

L'atome

1- Structure de l'atome

Un atome est la plus petite partie d'un corps simple conservant encore ses propriétés. Il est neutre. Il comprend un noyau et des électrons.

Le noyau, généralement assimilé à une sphère, est chargé positivement. Il contient des nucléons, constitués principalement de deux types de particules, les protons, chargés positivement et les neutrons, de charge électrique q , nulle.

Les électrons sont quant à eux chargés négativement. Ils gravitent autour du noyau sous forme d'un « nuage électronique ».

Tableau 1.1 : *Caractéristiques principales des constituants de l'atome*

Particule (symbole)	Charge	Masse
Electron (e-)	$-e = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$9,11 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$
Proton (p)	$+e = +1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	$1,67 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$
Neutron (n)	$q = 0$	$1,67 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$

Chaque atome est représenté par son symbole X et est défini selon deux paramètres nommés Z et A . Z ou **numéro atomique**, situé en bas à gauche du symbol, traduit le nombre de proton mais aussi le nombre d'électrons, lorsque l'élément étudié est neutre. A ou **nombre de masse**, localisé en haut à gauche du symbole, correspond à la somme du nombre de protons et de neutrons dont le noyau est constitué.

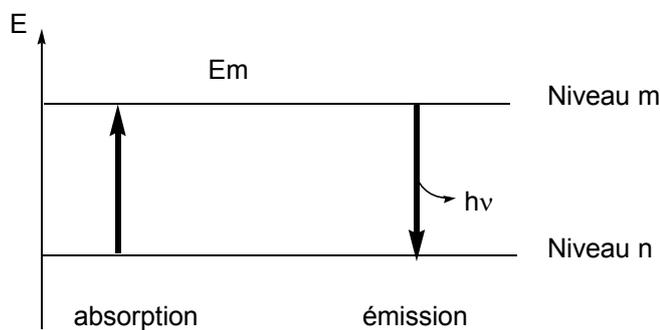
Chaque atome est alors décrit à l'aide du symbolisme : $\begin{matrix} A \\ Z \end{matrix} X$

2- Atome et énergie

2.1- Modèle de Bohr

A la suite du postulat de Planck (les systèmes émettent un rayonnement par saut d'énergie $E = h\nu$ où $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s est la constante de Planck et ν la fréquence du rayonnement), Bohr présente un modèle regroupant les principes suivants : (1) Chaque électron gravite autour du noyau en décrivant une orbite admise comme étant circulaire et centrée autour de ce dernier. Plusieurs orbites différentes existent dans un atome. Elles sont associées à des niveaux d'énergie différents. (2) Chaque atome ne peut admettre que certains états d'énergie quantifiés par un niveau d'énergie propre. (3) L'émission ou l'absorption d'une radiation n'est observée que lors du passage d'un niveau d'énergie à un autre.

Figure 1.1 : Absorption et émission



Ce modèle permet de donner comme valeur du moment angulaire μ de l'électron qui influe sur la direction du **nombre quantique magnétique m** (cf paragraphe 3.1 de ce chapitre) : $\mu = n h / 2\pi$ où n est le **nombre quantique principal** (cf paragraphe 3.1 de ce chapitre) et h , **la constante de Planck**. Il autorise une description correcte de l'atome d'hydrogène.

L'atome d'hydrogène peut absorber ou émettre des quantités d'énergie correspondant au passage d'un niveau d'énergie à un autre.

L'atome

Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène se compose dans le domaine du visible, de quatre raies, H_δ , H_γ , H_β et H_α pour lesquelles sont associées à chacune d'entre elles une longueur d'onde 410 (H_δ), 434,2 (H_γ), 486,1 (H_β) et 656,3 nm (H_α).

