

1- Introduction

Dans ce chapitre explicatif, nous allons apprendre à utiliser les nombres quantiques pour décrire un électron au sein d'un atome.

Un électron au sein d'un atome peut être complètement décrit avec des valeurs appelées nombres quantiques. Il y a quatre nombres quantiques (n, l, m_s), qui déterminent comment les électrons remplissent successivement les orbitales atomiques. Les quatre nombres quantiques expliquent également pourquoi les éléments doivent être groupés dans des blocs du tableau périodique et pourquoi tant d'éléments ont des propriétés chimiques similaires.

2- Les nombres quantiques

- a- **Le nombre quantique principal (n)** détermine la taille d'une orbitale atomique. Le nombre quantique principal est toujours un entier positif, et on peut affirmer que $n = 1, 2, 3 ; 4, 5, \dots, \infty$

Le nombre quantique principal est basé sur le modèle atomique de Bohr, et il détermine sur quel niveau ou quelle couche d'énergie se placera l'électron. Le nombre quantique principal peut être mis au carré (n^2) pour déterminer le **nombre d'orbitales** par niveau d'énergie. Il peut également être mis au carré et multiplié par deux ($2n^2$) pour déterminer **combien d'électrons il y a par couche** électronique. Les chimistes utilisent parfois des majuscules pour décrire des couches électroniques telles que la couche électronique $n=1$ ou $n=2$. La lettre **K** est utilisée pour la couche électronique $n=1$ et la lettre **L** est utilisée pour la couche électronique $n=2$.

Ces informations sont résumées dans le tableau suivant.

nombre quantique principal	Notation de la couche électronique	nombre d'orbitales n^2	nombre d'électrons $2n^2$
1	K	1	2
2	L	4	8
3	M	9	18 au total
4	N	16 au total	32 au total

La formule $2n^2$ n'est généralement pas appliquée aux nombres quantiques principaux plus grands ou égaux à cinq ($n \geq 5$) car la cinquième couche électronique et celles au-delà

contiennent des sous-couches qui ne sont pas occupées par des électrons, dans aucun élément chimique connu. Dans aucun élément chimique connu, la sous-couche 5f de la cinquième couche électronique et les sous-couches 6f et 6g de la sixième sous-couche électronique ne sont occupées par des électrons.

b- **Le nombre quantique secondaire :** ou nombre quantique azimutal et correspond au moment angulaire orbital de l'électron. Le nombre quantique secondaire (l) détermine la forme d'une orbitale atomique. Les sous-couches avec un nombre quantique secondaire égal à 0 ont une forme sphérique et sont appelées sous-couches de type s. Les orbitales **1s** et **2s** ont toutes les deux un nombre quantique secondaire égal à zéro.

Le nombre quantique secondaire peut prendre toute valeur entière allant de **0** à **$n-1$** . Cette affirmation pourrait également être reformulée pour indiquer que $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots, n-1$. où n est le nombre quantique principal.

Cela signifie que la première couche électronique ($n=1$) ne peut avoir que des sous-couches avec un nombre quantique secondaire égal à zéro, car $n-1=0$ quand $n=1$, et par conséquent l ne peut être égal qu'à 0. La deuxième couche électronique ($n=2$) peut avoir des nombres quantiques secondaires qui valent zéro et un, car $n-1=1$ quand $n=2$ et ainsi $l=0; 1$. La troisième couche électronique ($n=3$) peut avoir des sous-couches avec des nombres quantiques secondaires de zéro, un et deux, car $n-1=2$ quand $n=3$ et ainsi $l=0; 1; 2$. Les physico-chimistes classent les premières sous-couches comme il suit : zéro (**s**), un (**p**), deux (**d**) et trois (**f**). La relation entre les valeurs de l et les différents types de sous-couches est indiquée dans le tableau ci-dessous.

