

Chapitre III : La configuration électronique des atomes

Contenu de la matière

1. Chimie générale

1.1. Généralité :

1.1.1. Atome, noyau, isotopie,

1.1.2. Stabilité et cohésion du noyau, énergie de liaison par nucléon,...

1.2. Radioactivité :

1.2.1. Définition

1.2.2. Radioactivité naturelle : principaux types de rayonnement

1.2.3. Radioactivité artificielle

1.2.4. Loi de désintégration radioactive

1.2.5. Différent types de réaction nucléaire

1.3. Configuration électronique des atomes

1.3.1. Introduction des nombres quantiques

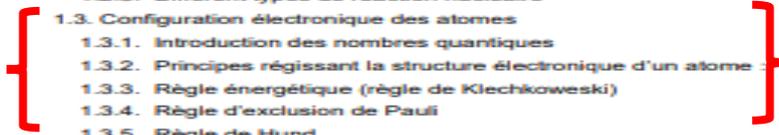
1.3.2. Principes régissant la structure électronique d'un atome :

1.3.3. Règle énergétique (règle de Klechkowski)

1.3.4. Règle d'exclusion de Pauli

1.3.5. Règle de Hund

1.4. Classification périodique :



Un électron a des valeurs de $n=2$ et $l=1$. Dans combien d'orbitales différentes cet électron pourrait-il se trouver ? **3**

Nombres quantiques : des valeurs qui peuvent être utilisées pour décrire entièrement un électron dans un atome.

Nombre quantique principal, n
 $n = 1; 2; 3 \dots$

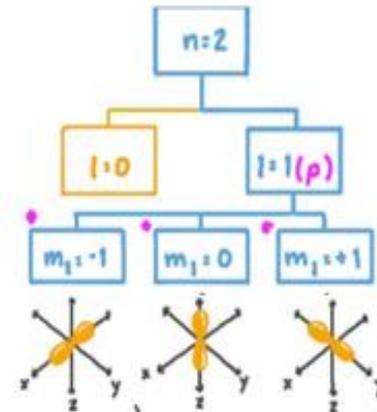
Couche
(taille)

Nombre quantique secondaire, l
 $l = 0 \dots n-1$

sous-couche
(forme)

Nombre quantique magnétique, m_l
 $m_l = -1 \dots 0 \dots +1$

orbitale
(orientation)



Le spin (S)

$S = -1/2$, $S = +1/2$

Année universitaire : 2024-2025

Dr : ZAABAT . N

Chapitre III : La configuration électronique des atomes

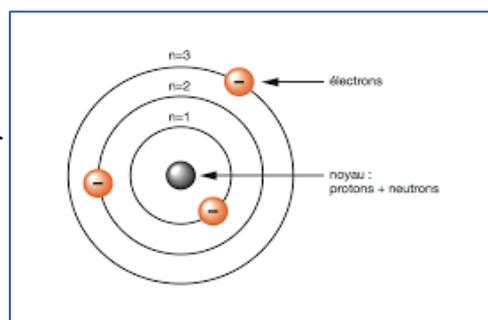
1-Introduction

Après la découverte expérimentalement des particules chargées négativement appelées les électrons en 1897 par Thomson. Bohr en 1913 a proposé un modèle atomique

en cherchant à comprendre la constitution d'un atome.

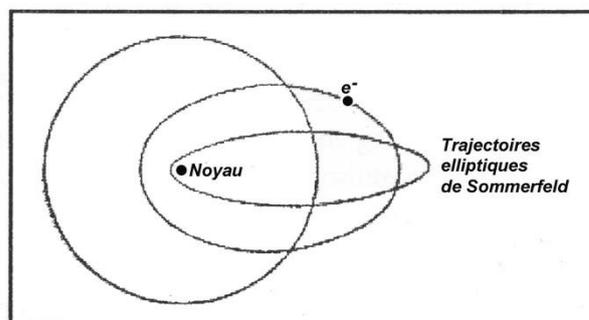
Ce modèle repose sur l'hypothèse que l'électron tourne autour du noyau sur des orbites circulaires. L'énergie E sur une orbite est constante. Ce modèle fait intervenir un seul paramètre : le nombre quantique principal n qui peut prendre les valeurs $n=1, 2, \dots, \infty$.

La valeur $n=1$ correspond à l'orbite de plus basse énergie.



En 1916 Sommerfeld a développé un modèle atomique dans lequel l'électron tourne autour du noyau sur des orbites elliptiques.

