

STRUCTURE ELECTRONIQUE DES ATOMES



1. ATOME ET ELEMENT CHIMIQUE

1.1 Constitution de l'atome

- Un atome est une entité électriquement neutre, formée d'un noyau chargé positivement et d'électrons chargés négativement, en mouvement dans le vide autour de lui.
- Le noyau est constitué de A nucléons :
 - ❖ Z protons, portant chacun une charge électrique $+e$;
 - ❖ $A-Z$ neutronsLa charge du noyau est $+Ze$.



- Dans un atome il ya Z électrons qui gravitent autour du noyau ;ils se répartissent dans les couches et les sous couches électroniques. Chaque électron porte la charge $-e$.
- Un noyau est représenté par le symbole A_ZX pour lequel :
 - Z est le numéro atomique ou nombre de protons
 - A est le nombre de masse ou de nucléons.



- **1.2 Élément chimique**

- Un élément chimique est l'ensemble des atomes et des ions ayant le même numéro atomique Z . Il est défini par son numéro atomique.
- A un même numéro atomique (donc à un même élément chimique) peut correspondre plusieurs noyaux différents par leur nombre de neutrons : on parle d'isotopes.
- **Exemples** : ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{14}_6\text{C}$; ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{18}_8\text{O}$; ${}^{35}_{17}\text{Cl}$, ${}^{37}_{17}\text{Cl}$.



- NB : Tous les isotopes ne sont pas nécessairement stables.
- Les pourcentages des isotopes d'un élément particulier tels qu'ils sont constatés à l'état naturel sur la Terre constituent les abondances naturelles.
- Pour un élément naturellement présent sous forme d'un mélange d'isotopes, la masse atomique est la moyenne pondérée des masses de chaque isotope, chacune de celles-ci étant multipliée par son abondance naturelle.



Exemple :

${}^{35}_{17}\text{Cl}$ (abondance naturelle: 75,77;
masse atomique égale à 34,9689 uma)

${}^{37}_{17}\text{Cl}$ (abondance naturelle: 24,23;
masse atomique égale à 36,9659 uma)

- $1 \text{ uma} = 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
- La masse atomique du chlore :
- $m(\text{Cl}) = 34,9689 * \frac{75,77}{100} + 36,9659 * \frac{24,23}{100}$
- $m(\text{Cl}) = 35,45 \text{ uma}$



- Exercice : La masse atomique du carbone naturel est de 12,011 uma. Sachant que le carbone naturel est en première approximation un mélange des isotopes $^{12}_6\text{C}$, $^{13}_6\text{C}$ et que la masse atomique de l'isotope $^{13}_6\text{C}$ est égale à 13,00 uma, et la masse atomique de l'isotope $^{12}_6\text{C}$ est de 12 uma, retrouver l'abondance isotopique naturelle des isotopes $^{12}_6\text{C}$, $^{13}_6\text{C}$.



- **1.3 Corps simples et corps composés**
- Les corps simples sont constitués d'un seul élément chimique : $He, C, H_2, O_3 \dots \dots$
- Les corps composés sont constitués de plusieurs éléments chimiques : $H_2O, CH_4, H_3PO_4 \dots \dots$



2. STRUCTURE ELECTRONIQUE DES ATOMES

2.1 Nombres quantiques n, l, m

- Le comportement de l'électron dans l'atome est régi par la donnée de quatre nombre quantiques n, l, m et m_s .



2.1.1 Nombre quantique n

n constitue le nombre quantique principal, c'est un entier positif non nul. Il détermine la couche quantique à laquelle appartient l'électron. Il quantifie l'énergie de l'électron de l'atome d'hydrogène.



2.1.2 Nombre quantique l

- Le nombre quantique l constitue le nombre quantique secondaire ou azimutal. Il prend les valeurs entières comprises entre 0 et n-1 (inclus). Il détermine la sous couche à laquelle appartient l'électron. En général la valeur de l est indiquée par une lettre :

Valeur de l	0	1	2	3
Sous couche	s	p	d	f

- Le couple (n, l) définit la sous couche électronique.



