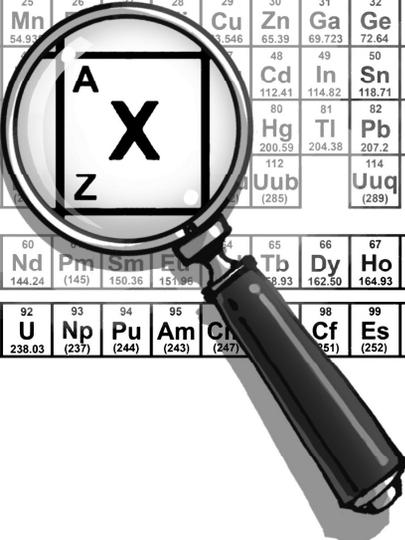


Chapitre 1 - Configuration électronique

I. L'essentiel du cours

Modèle quantique de l'atome (noyau + électrons)

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS



1 H 1.0079																	2 He 4.0026
3 Li 6.941	4 Be 9.0122											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305											13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc 98	44 Ru 101.07	45 Rh 102.905	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 La-Lu	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.084	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-103 Ac-Lr	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (271)	111 Rg (272)	112 Uub (285)	113 Nh (284)	114 Uuq (289)	115 Uup (288)	116 Uuq (289)	117 Uuq (289)	118 Uuo (289)
57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97			
89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)			

Pour un élément du tableau périodique, également dénommé nucléide, on définit :



A = nombre de masse ($Z + N$)

avec N = nombre de neutrons

et Z = numéro atomique
= nombre de protons
= nombre d'électrons

Deux éléments qui diffèrent uniquement par leur nombre de neutrons sont appelés des **isotopes**. Exemple : $^{12}_6\text{C}$ (6 protons, 6 électrons et **6 neutrons**) et $^{13}_6\text{C}$ (6 protons, 6 électrons et **7 neutrons**). La proportion de chacun des isotopes est appelée **abondance isotopique**.

Les électrons ne possèdent pas tous la même énergie. Il existe des **électrons de cœur** (proches du noyau) et des **électrons de valence** impliqués dans la formation de liaisons chimiques. Les électrons de l'élément (= du nucléide) vont se répartir sur différents niveaux d'énergie que l'on appelle des orbitales (et qui sont associées à des **cases quantiques**). Pour classer les électrons, on définit trois nombres quantiques orbitaux **n**, **ℓ**, **m** et un nombre quantique de spin **s** selon :

n (nombre quantique principal) : $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ (entier positif) que l'on associe à des niveaux d'énergie notés K ($n = 1$), L ($n = 2$), M ($n = 3$), N ($n = 4$)...

Les niveaux d'énergie K, L, M... (ou couches) se composent en sous-niveaux (sous-couches) s, p, d... décrits par le nombre quantique secondaire (ou azimutal) noté ℓ .



ℓ (nombre quantique secondaire) : $\ell = 0, 1, 2, 3, 4 \dots n-1$

Le **nombre quantique secondaire** est un entier positif qui peut prendre **n** valeurs de 0 à (n - 1).

Il définit une forme géométrique liée à la fonction d'onde (c'est-à-dire à l'orbitale).

m (nombre quantique magnétique) : $m = -\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, +\ell$

Le **nombre quantique magnétique** est un entier qui peut prendre $2\ell + 1$ valeurs de $-\ell$ à $+\ell$.

Il est lié à l'orientation spatiale des orbitales.

