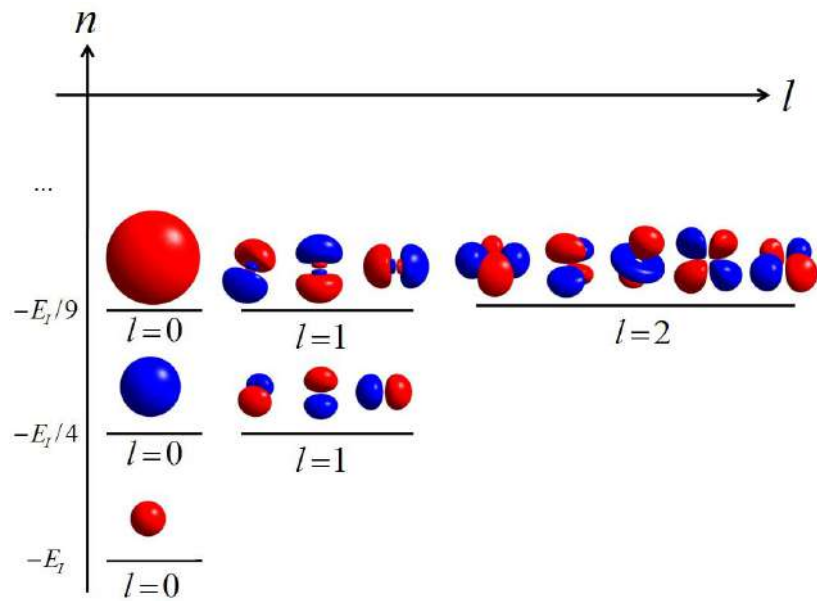


# PHYSIQUE ATOMIQUE

*Simulations avec Python*

NANA ENGO



# Table des matières

<b>Avant-propos</b>	<b>iii</b>
<b>1 Constitution de l'atome</b>	<b>1</b>
1.1 Constituants de l'atome - Défaut de masse . . . . .	1
1.1.1 Nombre de charge, nombre de masse et isotopes . . . . .	1
1.1.2 Défaut de masse et énergie de liaison par nucléon . . . . .	3
1.2 Nuage électronique . . . . .	6
1.2.1 Électron de valence . . . . .	6
1.2.2 Classification périodique des éléments . . . . .	6
1.2.3 Configuration électronique . . . . .	6
1.2.4 Séries spectrales de l'atome d'hydrogène . . . . .	12
1.3 Solutions des Exercices . . . . .	14

## Avant-propos

On peut définir **physique atomique** comme la partie de la physique qui s'occupe de comprendre la structure des atomes et des molécules, les processus et propriétés physiques et chimiques à l'échelle microscopique, les interactions avec le rayonnement électromagnétique.

Historiquement cette discipline est à l'origine de toute la physique des quanta, et elle a joué un rôle absolument déterminant dans la physique de tout le XXe siècle. De nos jours cette discipline couvre un champ très vaste et ses développements se trouvent finalement dispersés dans de nombreuses spécialités. Par exemple : le magnétisme, les propriétés optiques des solides, l'analyse chimique, l'imagerie par résonance magnétique, les lasers. . .

Schématiquement on peut distinguer plusieurs aspects dans la physique atomique :

1. **Physique "de" l'atome.** On s'intéresse dans ce cas à la constitution de l'atome pris à l'état isolé :
  - ses niveaux d'énergie, liés aux *mouvements internes* à l'atome ;
  - ses fonctions d'onde (ou *orbitales*), liées à la *forme* de l'atome ;
  - son interaction avec des champs extérieurs, magnétiques ou électriques, statiques ou oscillants (rayonnements électromagnétiques, optiques, X. . .) : processus d'absorption et d'émission, diffusion, photoionisation.
2. **Physique "avec" des atomes.** Il s'agit de l'étude des objets et processus où interviennent plusieurs atomes :
  - *physique des molécules* : structure (forme), vibrations. . . ;
  - *processus interatomiques* : collisions avec diverses particules, réactivité chimique élémentaire ;
  - *physique du solide* : inclusions atomiques dans un solide, propriétés individuelles des atomes dans un solide.
3. **Applications (sciences fondamentales et appliquées).** Elles sont innombrables. Mentionnons par exemple :
  - *L'électronique quantique* c'est-à-dire les lasers et leurs applications (Champ incroyablement vaste!) ;
  - L'exploration de milieux hostiles ou lointains au moyen du rayonnement émis, absorbé diffusé (flammes, atmosphères terrestre ou planétaires, étoiles et nuages interstellaires, plasmas et décharges. . .), détection ultra sensible de molécules à l'état individuel ;

- Le test de théories fondamentales (mesures à ultra-haute précision et électrodynamique quantique, expériences sur des systèmes simples et concepts quantiques). Exemple : mesure de la constante de Rydberg par spectroscopie ultra-précise des niveaux de l'atome d'hydrogène ;
- La manipulation de la matière au moyen de faisceaux lumineux ;
- Les calculs de forces intra et intermoléculaires ;
- La RMN et applications à l'analyse chimique et à l'imagerie ;
- La séparation isotopique de l'uranium ;
- La magnéto­métrie (mesure de faibles champs magnétiques à ultra-haute précision) ;
- Les horloges atomiques et GPS (voir par exemple <http://opdaf1.obspm.fr/>, <http://tf.nist.gov/timefreq/ofm/smallclock/>).

Ce cours a pour but de présenter un ensemble de concepts et de notions liés à la physique atomique. Les connaissances nécessaires pour aborder ce cours comprennent :

- les bases de physique générale (principes de la mécanique, électromagnétisme) ;
- les notions élémentaires de la théorie quantique ;
- les notions élémentaires en chimie physique et en physique.

## Chapitre 1

# Constitution de l'atome

## Sommaire

1.1	Constituants de l'atome - Défaut de masse . . . . .	1
1.2	Nuage électronique . . . . .	6
1.3	Solutions des Exercices . . . . .	14

La matière est constituée d'atomes qui s'associent au moyen de **liaisons**, liaisons covalentes, liaisons ioniques, liaisons hydrogène, etc. On dénombre un peu plus de 100 éléments différents dont certains qui n'existent pas à l'état naturel, ont été fabriqués artificiellement.

Les atomes peuvent être considérés comme les **constituants élémentaires** de la matière tant que les énergies mises en jeu ne sont pas très importantes. Une telle situation se rencontre en chimie où les énergies échangées n'excèdent pas quelques électrons-volts par atome. Cependant, les atomes ne sont pas *insécables*. Il est possible de les *casser* en les bombardant avec des projectiles (d'autres atomes éventuellement) dotés d'une énergie cinétique de plusieurs dizaines d'électron-volts. On met ainsi en évidence deux types de constituants plus élémentaires encore : **les électrons et les noyaux**.

