

# Structure de la matière

## II- L'organisation des électrons dans l'atome

notions abordées :

- Les systèmes hydrogénoïdes
- Les atomes polyélectroniques

### 1) Les systèmes hydrogénoïdes

#### • Fonction d'onde, probabilité de présence

- Modèle actuel de la méca quantique :
  - Dualité onde/ corpuscule (De broglie) :  $\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{p}$
  - Principe d'indétermination (Heisenberg) :  $\Delta x \cdot \Delta p > \frac{h}{2\pi}$
  - Le concept de trajectoire n'existe pas en méca quantique
- Le comportement ondulatoire est décrit par une fonction d'onde (équation de schrödinger) :
  - pour un système hydrogénoïdes :  $\Psi^2 = \frac{dP}{dV}$  (dP = proba de trouver la particule dans un volume élémentaire dV)
  - $P = \int_{v_0} \Psi^2 \cdot dV = 1$  la fonction d'onde est normalisé (voir exemple)
  - Le carré de la fonction d'onde représente la densité de probabilité de présence simultanée des électrons dans l'espace. (voir équation de Schrödinger)

#### • Nombres quantiques

- Les orbitales atomiques (OA) définissent des volume dans lequel un électron a une probabilité de se trouver dépendent de 3 nombres :
  - n : quantique **principale** (n>0)
  - l : quantique **azimutal** ( 0 ≤ l < n )
  - m : quantique **magnétique** ( -l ≤ m ≤ +l )

#### • Nomenclature des orbitales

- Chaque valeur de n définit une couche électronique

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

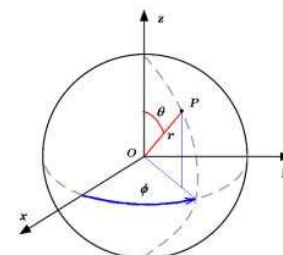
- Chaque valeur de l définit une sous couche électronique

l	0	1	2	3	4
Sous couche	s	p	d	f	g

- Voir tableau de nomenclature

#### • Expression des orbitales

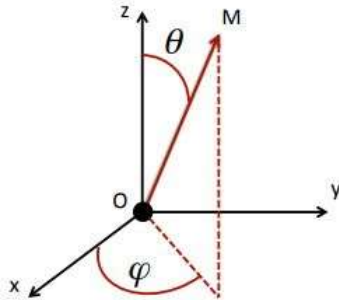
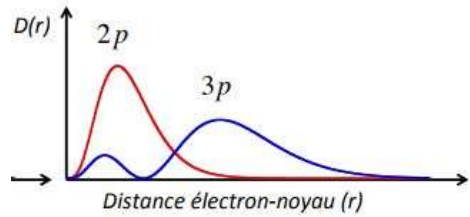
- Les orbitales atomiques dépendent de 3 coordonnées sphériques (r, θ, φ)
- On a donc :  $x = r \sin \theta \cos \phi$ ;  $y = r \sin \theta \sin \phi$ ;  $z = r \cos \theta$
- Ainsi les fonctions d'ondes peuvent s'écrire selon le produit de 3 fonctions :  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)$



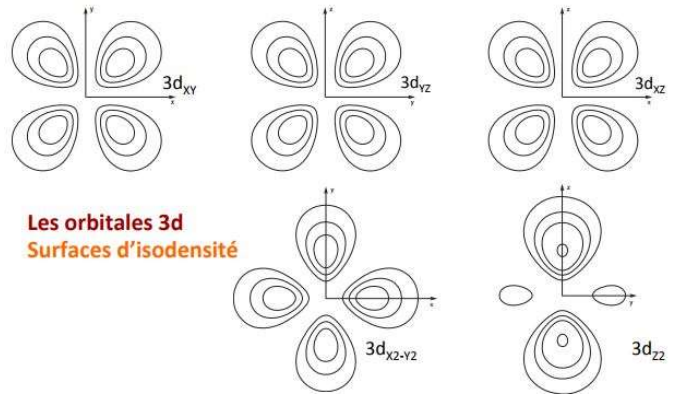
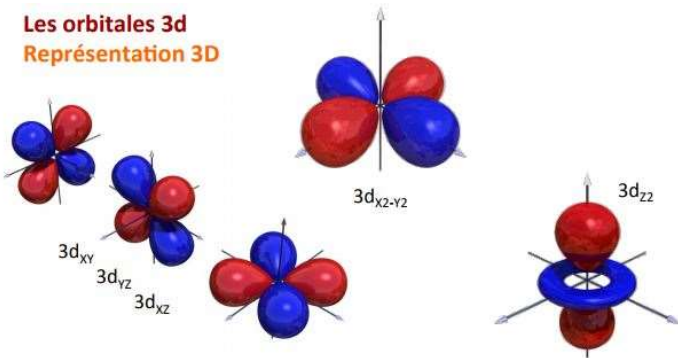
# Structure de la matière

