

# UE2 PASS Atomistique

Julie-Anne Chemelle  
Raphael Terreux

# CHIMIE PHYSIQUE

Chapitre 1 : Structure de l'atome

➔ Chapitre 2 : Configuration électronique

Chapitre 3: Classification périodique

Chapitre 4 : Orbitales atomiques

Chapitre 5 : Liaisons faibles / fortes

Chapitre 6 : Thermodynamique et équilibres

# CONFIGURATION ELECTRONIQUE

Julie-Anne Chemelle  
Raphael Terreux

# Configuration électronique

Objectifs d'apprentissage :

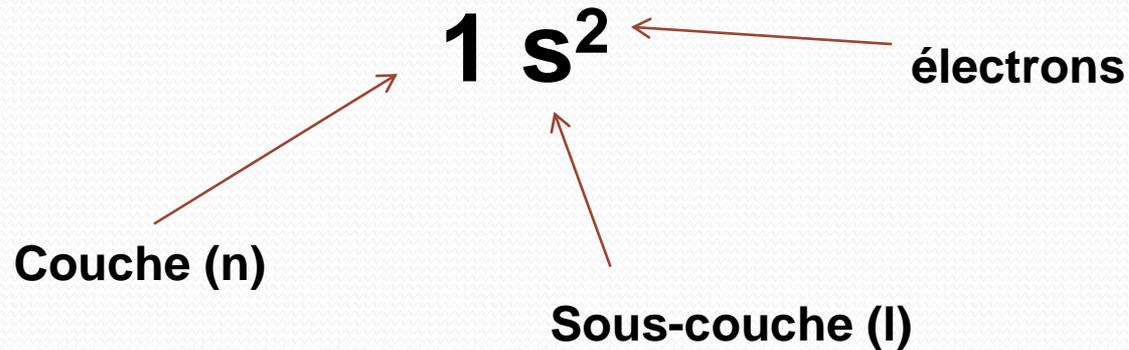
- Savoir donner les deux représentations d'une configuration électronique
- Appliquer les règles de remplissage électronique pour les atomes et ions
- Identifier les électrons de cœur et de valence

# Configuration électronique

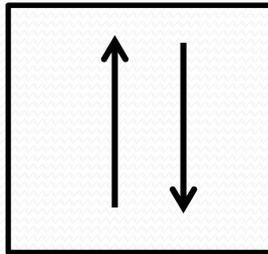
- A. Représentations
- B. Règles de remplissage

# A- Représentations

**Configuration électronique** = écriture des électrons dans les cases quantiques



**Configuration électronique** = écriture des électrons dans les cases quantiques



Case quantique  
Electrons orientés  $\pm \frac{1}{2}$

# B- Règles de remplissage

Pour l'état **fondamental** des atomes (non excité)

1. **Indiscernabilité** des électrons
2. **Stabilité** (niveaux les + bas remplis en 1<sup>er</sup>)

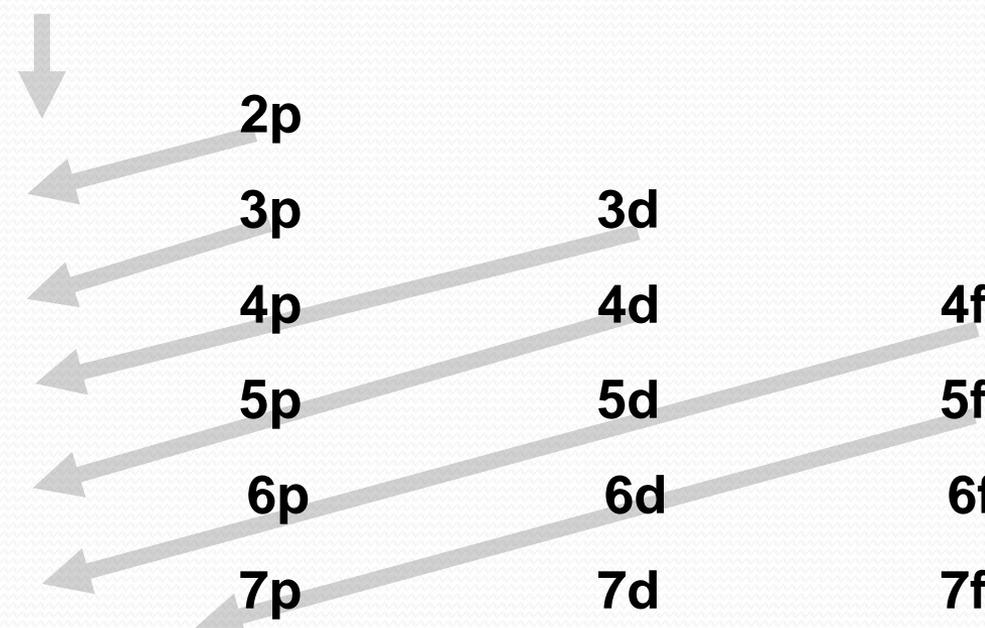
*Énergie minimale  $\Leftrightarrow$  stabilité maximale*

3. **Principe de Pauli** (intangible) : *2 électrons ne peuvent avoir leurs 4 nbr quantiques identiques*
4. **Règle de Hund** : *les électrons se repoussent toujours : tendent à occuper un nombre maximal de cases d'énergie identique*
5. **Règle de multiplicité** : *les électrons tendent à avoir leurs spins parallèles*

