

Chapitre 1 – Description de l'atome

I. Constitution de l'atome

1. Concept de l'atome

La chimie est une science qui étudie la matière et ses transformations. Les atomes y sont très importants. Toute matière est constituée d'atomes et d'ions dérivés d'atomes, ainsi la compréhension de la structure atomique est capitale pour expliquer la formation ou la rupture de liaisons chimiques.

La compréhension de la structure de l'atome a demandé plus de 2000 ans : de 450 avant JC avec Leucippe et Démocrite qui posèrent le concept d'atome (« Atomos » qui signifie indivisible) jusqu'au 20^{ème} siècle avec le début de la mécanique quantique (**figure 1**).

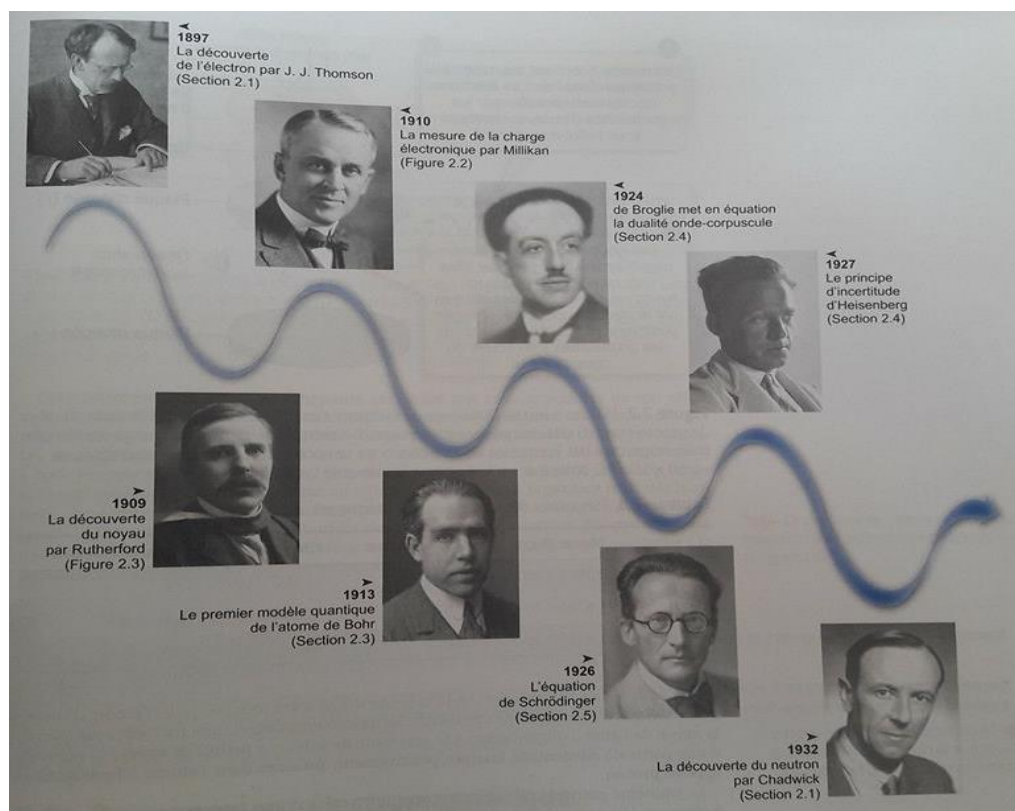


Figure 1 Chronologie illustrant les principales découvertes qui ont permis de comprendre la structure de l'atome

L'étude des atomes s'est faite, dans un premier temps, par l'observation des spectres d'émission et d'absorption des éléments (**figure 2**).

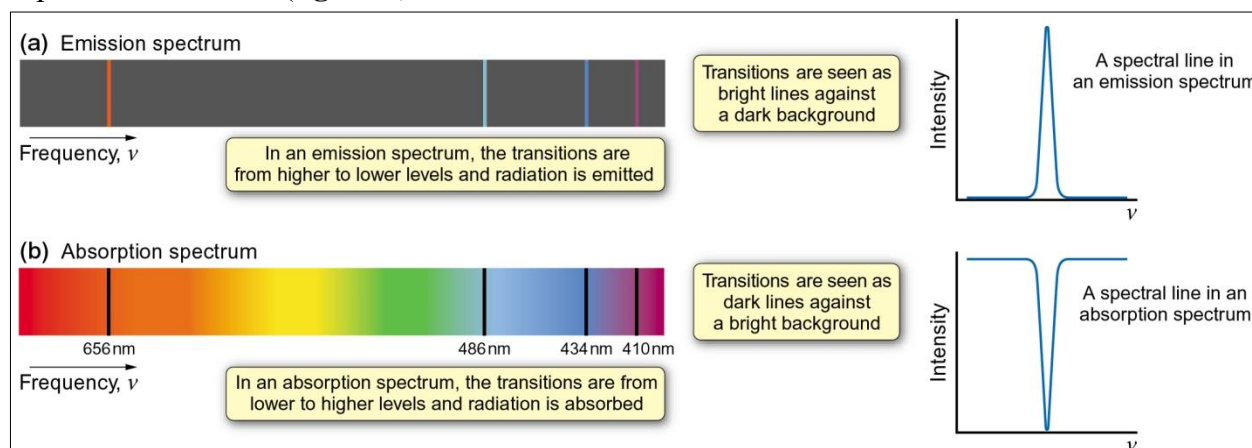


Figure 2(a) Spectre d'émission et (b) spectre d'absorption de l'atome d'hydrogène (le spectre d'absorption présenté correspond à un atome excité ($n=2$). Un atome d'hydrogène à l'état fondamental absorbe dans le domaine UV)