- Représentation des orbitales**

- Partie radiale :  $D(r) = r^2 |R_{nl}(r)|^2$  Densité de probabilité de présence de l'électron à une distance  $r$  du noyau.
- Partie angulaire :  $\Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)$

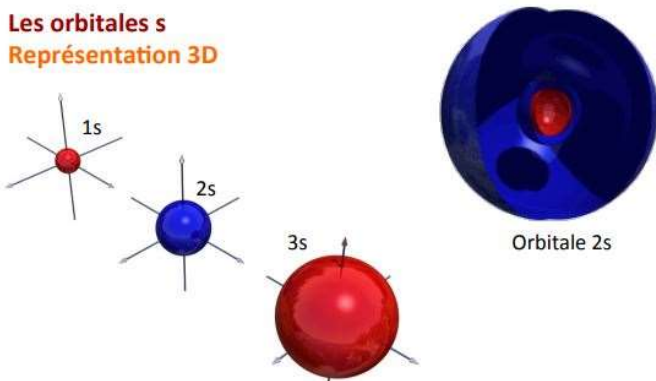


**Les orbitales 3d**  
Représentation 3D

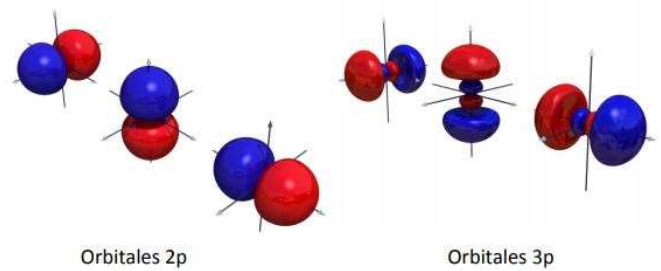


**Les orbitales 3d**  
Surfaces d'isodensité

**Les orbitales s**  
Représentation 3D



**Les orbitales p**  
Représentation 3D



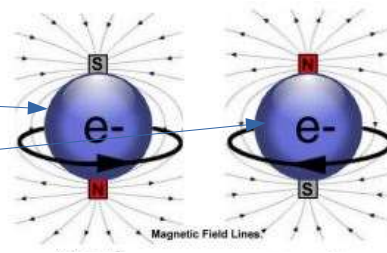
# Structure de la matière

## • Spin de l'électron

- 4<sup>ème</sup> nombre quantique : le nombre quantique **de spin**  $m_s$ , il est lié à la rotation de l'électron sur lui-même : il peut prendre 2 valeurs

$$\alpha = \frac{1}{2}$$

$$\beta = -\frac{1}{2}$$

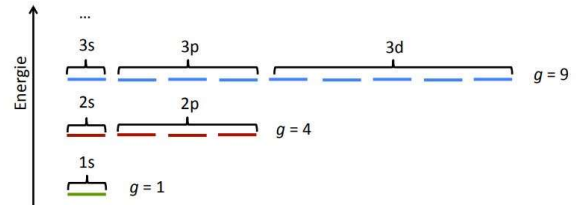


## • Énergie des OA :

- L'état d'un atome est défini par  $(n, l, m, m_s)$ , chaque état est associé à une énergie

