

PRÉSERVER
SAUVEGARDER
VALORISER

ORBITALES ATOMIQUES (COURS ET DIAPOSITIVES)

FICHE N° 453

Période de fabrication : 1975-1999

Fabricant : Université de Paris et Nice ; Université de Paris et Nice ; Université de Paris et Nice

Domaines : Chimie, Physique

Sous-domaines : Chimie analytique

Organisme : Fédération des Sciences Chimiques de Marseille

Ville : Marseille

Modèle :

Matériaux :

Description

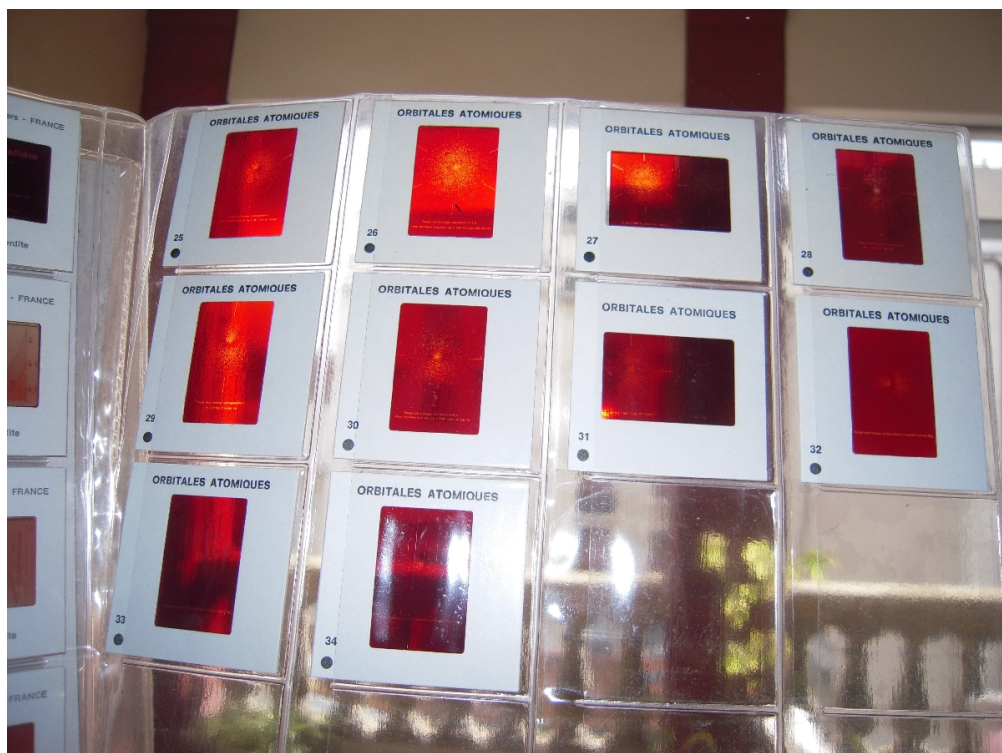
Présentation de 33 diapositives accompagnées de fiches explicatives. Support matériel à l'enseignement Universitaire de chimie sur les orbitales atomiques (fiches et diapositives). Une orbitale atomique est une fonction mathématique qui décrit le comportement ondulatoire d'un neutron ou d'une paire d'électrons dans un atome.

Programme des cours du 1er Cycle par J.P Jolivet, N. Lumbroso-Bader (Université Pierre & Marie Curie, Paris) et de D. Cabrol (Université de Nice). Les éléments illustrent les notions de :- Densité de probabilité et densité de probabilité radiale.- Orbitales s (symétrie sphérique) et 2Pz (propriétés directionnelles). - Équivalence de systèmes d'orbitales pures ou hybrides.

Utilisation

Les objets se trouvent dans une salle du laboratoire de chimie, il est utilisé pour l'enseignement.





ORBITALES ATOMIQUES

NIVEAU D'ENSEIGNEMENT : 1er CYCLE ET LICENCE

ELEMENTS CONSTITUANT LE DOCUMENT DE TRAVAIL :

Sont illustrées les notions de :

- Densité de probabilité et densité de probabilité radiale.
- Orbitales s (symétrie sphérique) et $2p_z$ (propriétés directionnelles).
- Equivalence de systèmes d'orbitales pures ou hybrides.

