

## Atomes polyélectroniques : Structure électronique et propriétés

### Observation

Contrairement à l'atome d'hydrogène, l'énergie totale (E) d'un électron appartenant à un atome à plusieurs électrons ne peut pas être déterminée avec précision en appliquant l'équation de Schrödinger.

$$\left[ \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_i V_{iN} + \sum_{i \neq j} V_{ij} \right] \psi = E\psi$$

*Energie cinétique de l'électron*
*Attractions du noyau*
*Répulsions de l'électron*

$$V_{iN} = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \qquad V_{ij} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|}$$

Le terme  $V_{ij}$  ne peut pas être connu avec précision en raison des interactions entre électrons.

L'énergie de l'électron dans un atome à plusieurs électrons peut être déterminée en tenant compte de l'effet d'écran de type électrostatique dû à la présence des autres électrons dans l'espace noyau-électron considéré.

$$E = E_H \frac{Z_{\text{eff}}^2}{n^2}$$

$Z_{\text{eff}}$  (ou  $Z^*$ ) est la charge effective à laquelle est soumis l'électron considéré. Cette charge se trouve diminuée par comparaison à la charge du noyau (Z) :

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sum \sigma$$

$\sigma$  est la constante d'écran dont la valeur dépend de la position de l'électron considéré par rapport au reste des électrons. Les valeurs de  $\sigma$  déterminées par Slater sont consignées dans le tableau ci-dessous.

<b>i \ j</b>	1s	2s2p	3s3p	3d	4s4p	4f
<b>1s</b>	0,31					
<b>2s2p</b>	0,85	0,35				
<b>3s3p</b>	1	0,85	0,35			
<b>3d</b>	1	1	1	0,35		
<b>4s4p</b>	1	1	0,85	0,85	0,35	
<b>4f</b>	1	1	1	1	1	0,35

- **i** : électron considéré ; **j** : électron qui fait écran sur l'électron i.

**NB :**

L'énergie électronique de l'atome correspond à la somme des énergies de tous les électrons.

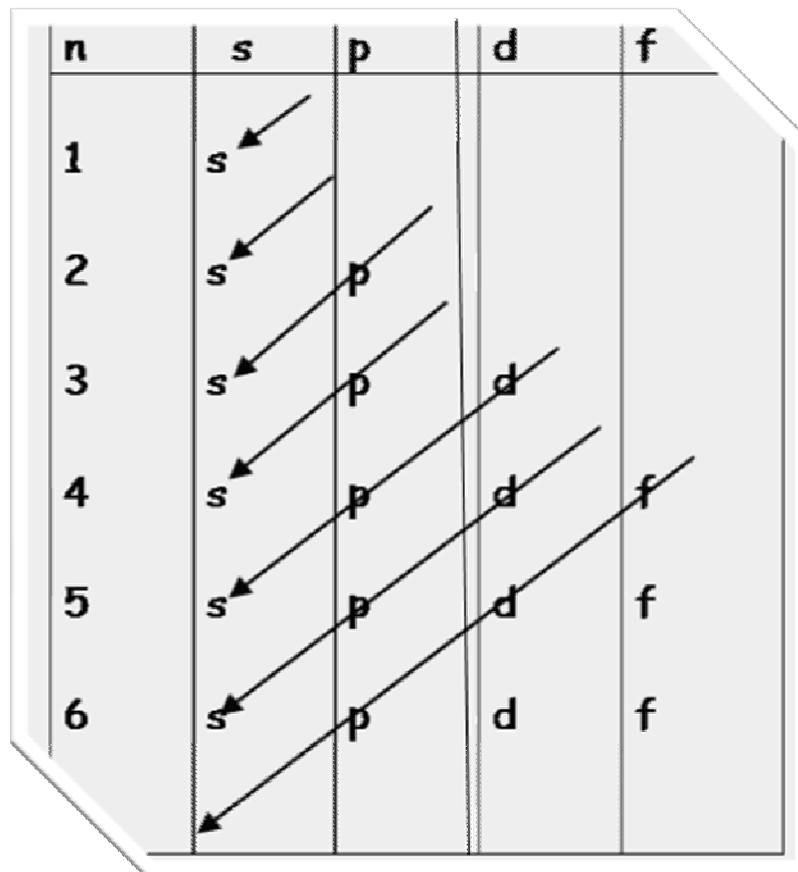
$$E = \sum (E_H \frac{Z_{eff}^2}{n^2})_i$$

### Structure électronique (configuration électronique)

Dans un atome, la répartition des électrons sur les orbitales atomiques d'un atome obéit à des règles.

#### Principe de stabilité

Les électrons occupent les orbitales atomiques par ordre croissant d'énergie. Le classement énergétique des orbitales atomiques se fait plus simplement selon la règle de Klechkowski (Tableau ci-dessous).