s (nombre de spin) : **+1/2 ou -1/2**

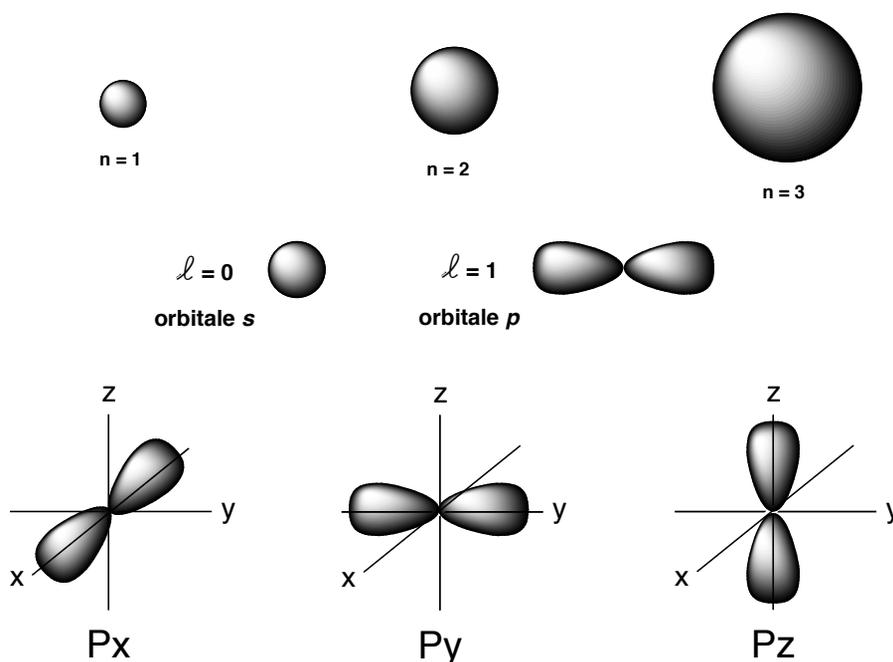
Le **nombre quantique de spin électronique** traduit la quantification du moment cinétique intrinsèque de l'électron.

Le « mouvement » d'un électron est décrit par une fonction d'onde $\Psi(r)$, appelée également orbitale, dont le carré (Ψ^2) définit la densité de probabilité de trouver l'électron dans la proximité immédiate d'un point de l'espace. La résolution de Ψ (Ψ est fonction de (**n**, **ℓ**, **m**)) permet de déterminer la géométrie des volumes appelés orbitales dans lesquels l'électron a le plus de chance de se trouver.

Notes / remarques :

Remarque : **n, nombre quantique principal**, caractérise la taille et l'énergie de l'orbitale considérée (couche) pour un atome donné.

l, nombre quantique secondaire (azimutal), caractérise la géométrie de l'orbitale (sous-couche).



si $l = 0$: **orbitale s** (s pour « *sharp* »), l'orbitale est de géométrie sphérique centrée sur le noyau (l'orbitale s peut accueillir 2 e- au maximum).

si $l = 1$: **orbitale p** (p pour « *principal* »), constituée par 2 lobes accolés (les 3 orbitales p (p_x , p_y et p_z) peuvent accueillir 6 e- au maximum).

si $l = 2$: **orbitale d** (d pour « *diffuse* »), 5 géométries possibles qui ne seront pas détaillées ici (les 5 orbitales d peuvent accueillir 10 e- au maximum).

l	0	1	2	3	4
Sous-couche	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

Il existe 3 orbitales p, orientées selon les axes x, y et z (d'un trièdre de référence).

Pour $n = 1$, $l = 0$ (orbitale s uniquement),

Pour $n = 2$, $l = 0$ ou 1 (orbitales s (2 e-) et p (6 e-)),

Pour $n = 3$, $l = 0$, 1 ou 2 (orbitales s (2 e-), p (6 e-) et d (10 e-)),

Pour $n = 4$, $l = 0$, 1, 2 ou 3 (orbitales s (2 e-), p (6 e-), d (10 e-) et f (14 e-)).