# B- Règles de remplissage

La configuration est donnée par la règle de Klechkovsky

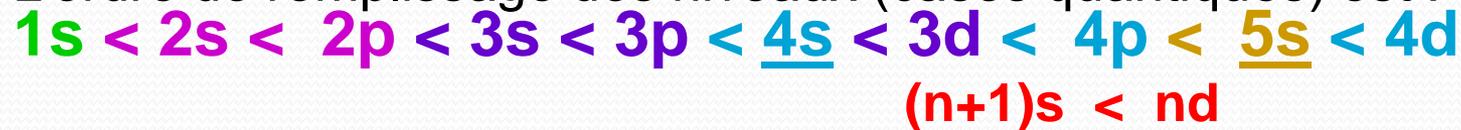
n	ℓ = 0	1	2	3
1	1s			
2	2s	2p		
3	3s	3p	3d	
4	4s	4p	4d	4f
5	5s	5p	5d	5f
6	6s	6p	6d	6f
7	7s	7p	7d	7f



## Règle

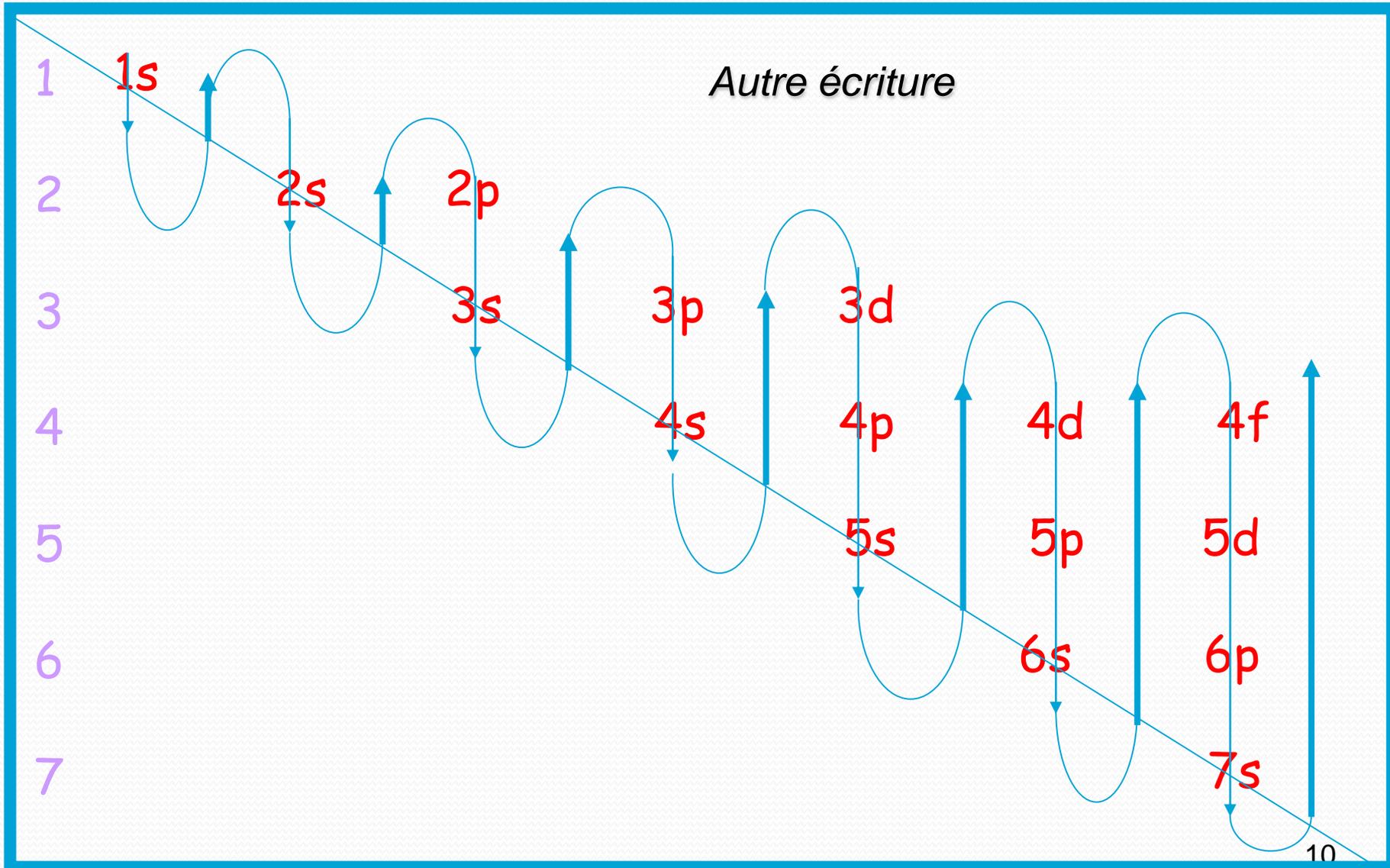
- 1) Remplissage à  $(n+l)$  croissant
- 2) Pour  $(n+l)$  constant,  $n$  doit croître

L'ordre de remplissage des niveaux (cases quantiques) est :



# B- Règles de remplissage

La configuration est donnée par la règle de Klechkovsky



# B- Règles de remplissage

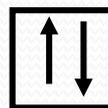
- Configuration électronique : **état fondamental** de l'atome
- Case quantique = orbitale
  - Avec un  $n$ ,  $\ell$ , et  $m$  donnés
  - Représentée par un symbole :  $\square$
  - Remplie avec : 0, 1 ou 2 électrons (**max**)

