

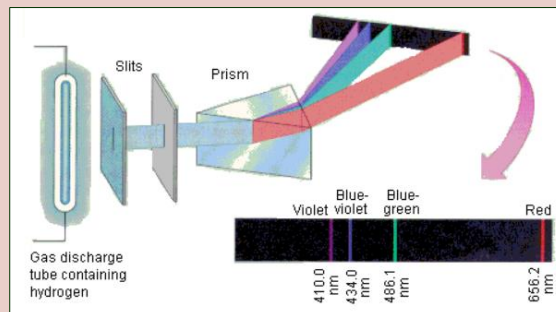
# Les niveaux d'énergie

## PowerPoint 8.3

### La découverte des niveaux d'énergie

Lorsqu'un atome est irradié avec de l'énergie, une portion de l'énergie est absorbé et puis ré-émise.

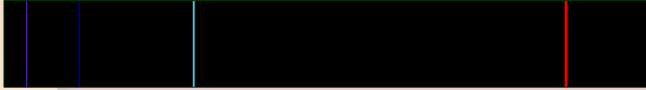
Si cette énergie est passée à travers un prisme et puis absorbée sur un film photographique, un spectre d'émission peut être observé – contenant des raies spectrales spécifiques à la substance irradiée.



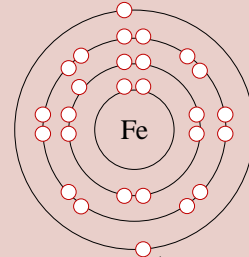
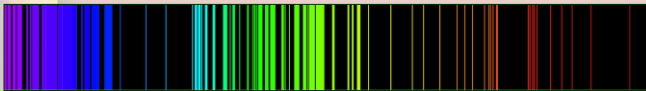
source de l'image – <http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch6/bohr.html>

## Les spectres d'émission

Ex. – le spectre d'émission de l'hydrogène



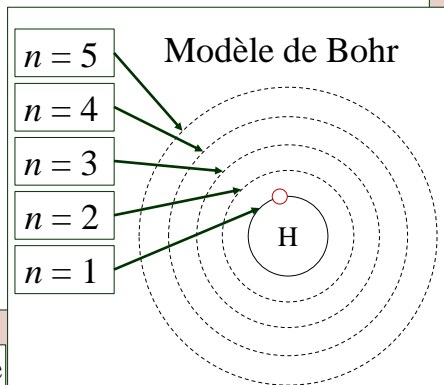
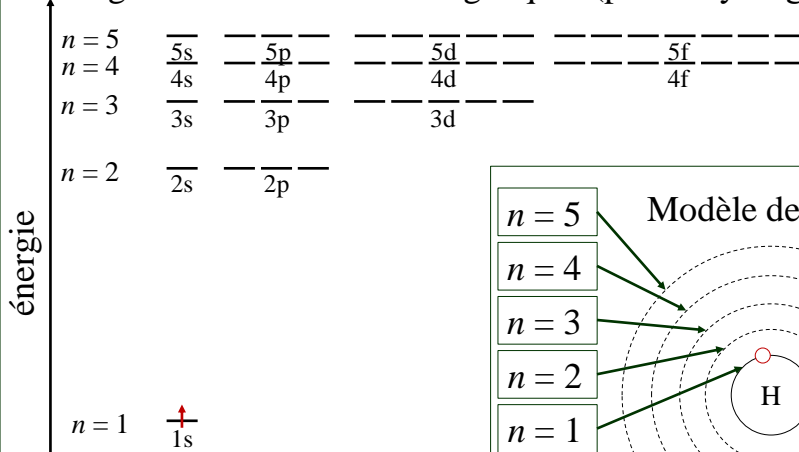
Ex. – le spectre d'émission du fer



Les couches électrons représentent où les électrons peuvent se trouver, mais en réalité ce ne sont pas des lignes, mais plutôt des régions qui s'appellent **des orbitales** où un électron peut se trouver

