

## Partie 2 du chapitre 4

11/05/2020

### Atomes à plusieurs électrons

#### • Configuration électronique:

La configuration électronique d'un atome est une notation symbolisée qui résume la distribution de ses électrons. Elle est déterminée par les règles suivantes:

#### a. Convention de représentation:

Une orbitale atomique est symbolisée par une case quantique. Les cases quantiques correspondantes à une même sous-couche électronique ( $n, l$ ) sont collées.

$l$	0	1	2
$m_l$	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2
$n=1$	□		
$n=2$	□	□ □	
$n=3$	□	□ □	□ □ □

↑  
s orbitale      p orbitale      d orbitale

• s: 1 case quantique

• p: 3 cases quantiques

• d: 5 cases quantiques

• f: 7 cases quantiques

• Un électron est représenté par

une flèche:  $\uparrow$

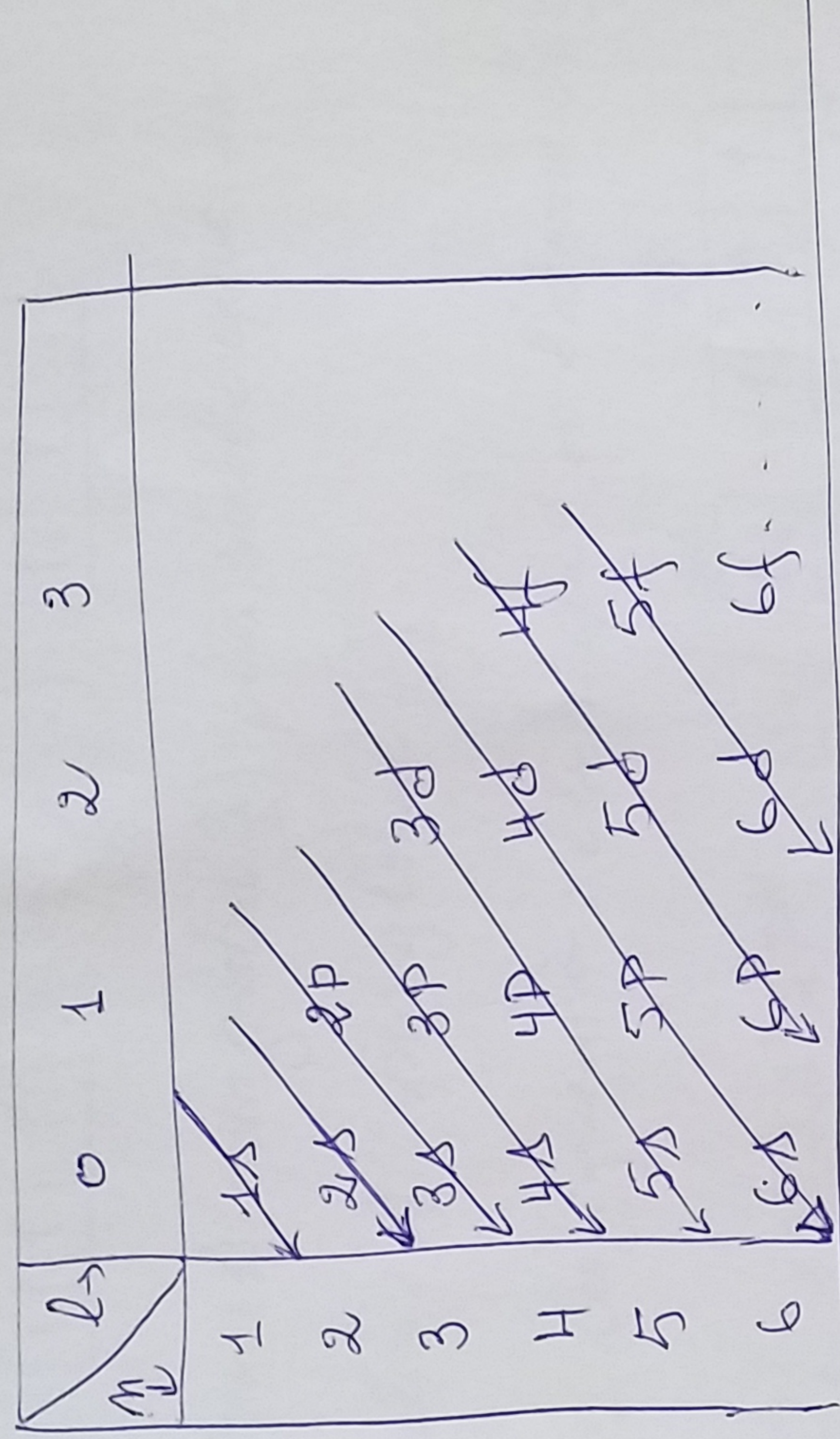
$m_s = +\frac{1}{2}$ : flèche vers haut

$m_s = -\frac{1}{2}$ : flèche vers le bas

#### b. Règles de remplissage (Klechkowski)

Le remplissage des orbitales s'effectue selon les valeurs de  $(n+l)$  croissant.