OBJECTIF :

Fournir un support matériel à l'enseignement des notions précisées ci-dessus, introduites parfois au niveau du premier cycle, et très souvent en second cycle.

Ce document a été volontairement limité aux représentations délicates à réaliser devant les étudiants. Il ne comporte donc pas l'ensemble complet des illustrations nécessaires à l'enseignement de cette partie du programme.

COMPOSITION DU DOCUMENT :

- 33 diapositives.
- Fiches (p. 1 à 11) précisant le contenu de chaque diapositive, et les codes (couleurs, graphismes, etc.) adoptés pour visualiser les concepts présentés.
- 33 photocopies en noir et blanc correspondant aux figures et permettant aux enseignants un éventuel tirage sur "transparents" destinés à l'usage sur rétroprojecteur.

UTILISATION DU DOCUMENT :

Ce document n'est pas utilisable en self-service par les étudiants car la projection de ces représentations exige un commentaire personnel de l'enseignant.

LISTE DES DIAPPOSITIVES

INTRODUCTION

L'objectif poursuivi est de fournir un support matériel aux enseignants chargés d'introduire les notions de densité de probabilité de présence électronique et d'orbitale.

Ce document a été volontairement limité aux représentations délicates à réaliser devant les étudiants. Il ne comporte donc pas l'ensemble complet des illustrations nécessaires à l'enseignement de cette partie du programme. De même, le texte relatif à chaque diapositive est en général limité à une description schématique de l'illustration.

La difficulté de représenter les fonctions orbitales Ψ ou leur carré Ψ^2 est liée au fait que ces fonctions dépendent en général de trois variables d'espace x, y, z (ou r, θ, φ lorsque l'on utilise les coordonnées sphériques). La représentation complète de ces fonctions nécessite ainsi un espace à 4 dimensions. Disposant seulement d'un "support" bidimensionnel, l'utilisation de la perspective ou de la projection permet au mieux de faire apparaître une troisième dimension. C'est pourquoi il est nécessaire, pour décrire une orbitale, d'utiliser plusieurs représentations.

Nous avons limité l'étude aux orbitales s et $2p_z$ de l'atome d'hydrogène. Leur expression est indépendante de φ . On peut alors réaliser les représentations suivantes :

Ψ^2 (ou Ψ)	r	θ	Représentations
variable	variable	constant	$\left[\Psi \text{ ou } \Psi^2 = f(r) \right] \theta = \text{Cte}$
variable	constant	variable	$\left[\Psi \text{ ou } \Psi^2 = f(\theta) \right] r = \text{Cte}$
constant	variable	variable	$\Psi^2 = \text{Cte}$ (isodensité)

En ce qui concerne le concept de l'hybridation, il est difficile de montrer, à partir des représentations habituelles des orbitales, l'équivalence complète des systèmes formés par les orbitales pures ou par les orbitales hybrides. Une série de diapositives permet d'illustrer ce concept.

LISTE DES DIAPOSITIVES

Notion de densité de probabilité de présence

- 1, 2, 3. Illustration des notions de densité de probabilité et de densité de probabilité radiale

Etude des orbitales s de l'atome d'hydrogène

- 4 - Comparaison des courbes représentant les fonctions ψ_{1s} et ψ_{1s}^2
- 5 - Cas d'un électron décrit par une orbitale $1s$: illustration de la symétrie sphérique de la densité électronique
- 6 - Construction des courbes d'isodensité électronique
- 7 - Projection dans un plan des courbes d'isodensité électronique
- 8 - Comparaison des courbes représentant les densités de probabilité de présence ψ_{1s}^2 , ψ_{2s}^2 , ψ_{3s}^2 .
- 9 - Nuage électronique correspondant à l'orbitale $1s$.
- 10 - Nuage électronique correspondant à l'orbitale $2s$.

