

Faculté des Sciences Médicales (U.D'ALGER 1) – année universitaire 2020/2021

Département de Médecine Dentaire

# **Module de chimie générale et organique de la 1<sup>ère</sup> Médecine Dentaire**

Cours élaborés par : Pr. Adel SAADI

**CHAPITRE II (partie 1) :**

**Structure électronique**

**Tableau périodique**

Afin de classifier les **éléments chimiques naturels et artificiels** dans le tableau périodique, il faut commencer d'abord par définir certaines notions élémentaires appliquées aux atomes qui permettront de construire ce tableau.

Ce dernier a été conçu en faisant appel aux propriétés physico-chimiques des éléments en se basant sur ce qu'on appelle : **configuration électronique ou structure électronique** de l'élément.

L'obtention de cette configuration doit passer obligatoirement par la détermination des **nombres quantiques** qui définissent, en quelque sorte, **l'identité d'un électron** dans un atome.

**Durant tout ce chapitre, on ne s'intéressera qu'aux électrons d'un nuage électronique d'un élément qui sont répartis autours du noyau.**

## I. NOMBRES QUANTIQUES DES ELECTRONS

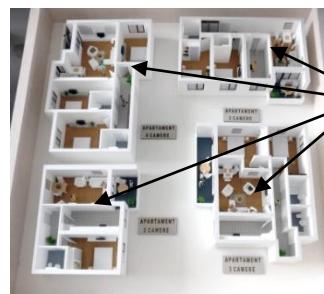
Les nombres quantiques des électrons sont définis comme étant les ensembles de valeurs numériques obtenus après la résolution de ce qu'on appelle **équation de Schrödinger**. Comme solution de cette équation, l'état quantique de ces électrons est entièrement défini par quatre nombres quantiques qui sont ***n*, *l*, *m* et *s***. **Les 4 nombres quantiques d'un électron permettent de situer cet électron autour du noyau qui devient finalement sa carte d'identité**. Prenons un exemple simple pour expliquer ces 4 nombres quantiques.

Si on suppose que vous êtes propriétaire d'un appartement dans un immeuble, on peut dire que l'**atome c'est l'immeuble** et le **propriétaire c'est l'électron** (nombre quantique '**s**'). Cet immeuble est constitué **d'étages qui représente le nombre quantique '**n**'**. chaque étage '**n**' regroupe un certains **nombre d'appartements c'est le nombre quantique '**l**'**. Chaque appartement '**l**' contient **un ou plusieurs chambres** c'est le nombre quantique '**m**'. Dans **une chambre**, vous allez placer **2 personnes max (électrons)**, c'est le nombre quantique '**s**'.



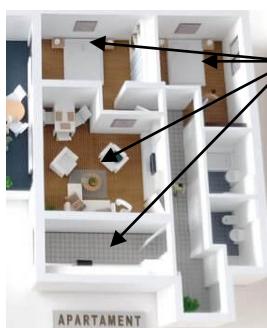
Immeuble = atome

Etages '**n**'  
Avec ***n* = 1,2,3,etc**  
**Nombre d'étages**



Un étage d'immeuble

Appartements '**l**'  
**Nombre d'appartements**  
**dépend de l'étage où on est.**



Chambres '*m*'  
Nombre de chambre dépend du type d'appartement.

Un appartement

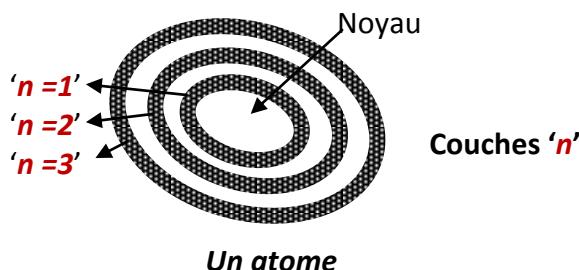


Personnes '*s*'  
une chambre ne peut contenir que 2 personnes max.

Une chambre

### I.1. Nombre quantique principal '*n*' (étage) :

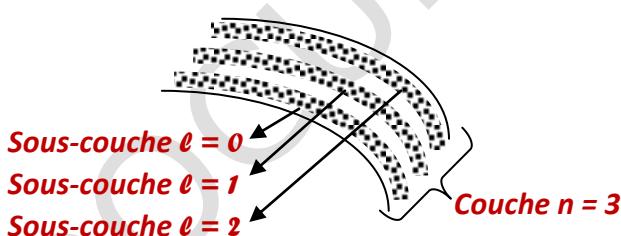
Ce nombre quantique définit **la couche électronique** et correspond **au niveau d'énergie de l'électron** dans cette couche ainsi que **la taille de l'atome**. Les valeurs de '*n*' sont entières  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$