Si 2 valeurs de  $(m, l)$  égales, le remplissage de la case ayant la valeur de  $n$  la plus faible est prioritaire. c'est la règle d'aufbau et de Klechkowski.



$\Rightarrow$  1s, 2s, 2p, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s,

### c. Principe d'exclusion de Pauli (1900-1958)

Ce principe est purement empirique, il n'a aucune base en mécanique quantique, il justifie seulement les résultats expérimentaux. Chaque orbitale définie par  $n, l$  et  $m_l$  ne peut recevoir que deux électrons dont les spins sont antiparallèles  $\uparrow \downarrow$ . Le nombre maximum d'électrons sur une couche de rang  $n$  est donc  $2n^2$ .

### d. Règle de Hund:

Dans le cas où une sous-couche est incomplète, les électrons

se disposent de manière à maximiser le maximum d'états à spins parallèles.

Exemple 1: On a deux configurations

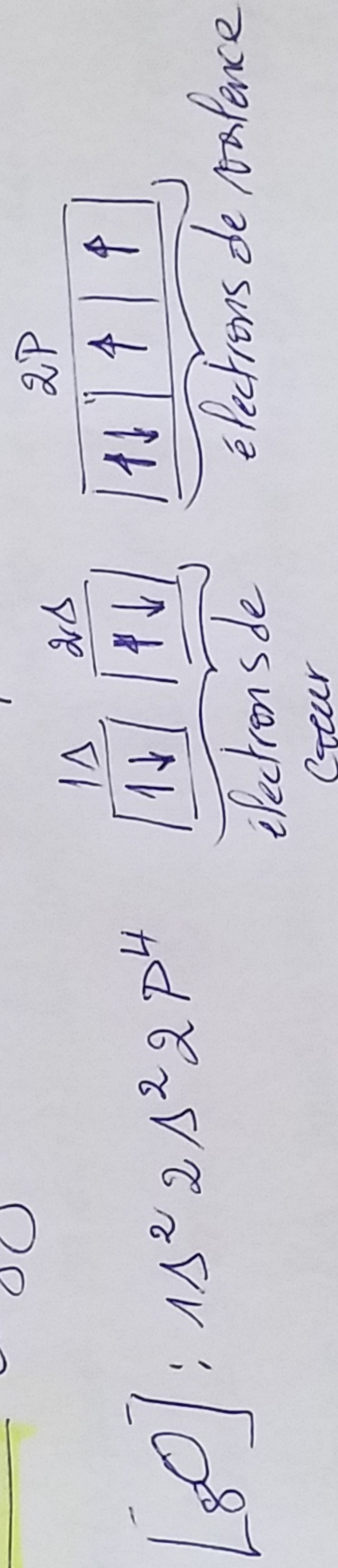


Configuration 1) (spin global  $\frac{3}{2}$ ) plus stable que la

Configuration 2) (spin global  $\frac{1}{2}$ ).