La longueur d'onde des transitions entre deux niveaux est donnée par la formule de Rydberg :

$$\nu = R_H \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

- n_1 et n_2 sont deux entiers naturels non nuls tels que $n_2 > n_1$. Les valeurs n_1 correspondent à des séries (**figure 3**), n_2 à des raies d'une série.
- R_H la constante de Rydberg qui vaut $3,29 \cdot 10^{15}$ Hz ou $11 \cdot 10^6$ m⁻¹

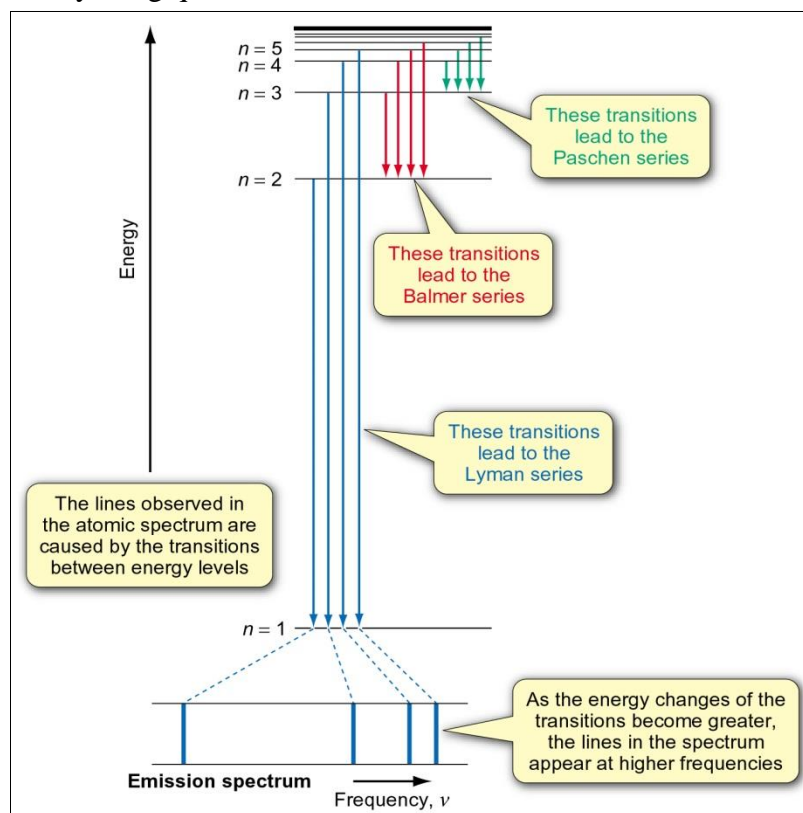


Figure 3 Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène et les transitions électroniques possibles. Chaque transition correspond à une raie du spectre d'émission de l'atome d'hydrogène. La différence d'énergie entre deux niveaux est égale à l'énergie de la raie spectrale résultant de la transition entre ces deux niveaux. Une partie du spectre d'émission correspond à la série de Lyman, dans le domaine ultraviolet ; les raies de la série de Lyman résultent de transitions électroniques vers le niveau fondamental $n=1$.

L'atome a eu plusieurs modèles au fil du temps (**figure 4**) :

- **1897** : Modèle de **Thomson** (ou plum pudding) : l'atome est composé d'électrons plongés dans une « soupe » de charge positive pour équilibrer la charge négative des électrons.
- **1911** : Le modèle de Thomson fut invalidé par l'expérience de la feuille d'or de 1909, qui fut interprétée par **Rutherford** en 1911. Rutherford imagina alors un atome constitué d'un noyau chargé positivement et contenant la majorité de la masse de l'atome, et séparé par du vide, des électrons tournant autour comme des planètes autour du Soleil. C'est **le modèle planétaire de l'atome**.

Cependant, ce modèle conduit à une énergie de l'atome qui devrait varier continûment, toutes les orbites donc toutes les énergies étant a priori possible. Cependant l'expérience ne le montre pas.

- **1913** : Bohr propose un modèle en complément de celui de Rutherford. Il met notamment en lien l'émission d'un photon à un changement d'orbite pour l'électron. L'énergie des niveaux est donnée par $E_n = -\frac{h \cdot c}{n^2} R_H = -\frac{13,6}{n^2}$ pour l'atome d'hydrogène.