## Les orbitales atomiques de l'hydrogène

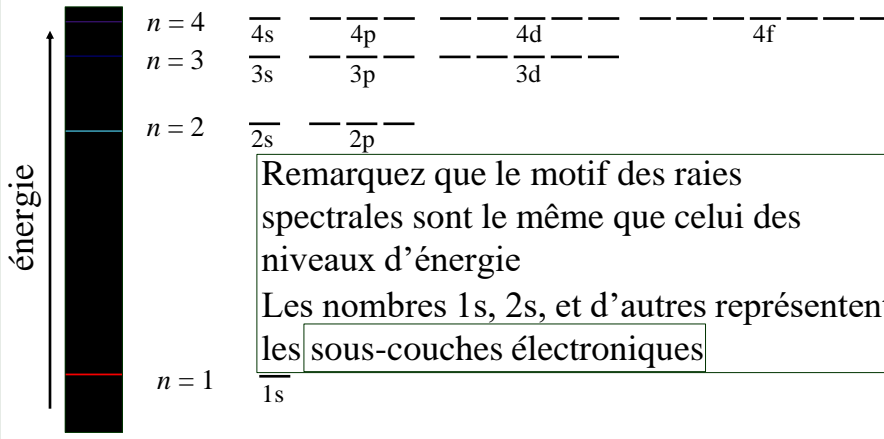
Diagramme de niveaux énergétiques (pour l'hydrogène)



Le nombre «  $n$  » représente le nombre de **la couche électronique**

## Les orbitales atomiques de l'hydrogène

Diagramme de niveaux énergétiques (pour l'hydrogène)



- Pour un atome avec plus d'un électron, le niveau d'énergie des sous-couches électroniques ne sont pas le même comme ils le sont pour l'hydrogène.

## La description mathématique des orbitales

Une orbitale est une région où un électron peut se trouver dans une atome, et chaque orbitale peut tenir 2 électrons.

Les électrons fonctionnent à la fois comme une particule et comme une onde et les orbitales peuvent être décrites mathématiquement par l'équation d'une onde quantique tridimensionnelle.



Erwin Schrödinger  
1887 – 1961

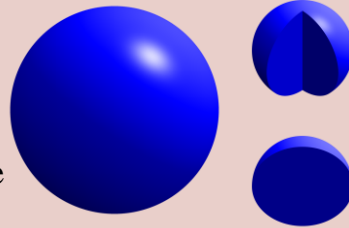
L'équation pour les orbitales d'hydrogène, seulement,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]}} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \cdot Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

## La forme des orbitales atomiques

Pour une valeur de  $n$  donnée, différentes formes d'orbitales sont possibles

Si  $n = 1$ , seulement les orbitales s sont possibles qui ont une forme sphérique avec le noyau au centre de la sphère. Une orbitale s consiste d'une seule orbitale.



Ex. – l'orbitale 1s

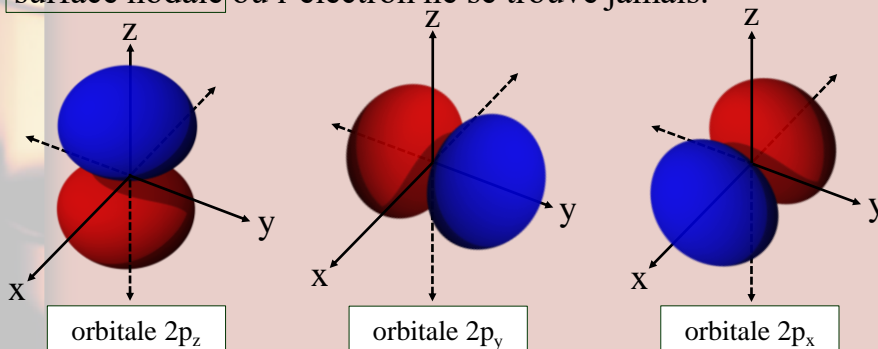
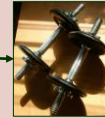
Les autres niveaux d'énergie,  $n = 2$ ,  $n = 3$ , et les autres, ont aussi un orbitale s en forme sphérique avec le noyau au centre de la sphère