Etude de l'orbitale $2p_z$ de l'atome d'hydrogène

- 11 - Dépendance angulaire de la fonction ψ_{2p_z}
- 12 - Dépendance angulaire de la densité de probabilité de présence $\psi_{2p_z}^2$
- 13 - Construction des courbes d'isodensité électronique
- 14 - Projection dans un plan des courbes d'isodensité électronique
- 15 - Représentation de la partie angulaire de la fonction orbitale $[\psi_{2p_z} = f(\theta)]$ $r = \text{Cte}$
- 16 - Représentation de la partie angulaire de la fonction densité de probabilité : $[\psi_{2p_z}^2 = f(\theta)]$ $r = \text{Cte}$
- 17 - Nuage électronique correspondant à l'orbitale $2p_z$

Hybridation des orbitales atomiques. (Cas des orbitales $n=2$ de l'atome de carbone)

- 18, 19, 20 - Nuages électroniques correspondant aux orbitales $2s$, $2p_y$ et $2p_x$ de l'atome de carbone.

21 à 25 - Hybridation sp_2 symétrique.

27 à 30 - Hybridation sp symétrique.

31 - Nuage électronique correspondant à une orbitale hybride sp_3 .

32 - " " " " " " " " sp_2 .

33 - " " " " " " " " sp .

N.B. - Utilisation des couleurs :

Représentation des fonctions ψ : rose ($\psi > 0$) et vert ($\psi < 0$)

Représentation des fonctions ψ^2 : orange.

Dans les diapositives 5, 6, 11, 12, 13, le dégradé de couleur n'est utilisé que pour suggérer la perspective. Dans le cas des diapositives 1, 2, 3 l'utilisation des couleurs est précisée dans le texte.

I. NOTION DE DENSITE DE PROBABILITE DE PRESENCE (Diapos 1,2,3)

Les représentations ont pour objet de faire apparaître la différence entre :

- densité de probabilité
- densité de probabilité radiale

en considérant l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental (décrit par une orbitale Ψ_{10}).

Densité de probabilité radiale

Afin d'illustrer et de concrétiser ces notions, nous avons établi un parallèle entre densité de probabilité et intensité de coloration d'une solution.

Nous rappellerons que l'intensité de coloration d'une solution dépend :

- de sa concentration en substance colorée
- de l'épaisseur de liquide à travers laquelle est faite l'observation.

En faisant varier un seul de ces deux facteurs, la concentration, on pourra utiliser les intensités de coloration d'une série de solutions pour représenter la variation (en fonction de la distance au noyau) de la densité de probabilité.

En faisant varier simultanément les deux facteurs (concentration et épaisseur de liquide observé), on pourra au contraire utiliser l'intensité de la coloration pour représenter la variation (en fonction de la distance au noyau) de la densité de probabilité radiale.

L'observation de colorations successives peut être réalisée expérimentalement en utilisant comme le colorant un radical libre tel que NO_2 . La coloration peut être observée avec la zone radiale correspondant au noyau de probabilité de l'atome.

DIAPO 1. Densité de probabilité $\frac{dP}{dV} = \psi_{1s}^2$.

a) La courbe (figure du haut) représente la variation de ψ_{1s}^2 en fonction de r , r étant la distance au noyau du volume unitaire dV dans lequel on recherche l'électron (r est exprimé en unités a_0).

b) Dans des tubes identiques (figure du bas) placés à des distances indiquées sur le diagramme et observés de face, on a représenté des volumes égaux de solution dont la concentration, et par conséquent l'intensité de coloration, varie proportionnellement à ψ_{1s}^2 .

La variation de l'intensité de la coloration dans la série de tubes permet donc de visualiser la variation de la fonction $\psi_{1s}^2 = f(r)$.

Densité de probabilité radiale.

Au lieu de considérer la densité de probabilité, c'est-à-dire la probabilité de présence de l'électron dans l'unité de volume dV à une distance r du noyau, on peut, en raison de la symétrie sphérique du modèle, considérer la probabilité de présence dans l'élément de volume dV compris entre les sphères de rayon r et $r+dr$. (dV représente un ensemble de volumes élémentaires d'autant plus important que r est plus grand).