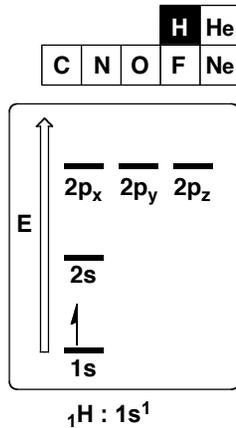
Elément	Symbol	Z	Nbe de protons	Nbe de neutrons	Nbe d'électrons	MW	Abondance nat. (%)
Hydrogène	¹ H	1	1	0	1	1	99,98
Deutérium	² H (D)	1	1	1	1	2	0,02
Tritium	³ H (T)	1	1	2	1	3	
Hélium	³ He	2	2	1	2	3	1,3.10 ⁻⁴
	⁴ He	2	2	2	2	4	99,99
Lithium	⁶ Li	3	3	3	3	6	7,3
	⁷ Li	3	3	4	3	7	92,7
Carbone	¹² C	6	6	6	6	12	98,9
	¹³ C	6	6	7	6	13	1,1
	¹⁴ C	6	6	8	6	14	2.10 ⁻¹⁰
Azote	¹⁴ N	7	7	7	7	14	99,6
	¹⁵ N	7	7	8	7	15	0,4
Oxygène	¹⁶ O	8	8	8	8	16	99,76
	¹⁷ O	8	8	9	8	17	0,04
	¹⁸ O	8	8	10	8	18	0,2
Fluor	¹⁹ F	9	9	10	9	19	100
Sodium	²³ Na	11	11	12	11	23	100
Chlore	³⁵ Cl	17	17	18	17	35	75,4
	³⁷ Cl	17	17	20	17	37	24,6
Brome	⁷⁹ Br	35	35	44	35	79	50,5
	⁸¹ Br	35	35	46	35	81	49,5

MW = « *Molecular Weight* » (masse molaire)

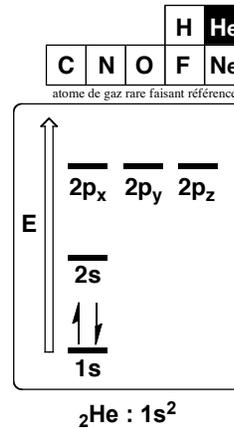
Il est généralement possible, à partir du remplissage électronique, de connaître la valence des éléments (c'est-à-dire le nombre de liaisons que peut présenter un atome donné).

Les éléments du tableau périodique ont en modèle (en « référence ») l'atome de gaz rare le plus proche qui a sa dernière couche électronique totalement remplie en électrons.

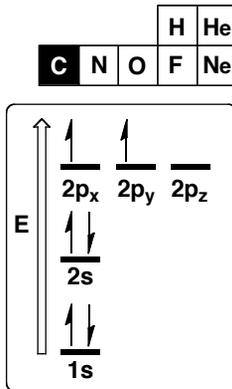
Nous vous proposons ci-après quelques exemples pour les éléments principaux qui constituent les composés organiques.



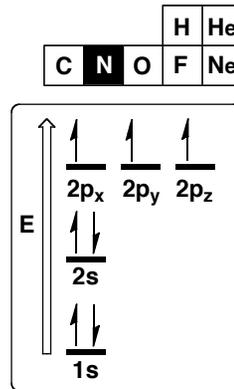
Il manque 1 e- pour compléter l'orbitale 1s : **l'hydrogène est monovalent**



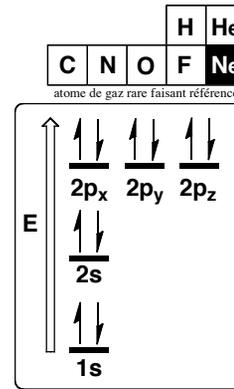
Hélium : atome de gaz rare le plus proche (dernière couche électronique remplie en e-)



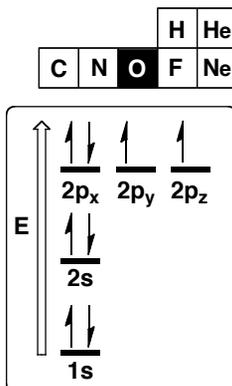
Il manque 4 e- pour compléter l'orbitale 2p : **le carbone est tétravalent**



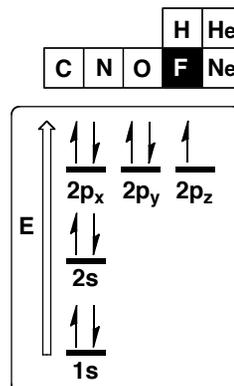
Il manque 3 e- pour compléter l'orbitale 2p : **l'azote est trivalent**