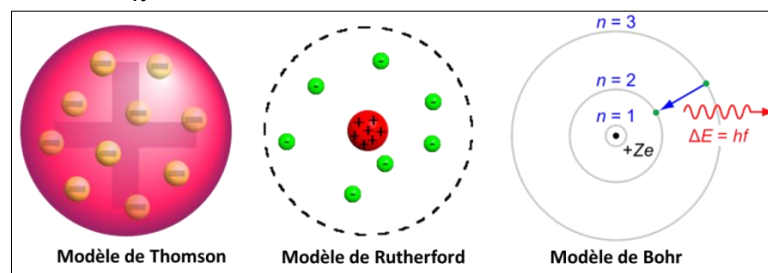


Figure 4 Représentation de différents modèles de l'atome

2. Un premier modèle de l'atome

On retient donc un premier modèle de l'atome : il peut être visualisé comme un noyau sphérique central, de diamètre de l'ordre de 10^{-14}m , chargé positivement, autour duquel gravite un cortège électronique, ce qui confère à l'ensemble un **diamètre de 10^{-10}m** (on retiendra 1\AA).

- Dans le cortège électronique :

Z électrons (Z est appelé nombre de charge ou **numéro atomique** de l'atome)

- Au sein du noyau

Z protons assurant l'électroneutralité, ainsi que N neutrons. Au total $A = N+Z$ nucléons ; A est appelé nombre de masse ou nucléons.

Représentation symbolique de l'atome : A_ZX

Le modèle de Bohr permet de déduire des énergies quantifiées entre transition, résultats encore justes de nos jours. Cependant l'hypothèse d'une trajectoire circulaire de l'électron autour du noyau est fausse, cette approche de mécanique classique ne convient pas, il faut une approche quantique.

II. Fonctions d'ondes et orbitales atomiques : cas de l'atome d'hydrogène

1. Equation de Shrödinger

Schrödinger a introduit la notion de fonction d'onde ψ , qui est une fonction dont la valeur varie avec la position. La fonction d'onde associée à un électron peut être calculée en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

où \hat{H} est l'opérateur hamiltonien, E l'énergie du système.

L'opérateur hamiltonien \hat{H} s'applique sur la fonction d'onde

Dans le cas de l'électron, on a l'équation aux dérivées partielles suivantes :

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi + E_p\psi = E\psi$$

E est l'énergie totale du système associée à la fonction d'onde ψ , m_e la masse de l'électron et E_p son énergie potentielle qui dépend de sa position. Le terme de gauche renvoie à une énergie cinétique, les dérivées montrent l'évolution de la fonction d'onde ψ en fonction de la distance de l'électron par rapport au noyau.

Nous n'aurons pas besoin de résoudre cette équation pour utiliser les résultats. Il n'est possible de résoudre exactement l'équation que pour des systèmes à deux corps, par exemple dans le cas d'un atome constitué d'un noyau et d'un électron unique.

De ce fait, le seul atome neutre pour lequel il est possible de résoudre l'équation est l'hydrogène. On peut également déterminer des solutions pour les ions n'ayant qu'un seul électron, par exemple He^+ , Li^{2+} .

L'électron est décrit dans l'atome d'hydrogène par son énergie E et sa probabilité de présence. Ces deux informations sont accessibles à partir de la fonction d'onde ψ . En effet, la probabilité dP de trouver l'électron dans le volume $d\tau$ est $dP = |\psi|^2 d\tau$.

La probabilité de trouver l'électron dans tout l'espace étant de 1, on a la condition de normalisation suivante :

$$\int_{r=0}^{r=+\infty} |\psi(r)|^2 d\mathbf{r} = 1$$

2. Les nombres quantiques n, l, m_l

Shrödinger a résolu l'équation qui porte son nom en 1927, et trouve pour l'atome d'hydrogène que seules certaines énergies peuvent être prises par son électron, dont les valeurs sont données par :

$$E_n = -\frac{hR}{n^2}$$

$$\text{où } R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \varepsilon_0} \text{ et } n = 1, 2, 3 \dots$$

Il se trouve que la valeur calculé pour R , $3,29.10^{15}$ Hz, correspond parfaitement à la constante de Rydberg, déterminée expérimentalement, renforçant ainsi la théorie de Shrödinger.

Comme dans le cas du modèle de Bohr, le nombre entier n est appelé nombre quantique. Etant donné que deux autres nombres quantiques découlent de la résolution de l'équation, **n est appelée nombre quantique principal.**

Ainsi, une combinaison de ces **trois nombres quantiques** caractérise **une orbitale atomique (O.A.)**, qui est une région de l'espace définie par une fonction d'onde.

Nombre quantique principal n : entier strictement positif décrivant la taille de l'orbital

Nombre quantique secondaire (ou azimutal) l : nombre entier positif caractéristique de la forme de l'orbital ; $0 \leq l \leq n-1$.

Nombre quantique magnétique m_l : renseigne sur l'orientation de l'orbitale dans l'espace. **m_l est tel que $-l \leq m_l \leq +l$.**

Les valeurs autorisées de l et m_l permettent de connaître le nombre et le type d'orbitales possibles pour chaque niveau énergétique.