Exemple 2: Configuration électronique de l'atome d'oxygène

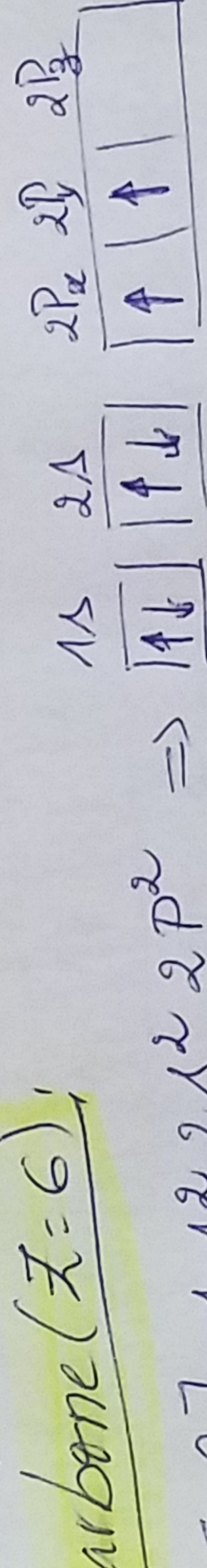
( $Z=8$ )



Électrons de valence: électrons de couches de nombre quantique principal  $n$  le plus élevé et des sous-couches  $(n-1)d$  et  $(n-2)f$  non saturées.

Quelques exceptions:

• Carbone ( $Z=6$ ):

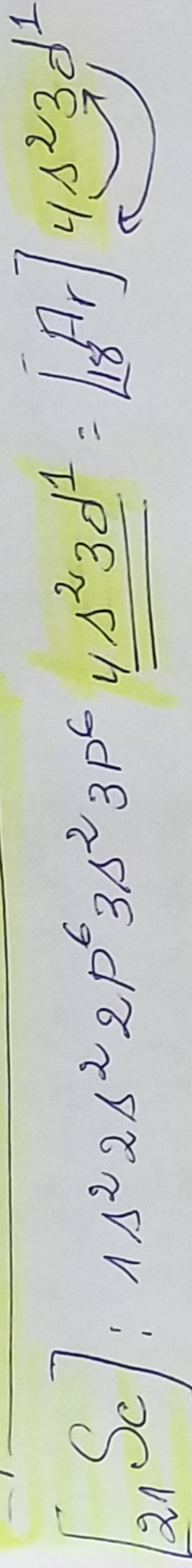


D'après cette configuration, le carbone possède 2 paires d'électrons appariés (doublets liants) et 2 électrons célibataires pouvant

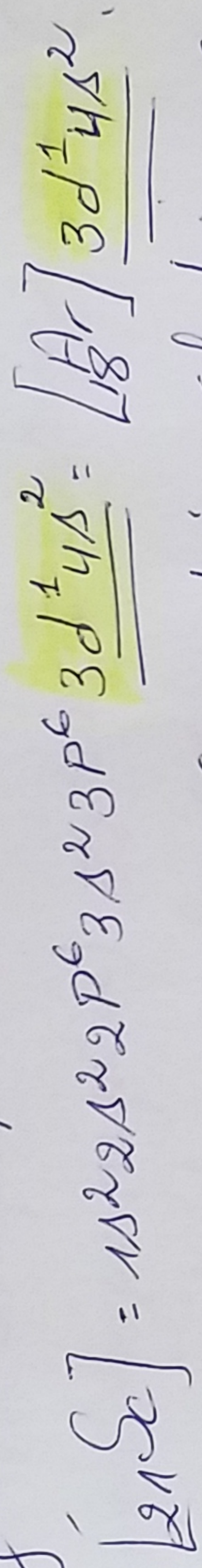
(8)

être engagés des liaisons covalentes.

• A partir du Scandium ( $Z=21$ ):



La règle de Klechkowski etasse les orbitales "vides" par ordre d'énergie croissante mais une fois occupées, leur énergie varie  $\rightarrow$  permutations des orbitales ( $n-1$ )d et ns