Valeur l	Sous-couche
0	s
1	p
2	d
3	f

La sous-couche 1s a un nombre quantique principal égal à un ($n=1$) et un nombre quantique secondaire égal à zéro ($l=0$). Les électrons remplissent toujours la sous-couche 1s en premier,

et ensuite ils remplissent les sous-couches 2s et 2p. Les électrons ont tendance à remplir d'abord les sous-couches de plus faible énergie, puis à remplir les sous-couches d'énergie plus élevée. L'ordre des énergies des sous-couches dans une couche électronique peut être décrit par l'expression s < p < d < f . La sous-couche s a toujours l'énergie la plus basse dans une couche électronique et la sous-couche p a la valeur suivante d'énergie la plus basse.

Les sous-couches **s** sont **sphériques** et les sous-couches **p** ont la forme **d'un haltère**. Les orbitales **d** et **f** ont des géométries beaucoup plus complexes et elles ne sont pas faciles à dessiner ou à décrire en une seule phrase. L'image suivante montre d'abord les formes relativement simples des orbitales s et p et ensuite les formes beaucoup plus complexes des orbitales d et f.

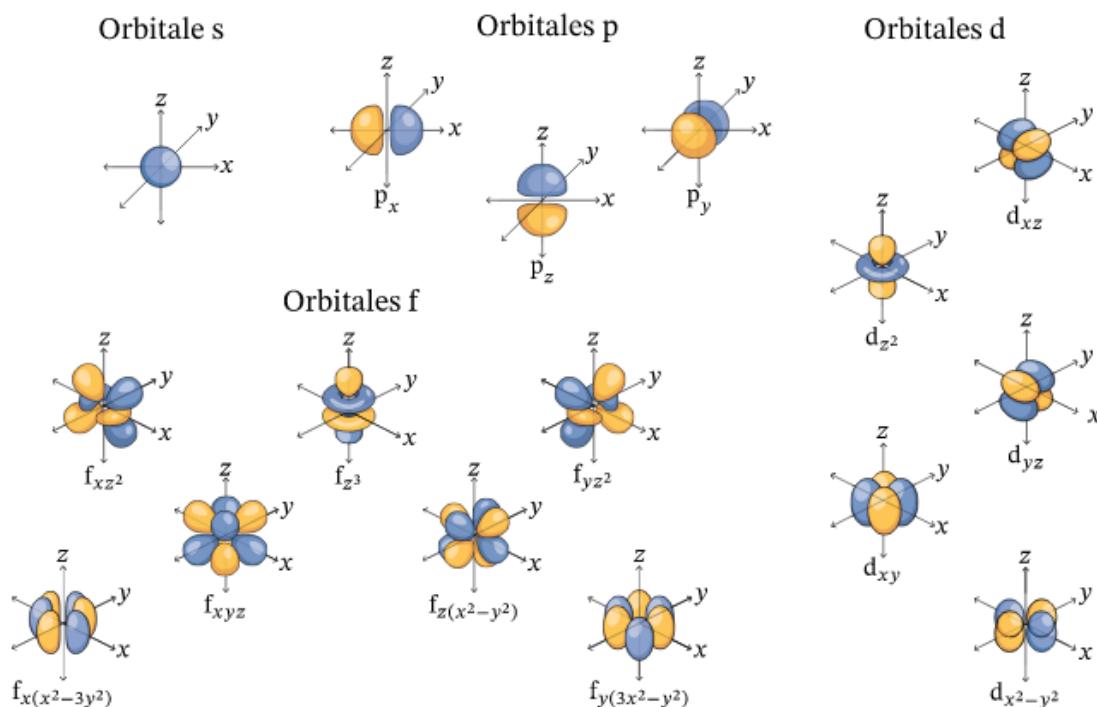


Figure 1 : orbitales atomiques s, p, d et f

c- **Le nombre quantique magnétique m ou (m_l) :** détermine le nombre d'orbitales par sous-couche, car m peut avoir une valeur qui va de $-l$ à $+l$. Cette affirmation pourrait également être reformulée pour indiquer que $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$, où l est un nombre quantique secondaire.