A chaque valeur de l est attribuée une lettre

	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
Type d'orbitale	s	p	d	f

Exemples :

$n = 1$	$l = 0$	$m_l = 0$	Orbitale 1s
$n = 2$	$l = 0$	$m_l = 0$	Une orbitale 2s
	$l = 1$	$m_l = -1, 0, +1$	Trois orbitales 2p

3. Fonctions d'onde radiale et angulaire

Pour décrire la fonction d'onde, on se place en coordonnées sphériques (étant donné que l'atome décrit une sphère). On peut décrire ψ comme une fonction de r, θ et ϕ , mais on choisit de l'exprimer à partir de deux fonctions, l'une ne dépendant que de r , la partie radiale, et l'autre ne dépendant que de θ et ϕ , la partie angulaire :

$$\Psi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times Y(\theta, \phi)$$

$R(r)$ est la composante radiale, renseigne sur l'évolution de la fonction d'onde lorsque la distance électron-noyau varie. $Y(\theta, \phi)$ est appelée composante angulaire de la fonction d'onde et renseigne sur la forme de l'orbitale.

Pour l'orbitale 1s on a :

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times Y(\theta, \phi)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times Y(\theta, \phi) = \left(\frac{4}{a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \times \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

avec a_0 **le rayon de Bohr**, valant **53 pm**. Il représente la distance entre le noyau et l'électron de l'atome d'hydrogène dans le modèle de Bohr.

La **figure 5** représente les variations de la composante radiale de la fonction d'onde $R(r)$ en fonction de la distance par rapport au noyau.

Lorsque la fonction d'onde s'annule, on parle de **surface nodale**. Lorsque la composante radiale de la fonction d'onde s'annule, on parle de surface nodale radiale (voir II.4).

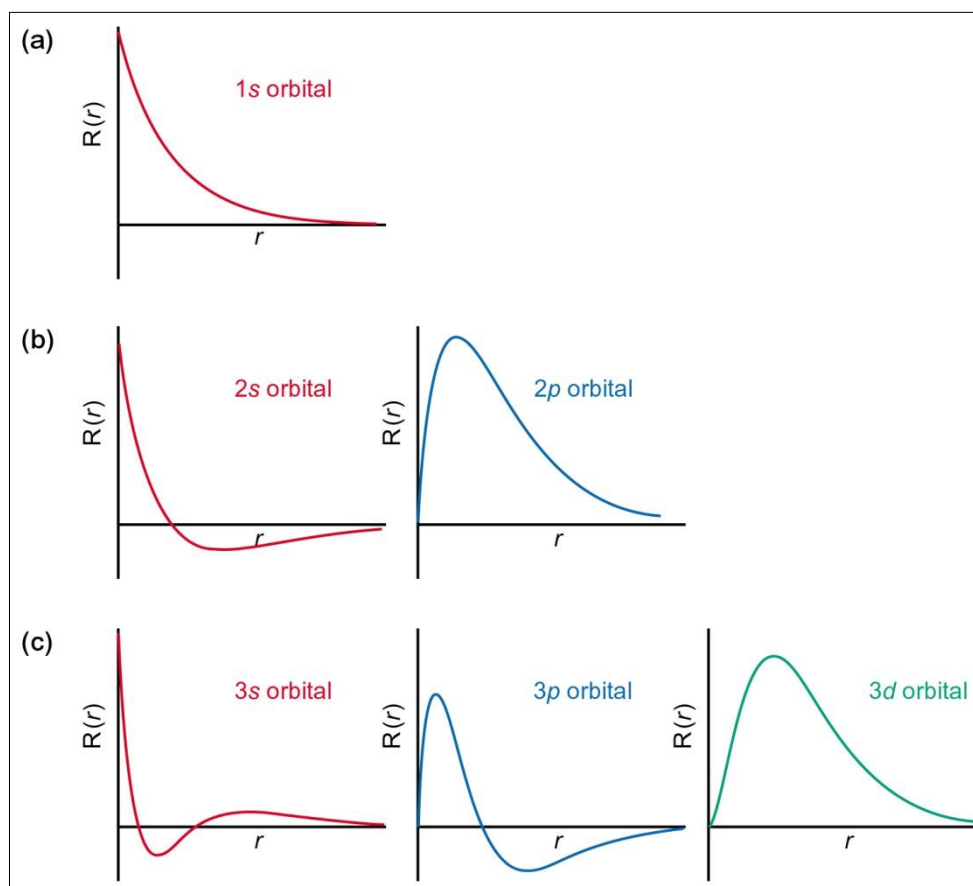


Figure 5 Variation de la composante radiale de la fonction d'onde $R(r)$ en fonction de r pour quelques orbitales de l'atome d'hydrogène (a) $n=1$, (b) $n=2$, et (c) $n=3$ (les graphes ne sont pas à la même échelle).

4. Représentation des orbitales atomiques

a. Orbitales s

La forme d'une orbitale atomique est reliée à la composante **angulaire** de la fonction d'onde $Y(\theta, \phi)$. Dans le cas de l'O.A. 1s de l'atome d'hydrogène, $\psi(r, \theta, \phi)$ ne dépend ni de θ ni de ϕ (cf équation précédente), ainsi $Y(\theta, \phi)$ est constante ; la fonction d'onde est donc **identique** dans toute direction de l'espace dont l'origine est le **noyau**. Par conséquent, l'orbital 1s est **sphérique** (**figure 6**). Le même raisonnement peut être appliqué aux autres orbitales s, qui ne diffèrent que par leur taille et le nombre de surfaces nodales.

