

Configuration électronique des atomes

I- Élément chimique

La notion d'élément chimique date du XVII^e siècle (Boyle). L'élément chimique n'est réellement défini qu'au XX^e siècle après la découverte de la structure de l'atome.

A- Atome :

entité électriquement neutre constituée d'un noyau chargé positivement et d'électrons chargés négativement en mouvement autour du noyau.

◆ Electron :	charge $q = -e = -1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	masse $m_e = 9,1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
◆ Noyau :	constitué de nucléons	
• les protons	charge $q = +e$	masse $m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
• les neutrons	charge $q = 0$	masse $m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

On désigne par

- ◆ nombre de masse, A, le nombre total de nucléons d'un noyau
- ◆ numéro atomique (ou nombre de charge), Z, le nombre de protons d'un noyau.

Un atome étant neutre, il comporte Z électrons symbole ${}_Z^A X$

B- Élément chimique

1- Définition Un élément chimique est caractérisé par son numéro atomique Z.

Tous les représentants d'un même élément chimique ont même nombre de protons dans leur noyau.

Symbole d'un élément ${}_Z X$ ou plus simplement X

2- Isotopes Des atomes isotopes ont même numéro atomique Z mais des nombres de masse A différents. Ils correspondent donc au même élément.

Exemple : les atomes ${}^{35}_{17}\text{Cl}$ et ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ correspondent au même élément chlore (Cl) .

Au cours des réactions chimiques, les différents éléments se conservent. Cl et Cl⁻ ne comportent pas le même nombre d'électrons, mais leur noyau a toujours 17 protons ; c'est le même élément à des nombres d'oxydation différents.

3- Corps simple - corps composé

corps pur simple : constitué d'un seul élément : O₂ , O₃

corps pur composé : constitué d'au moins deux éléments : SO₂, SO₃, H₂SO₃,...

C- Unités fondamentales

1- Unité fondamentale de quantité de matière : la mole (mol)

Grandeur fondamentale du système international d'unité.

Le nombre de particules par mole a été déterminé par Avogadro : constante d'Avogadro $N_a = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

2- unité de masse atomique : u.m.a (u)

$$1 \text{ u} = \frac{1}{12} \text{ masse d'un atome } {}^{12}_6\text{C} \quad 1 \text{ u} = \frac{1}{12} \cdot \frac{12 \cdot 10^{-3}}{N_a} = \frac{10^{-3}}{N_a} \text{ en kg (référence = atome de carbone 12)}$$

masse d'un proton = 1,0073 u \approx 1 u masse d'un neutron = 1,0087 u \approx 1 u masse d'un électron = 5,5.10⁻⁴ u

3- Masse atomique - masse molaire

♦ masse atomique : D'après ce qui précède, la masse des électrons est faible devant celle des nucléons, la masse d'un atome est, en unité de masse atomique, sensiblement égale à A.

♦ masse molaire d'un élément :

- Pour un isotope i de l'élément sa masse atomique, en unité de masse atomique est :

$$M_i = \frac{\text{masse d'un atome de l'isotope } i}{\frac{1}{12} \text{ masse de l'atome } {}^{12}_6\text{C}} \quad m_i = M_i \cdot u \quad (M_i \text{ voisin de } A_i)$$

Une mole d'atome de cet isotope a une masse égale à $N_a \cdot m_i = M_i \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1} = M_i \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

- Un élément, à l'état naturel, est en général un mélange d'isotopes dont les proportions restent constantes. On définit l'abondance isotopique x_i par le pourcentage massique de l'isotope i dans l'élément naturel

$$\left(\sum_i x_i = 1 \right)$$

La masse molaire de l'élément, notée M, est définie par : $M = \sum_i x_i \cdot M_i$

Ex : Élément carbone	Carbone naturel	${}^{12}_6\text{C}$	${}^{13}_6\text{C}$	${}^{14}_6\text{C}$
	x_i	98,89%	1,11%	traces
	M_i	12	13,0063	14,0032

Masse molaire de l'élément carbone : $M = 12,0112 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

Elément chlore	${}^{35}_{17}\text{C}$	${}^{37}_{17}\text{C}$	M
	$x_i = 75,8\%$ $M_i = 34,97$	$x_i = 24,2\%$ $M_i = 36,97$	$M = 35,45 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

II- Structure de l'atome d'hydrogène

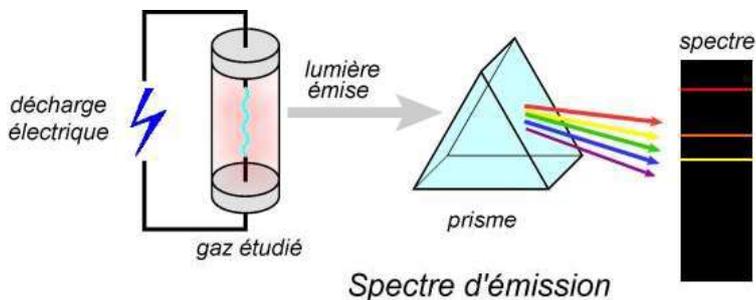
Hydrogène : numéro atomique $Z = 1$: l'atome possède un unique électron

L'étude du spectre d'émission de l'atome d'hydrogène a permis d'avancer dans la compréhension de la structure de la matière.