Les noyaux ne peuvent pas, non plus, être considérés comme des composants élémentaires, indestructibles. Certains d'entre eux se décomposent spontanément, de façon aléatoire : c'est le phénomène de **radioactivité** ; d'autres encore qui semblent très solides peuvent cependant être cassés lors de collisions avec divers types de projectiles. On met ainsi en évidence des constituants *encore plus élémentaires* : les **nucléons**<sup>1</sup>. On retiendra qu'une **particule élémentaire** est un système élémentaire dans lequel on ne peut distinguer constituants élémentaires de masse et de spin donnés.

## 1.1 Constituants de l'atome - Défaut de masse

### 1.1.1 Nombre de charge, nombre de masse et isotopes

Les atomes, tels qu'on les rencontre dans la nature, sont des objets de petites dimensions. Ils présentent une région centrale de forte densité de masse, le noyau, dont les dimensions

<sup>1</sup>Les nucléons sont eux-mêmes constitués de **quarks**.

n'excèdent pas quelques femtomètres ( $1\text{ fm}=10^{-15}\text{ m}$ ). Le nuage électronique entoure le noyau. Ses dimensions n'excèdent pas quelques angströms ( $1\text{ Å}=10^{-10}\text{ m}$ ).

- Les **électrons** constituent le **nuage électronique**. Le nombre d'électrons,  $Z$ , est le **numéro atomique** de l'atome. Les électrons sont des particules de petite masse<sup>2</sup> ( $m \simeq 9.1093897 \times 10^{-31}\text{ kg}$ ) et de charge négative ( $q_e = -e \simeq -1.60217733 \times 10^{-19}\text{ C}$ ).

On distingue deux constituants du noyau, **le proton et le neutron**. Ces deux constituants sont considérés comme les deux formes possibles d'un **nucléon**.

- Le **neutron** est une particule de masse  $m_N \simeq 1.6749286 \times 10^{-27}\text{ kg}$  sans charge électrique. A l'état naturel, il se décompose par radioactivité pour donner un proton et un électron. Le nombre de neutron dans un noyau est noté  $N$ .
- Le **proton** admet la masse  $m_P \simeq 1.6726231 \times 10^{-27}\text{ kg}$ . Il présente une charge positive  $q_P = e \simeq 1.60217733 \times 10^{-19}\text{ C}$ . Le nombre de protons dans le noyau est le **nombre de charge du noyau**. *Les atomes étant électriquement neutres*, le nombre de charge est égal au numéro atomique,  $Z$ .

Les masses du proton et du neutron étant voisines, dans les applications, on prend souvent pour masse du nucléon la valeur  $m_N \simeq 1.67 \times 10^{-27}\text{ kg}$ .

Le nombre total de nucléons est le **nombre de masse** que l'on note  $A$ . Quand ce nombre est connu le noyau est appelé **nucléide**. Pour identifier un nucléide, on utilise la notation  ${}_Z^AX$  où  $X$  est le symbole chimique de l'atome en question. Ainsi,  ${}_{6}^{12}\text{C}$  représente un noyau d'atome de carbone (C) qui est constitué de  $Z = 6$  protons et de 6 neutrons, c'est-à-dire de  $A = 12$  nucléons.

A un même numéro atomique  $Z$  correspondent les mêmes propriétés chimiques, caractéristiques de l'élément  $X$ , puisque les propriétés chimiques font intervenir les électrons de l'atome les moins liés.

A un même numéro atomique  $Z$  peuvent correspondre plusieurs nucléides, différant par le nombre total de neutrons  $N$ , ayant donc des nombres de masse  $A$  différents : ces nucléides sont appelés **isotopes**. Les propriétés physiques de deux isotopes peuvent être fort différentes : le carbone  ${}_{6}^{14}\text{C}$  se décompose spontanément tandis que  ${}_{6}^{12}\text{C}$  est stable. Cependant, les propriétés chimiques sont pratiquement les mêmes, car ces atomes ont les mêmes numéros atomiques et par conséquent les mêmes nuages électroniques.

On utilise très souvent le nombre de masse  $A$  pour obtenir un ordre de grandeur du rayon d'un nucléide à travers la formule empirique

$$R \simeq r_0 A^{1/3}, \quad (1.1.1)$$

où  $r_0$  varie de 1.2 fm pour les noyaux lourds à 1.4 fm pour les noyaux légers.

Il est à noter que lorsqu'on a des nucléides qui ont

---

<sup>2</sup>Petite en comparaison avec les nucléons.

même  $A$ , mais des  $Z$  différents, on parle de nucléides **isobares**

Nucléides	Prot	Neutr	Éléments
$^{210}_{81}\text{Ti}$	81	129	Thallium
$^{210}_{82}\text{Pb}$	82	128	Plomb
$^{210}_{82}\text{Bi}$	83	126	Bismuth

même  $N = A - Z$ , mais  $Z$  différents, on parle de nucléides **isotones**.

Nucléides	Prot	Neutr	Éléments
$^{37}_{17}\text{Cl}$	17	20	Chlore
$^{38}_{18}\text{Ar}$	18	20	Argon
$^{40}_{20}\text{Ca}$	20	20	Calcium

### 1.1.2 Défaut de masse et énergie de liaison par nucléon

Calculons la masse,  $M$ , des constituants du noyau de carbone  $^{12}_6\text{C}$  :

$$M = 6 \times m_P + 6 \times m_N = 2.0085 \times 10^{-26} \text{ kg}. \quad (1.1.2)$$

La masse d'un atome de carbone,  $M_{at}$ , est égale à 12 u, par définition de l'**unité de masse atomique** (u.m.a)<sup>3</sup>, i.e.,

$$1 \text{ u} = 16605402 \times 10^{-17} \text{ kg}, \quad M_{at} = 12 \text{ u} = 1.9926 \times 10^{-26} \text{ kg}. \quad (1.1.3)$$

On trouve  $M_{at} < M$  alors qu'en tenant compte de la masse des électrons on s'attendait à  $M_{at} > M$ . **Il faut admettre que la masse d'un atome n'est pas égale à la masse de ses constituants.** La différence est petite (de l'ordre de  $10^3$ ). De façon générale, soit  $M$  la somme des masses des constituants d'un noyau  $^A_Z\text{X}$

$$M = Zm_P + (A - Z)m_N, \quad (1.1.4)$$

et  $M_X$  la masse du noyau, la différence

$$M - M_X = \Delta M, \quad (1.1.5)$$

est appelé **défaut de masse**. C'est une quantité positive. Depuis l'article d'Einstein de l'automne 1905, nous savons que la variation d'énergie d'un système se traduit par une variation de la masse de ce même système,

$$\Delta E = \Delta M c^2, \quad (1.1.6)$$

où  $c$  est la célérité de la lumière dans le vide.

Ainsi, considérons le système, de masse  $M$ , formé de 6 protons et 6 neutrons immobiles, très éloignés les uns des autres. Lorsqu'on rapproche les nucléons, le même système forme un noyau de carbone  $^{12}_6\text{C}$  dont la masse est  $M_{at}$ . La quantité  $(M - M_{at})c^2$  est l'énergie perdue par le système lorsque s'est formé le noyau. La formule d'Einstein ne dit pas sous quelle forme apparaît cette énergie : rayonnement, énergie cinétique, etc.

