

# CT1: Structure électronique des atomes

## I- Constitution des atomes : Rappels

### 1. Quelques définitions

- Un **atome** est caractérisé par son numéro atomique  $Z$ , ainsi que par son nombre de masse  $A$ .

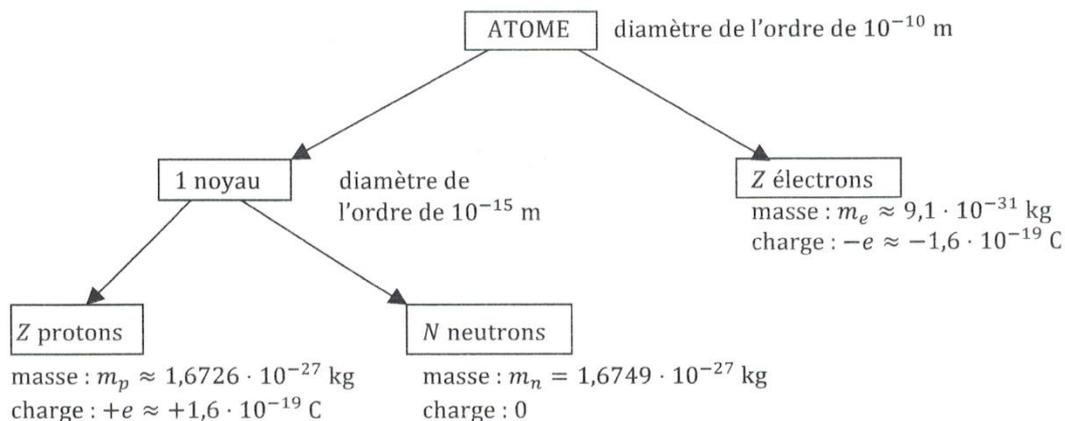


$Z$  représente.....

$A$  représente.....

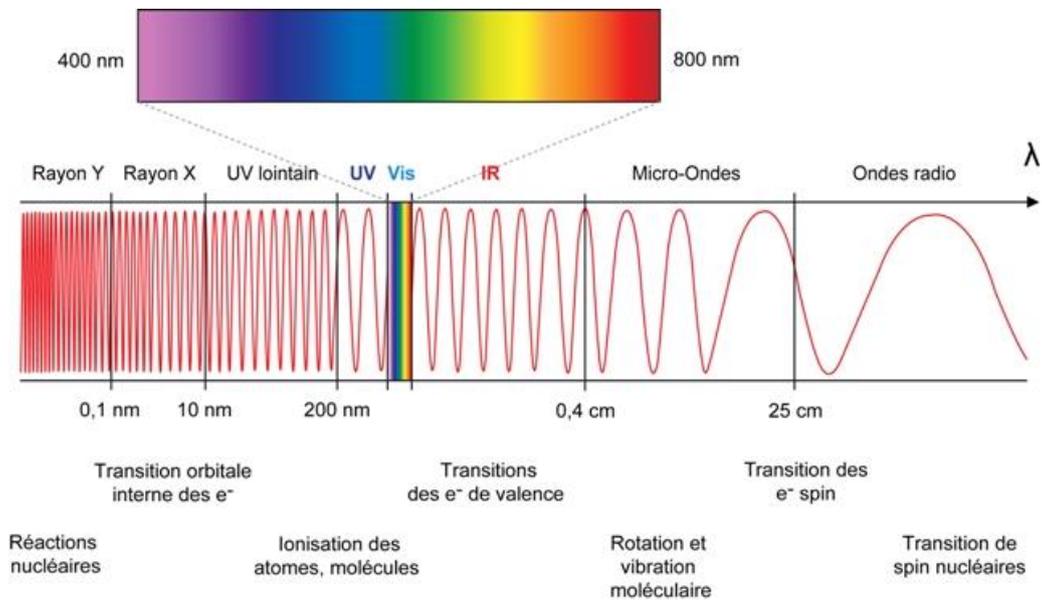
- Un **ion** possède le même  $Z$  que l'atome neutre mais pas le même nombre d'électrons. Il porte une charge positive lors d'un défaut d'électrons, on l'appelle alors un **cation**. Il porte une charge négative lors d'un excès d'électrons, on l'appelle un **anion**.
- Un **élément chimique** représente l'ensemble des atomes ou ions comportant le **même numéro atomique** donc le **même symbole**.
- Des isotopes ont le même numéro atomique  $Z$  mais diffèrent par leur nombre de neutrons : ils n'ont pas le même nombre de nucléons  $A=Z+N$ .  
Exemple : l'hydrogène  ${}^1\text{H}$ , le deutérium D ou  ${}^2\text{H}$  et le tritium T ou  ${}^3\text{H}$  sont isotopes.
- La masse molaire d'un élément est la moyenne de la masse molaire de ses isotopes pondérée par leur abondance naturelle.