$$E_n = \frac{-m_e e^4 Z^2}{8 \epsilon_0^2 h^2 n^2} = -13,6 \frac{Z^2}{n^2}$$

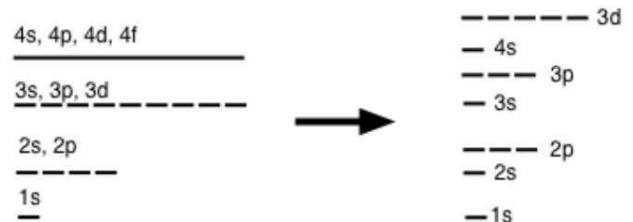
- Chaque OA sur la même couche (n) ont la même énergie, elles sont **dégénérées**. Ainsi le degrés de dégénérescence est :  $g = n^2$
- L'occupation de l'OA par un électron est schématisé par une flèche dépendant du spin.



## 2) Les atomes polyélectroniques :

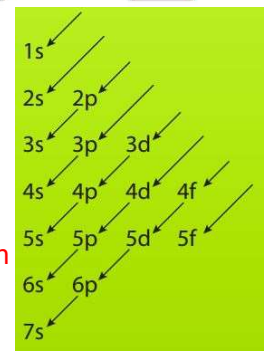
### • Énergies des OA :

- L'équation de Schrödinger est insoluble de manière exacte pour les atomes polyélectroniques
- L'énergie d'une OA dépend donc des nombres quantiques n et l



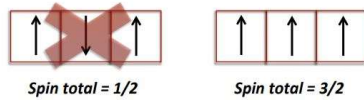
### • Configuration électronique des éléments

- Principe d'exclusion de Pauli
  - Dans un atome donné, deux électrons ne peuvent être caractérisés par 4 nombres quantiques identiques.
  - Une OA peut être occupé par au plus 2 électrons
  - 2 OA occupent un même OA (n, l, m identique) alors les spins sont différents.
- Règle de Klechkovski
  - Dans l'état fondamental, les électrons occupent les OA de plus basses énergies
  - Si  $n+l = n'+l'$  alors l'OA dont le nombre quantique n est inférieur a une énergie inférieure
- Règle de Hund
  - Dans une même sous couche les électrons occupent un maximum d'OA

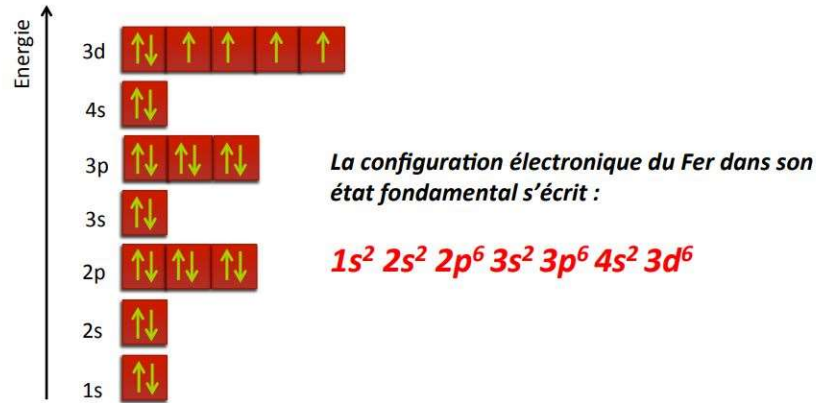


# Structure de la matière

- Le spin total doit être maximal



- Exemple l'atome de fer :



- Cœur et valence
    - électrons de cœur : électrons de couches internes, ils ne participent pas à la réactivité chimique du noyau
    - électrons de valence : électrons de la couche du plus grand n + les éléments de la dernière sous-couche non pleine
- Exceptions aux règle de remplissage des OA**
  - Éléments  $ns^2(n-1)d^9$ 
    - $ns^1(n-1)d^{10}$
  - Éléments  $ns^2(n-1)d^4$ 
    - $ns^1(n-1)d^5$