1) case quantique vide  $\square \Rightarrow E = 0$

2) case quantique à 1 électron  $\boxed{\uparrow}$  idem  $\boxed{\downarrow}$

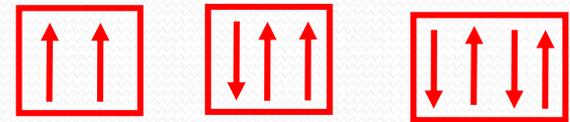
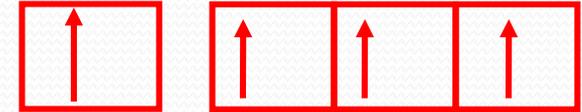
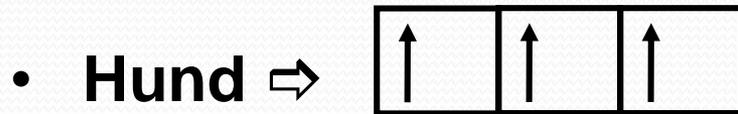
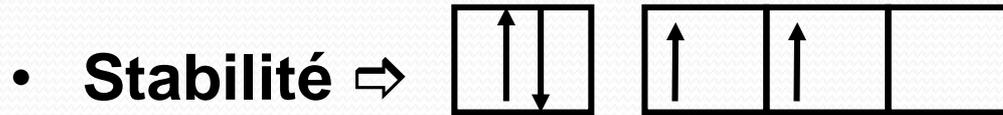
3) Case quantique à 2 électrons :

spins dits **anti-parallèles ou appariés**



# B- Règles de remplissage

OUI | NON



Rq: cases parallèles: même niveau d'énergie

# B- Règles de remplissage

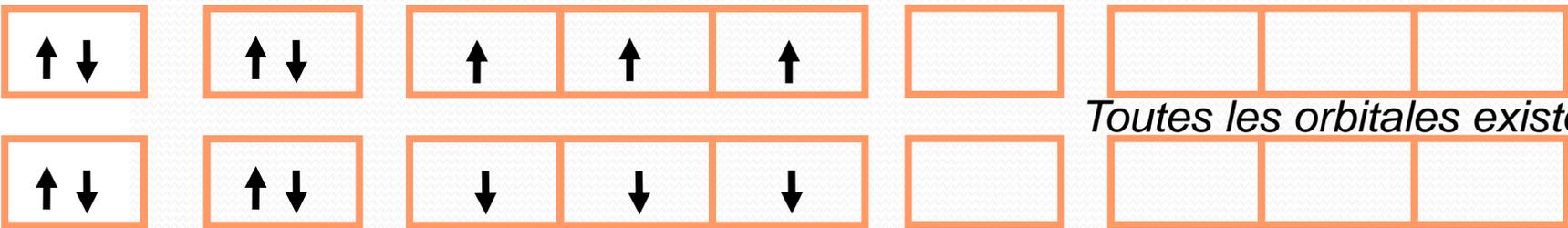
Règle de Klechkovsky :

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < \underline{4s} < \underline{3d} < 4p < \underline{5s} < 4d \dots$$

NB:  $(n+1)s < nd$

Ex : azote  $Z = 7$  état fondamental, atome neutre donc 7 e- =  
 $1s^2 2s^2 2p^3$

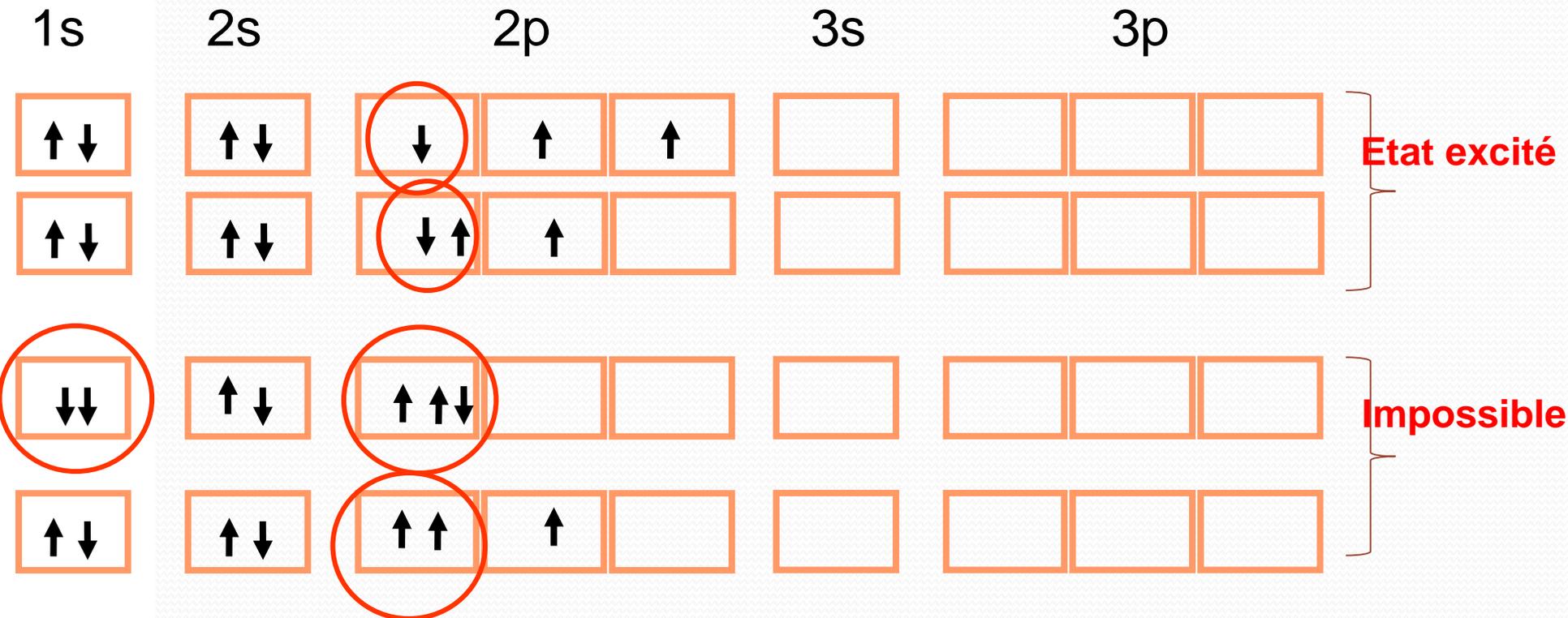
1s            2s                    2p                                    3s                                    3p