### 1. Quelques dimensions

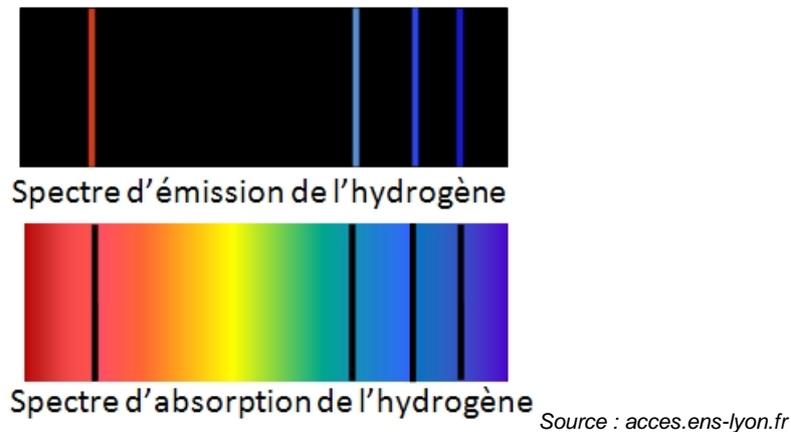


## II- Quantification de l'énergie

L'énergie des électrons au sein des atomes est **quantifiée** : elle ne peut prendre que des valeurs discrètes, discontinues. Ceci peut être mis en évidence expérimentalement par les spectres de raies en émission ou en absorption des atomes.



Source : [http://www.cima.ualg.pt/piloto/UVED\\_Geochemie/UVED/site/html/1/1-3/1-3-2/1-3-2-2.html](http://www.cima.ualg.pt/piloto/UVED_Geochemie/UVED/site/html/1/1-3/1-3-2/1-3-2-2.html)



Prenons le cas de l'atome d'hydrogène, atome à 1 seul électron. On observe quatre raies d'émission dans le visible : quatre photons de longueur d'onde différentes sont émis : ils correspondent chacun à une transition d'un niveau d'énergie donné vers un niveau d'énergie plus faible.

$$h\nu = E_m - E_p.$$

Chaque niveau d'énergie  $E_n$  est quantifié sous la forme  $E_n \text{ (en eV)} = -E_0/n^2$

$E_0$  est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène et vaut 13,6 eV.

$n$  est le nombre quantique principal : entier naturel non nul.

1 eV =  $1,6 \cdot 10^{-19}$  J,  $h$  = constante de Planck =  $6,62 \cdot 10^{-34}$  J.s

Schéma de principe de l'émission

Schéma de principe de l'absorption

### III- Description quantique des atomes

Plusieurs faits expérimentaux ont mis en évidence le caractère ondulatoire de l'électron comme par exemple, la diffraction d'un faisceau d'électrons. **L'électron est donc à la fois une onde et une particule comme l'est le photon.**

Aussi, c'est en utilisant les propriétés ondulatoires de l'électron qu'on arrive à décrire au mieux les propriétés des atomes. C'est donc une **description basée sur la mécanique quantique** qui va nous être utile.

