

Orbitales

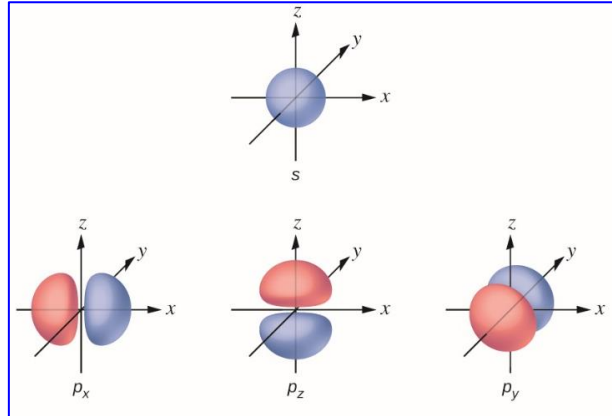
Orbitales atomiques

https://fr.wikipedia.org/wiki/Orbitale_atomique

En mécanique quantique, une orbitale atomique est une fonction mathématique qui décrit le comportement ondulatoire d'un électron ou d'une paire d'électrons dans un tome. Cette fonction donne la probabilité de présence d'un électron d'un atome dans une région donnée de cet atome. On la représente ainsi souvent à l'aide d'isosurfaces, qui délimitent la région à l'intérieur de laquelle la probabilité de présence de l'électron est supérieure à un seuil donné, par exemple 90 %.

Exemple des orbitales s et p

<https://opentextbc.ca/chemistry/>



<https://i.stack.imgur.com/EHl1o.png>

	s ($\ell = 0$)	p ($\ell = 1$)			d ($\ell = 2$)					f ($\ell = 3$)							
	$m = 0$	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = \pm 3$		
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_z(x^2-y^2)$	$f_x(x^2-3y^2)$	$f_y(3x^2-y^2)$	
n = 1	•																
n = 2	•																
n = 3	•																
n = 4																	
n = 5										
n = 6					
n = 7		

Remplissage électronique des orbitales : exemple des couche 1 et 2 (K et L) :

			1s	2s	2px 2py 2pz
Lithium, Li	Li	$1s^2 2s^1$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	$\square \square \square$
Beryllium, Be	Be	$1s^2 2s^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\square \square \square$
Boron, B	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \square \square$
Carbon, C	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \square$
Nitrogen, N	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
Oxygen, O	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$
Fluorine, F	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow$
Neon, Ne	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$

Théorie de l'orbitale moléculaire

https://fr.wikipedia.org/wiki/Th%C3%A9orie_de_l%27orbitale_mol%C3%A9culaire

La **TOM** utilise une combinaison linéaire d'orbitales atomiques afin de former des orbitales moléculaires sur la molécule dans son ensemble. Elles sont parfois classées en orbitales liantes, orbitales antiliantes, et orbitales non-liantes. [...] Si cette orbitale est du type dans lequel les électrons de l'orbitale ont une plus grande probabilité de présence *entre* les noyaux qu'ailleurs, l'orbitale sera liante, et tendra à maintenir les noyaux ensemble. Si les électrons se situent plutôt dans une orbitale pour laquelle ils passent plus de temps ailleurs qu'entre les noyaux, l'orbitale sera antiliante et affaiblira la liaison. Les électrons des orbitales non-liantes se situent plutôt dans des orbitales profondes (quasiment des orbitales atomiques) associées quasiment dans leurs intégralités avec un noyau ou l'autre, et ainsi passent autant de temps entre les noyaux qu'ailleurs. Ces électrons n'affaiblissent ni ne renforcent les liaisons chimiques.

Exemple du dihydrogène

https://fr.wikipedia.org/wiki/Diagramme_d%27orbitales_mol%C3%A9culaires

La configuration électronique de l'atome d'hydrogène est : $(1s)^1$. Chaque atome d'hydrogène apporte donc un électron, et on considère uniquement l'orbitale $1s$ de chacun de ces atomes lors de la construction du diagramme d'OM. Lorsqu'on approche les deux atomes d'hydrogène, les deux orbitales atomiques peuvent interagir. En effet, leur recouvrement est non nul et elles ont la même énergie. Ces deux orbitales atomiques, de symétrie σ , vont donc donner naissance à deux orbitales moléculaires de type σ . La combinaison symétrique d'orbitales atomiques a un recouvrement de signe positif, cette OM est donc stabilisée par rapport aux OA de départ et est notée $1\sigma_g$. La combinaison antisymétrique a un recouvrement de signe négatif, cette OM est donc déstabilisée par rapport aux OA et est notée $1\sigma_u^*$

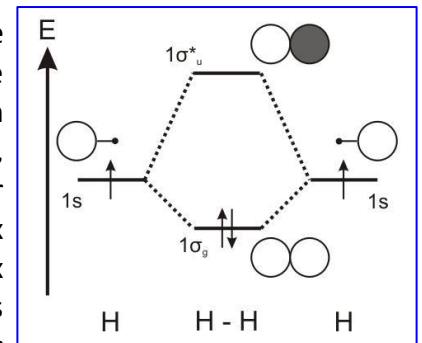


Diagramme d'orbitales moléculaires de H₂