- Plus le nombre de couche augmente, plus la taille de l'atome est grande,
- Plus l'électron (négatif) s'éloigne du noyau (positif), plus l'attraction diminue,

### I.2. Nombre quantique secondaire '*l*' (appartement) :

Appelé aussi le nombre quantique azimuthal. Il indique le nombre de sous-couches que peut contenir une seule couche et prend des valeurs entières entre '**0**' et '***n-1***'. Donc les valeurs sont dans le domaine :  $0 \leq l \leq n-1$



- Chaque valeur de *l* correspond à une sous-couche notée par une lettre alphabétique,
- Dans la chimie les valeurs 0, 1, 2, 3, .. de *l* correspondent respectivement à des sous-couches notées s, p, d, f, ... ,

Le tableau suivant récapitule les sous-couches rencontrées dans les atomes :

Valeur ' <i>l</i> '	0	1	2	3
Sous-couche	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>

### I.3. Nombre quantique magnétique ' $m$ ' (chambre) :

Ce nombre est appelé aussi le **nombre quantique tertiaire** qui peut être noté ' $m_e$ '. Il permet d'identifier les **orbitales atomiques**. Chaque sous-couche peut contenir **une ou plusieurs orbitales atomiques 'OA'** qui seront représentées **sous forme de cases** nommées '**cases quantiques**'. **Ces cases sont une représentation (écriture) simplifiée des orbitales atomiques.**

En résumé, le nombre quantique ' $m$ ' dépend de ' $\ell$ ' et prend des valeurs comprises entre ' $-\ell$ ' et ' $+\ell$ ' :

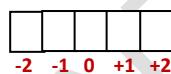
A retenir que ' $-\ell \leq m \leq +\ell$ '. Chaque sous-couche ' $\ell$ ' contient ' $2\ell+1$ ' orbitales atomiques ou cases quantiques ' $m$ ' selon le tableau suivant.

Sous-couche	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
$\ell$	0	1	2	3
Nombre de cases $2\ell+1$	1	3	5	7
Nom des cases	$m=0$	$m=-1; 0; +1$	$m=-2; -1; 0; +1; +2$	$m=-3; -2; -1; 0; +1; +2; +3$

Nombre de cases = Nombre d'orbitales atomiques OA.

Exemple :

La sous-couche '*d*' contient 5 orbitales atomiques = on représente 5 cases quantiques,



#### Qu'est ce que c'est une orbitale atomique 'OA' ?

Une orbitale atomique d'un électron 'OA' c'est la probabilité de présence de cet électron dans une région donnée de l'atome. On peut dire aussi que c'est **une région** ou **un espace** dans l'atome où j'ai **une forte probabilité (forte chance) de trouver cet électron.**

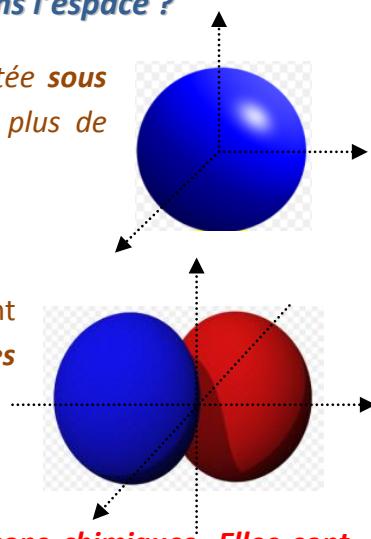
**Important : Il faut savoir que les électrons viennent s'installer dans les orbitales atomiques**

#### Comment ces orbitales atomiques 'OA' sont représentées dans l'espace ?

- Si l'électron est dans l'orbitale atomique de type 's', elle est représentée **sous forme de sphère autour du noyau**. A l'intérieur de cette sphère j'ai plus de chance de trouver l'électron. La taille de cette sphère augmente avec ' $n$ '.
- Les électrons qui occupent les orbitales atomiques de type 'p' sont localisés dans des espaces représentés **sous formes de deux lobes symétriques par rapport au noyau de l'atome**.

**Et ainsi de suite.....**

**Remarque : ces orbitales seront examinées dans le chapitre sur les liaisons chimiques. Elles sont responsables de la formation des liaisons chimiques entre les atomes.**



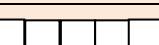
#### I.4. Nombre quantique magnétique de spin 's' (personne) :

C'est un nombre quantique qui permet d'identifier ***l'électron dans son orbitale atomique*** (ou case) et il correspond à une quantification du moment cinétique intrinsèque de cet électron.