Nous n'en utilisons que quelques résultats...Heureusement !!

Cette mécanique quantique est basée sur une **équation fondamentale, appelée équation de Schrödinger**, qui lie l'énergie  $E$  de l'électron à sa fonction d'onde  $\varphi$  c'est-à-dire la fonction mathématique associée à cet électron.

**Cette fonction  $\varphi$  n'a pas de sens réel** mais par contre, le **carré de cette fonction** va permettre de déterminer **la probabilité de trouver l'électron en chaque point de l'espace.**

Cette équation n'a pu être résolue que pour l'atome d'hydrogène et elle nécessite lors de sa résolution l'utilisation de trois paramètres appelés **nombre quantiques**. En fait, lors de la résolution, on établit des **couples énergie-fonction d'onde** et, à chaque fonction, **est associé un triplet de nombres quantiques.**

Dans une première approche uniquement énergétique, on va limiter notre étude à cette association :

1 état quantique = 1 couple « énergie - fonction d'onde » = 1 triplet de nombres quantiques  $n, l, m$  »

#### 1- Les trois premiers nombres quantiques : $n, l, m$

**$n$  : nombre quantique principal** associé à la quantification de l'énergie, **nombre entier non nul.**

Il détermine la **notion de couche électronique.**

**$l$  : nombre quantique secondaire ou azimutal;**  **$0 \leq l \leq n-1$**

Sa valeur détermine le type de fonction d'onde (appelée souvent orbitale atomique, OA); il est relié à la forme géométrique de la fonction d'onde dans l'espace. Il détermine la **notion de sous-couche.**

Valeur de $l$	0	1	2	3
Type de fonction d'onde	s	p	d	f

**$m$  : nombre quantique magnétique :  $-\ell \leq m \leq +\ell$  : nombre entier relatif**

Il est lié à l'orientation dans l'espace de la fonction d'onde.

**Le nombre de valeurs possibles pour  $m$  détermine le nombre de fonction d'onde dans la sous couche de type  $\ell$ .**

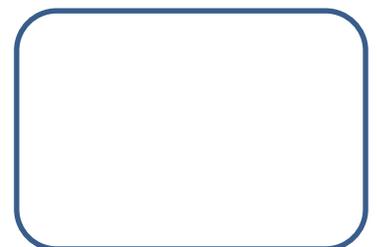
Des orbitales atomiques appartenant à **la même sous-couche** (=même valeur de  $n$  et de  $\ell$ ) ont la **même énergie à l'état fondamental** : elles sont dites **dégénérées**.

**Application : Tableau des différentes fonctions d'onde existantes**

Valeur de $n$	Valeur de $\ell$	Valeur de $m$	Orbitale atomique	Nombre d'OA dégénérées

**2- Diagramme énergétique de l'atome d'hydrogène :**

Chaque état possible sera représenté par un trait horizontal ou une « case ».



### 3- Configuration électronique des atomes

#### 3.1- Définition :

La configuration électronique d'un atome correspond à la répartition de ses électrons dans les différents états possibles cad les différentes couches et sous-couches. Elle est directement reliée aux propriétés de l'atome.

L'état de plus basse énergie est l'..... Les autres états sont dits.....

#### 3.2- Les règles de remplissage

**Règle de Klechkowski : Dans un atome poly électronique, l'énergie des orbitales atomiques croît en fonction de la valeur de  $n+l$ . Pour deux orbitales atomiques ayant la même valeur de  $n+l$ , alors l'énergie croît en fonction de  $n$ .**

Calcul de la valeur de  $n+l$  pour les différentes OA puis classement énergétique croissant

OA	Valeur de n	Valeur de l	Valeur de $n+l$	Classement Énergétique
1s				
2s				
2p				
3s				
3p				
3d				
4s				
4p				
4d				
4f				
5s				
5p				
5d				
5f				
6s				
6p				
6d				
7s				
7p				

**Diagramme énergétique des OA des atomes polyélectroniques**

Hum....un peu complexe tout cela....

