

## 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** :  $n = 1, 2, \dots, \infty$ , nombre entier appartenant à  $[1, \infty[$

Il quantifie l'énergie de l'électron et 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 (ou azimutal)** :  $0 \leq \ell \leq n-1$ , nombre entier appartenant à  $[0, n-1]$

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

Sous-couche	s	p	d	f	g,h,i,j,....
ℓ	0	1	2	3	4,5,6,7,....
Origine du nom	sharp	principal	diffuse	fundamental	Respecter l'ordre alphabétique

c- Le nombre **m**, **nombre quantique magnétique** :  $-\ell \leq m \leq +\ell$ , nombre entier appartenant à  $[-\ell, +\ell]$

Il définit l'orbitale atomique ou la case quantique.

Il définit l'orientation de l'orbitale atomique dans l'espace.

Dans une sous couche définie par une valeur de  $\ell$ , m peut prendre  $(2\ell + 1)$  valeurs. Donc  $(2\ell + 1)$  cases ou orbitales atomiques (c'est toujours un nombre impair) :

Sous-couche	s	P	D	f	g,h,i,j,....
ℓ	0	1	2	3	4,5,6,7,....
Nombre de cases $(2\ell+1)$	1	3	5	7	9,11,13,15,....

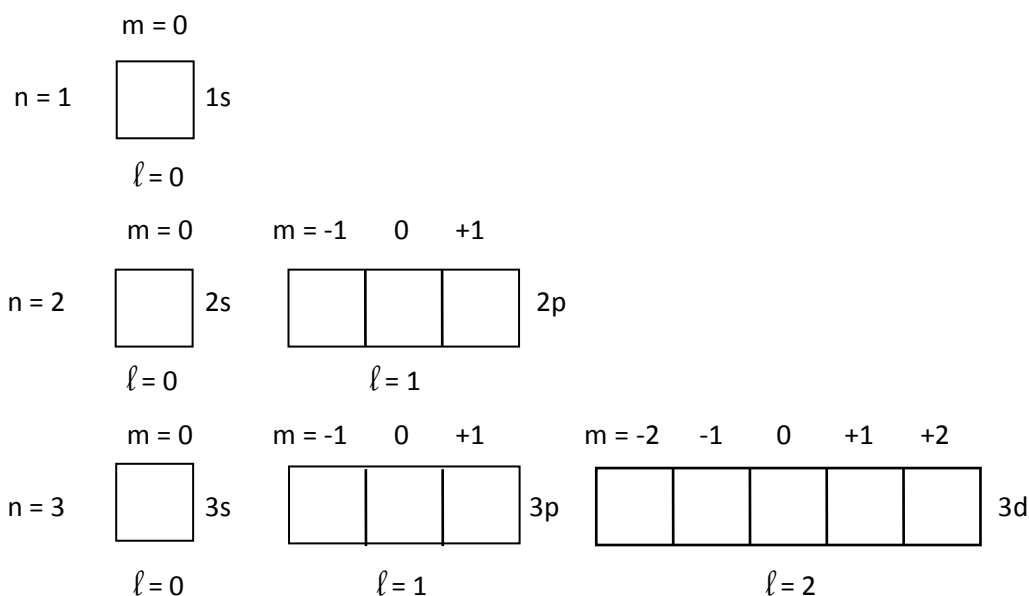
$\ell = 0 \Rightarrow m = 0 \Rightarrow$  1 seule orientation qui est sphérique (comme un ballon)  $\Rightarrow$  1 orbitale s  $\Rightarrow$  1 case quantique

$\ell = 1 \Rightarrow m = -1; 0; 1 \Rightarrow$  3 orientations selon les trois axes d'un système tridimensionnel  $\Rightarrow$  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  $n, \ell, m$  définissent une orbitale atomique (case quantique)



- Les quatre nombres quantiques  $n, \ell, m, s$  définissent un électron.

Ex : 1 électron sur la sous-couche s : ↑ ou ↓

**II- Les orbitales et leur description.**

**a- Fonction d'onde  $\psi$**

On associe à chaque orbitale ou case quantique une fonction d'onde  $\psi_{nlm}$  qui est 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 :  $n, \ell$  et  $m$  :  $\psi_{n,\ell,m}$

**Exemple :**



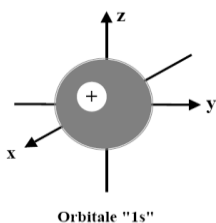
Chaque case quantique possède sa propre fonction.

**b- Description de l'orbitale « s »**

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

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

**Exemple :** Orbitale "1s"

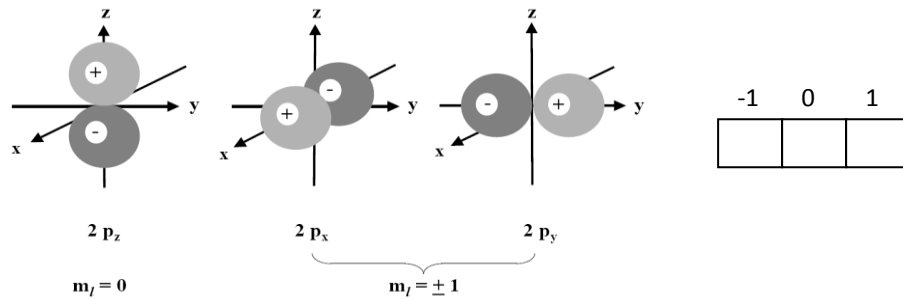


Le signe + indiqué à l'intérieur de la sphère est le signe de la fonction d'onde  $\Psi_{1s}$

### c- Description des orbitales « p »

Les orbitales p ( $\ell = 1$ ) 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  $\ell = 2$  et  $\ell = 3$  c'est à dire les orbitales d et f, la représentation géométrique est complexe.