

1-INTRODUCTION

La théorie découverte par Planck en 1900, démontre que les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement s'effectue non de façon régulière mais par paquet, par quantité discontinu. On donne alors le nom de discontinu. On donne alors le nom de « quantum » à chacun de ces paquets.

Einstein, en 1905, démontre que la lumière que l'on croyait forcément être une onde est formée de grains d'énergie que l'on appelle photons. La physique quantique vient de naître. En mécanique classique une particule est entièrement caractérisée par 6 paramètres:

Les 3 paramètres de position : x , y et z

Les 3 paramètres de vitesse : v_x , v_y et v_z

En mécanique quantique, une particule comme l'électron est caractérisé non pas par les paramètres classiques mais par les 4 nombres quantique : n , l , m et s . Ces quatre nombres caractérisent les mouvements microscopiques de l'électron autour du noyau.

La mécanique ondulatoire permet t d'associer une onde Ψ à une particule. La résolution de la fonction d'onde d'un électron nécessite d'introduire dans le calcul les quatre nombres quantiques. La résolution de $\Psi(x, y, z)$ permet de déterminer la géométrie des volume appelés orbitales.

2-LES NOMBRES QUANTIQUES :

➤ Le nombre quantique principal n

- Le nombre quantique principal, noté n , est un entier naturel non nul ($n \in \mathbb{N}^*$) : $n=1,2,3\dots$
 - Dans un atome donné, une OA de n plus élevé décrit un électron plus éloigné du noyau.
 - On dit souvent que n numérote la **couche** dans laquelle se trouve l'électron. Il existe une nomenclature (peu utilisée) pour désigner ces valeurs de n : K, L, M... pour respectivement $n=1,2,3\dots$
 - Pour l'atome d'hydrogène (électron unique), et pour cet atome seulement, ce nombre suffit à lui seul pour connaître l'énergie de l'électron, par la formule : $E_n = -A/n^2$, avec $A=13,6$ eV.
- Rappel sur l'unité « électronvolt » : $1 \text{ eV} = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

➤ Le nombre quantique secondaire (ou azimutal) l

- Le nombre quantique secondaire, ou azimutal, noté l , est un entier naturel ($l \in \mathbb{N}$), tel que $0 \leq l \leq (n-1)$.

LA CONFIGURATION ELECTRONIQUE DES ATOMES

• On dit souvent que ℓ numérote la **sous-couche** dans laquelle se trouve l'électron. Il existe une nomenclature à **connaître impérativement** pour désigner ces sous-couches : s, p, d, f, g, \dots pour respectivement $\ell=0,1,2,3,4,\dots$

➤ **Le nombre quantique magnétique $m\ell$**

Le nombre quantique magnétique, noté $m\ell$ est un entier relatif ($m\ell \in \mathbb{Z}$), tel que $-\ell \leq m\ell \leq +\ell$. Pour chaque valeur de ℓ , il existe donc $2\ell+1$ valeurs possibles de $m\ell$.

Nomenclature d'une OA Les caractéristiques les plus importantes de l'électron étant contenues dans les nombres n et ℓ , une orbitale atomique est désignée en accolant la **valeur** de n à la **lettre** de nomenclature correspondant à la valeur de ℓ .

Ainsi, une orbitale pour laquelle $n=1$ et $\ell=0$ est appelée **orbitale 1s** ; une orbitale de nombres quantiques $n=2$ et $\ell=1$ est une **orbitale 2p**... En plus des trois nombres quantiques $n, \ell, m\ell$ caractérisant une OA, tout électron possède un quatrième nombre quantique caractérisant son spin (propriété quantique de rotation propre) :

➤ **Le nombre quantique de spin m_s**

Le nombre quantique de spin, noté m_s est un nombre caractérisant l'orientation du spin de l'électron. On retiendra que m_s peut prendre 2 valeurs : $+1/2$ ou $-1/2$.

3. LES REGLES POUR ETABLIR LA CONFIGURATION ELECTRONIQUE D'UN ATOME A L'ETAT FONDAMENTAL :

➤ **Règle n°1 : Le principe de Pauli**

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques identiques. Une OA ne peut décrire que deux électrons au maximum, et dans ce cas leurs spins sont opposés.

➤ **Règle n°2 : La règle de Klechkowski**

Les OA se remplissent dans l'ordre croissant de $n+\ell$ et, en cas d'égalité, par ordre croissant de n . Pour appliquer aisément cette règle, il existe des méthodes graphiques pour retrouver rapidement

l'ordre de remplissage qu'elle engendre.



On retrouve ainsi l'ordre de remplissage des OA :

$1s2s2p3s3p4s3d4p5s4d5p6s4f5d6p7s...$

Klechkowski »

- Exemples :

Structure électronique ou configuration électronique à l'état fondamental :

${}_8\text{O}$ (8 électrons à placer) : $1s^2 / 2s^2, 2p^4$ → électrons de cœur / électrons de valence

Il est préférable d'écrire : $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6 / 3d^7, 4s^2$

Exceptions à la règle de Klechkowski.

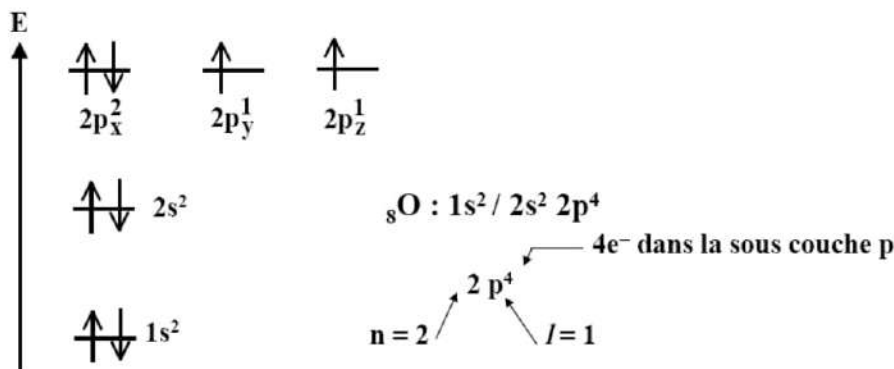
Exemples :

- le chrome : ${}_{24}\text{Cr} : 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6 / 3d^5, 4s^1$ et non pas : $3d^4, 4s^2$

- le cuivre : ${}_{29}\text{Cu} : 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6 / 3d^{10}, 4s^1$ et non pas : $3d^9, 4s^2$

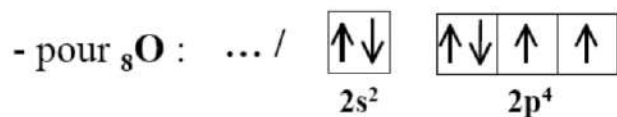
2.3.Règle n°3 : La règle de Hund

Lorsque plusieurs OA de même énergie sont disponibles, les électrons occupent d'abord le **maximum d'OA avec leurs spins parallèles** avant de s'apparier. L'expression « à spins parallèles » est à comprendre comme : « avec la même valeur du nombre quantique m_s »



Utilisation des **cases quantiques symbolisant chacune une orbitale atomique.**

LA CONFIGURATION ELECTRONIQUE DES ATOMES



- Pour écrire la structure électronique d'une **espèce ionisée positivement** :

- **Cas général** : on enlève d'abord les électrons les plus externes (ceux qui correspondent à n le plus grand).

- Dans le cas des métaux de transition, on enlève donc d'abord les électrons « s »