Pour retrouver simplement cet ordre croissant des niveaux d'énergie, il suffit d'appliquer le **diagramme de Klechkowski** qui classe les différentes OA en fonction de leur valeur de  $n$  et de  $l$ .

L'ordre croissant d'énergie est donné par les diagonales de ce tableau dans le sens des  $n$  croissants.


♥ **Règle N°1 : Principe de l'Aufbau ou d'énergie minimale :**

Dans l'état fondamental c'est-à-dire de plus basse énergie, les électrons sont placés par **ordre croissant d'énergie dans les différents états possibles**.

♥ **Règle N°2 : Principe de Pauli :**

Il ne peut jamais exister deux particules dans le même état quantique c'est-à-dire que deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir le même quadruplet de nombres quantiques.

Et oui, il y a un quatrième nombre quantique pour décrire complètement l'électron : il caractérise une propriété magnétique interne appelée « **spin** ».

Il y a deux états de spin possibles : spin  $\alpha$  représenté par  $\uparrow$  et spin  $\beta$   $\downarrow$ .

**Corollaire de la règle N°2 :** Dans une orbitale atomique, on pourra placer au maximum deux électrons avec des spins opposés.

♥ **Règle N°3 : Règle de Hund :** Dans une sous-couche dégénérée, les électrons sont placés, en priorité, avec des spins identiques dans des OA différentes avant de créer des paires d'électrons.



## IV- Configuration électronique et tableau périodique

### 1- Description générale du tableau périodique

Le tableau périodique, tel que nous le connaissons aujourd'hui, n'est pas exactement celui déterminé par Mendeleïev en 1869 mais il lui ressemble beaucoup. Mendeleïev avait observé qu'en rangeant les atomes en fonction de leur masse atomique, on trouvait aussi des similitudes dans leurs propriétés. Il a eu aussi le génie de prédire l'existence d'éléments inconnus à cette époque en définissant leurs propriétés et un encadrement de leur masse.

Dans le TPE actuel, les atomes sont rangés par **numéro atomique croissant**.

Il est composé de **7 lignes et de 18 colonnes** réparties en blocs de 2, 10 et 6 colonnes.

Un bloc est séparé du corps du tableau, il comporte 14 colonnes.

Les éléments appartenant à une **même colonne** ont des **propriétés physico-chimiques très proches** : ils appartiennent à la **même famille chimique**.

On peut citer :

- Colonne **1 : les métaux alcalins** : sodium Na, Lithium Li, potassium K que nous connaissons naturellement sous la forme de cations  $M^+$ . Ils sont tous très réducteurs.
- **Colonne 2 : les métaux alcalino-terreux** comme le calcium Ca ou le magnésium que nous connaissons sous forme de cations  $M^{2+}$  exemple  $Ca^{2+}$  ion calcium (II).
- **Colonne 17 : les halogènes** comme le fluor F, le chlore Cl, le brome Br et l'iode I qui existent naturellement sous forme d'anions halogénures  $A^-$  comme l'ion chlorure  $Cl^-$ . Ils sont tous très oxydants.
- **Colonne 18 : les gaz rares**, inertes comme l'hélium  ${}^2He$ , le néon  ${}^{10}Ne$ , l'argon  ${}^{18}Ar$ , le krypton  ${}^{36}Kr$ , le xénon  ${}^{54}Xe$  et le radon  ${}^{86}Rn$ .

### 2- Tableau périodique, structure électronique des atomes et représentation de Lewis

#### 2.1. Remplissage du tableau sur feuille annexe

#### 2.2. Quelques conclusions après le remplissage du tableau :

- Les éléments d'une même colonne ont une couche externe partiellement remplie, de structure électronique identique : on l'appellera **couche de valence**.

=> **Définitions :**

- Les **électrons de valence** sont donc les électrons appartenant à **la dernière couche ou sous-couche en cours de remplissage** : ils sont les électrons responsables de la **réactivité chimique de cet élément**.

