

Cours N°3:

Configuration électronique des atomes

3.1. Nombres quantiques et orbitales atomiques

- En mécanique ondulatoire (quantique) un électron se trouve en point de coordonnées (x,y,z) à l'instant (t) est décrit par une fonction d'onde $\psi(x,y,z)$.
- La résolution de la fonction d'onde d'un électron fait intervenir quatre nombres appelés nombres quantiques qui caractérisent l'état d'un électron qui sont : n, ℓ, m, s .

3.1.1. Nombre quantique principal (n)

- C'est un nombre entier positif ($n \geq 1$),
- il définit la couche électronique (niveau d'énergie) d'un atome,
- Il définit la taille de **l'orbitale atomique**,
- Il représente le numéro de chaque période dans le tableau périodique,
- Les couches électroniques sont désignées par un symbole tel qu'ils sont représentées sur le tableau ci-dessous.
- **Tableau .1** : les valeurs de n et couche correspondante.

Valeurs de n	1	2	3	4	5	6	7
Couche	K	L	M	N	O	P	Q

Définition d'un orbital atomique

- **Un orbital atomique:**
- Est une zone dans l'espace (volume) dont le quel la probabilité de se trouver un électron autour de son noyau est plus importante ($\geq 95\%$)

3.1.2. Nombre quantique secondaire ou azimutal (ℓ)

- Ce nombre entier caractérise la sous-couche (ou le sous niveau) occupée par l'électron.
- Il définit la forme (la géométrie) de l'orbitale atomique dans lequel se trouve l'électron,
- Il peut prendre toutes les valeurs comprises entre 0 et $n-1$ ($0 \leq \ell \leq n-1$).
- **Tableau 3.2** : les valeurs de (ℓ) et sous couche correspondante.

Valeurs de (ℓ)	0	1	2	3
Sous couche électronique	S	P	d	f

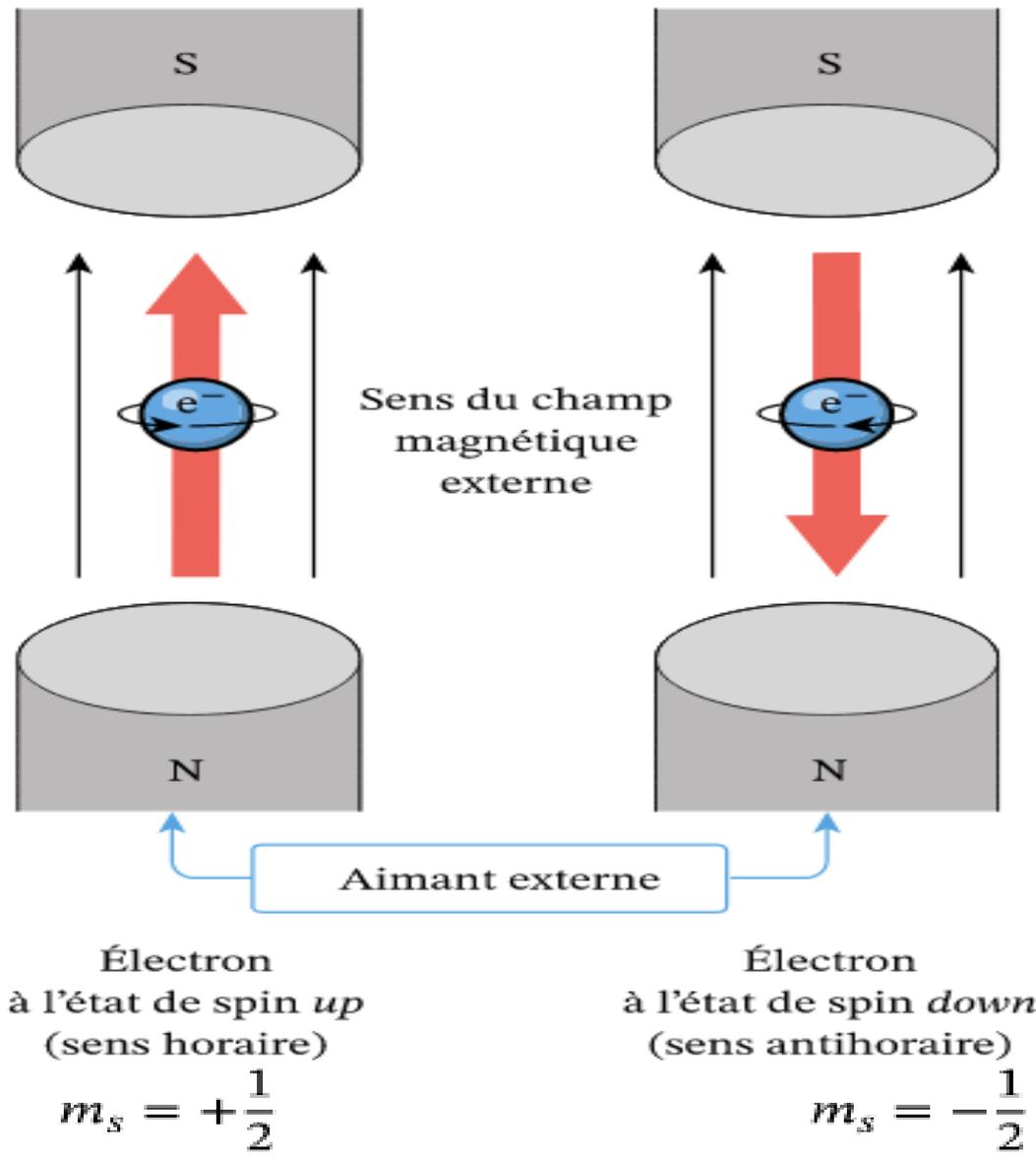
3.1.3. Nombre quantique magnétique (m)