## La forme des orbitales atomiques

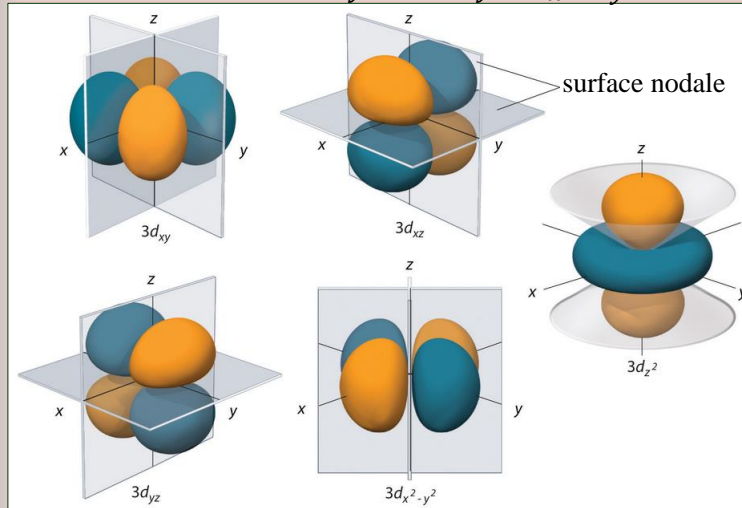
Si  $n \geq 2$ , les orbitales p sont possibles qui ont une forme de deux ellipsoïdes, souvent décrite comme une forme d'haltère, au côtés opposés du noyau sur un des axes  $x$ ,  $y$  ou  $z$

- Chaque orbitale p contient 3 orbitales –  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$
- au milieu des deux boules se trouve le noyau et une surface nodale où l'électron ne se trouve jamais.



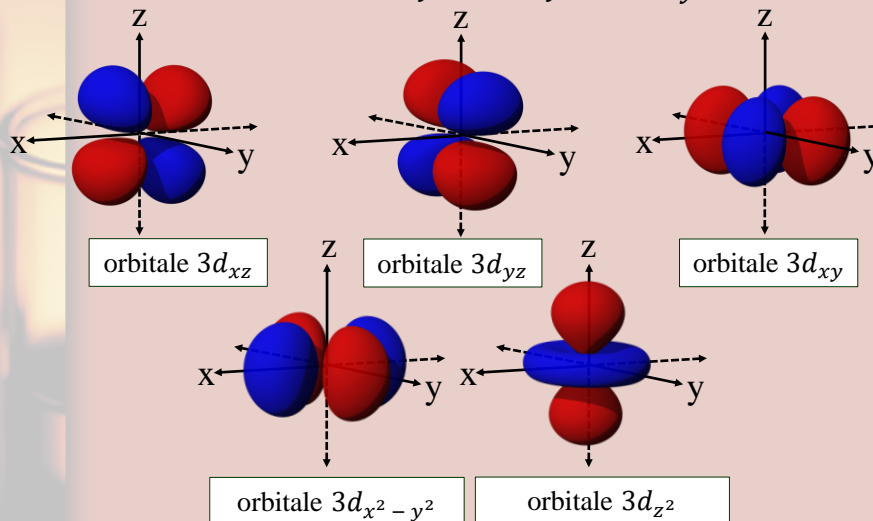
## La forme des orbitales atomiques

Si  $n \geq 3$ , les orbitales d sont possibles, dont il y a 5 orbitales pour chaque valeur de  $n - d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2 - y^2}$ , et  $d_{z^2}$



## La forme des orbitales atomiques

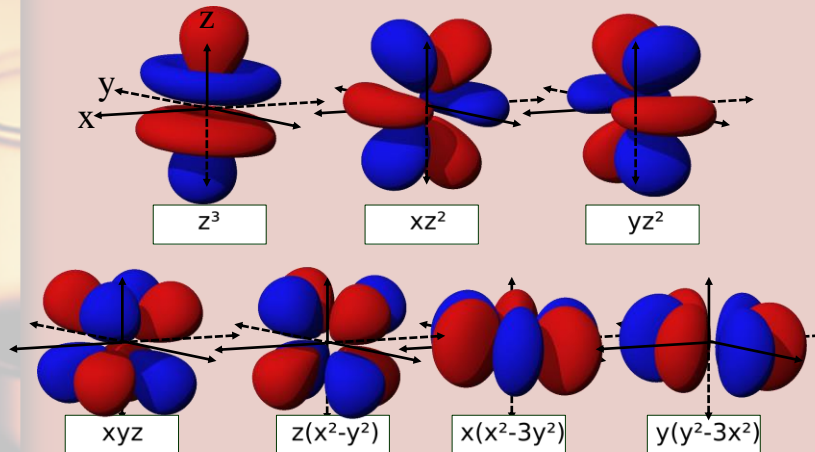
Si  $n \geq 3$ , les orbitales d sont possibles, dont il y a 5 orbitales pour chaque valeur de  $n - d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{x^2 - y^2}$ , et  $d_{z^2}$