A cette série de raies est associée la relation suivante :

$$\frac{1}{\lambda} = \sigma = Rh \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right]$$

Avec Rh = constante de Rhydberg

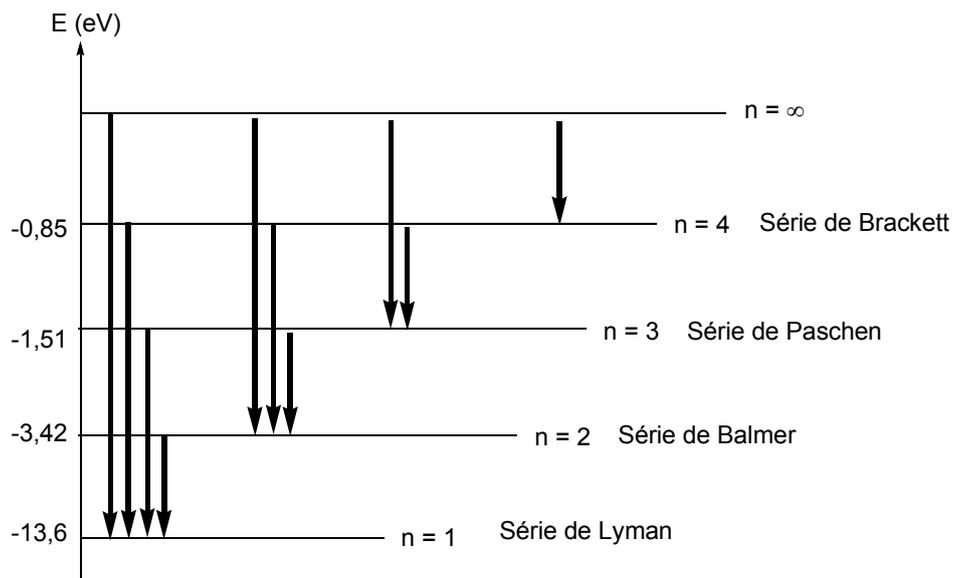
λ = longueur d'onde

σ = nombre d'onde

n et m entiers naturels avec $m \geq n + 1$

L'atome d'hydrogène dans son état fondamental, correspond au niveau de plus basse énergie E_1 pour lequel $n = 1$ et $E_1 = -13,6$ eV. Il présente un diagramme d'énergie et un spectre d'émission caractérisé par le passage d'un niveau énergétique E_n à un niveau inférieur avec une émission d'énergie.

Figure 1.2 : Diagramme énergétique et spectre d'émission de l'atome d'hydrogène



Chapitre 1

Les quatre premières séries de raies observées dans ce spectre d'émission correspondent à des transitions bien définies. Pour la transition $E_{\infty} \rightarrow 1$, il s'agit de la **série de Lyman**. La transition $E_{\infty} \rightarrow 2$ correspond à la **série de Balmer**. Les transitions $E_{\infty} \rightarrow 3$ et $E_{\infty} \rightarrow 4$ portent respectivement les noms de séries de **Paschen** et **Brackett**. E_{∞} correspond à un état libre de l'électron, ou encore à un état ionisé pour l'atome.

3- Modèle quantique de l'atome

Le modèle quantique de l'atome repose sur deux principes : le principe de l'onde associée et celui de l'incertitude d'Heisenberg. Le principe de l'onde associée est basé sur la dualité onde-corpuscule : à toute particule de masse m et de vitesse v en mouvement rapide, correspond une onde de longueur d'onde λ , et inversement à toute onde électromagnétique, est associée une particule. La relation caractéristique de ce principe est : $\lambda = h / mv$ (h constante de Planck). Le principe d'incertitude estime irréalizable la description exacte de la trajectoire d'une particule. La détermination simultanée de la position x et de la vitesse v n'est pas envisageable. Le produit des incertitudes est alors donnée par l'inégalité d'Heisenberg : $\Delta x \cdot \Delta v \geq h / 2\pi m$. La notion de **probabilité de présence** d'une particule remplace la position précise d'un élément en un point donné. Ce principe permet d'associer à chaque électron de l'atome une fonction d'onde nommée ψ obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger. Son carré, ψ^2 exprime la probabilité de présence de l'électron, à un moment donné, dans un certain volume de l'espace caractérisé par ses coordonnées x, y, z . Les régions de l'espace pour lesquelles la probabilité de trouver l'électron est maximale se nomment **orbitales atomiques**.