Inversement, pour décomposer un noyau de carbone en ses nucléons constitutifs, il faut lui fournir l'énergie  $(M - M_{at})c^2$ . Cette énergie est l'**énergie moyenne de liaison** du noyau. **L'énergie de liaison est une énergie potentielle que possède le système lorsqu'il est décomposé en nucléons et qu'il perd lors de la formation du noyau.**

Pour rendre compte de la stabilité relative d'un nucléide par rapport à un autre, on calcule l'énergie moyenne de liaison par nucléon

$$\frac{\Delta M}{A}. \quad (1.1.7)$$

<sup>3</sup>On convient de définir que 12 g de l'isotope  $^{12}_6\text{C}$  contient  $\mathcal{N}_A = 6.0221367 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Un noyau sera d'autant plus stable que l'énergie moyenne de liaison par nucléon est élevée.

Les énergies d'ionisations telles qu'elles apparaissent dans les tableaux des figure 1.2.2 et 1.2.5 sont des énergies moyenne de liaison. Elles sont de l'ordre de quelques eV ; le défaut de masse correspondant est négligeable. Pour le fer,  ${}^{57}_{26}\text{Fe}$ , l'énergie de première ionisation est eV. Le défaut de masse correspondant est

$$\frac{7.9 \times 1.6 \times 10^{-19}}{(3 \times 10^8)^2} = 1.3 \times 10^{-33} \text{ kg}, \quad (1.1.8)$$

tandis que la masse de l'atome est  $57 \text{ u} = 9.46 \times 10^{-26} \text{ kg}$ . L'accroissement relatif de la masse du système lors de son ionisation est donc

$$\frac{1.3 \times 10^{-33}}{9.46 \times 10^{-26}} \simeq 10^{-8}. \quad (1.1.9)$$

On comprend pourquoi les réactions chimiques qui laissent les noyaux inchangés, ne permettent pas de mettre en doute la conservation de la masse. Il n'en est pas de même pour les réactions nucléaires qui conduisent à des défauts de masse plus facilement observables, qui sont fréquemment de l'ordre de  $10^{-3}$ .

Négligeons le défaut de masse et remarquons la relation  $m_e \ll m_p$ . On en déduit que la masse totale des électrons  $Zm_e$  est très inférieure à la masse des protons et par conséquent à la masse du noyau :  $Zm_e \ll Zm_p < Zm_p + (A - Z)m_N \simeq Am_N$  ; ainsi on commet une erreur qui reste de l'ordre de 1% en posant  $M = Am_N$  où  $M$  est la masse de l'atome.

Soulignons que les masses atomiques s'expriment en u.m.a. Les masses atomiques qui apparaissent dans le tableau périodique 1.2.2 sont les moyennes pondérées selon les divers isotopes de chaque élément. Par exemple le chlore a deux isotopes de masses approximatives 35 u (75,4%) et 37 u (24,6%). La masse atomique indiquée est donc

$$35 \text{ u} \times 0.754 + 37 \text{ u} \times 0.246 = 35.5 \text{ u}. \quad (1.1.10)$$

Le nombre de masse  $A$  d'un isotope est numériquement égal à sa masse atomique exprimée en unités de masse atomique et arrondie à la valeur entière la plus proche.

Il est à noter qu'il existe dans le dichlore naturel, trois sortes de molécules avec les masses molaires et proportions relatives suivantes :

Molécule	Masse molaire ( $M_i$ )	Abondance ( $x_i$ )
${}^{35}\text{Cl} - {}^{35}\text{Cl}$	70 u	$0.75 \times 0.75 = 0.5626$
${}^{35}\text{Cl} - {}^{37}\text{Cl}$ ou ${}^{37}\text{Cl} - {}^{35}\text{Cl}$	72 u	$2 \times (0.75 \times 0.25) = 0.375$
${}^{37}\text{Cl} - {}^{37}\text{Cl}$	74 u	$0.25 \times 0.25 = 0.0625$

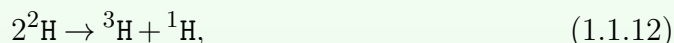
On vérifie que

$$\sum_i x_i = 1, \quad M_{\text{Cl}_2} = 2 \times 35.5 \text{ u} = 71 \text{ u} = \sum_i x_i M_i. \quad (1.1.11)$$



**Exemple 1.1.1 – Constituants de l'atome**

1. On considère la réaction



avec  $M(^1\text{H}) = 1.00783\text{u}$ ,  $M(^2\text{H}) = 2.01410\text{u}$ ,  $M(^3\text{H}) = 3.01605\text{u}$ .

(a) La quantité d'énergie libérée par la fusion de 1 kg de deutérium est  $\Delta E = \Delta Mc^2$ , avec

$$\begin{aligned} \Delta M &= 35.5\text{u} + 35.5\text{u} - 2 \times 35.5\text{u} = -0.00432\text{u} \\ &= -0.00432\text{g}/2\text{mol}, \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

soit

$$\begin{aligned} \Delta E &= -3.89 \times 10^{11} \text{ J}/2\text{mol} = -1.945 \times 10^{11} \text{ J/mol} \\ &= -\frac{1.9452 \times 10^{11} \text{ J}}{2.0141 \text{ g}} = -9.657 \times 10^{13} \text{ J/kg}. \end{aligned} \quad (1.1.14)$$

Puisque cette énergie est négative, la *réaction* (1.1.12) est *exothermique*.

(b) Sachant que le pouvoir calorifique du charbon est 33.400 MJ/kg, la masse de charbon que l'on doit brûler pour produire une énergie équivalente à celle produite par la fusion de 1 kg de deutérium est

$$M_C = \frac{9.657 \times 10^{13}}{33.400 \times 10^6} = 3225 \text{ t}. \quad (1.1.15)$$

L'énergie dégagée par les processus nucléaires est beaucoup plus importante que celle dégagée par les processus chimiques ordinaires. Cela explique la propension actuelle à l'utilisation de l'énergie nucléaire malgré les risques.

2. Le magnésium  $_{12}\text{Mg}$  existe sous forme de trois isotopes de nombre de masse  $_{12}^{24}\text{Mg}$ ,  $_{12}^{25}\text{Mg}$  et  $_{12}^{26}\text{Mg}$ . Les fractions molaires dans le magnésium naturel sont 0.101 pour  $_{12}^{25}\text{Mg}$  et 0.113 pour  $_{12}^{26}\text{Mg}$ .