Ce modèle fait intervenir quatre nombres appelés nombres quantiques qui caractérisent l'état d'un électron qui sont : n, ℓ, m, s .



2-Les nombres quantiques

2-a-Le nombre quantique principal n

Le nombre quantique principal, noté n représente une couche électronique et détermine le niveau principal d'énergie E_n de l'atome. n peut prendre des valeurs entières égales ou supérieures à 1 ($n \in \mathbb{N}^*$) c'est-à-dire : $n=1, 2, 3, 4, \dots$ etc.

Plus la valeur de n sera grande, plus l'énergie de l'électron sera grande. Généralement, les couches électroniques sont désignées par une lettre majuscule : K, L, M, \dots

n	1	2	3	4	5	6	7
Couche électronique	K	L	M	N	O	P	Q

2-b- Le nombre quantique secondaire (ou azimutal) « ℓ »

Le nombre quantique secondaire, noté ℓ (lettre L minuscule (ℓ)) représente une sous couche électronique. ℓ peut prendre des valeurs entières positives comprises entre 0 et $n-1$:

$0 \leq \ell \leq n-1$. Chaque valeur de ℓ est représentée par une lettre qui détermine une forme géométrique spécifique pour chaque sous couche.

ℓ	0	1	2	3
Lettre	s	p	d	f

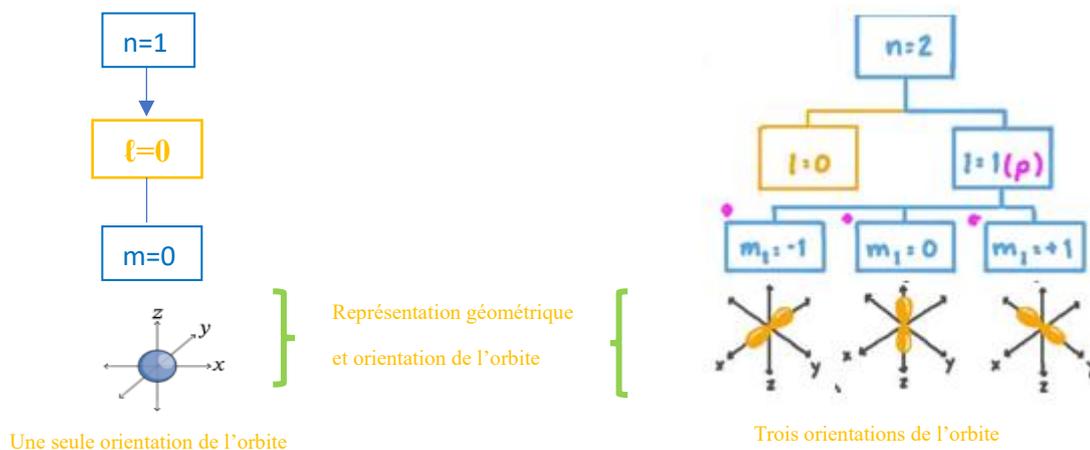
2-c- Le nombre quantique magnétique « m »

Le nombre quantique magnétique « m » caractérise les différentes possibilités d'orientation spatiale des orbites d'une même sous-couche et prend toutes les valeurs comprises entre $-\ell$ et $+\ell$: $-\ell \leq m \leq +\ell$. Le nombre des orientations possibles (valeurs de m) est $(2\ell + 1)$

Exemple :

$\ell = 0$: $m = 0$ une (1) seule orientation

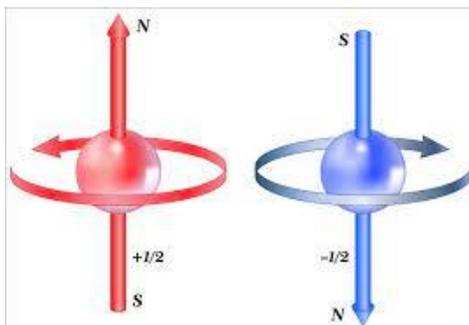
$\ell = 1$: $m = -1 ; 0 ; +1$ trois (3) orientations



2-d- Le Spin

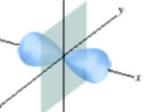
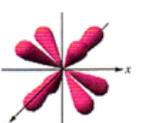
Le spin noté s est une caractéristique quantique des particules liées à leurs propriétés de rotation. Il définit la rotation de l'électron sur lui-même.

