) Rappeler les valeurs des nombres quantiques qui les caractérisent. 2) Calculer, pour chacune de ces orbitales la distance à laquelle la probabilité de trouver l'électron est la plus grande. 3) Calculer la valeur moyenne de la distance entre l'électron et le noyau pour l'orbitale correspondant au niveau d'énergie le plus profond.
- COURS** a) Définir les surfaces nodales de l'orbitale atomique $2p_y$ de l'atome

d'hydrogène. Comment évoluent ces surfaces nodales dans le cas d'un atome hydrogènoïde avec $Z = 1$.

b) Démontrer que le plan xOz est plan nodale de cette orbitale.

c) Représenter schématiquement le nuage électronique correspondant à cette orbitale : pour cette représentation utiliser des ombres plus ou moins foncées ou des points plus ou moins resserrés.

11. [S9] Atoms and ions can be excited to very high states called Rydberg states. Consider a He^+ ion which has been excited to the $n=45$ state (the nucleus of the one-electron ion is an alpha particle).

a) Calculate the ionization energy of the ion

b) Calculate the average size of the ion

c) The result calculated above is an estimate of the uncertainty of the position of the electron in the ion. Use the result to estimate the uncertainty of the electron's momentum.

d) Calculate the maximum possible value of the orbital angular momentum in unit of $\hbar/2\pi$

e) The ion is moving with a speed of 2.0 km/s. Calculate the de Broglie wavelength of the ion.

f) Suppose that a sample of 1000 He^+ ions in the $n=45$ state is prepared. When the excited ions decay to the ground state, will monochromatic or polychromatic radiation be emitted? Explain