La probabilité ainsi définie, appelée probabilité radiale, représente ainsi le produit de la probabilité par unité de volume (ψ_{1s}^2) par le nouveau volume dV considéré : $dP_{\text{rad}} = \psi_{1s}^2 \cdot dV$

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad dV = 4\pi r^2 dr \quad \text{d'où} \quad dP_{\text{rad}} = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr.$$

La densité de probabilité radiale est alors $\frac{dP_{\text{rad}}}{dr} = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2$

* L'obtention des solutions colorées peut être réalisée expérimentalement en utilisant du bleu de bromothymol en milieu acide (pH ~ 2). La coloration jaune orangé se place dans la zone spectrale correspondant au maximum de sensibilité de l'œil.

La diapo 1 montre la variation de Ψ_{1s}^2 en fonction de r .
 La diapo 2 est l'étude de la variation de l'élément de volume $dV = 4\pi r^2 dr$ en fonction de r .

DIAPHO 2 - Variation de l'élément de volume $dV = 4\pi r^2 dr$ en fonction de r .

La courbe (figure du haut) représente la variation du volume dV en fonction de r . Des coupes représentant une partie de l'élément de volume dV compris entre les sphères de rayon r et $r + dr$ montrent l'accroissement rapide du nombre de volumes unitaires compris dans dV à mesure que r augmente.

L'illustration de cette variation est représentée sur la figure du bas. Les concentrations des solutions sont identiques à celles des tubes représentés sur la diapo 1. Seul le volume de liquide contenu dans les tubes augmente, en fonction de r , proportionnellement à dV . Les colorations des solutions sont donc identiques à celles de la diapo 1 et restent proportionnelles à Ψ_{1s}^2 .

DIAPHO 3 - Densité de probabilité radiale $\frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 \Psi_{1s}^2$.

La courbe (trait plein, figure supérieure) représente la variation de la densité de probabilité de présence radiale en fonction de la distance r . Cette fonction est le produit des deux fonctions de la même variable r rappelées en pointillés : l'une décroissante $\Psi_{1s}^2 = f(r)$, l'autre croissante $dV = g(r)$. Leur produit présente un maximum pour la valeur de $r = a_0$.

Sur le schéma inférieur l'observation des tubes par le fond permet de visualiser directement le produit des deux fonctions : l'intensité de coloration observée est due en effet simultanément :

- à la coloration des solutions qui décroît avec r proportionnellement à Ψ_{1s}^2
- à l'observation de la coloration à travers une épaisseur de liquide de plus en plus grande puisqu'elle croît proportionnellement à dV .

Un maximum de coloration apparaît alors nettement pour une distance $r = a_0$.

II. ETUDE DES ORBITALES s DE L'ATOME D'HYDROGENE (Diapos 4 à 10)

DIAPO 4 - Comparaison des fonctions Ψ_{1s} et Ψ_{1s}^2 .

Variation en fonction de r

DIAPOS 4 à 10. Images électroniques correspondant aux

DIAPO 5 - $[\Psi_{1s}^2 = f(r)]_{\theta = \text{Cte}}$ Illustration de la symétrie sphérique de l'orbitale s.

La figure représente la variation de la densité de probabilité Ψ_{1s}^2 en fonction de r pour différentes valeurs de l'angle θ : le point autour duquel on recherche l'électron est situé soit sur l'axe Oz ($\theta = 0$) soit dans le plan yOz ($\theta \neq 0$). L'invariance de la fonction Ψ_{1s}^2 avec θ se traduit par un ensemble de courbes identiques quelle que soit la valeur de θ .

Par ailleurs, l'invariance de la fonction Ψ_{1s}^2 avec φ se manifeste par la permutation possible des plans xOz et yOz.

La densité de probabilité de présence de l'électron décrit par une orbitale s présente donc une symétrie sphérique.

II. ETUDE DE L'ORBITALE Ψ_{1s} DE L'ATOME D'HYDROGENE (Diapos 11 à 17)

DIAPO 6 - $[\Psi_{1s}^2 = \text{Cte}]$ Lignes d'isodensité électronique.

