

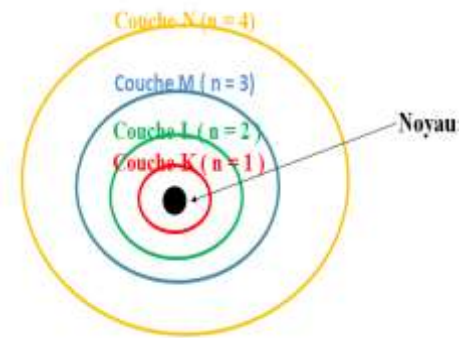
II- Structures électroniques des éléments

De même que les planètes du système solaire n'ont pas toutes les mêmes caractéristiques, les électrons qui gravitent autour du noyau d'un atome sont plus ou moins liés à celui-ci et ont des niveaux d'énergie différents sur des couches et des sous couches arbitraires.

II.1 Les quatre nombres quantiques: carte d'identité des électrons d'un atome. Chaque électron dans l'atome est caractérisés par ses quatre nombres quantiques n , l , m et s .

1) **Nombre quantique principal (n) :** il détermine le niveau d'énergie ou la couche associée à l'électron avec n ; un nombre entier ≥ 1

Pour $n = 1$, nous avons la couche 1 ou couche appelée « K »
 Pour $n = 2$, nous avons la couche 2 ou couche appelée « L »
 Pour $n = 3$, nous avons la couche 3 ou couche appelée « M ».



Le nombre d'électrons sur la couche est calculé par la relation: $2.n^2$

2. Nombre quantique secondaire (l) : il caractérise la sous-couche occupée par l'électron.

Sa valeur est fonction de celle du nombre quantique principal n ; $(0 \leq l \leq n-1)$, Dont.

$l = 0$	\longrightarrow	sous couche s
$l = 1$	\longrightarrow	sous couche p
$l = 2$	\longrightarrow	sous couche d
$l = 3$	\longrightarrow	sous couche f

Exemple :

Dans la couche K ($n=1$), $l = 0$, il existe qu'une seule couche notée $1s$

Dans la couche L ($n=2$), il existe deux sous couches : pour $l = 0$, on trouve la sous couche $2s$ et effectivement pour $l = 1$ on trouve la sous couche $2p$

3- Nombre quantique magnétique (m) : Il définit la case quantique ou l'orbitale atomique avec : $(-l \leq m \leq +l)$. L'orbitale atomique ou casier quantique est symbolisé graphiquement par un carré et il peut contenir au maximum que deux électrons. Donc dans une sous-couche on trouve $(2l+1)$ orbitales atomiques ?

Exemple :

N	l ($0 \leq l \leq n-1$)	m ($-l \leq m \leq +l$)	Notation des OA
1	0	0	un seul orbitale de type s : 1s
2	0 1	0 +1 0 -1	4 OA : un OA de type s : 2s et trois OA type p : 2p _x , 2p _y , 2p _z
3	0 1 2	0 +1 0 -1 +2 +1 0 -1 -2	9 OA : un OA de type s : 3s + trois OA type p : 3p _x , 3p _y , 3p _z et cinq OA de type d : 3d _{x²-y²} , 3d _{z²} , 3d _{xy} , 3d _{xz} , 3d _{yz}

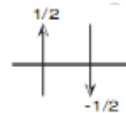
Représentation des orbitales : les nombre des OA dans une sous couche est calculé par $(2l+1)$

- Dans la sous couche s, il existe un seul OA ($m = 0$), représenté par on précise le niveau d'énergie et la sous couche de cet OA
- Pour les sous couches p, caractérisées par $l = 1$, on trouve 3 orbitales atomiques ($m=+1, 0, -1$)
- Pour les sous-couches d, caractérisées par $l = 2$, on trouve 5 orbitales atomiques $m=(+2, +1, 0, -1, -2)$

- Pour les sous-couches f, caractérisées par $l = 3$ on trouve 7 orbitales atomiques



4- Nombre quantique magnétique de spin s : il nous renseigne sur le mouvement propre de l'électron en présence d'un champ magnétique, il peut prendre que deux valeurs ($s = \pm 1/2$)



Exercice 1: quelles sont les combinaisons possibles pour les propositions suivantes :

Combinaison	n	l	M	s
1	1	1	0	1/2
2	4	2	1	-1/2
3	3	-2	-1	-1/2
4	2	1	0	-1/2
5	3	-2	2	3/2

Corrigé :

