

Cours 3 : La Configuration Electronique

Objectif : A la fin de ce cours vous serez capable de donner la distribution des électrons sur les orbitales atomiques en utilisant les règles de remplissage.

I- L'atome selon la mécanique quantique :

L'électron dans certaines circonstances se comporte comme une onde et dans d'autre il est considéré comme une particule.

Heisenberg a conclu qu'il est impossible de préciser la position de l'électron et son énergie si il est décrit comme une onde : est ceci est le principe d'incertitude de Heisenberg, qui annonce que : si on veut évaluer avec certaine précision l'énergie d'un électron dans un atome, il faut accepter l'idée qu'il faut calculer la probabilité de présence de cet électron dans une région déterminé de l'espace.

Ce modèle n'a pu donner que la probabilité de présence d'un électron en un point de l'espace avec une énergie bien déterminée, ce point est appelé orbitale atomique.

II- Les nombres quantiques :

Toute orbitale atomique (OA) dépend de quatre nombres quantiques notés n , l , m et s , donc, l'état d'un électron est complètement défini par l'ensemble de quatre nombres quantiques n , l , m et s .

1- Le nombre quantique principal $n : n \geq 1$

Il prend toutes les valeurs entières ($1 \rightarrow \infty$) définit la couche contenant l'électron et la taille de l'orbitale est l'énergie qui lui est associée donc en augmentant n la taille de l'orbitale augmente et l'électron s'éloigne du noyau donc l'électron sera faiblement lié au noyau. Il détermine aussi le nombre des sous-couches dans une couche.

2- Le nombre quantique secondaire (ou azimutal) $l : 0 \leq l \leq n - 1$

Dans la même couche les électrons peuvent être regroupés dans des sous-couches, l caractérise ces sous-couches. Il définit la forme de l'orbitale (figure 1) tels que :

- $l=0$: l'orbitale est de type s qui correspond à une sphère centrée sur le noyau de l'atome considéré,
- $l=1$: l'orbitale est de type p dont le noyau se situe à l'intersection des deux lobes.
- $l=2$: l'orbitale est de type d qui comporte le plus souvent quatre lobes, le noyau se situe à nouveau au centre de l'agrégat

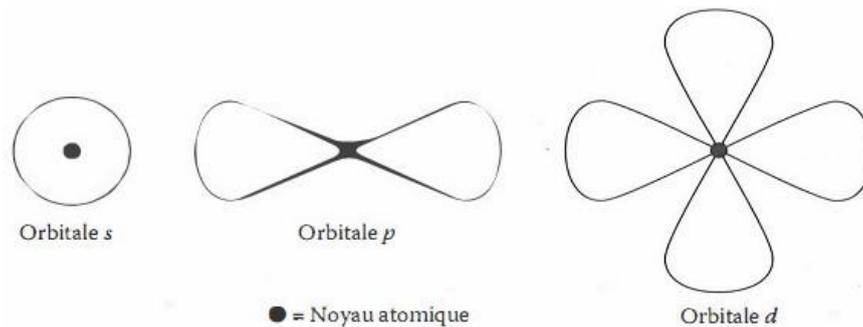


Figure 1 : Formes des trois orbitales s, p et d.

3- Le nombre quantique magnétique m : $-l \leq m \leq +l$

Il détermine l'orientation spatiale des orbitales, la figure 2 présente les trois orbitales p, ils sont disposées de manière orthogonale entre elles, c'est-à-dire qu'elles s'étendent selon les axes x, y et z.

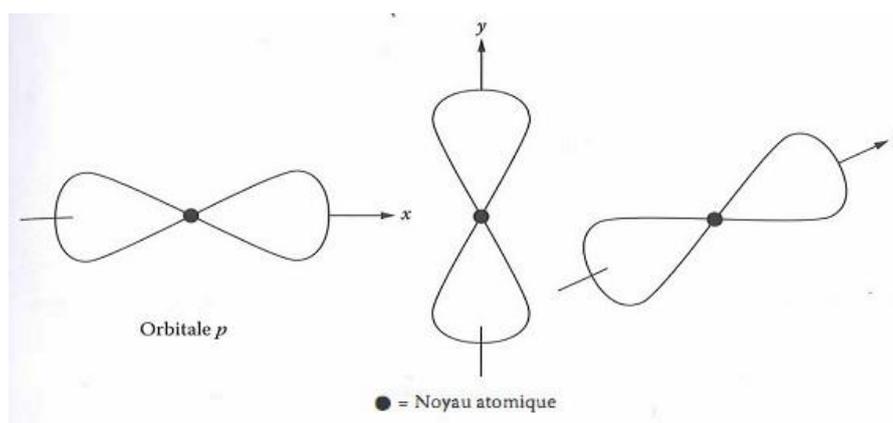


Figure 2 : les orientations des orbitales p

Il détermine aussi le nombre d'orbitales dans une sous-couche.

