<u>Département ST- Université de Bejaia</u> SECTION F

Configuration électronique

La **configuration électronique** d'un atome est la répartition des électrons sur les couches de différents niveaux d'énergie. Elle est définie par les nombres quantiques.

Les modèles électroniques de l'atome

Avant l'apparition de la mécanique quantique moderne, plusieurs modèles de l'atome ont été proposés. Rutherford (vers 1905) a été le premier à présenter un modèle de l'atome. Celui-ci est constitué d'un noyau autour duquel gravitent les électrons à l'image dans un système planétaire avec les planètes tournant autour du soleil. Neils Bohr (en 1913) repris le modèle instable de Rutherford et rajouta les résultats de la théorie de Planc et la quantification de l'énergie suivant la relation E =hv Malheureusement ces modèles reflètent mal la réalité et ne permettent pas d'expliquer un certain nombre de phénomènes physiques tels que l'effet photoélectrique!

Ecrire la configuration électronique d'un atome

Pour rappel, l'état d'un atome est définit par 4 nombres quantiques : n le nombre quantique principal, l le nombre quantique secondaire, m le nombre quantique magnétique et s le nombre quantique de spin. Les **cases quantiques** (représentées par des carrés) schématisent les orbitales contenant les électrons représentés par des flèches.

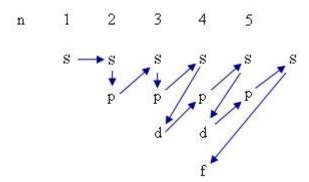
Des règles permettent de remplir ces cases quantiques et donc de définir la configuration électronique de l'atome :

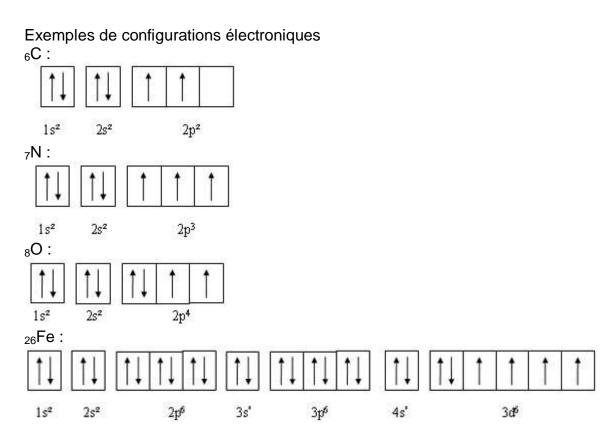
- *Principe d'exclusion de Pauli* (1923) : dans un atome, 2 électrons ne peuvent pas voir les 4 nombres quantiques identiques.
- Règle de *Hund* : pour une valeur déterminée du nombre quantique secondaire I, les électrons occupent le nombre maximum de valeur de m, c'est-à-dire le maximum de cases quantiques.
- Le remplissage des orbitales s'effectue selon les valeurs de n + l croissant. Si 2 valeurs de n+l sonts égales, le remplissage de la case ayant la valeur de n la plus faible est prioritaire. C'est la règle de Klechkowski.

n	I	n + l	case quantique
1	0	1	1s

2	0	2	2s	
	1	3	2p	
3	0	3	3s	
	1	4	3p	
	2	5	3d	
4	0	4	4s	
	1	5	4p	

Un diagramme permet de retrouver facilement l'ordre de remplissage :





Les nombres quantiques

La configuration électronique des atomes est définie par 4 nombres quantiques.

Les 4 nombres quantiques de la configuration électronique

n : nombre quantique principal. Il définit la couche.

n = 1 à couche K

n = 2 à couche L

n = 3 à couche M

et ainsi de suite...

L'énergie de l'électron est fonction de n.

I : nombre quantique secondaire ou azimutal

c'est un entier qui varie de 0 à n-1. Il définit les sous-couches s, p, d, f

I = 0 à sous couche s

I = 1 à sous couche p

I = 2 à sous couche d

I = 3 à sous couche f

Il définit la forme et la symétrie des orbitales (orbitales s, p, d etc...)

Exemple n=2 à l=0 ou l=1 d'où 2 sous-couches 1s et 2p

m : nombre quantique magnétique

Il prend des valeurs comprises entre –l et l (y compris les valeurs de –l et l). A une valeur de m, correspondent 2l+1 valeur de m. Il détermine l'orientation des orbitales dans l'espace.(voir la forme des orbitales.

s : nombre quantique de spin

Le nombre quantique de spin se définit comme le moment cinétique (ou moment angulaire) de l'électron. s=-1/2 ou ½ (2 sens de rotation de l'électron sur lui-même)

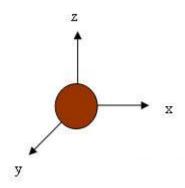
Forme des orbitales atomiques

Les **orbitales atomiques** décrivent l'espace où l'électron a une forte probabilité de se situer.

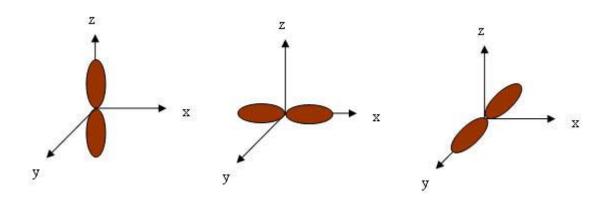
Les différentes formes spatiales des orbitales atomiques

Elle est définie à partir du nombre quantique secondaire I.

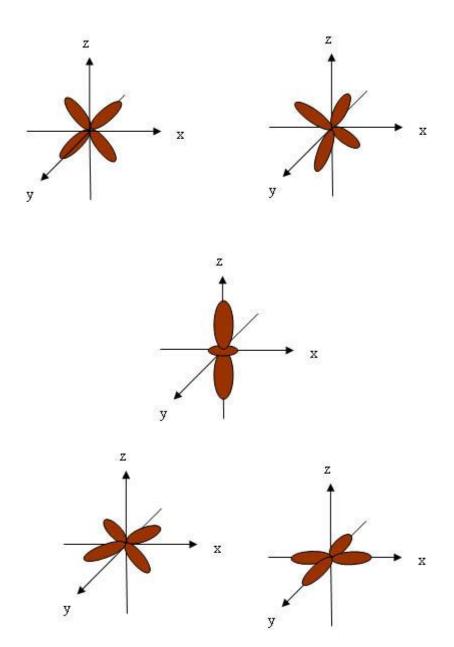
Pour I = 0, m = 0, 1 orbitale atomique s, forme sphérique



Pour I = 1, m = -1,0,+1, 3 orbitales atomique p : p_x , p_y , p_z



Pour I = 2, m = -2, -1, 0, 1, 2 orbitales d



La forme des orbitales atomiques est le résultat mathématique de l'équation de Schrödinger

Ne pas confondre avec les orbitales moléculaires qui sont des combinaisons d'orbitales atomiques déterminées par la méthode CLAO (combinaison linéaire d'orbitales atomiques)