Ce nombre peut prendre deux valeurs : $s = +\frac{1}{2}$ (rotation vers le haut \uparrow), $s = -\frac{1}{2}$ (rotation vers le bas \downarrow).



Dans le modèle atomique de la mécanique quantique l'orbite est remplacé par l'orbitale atomique (O.A): région de l'espace où l'électron a le plus de chance de se trouver.

→ Une orbitale atomique est définie par $n ; l ; m$

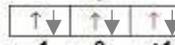
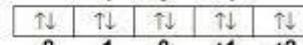
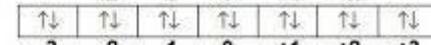
	Nombre quantique principal n			Nombre quantique secondaire l		Nombre quantique magnétique m_l		
Valeurs permises	$n = 1, 2, 3, \dots$			$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$		$m = -l, \dots, 0, \dots, +l$		
Détermine...	Le niveau énergétique et la taille des orbitales			La forme des orbitales		L'orientation des orbitales		
Caractérise ...	Un niveau électronique			Un sous-niveau électronique		L'orbitale d'un sous-niveau		
	Valeur de n	Énergie	Proximité du noyau	Valeur de l	Identification du sous-niveau	Type d'orbitale	Valeurs de m_l	Nombre d'orbitales
1	+ basse	+ près	...	0	s		$l = 0$ $m_l = 0$	1 orbitale s
2								
3								
4								
5								
...	+ élevée	+ éloignée	1	p		$l = 1$ $m_l = -1, 0, +1$	3 orbitales p	
2	d		$l = 2$ $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$	5 orbitales d				
3	f		$l = 3$ $m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7 orbitales f				

- Un schéma plus visuel a été établi pour représenter les orbitales atomiques, il s'agit d'une case quantique (lacune ou case vide) :  → Une orbitale atomique (O A)
- Chaque valeur de m correspond à une OA ⇒ représenté par une case quantique
- D'une façon générale, pour une couche n donnée, on aura n sous-couches et $2n^2$ électrons au maximum

Dans une orbitale atomique, on ne peut pas mettre plus de deux électrons, les électrons qui possèdent les mêmes nombre quantiques (n, ℓ , m) se trouvent dans la même case quantique.

Sous couche (ℓ)	0	1	2	3
Type d'orbitale	S	P	d	f
m	0	-1, 0, +1	-2, -1, 0, +1, +2	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3
Nombre d'orbitales	1	3	5	7
Cases quantiques				
Nombre maximum d'électrons	2	6	10	14

Pour une valeur de ℓ , il y a $(2\ell+1)$ case $\Rightarrow 2(2\ell+1)$ électrons

$l = 0$	s		2 électrons au maximum
$l = 1$	p		6 électrons au maximum
$l = 2$	d		10 électrons au maximum
$l = 3$	f		14 électrons au maximum

Une case quantique ne peut contenir au maximum que 2 électrons de spin opposés tel que :

\rightarrow Un électron célibataire est un électron seul dans une case quantique : 

\rightarrow Electrons appariés (doublet électronique) : Ce sont deux électrons dans une même case quantique (même orbitale) ne diffèrent que par leur nombre quantique s (un électron avec $s = +1/2$ et l'autre avec $s = -1/2$) :  (case pleine ou saturée)

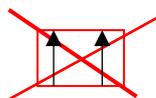
Pour donner une structure électronique d'un atome il faut répartir les électrons dans diverses couches et sous couches (sur les orbitales atomiques). Il faut respecter les règles suivantes :

3-a-Le principe d'exclusion de Pauli :

Deux électrons d'un même atome ne peuvent pas avoir les quatre nombres quantiques identiques (n ; ℓ ; m ; s). Si n ; ℓ ; m sont identiques alors s sera différent. Il peut y avoir au maximum deux électrons par orbitale différent chacun par leur spin (+1/2 pour le premier électron et - 1/2 pour le second).



Wolfgang Pauli



⊘ 2 électrons possédant 4 nombres quantiques (n ; ℓ ; m ; s) identiques



👉 Les 3 nombres quantiques n ; ℓ ; m des deux électrons sont identiques alors que le nombre quantique s est différent.