- La combinaison (1) est fausse car pour $n = 1$, l doit être dans l'intervalle $(0 \leq l \leq n-1)$ c.à.d, l ici peut prendre que la valeur 0
- La combinaison (2) est juste car pour $n = 4$, l doit être dans l'intervalle $(0 \leq l \leq n-1)$ c.à.d, $l \in \{0, 1, 2, 3\}$, $l=2$ est bien dans cette intervalle, m doit être aussi dans l'intervalle $(-l \leq m \leq +l)$ c.à.d $(-2 \leq m \leq +2)$ donc m peut prendre l'une des valeurs suivantes $(-2, -1, 0, +1, +2)$, et la valeur l donnée pour cette combinaison est bien dans cette intervalle, $s = (-1/2)$ est juste
- La combinaison (3) est fausse car l doit être un nombre entier positif
- La combinaison (4) est juste car pour $n = 2$, l doit être dans l'intervalle $(0 \leq l \leq n-1)$ c.à.d $l \in (0, 1)$, et dans ce cas $l=1$ est bien dans cette intervalle, m doit être aussi dans l'intervalle $(-1 \leq m \leq +1)$ donc m peut prendre l'une des valeurs suivantes $(-1, 0, +1)$, et la valeur l donnée pour cette combinaison est bien dans cette intervalle, $s = (-1/2)$ est juste
- La combinaison (5) est fausse pour deux raisons, premièrement le nombre quantique l doit être un nombre entier positif alors pour cette combinaison est négatif, la deuxième raison c'est la valeur du moment de spin s qui doit être soit $(+1/2)$, soit $(-1/2)$ or pour cette combinaison est $(3/2)$

Exercice 2 :

Donner la notation des sous-couches correspondant aux combinaisons suivantes :

$(n=2, l=1)$, $(n=3, l=0)$, $(n=4, l=2)$, $(n=5, l=3)$

Corrigé :

$(n=2, l=1) \implies 2p$

$(n=3, l=0) \implies 3s$

$(n=4, l=2) \implies 4d$

$(n=5, l=3) \implies 5f$

II.2 Configuration électronique et cases quantiques

Donner la configuration électronique (ou structure électronique) d'un atome, c'est préciser la répartition des électrons dans les diverses couches et sous-couches de cet atome à l'état fondamental, on respecte les règles suivantes :

1. Principe d'exclusion de Pauli :

Dans un atome, deux électrons ne peuvent pas avoir les quatre nombres quantiques identiques ; Autrement dit deux électrons appartenant à un même atome diffèrent par au moins un nombre quantique.

Par conséquent, une O.A définie par (n, l, m) ne peut contenir que deux électrons de spin opposé

Exemple : pour la couche $n=1$, on trouve uniquement une sous couche $l=0$ et un orbitale atomique $m=0$, les deux électrons possibles sont respectivement des combinaisons :

$(1, 0, 0, +1/2)$ et $(1, 0, 0, -1/2)$

2. Principe de stabilité ou règle de Klechkowski

Le remplissage se fait en complétant d'abord les niveaux d'énergie les plus profonds (les plus bas) c.à.d de l'ordre croissantes de la somme $(n + l)$.

Si deux sous-couches correspondent à la même valeur de la somme $(n + l)$, la sous-couche dont la valeur de n est la plus petite a l'énergie la plus basse.

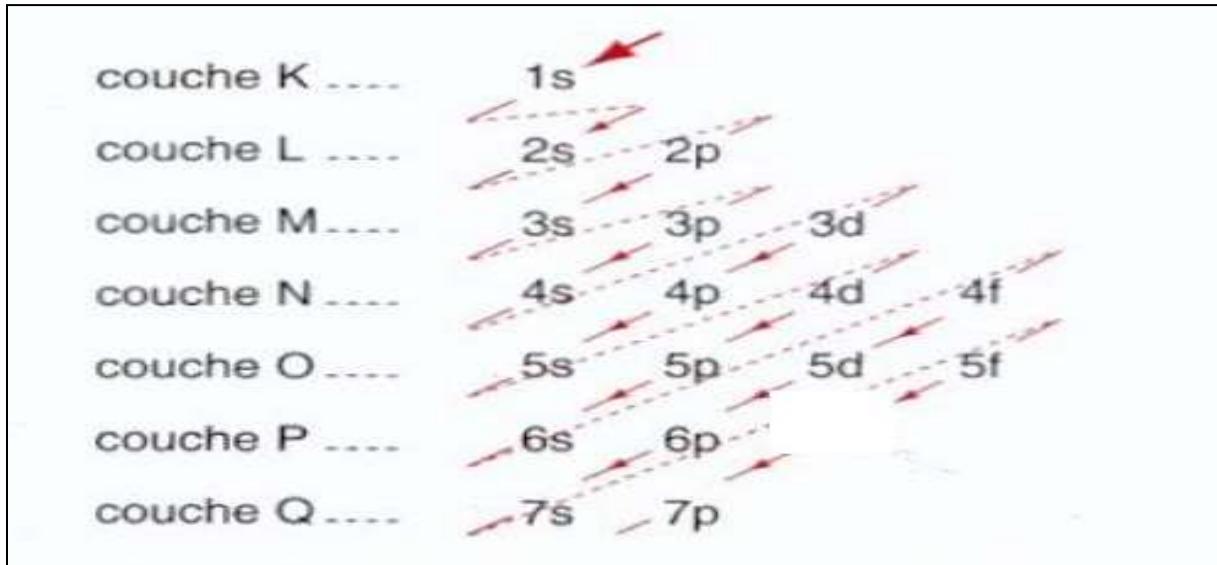
Exemples :

