

Configuration électronique d'un atome

I.1) position du problème

I.2) règle de stabilité

Écrire une configuration électronique d'un atome
=
Répartir les électrons de l' atome sur les différents niveaux énergétiques
=
« Remplir » les électrons dans les différentes orbitales atomiques

(n, l) caractérise une sous-couche (un niveau d'énergie)

(n, l, m) caractérise une OA

Lorsqu'on s'intéresse au remplissage des OA par des électrons, on prend en compte un 4^{ème} nombre quantique qui rend compte des propriétés magnétiques de l'électron.

4^{ème} nombre quantique : nombre quantique de spin

L'électron possède un mouvement de révolution sur lui-même appelé « spin »
 $S = 1/2$
Le sens de rotation est caractérisé par le « moment magnétique de spin »
 $m_s = + 1/2$ ou $- 1/2$

II.2) Règle de stabilité

Les électrons sont répartis de manière à obtenir la configuration de minimum d'énergie.

Les configurations électroniques ne sont établies que pour l'atome dans son état fondamental !

Les électrons sont répartis par ordre croissant d'énergie en commençant par la sous-couche de plus basse énergie.

➤ ordre croissant d'énergie des sous-couches donné par la règle de Klechkovski (cf. paragraphe règles de remplissage)

II. Règles de remplissage

II.1) Règle de Klechkovski

II.2) Principe d'exclusion de Pauli

II.3) Les 3 types de représentation de la configuration électronique

II.4) Règle de Hund

II.1) Règle de Kleckovski

Règle de Kleckovski

L'énergie des sous-couches augmente quand la somme $(n + l)$ augmente.

Lorsque la somme $(n + l)$ est identique pour 2 sous-couches, la sous-couche de plus basse énergie est celle pour laquelle n est le plus petit.

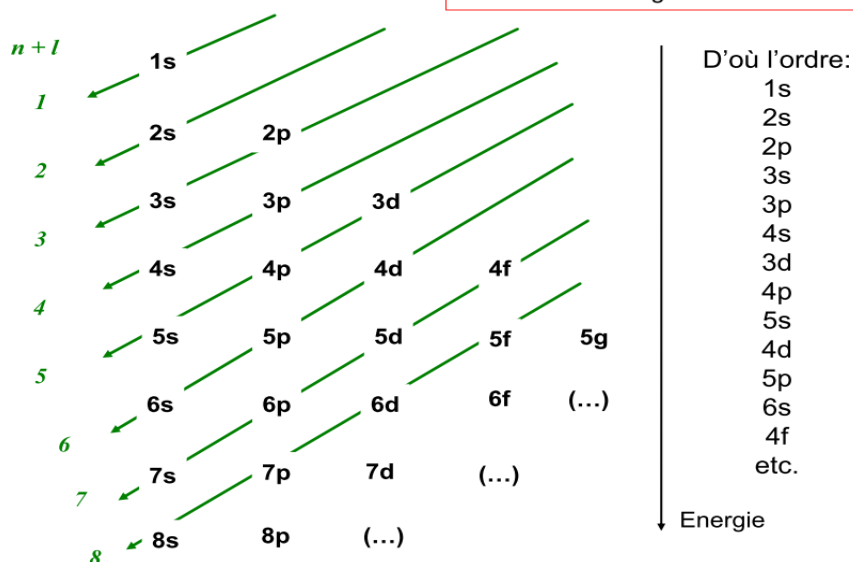
➤ l'énergie précise des différentes sous-couches change pour chaque élément

➤ l'ordre des sous-couches reste lui le même quelque soit l'élément considéré (aux inversions près.....)

si $n+l$ identique, c'est le niveau avec l'indice n le plus petit qui est rempli en premier

II.1) Règle de Kleckovski

ii) Moyen mnémotechnique pour la règle de Kleckovski



II.2) Principe d'exclusion de Pauli

Dans le même atome, il ne peut pas y avoir 2 électrons dont les 4 nombres quantiques sont identiques

Une OA donnée → un triplet (n, l, m) donné.

La quadruplet de nombres quantiques associé à un électron décrit par une OA donnée ne peut être que $(n, l, m, m_s = +1/2)$ ou $(n, l, m, m_s = -1/2)$

Conséquence → Une OA donnée $(n, l$ et m donnés) ne peut décrire que 2 électrons

Et donc....

2 électrons maximum au niveau énergétique d'une sous-couche s
6 électrons maximum au niveau énergétique d'une sous-couche p
10 électrons maximum au niveau énergétique d'une sous-couche d
14 électrons maximum au niveau énergétique d'une sous-couche f

II.3) Les 3 types de représentation de la configuration électronique

- Représentation dans le diagramme énergétique
- Représentation en cases quantiques
- Ecriture simplifiée de la configuration électronique

Représentation dans le diagramme énergétique

les électrons sont représentés par des flèches verticales.

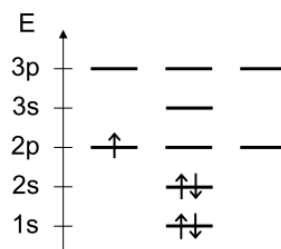
↑ : électron de $m_s = +1/2$

↓ : électron de $m_s = -1/2$

↑↓ : deux électrons décrits par la même OA : doublet d'électrons appariés.