Sur la figure, identique à la précédente, on a tracé (en rouge) les contours correspondant à des valeurs égales de Ψ_{1s}^2 . Ce sont les courbes d'isodensité, analogues à des courbes de niveau. Ces contours sont des cercles. (Ils tracent d'une manière différente de la précédente (diapo 5) la symétrie sphérique de l'orbitale).

DIAPO 7 - $[\Psi_{1s}^2 = \text{Cte}]$ Projection sur le plan xoz (ou xoy) des lignes d'isodensité.

C'est ce type de représentation qui est le plus fréquemment utilisé.

L'épaisseur du trait traduit les différentes valeurs de Ψ_{1s}^2 .

DIAPHO 8 - $[\Psi_{ns}^2 = f(r)]_{\theta = \text{Cte}}$

Comparaison des courbes représentant la densité de probabilité de présence d'un électron de l'atome d'hydrogène décrit par les orbitales Ψ_{1s} , Ψ_{2s} et Ψ_{3s} .

DIAPOS 9,10 - Nuages électroniques correspondant aux orbitales 1s et 2s.

Ces diagrammes représentent des coupes du nuage par un plan passant par le noyau (ce dernier se trouve au centre du carré). Ils sont tracés à l'ordinateur et contiennent chacun 2000 points formant un nuage dont la densité n'est pas uniforme : elle est proportionnelle à la densité de probabilité de présence Ψ^2 .

Les diagrammes permettent de comparer l'étendue des nuages correspondant aux orbitales 1s et 2s. Dans ce dernier cas, la diapo 10 fait clairement ressortir l'existence d'une zone nodale située entre deux maximums.

III. ETUDE DE L'ORBITALE $2p_z$ DE L'ATOME D'HYDROGENE (Diapos 11 à 17)

DIAPHO 11 - $[\Psi_{2p_z} = f(r)]_{\theta = \text{Cte}}$

On a représenté la variation de la fonction orbitale Ψ_{2p_z} en fonction de r pour différentes valeurs de l'angle θ . Le point autour duquel on recherche l'électron est situé soit sur l'axe Oz ($\theta = 0$) soit dans le plan yOz en dehors de l'axe Oz ($\theta \neq 0$).

L'invariance de la fonction Ψ_{2p_z} avec φ se traduit par la permutation possible des plans yOz et xOz.

Les zones rouges correspondent à des valeurs positives de Ψ_{2p_z} , les vertes aux valeurs négatives de Ψ_{2p_z} ($\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{2}$).

DIAPO 12_ $\left[\Psi_{2p_z}^2 = f(r)\right]_{\theta = \text{Cte}}$

Variation de la densité de probabilité $\Psi_{2p_z}^2$ en fonction de r pour différentes valeurs de θ .

Le principe de la représentation est identique à celui de la diapo 11.

DIAPO 13_ $\left[\Psi_{2p_z}^2 = \text{Cte}\right]$ Lignes d'isodensité électronique.

Sur la même figure que la précédente, on a tracé les contours correspondant à des valeurs égales de la densité de probabilité $\Psi_{2p_z}^2$.

DIAPO 14_ $\left[\Psi_{2p_z}^2 = \text{Cte}\right]$ Projection sur le plan yz (ou xoz) des lignes d'isodensité.

L'épaisseur du trait tracé les différentes valeurs de $\Psi_{2p_z}^2$.

N.B. - Devant l'impossibilité d'avoir une représentation simple des orbitales $2p$, ces lignes d'isodensité semblent la meilleure façon de les symboliser.

DIAPO 15_ $\left[\Psi_{2p_z} = f(\theta)\right]_{r = \text{Cte}}$ Représentation de la partie angulaire de la fonction orbitale Ψ_{2p_z} $\left[\Psi_{2p_z} = A \cos \theta\right]$

r , distance au noyau du point M autour duquel on recherche l'électron demeure constante mais la direction dans laquelle on recherche l'électron (angle θ) varie. Le point M décrit donc la surface d'une sphère (en grisé sur la diapo).

Pour chaque direction de recherche, on porte sur l'axe OM correspondant un segment OP représentant la valeur de la partie angulaire ($\cos \theta$) de la fonction Ψ_{2p_z} . Le point P décrit alors la surface des sphères rouge (valeurs positives de $\cos \theta$) et verte (valeurs négatives de $\cos \theta$).

