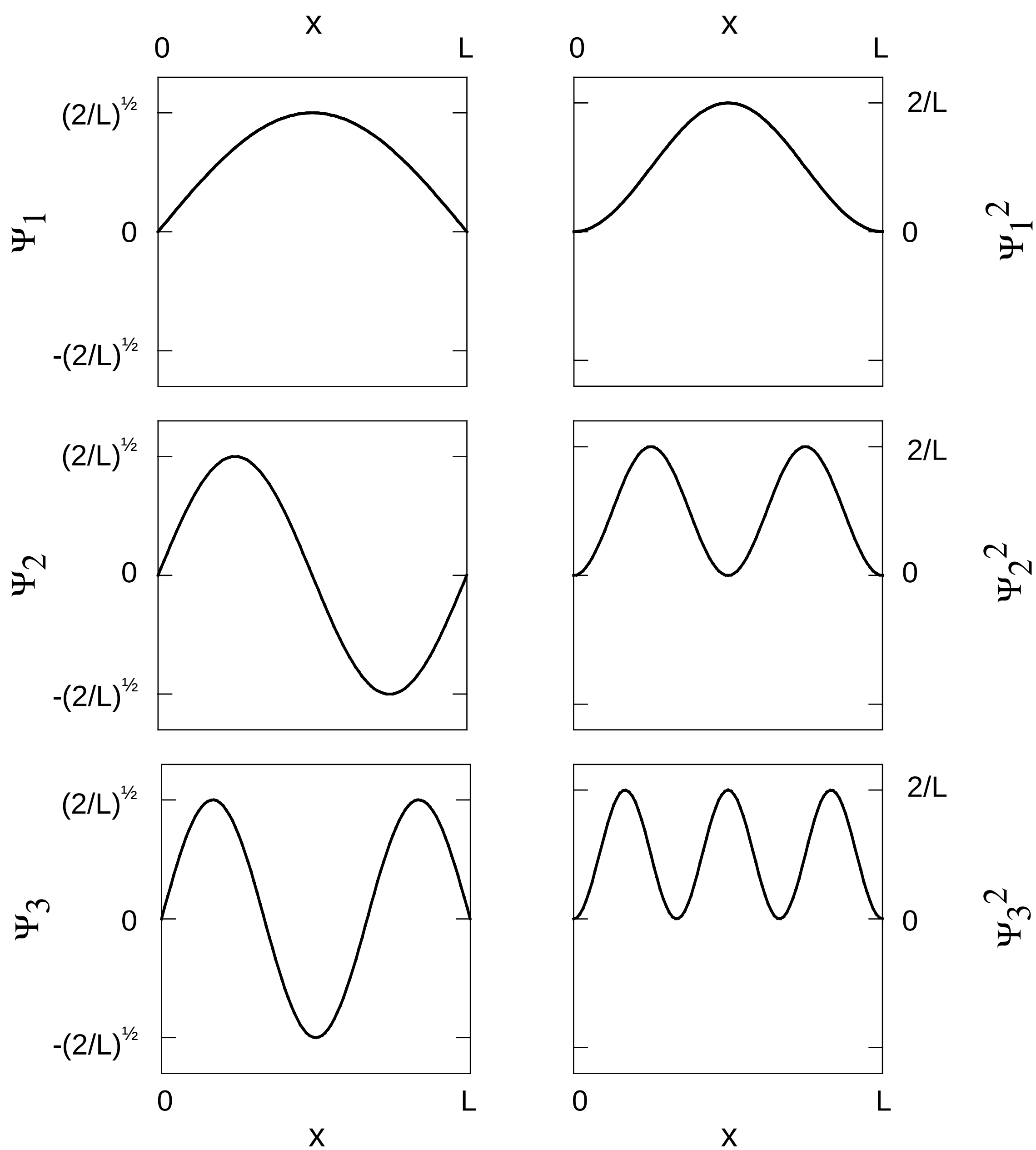
Particule confinée dans une boite unidimensionnelle

Fonctions d'onde : $\Psi(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right)$

Énergies : $E = \dfrac{h^2 n^2}{8mL^2}$ où $n = 1, 2, 3$, etc.



Espèces atomiques à un seul électron

Fonction d'ondes :

r, θ et ϕ sont les coordonnées polaires d'un point de l'espace. Z est le numéro atomique. a_o est le rayon de la première orbite de Bohr : $a_o = \dfrac{h^2 \varepsilon_o}{\pi\, m\, Q_e^2}$. σ est introduit pour simplifier les expressions des fonctions d'onde : $\sigma = \dfrac{Zr}{a_o}$. n, ℓ et m sont trois nombres quantiques: n = 1, 2, 3, etc.; ℓ = 0, 1, 2, …, n-1; m = -ℓ, …, 0, …, +ℓ

n=1 ℓ=0 m=0 $$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-\sigma}$$

n=2 ℓ=0 m=0 $$\Psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} (2-\sigma)\, e^{-\sigma/2}$$

ℓ=1 m=0 $$\Psi_{2p_z} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma\, e^{-\sigma/2} \cos\theta$$

m=±1 $$\Psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma\, e^{-\sigma/2} \sin\theta \cos\phi$$

$$\Psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma\, e^{-\sigma/2} \sin\theta \sin\phi$$

n=3 ℓ=0 m=0 $$\Psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \left(27-18\sigma+2\sigma^2\right) e^{-\sigma/3}$$