Cela signifie que les sous-couches s ($l=0$) ne peuvent avoir qu'une seule orbitale, alors que les sous-couches p ($l=1$) peuvent avoir trois orbitales. Les sous-couches d peuvent avoir cinq

orbitales, car m peut prendre n'importe quelle valeur entre -2 et $+2$. Le nombre total d'orbitales par couche peut toujours être déterminé par la formule $2l+1$.

Le nombre quantique magnétique m est d'habitude associé à l'orientation dans l'espace de chaque orbitale d'une sous-couche.

Le nombre quantique magnétique m est d'habitude lié à l'orientation spatiale de chaque orbitale à l'intérieur d'une sous-couche et il est décrit par l'expression $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$, où l est un nombre quantique secondaire.

L'orbitale $2p$ peut être utilisée comme exemple représentatif pour mieux comprendre le nombre quantique magnétique. L'orbitale $2p$ a un nombre quantique principal égal à deux ($n=2$) et un nombre quantique secondaire égal à un ($l=1$). L'orbitale $2p$ a trois orbitales atomiques différentes qui ont les nombres quantiques magnétiques $-1, 0$ et $+1$. Les orbitales correspondent aux trois orbitales distinctes p_x, p_y , et p_z . Le tableau suivant indique les différents nombres quantiques et orbitales magnétiques possibles pour les quatre premiers nombres quantiques. Il est important de souligner ici que le tableau est rempli par soucis d'être complet et pour aider les étudiants à comprendre comment les valeurs des nombres quantiques secondaires et magnétiques déterminent le nombre d'orbitales dans une sous-couche électronique. Notre contenu évaluera uniquement la connaissance des orbitales qui composent les sous-couches s ou p et non pas les orbitales qui forment les sous-couches de type d ou f .

Valeur de l	Sous-couche	Valeur de m	Orbitales possibles
0	s	0	s
1	p	-1, 0, 1	P_x, P_y, P_z
2	d	-2 ; -1, 0, 1, 2	$d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{(x-y)^2}, d_{(z)^2}$
3	f	-3; -2; -1 ; 0; 1 ; 2 ; 3	$f_z^3, f_{xz}^2, f_{yz}^2, f_{x(x-3y)^2}, f_{y(y-3x)^2}, f_{xyz}, f_{z(x-3y)^2}$

d- Le nombre quantique de spin s ou m_s : Le dernier nombre quantique a été appelé nombre quantique de spin s ou (m_s) et il détermine l'état de spin d'un électron. Il est important de souligner ici que le spin est considéré comme une propriété intrinsèque et que les électrons ne doivent pas être considérés comme des sphères

discrètes qui tournent autour d'un axe principal comme la Terre. Les électrons peuvent avoir des nombres quantiques de spin qui valent soit $s = +\frac{1}{2}$ soit $s = -\frac{1}{2}$

Chaque orbitale atomique peut contenir un électron à l'état de spin ($s = +\frac{1}{2}$) et un électron à l'état de spin ($s = -\frac{1}{2}$). Ceci explique pourquoi chaque sous-couche de type s peut contenir deux électrons et pourquoi chacune des trois orbitales de type p de toute couche électronique peut contenir deux électrons.

3- principes de configuration électronique

3.1-Principe d'exclusion de Pauli :

Le principe d'exclusion de Pauli affirme que deux électrons d'un même atome ne peuvent pas avoir le même ensemble de quatre nombres quantiques. L'électron de plus haute énergie dans un atome de potassium a un ensemble de quatre nombres quantiques, et l'électron de plus haute énergie dans un atome de césium a un ensemble différent de quatre nombres quantiques.

3.2- Couches, sous-couches et orbitales :

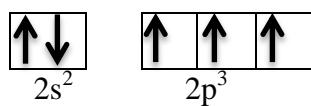
Les termes couche, sous-couche et orbitale sont hérités du modèle de Bohr, qui faisait orbiter les électrons sur des trajectoires circulaires de rayon croissant en formant des couches successives autour du noyau atomique. Ils sont encore très largement employés bien que la réalité physique qu'ils décrivent relève de la mécanique quantique.

