

## Fonctions de Distribution radiale de l'électron des orbitales hydrogénéoïdes.

- La fonction de distribution radiale est définie comme :  $r^2 \cdot R_{n,l}(r)$  où  $r$  est la distance au noyau (en unités de rayon de Bohr  $a_0$  et  $R_{n,l}(r)$  est la fonction d'onde radiale).

Les fonctions de distribution radiale pour les orbitales 1s, 2s et 3p sont exprimées ci-dessous (avec  $a_0=52.91\text{pm}$  et  $z$ = charge nucléaire) :

Orbitale 1s     $\text{Radial}(r, z) = r^2 \cdot (2z^{1.5} \cdot e^{-zr})^2$

Orbitale 2s     $\text{Radial}(r, z) = r^2 \cdot \left[ \frac{1}{2\sqrt{2}} \cdot z^{1.5} \cdot (2 - zr) \cdot e^{-\frac{zr}{2}} \right]^2$

Orbitale 2p     $\text{Radial}(r, z) = r^2 \cdot \left[ \frac{1}{2\sqrt{6}} \cdot z^{1.5} \cdot (zr) \cdot e^{-\frac{zr}{2}} \right]^2$

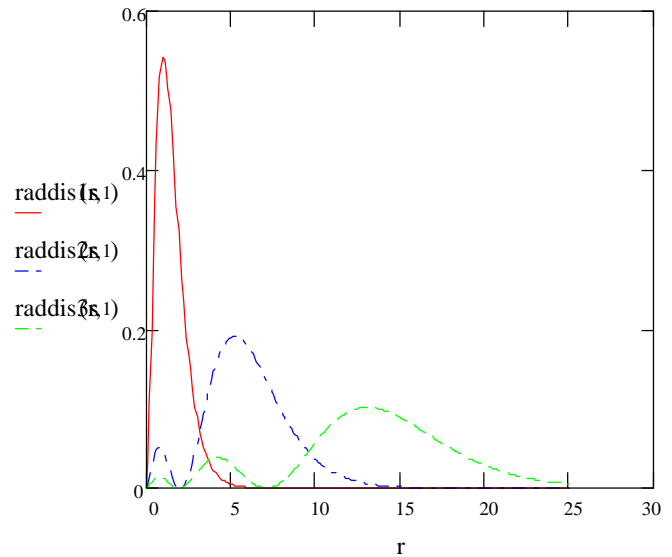
La fonction de distribution radiale représente la probabilité de trouver l'électron à une distance  $r$  du noyau (c'est donc la probabilité de le trouver sur la surface d'une sphère de rayon  $r$ ).

- Les orbitales 2s et 2p ont-elles la même énergie ?

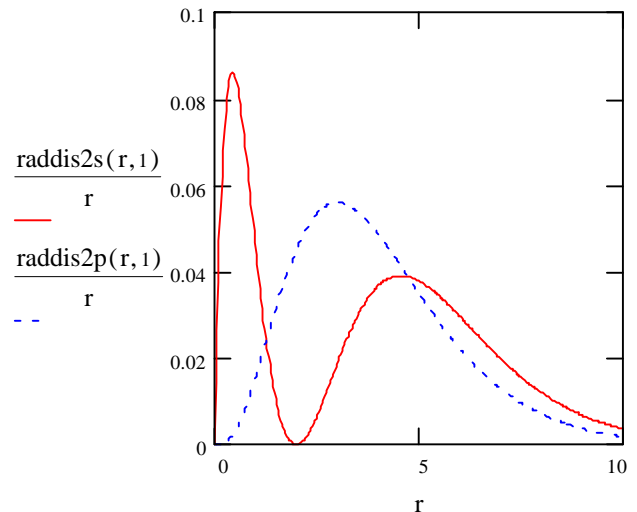
Le graphe suivant représente la dépendance radiale de l'énergie.

$$E = -0.5 \int_0^r \frac{r^2 \cdot R(r)}{r} \cdot dr$$

L'orbitale 2s semble s'étendre davantage dans l'espace mais la région proche du noyau est plus déterminante pour la valeur de l'énergie.



Fonctions de distribution radiale 1s, 2s, 2p



Variation radiale de l'énergie 2s, 2p