$s=+1/2$ et $s=-1/2$

Exemple : $n=1$ (couche K, peut contenir 2 électrons)

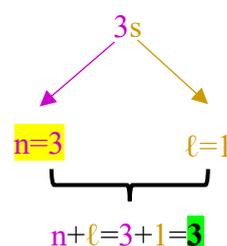
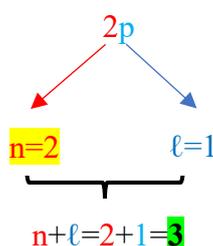
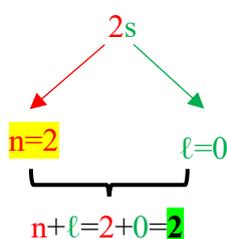
Les 4 nombres quantiques du 1er électron : $n=1$, $\ell=0$, $m=0$, $s=+1/2$

Les 4 nombres quantiques du 2ème électron : $n=1$, $\ell=0$, $m=0$, $s=-1/2$

3-b-La règle de Klechkowski (principe de stabilité):

Cette règle porte le nom du chimiste russe **Vsevolod Kletchkowski**. Également appelée **règle de Madelung**. Constitue l'un des outils de base qui décrit l'ordre de répartition des électrons dans les différentes orbitales atomiques (sous couches) par **la valeur croissante de $(n + \ell)$** . Si deux orbitales ont la **même valeur de $(n + \ell)$** la répartition se fait selon **la valeur croissante de n** (l'orbitale atomique qui possède la valeur la plus petite de n qui se remplit en premier) .

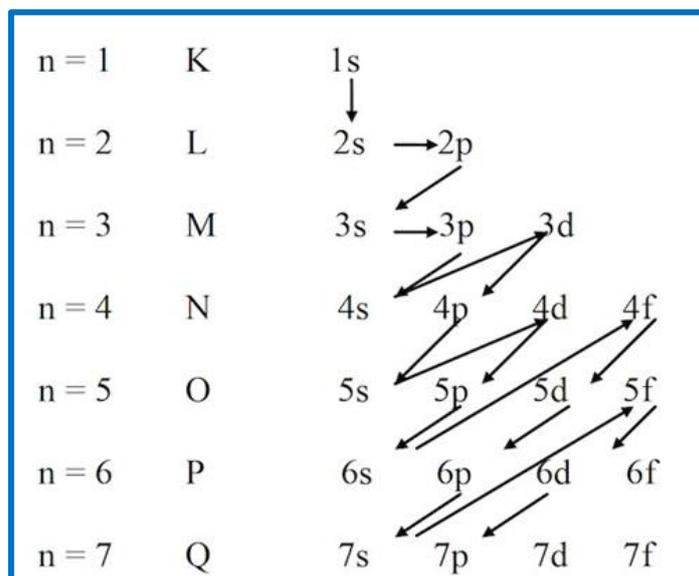
Exemple : l'ordre de remplissage des orbitales 2s, 2p et 3s :



Selon la valeur croissante de $(n + \ell)$ entre 2s , 2p: le remplissage débute par l'orbitale 2s puis l'orbitale 2p

Concernant l'ordre de remplissage des orbitales 2p , 3s (**même valeur de $(n + \ell)$**) se fait selon la valeur croissante de n ($n=2$ pour 2p et $n=3$ pour 3s) c'est-à-dire l'orbitale atomique ayant la plus petite valeur de n est remplie en premier.

L'ordre de remplissage selon la règle de Klechkowski est représenté dans le schéma ci-dessous :



Représentation schématique de la règle de Klechkowski

L'énergie (E) des orbitales atomiques (OA) augmente avec $(n + l)$. C'est-à-dire à l'état fondamental les électrons vont commencer par occuper les niveaux d'énergie les plus bas (la plus petite valeur de $(n+l)$) d'où une stabilité maximale, le niveau le plus bas (couche K de $n=1$). Si deux orbitales possèdent la même valeur de $(n+l)$, l'orbitale avec la plus petite valeur de n , possède l'énergie la plus basse.