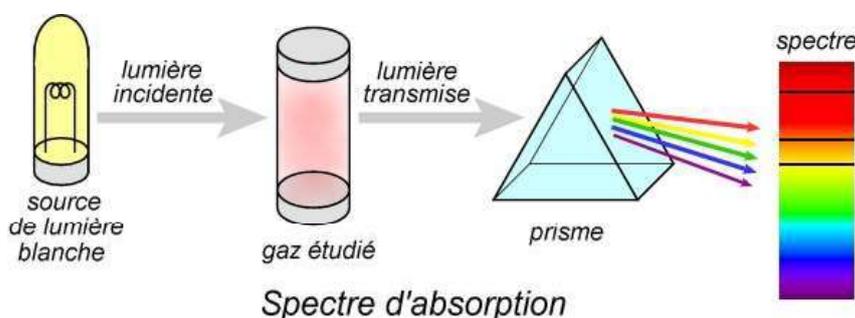
A- Description du spectre d'émission

Dans son état « normal » (ou fondamental), l'atome n'émet aucun rayonnement. Il est nécessaire de l'exciter c'est-à-dire de lui fournir de l'énergie (en chauffant un gaz d'atomes d'hydrogène ou en le soumettant à une décharge électrique) pour qu'il émette un rayonnement.

Le **spectre d'émission** est un **spectre de raies** : seules certaines fréquences sont présentes.



On peut inversement étudier le **spectre d'absorption** de l'atome d'hydrogène. Le spectre de la lumière blanche présente des **raies sombres**.



B- Interprétation du spectre

Pour interpréter les spectres d'absorption et d'émission, de l'atome d'hydrogène, Niels Bohr, s'appuyant sur l'hypothèse d'Einstein concernant l'énergie du photon a formulé les postulats suivants.

- l'énergie des électrons dans l'atome est quantifiée : seules certaines valeurs, certains niveaux sont possibles
- un photon est émis ou absorbé lorsque l'atome passe d'un niveau à un autre.

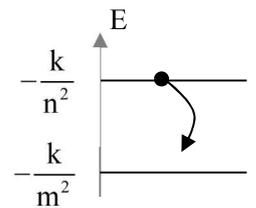
Les valeurs possibles pour l'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène sont : $E_n = -\frac{k}{n^2}$ avec

$$k = -13,6\text{eV} = -13,6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J et } n \in \mathbb{N}^*$$

Lorsque l'électron se « désexcite » (passe d'un niveau d'énergie élevé vers un niveau d'énergie plus basse) il émet un photon d'énergie $h\nu = E_n - E_m = -k\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$

Le spectre de la lumière émise par un gaz d'atome d'hydrogène présentera

- des fréquences vérifiant $\nu = \frac{k}{h}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ avec $m, n \in \mathbb{N}^*$
- des longueurs d'onde vérifiant $\frac{1}{\lambda} = \frac{k}{ch}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ avec $m, n \in \mathbb{N}^*$

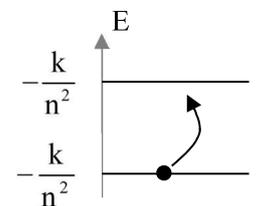


Où h est la constante de Planck et c la célérité de la lumière dans le vide

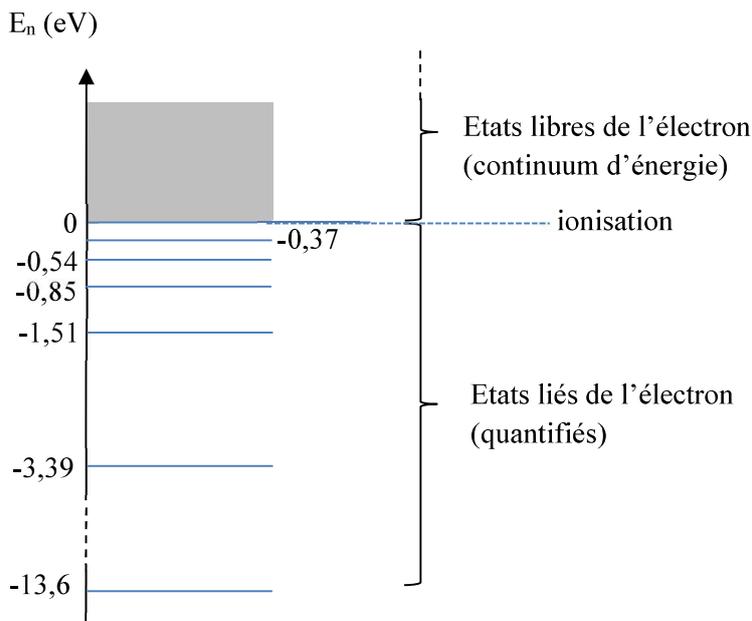
Remarque : dans les calculs, faire attention aux unités : exprimer k, c et h dans le système international