2.1.3 Nombre quantique m

- Le nombre quantique m ou m_l est le nombre quantique magnétique. Il prend les valeurs entières comprises entre $-l$ et $+l$ (inclus).
- Le triplet (n, l, m) définit une orbitale atomique



2.2 Notion d'orbitale atomique, dégénérescence

- La donnée des 3 nombres quantiques n , l et m définit une fonction mathématique appelée orbitale atomique. Elle contient toute l'information physique relative à l'électron qu'elle décrit.
- A chaque orbitale est associée un niveau d'énergie quantifiée.



- Considérons l'électron possédant un nombre $n = 1$, la sous couche correspondante est $l = 0$. Il n'existe qu'une seule possibilité caractérisée par $m = 0$.

Pour un électron caractérisé par $n = 1$ et possédant l'énergie $E_1 = -13.6 \text{ eV}$, il n'existe qu'une seule orbitale atomique décrite par les nombres quantiques $n = 1$, $l = 0$ et $m = 0$. Elle est notée $1s$.



- Considérons un électron possédant le nombre $n = 2$. l peut prendre deux valeurs : 0 et 1 .
- Si $l = 0$, m prend une seule valeur, 0
- Si $l = 1$, m peut prendre trois valeurs, -1 , 0 et $+1$.

Pour un électron caractérisé par $n = 2$ et d'énergie $E_2 = -3,4 \text{ eV}$, il existe 4 possibilités d'orbitales atomiques notées : $2s$, $2p_0$, $2p_{-1}$ et $2p_1$.

On désigne par $2p$ l'ensemble des trois orbitales $2p_0$, $2p_{-1}$ et $2p_1$.

- On appelle dégénérescence d'un niveau d'énergie le nombre d'orbitales atomiques correspondant à ce niveau. Elle vaut n^2 .



2.3 Nombre quantique de spin

- Pour décrire complètement le comportement d'un électron lié à l'atome, il est nécessaire de préciser la valeur d'un quatrième nombre quantique, m_s , qui ne prend que deux valeurs : $+1/2$ et $-1/2$.
- L'état quantique d'un électron est entièrement déterminé par la donnée du quadruplet (n, l, m, m_s) .