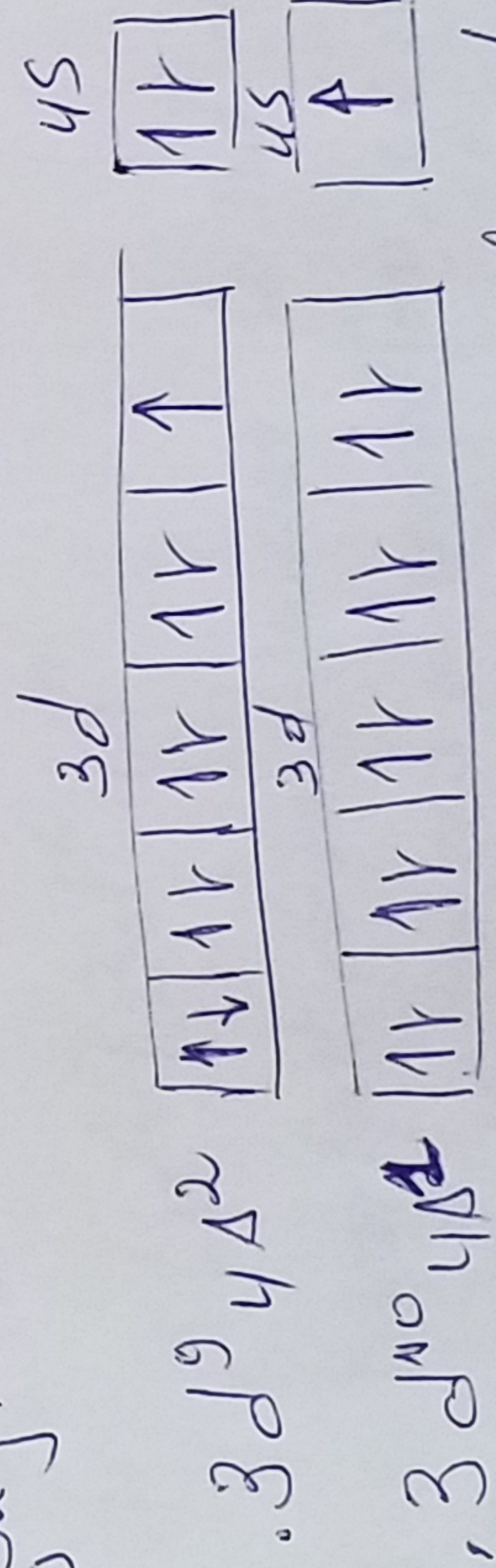
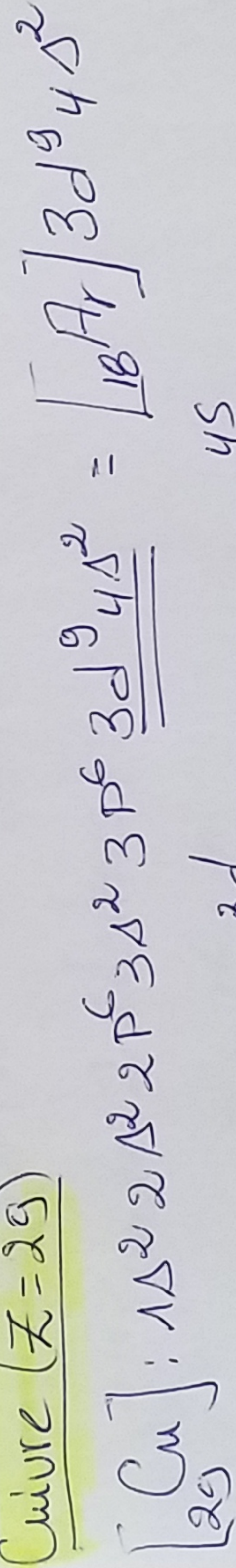


En pratique, on écrit la configuration électronique

dans l'ordre donné par la règle de Klechkowski, puis on regroupe les sous-couches de même nombre quantique

n.

Cuivre ( $Z=29$ )



, configuration  $3d^{10} 4s^1$  est plus stable que  $3d^9 4s^2$   
car la couche 3d est saturée:  $[\text{Cu}] = [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$

De façon générale:

- $(n-1)d^4 ns^2 \rightarrow (n-1)d^5 ns^1$  semi-remplissage (chrome  $Z=24$ )
- $(n-1)d^9 ns^2 \rightarrow (n-1)d^{10} ns^1$  remplissage total (couche saturée).

### • Configuration électronique des ions:

Il faut déjà écrire la configuration électronique de l'atome, puis celle de l'ion en enlevant ou rajoutant le nombre d'électrons adéquat.

- Anion (charge négative): on place les électrons supplémentaires selon les règles de remplissage.
- Cation (charge positive): on enlève les électrons les plus externes.

