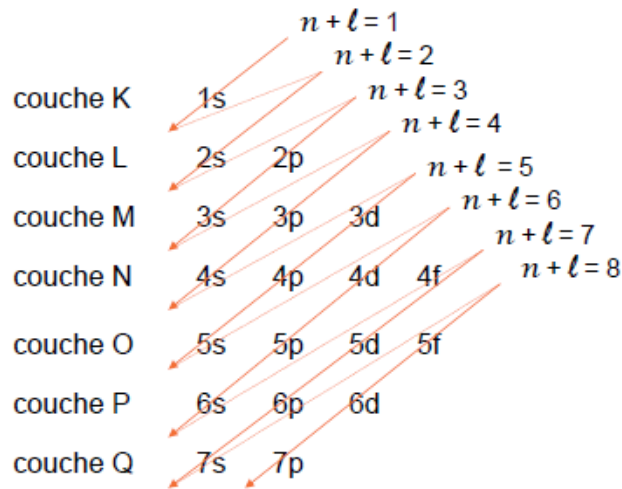


La règle de Klechkowski indique le classement énergétique des différentes sous-couches électroniques d'un atome. D'après cette règle, l'énergie des sous-couches augmente en premier lieu avec la valeur de $n + \ell$, et avec la valeur de n , à $n + \ell$ constant.



Principe d'exclusion de Pauli : deux électrons d'un même atome ne peuvent être dans le même état quantique (*ie* se voir attribuer les cinq mêmes nombres quantiques). Il s'agit d'une règle rigoureuse, sans exception aucune.

$(n, l, m_l) ; S=1/2$



m_s identique (+1/2)



2 particules possédant

5 nombres quantiques identiques

$(n, l, m_l) ; S=1/2$



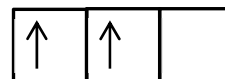
m_s différents (+1/2 et -1/2)

2 particules possédant au moins

1 nombre quantique différent



Règle de Hund : pour une sous-couche donnée, la configuration électronique de plus basse énergie est obtenue en plaçant un maximum d'électrons de même spin (même valeur de m_s) dans des orbitales différentes (*cf* Principe d'exclusion de Pauli), avant d'apparier des électrons de spins opposés (valeurs de m_s opposées).

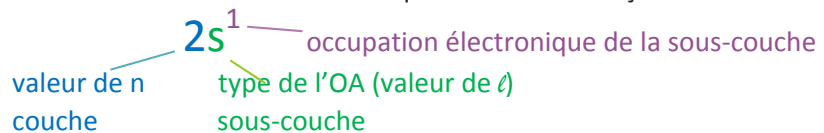


État fondamental

Afin de répartir tous les électrons d'un atome dans les différentes orbitales atomiques, celles-ci sont classées par énergie croissante et les électrons sont répartis prioritairement dans les orbitales d'énergie les plus faibles (utilisation de la règle de Klechkowski). On obtient alors la répartition électronique pour l'atome dans son état fondamental.

Configuration électronique

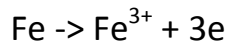
La répartition des électrons d'un atome dans les orbitales atomiques s'écrit de la façon suivante :



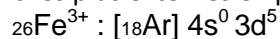
Pour les atomes ayant plusieurs couches électroniques totalement remplies, la notation peut devenir très longue. On peut alors abréger la notation en indiquant que la configuration des électrons de cœur (électrons d'une couche électronique totalement remplie, à l'exception des couches d ou f) a une configuration identique à celle du gaz rare qui précède l'élément. Le phosphore, par exemple, ne diffère du néon ($1s^2 2s^2 2p^6$) que par la présence d'une troisième couche. Donc la configuration électronique du néon est retirée, et le phosphore est noté ainsi : $[\text{Ne}]3s^2 3p^3$.

Cations et Anions

Pour établir la configuration électronique d'un atome non neutre, il faut d'abord chercher celle de l'atome neutre puis lui retirer (cations) ou lui ajouter (anions) les électrons. En effet, la règle de Klechkowski ne s'applique qu'aux atomes neutres. Par exemple, ${}_{26}\text{Fe}^{3+}$:



on retire les électrons les plus externes en premier : 4s puis 3d



et non ${}_{26}\text{Fe}^{3+} 26-3 = 23$ électrons $\Rightarrow [{}_{18}\text{Ar}] 4s^2 3d^3$
qui est la configuration électronique du Vanadium ${}_{23}\text{V}$

Exceptions

Cette approche simple par les nombres quantiques souffre néanmoins d'un certain nombre d'exceptions, en particulier parmi les métaux de transition et les lanthanides ; les règles de remplissage ne sont qu'une approximation de la mécanique quantique qui décrit les atomes.

Une sous-couche à moitié remplie conduit à une configuration de spin maximal, ce qui lui confère une certaine stabilité en vertu de la règle de Hund. Par exemple, le chrome (numéro atomique 24) a une configuration électronique $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$, et non $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$. De la même façon, le cuivre (numéro atomique 29) a une configuration électronique $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$, et non $[\text{Ar}] 3d^9 4s^2$, ce qui permet d'avoir la couche 3d pleine et la couche 4s à demi-pleine.

Généralement, les exceptions se trouvent lors que les configurations électroniques sont du type :