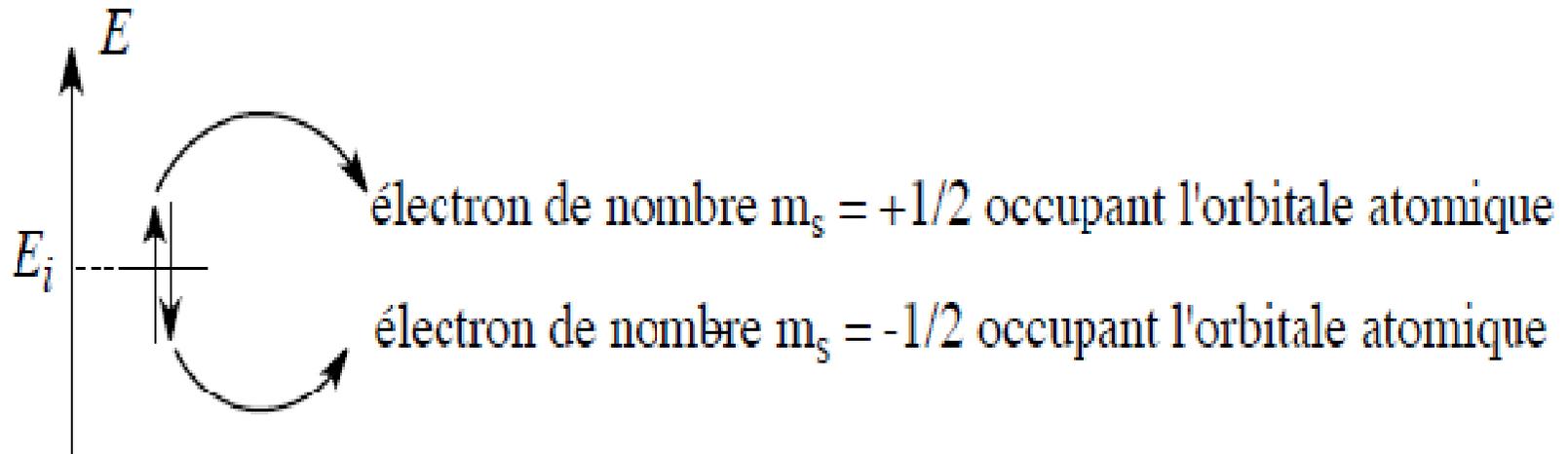


2.4 Principe d'exclusion de Pauli

- Deux électrons d'un même atome ne peuvent pas posséder les quatre mêmes nombres quantiques.
- Une orbitale atomique est définie par la donnée des trois nombres quantiques n , l et m . Elle ne pourra donc décrire que le comportement de deux électrons : un électron avec un nombre quantique de spin $+1/2$ et un électron avec un nombre quantique de spin $-1/2$.



- Sur un diagramme d'énergie, une orbitale atomique est schématisée par un segment horizontal représentant son énergie. L'état de spin sera représenté par une flèche verticale, dirigée vers le haut pour un état $m_s = +1/2$ et dirigée vers le bas pour un état $m_s = -1/2$



- On peut symboliser l'orbitale atomique accueillant les électrons par une case (case quantique) pouvant accueillir au maximum deux électrons.
- Une orbitale atomique de type s, définie par les nombre quantiques $n, l=0$ peut contenir au maximum deux électrons qui respectent le principe d'exclusion de Pauli.
- Une orbitale atomique de type p, définie par les nombres quantiques $n, l=1$ peut contenir au maximum six électrons.



- Une orbitale atomique de type d, définie par les nombres quantiques n et $l=2$ peut contenir au maximum dix électrons.
- Une orbitale atomique de type f, définie par les nombres quantiques n et $l=3$ peut contenir au maximum quatorze électrons.



2.5 Configuration électronique des atomes et des ions.

- Établir une configuration électronique, c'est répartir les électrons dans les différentes orbitales atomiques. Le nombre d'électron occupant une orbitale est indiqué en exposant.
- Plusieurs règles permettent d'établir la configuration électronique d'un atome.