L'atome

3.1- Nombres quantiques et représentation graphique des orbitales atomiques.

La résolution de l'équation de Schrödinger afin de connaître les solutions ψ , a nécessité l'introduction de paramètres appelés **nombres quantiques**.

Le nombre **quantique principal n** est un entier naturel. Il définit la couche ou niveau énergétique. A une valeur de $n = 1$, correspond la couche K ; $n = 2$, la couche L ; $n = 3$, la couche M et $n = 4$, la couche N. On a nommé K, la couche plus proche du noyau puis viennent en s'éloignant au fur et à mesure du noyau, les couches L, M, N, La couche remplie la plus éloignée du noyau est appelée **couche externe** et les électrons de cette couche, **électrons périphériques**.

Le nombre maximal d'électrons contenus dans la couche K est 2. La couche L renferme au maximum 8, la couche M, 18 et la couche N, 32 électrons. Une couche possédant son nombre maximum d'électrons est dite **saturée**.

Tableau 1.2 : Exemples de correspondances entre valeurs de nombres quantiques et orbitales

n	l	m	s	orbitales
1	0	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	s
2	0	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	s
	1	-1, 0, +1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	p
3	0	0	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	s
	1	-1, 0, +1	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	p
	2	-2, -1, 0, +1, +2	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	d

Le **nombre quantique secondaire l** ou **nombre quantique azimutal**, traduit les sous-couches ou sous-niveaux énergétiques. Il prend des valeurs positives entières comprises entre 0 et $(n-1)$. Ce nombre permet de décrire la

Chapitre 1

région de l'espace où la probabilité de présence de l'électron est élevée appelée orbitale atomique. A la valeur de $l = 0$ est associée l'**orbitale** ou **sous-couche s**. Pour $l = 1$, l'orbitale est de type **p**. $l = 2$, correspond à une orbitale **d** et $l = 3$ à une orbitale **f**.

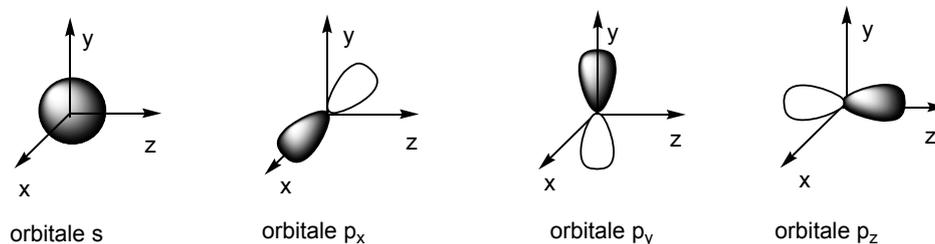
Le **nombre quantique magnétique m_l** , caractérise l'orientation des trajectoires de l'électron dans l'espace. Sa valeur est fonction de celle du nombre quantique secondaire l , $-l \leq m_l \leq +l$. $2l+1$ valeurs différentes sont alors susceptibles d'être attribuées à l .

Le **nombre quantique de spin** ou **s** rend compte de la rotation de l'électron sur son propre axe. Seules deux orientations sont possibles, $s = +\frac{1}{2}$ et $s = -\frac{1}{2}$.