*Toutes les orbitales existent*

# B- Règles de remplissage

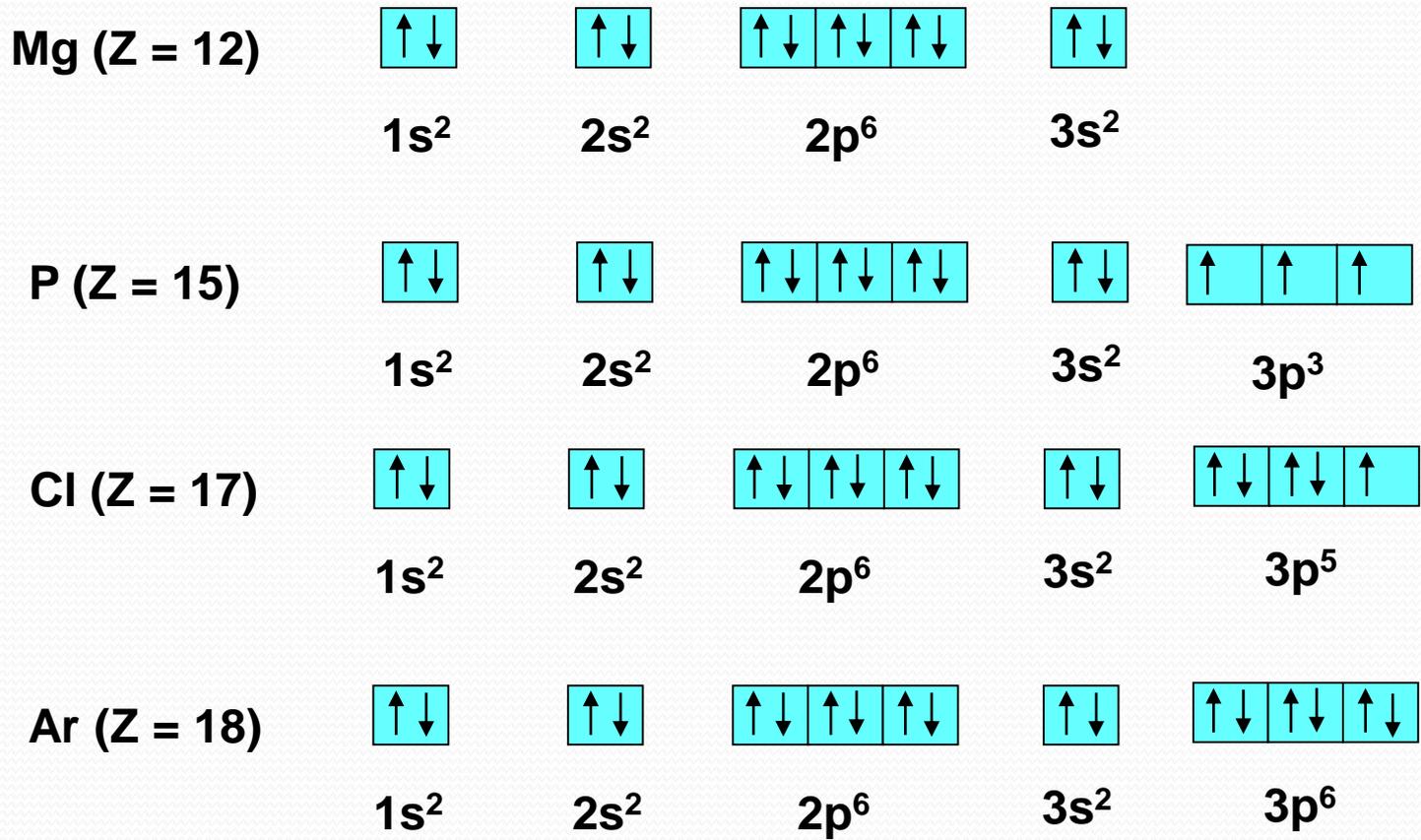
Ex : azote  $Z = 7$  état fondamental, neutre donc  $7 e^- = 1s^2 2s^2 2p^3$



