

Les nombres quantiques

Emilie Deaux
Priscilla Peyrol
Stéphanie Battistel

SOMMAIRE

- Introduction
- Les électrons
 - Le nombre quantique principal n
 - Le nombre quantique secondaire l
 - Le nombre quantique magnétique m
 - Le nombre quantique de Spin s
- Les principes
 - Principe d'exclusion de Pauli
 - Règle de Klechkowski
 - Principe de stabilité
 - Formule quantique ou électronique d'un atome
 - Règle de Hund
 - Règle de Schrödinger
- Les orbitales
 - Nombre quantique n
 - Nombre quantique l
 - Représentation des orbitales

Introduction

La théorie découverte par Planck en 1900, démontre que les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement s'effectue non de façon régulière mais par paquet, par quantité discontinu. On donne alors le nom de « quantum » à chacun de ces paquets.

Einstein, en 1905, démontre que la lumière que l'on croyait forcément être une onde est formée de grains d'énergie que l'on appellera plus tard photons. La physique quantique vient de naître.

En mécanique classique une particule est entièrement caractérisée par 6 paramètres :

- Les 3 paramètres de position : x , y et z
- Les 3 paramètres de vitesse : v_x , v_y et v_z

En mécanique quantique, une particule comme l'électron est caractérisé non pas par les paramètres classiques mais par les 4 nombres quantiques : n , l , m et s .

Ces quatre nombres caractérisent les mouvements microscopiques de l'électron autour du noyau.

Les électrons

La mécanique ondulatoire permet d'associer une onde Ψ à une particule. La résolution de la fonction d'onde d'un électron nécessite d'introduire dans le calcul les quatre nombres quantiques.

La résolution de $\Psi (x, y, z...)$ permet de déterminer la géométrie des volume appelés orbitales.

1/ Le nombre quantiques principal : n

Ce nombre quantique définit : - une couche d'électrons

- un volume disponible pour les électrons.

Il s'agit d'un entier qui peut prendre toutes les valeurs positives supérieure à 1. Il représente aussi le numéro de chaque période de la classification des éléments. Le nombre quantique n intervient dans la composante radiale de la fonction d'onde. Il caractérise la taille ou le rayon de l'orbitale et son énergie.

Classification des éléments

n	1	2	3	4	5	6	7
Niveau	K	L	M	N	O	P	Q

2/ Le nombre quantique secondaire ou azimutal l

Le nombre quantique l est un entier compris entre 0 et n-1.

$$0 \leq l \leq n-1$$

Il définit une sous-couche d'énergie. Ainsi il caractérise la géométrie de l'orbitale.

l	0	1	2	3	4
Sous-couche	S	P	D	F	G

3/ Le nombre quantique magnétique m

Il traduit l'orientation prise par les orbitales soumises à un champ magnétique. Il est compris entre $-l$ et l .

4/ Le nombre quantique de Spin s

Il est la conséquence de la rotation de l'électron sur lui-même. C'est le moment cinétique de rotation d'une particule.