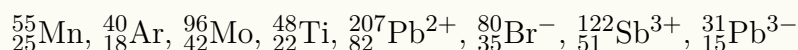
La valeur approchée de la masse molaire atomique du magnésium naturel est

$$M(\text{Mg}) = 0.101 \times 25\text{u} + 0.113 \times 26\text{u} + (1 - 0.101 - 0.113) \times 6\text{u} = 24.327\text{g/mol}. \quad (1.1.16)$$

Cette valeur est approchée parce qu'on a considéré que  $m_n = m_p = 1\text{u}$ , qu'on a négligé la masse des électrons et le défaut de masse.

**Exercice 1.1.1: Constituants de l'atome.**

1. Quel est le nombre de neutrons, de protons et d'électrons présents dans chacun des atomes ou des ions suivants ?



2. Si l'on dit, à propos de l'ion  $\text{Bi}^{3+}$ , qu'il possède 127 neutrons, 83 protons, 81 électrons et 210 nucléons, quelles sont les données certainement exactes, éventuellement exactes et certainement fausses ?

## 1.2 Nuage électronique

### 1.2.1 Électron de valence

Les électrons forment un nuage qui enveloppe le noyau.

Rappelons que la loi de Coulomb explique pour l'essentiel la cohésion de l'atome. Les électrons se repoussent les uns les autres car ils sont de même charge. Cependant, ils sont tous attirés par le noyau.

Dans un atome alcalin, par exemple, l'électron de valence est éloigné des autres électrons qui avec le noyau forment un **coeur** de charge positive (voir la figure 1.2.1). Dans ce cas, la charge *vue* par l'électron de valence est  $Ze - (Z - 1)e = e$ . Il en résulte une force attractive qui maintient l'électron de valence lié au noyau. Des mécanismes similaires, bien que plus compliqués, se produisent pour tous les électrons. L'attraction exercée par le noyau domine et assure la cohésion de l'ensemble.

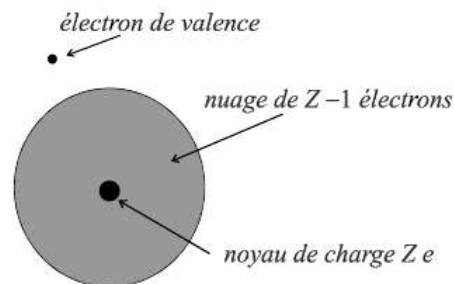


Figure 1.2.1 – Modélisation d'un atome alcalin.

### 1.2.2 Classification périodique des éléments

La description du **nuage électronique** ne peut se comprendre réellement que dans le cadre de la théorie quantique. Une classification astucieuse et pertinente, expliquant de nombreuses propriétés chimiques, fut cependant établie par Mendeleïev bien avant les premiers balbutiements de la théorie des quanta<sup>4</sup>. Cette classification, améliorée, complétée et présentée parfois de diverses façons (voir les Tableaux des figure 1.2.2 et 1.2.5) est connue sous le nom de **classification périodique des éléments**.

La figure 1.2.3 inventorie les différentes matières premières utilisées dans et autour des technologies quantiques, et surtout les calculateurs quantiques.

### 1.2.3 Configuration électronique

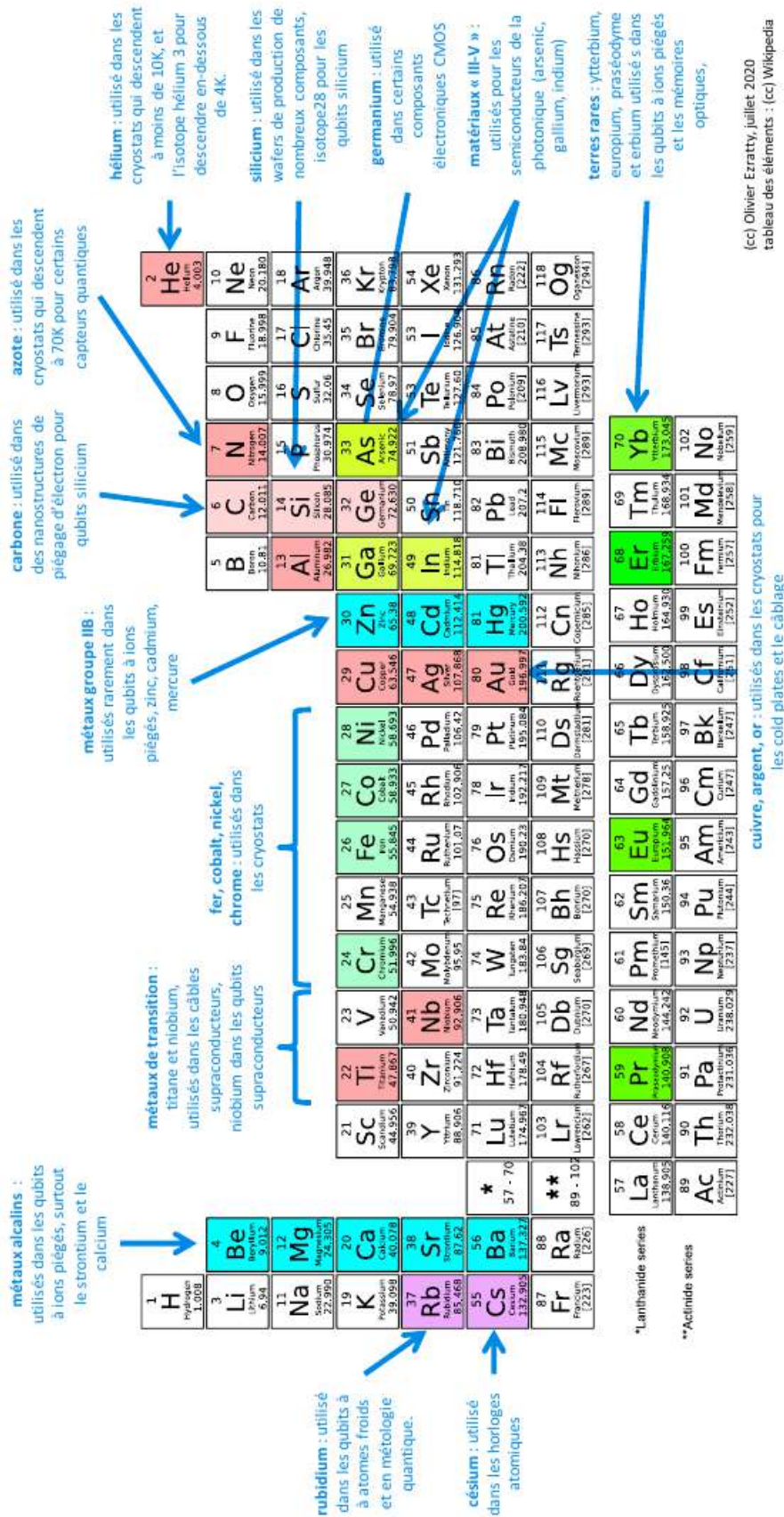
Les électrons se répartissent en **couches**, dans chaque couche on distingue les **sous couches** et dans les sous-couches, les **cases**; chaque case peut accueillir 2 électrons que l'on distingue par l'un des deux symboles  $\uparrow$  ou  $\downarrow$  représentant les différents états de spin, *spin up* et *spin down*.