Exemple: ion  $Fe^{2+}$

Atome de Fer ( $Z=26$ ):  $[Ar] 3d^6 4s^2$

ion  $Fe^{2+}$  (perde 2 électrons):

$[Ar] 3d^6 4s^0$

Il est important de bien inverser les 3d et 4s après remplissage, car en cas d'ionisation, ce sont les électrons 4s qui sont arrachés en premier.

• Diamagnétisme et paramagnétisme:

a) Lorsque tous les électrons d'un atome sont appariés, les moments de spins se compensent. L'atome ne possède pas de moment de spin intrinsèque.  $\sum m_s = 0$

$\Rightarrow$  l'atome est diamagnétisme

b) Lorsque tous les électrons d'un atome ne sont pas appariés, le moment magnétique total est différent de zéro.  $\Rightarrow$  l'atome est paramagnétique.

$\sum m_s \neq 0$

Exemple:

• Magnésium ( $Z=12$ ):  $[12g]$ :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ 

$1s$	$2s$	$2p$	$3s$
↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓

  
diamagnétique.

• Phosphore ( $Z=15$ ):  $[15Ph]$ :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ 

$1s$	$2s$	$2p$
↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓

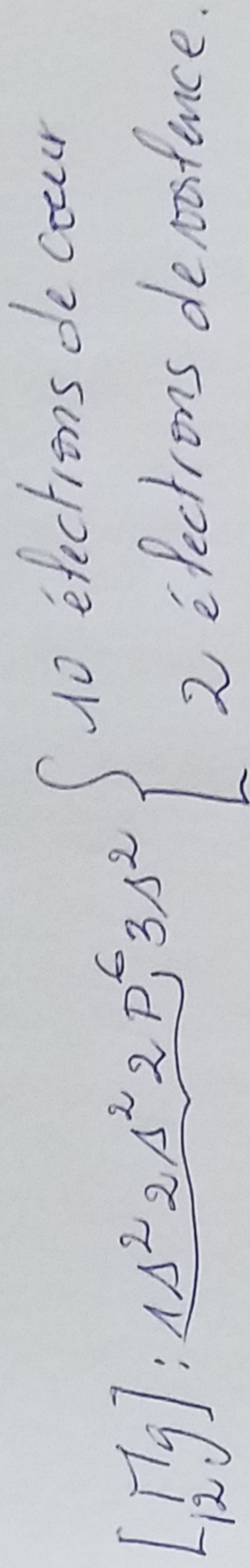
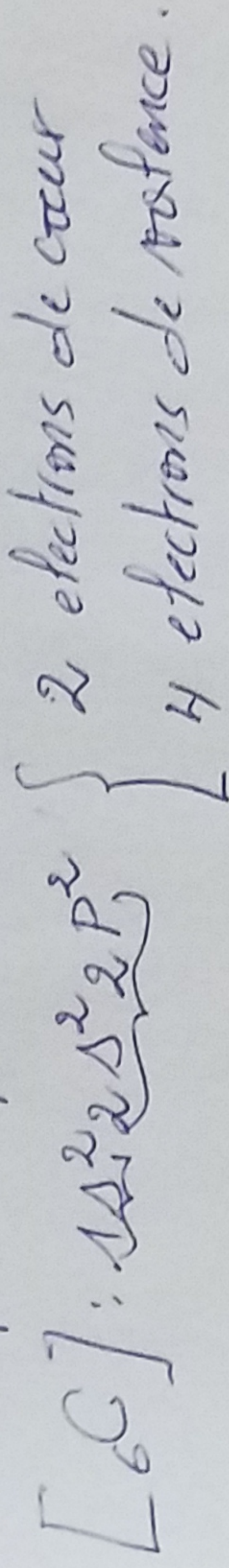
$3s$	$3p$
↑↓	↑ ↑ ↑

Paramagnétique.

• Électrons de cœur, électrons de valence:

Il faut distinguer les électrons qui occupent les OA d'énergie les plus basses (électrons de cœur) de ceux qui occupent les OA d'énergie les plus hautes (électrons de valence). Le plus souvent, les électrons de valence sont ceux qui ont le

nombre quantique principal le plus grand.



Notation :

Dans la configuration électronique, on remplace souvent l'ensemble des électrons de cœur par le symbole du gaz rare qui possède ce nombre d'électrons.