$$s = \pm 1/2$$

Les principes

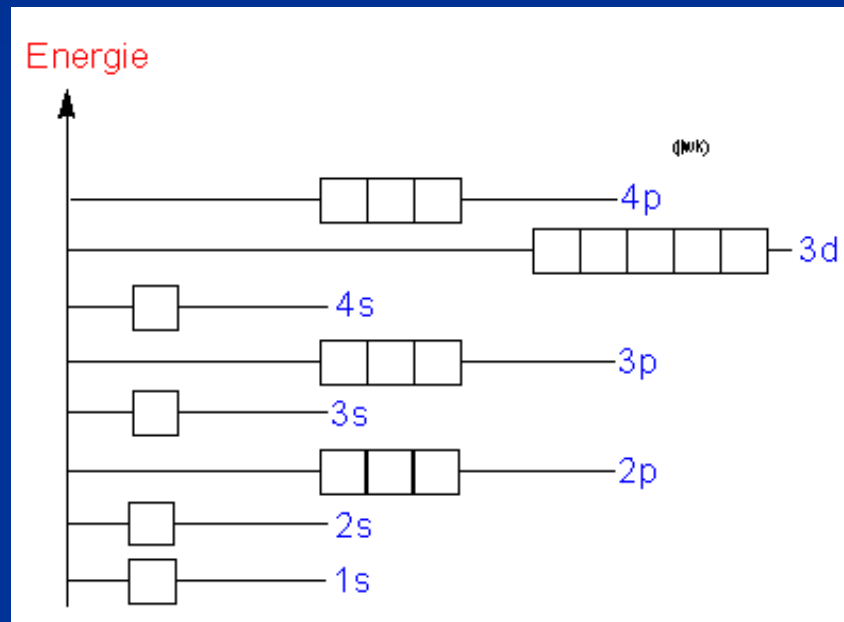
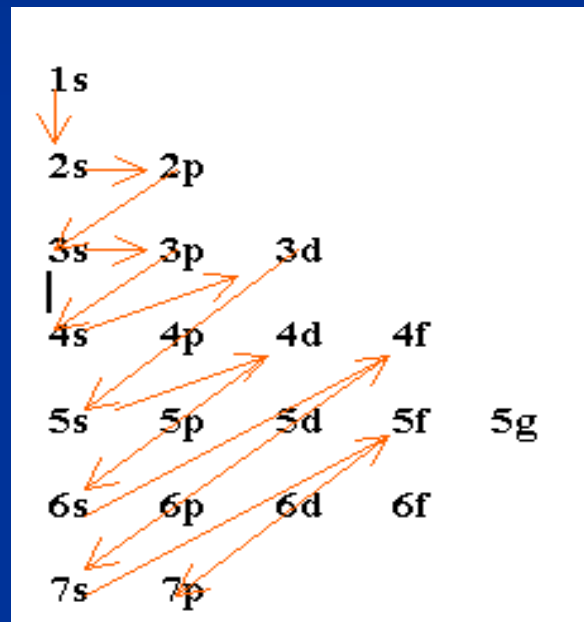
1/ Principe d'exclusion de Pauli

Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques identiques.

2/ Règle de Klechkowski

C'est un moyen mémo technique permettant de retrouver l'ordre de remplissage des couches électroniques d'un élément chimique. Toutes les couches sont mises en diagonales puis on rajoute les couches suivantes sur la ligne. La lecture se fait ensuite en colonne.

Règle de Klechkowski



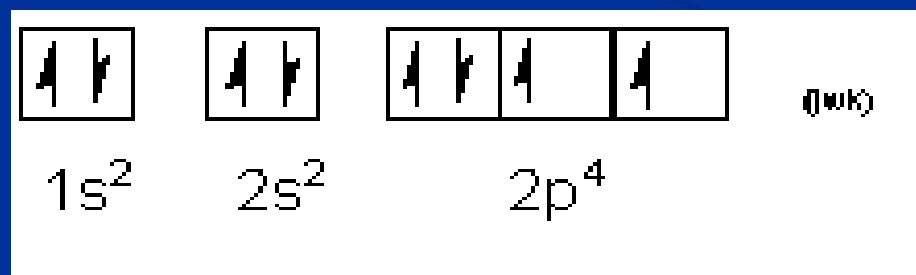
3/ Principe de stabilité ou d'énergie minimum

A partir de la règle de Klechkowski, les électrons se placent de telle manière que l'énergie totale soit la plus petite possible : c'est l'état dit fondamental.

4/ Formule quantique ou électronique d'un atome

Illustré par l'exemple de l'oxygène.

Oxygène $Z=8$



5/ Règle de Hund

Dans une sous-couche d'énergie donnée le nombre d'électrons non appariés (célibataire) doit être maximal.