- Les couches électroniques qui sont totalement remplies correspondent à des couches stables, inertes chimiques : leurs électrons sont des électrons de cœur.

- Sur une ligne « n » du tableau périodique, le remplissage des OA se fera dans l'ordre :  
**ns (n-2)f (n-1)d np .**

Mais attention : la sous couche (n-2)f n'est remplie qu'à partir de  $n \geq 6$ ,  
la sous-couche (n-1)d n'est remplie qu'à partir de  $n \geq 4$

**On trouve donc comme dernière sous-couche en cours de remplissage, en fonction du Z et de la position dans le tableau périodique :**

L1 : 1s

L2 : 2s                      2p

L3 : 3s                      3p

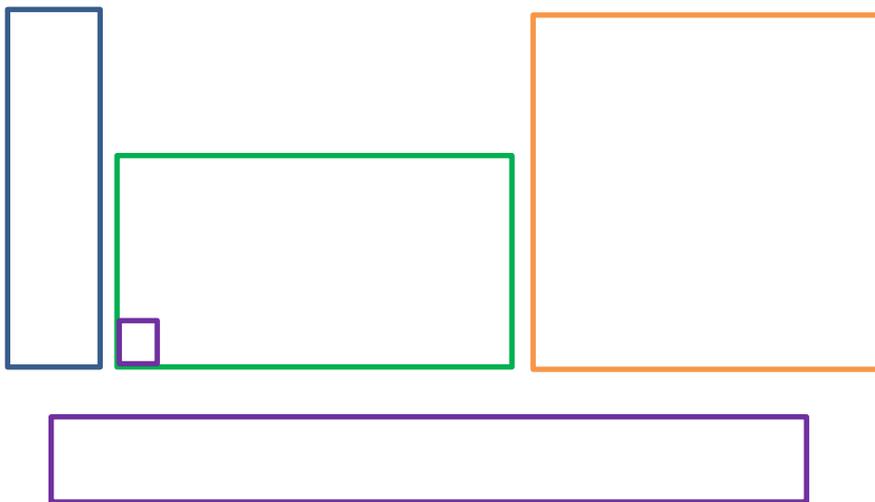
L4 : 4s            3d            4p

L5 : 5s            4d            5p

L6 : 6s 4f        5d            6p

L7 : 7s 5f        6d            7p

**D'où la notion de « bloc » dans le tableau périodique :**



Les éléments appartenant à un même bloc ont pour dernier électron placé, le plus haut en énergie, un électron de même type cad un électron s pour le bloc s, un électron p pour le bloc p..... :

- Les colonnes C1 et C2 forment le bloc s car le dernier électron de la configuration électronique est de type s. Le numéro de la ligne à laquelle appartient un élément de ce bloc correspond au nombre quantique principal de sa couche de valence.
- Les colonnes C3 à C12 forment le bloc d, car le dernier électron de la configuration électronique est de type d. Les électrons d sont responsables de la réactivité chimique de ces éléments : ce sont donc obligatoirement des électrons de valence de ces éléments. Ces éléments du bloc d sont appelés métaux de transition.

- Les colonnes **C13 à C18 forment le bloc p**, car le dernier électron de la configuration électronique est de type p. Le numéro de la ligne à laquelle appartient un élément de ce bloc correspond au nombre quantique principal de sa couche de valence.
- Le bloc apparaissant uniquement sur les lignes 6 et 7, séparé du corps du tableau principal est appelé bloc f car le dernier électron de la configuration électronique est de type f.
- Le remplissage des **4f** correspond à la famille des **lanthanides** ; le remplissage des **5f** correspond à la famille des **actinides**.

### 2.3. Comment trouver rapidement la configuration électronique de valence d'un élément en utilisant le TPE

Étape 1 : On encadre le numéro atomique de l'élément étudié avec ceux des gaz rares : on en déduit **la ligne du TPE** à laquelle il appartient donc le **nombre quantique principal le plus élevé, utilisé**.