Les couches sont numérotées  $1, 2, 3, \dots, n$ ,  $n$  étant le **nombre quantique principal**. Dans une couche  $n$ , il y a  $n$  sous couches  $\ell$ ,  $0 \leq \ell \leq n - 1$ ;  $\ell$  est le **nombre quantique orbital ou azimutal**. Dans une sous-couche  $\ell$ , il y a  $m = 2\ell + 1$  cases,  $-\ell \leq m \leq +\ell$ ;  $m$  est le **nombre quantique magnétique**. Ainsi une couche  $n$  contient

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2, \quad (1.2.1)$$

<sup>4</sup>La théorie des quanta est l'ancêtre de la théorie quantique.





**Figure 1.2.3** — Tableau de classification périodique - Eléments utilisés dans les technologies quantiques.  
@Olivier Ezratty, juillet 2020

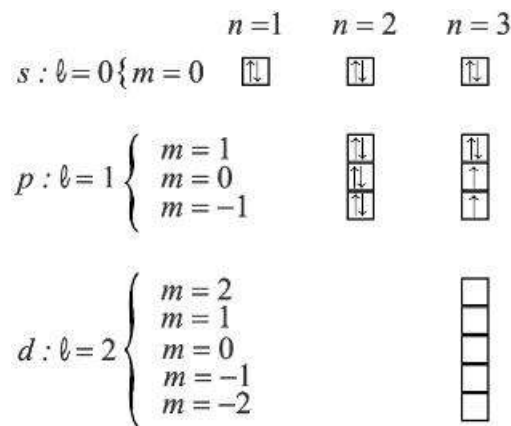


cases qui peuvent accueillir  $2n^2$  électrons.

L'usage veut que l'on distingue les sous-couches pour lesquels  $\ell = 0, 1, 2, 3$  par une lettre  $s, p, d, f$  qui est l'initial de la série de raies correspondante comme on le montre dans le tableau 1.2.1.

$\ell$	0	1	2	3
lettre symbolique	$s$	$p$	$d$	$f$
série de raies	sharp (étroite)	principale	diffuse	fondamentale

**Tableau 1.2.1** – Notation spectroscopique.



**Figure 1.2.4** – Configuration électronique du soufre,  $_{16}\text{S} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ .

La figure 1.2.4 présente un exemple de **configuration électronique**, celle du soufre,  $_{16}\text{S}$ ). La notation  $2p^6$ , par exemple signifie qu'il y a 6 électrons sur la sous-couche p (i.e.,  $\ell = 1$ ) de la couche  $n = 2$ , c'est-à-dire que la couche est **saturée**. Le Tableau de la figure 1.2.5 donne les configurations électroniques des atomes dans leur état fondamental, état de plus basse énergie.

Les couches électroniques périphériques correspondent aux valeurs maximales de  $n$  et  $\ell$ . Les propriétés chimiques d'un élément dépendent des configurations de ces couches.

Le Tableau de la figure 1.2.5 appelle plusieurs remarques :

- Les nombres quantiques  $n, \ell, m$  et  $s$  (avec  $s = +\frac{1}{2}$  pour  $\uparrow$  et  $s = -\frac{1}{2}$  pour  $\downarrow$ ) déterminent complètement les propriétés de l'électron correspondant. On constate qu'il n'existe pas deux électrons présentant les mêmes nombres quantiques quel que soit l'atome considéré. Élevé au rang de principe, cette propriété est connu comme le **principe d'exclusion de Pauli**. Le principe d'exclusion ne s'applique pas seulement aux électrons, mais à une famille de corpuscules appelée **fermions**. Le proton et le neutron, par exemple, sont des fermions ;
- La constitution d'un atome, dans son état fondamental, à partir de son noyau et de ses  $Z$  électrons s'effectue de telle sorte que **l'énergie potentielle du système soit minimale**. Cette règle est très générale en physique. Pour  $n < 4$  et  $\ell < 2$ , on constate que le remplissage des couches et des sous-couches s'effectue suivant les valeurs de  $n$  croissantes et, pour  $n$  donné, de  $\ell$  croissantes. Cette règle est en défaut pour  $n > 4$  ou  $\ell > 2$ . D'autres règles permettent de décrire le remplissage ;