L'absence de dépendance de ϕ entraîne une symétrie de révolution de la figure.

N.B. - Cette représentation n'est pas spécifique de l'orbitale $2p_z$. Elle sera identique pour toutes les orbitales p_z ($3p_z$, $4p_z$) puisque toutes ont la même partie angulaire ($\cos \theta$).

DIAPO 16 - $[\Psi_{2p_z}^2 = r(0)]_{r=Cte}$ Représentation de la partie angulaire de la densité de probabilité $\Psi_{2p_z}^2$.

La représentation est basée sur le même principe que précédemment (diapo 15).

DIAPO 17 - Nuage électronique correspondant à l'orbitale $2p_z$.

Ce diagramme est tracé selon la même technique que celle utilisée pour les nuages correspondant aux orbitales s (diapo 8 et 10). Le plan de coupe du nuage contient l'axe z. L'invariance de la fonction $\Psi_{2p_z}^2$ avec ϕ entraîne une symétrie de révolution autour de l'axe Oz.

IV - HYBRIDATION DES ORBITALES ATOMIQUES (Cas des orbitales $n=2$ de l'atome de carbone). (Diapos 18 à 33)

L'hybridation des orbitales atomiques est une transformation mathématique qui permet de remplacer un ensemble d'orbitales par un autre ensemble obtenu par combinaison linéaire des premières. L'intérêt de cette transformation est d'obtenir des orbitales dont les directions principales coïncident avec celles des liaisons de la molécule que l'on cherche à décrire.

La série de diapositives a pour but de montrer l'équivalence des ensembles d'orbitales s, p_x , p_y et des orbitales hybrides obtenus par combinaison linéaire de ces dernières. (Nous nous sommes limités aux hybridations symétriques représentables dans un plan : hybridation sp_2 et sp).

Diapos 18,19,20 - Présentation des orbitales 2s, 2p_y, 2p_x

Les représentations sont effectuées selon le principe déjà décrit (diapos 8, 10, 17).

Le plan en rouge du nuage contient l'axe de révolution.

Diapos 21 à 26 - Hybridation sp₂ symétrique

Le nuage électronique correspondant à trois électrons de valence décrits respectivement par les orbitales pures 2s, 2p_y, 2p_x peut être représenté par superposition des figures précédentes.
Diapo 21 : { 2s, 2p_y } . Diapo 22 : { 2s, 2p_y, 2p_x }

A partir de ces trois orbitales pures, on peut construire trois orbitales hybrides sp₂ symétriques dirigées à 120° l'une de l'autre. Le nuage électronique d'une telle orbitale est représenté sur la diapo 23. Par superposition de trois orbitales sp₂ à 120° l'une de l'autre (diapos 24 et 25), on obtient la même représentation que celle obtenue en superposant les orbitales pures 2s, 2p_y, 2p_x (diapo 26).

Diapos 27 à 30 - Hybridation sp symétrique

Le nuage électronique correspondant à deux électrons de valence décrits respectivement par les orbitales 2s et 2p_y (ou 2p_x) peut être représenté par superposition des figures correspondantes : diapo 18 : { 2s }, diapo 19 : { 2p_y }, diapo 27 : { 2s, 2p_y }

A partir de ces deux orbitales pures, on peut construire deux orbitales hybrides sp symétriques colinéaires. Le nuage électronique d'une telle orbitale est représenté sur la diapo 28.

La superposition de deux orbitales sp à 180° l'une de l'autre est représentée sur la diapo 29.

On observe ici encore l'équivalence complète des deux systèmes (diapo 30).

Diapos 31, 32, 33 - Comparaison des nuages électroniques correspondant aux orbitales hybrides sp₃, sp₂, sp.

*
* *

Pour nous citer :

Base de la Mission nationale de sauvegarde et de valorisation du patrimoine scientifique et technique contemporain, PATSTEC, Orbitales atomiques (cours et diapositives) (Université de Paris et Nice ; Université de Paris et Nice ; Université de Paris et Nice),
<https://www.patstec.fr/ressources/objets/detail?id=24598>, consulté le 2026-07-28