
ESSENTIEL MQ 01

Les orbitales atomiques possèdent des caractéristiques énergétiques (cf cours de PCSI), mais aussi spatiales. On représente conventionnellement un contour dans lequel il y a une forte (ex : 90 %) probabilité de trouver l'électron. Cette probabilité est calculable en tout point de l'espace par le carré de la fonction « orbitale atomique ». Un hachurage permet de distinguer les zones où la fonction était positive de celles où elle était négative.

Le nombre quantique principal n renseigne sur l'étendue de l'OA, le nombre quantique secondaire ℓ sur sa forme, et le nombre quantique magnétique orbital m_ℓ sur son orientation.

Pour l'hydrogène et les hydrogénoïdes, quand le numéro atomique Z augmente, le rayon et l'énergie de l'OA diminuent (plus grande interaction électron - noyau). Quand le nombre quantique principal n augmente, le rayon de l'OA augmente (cf. modèle « visuel » des couches concentriques) et l'énergie de l'OA diminue.

Pour les atomes polyélectroniques, aucune expression exacte n'est possible, mais le modèle d'écrantage permet de se rapprocher des cas connus. Il s'agit de moyenniser l'effet des autres électrons en diminuant la charge perçue par l'électron étudié (notion de charge effective et de constante d'écran).