4- Le nombre quantique (magnétique) de spin s ou m_s : $m_s = \pm 1/2$

Les électrons présentent une caractéristique particulière, en l'occurrence un spin, c'est-à-dire qu'ils peuvent tourner sur eux. Lorsque deux électrons sont présents dans une orbitale, leurs spins doivent être appariés, en ce sens que l'un tourne dans le sens des aiguilles d'une montre et l'autre dans le sens inverse.

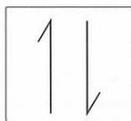


Figure 3 : la présence de deux électrons dans une orbitale.

L'une des flèches pointe vers le haut et l'autre vers le bas (le sens de la flèche représente le sens de rotation de l'électron sur lui-même).

Les quatre nombres quantiques (n , l , m et s) identifient un électron comme une adresse de sorte que deux électrons ne peuvent jamais avoir les mêmes quatre nombres quantiques à la fois. L'électron vit dans un bâtiment, dans un étage (une couche n), dans un appartement (une sous-couche l) de cet étage et il est assis dans une pièce ou chambre (l'orbitale atomique désignée par m) de cet appartement.

Remarque : Dans une couche n donnée on a :

- on a n sous-couches.
- n^2 orbitales atomiques.
- n types d'orbitales atomiques.
- $2n^2$ électrons.
- $2l+1$ désigne le nombre d'orbitale dans une sous-couche.

Le tableau suivant présente les combinaisons permises pour les trois nombres quantiques (n , l et m).

| n 1, 2, 3, 4,...,n n=nombre des sous-couches | l 0,1, 2, 3....., (n- 1) | m -l,,0,....+l | Nombre d'OA dans la couche= n² Nombre d'OA dans la sous- couche = 2l+1 |
|---|---|---|--|
| 1 | 0 | 0 | Une OA 1s (une OA d'un seul type pour =1) |
| 2 | 0 1 | 0 -1, 0, +1 | Une OA 2s Trois OA 2p ($2p_x, 2p_y, 2p_z$) (pou n=2 on a ($2^2 = 4$) quatre OA de deux types) |
| 3 | 0 1 2 | 0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 | Une OA 3s Trois OA 3p ($3p_x, 3p_y, 3p_z$) Cinq OA 3d (pou n=3 on a ($3^2 = 9$) neuf OA de 3 types) |
| 4 | 0 1 2 3 | 0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3 | Une OA 4s Trois OA 4p ($4p_x, 4p_y, 4p_z$) Cinq OA 4d 7 OA 4f (pou n=4 on a ($4^2 = 16$) seize OA de quatre types) |

Les niveaux d'énergie supérieurs se traduisent par une réactivité accrue, de sorte que seule cette couche externe d'électrons intervient dans les réactions biochimiques ou chimiques.

Exp :

Si le nombre quantique principal n est de 5, donner le nombre et le type des sous-couches, le nombre et le type des orbitales, le nombre des électrons et l'expression des sous-couches.

Pour $n=5$ on a :

$0 \leq l \leq 5 - 1$, donc l prends les valeurs (0, 1, 2, 3, 4) , donc

on 5 sous-couches 0, 1, 2, 3, 4 respectivement de type s, p, d, f et g.

On dit qu'on est dans la couche 5 et on a 5 sous-couches : 5s, 5p, 5d, 5f, 5g.

et on $5^2= 25$ OA : un orbitale de type 5s, 3 OA de type 5p, 5 OA de type 5d, 7 OA de type 5f et 9 OA de type 5g.

Ces OA peuvent héberger $2 \times 5^2=50$ électrons.

Remarque :

Les chimistes ont mis l'hypothèse que les OA des autres atomes ou mêmes les molécules ressemblent à celles de l'atome d'hydrogène, ils ont trouvé que c'est l'hypothèse la plus convenable et pratique pour expliquer la forme des OA.

III- Principes régissant la structure électronique d'un atome :

a- Définition de la configuration électronique :

La configuration électronique est la répartition des électrons au sein des différentes orbitales atomiques en respectant des règles bien précises, nommés les règles de remplissage.

b- Les notations utilisées pour la configuration électronique:

Pour donner la configuration électronique d'un élément on utilise deux types de notations :

- **La notation par des cases quantiques :** Ici les sous-couches sont représentés par des cases aussi appelés les chambres quantiques, et l'électron est représenté par une flèche up \uparrow si l'électron a le nombre de spin $s = +\frac{1}{2}$ et une flèche down \downarrow si l'électron a un nombre de spin $s = -\frac{1}{2}$.

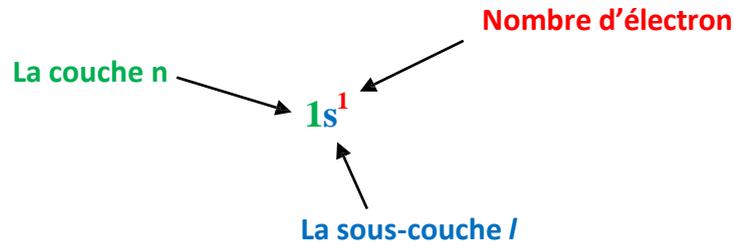
Pour l'orbitale de type s on a une case

Pour l'orbitale de type p on a trois cases

Pour l'orbitale de type d on a cinq cases

Pour l'orbitale de type f on a 7 cases

- **La notation spdf** : pour l'hydrogène qui a un seul électron, elle s'écrit sous la forme $1s^1$, qu'on lit **un s un**.