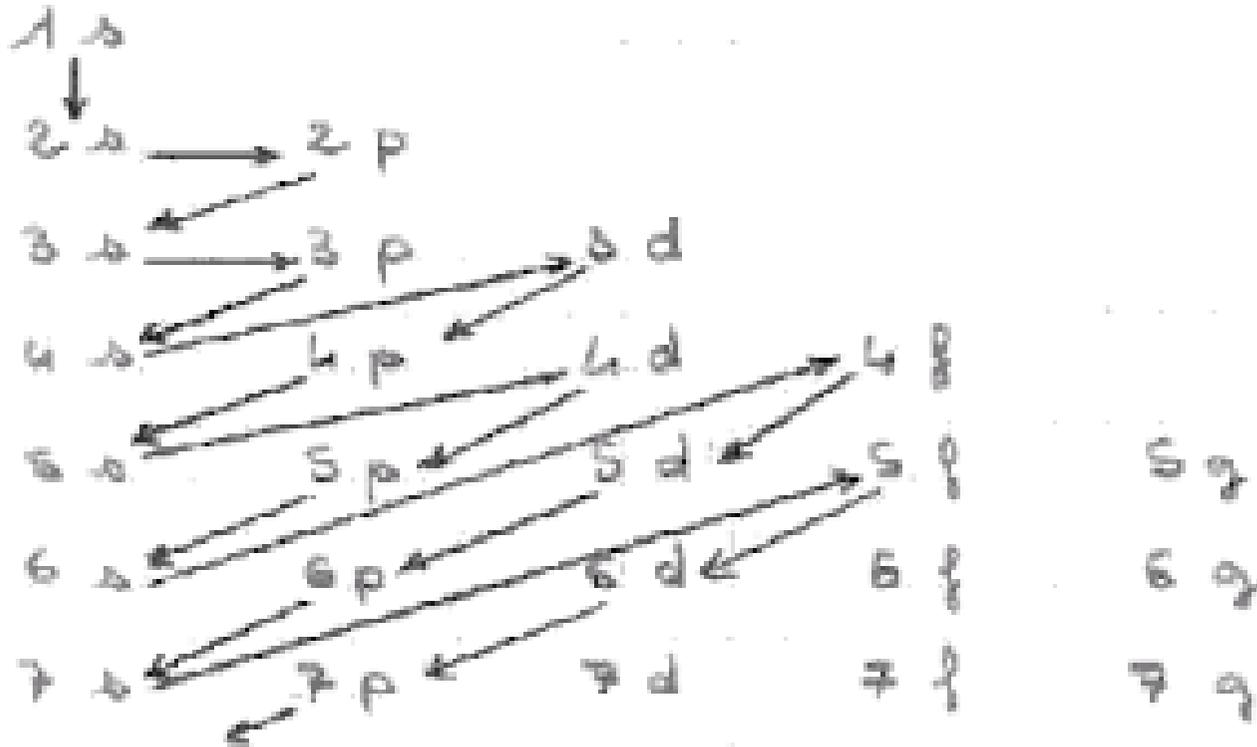


2.5.1 Règle de Klechkowski

- Les orbitales atomiques sont remplies dans l'ordre des $n+l$ croissant.
- Lorsque plusieurs orbitales ont la même valeur de $n+l$, la première à être remplie est celle qui a la plus petite valeur de n .
- Ainsi l'ordre suivant est observé

orbitale	1	2	2p	3	3p	4	3d	4p	5
	s	s		s		s			s
$n+l$	1	2	3	3	4	4	5	5	5





- Une façon plus simple de retenir l'ordre de remplissage des orbitales atomiques est :

2.5.2 Règle de Hund

- Comment répartir les électrons dans les orbitales dégénérées ? La règle de Hund permet de répondre à cette préoccupation.
- Dans l'état fondamental d'un atome, les électrons remplissent les niveaux d'énergie par énergie croissante. Pour des niveaux d'énergies dégénérées, les électrons occupent le maximum d'orbitales avec des spins parallèles.



2.5.3 Exemples

Quelques exemples de configuration électronique d'atome dans leur état fondamental.

Carbone ($Z=6$) : $C : 1s^2 2s^2 2p^2$

Sodium ($Z=11$) : $Na : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Fer ($Z=26$) : $Fe : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$



2.5.4 Quelques exceptions aux règles de remplissage

- Il existe quelques exceptions aux règles de remplissage.

- La structure électronique du chrome ($Z = 24$) dans son état fondamental telle que proposée par Klechkowski

est : $[\text{Ar}] 3d^4 4s^2$

- Celle qui est admise est : $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$



- Il en est de même pour le cuivre ($Z = 29$)



- Une explication établie par des considérations quantiques est le caractère stabilisateur fourni par une couche d ou f remplie ou demi-remplie.

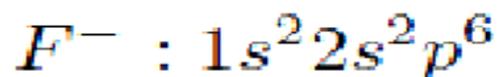


2.5.5 Électrons de cœur, électrons de valence

- Les électrons de valence d'un atome sont les électrons occupant les orbitales atomiques de nombre quantique principal n le plus élevé et/ou les orbitales insaturées. Ce sont ces électrons qui sont mise en jeu lors des réactions chimiques.
- Les électrons de cœur sont ceux qui n'appartiennent pas aux orbitales de valence. Ils sont les plus proches du noyau.