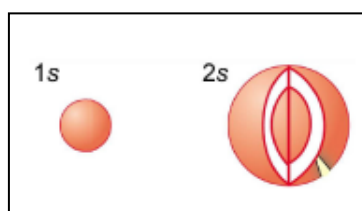


Figure 6 Surfaces frontières des orbitales 1s et 2s de l'atome d'hydrogène. L'observation d'une section de l'orbitale 2s permet de voir sa surface nodale.

Classiquement, on représente une O.A. par la surface dans laquelle on a ~ 95% de chance de trouver l'électron. En effet, sur la courbe $R(r)$, on peut voir que l'on atteint la valeur 0 que pour $r \rightarrow \infty$. Cela signifie qu'il n'est pas possible de définir une région qui contient la fonction d'onde entière.

Le pourcentage réel de densité électronique représenté par ces surfaces n'est pas important car il n'affecte pas la forme de l'orbitale mais seulement sa taille. Cela convient parfaitement pour les raisonnements que nous mènerons comme l'interprétation de réactions chimiques à l'aide des orbitales (par exemple pour les réactions de Diels-Alder que vous verrez en chimie organique plus tard avec Anne-Sophie).

b. Orbitales p

Les composantes angulaires dépendent de θ et/ou de ϕ . Par exemple, la composante angulaire de la fonction d'onde associée à l'orbitale $2p_z$ est proportionnelle à $\cos \theta$. La fonction d'onde dépend donc de la direction d'observation par rapport au noyau. Ainsi, $\cos \theta$ sera positif dans certaines directions, négatif dans d'autres (**figure 7**). Dans le cas de l'orbitale p_z , c'est dans la direction z que la fonction présente la plus grande valeur absolue.

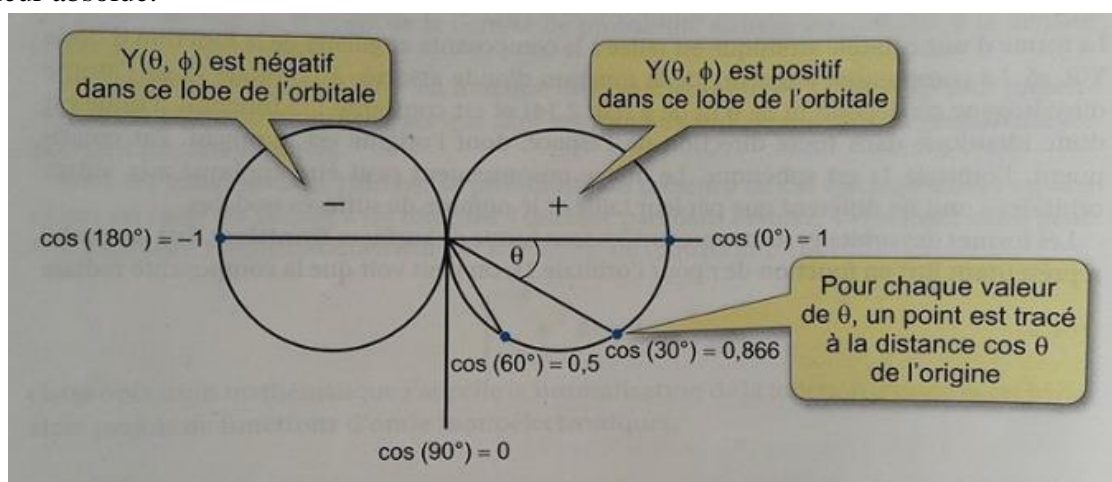


Figure 7 La composante angulaire $Y(\theta, \phi)$ de la fonction d'onde d'une orbitale p. Le schéma présente $\cos \theta$ en fonction de θ : pour chaque valeur d'angle θ , un point est défini et dessiné à la distance $\cos \theta$ de l'origine. La forme la plus familière des orbitales p est relative au tracé de la densité électronique, exprimée en fonction de $\cos^2 \theta$.

Il est nécessaire de représenter un repère pour distinguer les orbitales $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ (**figure 8.a**)

Pour le chimiste, c'est la taille et la forme du volume de localisation de l'électron qui sont essentiels. Ces derniers dépendent de $\psi^* \psi$ d'une part, et des signes relatifs ou relations de phase de la fonction ψ dans les diverses régions d'autre part. C'est pourquoi on représente ces fonctions par des dessins conventionnels regroupant ces informations (**figure 8.a**).

On représente alors un volume de localisation V comme étant limité par une surface d'isodensité électronique ($\psi^2 = \text{constante}$) et tel que la probabilité de présence P totale de l'électron dans V soit égale à une valeur proche de 1 (0,95 par exemple) :

$$P = \iiint_V \psi^* \psi dv$$

La représentation d'un tel volume fait intervenir $Y_{l,m}$, donnant une forme de lobes aux orbitales p (**figure 8**) plutôt qu'une forme de sphères (**figure 7**). Les orbitales s gardent une forme sphérique (indépendantes de $Y_{l,m}$).