- c- Les règles de remplissage des électrons dans les cases quantiques (chambres électroniques) :

Ces règles ont été élaborés pour faciliter la distribution des électrons dans les orbitales atomiques et leurs représentation schématique.

L'énergie de l'atome d'hydrogène ayant un seul électron, dépend seulement de la valeur de n , tandis que, pour les atomes qui ont plus d'un électron l'énergie dépend de n et l . par exemple : pour la couche $n=3$, les sous-couches n'ont pas la même énergie, l'énergie de l'orbitale $3s$ est inférieure à celle de l'orbitale $3p$, et l'énergie de cette dernière est inférieure à celle du $3d$. donc : $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < \dots$

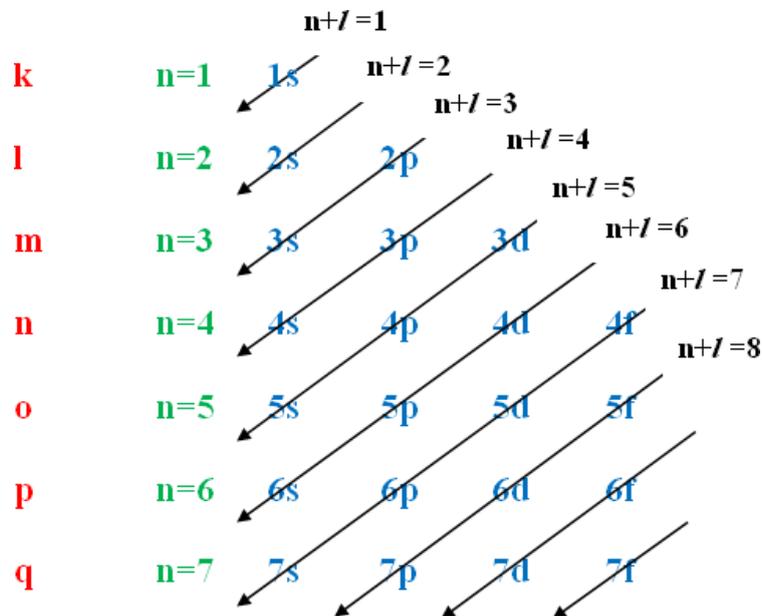
1- La règle de Kleshcowsky :

Dans la règle de klechkowsky, le remplissage des OA obéit à :

- Les électrons sont assignés aux sous-couches par ordre croissant de la valeur $(n+l)$.
- Lorsque deux sous-couches ont la même valeur $(n+l)$ on remplit en premier la sous-couche ayant la faible n .

Par exemple : on remplit la sous-couche $2s$ ($n+l = 2+0 = 2$) avant la sous-couche $2p$ ($n+l = 2+1 = 3$).

Pour bien retenir le remplissage, on suit le schéma suivant qui présente d'une manière simple la règle de Klechkowsky :



Chaque ligne correspond a une valeur de la couche n, contenant les valeurs de l possibles (type d'orbitale). Le remplissage se fait selon les flèches et l'énergie totale de l'atome doit être la plus basse possible.

Exp : ${}_2\text{He}$: on remplit la sous-couche 1s avant de passer à 2s, le remplissage sera comme suit : $1s^2$ et non $1s^1 1s^1$

2- Règle de Hund :

D'après le principe de Hund, nous devons occuper le maximum des OA par des électrons non appariés du même spin avant d'ajouter le 2^{ème} électron de spin opposé :



3- Règle d'exclusion de Pauli :

En 1925, le physicien autrichien wolfgang Pauli a énoncé son principe d'exclusion : **Dans un atome, deux électrons ne peuvent pas posséder le même état quantique**, c'est-à-dire, ils ne peuvent pas avoir le même ensemble des nombres quantiques (n, l, m et s). Donc une case quantique (OA) ne peut contenir que deux électrons ayants des spins opposés.

d- La différence entre la configuration électronique et le cortège électronique :

Dans un cortège électronique, les sous-couches sont écrites par ordre croissant d'énergie en suivant le schéma de Klechkowsky.

Par contre, dans la configuration électronique on écrit les sous-couches par ordre croissant de n.

Exp : pour le ${}_{26}\text{Fe}$: le cortège électronique: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

La configuration électronique est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

On peut abrégé une configuration électronique d'un élément en remplaçant la série des sous-couches qui correspond à celle du gaz rare, celui qui précède cet élément.

Exps :



Cette présentation nous permet de séparer les électrons en deux catégories distinctes : **les électrons internes** de l'atome, qui ne participent pas dans la réactivité de l'atome (dans la formation des liaisons), et les électrons de la **couche périphérique** ou bien nommés **les électrons de valence**.