6/ Equation de Schroödinger

Elle est l'équation fondamentale de la théorie quantique. Cette équation est compatible avec la nature ondulatoire des particules ainsi qu'avec le principe d'incertitude.

Les niveaux d'énergie permis correspondent aux états stationnaires des électrons. On associe à chaque état stationnaire une ou plusieurs fonctions d'ondes : $\Psi(x,y,z)$.

L'équation est telle que :

$$\Psi^2(x,y,z) \times \Delta V$$

Elle correspond à la probabilité de trouver l'électron dans le volume ΔV entourant la position (x,y,z) . Cela permet donc de calculer la probabilité de trouver l'électron dans une région spatiale donnée. La fonction d'onde correspond à une orbitale.

Les orbitales

Chaque orbitales est caractérisée par les nombres quantiques n, l, m .

1/ Le nombre quantique n

La fonction d'onde ne dépend que de la distance r d'où :

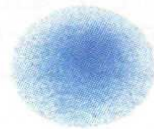
$$\Psi_{ns}^2 = f(r)$$

r = distance de l'électron par rapport au noyau

n = étendue de l'orbitale

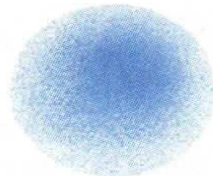
Cette équation est caractéristique s'une symétrie sphérique : l'orbitale s

a)

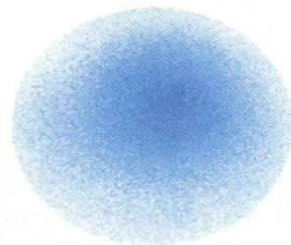


$$n = 1$$

b)



$$n = 2$$



$$n = 3$$

2/ Le nombre quantique azimutal

« l » représente la forme d'une orbitale.

$$n=1 \longrightarrow l=0$$

$$n=2 \longrightarrow l \text{ prend 2 valeurs : } l=0 \text{ et } l=1$$

$$n=3 \longrightarrow l \text{ prend 3 valeurs : } l=0, l=1 \text{ et } l=2$$

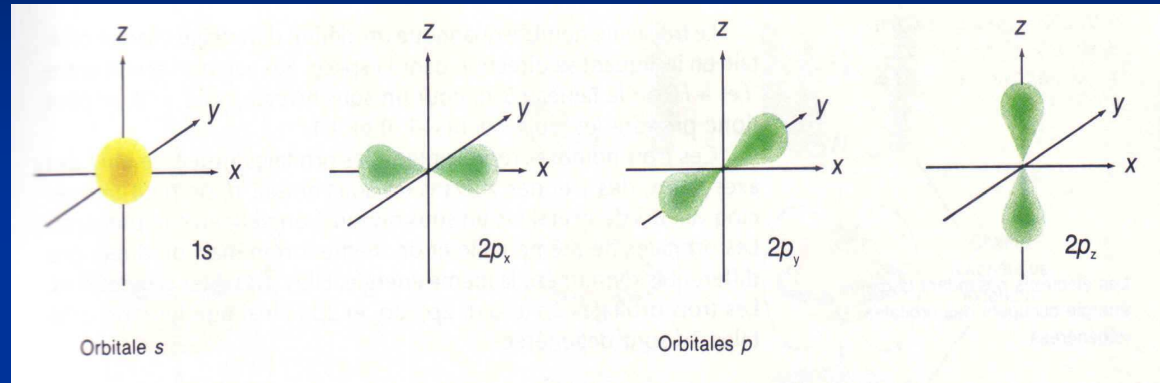
Pour simplifier les valeurs de l ont été désignée par des lettres, d'où:

$l=0$ correspond à l'orbitale s

$l=1$ correspond à l'orbitale p

$l=2$ correspond à l'orbitale d

3/ Représentation des orbitales



Toutes les orbitales p ont une forme identique : elles ont une symétrie cylindrique selon un grand axe.

Les orbitales d peuvent posséder plusieurs formes. Plus « n » est grand, plus l'orbitale d est volumineuse.