- Ce nombre définit l'orientation de l'orbitale atomique par rapport une direction de référence (direction du champ magnétique),
- Les valeurs de **m** sont limitées par les valeurs de ℓ :
 - $-\ell \leq m \leq +\ell$,
- il y a $(2\ell + 1)$ valeurs de m.
Pour symboliser les différentes formes de l'orbitale, on utilise une case quantique représentée par un **rectangle**.

ℓ	0	1	2	3
Sous couche électronique	S	P	d	f
m	0	-1 ; 0 ; +1	-2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2	-3 ; -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2 ; +3
représentation				
Nombre de case quantique	1	3	5	7

3.1.4. Le nombre quantique de spin (s)

- **Le nombre quantique de spin:**
- C'est le moment cinétique de rotation de l'électron sur lui-même.
- Ce nombre ne peut prendre que deux valeurs ($+1/2$) et ($-1/2$) (figure I.1).
- On représente symboliquement ce nombre de spin par :
 - **Une flèche vers le haut** (rotation vers le haut \uparrow): un électron dans l'état de spin **$+1/2$** .
 - **Une flèche vers le bas** (rotation vers le bas \downarrow) : un électron dans l'état de spin **$-1/2$** .



Les spins des deux électrons sur la même orbitale

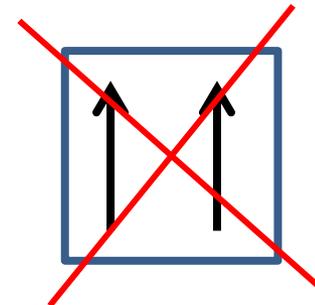
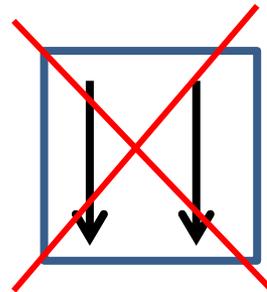
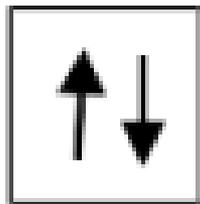
n≥1	Niveau Couche é	0≤ℓ≤n-1	Sous-couche é	-ℓ≤m≤+ℓ	S=+1/2 S=-1/2	Case quantiques	Nombre max des é	
							Sous couche é	Couche é
n=1	K	0	S	0	+1/2 ; -1/2		2	2
n=2	L	0	S	0	+1/2 ; -1/2		2	8
		1	P	-1	+1/2 ; -1/2		6	
				0	+1/2 ; -1/2			
+1	+1/2 ; -1/2							
n=3	M	0	S	0	+1/2 ; -1/2		2	18
		1	P	-1	+1/2 ; -1/2		6	
				0	+1/2 ; -1/2			
				+1	+1/2 ; -1/2			
		2	d	-2	+1/2 ; -1/2		10	
				-1	+1/2 ; -1/2			
				0	+1/2 ; -1/2			
+1	+1/2 ; -1/2							
+2	+1/2 ; -1/2							
n=4	N	0	S	0	+1/2 ; -1/2		2	32
		1	P	-1	+1/2 ; -1/2		6	
				0	+1/2 ; -1/2			
				+1	+1/2 ; -1/2			
		2	d	-2	+1/2 ; -1/2		10	
				-1	+1/2 ; -1/2			
				0	+1/2 ; -1/2			
				+1	+1/2 ; -1/2			
+2	+1/2 ; -1/2							
3	f	-3 ; -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2 ; +3	+1/2 ; -1/2		14			