De la même manière, un gaz d'atomes d'hydrogène pourra absorber des photons d'énergie correspondant à une transition entre deux niveaux d'énergie. Les raies sombres

du spectre d'absorption correspondent aux fréquences vérifiant $h\nu = k\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$



C- Diagramme énergétique de l'atome d'hydrogène



Remarque :

- lorsque l'électron est libre (ce qui correspond à un atome d'hydrogène ionisé) ses niveaux ne sont alors plus quantifiés ; on parle de continuum d'énergie.
- Si on fournit à l'électron (atomique) initialement dans un niveau d'énergie $E_n = -\frac{k}{n^2}$ une énergie $E_f > \frac{k}{n^2}$ alors l'atome est ionisé (ce qui nécessite une énergie $\frac{k}{n^2}$) et le reste d'énergie $E_f - \frac{k}{n^2}$ est emporté par l'électron sous forme d'énergie cinétique.

D- Spectres des ions hydrogénoïdes

Les ions hydrogénoïdes sont les ions à un seul électron : He^+ , Li^{2+}

La structure des spectres d'absorption et d'émission sont semblables à ceux du spectre de l'hydrogène.

Les niveaux de l'énergie de l'électron de ces ions vérifient : $E_n = -\frac{k}{n^2}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$; mais la constante k a une valeur différente de celle de l'atome d'hydrogène.

III- Structure des atomes polyélectroniques

A- Niveau d'énergie ou sous-couche électronique

Dans un atome polyélectronique les niveaux d'énergie des électrons dépendent de deux nombres quantiques :

- n : nombre quantique principal $n \in \mathbb{N}^*$ (qui définit seul les niveaux d'énergie dans l'atome d'hydrogène)
- l : nombre quantique secondaire : entier positif ou nul strictement inférieur à n . $l \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket$

On associe une lettre à chaque valeur de l :

Valeur de l	0	1	2	3
Lettre associée	s	p	d	f

Une valeur de n définit une couche électronique

Une valeur du doublet (n, l) définit une sous-couche énergétique (ou un niveau d'énergie)

Exemple :

- Dans la couche $n = 1$, il y a une seule sous-couche $1s$ (pour $n = 1$ et $l = 0$)
- Dans la couche $n = 2$, il y a une sous-couche $2s$ (pour $n = 2$ et $l = 0$) et une sous-couche $2p$ (pour $n = 2$ et $l = 1$)
- Dans la couche $n = 3$, il y a une sous-couche $3s$ (pour $n = 3$ et $l = 0$), une sous-couche $3p$ (pour $n = 3$ et $l = 1$) et une sous-couche $3d$ (pour $n = 3$ et $l = 2$)

B- Configuration électronique

Etablir la configuration électronique d'un atome dans un état donné consiste à préciser la répartition des électrons dans ses différentes couches et sous-couches. La configuration électronique de **stabilité maximale** est celle de **plus faible énergie**. Elle est appelée **configuration électronique fondamentale**.

Des règles sont à respecter pour déterminer la configuration électronique fondamentale d'un atome :

- Une sous couche (n, l) contient au maximum $2(2l + 1)$.
Une sous couche ns ($l = 0$) contient donc au maximum 2 électrons ; une sous-couche np contient au maximum 6 électrons et une sous couche nd , au maximum 10 électrons
- Dans l'état fondamental les sous-couches se remplissent par ordre croissant d'énergie
Les énergies $E_{n,l}$ des sous couches croissent avec $n + l$ et à $n + l$ donné croissent avec n .
L'ordre de remplissage est donc le suivant :
 $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p$

C- Electrons de cœur, électrons de valence

Les **électrons de valence** de l'atome occupent les couches de **plus grand n** et les **sous-couches en cours de remplissage**.

Ce sont les électrons de **plus hautes énergies** et donc les moins liés au noyau. Ils sont responsables des propriétés chimiques de l'atome et de l'établissement de liaisons entre les atomes.

Les électrons de cœur sont situés sur les autres couches, plus profondes en énergie.

Elément chimique	Configuration électronique fondamentale	Nombre d'électrons de valence	Nombre d'électrons de cœur
Hydrogène ${}_1\text{H}$			
Lithium ${}_3\text{Li}$			
Carbone ${}_6\text{C}$			
Oxygène ${}_8\text{O}$	$1s^2 2s^2 2p^4$	6 (situés sur $2s$ et $2p$)	2 (situés en $1s$)
Néon ${}_{10}\text{Ne}$			
Soufre ${}_{16}\text{S}$			
Vanadium ${}_{23}\text{V}$			