**INTERDIT**

# B- Règles de remplissage

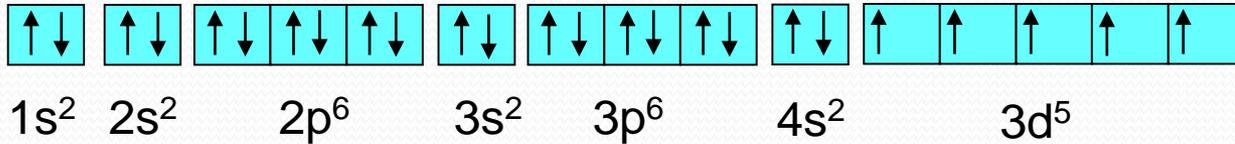
## Éléments des périodes 1 à 3



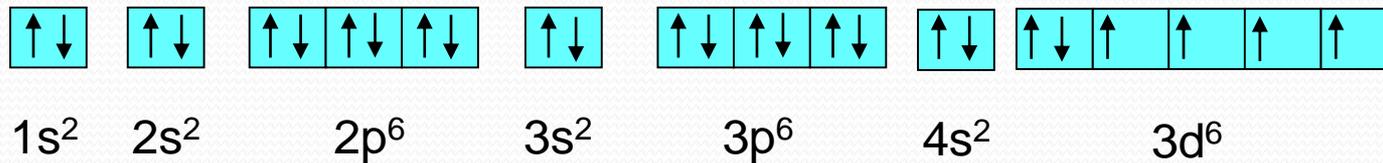
# B- Règles de remplissage

## Eléments des périodes > 3

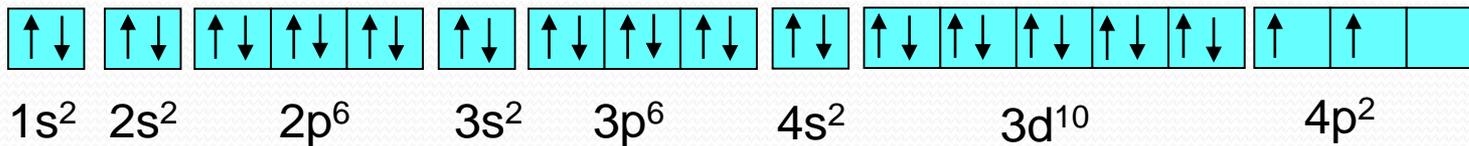
Mn : Z = 25



Fe : Z = 26



Ge : Z = 32



# CHIMIE PHYSIQUE

Chapitre 1 : Structure de l'atome

➔ Chapitre 2 : Configuration électronique

Chapitre 3: Classification périodique

Chapitre 4 : Orbitales atomiques

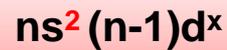
Chapitre 5 : Liaisons faibles / fortes

Chapitre 6 : Thermodynamique et équilibres

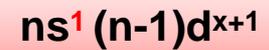
# B- Règles de remplissage: exceptions

La proximité des orbitales  $(n-1)d$  et  $ns$  font que les électrons se répartissent sur les deux orbitales

Éléments de transition

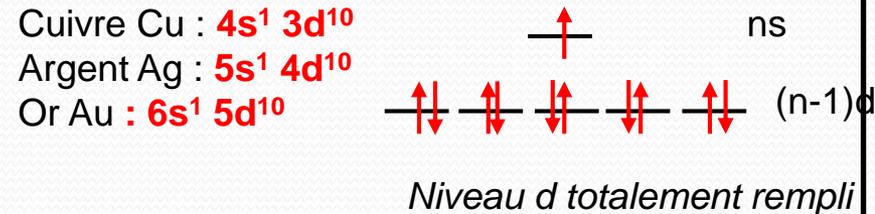
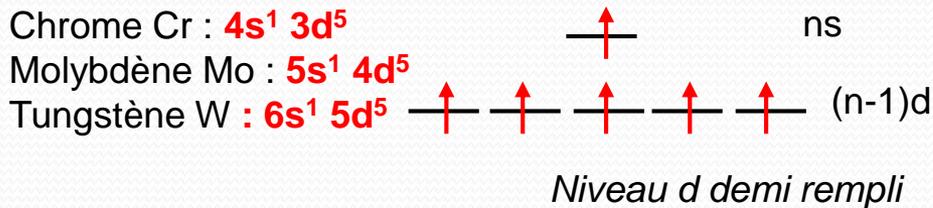


$x = 4$  ou  $9$



$x = 4$

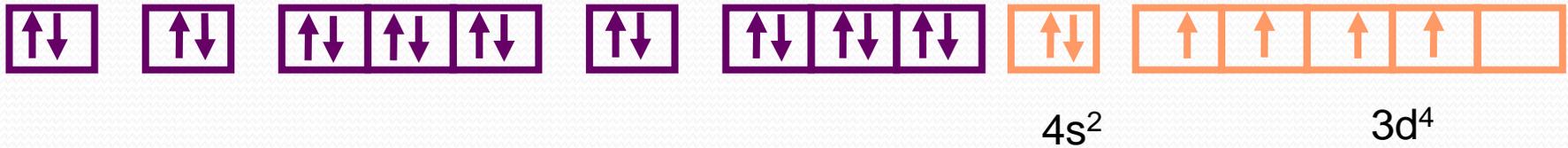
$x = 9$



# B- Règles de remplissage: exceptions

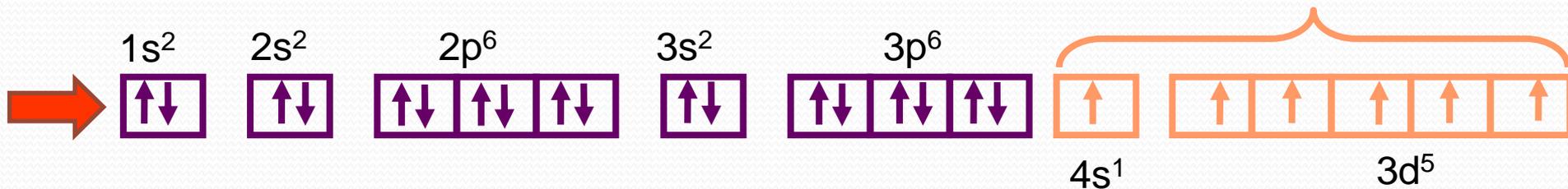
**Cr** :  $Z = 24$  atome neutre 24  $e^-$  :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$