3.2. Les principales lois de remplissages des cases quantiques

- Le remplissage des cases quantique s'effectue à l'aide des règles suivantes :
 - 3.2 .1. Principe d'exclusion de Pauli**
 - **3.2 .2. Principe de stabilité**
 - **3.2 .3. Règle de Hund**
 - **3.2.4. Règle de Klechkowski**

3.2 .1. Principe d'exclusion de Pauli

- Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques identiques n , ℓ , m et s .
- Dans une même case quantique n , ℓ , m sont fixés.
- On ne peut placer que deux électrons au maximum avec leur nombre quantique de spins opposés. Donc:
- Le premier électron prend **$m=+1/2$** ,
- Le deuxième électron prend **$m=-1/2$** .



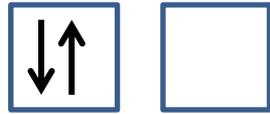
3.2 .2. Principe de stabilité

- L'état fondamental de l'atome représente l'état le plus stable de l'électron, donc les électrons vont commencer par occuper les niveaux d'énergie les plus bas à la limite des places vacantes.

- **Exemple:** He ($z=2$)

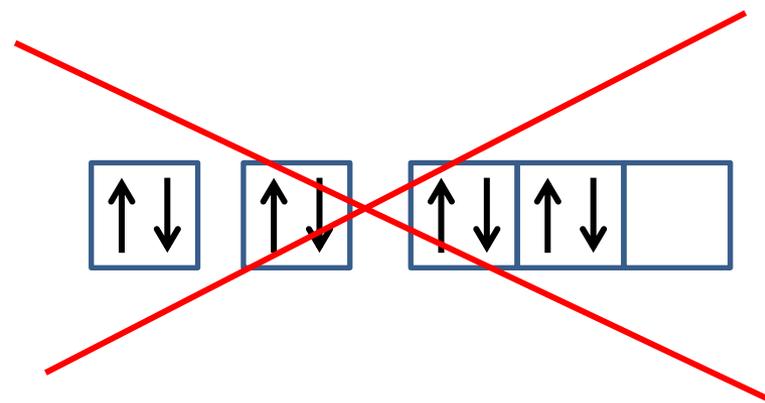
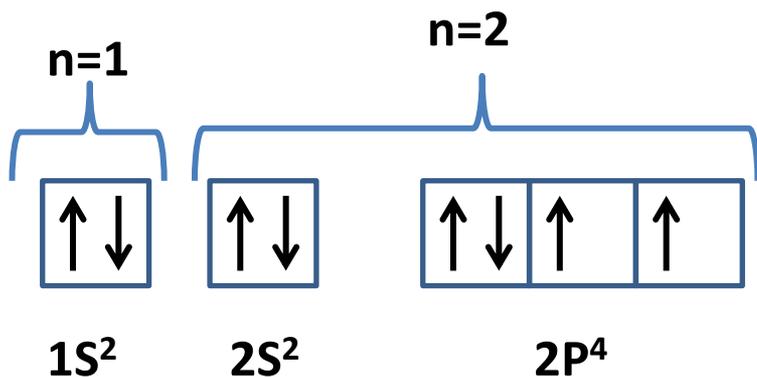
- ~~$n=1$ $n=2$~~