ℓ=1 m=0 $$\Psi_{3p_z} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma(6-\sigma)\, e^{-\sigma/3} \cos\theta$$

m=±1 $$\Psi_{3p_x} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma(6-\sigma)\, e^{-\sigma/3} \sin\theta \cos\phi$$

$$\Psi_{3p_y} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma(6-\sigma)\, e^{-\sigma/3} \sin\theta \sin\phi$$

ℓ=2 m=0 $$\Psi_{3d_{z^2}} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma^2\ e^{-\sigma/3} \left(3\cos^2\theta-1\right)$$

ℓ=2 m=±1 $$\Psi_{3d_{xz}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma^2\ e^{-\sigma/3} \sin\theta \cos\theta \cos\phi$$

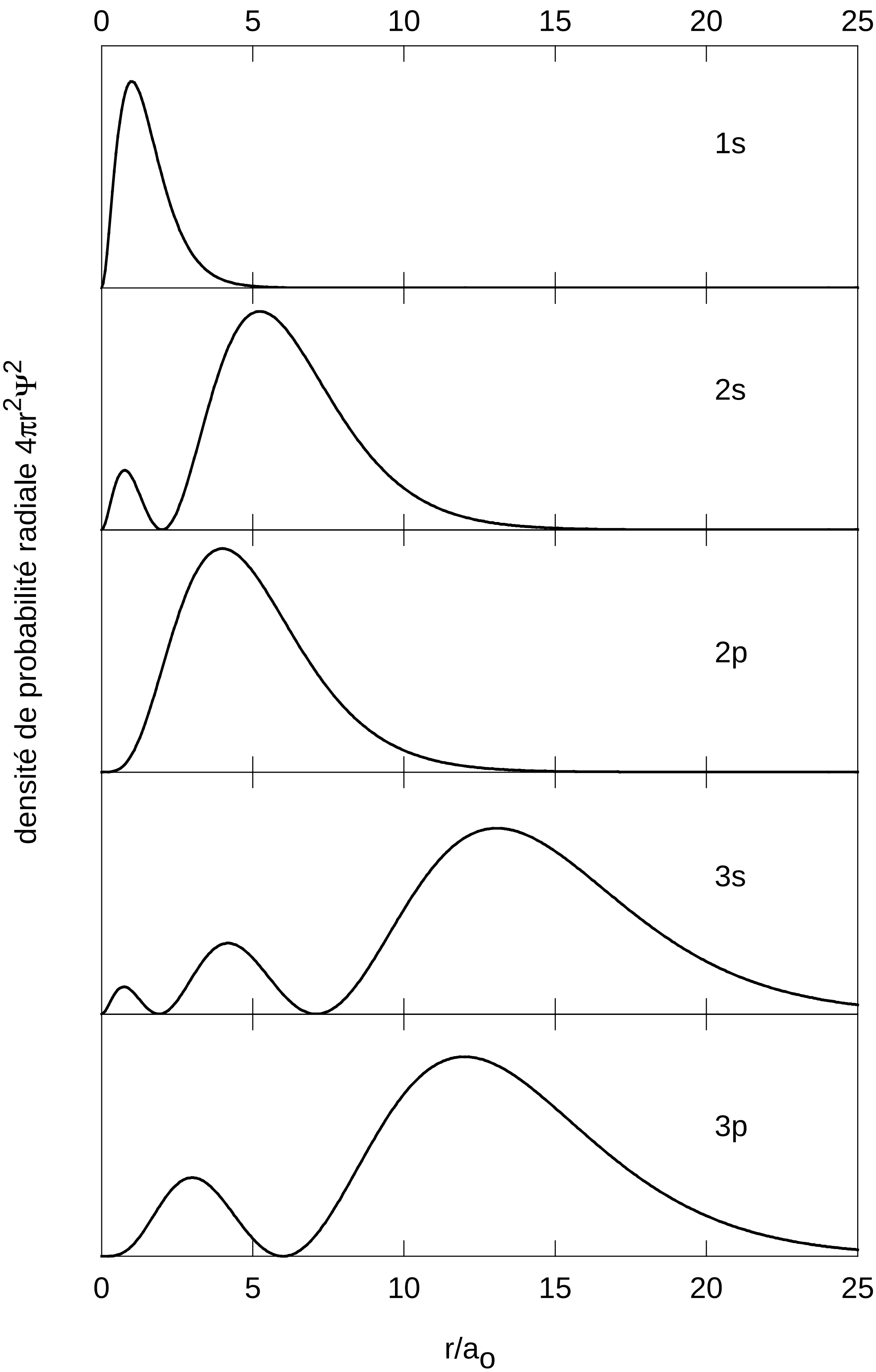
$$\Psi_{3d_{yz}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma^2\ e^{-\sigma/3} \sin\theta \cos\theta \sin\phi$$

ℓ=2 m=±2 $$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma^2\ e^{-\sigma/3} \sin^2\theta \cos 2\phi$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \sigma^2\ e^{-\sigma/3} \sin^2\theta \sin 2\phi$$

Énergies :

$$E(n) = -\frac{Z^2 m\, Q_e^4}{8\,\varepsilon_0^2 h^2 n^2} \quad \text{où } n = 1, 2, 3, \text{etc.}$$


0
5
10
15
20
25
1s
2s
2p
3s
3p
densité de probabilité radiale $4\pi r^2\Psi^2$
0
5
10
15
20
25
r/a_o

Densité de probabilité radiale pour les orbitales de l'hydrogène