- Le nombre quantique **principal n** seul identifie **une couche** électronique. Les différentes couches sont aussi désignées par une lettre majuscule : **K** ($n = 1$), **L** ($n = 2$), **M** ($n = 3$), **N** ($n = 4$), **O** ($n = 5$), **P** ($n = 6$) et **Q** ($n = 7$).
- Le couple de nombres quantiques (n, ℓ) identifie **une sous-couche** électronique.
- Le triplet (n, ℓ, m) identifie **une orbitale atomique**, ou **case quantique**.

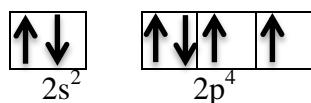
3.3- Règle de hund :

Dans la même sous-couche, les électrons occupent le maximum d'orbitales (cases quantiques) avec des spins de même sens.

Exemple : ${}_7\text{N}$: $1s^2, 2s^2 2p^3$: les cases quantiques :



${}_{\text{8}}\text{O} : 1\text{s}^2, 2\text{s}^2 2\text{p}^4$: les cases quantiques :



3.4- Le principe d'Aufbau

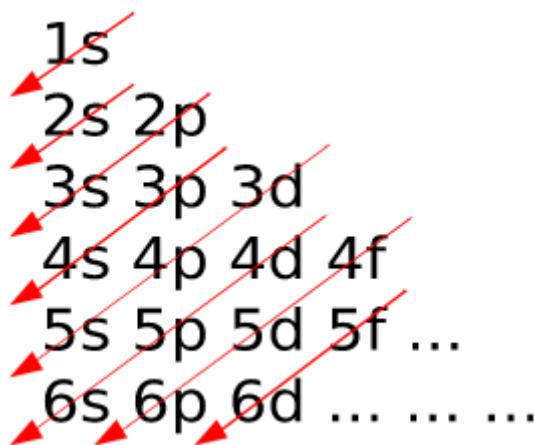
Le principe d'Aufbau stipule que dans tout atome, les électrons doivent remplir les orbitales atomiques de plus faible énergie avant de pouvoir remplir les orbitales atomiques de plus haute énergie.

Exceptions à la règle d'Aufbau

Le sous-niveau d, qui est plein (c'est-à-dire comportant 5 ou dix 10), est plus stable que le sous-niveau S situé à côté. Par exemple, le cuivre (numéro atomique 29) a la configuration électronique $1\text{s}^2 2\text{s}^2 2\text{p}^6 3\text{s}^2 3\text{p}^6 4\text{s}^1 3\text{d}^{10}$ et n'a pas $1\text{s}^2 2\text{s}^2 2\text{p}^6 3\text{s}^2 3\text{p}^6 4\text{s}^2 3\text{d}^9$

3.5- Règle de Klechkowski

Le diagramme de Klechkowski est un moyen mnémotechnique, servant à retrouver cette règle. On accède ainsi à l'ordre de remplissage des couches électroniques d'un élément chimique.



Sa construction est assez simple :

- Toutes les couches s sont mises en diagonale ;
- Puis on rajoute les couches suivantes (p, d, f, etc.) sur la ligne.

La lecture se fait ensuite le long des colonnes. On trouve par conséquent l'ordre de remplissage suivant : $1s^2$, $2s^2$, $2p^6$, $3s^2$, $3p^6$, $4s^2$, $3d^{10}$, $4p^6$, $5s^2$, $4d^{10}$, $5p^6$, $6s^2$, $4f^{14}$, $5d^{10}$, $6p^6$, $7s^2$...

Quelques exemples :

Pour l'atome d'oxygène ($Z = 8$, soit 8 électrons à placer) : $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$;

Pour l'atome de cobalt ($Z = 27$, soit 27 électrons à placer) : $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^7$.

Pour certains atomes, on préfère réarranger l'ordre des orbitales de sorte à ce qu'elles correspondent aux niveaux d'énergie croissant. Ainsi, la configuration du cobalt pourra aussi être décrite sous la forme : $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^7\ 4s^2$