Deux électrons appariés ont nécessairement des nombres quantiques de spin opposés (« spins anti-parallèles ») pour respecter le principe d'exclusion de Pauli

Une représentation possible



Atome de bore : 2
doublets d'électrons
appariés et un
électron célibataire.

Représentation en cases quantiques :

les OA sont représentées par des cases appelées « cases quantiques ».

Les cases sont placées de gauche à droite par ordre croissant d'énergie, les cases accolées représentent des OA dégénérées.



Ecriture simplifiée de la configuration électronique:

Les sous-couches sont placées de gauche à droite par ordre croissant d'énergie, le nombre d'électrons peuplant chaque sous-couche étant indiqué en exposant.



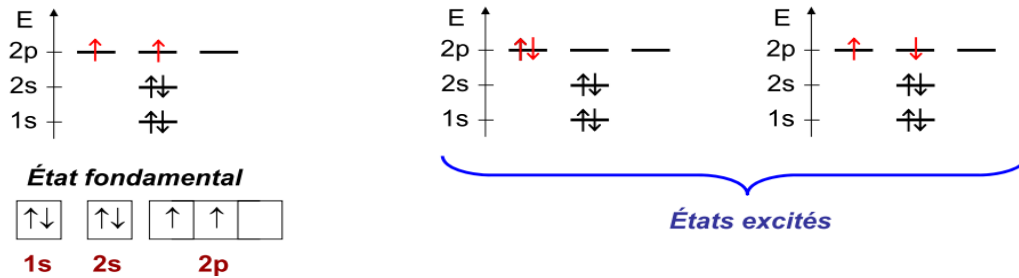
si $n+l$ identique, c'est le niveau avec l'indice n le plus petit qui est rempli en premier

II.4) Règle de Hund

Règle de Hund :
 pour des orbitales atomiques **dégénérées**, l'état de stabilité maximum est obtenu lorsque les électrons occupent le maximum de ces OA dégénérées, leurs nombres magnétiques de spin étant de même signe (« spins parallèles »)

Attention : l'écriture simplifiée de la configuration électronique (ici $1s^2 2s^2 2p^2$) ne fait pas apparaître cet état de stabilité maximum selon la règle de Hund.

Configuration électronique de l'atome de carbone (${}_6\text{C}$) dans son état fondamental ?



Une orbitale peut être symbolisée par une case quantique ou un trait.

OA avec 1 seul électron, ou un électron célibataire: \uparrow

OA avec 2 e^- appariés ou une paire d' e^- de spin opposé: $\uparrow\downarrow$

• 1 OA $1s^2 = 1\text{OA } 1s$ avec 2 e^- (1 pour $n = 1$ et s pour $l = 0$)

Les spin-orbitales correspondantes sont $1s\alpha$ et $1s\beta$.

Un état excité sera par ex: $1s 2p$.

• 3 OA $2p^6$



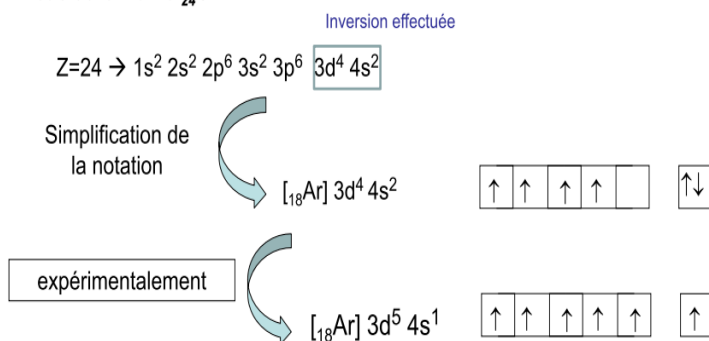
$n = 2$ $l = 1$ $m_l = 0, \pm 1$ $m_s = \pm 1/2$

Les OA ayant même l forment une sous-couche (subshell) notée $s, p, d, f \dots$

Les OA ayant même n forment une couche notée K, L, M, N, O, P, Q .

III. Limites de la règle de Kleckovski et exceptions aux règles de remplissage.

• cas du chrome ${}_{24}\text{Cr}$



Ex: ${}_{19}\text{K} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1; [\text{Ar}] 4s^1$

${}_{40}\text{Zr} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^2$

écrit également: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^2 5s^2$
 ou $K L M 4s^2 4p^6 4d^2 5s^2$ ou $[\text{Kr}] 4d^2 5s^2$

Exceptions: ${}_{24}\text{Cr}$ est: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$ au lieu de $\dots 4s^2 3d^4$

${}_{29}\text{Cu}$ est: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$ au lieu de $\dots 4s^2 3d^9$

5 - Donner les configurations électroniques des atomes et ions suivants : Br^- , Kr , Rb^+ , Sr^{2+} et Y^{3+}

$\text{Br}^- : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5 \rightarrow \text{Br}^- : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

$\text{Kr} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

$\text{Rb} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 \rightarrow \text{Rb}^+ : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

$\text{Sr} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 \rightarrow \text{Sr}^{2+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

$\text{Y} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^1 \rightarrow \text{Y}^{3+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Qu'ont-ils en commun?

Ils sont isoélectroniques