Z	Symbol	Ground state	Ground configuration	Ionization energy, eV	Z	Symbol	Ground state	Ground configuration	Ionization energy, eV
1	H	$2S$	$1s$	13.595	52	Te	$3P_2$	$4d^{10} 5s^2 5p^4$	9.01
2	He	$1S$	$1s^2$	24.581	53	I	$2P_{3/2}$	$4d^{10} 5s^2 5p^5$	10.454
3	Li	$2S$	[He] $2s$	5.390	54	Xe	$1S$	$4d^{10} 5s^2 5p^6$	12.127
4	Be	$1S$	$2s^2$	9.320	55	Cs	$2S$	[Xe] $6s$	3.893
5	B	$2P_{1/2}$	$2s^2 2p$	8.296	56	Ba	$1S$	$6s^2$	5.210
6	C	$3P_0$	$2s^2 2p^2$	11.256	57	La	$2D_{3/2}$	$5d 6s^2$	5.61
7	N	$4S$	$2s^2 2p^3$	14.545	58	Ce	$1G_4$	$4f 5d 6s^2$	6.54
8	O	$3P_2$	$2s^2 2p^4$	13.614	59	Pr	$4I_{9/2}$	$4f^3 6s^2$	5.48
9	F	$2P_{3/2}$	$2s^2 2p^5$	17.418	60	Nd	$5I_4$	$4f^4 6s^2$	5.51
10	Ne	$1S$	$2s^2 2p^6$	21.559	61	Pm	$6H_{5/2}$	$4f^5 6s^2$	
11	Na	$2S$	[Ne] $3s$	5.138	62	Fm	$7F_0$	$4f^6 6s^2$	5.6
12	Mg	$1S$	$3s^2$	7.644	63	Eu	$8S$	$4f^7 6s^2$	5.67
13	Al	$2P_{1/2}$	$3s^2 3p$	5.984	64	Gd	$9D_2$	$4f^7 5d 6s^2$	6.16
14	Si	$3P_0$	$3s^2 3p^2$	8.149	65	Tb	$6H_{15/2}$	$4f^9 6s^2$	6.74
15	P	$4S$	$3s^2 3p^3$	10.484	66	Dy	$5I_8$	$4f^{10} 6s^2$	6.82
16	S	$3P_2$	$3s^2 3p^4$	10.357	67	Ho	$4I_{15/2}$	$4f^{11} 6s^2$	
17	Cl	$2P_{3/2}$	$3s^2 3p^5$	13.01	68	Er	$3H_6$	$4f^{12} 6s^2$	
18	Ar	$1S$	$3s^2 3p^6$	15.755	69	Tm	$2F_{7/2}$	$4f^{13} 6s^2$	
19	K	$2S$	[Ar] $4s$	4.339	70	Yb	$1S$	$4f^{14} 6s^2$	6.22
20	Ca	$1S$	$4s^2$	6.111	71	Lu	$2D_{3/2}$	$4f^{14} 5d 6s^2$	6.15
21	Sc	$2D_{3/2}$	$3d 4s^2$	6.54	72	Hf	$3F_2$	$4f^{14} 5d^2 6s^2$	7.0
22	Ti	$3F_2$	$3d^2 4s^2$	6.83	73	Ta	$4F_{3/2}$	$4f^{14} 5d^3 6s^2$	7.88
23	V	$4F_{3/2}$	$3d^3 4s^2$	6.74	74	W	$5D_0$	$4f^{14} 5d^4 6s^2$	7.98
24	Cr	$7S$	$3d^5 4s$	6.764	75	Re	$6S$	$4f^{14} 5d^5 6s^2$	7.87
25	Mn	$6S$	$3d^5 4s^2$	7.432	76	Os	$5D_4$	$4f^{14} 5d^6 6s^2$	8.7
26	Fe	$5D_4$	$3d^6 4s^2$	7.87	77	Ir	$4F_{9/2}$	$4f^{14} 5d^7 6s^2$	9.2
27	Co	$4F_{9/2}$	$3d^7 4s^2$	7.86	78	Pt	$3D_3$	$4f^{14} 5d^8 6s^2$	8.88
28	Ni	$3F_4$	$3d^8 4s^2$	7.633	79	Au	$2S$	[Xe, $4f^{14} 5d^{10}$ ] $6s$	9.22
29	Cu	$2S$	$3d^{10} 4s$	7.724	80	Hg	$1S$	$6s^2$	10.434
30	Zn	$1S$	$3d^{10} 4s^2$	9.391	81	Tl	$2P_{1/2}$	$6s^2 6p$	6.106
31	Ga	$2P_{1/2}$	$3d^{10} 4s^2 4p$	6.00	82	Pb	$3P_0$	$6s^2 6p^2$	7.415
32	Ge	$3P_0$	$3d^{10} 4s^2 4p^2$	7.88	83	Bi	$4S$	$6s^2 6p^3$	7.287
33	As	$4S$	$3d^{10} 4s^2 4p^3$	9.81	84	Po	$3P_2$	$6s^2 6p^4$	8.43
34	Se	$3P_2$	$3d^{10} 4s^2 4p^4$	9.75	85	At	$2P_{3/2}$	$6s^2 6p^5$	
35	Br	$2P_{3/2}$	$3d^{10} 4s^2 4p^5$	11.84	86	Rn	$1S$	$6s^2 6p^6$	10.745
36	Kr	$1S$	$3d^{10} 4s^2 4p^6$	13.996	87	Fr	$2S$	[Rn] $7s$	
37	Rb	$2S$	[Kr] $5s$	4.176	88	Ra	$1S$	$7s^2$	5.277
38	Sr	$1S$	$5s^2$	5.692	89	Ac	$2D_{3/2}$	$6d 7s^2$	6.9
39	Y	$2D_{3/2}$	$4d 5s^2$	6.377	90	Th	$3F_2$	$6d^2 7s^2$	
40	Zr	$3F_2$	$4d^2 5s^2$	6.835	91	Pa	$4K_{11/2}$	$5f^2 6d 7s^2$	
41	Nb	$6D_{1/2}$	$4d^4 5s$	6.881	92	U	$5L_6$	$5f^3 6d 7s^2$	4.0
42	Mo	$7S$	$4d^5 5s$	7.10	93	Np	$6L_{11/2}$	$5f^4 6d 7s^2$	
43	Tc	$6S$	$4d^5 5s^2$	7.228	94	Pu	$7F_0$	$5f^6 7s^2$	
44	Ru	$5F_5$	$4d^7 5s$	7.365	95	Am	$8S$	$5f^7 7s^2$	
45	Rh	$4F_{9/2}$	$4d^8 5s$	7.461	96	Cm	$9D_2$	$5f^7 6d 7s^2$	
46	Pd	$1S$	$4d^{10}$	8.33	97	Bk		$(5f^8 6d 7s^2)$	
47	Ag	$2S$	$4d^{10} 5s$	7.574	98	Cf		$(5f^9 6d 7s^2)$	
48	Cd	$1S$	$4d^{10} 5s^2$	8.991	99	E		$(5f^{10} 6d 7s^2)$	
49	In	$2P_{1/2}$	$4d^{10} 5s^2 5p$	5.785	100	Fm		$(5f^{11} 6d 7s^2)$	
50	Sn	$3P_0$	$4d^{10} 5s^2 5p^2$	7.342	101	Mv			
51	Sb	$4S$	$4d^{10} 5s^2 5p^3$	8.639	102	No			
					103	Lw			

Figure 1.2.5 – Configurations atomiques des éléments du tableau périodique.

- L'énergie d'ionisation reste de l'ordre de quelques électrons-volts. Un maximum apparaît pour  $Z = 2, 10, 18, 36, 54, 86$ . Les atomes correspondant présentent donc une forte stabilité et peu de réactivité chimique : ce sont les **gaz rares**.

Les liaisons interatomiques se produisent lorsque les couches extérieures des nuages électroniques s'interpénètrent. Le Tableau de la figure figure 1.2.6 permet donc de vérifier que l'ordre de grandeur des dimensions atomiques est de quelques angströms.

**Densité et concentration atomique des éléments**

Les valeurs sont données sous la pression atmosphérique à la température ambiante, ou à la température indiquée en deg K.