Étape 2 : La configuration électronique du **gaz rare précédent**, noté GR correspond forcément à des **électrons de cœur**, totalement inutiles pour faire réagir cet atome : ils seront notés [GR].

Étape 3 : Par différence entre  $Z_{\text{étudié}}$  et  $Z_{\text{gaz rare précédent}}$  on trouve le numéro de la colonne à laquelle il appartient.

Étape 4 : les électrons de valence dépendent du bloc auquel appartient l'élément :

Cas d'un élément du bloc s ou p :

Cas d'un élément du bloc d :

## V. Représentation de Lewis des atomes et ions :

**Définition :** Représentation schématique de la configuration électronique de valence.

### Définition de la valence :

### Formalisme de Lewis :

Symbole	Représentation
•	<p>→ Électron seul dans sa case quantique appelé <b>électron célibataire</b>.</p> <p>→ Électron susceptible de s'apparier avec un autre électron d'un autre atome donc responsable d'une liaison chimique éventuelle.</p> <p><b>Le nombre d'électrons célibataires de la couche de valence est égal au nombre de liaisons chimiques covalentes que pourra faire cet élément aussi appelé <u>valence de l'élément</u>.</b></p>
—	<p><b>Doublet d'électrons non liant</b> appartenant à la même case quantique, appelé aussi <b>doublet libre</b>.</p> <p>→ Susceptible d'être <u>donné</u> : caractère de <b>base de Lewis</b></p>
□	<p>→ <b>case quantique vide</b> : on l'appelle une <b>lacune électronique</b>.</p> <p>→ Susceptible d'<u>accepter</u> un doublet d'électrons non liant : caractère <b>acide de Lewis</b>.</p>

### Pour les familles chimiques des blocs s et p :

Puisque au sein d'une même famille chimique (même colonne du TPE), les éléments ont la même structure électronique de valence, ils ont donc aussi la même représentation de Lewis.

N° colonne	Structure électronique de valence	Représentation de Lewis pour la famille de la colonne i	Valence normale	Acides ou bases de Lewis
1				
2				

13				
14				
15				
16				
17				
18				

Exemples : Donner le schéma de Lewis de Al, Cl<sup>-</sup>, N, N<sup>+</sup>, N<sup>-</sup>, O, O<sup>+</sup>, O<sup>-</sup>. En déduire les valences des ions. (<sub>13</sub>Al, <sub>17</sub>Cl, <sub>7</sub>N, <sub>8</sub>O).