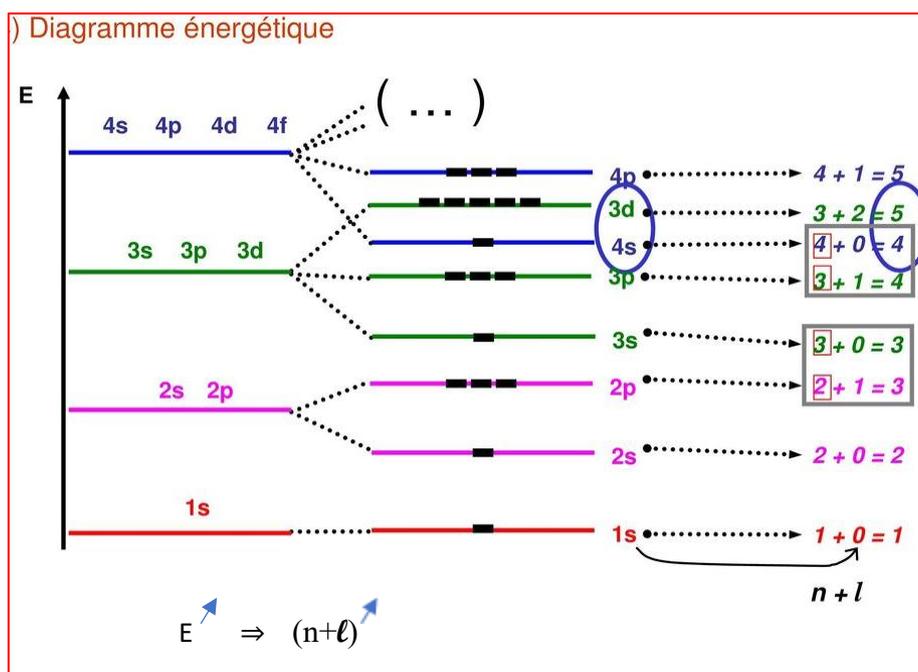
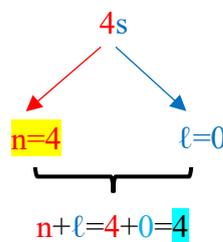
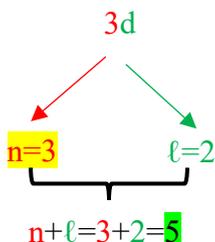


Diagramme des niveaux énergétiques d'un atome

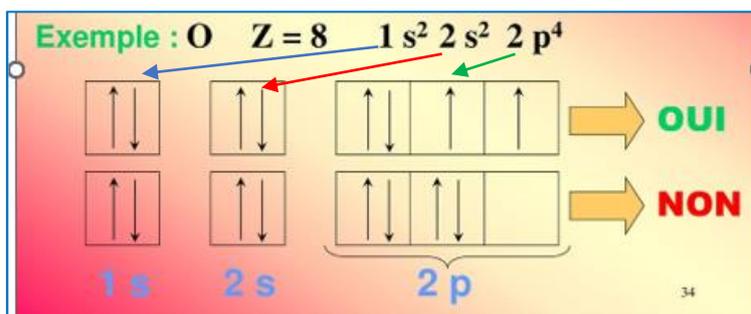
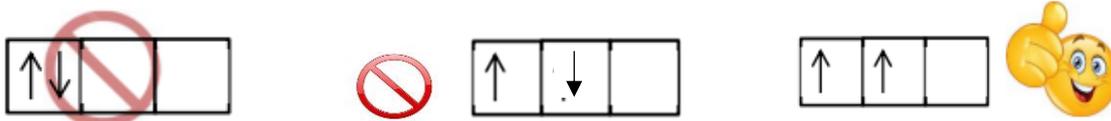
Exemple

$E_{3d} > E_{4s}$ puisque $(n+l)_{3d} > (n+l)_{4s}$



3-c-Règle de Hund

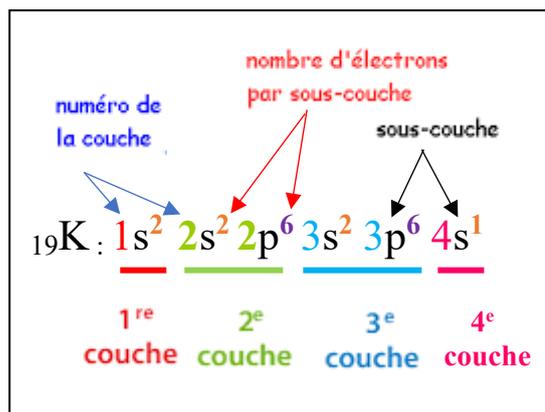
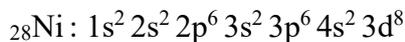
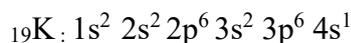
Appelée aussi ‘règle de multiplicité maximale’. Lorsque plusieurs orbitales atomiques « dégénérées » (les orbitales atomiques d’une même sous couche ont la même énergie) exemple : p_x ; p_y ; p_z , les électrons se répartissent successivement, avec le même spin dans chacune des orbitales jusqu’à ce que toutes les orbitales possèdent un électron avant de placer un deuxième électron, de spin opposé, dans une même orbitale.