Pour simplifier, il définit ***l'orientation de l'électron dans un champ magnétique*** (rotation rapide autour de lui-même) :

- ⊕ Si la rotation de cet électron est dans le sens des aiguilles d'une montre, on parle de spin positif et prend la valeur  $s = + \frac{1}{2}$  (***on représente l'électron dans la case (chambre) par une flèche orientée vers le haut***)   $s = + \frac{1}{2}$
- ⊕ Si la rotation de cet électron est dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, on parle de spin négatif et prend la valeur  $s = - \frac{1}{2}$  (***on représente l'électron dans la case (chambre) par une flèche orientée vers le bas***)   $s = - \frac{1}{2}$

### Récapitulatif

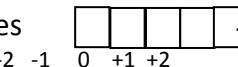
Couche (n)	Sous-couche ()	symbole	Représentation des OA	Nombre d'électron max
$n = 1$	$\ell = 0$	$1s$	$m = 0$ (2 e <sup>-</sup> max) 	1 à 2 max
$n = 2$	$\ell = 0$	$2s$	$m = 0$ (2 e <sup>-</sup> max) 	1 à 8 max
	$\ell = 1$	$2p$	$m = -1 ; 0 ; +1$ (6 e <sup>-</sup> max) 	
$n = 3$	$\ell = 0$	$3s$	$m = 0$ (2 e <sup>-</sup> max) 	1 à 18 max
	$\ell = 1$	$3p$	$m = -1 ; 0 ; +1$ (6 e <sup>-</sup> max) 	
	$\ell = 2$	$3d$	$m = -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2$ (10 e <sup>-</sup> max) 	

La couche n = 4 contient 4 sous couches notées '4s ; 4p ; 4d ; 4f'. ...etc.

#### I.5. Représentation d'une sous-couche par une fonction d'onde :

Chaque sous-couche est associée à une fonction d'onde représentée sous forme de  $\Psi_{n,l}$  comme par exemple  $\Psi_{2s}$ . Ce symbole signifie que cette fonction d'onde est celle de la sous-couche '2s' avec n=2 et  $\ell=0$ . C'est une équation mathématique (fonction exponentielle) de l'électron appartenant à la sous-couche '2s'.

#### I.6. Représentation d'une orbitale atomique par une fonction d'onde :

Chaque orbitale atomique est aussi associée à une fonction d'onde représentée sous forme de  $\Psi_{n,l,m}$  comme par exemple  $\Psi_{2,0,0}$ . Ce symbole signifie que cette fonction d'onde est celle de l'O.A '2s' avec n=2 et  $\ell=0$  et  $m=0$ . Exemple : sous-couche '4d' contient 5 cases   $\Psi_{4,2,+2}$

**Important : les OA de la même sous-couche ont la même énergie.**

## II. STRUCTURE ELECTRONIQUE DES ATOMES

Grâce aux nombres quantiques, on sait que le nuage électronique est constitué de couches d'électrons, chaque couche ' $n$ ' renferme un certains nombre de sous-couches  $\ell$ . Si on prend une sous-couche séparément, on voit qu'elle est composée d'une ou de plusieurs orbitales atomiques (représentée sous forme de cases). A l'intérieur de ces OA, on a plus de chance de trouver l'électron autour du noyau.

### *Comment les électrons choisissent une orbitale atomique 'OA' ?*

Le remplissage est OA avec des électrons obéit à des règles strictes qui sont :

- La règle de KLECHKOWSKY
- Le principe d'exclusion de PAULI
- La règle de remplissage de HUND

#### II.1. Règle de KLECHKOWSKY :

Grâce à la résolution de l'**équation de Schrödinger**, on sait qu'un électron dans une OA possède une fonction d'onde  $\Psi_{n,l,m}$  et une énergie  $E_{n,l}$ . A partir de là, KLECHKOWSKY a montré que l'énergie d'une sous-couche  **$E_{n,l}$  augmente** lorsque la somme  **$(n+\ell)$  augmente**. Dans le cas où la somme  **$(n+\ell)$**  est **identique**, la sous-couche qui a le nombre quantique  **$(n)$**  le plus petit est celle qui possède une énergie  **$E_{n,l}$**  la plus faible.

#### Exemple 1 :

L'énergie  **$E_{2s}$**  de la sous-couche '2s' est plus faible que celle de la '4p', pourquoi ?

