

Nombres quantiques et orbitales atomiques

I- Nombres quantiques.

L'état d'un électron dans un atome, c'est-à-dire : son énergie, ses mouvements autour du noyau, la forme de l'orbitale, est défini par 4 paramètres appelés **nombres quantiques**.

a- Le nombre **n**, **nombre quantique principal** : $n = 1, 2, \dots, \infty$

- quantifie l'énergie de l'électron,
- définit une couche électronique ou un niveau d'énergie.
 $n = 1 \Rightarrow$ couche K ; $n = 2 \Rightarrow$ couche L ; $n = 3 \Rightarrow$ couche M ; etc...

b- Le nombre **l**, **nombre quantique secondaire**, avec : $0 \leq l \leq n-1$

l caractérise la "forme" de l'orbitale; il définit une sous-couche électronique, ou un sous-niveau d'énergie.

$l = 0 \Rightarrow$ sous-couche *s* $l = 1 \Rightarrow$ sous-couche *p*

$l = 2 \Rightarrow$ sous-couche *d* $l = 3 \Rightarrow$ sous-couche *f*

c- Le nombre **m**, **nombre quantique magnétique**: avec : $-l \leq m \leq +l \Rightarrow m$ peut prendre $(2l + 1)$ valeurs. IL définit l'orientation de l'orbitale :

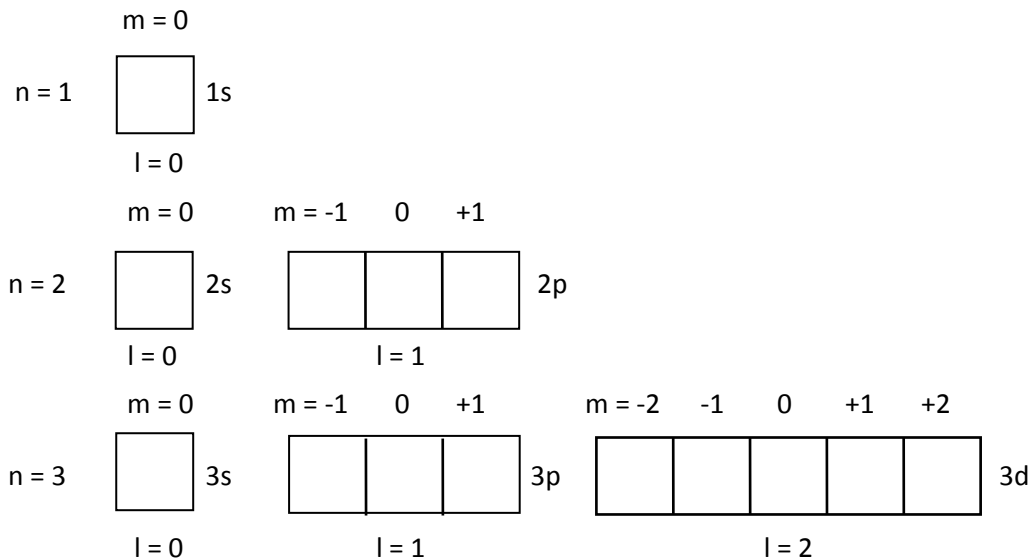
$l = 0 \Rightarrow m = 0 \Rightarrow$ 1 seule orientation \Rightarrow 1 orbitale *s* \Rightarrow 1 case quantique

$l = 1 \Rightarrow m = -1; 0; +1 \Rightarrow$ 3 orientations \Rightarrow 3 orbitales *p* de même énergie \Rightarrow 3 cases quantiques

d- Le nombre **s**, **nombre quantique de spin s**, définit la rotation de l'électron sur lui-même. Deux orientations sont possibles : $s = +1/2$ (\uparrow) et $s = -1/2$ (\downarrow).

Remarques :

- Les nombres *n, l, m* définissent une orbitale atomique (case quantique)



- Les quatre nombres quantiques *n, l, m, s* définissent un électron.

Ex : 1 électron sur la sous-couche *s* :



ou



II- Les orbitales et leur description.

a- Fonction d'onde ψ

ψ est une fonction purement mathématique:

- elle n'a pas de signification physique,
- elle est fonction des coordonnées de l'électron,
- elle est définie par les 3 nombres quantiques : n, l et m : $\Psi_{n, l, m}$

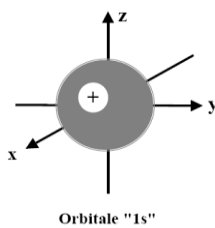
Exemple : l'orbitale 2s est représentée par la fonction d'onde : $\Psi_{2,0,0}$

b- Description de l'orbitale « s »

C'est une orbitale de symétrie sphérique, correspondant à $l = 0, m = 0$

Ces fonctions d'onde s'écrivent : $\Psi_{n,0,0}$ ou Ψ_{ns}

Exemple : Orbitale "1s"

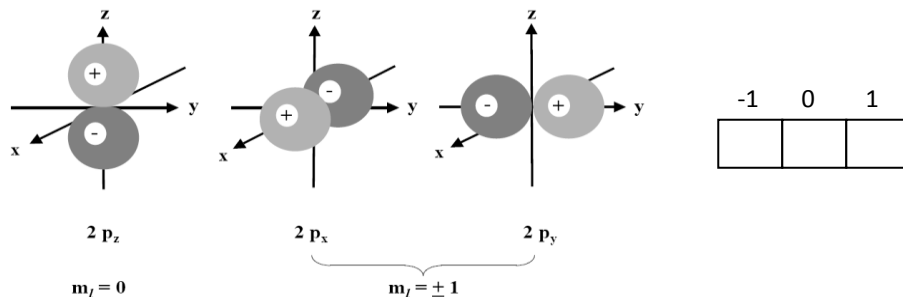


Remarque : le signe + indiqué à l'intérieur de la sphère est le signe de la fonction d'onde Ψ_{1s}

c- Description des orbitales « p »

Les orbitales p ($l = 1$) peuvent être représentées par deux lobes à peu près sphériques, accolés, ayant pour axes de symétrie les axes x, y et z du trièdre de référence.

On les appelle donc "n p_x", "n p_y" et "n p_z" selon la valeur de m ($n \geq 2$). Elles sont dites de symétrie latérale ou axiale.



Remarque :

pour les orbitales $l = 2$ et $l = 3$ c'est à dire les orbitales d et f, la représentation géométrique est complexe.