3.2- Géométrie des orbitales

Une orbitale atomique définit une région de l'espace pour laquelle la probabilité de trouver l'électron est maximale. Elle peut être représentée en trois dimensions et sa forme dépend essentiellement de la valeur du nombre quantique secondaire l dont le rôle est de définir son type s , p ou d . L'orbitale atomique s est de symétrie sphérique et centrée sur le noyau. Les orbitales atomiques p sont constituées de deux lobes de signes opposés séparés par un nœud au niveau duquel, la probabilité de présence de l'électron est nulle. Pour $l = 1$ sont reliées trois valeurs pour m , -1 , 0 , $+1$ correspondant aux trois directions distinctes des trajectoires spatiales. Les axes des orbitales p (p_x , p_y , p_z) sont dirigés suivant ces trois orientations perpendiculaires deux à deux.

Figure 1.3 : Géométrie des orbitales atomiques



3.3- Règles de répartition des électrons d'un atome et configuration électronique.

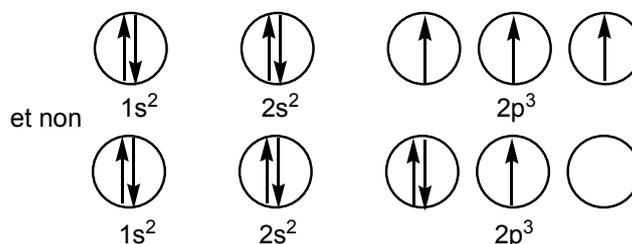
La répartition des électrons autour du noyau dans les orbitales, permet de définir la configuration électronique d'un atome. Elle obéit aux quatre règles ou principes définis ci-après.

Principe de stabilité : l'état fondamental d'un électron correspond à son état de stabilité énergétique c'est-à-dire de plus faible niveau d'énergie.

Principe d'exclusion de Pauli : deux électrons d'une même orbitale atomique ne peuvent posséder leur quatre nombres quantiques identiques. Les trois nombres n , l , m_l étant fixés pour une orbitale atomique donnée, les électrons diffèrent alors par leur nombre de spin s pour lequel seules deux valeurs peuvent être attribuées, $+\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$. De ce fait, une orbitale atomique renferme au maximum deux électrons de spins opposés ou **antiparallèles**. Ces électrons sont alors **appariés**.

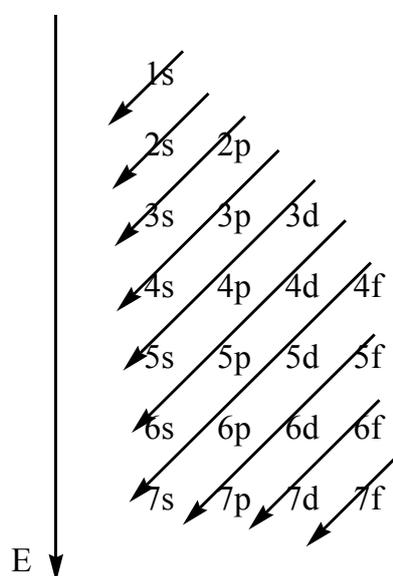
Règle de Hund : pour un même niveau énergétique, il faut atteindre le nombre maximal d'orbitales occupées avant d'apparier les électrons.

Figure 1.4 : Exemple de répartition des électrons pour n



Règle de Klechowski : Les orbitales atomiques sont remplies par ordre d'énergie croissante. Le remplissage s'effectue selon l'ordre croissant de la somme $n+l$, où n est le nombre quantique principal et l le nombre quantique secondaire. Il existe néanmoins des exceptions au niveau de l'ordre de remplissage. Il en résulte par exemple, une inversion de remplissage entre les orbitales $4s$ et $3d$. L'ordre de remplissage est alors déterminé à l'aide du tableau présenté ci-après.

Figure 1.5 : Ordre de remplissage des sous-couches



On peut alors écrire l'ordre de remplissage suivant : $1s$ $2s$ $2p$ $3s$ $3p$ **$4s$** **$3d$** $4p$ **$5s$** **$4d$** $5p$ $6s$ $4f$ $5d$ $6p$ $7s$ $5f$ $6d$ $7p$ $6f$ $7d$ $7f$.