Ordre énergétique des orbitales atomiques :

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < \dots$  on constate que l'énergie croît avec  $n+l$

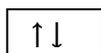
### Principe de Pauli

Les électrons d'un même atome ne peuvent pas avoir les mêmes quatre nombres quantiques.

En conséquence, chaque orbitale atomique, caractérisée par  $n$ ,  $l$  et  $m_l$  contient au maximum deux électrons à spins opposés ( $+\frac{1}{2}$  et  $-\frac{1}{2}$ ).

Remarque :

Une orbitale peut être représentée par une case ( $\square$ ) dite case quantique. Chaque case quantique peut contenir au maximum, deux électrons antiparallèles (à spins opposés)

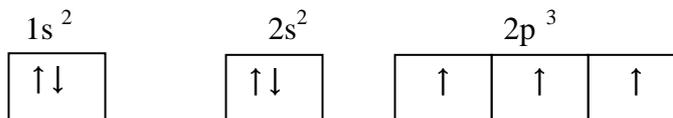


Pour chaque valeur de  $n$ , il existe  $n^2$  cases quantiques ou orbitales atomiques, et par conséquent  $2n^2$  électrons.

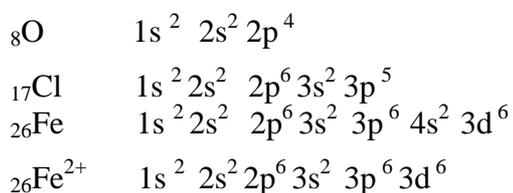
### Principe de Hund

A l'état fondamental, les électrons d'une même sous couche se répartissent sur le maximum d'orbitales atomiques (orbitales atomiques dégénérées).

Exemples  ${}_{7}\text{N}$



**Structure électronique de certaines espèces chimiques :**

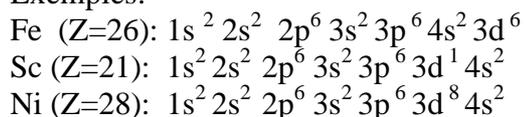


(les OA sont classées selon la règle de Klechkowski)

**Exception à la règle de Klechkowski**

L'énergie de la sous-couche (n+1)s devient supérieure à celle de nd une fois cette dernière contient un ou plusieurs électrons.

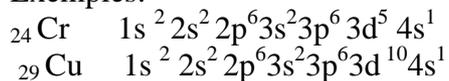
Exemples:



**Remarques :**

- Dans certains cas, la sous-couche d est plus stable lorsqu'elle est à moitié ou complètement remplie.

Exemples:



- Les électrons de la couche externe dits « électrons de valence » jouent un rôle important dans la réactivité chimique des éléments.

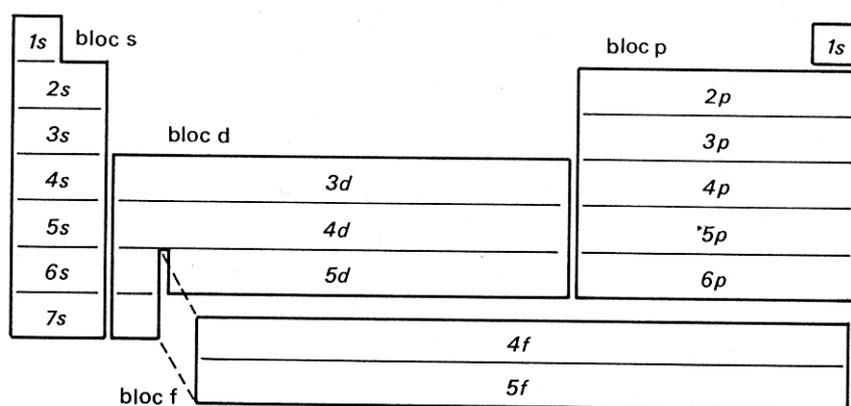
## Classification des éléments chimiques (Tableau périodique)

Le classement des éléments se fait selon  $Z$  croissant et prend en considération la structure électronique des atomes.

Les éléments dont les atomes ont la même couche externe (même  $n$ ) sont rangés dans une période (ligne).

Les éléments de même structure électronique externe possèdent des propriétés chimiques similaires et de ce fait, ils sont rangés dans la même colonne.

Le tableau périodique comporte environ 103 éléments y compris les éléments artificiels, et se compose de 4 blocs (s, p, d et f).



**Bloc s** (Métaux actifs) :  $ns^1 \rightarrow$  alcalin et  $ns^2 \rightarrow$  alcalino-terreux

**Bloc p** ( $ns^2 np^z$  ;  $1 \leq z \leq 6$ ) : Exemples: Chalcogènes ( $ns^2 np^4$ ); Halogènes ( $ns^2 np^5$ ); Gaz rares ( $ns^2 np^6$ ). Les éléments de ce bloc tels que: Si, Ge, As, Sb et Po sont des métalloïdes.