- ~~
 Représentation fausse~~

- 
 Représentation juste

1.2 .3. Règle de Hund

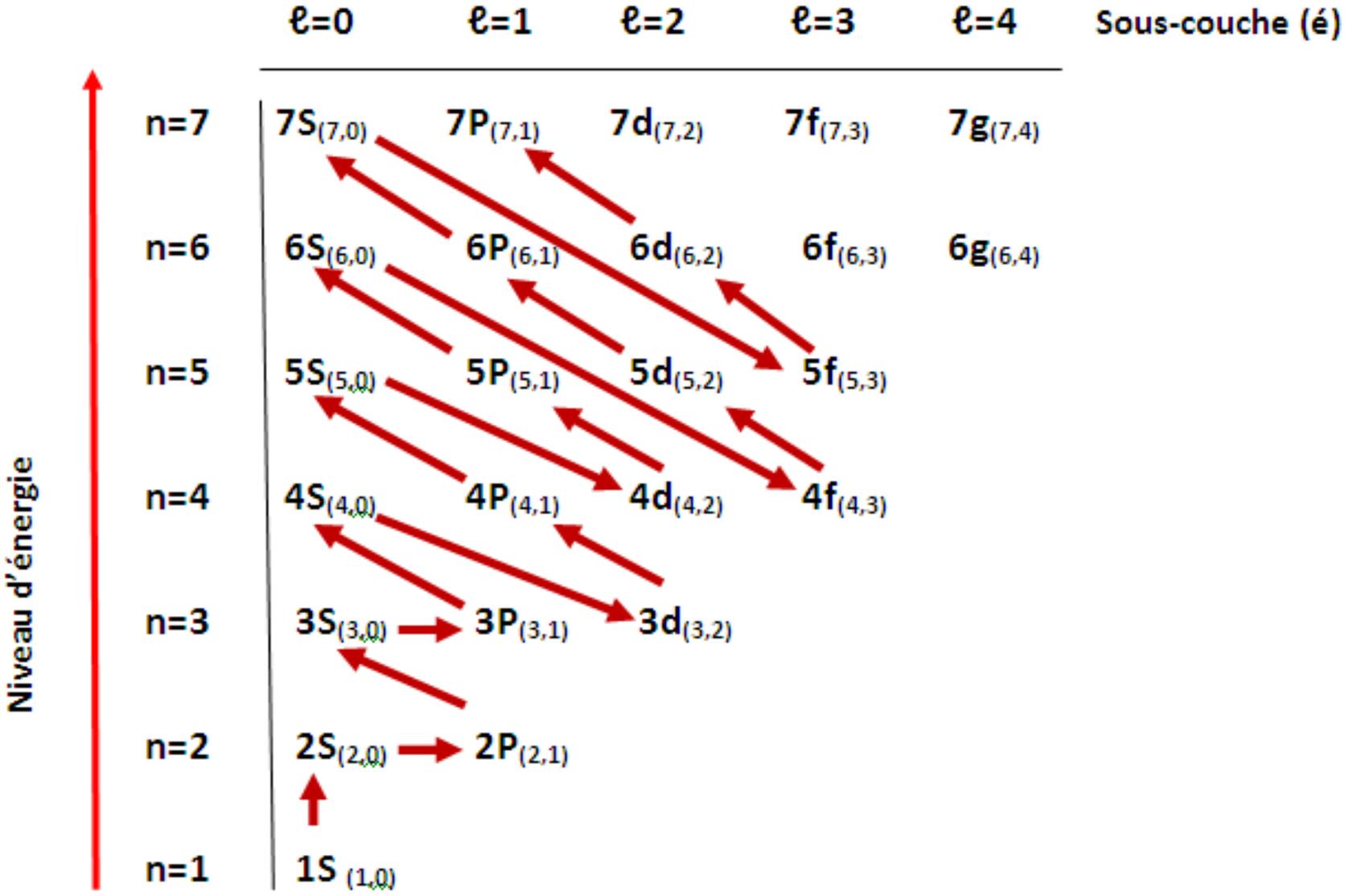
- Les orbitales atomiques(cases quantiques) d'une même sous couche correspondent au même niveau énergétique,
- Les électrons se répartissent dans ces cases d'abord à raison d'**un électron par orbitale puis en doublet** à défaut de cases.
- **$2n^2$** est le nombre maximal d'électron pouvant se répartir sur toutes les sous couches de la couche n.
- **Exemple:** O(Z=8)