Les orbitales p sont représentées par deux lobes dont l'un est grisé. Cette opposition blanc/grisé représente les rapports de phase, c'est-à-dire les signes relatifs de la partie angulaire dans la région correspondante. Ce n'est pas le signe de la fonction totale puisque la partie radiale peut changer de signe en fonction de la distance r au noyau. Ce n'est pas non plus un signe absolu : « grisé » ne signifie pas « positif », ni « blanc » ne signifie « négatif ». En effet, seul le carré du module $\psi^*\psi$ ayant une signification physique, la fonction d'onde n'est définie qu'à un facteur de phase $e^{i\alpha}$ près si la fonction est complexe, au signe près si la fonction est réelle. Cette convention signifie qu'en deux points symétriques par rapport au noyau, la fonction d'onde soit ne change pas de signe (comme dans une orbitale s), soit change de signe (orbitale p) : elle traduit visuellement les propriétés de symétrie de la fonction d'onde.

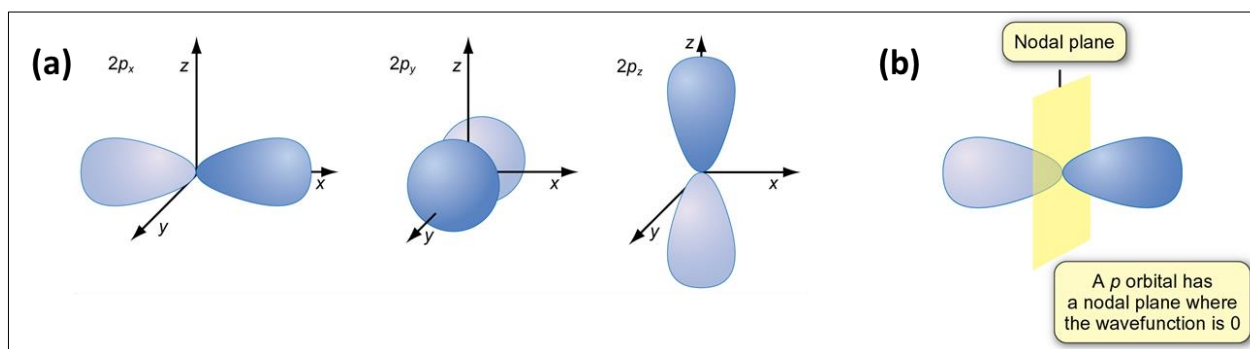


Figure 8 (a) Représentation des orbitales $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$ (b) Surface nodale d'une orbitale p.

On voit sur la **figure 8.b** que l'orbitale $2p$ présente une surface nodale pour laquelle $\psi = 0$.

c. Orbitales d

La **figure 9** représente les orbitales 3d. Quatre d'entre elles ont une forme de trèfle à quatre feuilles et présentent quatre lobes et deux plans nodaux. Quant à l'orbitale d_{z^2} , elle présente deux lobes de mêmes signes alignés le long de l'axe (z) et un anneau (ou tore) de signe opposé autour de l'axe (z) au niveau du centre de l'orbitale.

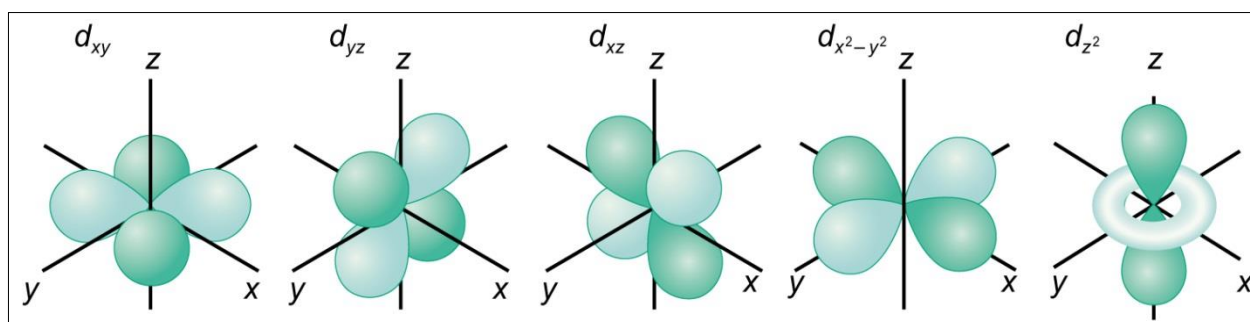


Figure 9 Représentation des orbitales d_{xy} , d_{yz} , d_{xz} , $d_{x^2-y^2}$ et d_{z^2} .

III. Les atomes polyélectroniques

L'objectif va être de construire la configuration électronique de atomes polyélectroniques : remplir les orbitales atomiques avec des électrons. Il faut dans un premier temps résoudre l'équation de Schrödinger.