Sous-couche	2s	4p
Couche ' $n$ '	2	4
Sous-couche ' $\ell$ '	0	1
Somme ' $n+\ell$ '	2	5

D'où :  $E_{2s} < E_{4p}$

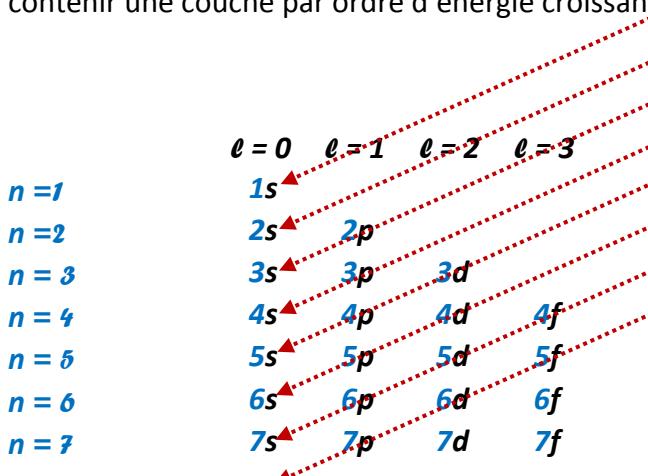
#### Exemple 2 :

L'énergie  **$E_{2p}$**  de la sous-couche '2p' est plus faible que celle de la '3s', pourquoi ?

Sous-couche	2p	3s
Couche ' $n$ '	2	3
Sous-couche ' $\ell$ '	1	0
Somme ' $n+\ell$ '	3	3

D'où :  $E_{2p} < E_{3s}$

Cette règle empirique permet de réaliser un classement de toutes les sous-couches que pourrait contenir une couche par ordre d'énergie croissante en appliquant le schéma simplifié suivant :



- En passant d'une flèche à une autre du haut vers le bas, vous remarquerez que la somme  $n+\ell$  augmente,
- Toutes les sous-couches traversées par la même flèche ont la même somme  $n+\ell$ ,
- En descendant d'une flèche à une autre, vous aurez le classement des sous-couches par ordre croissant d'énergie,

	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	4d	5p	6s	4f	5d	6p	7s	5f	6d	7p
$n+\ell$	1	2	3	3	4	4	5	5	5	6	6	6	7	7	7	7	8	8	8

Ce classement par ordre croissant d'énergie est appelé **structure électronique** ou **configuration électronique**.

**Ecriture générale de la structure est :**

$$1s^2/2s^2 2p^6/3s^2 3p^6/4s^2 3d^{10} 4p^6/5s^2 4d^{10} 5p^6/6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6/7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6/$$

- ❖ **Les slashes** qui sont ajoutés dans la structures séparent la fin d'un couche 'n' et le début d'une autre couche 'n+1',...
- ❖ **Les exposants** indiquent la capacité maximale de chaque sous-couche à accueillir des électrons (le chiffre en exposant c'est le nombre d'électrons dans cette sous-couche).
- ❖ **Il est interdit de passer à une sous-couche suivante si celle d'avant n'est pas remplie.**

**Exemple : la structure électronique de l'atome  $_{17}\text{Cl}$  est :  $1s^2/2s^2 2p^6/3s^2 3p^5$  (somme des exposants =17)**

La structure électronique d'un élément (à voir dans le chapitre tableau périodique) permet également de déterminer sa position dans le tableau de Mendeleïev.

## II.2. Le principe d'exclusion de PAULI :

Il permet d'expliquer comment les électrons sont positionnés dans une orbitales atomiques (cases). Selon PAULI :

- ❖ **Jamais** vous ne trouverez **deux électrons** dans le **même atome** qui peuvent avoir les **4 nombres quantiques identiques**. **Les électrons doivent être différents dans au moins un nombre quantique**.
- ❖ Une orbitale atomique ne peut accueillir **que 2 électrons maximum** à conditions que **leur spin 's' soit différent**. **Les deux électrons sont appariés**.
- ❖ **Par convention, on place en premier le spin positif  $s = +1/2$** .

**Exemple :  $_{2}\text{He}$  :  $1s^2$ , la sous-couche 's' contient une seule OA ( $\ell = 0$  d'où  $m = 0$ ). Comment placer les  $2e^-$  ?**

ou faux : ne respecte pas le principe de PAULI.  
les spins sont identiques (même valeur)

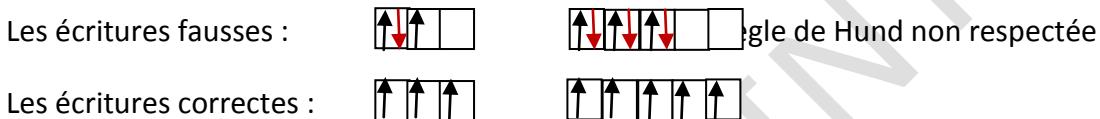
correcte : les spins sont opposés  
 $s = +1/2$  et  $s = -1/2$