I.2.4. Règle de Klechkowski

- **La règle de Klechkowski:**
- Est une règle **empirique** qui permet de retrouver l'ordre de remplissage des sous couches électroniques d'un atome dans son état fondamental.
- Dans un atome polyélectronique:
- L'ordre de remplissage des sous couches est celui pour lequel **$(n+l)$ croit.**
- Quand deux sous-couches ont la même valeur pour la somme $(n+l)$, la sous couche qui est occupée la première est celle dont le nombre quantique principal **(n) est petit.**

Règle de Klechkowski (suite)



Exception à la règle de Klechkowski

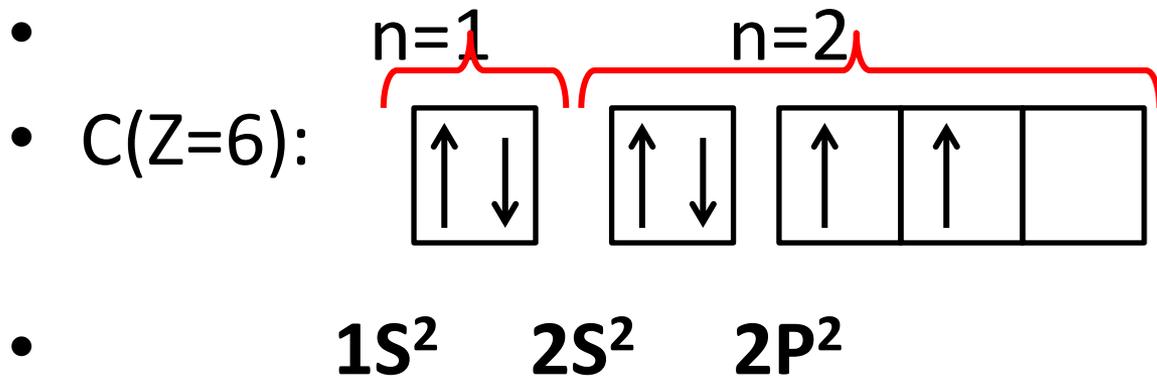
- A partir du niveau ($n=4$), le remplissage des orbitales atomiques ne respecte pas rigoureusement la R. Klechkowski (Ex:Cu($Z=29$) ;Cr($Z=24$)).
- De nombreuses irrégularités apparaissent dans le remplissage des sous- couches **d** et **f**.

Exemple d'application (1)

- **Exercice N°1:**
- Trouver les quatre nombres quantiques de l'hydrogène Hydrogène ($Z=1$).
- Solution:
- **1. Détermination le nombre quantique principal:**
- L'hydrogène est constitué d'un seul électron,
- L'électron de l'hydrogène occupe le niveau d'énergie le plus bas qui correspond à $n=1$, donc le nombre quantique principale est ($n=1$).
- **2. Détermination le nombre quantique secondaire :** ($0 \leq \ell \leq n-1$)
- D'après la loi: ($0 \leq \ell \leq n-1$) donc: $0 \leq \ell \leq 1-1$ c.à.d.
- $\ell=0$ qui correspond à l'orbitale atomique (s).
- **3. Détermination le nombre quantique magnétique :** $-\ell \leq m \leq +\ell$,
- $m=0$: c.à.d. il ya une seul orientation de l'orbitale atomique est donc une seule case quantique .
- **4. Détermination le nombre quantique de spin :** $s=+1/2$ ou $s=-1/2$.
- Nous avons un seul électron qui va prendre $s=+1/2$.

Exemple 2

- **Exercice:**
- Trouver la configuration électronique du carbone: C(Z=6).
- Solution:
- C(Z=6): **$1S^2 2S^2 2P^2$**



Travail personnel

- **Exercice N°1:**
- Trouver les quatre nombres quantique de l'hélium(**Z=?**).
- **Exercice N°2:**
- Trouver la configuration électronique des éléments chimiques suivants:
- Ne(Z=10)
- S(Z=16)
- S⁻²(Z=16)
- U(Z=92).