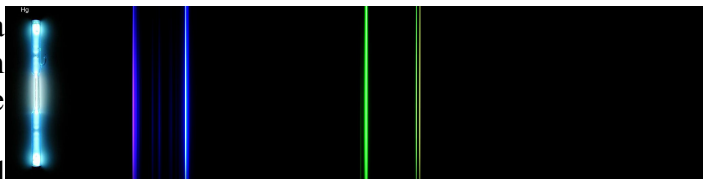


# Nombres quantiques et orbitales

En observant les spectres de raies (ici une lampe à vapeur de mercure et le spectre de sa lumière visible), on constate que l'énergie prise par les électrons n'a que certaines valeurs bien définies (quanta).



Lorsqu'un électron saute d'une couche à une autre, il absorbe ou émet un photon d'énergie  $E = h \times \nu$

$h$  est la constante de Planck  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s et  $\nu$  est la fréquence de la lumière émise en Hz ( $s^{-1}$ ).

Les physiciens du début du XX<sup>ème</sup> siècle comme Max Planck ont donc proposé que les électrons occupent des espaces bien définis. La fonction d'onde  $\Psi$  représente l'état quantique de l'électron et son carré  $\Psi^2$  représente la probabilité de trouver un électron et permet de déterminer la forme des orbitales (voir plus bas).

La physique quantique décrit l'univers à l'échelle des particules et il est difficile de trouver des images de la vie courante pour expliquer les résultats obtenus comme le chat de Schrödinger vivant et mort à la fois pour exprimer la superposition de deux états quantiques.

## 1) les nombres quantiques

a)  $n$ : Le nombre quantique principal détermine la couche électronique.

n	1	2	3	4	5	6	7
couche	K	L	M	N	O	P	Q

L'énergie de liaison d'un électron est d'autant plus grande que l'électron est proche du noyau ( $n$  petit). Pour un atome d'hydrogène, elle est donnée par la relation  $E = \frac{-13,6}{n^2}$  en électron-volt eV.

b)  $0 \leq l \leq n-1$  Le nombre quantique secondaire ou azimutal  $l$  détermine la sous-couche, c'est-à-dire la forme de l'orbitale. Les énergies mises en jeu lors de saut d'une sous-couche à une autre donnent des raies très proches dans les spectres lumineux.

n	1 couche K	2 couche L	3 couche M	4 couche N
$l$	0	0, 1	0, 1, 2	0, 1, 2, 3
sous-couche	s	s p	s p d	s p d f

c)  $-l \leq m \leq +l$  Le nombre quantique magnétique  $m$  détermine l'orientation spatiale de l'orbitale. Il est responsable de la structure hyperfine des spectres lumineux.

Couche	Sous-couche			Cases quantiques (voir d)
n	$l$	m	nombre max d'e <sup>-</sup>	$m_s$
1	0	1s	0	$2 = 2 \times 1^2$
2	0	2s	0	$2 + 6 = 8 = 2 \times 2^2$
	1	2p	-1 ; 0 ; +1	
3	0	3s	0	$2 + 6 + 10 = 18 = 2 \times 3^2$
	1	3p	-1 ; 0 ; +1	
	2	3d	-2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2	

d)  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  est le nombre quantique de spin qui indique si l'électron tourne dans un sens ou dans un autre. On

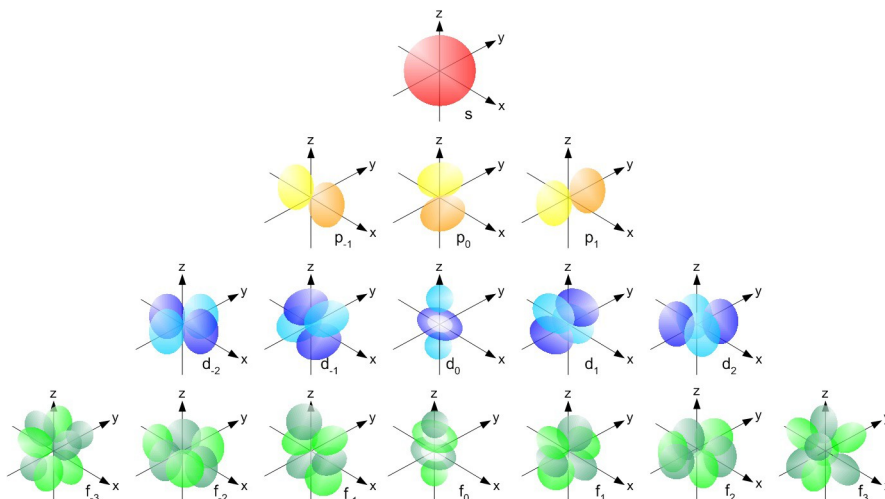
commence par remplir, dans les couches les plus proches du noyau, les orbitales avec des électrons de spin  $+\frac{1}{2}$  représentés  $\uparrow$  puis on complète les doublets avec des électrons de spin antiparallèle  $\downarrow$ . Les électrons restants sont dits célibataires et peuvent former des liaisons chimiques.

## 2) Règles de remplissage des couches : configuration électronique.

Les électrons des atomes dans leur état fondamental (non excités) sont le plus liés donc le plus près du noyau. Les règles ci-dessous sont mnémotechniques et fonctionnent pour la plupart des atomes (80 % des 103 éléments). La règle qui est toujours vraie est celle du remplissage commençant par les niveaux d'énergies les plus faibles.

- La première règle (principe d'exclusion de Pauli) indique que deux électrons ne peuvent avoir les quatre nombres quantiques identiques : chacun sa place !
- La seconde règle (de Klechkowski) donne l'ordre croissant des niveaux d'énergie des orbitales : le remplissage se fait selon les valeurs croissantes de  $(n+l)$ . Cela donne le tableau ci-dessous.
- La troisième règle (de Hund) précise que la configuration la plus stable (de plus basse énergie) est obtenue pour la somme des spins la plus grande : on commence donc par remplir toutes les cases quantiques par des électrons de spin  $+\frac{1}{2}$  puis on complète les doublets.

La dernière couche étant la couche de valence, un atome pourra faire autant de liaisons chimiques qu'il y a d'électrons célibataires.



En conséquence, les structures électroniques des atomes de la classification périodique des éléments peuvent être regroupées en bloc s, p, d et f.

Classification périodique 100% quantique avec orbitales																					
l	Bloc s		Bloc f			Bloc d					Bloc p										
	0	3	Nombre d'électrons dans la sous-couche en remplissage																		
	1	2	1...14	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5	6		
n	noeuds sphériques : 2 éléments		3 noeuds : 14 éléments	Deux noeuds de vibration parallèles ou méridiens : 10 éléments par ligne										Un noeud de vibration parallèle ou méridien : 6 éléments par ligne							
n	m = 0		m = 0			m = ± 1			m = ± 2		m = 0		m = ± 1								
K 1	H	He											He								
L 2	Li	Be											B	C	N	O	F		Ne		
M 3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar		
N 4	K	Ca				Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
O 5	Rb	Sr				Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
P 6	Cs	Ba	57 à 70			Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Q 7	Fr	Ra	89 à 102			Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	113 Uuq	115 Uuh	117 Uuo			
Détail des lanthanides et actinides (Bloc f : l = 3)																					
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14							
n	m = 0		m = ± 1			m = ± 2			m = ± 3												
P 6	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb							
Q 7	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No							