4 spins parallèles



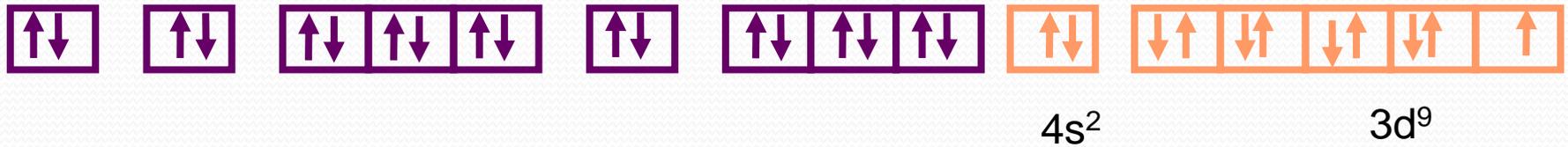
Gain de stabilité en désappariant  $4s^2$  :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$

6 spins parallèles

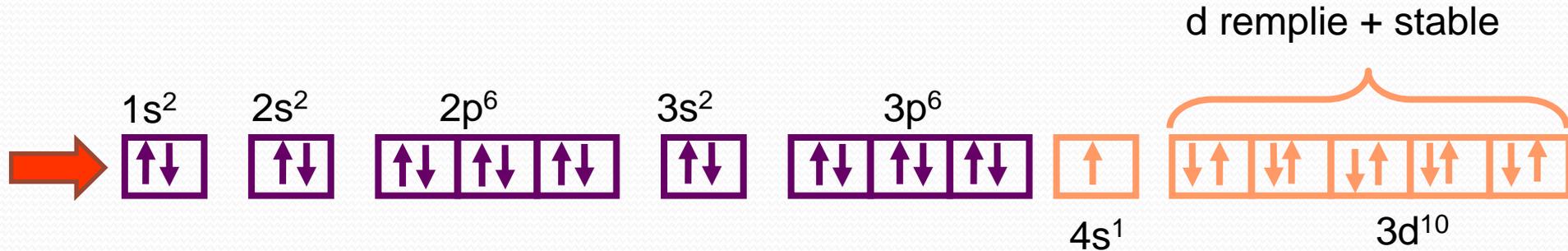


# B- Règles de remplissage: exceptions

**Cu** :  $Z = 29$  :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$



*Gain de stabilité en désappariant  $4s^2$  :*  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$



## B- Electrons de valence et de cœur

- **Electrons de valence :**

électrons situés dans les couches externes (de + haute énergie), + accessibles (-attachés au noyau) et responsables de liaisons chimiques