**Bloc d** (Métaux de transition) :  $(n-1) d^y ns^2$  ( $1 \leq y \leq 10$ )

**Bloc f** :  $(n-2)f^z (n-1)d ns^2$  ;  $1 \leq z \leq 14$ . Exemples: Lanthanides ( $4f^z 5d 6s^2$ ); Actinides ( $5f^z 6d 7s^2$ ).

## Tableau périodique des éléments

1												18																											
IA												VIII A																											
1	1 H 1,008 Hydrogène											13	14	15	16	17	2																						
2	3 Li 6,94 Lithium	4	2 Be 9,01 Béryllium											5	6	7	8	9	10																				
3	11 Na 22,99 Sodium	12	4 Mg 24,31 Magnésium											13	14	15	16	17	18																				
4	19 K 39,10 Potassium	20	2 Ca 40,08 Calcium	21	3 Sc 44,96 Scandium	22	4 Ti 47,87 Titane	23	5 V 50,94 Vanadium	24	6 Cr 52,00 Chrome	25	7 Mn 54,94 Manganèse	26	8 Fe 55,85 Fer	27	9 Co 58,93 Cobalt	28	10 Ni 58,69 Nickel	29	11 Cu 63,55 Cuivre	30	12 Zn 65,38 Zinc	31	13 Ga 69,72 Gallium	32	14 Ge 72,64 Germanium	33	15 As 74,92 Arsenic	34	16 Se 78,96 Sélénium	35	17 Br 79,90 Brome	36	18 Kr 83,80 Krypton				
5	37 Rb 85,47 Rubidium	38	2 Sr 87,62 Strontium	39	4 Y 88,91 Yttrium	40	5 Zr 91,22 Zirconium	41	6 Nb 92,91 Niobium	42	7 Mo 95,94 Molybdène	43	8 Tc 98 Technetium	44	9 Ru 101,07 Ruthénium	45	10 Rh 102,91 Rhodium	46	11 Pd 106,42 Paladium	47	12 Ag 107,87 Argent	48	13 Cd 112,41 Cadmium	49	14 In 114,82 Indium	50	15 Sn 118,71 Étain	51	16 Sb 121,76 Antimoine	52	17 Te 127,60 Tellure	53	18 I 126,91 Iode	54	19 Xe 131,29 Xénon				
6	55 Cs 132,91 Césium	56	2 Ba 137,33 Baryum	57	4 La 138,91 Lanthane	72	6 Hf 178,49 Hafnium	73	7 Ta 180,95 Tantalum	74	8 W 183,84 Tungstène	75	9 Re 186,21 Rhenium	76	10 Os 190,23 Osmium	77	11 Ir 192,22 Iridium	78	12 Pt 195,08 Platine	79	13 Au 196,97 Or	80	14 Hg 200,59 Mercure	81	15 Tl 204,38 Thallium	82	16 Pb 207,2 Plomb	83	17 Bi 208,98 Bismuth	84	18 Po [209] Polonium	85	19 At [210] Astaté	86	20 Rn [222] Radon				
7	87 Fr [223] Francium	88	2 Ra [226] Radium	89	4 Ac [227] Actinium	104	8 Rf [261] Rutherfordium	105	9 Db [262] Dubnium	106	10 Sg [266] Seaborgium	107	11 Bh [264] Bohrium	108	12 Hs [269] Hassium	109	13 Mt [277] Meitnerium	110	14 Ds [281] Darmstadtium	111	15 Rg [...] Roentgenium	...																	
		58	2 Ce 140,12 Cérium	59	3 Pr 140,91 Praseodyme	60	4 Nd 144,24 Néodyme	61	5 Pm [145] Prométhium	62	6 Sm 150,36 Samarium	63	7 Eu 151,96 Europium	64	8 Gd 157,25 Gadolinium	65	9 Tb 158,93 Terbium	66	10 Dy 162,50 Dysprosium	67	11 Ho 164,93 Holmium	68	12 Er 167,26 Erbium	69	13 Tm 168,93 Thulium	70	14 Yb 173,05 Ytterbium	71	15 Lu 174,97 Lutétium										
		90	2 Th 232,04 Thorium	91	3 Pa 231,04 Protactinium	92	4 U 238,03 Uranium	93	5 Np [237] Neptunium	94	6 Pu [244] Plutonium	95	7 Am [243] Américium	96	8 Cm [247] Curium	97	9 Bk [247] Berkélium	98	10 Cf [251] Californium	99	11 Es [252] Einsteinium	100	12 Fm [257] Fermium	101	13 Md [258] Moscovium	102	14 No [259] Nobelium	103	15 Lr [260] Lawrencium										

**Numéro atomique:** 6 **C** **Symbolle de l'élément**  
 Principaux nombres d'oxydation: (+4, +2)  
 Masse atomique: 12,011  
 Nom: Carbone  
 (C): deux électrons célibataires  
 (3): trois paires d'électrons

Métaux    Métaux de transition    Non-métaux    Gaz rares et métaux

Éléments artificiels

\* Signifie élément radioactif (instable)