

LA NOTION DE VECTEUR D'ÉTAT EN MÉCANIQUE QUANTIQUE (avec aspirine)

Intro : il existe une équation complexe, appelée « équation d'onde », qui permet de décrire le comportement énergétique de l'unique électron d'un atome d'hydrogène.

Cette équation offre plusieurs solutions possibles. Ces différentes solutions mathématiques décrivent en fait les différentes régions probables (appelées orbitales) où peut se situer l'électron de l'hydrogène.

Chaque orbitale possède une énergie précise, et pour la générer, l'électron doit acquérir la bonne énergie (ni plus ni moins, tout comme on ne peut tenir entre deux marches, qui constituent des valeurs discrètes dans un référentiel gravitationnel).

Les différentes valeurs possibles d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène se trouvent caractérisées dans l'équation de Schrödinger par une série de quatre nombres, appelés « nombre quantiques ».

En mécanique quantique, l'état de l'électron (ou son *orbitale*) dans l'**atome d'hydrogène** est spécifié par trois « nombres quantiques » : n , l , m .

- n : nombre entier positif (1, 2, 3, ...) qui exprime le « niveau d'énergie » où se trouve l'électron.
($n = 1$ est le niveau fondamental.)

n nb quantique principal :

- caractérise l'énergie de l'orbitale ;
- détermine sa taille

- l : nombre naturel (0, 1, 2, ...) correspondant au nombre de « moments angulaires » de l'électron.
($0 \leq l \leq n - 1$.)

l = nb quantique secondaire :

- détermine la forme de l'orbitale et aussi un peu son énergie (ex : $l=0$, forme *sphérique* : orbitale « s » ($l=1$ est l'orbitale p pour précise, $l=2$ est l'orbitale d pour diffuse, f pour focused, d'après les tracés obtenus à l'époque)
- ses valeurs permises sont situées entre 0 et $n-1$

- m : nombre entier associé au moment angulaire et qui dans tous les cas n'affecte pas le niveau d'énergie où se trouve l'électron. ($-l \leq m \leq +l$.)

m : nb quantique magnétique

- détermine l'orientation magnétique de l'orbitale dans l'espace
- le nb de valeurs permises de m indique combien d'orbitale(s) il peut exister pour un l donné. par exemple, pour $l=0$ (c'est l'orbitale s), m vaut 0. Il n'existe donc qu'une seule orbitale s . Pour $l=1$ (les orbitales de forme p), $m = -1, 0, +1$. Il n'existe donc que 3 orbitales p . Etc.

s = nb quantique de spin

- caractérise le spin de l'électron, soit le champ généré par la rotation de l'électron sur lui-même ;

- Deux valeurs permises : $+\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$.

(À noter qu'il est futile de supposer un spin lorsqu'un électron est célibataire dans une orbitale. Par contre, on est assuré qu'un second électron qui l'y accompagnera générera un spin opposé au premier.)

Ces trois nombres sont les éléments des **vecteurs d'états** (*eigenstates*), notés $|n,l,m\rangle$, chacun déterminant une « fonction d'onde de probabilité », qui donne en tout point de l'espace la *probabilité* que l'électron se trouve à ce point.