H 4K 0,088																	He 2K 0,205 (à 37 atm)														
Li 78K 0,542 4,700 3,023	Be 1,82 12,1 2,22											B 2,47 13,0 1,54	C 3,516 17,6 1,54	N 20K 1,03	O 1,44	F 1,51 4,36 3,16	Ne 4K 1,77 2,66 3,76														
Na 5K 1,013 2,652 3,659	Mg 1,74 4,30 3,20											Al 2,70 6,02 2,86	Si 2,33 5,00 2,35	P 2,03	S 2,02	Cl 33K 1,77 2,66 3,76	Ar 4K 1,77 2,66 3,76														
<p style="text-align: center;">Densité en <math>\text{g cm}^{-3}</math> (<math>10^3 \text{ kg m}^{-3}</math>)</p> <p style="text-align: center;">Concentration <math>\times 10^{22} \text{ cm}^{-3}</math> (<math>10^{28} \text{ m}^{-3}</math>)</p> <p style="text-align: center;">Distance entre plus proches voisins, en Å (<math>10^{-10} \text{ m}</math>)</p>																															
K 5K 0,910 1,402 4,525	Ca 1,53 2,30 3,95	Sc 2,99 4,27 3,25	Ti 4,51 5,66 2,89	V 6,09 7,22 2,62	Cr 7,19 8,33 2,50	Mn 7,47 8,18 2,24	Fe 7,87 8,50 2,48	Co 8,9 8,97 2,50	Ni 8,91 9,14 2,49	Cu 8,93 8,45 2,56	Zn 7,13 6,55 2,66	Ga 5,91 5,10 2,44	Ge 5,32 4,42 2,45	As 5,77 4,65 3,16	Se 4,81 3,67 2,32	Br 123K 4,05 2,36	Kr 4K 3,09 2,17 4,00														
Rb 5K 1,629 1,148 4,837	Sr 2,58 1,78 4,30	Y 4,48 3,02 3,55	Zr 6,51 4,29 3,17	Nb 8,58 5,56 2,86	Mo 10,22 6,42 2,72	Tc 11,50 7,04 2,71	Ru 12,36 7,36 2,65	Rh 12,42 7,26 2,69	Pd 12,00 6,80 2,75	Ag 10,50 5,85 2,89	Cd 8,65 4,64 2,98	In 7,29 3,83 3,25	Sn 5,76 3,62 2,81	Sb 6,69 3,31 2,91	Te 6,25 2,94 2,86	I 4,95 2,36 3,54	Xe 4K 3,78 1,64 4,34														
Cs 5K 1,997 0,905 5,235	Ba 3,59 1,60 4,35	La 6,17 2,70 3,73	Hf 13,20 4,52 3,13	Ta 16,66 5,55 2,86	W 19,25 6,30 2,74	Re 21,03 6,80 2,74	Os 22,58 7,14 2,68	Ir 22,55 6,62 2,71	Pt 21,47 5,90 2,77	Au 19,28 4,26 2,88	Hg 227 14,26 3,50 3,01	Tl 11,87 3,50 3,46	Pb 11,34 3,30 3,50	Bi 9,80 2,82 3,07	Po 9,31 2,67 3,34	At — — —	Rn — — —														
Fr — — —	Ra — — —	Ac 10,07 2,66 3,76	Ce 6,77 2,91 3,65	Pr 6,78 2,92 3,63	Nd 7,00 2,93 3,66	Pm — — —	Sm 7,54 3,03 3,59	Eu 5,25 2,04 3,96	Gd 7,89 3,02 3,58	Tb 8,27 3,22 3,52	Dy 8,53 3,17 3,51	Ho 8,80 3,22 3,49	Er 9,04 3,26 3,47	Tm 9,32 3,32 3,54	Yb 6,97 3,02 3,88	Lu 9,84 3,39 3,43															
<td>Th 11,72 3,04 3,60</td> <td>Pa 15,37 4,01 3,21</td> <td>U 19,05 4,80 2,75</td> <td>Np 20,45 5,20 2,62</td> <td>Pu 19,81 4,26 3,1</td> <td>Am 11,87 2,96 3,61</td> <td>Cm — — —</td> <td>Bk — — —</td> <td>Cf — — —</td> <td>Es — — —</td> <td>Fm — — —</td> <td>Md — — —</td> <td>No — — —</td> <td>Lw — — —</td>																		Th 11,72 3,04 3,60	Pa 15,37 4,01 3,21	U 19,05 4,80 2,75	Np 20,45 5,20 2,62	Pu 19,81 4,26 3,1	Am 11,87 2,96 3,61	Cm — — —	Bk — — —	Cf — — —	Es — — —	Fm — — —	Md — — —	No — — —	Lw — — —

**Figure 1.2.6** — Densité, concentration et distance avec le plus proche voisin, des éléments du tableau périodique.

### Exercice 1.2.1: Configuration électronique.

Un élément a moins de 18 électrons et possède 2 électrons célibataires.

1. Quelles sont les configurations électroniques possibles pour cet éléments ?  
Quel est cet élément sachant qu'il appartient
2. à la période de  ${}_3\text{Li}$
3. et au groupe de  ${}_{50}\text{Sn}$  ?

*Solution à la page 14*

**Exercice 1.2.2: Nombre quantiques et configuration électronique.** Justifier pourquoi les affirmations suivantes sont exactes ou inexactes :

1. Pour un électron d, le nombre quantique  $m$  peut être égal à 3.

2. Si  $\ell = 2$ , la sous-couche correspondante peut recevoir au plus 6 électrons.
3. Le nombre  $n$  d'un électron d'une sous-couche f peut être égal à 3.
4. Si deux *édifices atomiques* (atome neutre ou ion) ont la même configuration électronique, il s'agit forcément du même élément.
5. Si deux *édifices atomiques* ont des configurations électroniques différentes, il s'agit forcément de deux éléments différents.

*Solution à la page 14*

**Exercice 1.2.3: Composé ionique.** Un composé ionique a pour formule  $A_2B_3$ . A qui est un métal et B un métalloïde ou non métal, sont deux éléments des 2e et 3e périodes de la classification.

Quelles sont les natures possibles pour ce composé ionique ?

On suppose que la charge d'un ion est toujours entière, et que les ions sont les ions les plus stables de l'élément correspondant.

On rappelle que la règle de Sanderson stipule qu'un élément est considéré comme métallique si le nombre total d'électron de sa couche de valence est inférieur ou égal au numéro de la période auquel il appartient.

*Solution à la page 14*

## 1.2.4 Séries spectrales de l'atome d'hydrogène

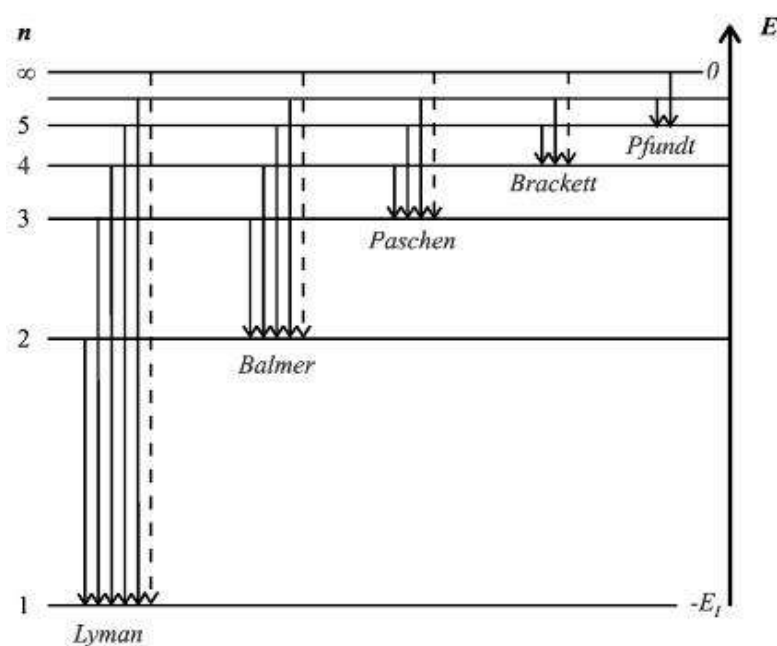


Figure 1.2.7 – Séries spectrales de l'atome d'hydrogène.