★ 4s et 3d.

$$\left. \begin{array}{l} E(4s) : 4 + 0 = 4 \\ E(3d) : 3 + 2 = 5 \end{array} \right\} \Rightarrow 4s \text{ sera occupée avant } 3d.$$

★ 4p et 3d.

$$\left. \begin{array}{l} E(4p) : 4 + 1 = 5 \\ E(3d) : 3 + 2 = 5 \end{array} \right\} \Rightarrow \text{même valeur de } n+l \text{ et comme } n(4p) > n(3d) \Rightarrow 3d \text{ sera occupée avant } 4p.$$



L'ordre de remplissage est dans le sens des flèches : 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p...

Exemple :

la configuration électronique du $_{11}\text{Na}$ est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

la configuration électronique du $_{17}\text{Cl}$ est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Remarque : une sous couche demie remplie ou totalement remplie sont les états les plus stables

Exemple :

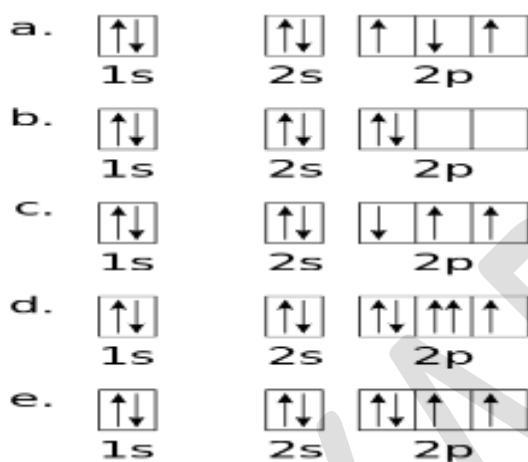
- $_{24}\text{Cr}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$ et non pas $4s^2 3d^4$
- $_{29}\text{Cu}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$ et non pas $4s^2 3d^9$

3. Règle de Hund

Lorsque des électrons se trouvent dans les même sous couches (même énergie), la configuration la plus stable est celle pour laquelle le nombre quantique magnétique total de spin M_s est maximal avec $M_s = \sum s$ (c'est-à-dire lorsque le nombre d'électrons ayant des spins identiques est maximal)

Remarque : Si : $M_s < 0$ la molécule est dite diamagnétique

$M_s > 0$ la molécule est dite paramagnétique



- Pour la configuration a, elle est fausse car $M_s = +1/2$, alors si on inverse l'électron dans l'orbitale ($m=0$) de la sous couche 2p on trouve une valeur de $M_s = 3/2$
- Pour la configuration b, elle est fausse car $M_s = 0$, on doit mettre les électrons dans deux OA différents dirigés vers le haut pour avoir un M_s maximal = +1
- Pour la configuration c, elle est fausse car $M_s = +1/2$, on doit mettre les 3 électrons dans la sous couche 2p dans les mêmes directions pour avoir un M_s maximal = +3/2
- Pour la configuration d, deux électrons dans le même atome ne peuvent pas avoir les 4 nombres quantiques identiques, donc il faut inverser l'un des électrons dans l'OA ($m=0$) de la sous couche 2p
- La configuration est juste car les règles de remplissage sont respectées

Exercice 1:

Etablir la configuration électronique des éléments suivants : ${}_3\text{Li}$, ${}_5\text{B}$, ${}_{10}\text{Ne}$, ${}_{12}\text{Mg}$, ${}_{17}\text{Cl}$, ${}_{24}\text{Cr}$, ${}_{26}\text{Fe}$, ${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{36}\text{Kr}$

Exercice 2: Donner les quatre nombres quantiques caractérisant l'électron célibataire du Scandium ${}_{21}\text{Sc}$

FELKARCHA