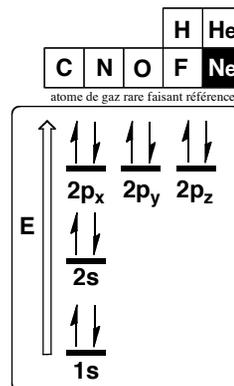
Néon : atome de gaz rare le plus proche



Il manque 2 e- pour compléter l'orbitale 2p : **l'oxygène est divalent**



Il manque 1 e- pour compléter l'orbitale 2p : **le fluor est monovalent**



Néon : atome de gaz rare le plus proche

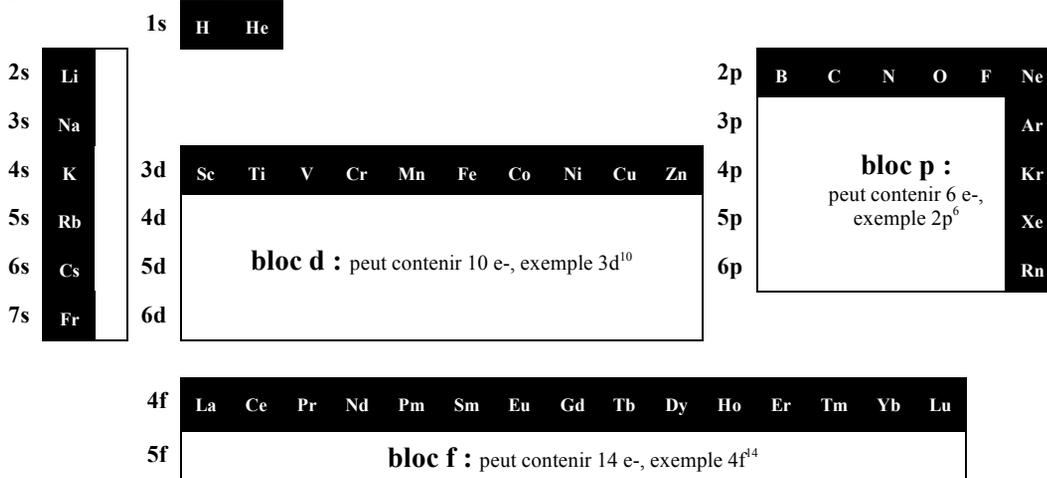
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

H																	He
Li	Be	Tableau Périodique des Eléments										B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg							

Un découpage du tableau périodique en blocs s, p, d et f est proposé ci-dessous :

bloc s :

peut contenir 2 e-, exemple 2s²



Notes / remarques :



A l'intérieur des sous-couches, le remplissage électronique suit les règles suivantes :

- 1) la Règle de HUND,
- 2) le Principe d'exclusion de PAULI.

On définit :

- la « Règle de HUND » : dans une sous-couche d'énergie donnée le nombre d'électrons non appariés doit être maximum.

- le « Principe d'exclusion de PAULI » : 2 électrons d'un même atome ne peuvent avoir leurs 4 nombres quantiques identiques. Une orbitale ne peut décrire que 2 e- de spin opposé.



Le nombre quantique principal n définit le nombre de niveaux d'énergie (couches).

Pour une valeur de n donné, il existe au maximum $2n^2$ électrons dans la couche correspondante.

- **Si n = 1, la 1^{ère} couche K comporte au maximum 2 électrons**

Exemple : Hélium He $1s^2$

- **Si n = 2, la 2^{ème} couche L comporte au maximum 8 électrons**

Exemple : Néon Ne $1s^2 2s^2 2p^6$

- **Si n = 3, la 3^{ème} couche M comporte au maximum 18 électrons**

Ces valeurs de remplissage sont plus connues sous la dénomination de « Règle des 8 électrons (Règle de l'Octet), Règle des 18 électrons... » qui sont très utiles pour établir les représentations de Lewis (représentation de la structure électronique des molécules).

L'atome de carbone qui possède 6 électrons présente un remplissage électronique en $1s^2 2s^2 2p^2$. Seuls les électrons de la couche externe (niveau 2) peuvent participer à la formation de liaisons.

Dans le cas de l'atome de carbone, 4 électrons se trouvent au niveau de la couche externe. Ainsi l'atome de carbone peut accepter 4 électrons « extérieurs » pour compléter sa dernière couche électronique (et respecter la Règle de l'Octet). Toutefois, la répartition des 4 électrons externes du carbone dans des orbitales s et p de formes différentes ne permet pas d'expliquer, par exemple, la formation de la