Les atomes ne sont pas nécessairement, toujours, dans leur état fondamental. Ils peuvent être dans un état excité. L'énergie interne de l'atome d'hydrogène dépend du nombre quantique



principal  $n$  qui caractérise son état électronique :

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}, \quad E_I \simeq 13.6 \text{ eV} \text{ énergie d'ionisation.} \quad (1.2.2)$$

La quantification des énergies internes des atomes se traduit par l'existence de spectres de raies (raies d'émission et raies d'absorption). Lorsqu'un atome au repos dans un état excité d'énergie  $-\frac{E_I}{n^2}$  retombe dans un état de moindre énergie  $-\frac{E_I}{p^2}$ , il émet un photon de pulsation  $\omega$ , d'énergie

$$\hbar\omega = -\frac{E_I}{n^2} + \frac{E_I}{p^2} = E_I \left( \frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (1.2.3)$$

Les raies dont la pulsation correspondent à  $p = 1$  (état fondamental) sont les raies de **Lyman**, les raies de **Balmer** correspondent à  $p = 2$  (voir la figure 1.2.7).

L'observation des séries de Lyman et de Balmer est antérieure à la compréhension de la structure énergétique de l'atome d'hydrogène. L'explication qu'en fournit le modèle de Bohr constitue une forte justification de ce modèle et des hypothèses qui le sous-tendent.

**Exercice 1.2.4:** Séries spectrales de l'atome d'hydrogène de Bohr.

1. Combien de raies différentes peuvent être émises lorsqu'un atome d'hydrogène excité au niveau  $n = 5$  retourne à l'état fondamental ?
2. Quelle est l'énergie minimale que l'on doit fournir à un atome d'hydrogène pour qu'il puisse émettre la raie  $H_\beta$  ?
3. Quelle est la valeur minimale du potentiel accélérateur qui permettra à un électron d'exciter un atome d'hydrogène dans l'état fondamental ?
4. Si un atome d'hydrogène dans son état fondamental absorbe un photon de longueur d'onde  $\lambda_1$  puis émet un photon de longueur d'onde  $\lambda_2$ , sur quel niveau l'électron se trouve-t-il après cette émission ?
  - (a)  $\lambda_1 = 97.28 \text{ nm}$  et  $\lambda_2 = 1879 \text{ nm}$ .
  - (b)  $\lambda_1 = 97.28 \text{ nm}$  et  $\lambda_2 = 78.15 \text{ nm}$ .

*Solution à la page 15*

## 1.3 Solutions des Exercices

### Solution Exercice 1.2.1 de la page 11:

#### Configuration électronique.

L'élément en question appartient à l'une des trois premières lignes de la classification périodique.

1. Comme seules les configurations  $p^2$  et  $p^4$  possèdent deux électrons célibataires, l'élément recherché peut être C ou Si pour  $p^2$ , O ou S pour  $p^4$ .
2. Puisqu'il appartient à la période du Li, c'est-à-dire à la deuxième ligne, Si et S sont éliminés.
3. La configuration de l'étain  $_{50}\text{Sn}$  étant,  $(\text{Kr})4d^{10}5s^25p^2$ , l'élément recherché est donc le carbone  $_{6}\text{C}$  ( $1s^22s^22p^2$ ).

### Solution Exercice 1.2.2 de la page 11:

#### Nombre quantiques et configuration électronique.

1. d correspond à  $\ell = 2$  et donc  $m = -2, -1, 0, 1, 2$ . FAUX
2. Si  $\ell = 2$ ,  $m = -2, -1, 0, 1, 2$ , soit 5 cases quantiques et donc 10 électrons au maximum. FAUX
3. Si  $n = 3$ ,  $\ell = 0, 1, 2$ , soit s, p, d. Pas du sous-couche f. FAUX.
4. Un ion à la même configuration électronique qu'un atome neutre d'un autre élément. FAUX
5. L'ion et l'atome neutre du même élément ont forcément des configurations électroniques différentes. FAUX

### Solution Exercice 1.2.3 de la page 12:

#### Composé ionique.

- Dans le composé ionique  $\text{A}_2\text{B}_3$ , A porte 3 charges et B porte 2 charges. On a donc les deux possibilités,  $(\text{A}^{3+}, \text{B}^{2-})$  ou  $(\text{A}^{3-}, \text{B}^{2+})$ .
- On sait que les métaux donnent des cations et les métalloïdes des anions. Ainsi, A est le cation  $\text{A}^{3+}$  et B est l'anion  $\text{B}^{2-}$ .
- Puisque A et B sont deux éléments des 2e et 3e périodes de la classification, A peut être le Bore ou l'Aluminium ; B peut être l'Oxygène ou le Soufre.
- En vertu de la règle de Sanderson, on exclu le Bore qui appartient à la 2e période et possède 3 électrons de valence. Il n'est donc pas un métal. Par contre, l'Aluminium qui possède 3 électrons de valence et appartient à la 3e période est bien un métal. Le Oxygène et le Soufre sont bien deux métalloïdes avec leurs 6 électrons de valence.
- Il nous reste donc les deux possibilités  $\text{Al}_2\text{O}_3$  et  $\text{Al}_2\text{S}_3$ .

**Solution Exercice 1.2.4 de la page 13:**

## Séries spectrales de l'atome d'hydrogène de Bohr.

1. Si  $(n_i, n_f)$  est une paire quelconque d'entiers différents compris entre  $n$  et 1 (état fondamental), il y a au moins une transition entre l'état  $n$  et l'état fondamental qui inclut la transition  $n_i \rightarrow n_f$ . Le nombre de photons est alors égal au nombre de ces paires qui est

$$\binom{n}{2} = \frac{n!}{2!(n-2)!} = \frac{n(n-1)}{2}. \quad (1.3.1)$$

On a donc  $\binom{5}{2} = 10$  raies différentes qui peuvent être émis par un atome d'hydrogène passant de l'état  $n = 5$  à l'état fondamental.

2.

3.

4. Absorption  $\frac{1}{\lambda_1} = \frac{E_I}{hc} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$  et émission  $\frac{1}{\lambda_2} = \frac{E_I}{hc} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) \Rightarrow 1 - \frac{hc}{E_I} \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right) = \frac{1}{n^2}$ .

$$(a) \quad n = \left[1 - \frac{12398 \text{ eV}\cdot\text{\AA}}{13.6 \text{ eV}} \left(\frac{1}{97.28 \text{ nm}} - \frac{1}{1879 \text{ nm}}\right)\right]^{-1/2} = 2.9960 = 3.$$

- (b) Cette transition est impossible puisque  $\lambda_2 < \lambda_1$  ou  $E_1 < E_2$ . L'atome ne peut restituer plus d'énergie qu'il n'en reçoive.

## Bibliographie

[NE 2009] Nana Engo, *Phénomènes Quantique et Applications*.

[MLB 2007] Michel Le Bellac, *Physique Quantique*, EDP Sciences, Paris