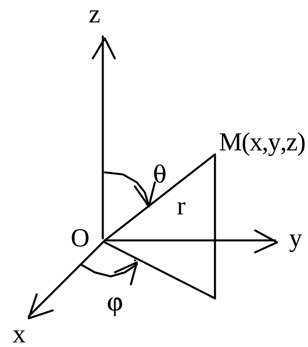
TD MAPLE CHIMIE N°1 : ORBITALES ATOMIQUES

Préambule.

L'électron d'un atome est décrit par une fonction d'onde $\psi(x,y,z)$, solution de l'équation de Schrödinger, telle que $\psi^2\,dx\,dy\,dz$ est la probabilité de trouver l'électron dans le volume élémentaire $d\tau = dx\,dy\,dz$ autour de M .
ψ est normée car l'électron est avec certitude dans l'espace infini.

En coordonnées sphériques :
$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\,Y_{l,m}(\theta,\varphi)$:

- n est le nombre quantique principal, l le nombre quantique secondaire et m le nombre quantique magnétique ;
- $R_{n,l}(r)$ est la partie radiale de la fonction d'onde ;
- $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ est la partie angulaire de la fonction d'onde.



La condition de normation s'écrit : $\int_\infty \psi^2\,d\tau = 1$ avec $d\tau = r^2\,dr\,\sin(\theta)\,d\theta\,d\varphi$,

les constantes des parties radiale et angulaire étant choisies de façon à ce que les fonctions radiale et angulaire soient normées séparément :
$$\int_{r=0}^{\infty} R^2\, r^2\, dr = 1 \quad \text{et} \quad \int_{\theta=0}^{\theta=\pi}\int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} Y^2 \sin(\theta)\, d\theta\, d\varphi = 1 \ .$$

On s'intéresse dans ce TD uniquement à la partie angulaire : les valeurs de $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ définissent les orbitales atomiques (O.A.) et sont rappelées dans le tableau ci-dessous.

- $dP_{\theta,\varphi} = Y^2 \sin(\theta)\,d\theta\,d\varphi$ est la probabilité de présence de l'électron à une distance r du noyau fixée, dans une direction comprise entre θ , $\theta+d\theta$ et φ , $\varphi+d\varphi$.
- Avec $d\Omega = \sin(\theta)\,d\theta\,d\varphi = \dfrac{dS}{r^2}$ l'angle solide élémentaire (dS est la surface élémentaire interceptée sur une sphère de rayon r), $\dfrac{dP_{\theta,\varphi}}{d\Omega} = Y^2$ est la densité angulaire de probabilité de présence de l'électron.
- La représentation de $(Y_{l,m})^2$ en coordonnées sphériques (θ,φ) est la représentation conventionnelle de l'O.A. correspondante.

Plan du TD .

On étudie les O.A. s , p_x (p_y et p_z étant identiques à des rotations près) , d_{x2-y2} , d_{xy} (d_{xz} et d_{yz} étant identiques à des rotations près) et d_{z2}.
Dans une première partie on trace les représentations conventionnelles associées.
Dans une deuxième partie on vérifie la condition de normation des $Y_{l,m}$.

Tableau.

l	m	orbitale	$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$
0	0	s	$\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	1	p_x	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\ \sin\theta\cos\varphi$
2	2	d_{x2-y2}	$\sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\ \sin^2\theta\cos 2\varphi$
2	-2	d_{xy}	$\sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\ \sin^2\theta\sin 2\varphi$
2	0	d_{z2}	$\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\ (3\cos^2\theta - 1)$