# Tableau périodique des éléments chimiques

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H Hydrogène 1.00794 1.01	2 He Hélium 4.002602 1.0078	3 Li Lithium 6.941 1.037	4 Be Béryllium 9.012182 1.037	5 B Bore 10.811 1.037	6 C Carbone 12.0107 1.037	7 N Azote 14.0064 1.037	8 O Oxygène 15.9994 1.037	9 F Fluor 18.998403 1.037	10 Ne Neon 20.1797 1.037	11 Na Sodium 22.98976 1.037	12 Mg Magnésium 24.3050 1.037	13 Al Aluminium 26.98153 1.037	14 Si Silicium 28.0855 1.037	15 P Phosphore 30.97376 1.037	16 S Soufre 32.065 1.037	17 Cl Chlore 35.453 1.037	18 Ar Argon 39.948 1.037
3 K Potassium 39.0983 1.037	4 Ca Calcium 40.078 1.037	5 Sc Scandium 44.95591 1.037	6 Ti Titane 47.867 1.037	7 V Vanadium 50.9415 1.037	8 Cr Chrome 51.9961 1.037	9 Mn Manganèse 54.93804 1.037	10 Fe Fer 55.845 1.037	11 Co Cobalt 58.93319 1.037	12 Ni Nickel 58.6934 1.037	13 Cu Cuivre 63.546 1.037	14 Zn Zinc 65.38 1.037	15 Ga Gallium 69.723 1.037	16 Ge Germanium 72.64 1.037	17 As Arsenic 74.92160 1.037	18 Se Sélénium 78.96 1.037	19 Br Brome 79.904 1.037	20 Kr Krypton 83.796 1.037
4 Rb Rubidium 85.4678 1.037	5 Sr Strontium 87.62 1.037	6 Y Yttrium 88.90585 1.037	7 Zr Zirconium 91.224 1.037	8 Nb Niobium 92.90638 1.037	9 Mo Molybdène 95.96 1.037	10 Tc Technétium 98 1.037	11 Ru Ruthénium 101.07 1.037	12 Rh Rhodium 102.9055 1.037	13 Pd Paladium 106.42 1.037	14 Ag Argent 107.8682 1.037	15 Cd Cadmium 112.411 1.037	16 In Indium 114.818 1.037	17 Sn Étain 118.710 1.037	18 Sb Antimoine 121.760 1.037	19 Te Tellure 127.60 1.037	20 I Iode 126.9044 1.037	21 Xe Xénon 131.293 1.037
5 Cs Césium 132.9054 1.037	6 Ba Baryum 137.327 1.037	7 La Lanthane 138.9054 1.037	8 Hf Hafnium 178.49 1.037	9 Ta Tungstène 180.9471 1.037	10 W Wolfram 183.84 1.037	11 Re Rhenium 186.207 1.037	12 Os Osmium 190.23 1.037	13 Ir Iridium 192.217 1.037	14 Pt Platine 195.084 1.037	15 Au Or 196.9665 1.037	16 Hg Mercure 200.59 1.037	17 Tl Thallium 204.3833 1.037	18 Pb Plomb 207.2 1.037	19 Bi Bismuth 208.9804 1.037	20 Po Polonium 209 1.037	21 At Astatine 210 1.037	22 Rn Radon 222 1.037
6 Fr Francium 223 1.037	7 Ra Radium 226 1.037	8 Ac Actinium 227 1.037	9 Rf Rutherfordium 261 1.037	10 Db Dubnium 262 1.037	11 Sg Seaborgium 266 1.037	12 Bh Bohrium 269 1.037	13 Hs Hassium 277 1.037	14 Mt Meitnerium 288 1.037	15 Ds Darmstadtium 289 1.037	16 Rg Roentgenium 293 1.037	17 Cn Copernicium 285 1.037	18 Nh Nihonium 284 1.037	19 Fl Flerovium 289 1.037	20 Uup Ununpentium 288 1.037	21 Lv Livermorium 293 1.037	22 Uus Ununseptium 294 1.037	23 Uuo Ununoctium 294 1.037

**Fe**

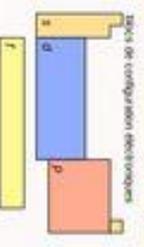
masse atomique : 55.845  
 1ère énergie de ionisation : 762.5  
 symbole chimique : Fe  
 configuration électronique : [Ar] 3d<sup>6</sup> 4s<sup>2</sup>

nombre atomique : 26  
 électronégativité : 1.83

états d'oxydation : +2, +3, +4, +6  
 plus commun en état : +2

catégorie : métaux alcalins  
 groupe : alcalino-terreux  
 autres métaux : métaux de transition  
 lanthanides : actinides

éléments incertains : Les éléments incertains ont leur nom entre parenthèses



57 La Lanthane 138.9054	58 Ce Césium 140.116	59 Pr Praseodyme 140.9076	60 Nd Néodyme 144.242	61 Pm Prométhée (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.9253	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.9303	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.9342	70 Yb Ytterbium 173.054
89 Ac Actinium 227	90 Th Thorium 232.0380	91 Pa Protactinium 231.0368	92 U Uranium 238.0289	93 Np Néptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkélium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (288)	102 No Nobelium (289)

**Notes :**  
 • pour l'actinium, les éléments 113, 115, 117 et 118 n'ont pas de nom officiel désigné par l'IUPAC  
 • 1.037u = 99.986%  
 • Tous les éléments sont indiqués dans des états d'oxydation de 0.