

## 4 ORBITALES ET NOMBRES QUANTIQUES

### Exercice 4.1

1. Quelle équation doit-on résoudre pour décrire le comportement ondulatoire d'un électron ?

L'équation de Schrödinger.

2. Comment appelle-t-on les fonctions  $\Psi$  solutions de cette équation ? De quelles variables dépendent-elles ? Quel est leur sens physique ?

Les fonctions  $\Psi$  sont appelées *orbitales atomiques*. Elles dépendent des coordonnées spatiales de l'électron ( $r, \theta, \phi$  dans le système des coordonnées sphériques). Le carré de leur module correspond à la densité de probabilité de présence de l'électron, c'est-à-dire la probabilité de trouver ce dernier dans un volume défini.

3. Les fonctions  $\Psi$  décrivant l'électron de l'atome d'hydrogène dépendent de trois nombres entiers  $n, l, m$ , appelés nombres quantiques. Donner les relations liant ces trois nombres.

$$0 \leq l < n$$
$$-l \leq m \leq +l$$

4. Nomenclature utilisée pour désigner les fonctions dont les nombres quantiques sont :

- (a)  $n = 1, l = 0, m = 0 \Rightarrow 1s$
- (b)  $n = 3, l = 2, m = 1 \Rightarrow 3d$
- (c)  $n = 4, l = 1, m = -1 \Rightarrow 4p$

5. Quelle est la symétrie de la fonction d'onde  $\Psi_{100}$  ?

La fonction d'onde  $\Psi_{100}$  est de symétrie sphérique. Son expression ne dépend que de la distance électron-noyau ( $r$ ), et non des angles  $\theta$  et  $\phi$ .

### Exercice 4.2

Classer par ordre croissant de leur énergie les électrons d'un même atome définis par les valeurs suivantes de leurs nombres quantiques. Identifier la sous-couche électronique à laquelle ils appartiennent.

1.  $n = 3; l = 1; m = 0; s = +1/2 \Rightarrow$  sous-couche 3p
2.  $n = 4; l = 0; m = 0; s = -1/2 \Rightarrow$  sous-couche 4s
3.  $n = 3; l = 1; m = 0; s = -1/2 \Rightarrow$  sous-couche 3p
4.  $n = 3; l = 0; m = 0; s = +1/2 \Rightarrow$  sous-couche 3s
5.  $n = 3; l = 1; m = -1; s = +1/2 \Rightarrow$  sous-couche 3p

Ordre énergétique des sous-couches :  $3s < 3p < 4s$

### Exercice 4.3

Soit l'atome d'hydrogène dans un état excité  $n = 2$ , quelles sont les valeurs possibles du jeu des 4 nombres quantiques de l'électron ?

$n$	$l$	$m$	$m_s$
2	0	0	-1/2
2	0	0	+1/2
2	1	-1	-1/2
2	1	-1	+1/2
2	1	0	-1/2
2	1	0	+1/2
2	1	1	-1/2
2	1	1	+1/2