1. Résolution de l'équation de Schrödinger : approximations

Il est possible de résoudre l'équation de Schrödinger uniquement pour l'atome d'hydrogène ou les ions hydrogénoïdes (He^+ ou Li^{2+} par exemple). Pour les éléments ayant plus d'un électron, dit atomes **polyélectroniques**, on ne peut résoudre exactement cette équation. On utilise alors plusieurs approximations.

On part de l'expression de l'hamiltonien de l'atome polyélectronique :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_n - \sum_{i=1}^{Ne} \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_i - \sum_i^{Ne} \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

(termes énergie cinétique du noyau, énergie cinétique des électrons, attraction noyau-électron, répulsion électron-électron).

Approximation de Born-Oppenheimer : On définit d'abord des solutions électroniques calculées à noyau fixe puisque les électrons s'adaptent instantanément au mouvement du noyau. Cette approximation permet de découpler le mouvement du noyau des électrons.

On obtient alors l'hamiltonien :

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{Ne} \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_i - \sum_i^{Ne} \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

(Termes énergie cinétique des électrons, attraction électron-noyau, répulsions électron-électron)

Le terme de répulsion biélectronique, faisant intervenir la distance instantanée entre les électrons i et j , rend impossible la résolution analytique exacte de l'équation de Shrödinger. On utilise une autre approximation.

Approximation monoélectronique : le terme de répulsion entre les électrons est remplacé par une somme de potentiels monoélectroniques. Chaque terme traduit la répulsion moyenne ressentie par un électron.

L'hamiltonien se décompose alors de la façon suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) + \hat{H}(3) + \dots \text{ avec } \hat{H}(i) = \hat{h}(i) + \hat{v}(i)$$

où $\hat{h}(i)$ prend en compte l'énergie cinétique de l'électron i et l'attraction électrostatique entre l'électron i et le noyau, et $\hat{v}(i)$ traduit cette répulsion moyenne ressentie par l'électron i de la part des autres électrons.

Pour simplifier : on admet donc que les électrons « orbitent » autour du noyau indépendamment les uns des autres. Cette hypothèse permet de décomposer la fonction d'onde d'un atome polyélectronique, en produit de fonction d'onde monoélectroniques :

$$\Psi(1, 2, 3, \dots N) = \psi(1) \times \psi(2) \times \psi(3) \times \dots \times \psi(N)$$

Les fonctions d'onde monoélectroniques sont les solutions de l'équation de Shrödinger pour l'atome d'hydrogène, que nous savons résoudre.

Cependant utiliser les orbitales de l'hydrogène pour résoudre les orbitales d'autres atomes implique des différences. Notamment, l'énergie d'une orbitale atomique de l'hydrogène **dépend uniquement du nombre quantique principale n** . Par exemple les orbitales 2s et 2p possèdent la même énergie, elles sont dites **dégénérées**. Il en est de même pour les O.A. 3s, 3p et 3d et ainsi de suite. Ce n'est pas le cas pour les atomes polyélectroniques où plus la valeur de l (nombre quantique secondaire) est petite, plus l'énergie de l'orbitale est basse. L'orbitale 2s est plus basse en énergie que la 2p, de même la 3s est plus basse que les 3p elle-même plus basses que les 3d (**figure 10**).

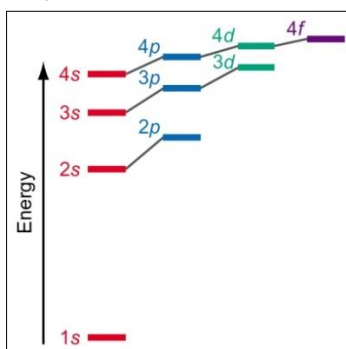


Figure 10 Orbitales atomiques d'un atome polyélectronique présentées par niveau d'énergie croissant

2. Le spin électronique

Pour décrire la configuration électronique d'un atome polyélectronique, il est nécessaire d'utiliser un quatrième nombre quantique, m_s , relatif au spin de l'électron dans l'orbitale. Ce nombre correspond au moment intrinsèque de spin de l'électron $\vec{\sigma}_s$ qui est lui aussi quantifié :

$$|\vec{\sigma}_s|^2 = s(s+1)\hbar^2 \text{ et } \sigma_{s,z} = m_s\hbar$$

Le nombre quantique de spin $s=1/2$ n'est pas pertinent pour la description, mais sa projection $m_s = \pm 1/2$ l'est. On parle d'état de spin up ou down.

Un électron est complètement décrit par le quadruplet (n, l, m_l, m_s)

3. Configuration électronique

On appelle configuration électronique de l'atome la répartition des électrons dans les différents niveaux d'énergie. On sait comment trouver les énergies des O.A. grâce à la résolution de l'équation de Schrödinger, mais on ne sait pas quelles vont être les O.A. occupées par les électrons. Pour cela, on utilise 3 principes.

Principe d'exclusion de Pauli (énoncé en 1925, année de l'introduction du spin).

Il est impossible que deux électrons d'un même atome possèdent quatre nombres quantiques identiques.