### II.3. Règle de remplissage de HUND :

Cette règle s'applique beaucoup plus lorsqu'une sous-couche est composée de plusieurs orbitales atomiques (cases). Selon Hund, les électrons de **même sous-couche** occupent le **maximum de cases quantiques avec le même spin** :

- ❖ Si le nombre d'électrons est inférieure ou égale au **nombre de cases de la même sous-couche**, dans ce cas, le maximum de cases doivent être occupées par le même spin.
- ❖ Si le nombre d'électrons est supérieure au **nombre de cases de la même sous-couche**, on commence le remplissage de toutes les cases par les électrons ayant le même spin puis revenir à la première case et appliquer le principe d'exclusion de PAUL jusqu'à l'épuisement des électrons de cette sous-couche.
- ❖ Par convention, on commence le remplissage par la gauche vers la droite avec les électrons de spin positif  $s = +1/2$ .

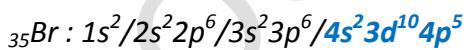
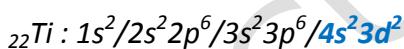
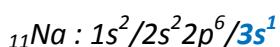
Exemple :



Remarque :

- ❖ *Electron célibataire* : c'est l'électron qui est seul dans la case
- ❖ *Electrons appariés* : c'est les électrons de spin opposé dans la même case
- ❖ *Sous-couche saturée* : veut dire que la sous-couche est complètement remplie par les électrons.  
2 pour 's' ; 6 pour 'p' ; 10 pour 'd' et 14 pour 'f'.
- ❖ *Ecriture générale de la structure électronique* : / $ns^x$  ( $n-2)f^w$  ( $n-1)d^z$   $np^y$ /

Quelques exemples :

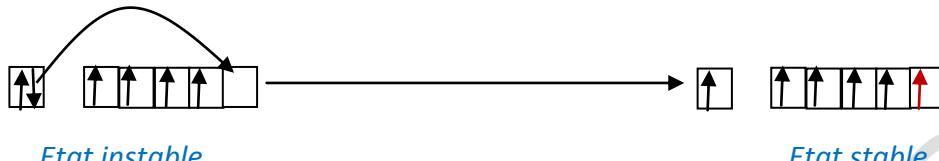


**IMPORTANT : LES EXCEPTIONS DU TABLEAU PERIODIQUE (anomalies du tableau périodique)**

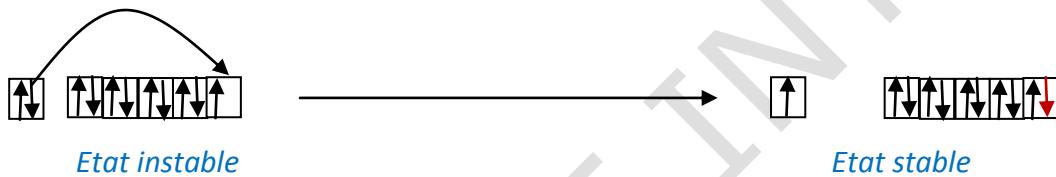
La structure électronique de **certains éléments** du tableau périodique **n'obéit pas aux règles générales de remplissage** citées précédemment comme le cuivre 29 et le chrome 24. Généralement, c'est lié directement à **la stabilité de leur structure** qui fait que **les électrons seront redistribués pour rendre l'atome plus stable**.

**Exemple :**

$^{24}\text{Cr} : 1s^2/2s^22p^6/3s^23p^6/\underline{\textbf{4s}^2\text{3d}^4}$  forme instable, devient  $1s^2/2s^22p^6/3s^23p^6/\textbf{4s}^1\text{3d}^5$  forme stable à cause de la sous-couche ' $d^5$ ' qui est à moitié saturée.



$^{29}\text{Cu} : 1s^2/2s^22p^6/3s^23p^6/\underline{\textbf{4s}^2\text{3d}^9}$  forme instable, devient  $1s^2/2s^22p^6/3s^23p^6/\textbf{4s}^1\text{3d}^{10}$  forme stable à cause de la sous-couche ' $d^{10}$ ' qui est totalement saturée.



Tous les éléments qui sont dans la même colonne que le cuivre et le chrome subissent cette redistribution à cause de la stabilité de la sous-couche ' $d$ '. **Un seul électron est permis à être déplacer** :

- ❖ La configuration  $ns^2(n-1)d^4$  sera remplacée par  $ns^1(n-1)d^5$
- ❖ La configuration  $ns^2(n-1)d^9$  sera remplacée par  $ns^1(n-1)d^{10}$