**Bloc s : électrons ns**

**Bloc d : électrons ns + (n-1)d**

**Bloc p : électrons ns + np**

- **Electrons de cœur :**

électrons autres que les électrons de valence

# B- Electrons de valence et de cœur

## Bloc s : ns

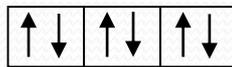
Na : Z = 11



1s<sup>2</sup>



2s<sup>2</sup>



2p<sup>6</sup>



3s<sup>1</sup>

## Bloc p : ns+np

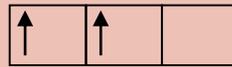
C : Z = 6



1s<sup>2</sup>



2s<sup>2</sup>



2p<sup>2</sup>

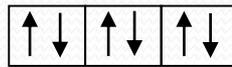
Cl : Z = 17



1s<sup>2</sup>



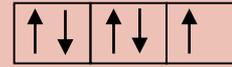
2s<sup>2</sup>



2p<sup>6</sup>



3s<sup>2</sup>



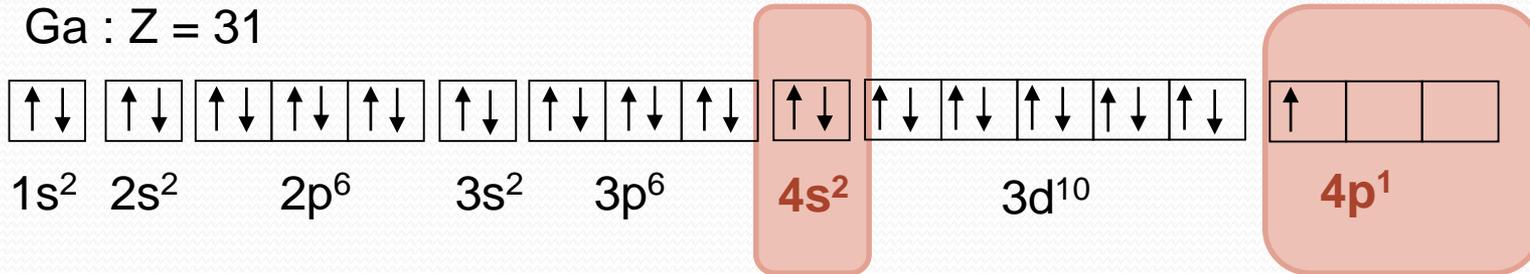
3p<sup>5</sup>

# B- Electrons de valence et de cœur

## Bloc p : ns+np

*Couche (n-1)d pleinement remplie → bloc p*

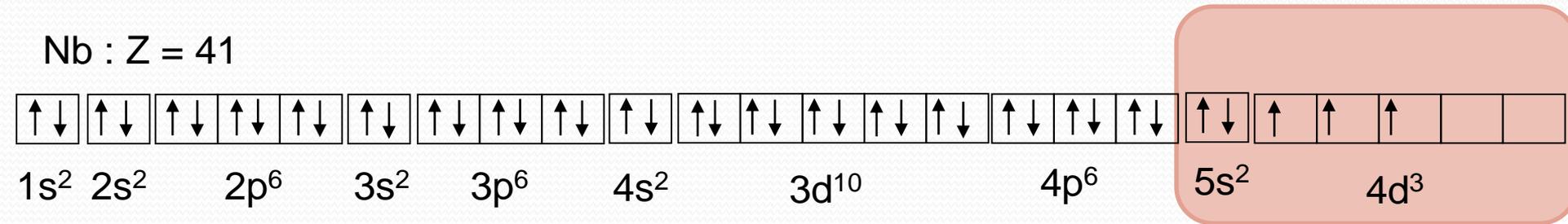
Ga : Z = 31



# B- Electrons de valence et de cœur

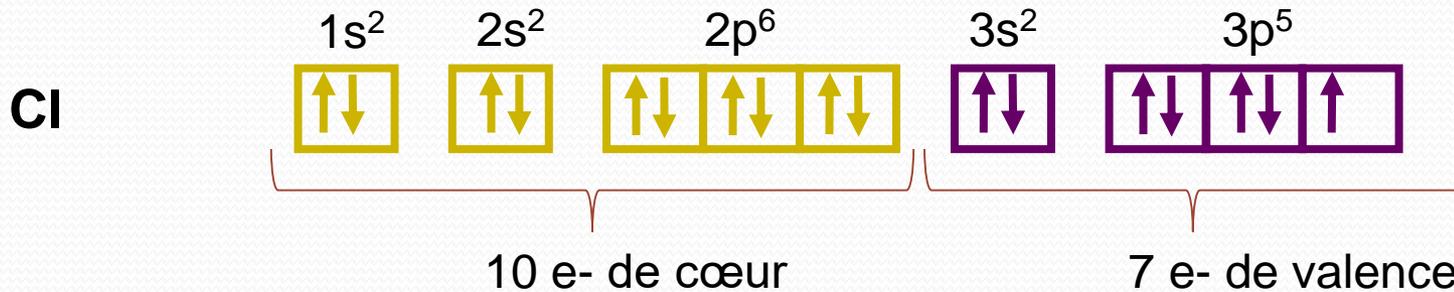
**Couche (n-1)d non complètement remplie → bloc d : ns(n-1)d**

Nb : Z = 41

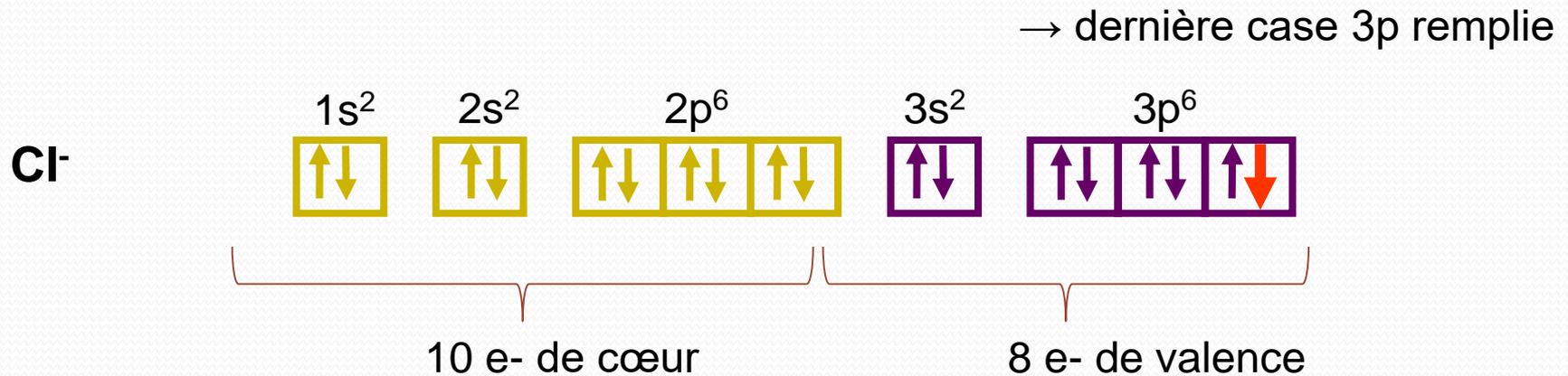


# B- Configuration électroniques des ions

**Cl : Z = 17**



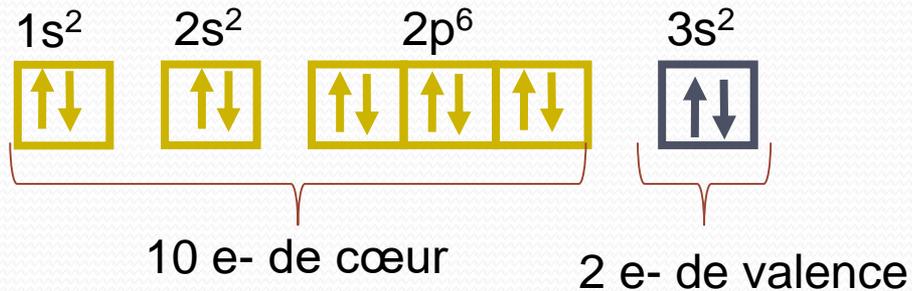
**Anion Cl<sup>-</sup> : 17 + 1 = 18 électrons**