4-Le cortège électronique

La distribution des électrons se fait selon la règle de Klechkowski
(la valeur croissante de $(n+l)$)

Exemple



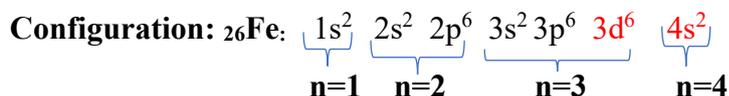
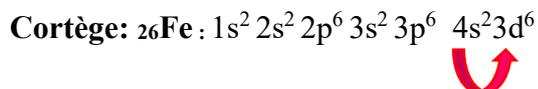
5-La configuration électronique

La répartition des électrons se fait selon la valeur croissante de n
(à partir de la valeur la plus petite de n jusqu'à la valeur la plus grande de n)

Les éléments qui possèdent $Z \leq 20$ le cortège = la configuration

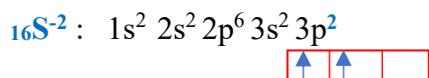
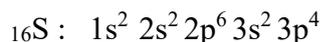
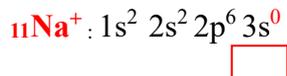
Exemple :

Donner le cortège et la configuration de l'élément ${}_{26}\text{Fe}$



Ionisation d'un atome :

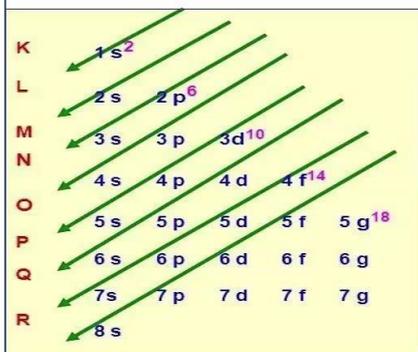
Il peut y avoir ionisation d'un atome par perte d'un ou plusieurs électrons pour former des cations (X^+), il peut aussi s'ioniser en gagnant des électrons pour compléter sa dernière couche pour former un anion (X^-).



Exemple 2 : établir la configuration électronique de l'élément de $Z = 37$

Ordre de remplissage selon Klechkowski | Cortège

$1 s^2, 2 s^2, 2 p^6, 3 s^2, 3 p^6, 4 s^2, 3 d^{10}, 4 p^6, 5 s^1$



Configuration

$1 s^2, 2 s^2, 2 p^6, 3 s^2, 3 p^6, 3 d^{10}, 4 s^2, 4 p^6, 5 s^1$

Ecriture simplifiée:

$K^2, L^8, M^{18}, N^8, O^1$

Exercice :

Parmi les ensembles (n, l, m, s) suivants lesquels peuvent décrire un électron dans un atome ? Déterminer l'OA où se trouve cet électron.

- a- $(2; 2; 1; +1/2)$; b) $(2; 2; -1; +1/2)$; c) $(4; 0; -1; +1/2)$; d) $(3; 1; 0; -1/2)$.

Solution

- $(2; 2; 1; +1/2)$
 $(2; 2; -1; +1/2)$
- } $l = 2$ impossible car $0 \leq l \leq 1$
- $(4; 0; -1; +1/2) \rightarrow m = -1$ impossible car $-l \leq m \leq +l$
 $(3; 1; 0; -1/2) \rightarrow$ L'électron se trouve sur l'orbitale atomique $3p_z$



n (couches)	l (sous-couches)	m (cases quantiques)	Type de la sous-couche	" $n+l$ "
1 (K)	0 (1s)	0	$1s^2$	1
2 (L)	0 (2s)	0	$2s^{1 \times 2}$	2
	1 (2p)	-1, 0, +1	$2p^{1 \times 6}$	3
3 (M)	0 (3s)	0	$3s^{1 \times 2}$	3
	1 (3p)	-1, 0, +1	$3p^{1 \times 6}$	4
	2 (3d)	-2, -1, 0, +1, +2	$3d^{1 \times 10}$	5
4 (N)	0 (4s)	0	$4s^{1 \times 2}$	4
	1 (4p)	-1, 0, +1	$4p^{1 \times 6}$	5
	2 (4d)	-2, -1, 0, +1, +2	$4d^{1 \times 10}$	6
	3 (4f)	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$4f^{1 \times 14}$	7