- **2.5.6 Cas des ions**
- Toutes les règles énoncées pour décrire la configuration électronique d'un atome se généralisent aux ions.
- Un anion possède plus d'électrons que l'atome tandis qu'un cation en possède moins que l'atome.
- Exemple : Donner la structure électronique de l'ion F^- .
- L'ion fluorure possède un électron de plus que l'atome de fluor, soit 10 électrons



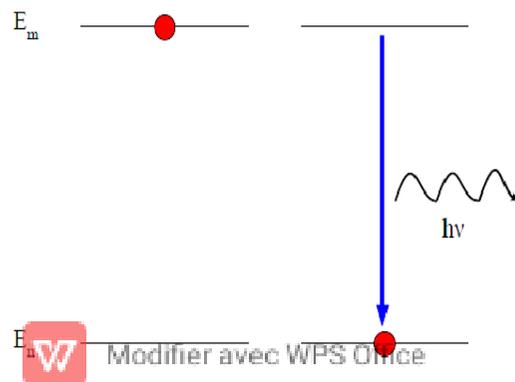
- Pour les cations il faut partir de la configuration de l'atome et retirer les électrons les plus éloignés du noyau, c'est-à-dire ceux qui ont la plus grande valeur de n .
- Exemple : Donner la configuration de l'ion Fe^{3+} .
- Le fer a 26 électrons. Sa configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
- La configuration électronique de l'ion Fe^{3+} est : $\text{Fe}^{3+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$



3. ABSORPTION ET EMISSION DE LA LUMIERE PAR UN ATOME.

3.1 Émission d'un photon par un atome

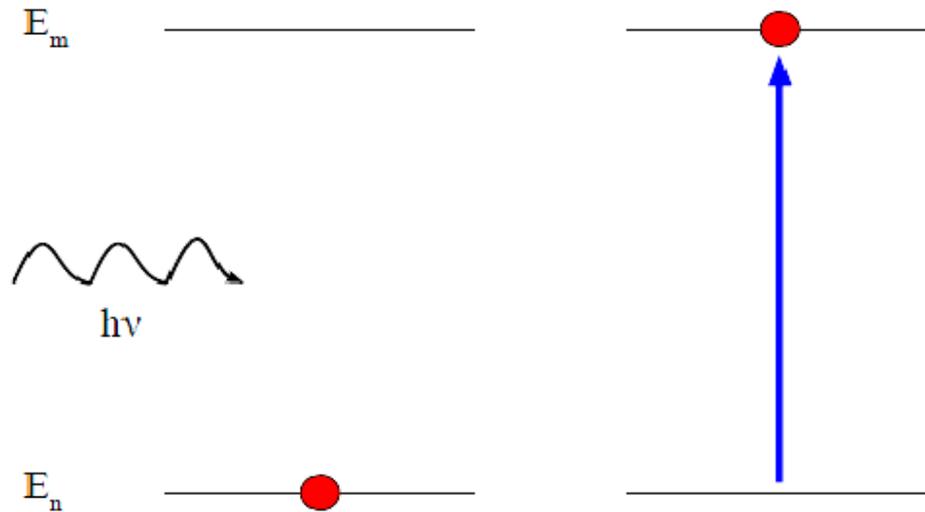
- On appelle état excité d'un atome, un état de l'atome de plus haute énergie que l'état fondamental.
- Lorsqu'un atome est dans un état excité il peut descendre vers un état moins excité en émettant un photon d'énergie $h\nu = E_m - E_n$.



- **3.2 Absorption d'un photon**

- Un électron dans un état moins excité ne peut accéder à un état plus excité qu'en absorbant un photon d'énergie

$$h\nu = E_m - E_n$$



- Exercice : L'énergie de l'atome d'hydrogène est donnée par la relation $E_n = -\frac{13.6}{n^2}$ (eV).
- Calculer les longueurs d'onde des radiations émises lorsqu'on passe des niveaux d'énergie E_5, E_4, E_3, E_2 au niveau fondamental. On donne $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$ J.s et $C = 3 \cdot 10^8$ m/s