→ Configuration électronique du gaz rare qui suit l'élément

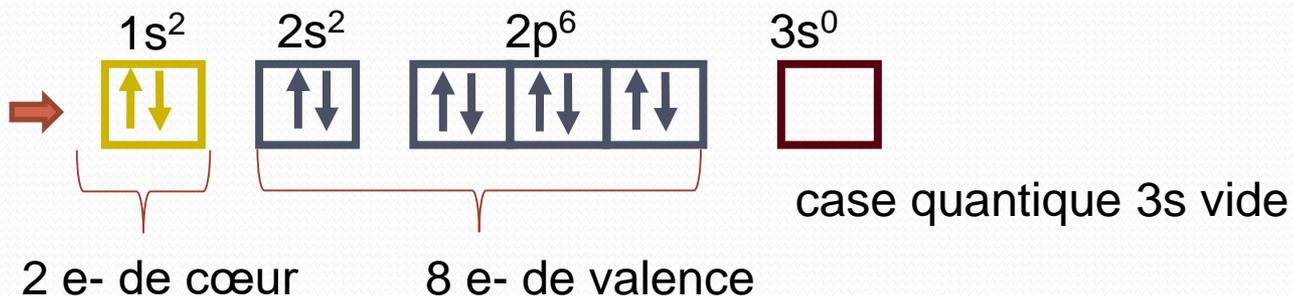
# B- Configuration électroniques des ions

**Mg : Z = 12**



**Cation Mg<sup>2+</sup> : 12 - 2 = 10 électrons**

**on enlève 2 e<sup>-</sup> de valence de la case 3s**

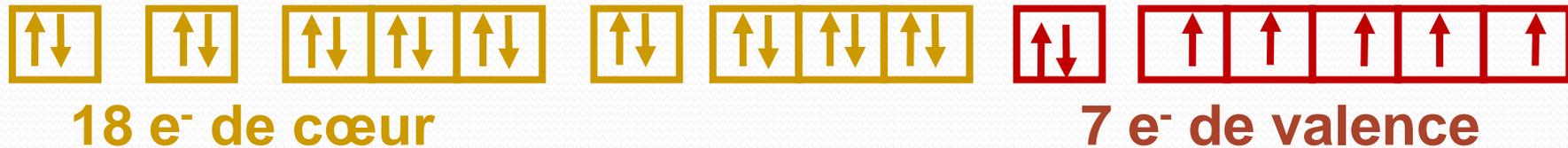


**→ Configuration électronique du gaz rare qui précède l'élément**

# B- Configuration électroniques des ions

*Attention aux  $e^-$  de valence !*

**Mn  $Z = 25$  :** Energie (électrons 4s) < Energie (électrons 3d)



**Ion  $Mn^{2+}$  :** 23 électrons à placer (25 protons!)

2 électrons à retirer : lesquels ?

a) 2 électrons s ? b) 2 électrons d ? c) 1 de chaque ?

**Retirer les  $e^-$  de valence : on retire en premier les électrons de la couche n la plus grande**

# Configuration électronique d'un cation

**Mn Z = 25** : Energie (électrons 4s) < Energie (électrons 3d)  
 Mais écart très faible

**Mn<sup>2+</sup>** :



5 spins parallèles: + stable

**5 e<sup>-</sup> de valence**

► **Configuration à l'état fondamental**



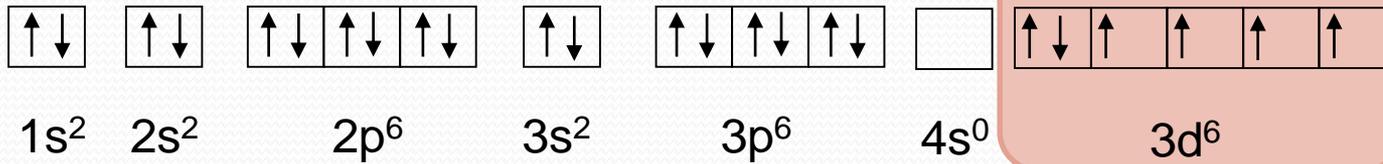
**Configuration d'un état excité**

# B- Configuration électroniques des ions



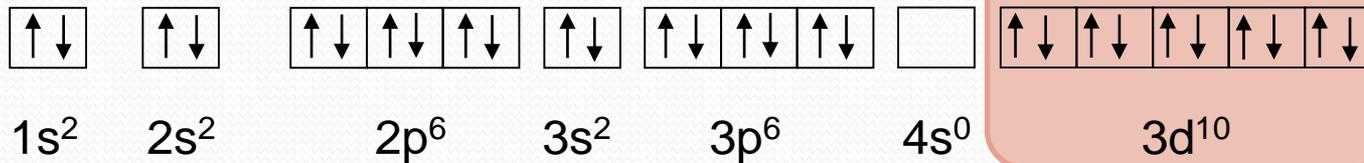
**l'électron partant est l'électron de la couche électronique la plus en périphérie (de + grand n) → Toujours écrire la configuration de l'atome avant celle de l'ion**

**Fe<sup>2+</sup> : Z = 26 → 24 e<sup>-</sup>**



Et non 4s<sup>2</sup> 3d<sup>4</sup> !!

**Cu<sup>+</sup> : Z = 29 (exception!) → 28 e<sup>-</sup> électrons**



Et non 4s<sup>2</sup> 3d<sup>8</sup> !!  
ni 4s<sup>1</sup> 3d<sup>9</sup> !!