Il en résulte qu'à un triplet n, l, m_l correspond une OA pouvant contenir :

- Soit un électron célibataire \downarrow ou \uparrow
- Soit deux électrons « appariés » $\downarrow\uparrow$

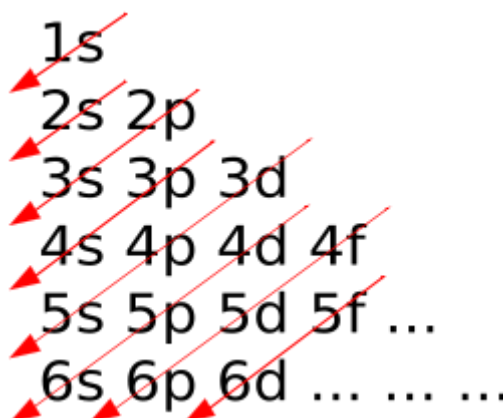
Ainsi, une O.A. ne peut contenir plus de deux électrons.

Principe de stabilité : règle de Klechkowski (l'ordre empirique d'après les spectres atomiques a été trouvé par Madelung dès 1936, mais ce n'est qu'en 1962 que Klechkowski le justifia théoriquement)

La règle de Klechkowski établit l'ordre de niveaux quelconques :

$E_{n,l}$ est une fonction croissante de $n+l$, et pour deux valeurs semblables de $n+l$, une fonction croissante de n .

Il est plus aisé de retenir cela graphiquement :



Attention, on remarque que les orbitales 4s sont remplies avant les 3d. De même les 5s avant les 4d etc.

Principe de remplissage : règles de Hund.

La règle de Hund précise comment placer les électrons :

On remplit les orbitales par ordre d'énergie croissante, et pour des niveaux d'énergies dégénérés, on occupe le maximum de niveaux avec des électrons de spin parallèles.

Exercice d'application : Etablir la configuration électronique des atomes de carbone ($Z=6$), d'oxygène ($Z=8$), et de soufre ($Z=16$).

Résultats : ${}_6\text{C} : 1s^2 2s^2 2p^2$; ${}_8\text{O} : 1s^2 2s^2 2p^4$; ${}_{16}\text{S} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

Exceptions : Les atomes de chrome Cr ($Z=24$) et de cuivre Cu ($Z=29$) présentent une exception dans le remplissage (ce ne sont pas les seules). Ces exceptions sont dues à des irrégularités quand Z augmente en raison essentiellement du voisinage en énergie des niveaux $4s$ $3d$ et $5s$ $4d$.

On en rencontre deux principales :

- Une sous couche d saturée est plus stable qu'une sous-couche s saturée : Cu est en $3d^{10}4s^1$ (au lieu de $4s^2 3d^9$)
- Une sous-couche à demi-remplie est stabilisée par le maximum de spins parallèles : Cr est en $3d^5 4s^1$ (au lieu de $4s^2 3d^4$).

Lorsque l'on a stabilisation d'une couche d par saturation (Cu) ou demi saturation (Cr), le niveau énergétique des couches d devient plus faible que celui des s d'où l'inversion $4s^2 3d^1$ en $3d^{1+1} 4s^1$.

4. Electrons de valence et de cœur

Très souvent, les propriétés chimiques d'un élément sont fortement liées à sa couche externe, ou couche de valence. On se contente en général de donner sa configuration de valence. Les autres électrons sont dits les « électrons de cœur ».

Les **électrons de valence** correspondent à ceux de la couche de n le plus grand. On leur adjoint ceux d'une sous-couche n-1 si elle n'est que partiellement remplie. Les **électrons de cœur** correspondent aux électrons des couches et sous-couches saturées, donc de plus basses énergies.

Exercice d'application : Etablir la configuration électronique de ${}_7\text{N}$ et ${}_{25}\text{Mn}$, et déterminer les électrons de cœur et de valence.

Résultats : ${}_7\text{N}$: $1s^2 2s^2 2p^3$. Il y a 2 électrons de cœur, 5 de valence.

${}_{25}\text{Mn} = [\text{Ar}] 3d^5 4s^2$

Ce qu'il faut retenir du chapitre

- Une orbitale atomique est définie par une fonction d'onde, décrivant le comportement ondulatoire d'un électron ou d'une paire d'électrons.
- La forme des orbitales s, p, d ainsi que déterminer graphiquement les surfaces nodales (sur un schéma d'orbitale).
- Connaître les 4 nombres quantiques (nom et valeurs).
- Déterminer une configuration électronique : connaître les règles de construction (Klechkowski, Hund, Pauli).
- Connaître les 2 exceptions Cu et Cr.

Bibliographie et compléments

Burrows Chimie³ Introduction à la chimie inorganique, organique et à la chimie physique, p.74-110

Grecias Compétences Prépa 1^{ère} année Chimie PCSI, chapitre 6.

Fosset J'intègre Chimie PCSI tout-en-un, chapitre 2 p.76-96.

Schott Chimie PCSI tout-en-un

Pour plus de détails sur les aspects quantiques :

Atkins de boeck Chimie Physique (2^{ème} édition), chapitre 11 p.293 et chapitre 12 p.327.

Cours de Patrick Chaquin dispensé à Jussieu

http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/chaquin/2.Atome_Hydrogene.pdf