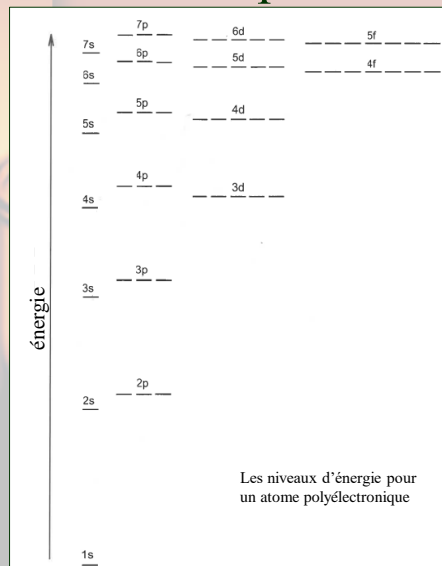
## La forme des orbitales atomiques

Si  $n = 4$  ou  $n = 5$ , les orbitales f sont possibles, dont il y a 7 orbitales,

$f_{z^3}$ ,  $f_{xz^2}$ ,  $f_{yz^2}$ ,  $f_{xyz}$ ,  $f_{z(x^2 - y^2)}$ ,  $f_{x(x^2 - 3y^2)}$ , et  $f_{y(3x^2 - y^2)}$



## Les orbitales atomiques d'un atome avec plus d'un électron



Comme on peut voir, les diverses sous-couches électroniques ont des énergies différentes et, donc, vont être remplies dans un ordre spécifique

- en remplissant celles avec l'énergie plus faible en premier

## Des lois qui gouvernent la configuration électronique

**Le principe d'exclusion de Pauli** – C'est impossible pour 2 électrons d'avoir le même état quantique – mais ils peuvent occuper la même orbitale si leur spin respectif est opposé

**Le principe d'Aufbau** – Les électrons d'un atome ou d'un ion (dans leur état fondamental) vont remplir les orbitales aux niveaux d'énergie plus faibles avant de remplir les orbitales d'énergie plus élevés

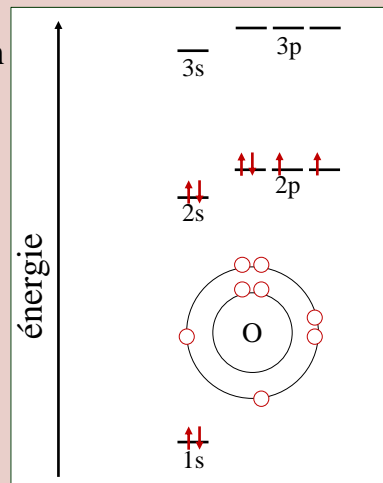
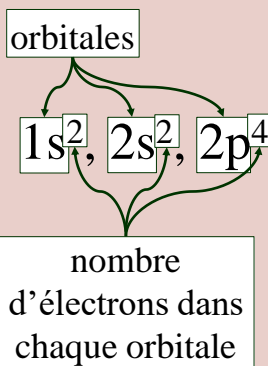
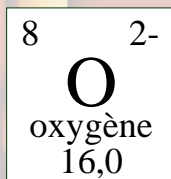
**La règle de Hund** – Les électrons d'un atome ou d'un ion rempliront les orbitales de la même énergie de façon que les électrons ont tous le même spin, avant de s'apparier avec des électrons de spin opposé

## La configuration électronique

**La configuration électronique** est une description de l'emplacement des électrons dans les orbitales d'un atome ou d'un ion.

**Question** – Que serait la configuration électronique d'oxygène neutre?

Réponse –



## La configuration électronique

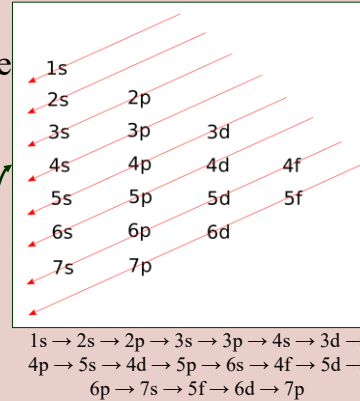
Lorsque les électrons remplissent des orbitales d'un atome ou d'un ion,

- ils remplissent les orbitales avec la moindre d'énergie en premier (le principe d'Aufbau)
- chacun des orbitale peut tenir 2 électrons maximum (le principe d'exclusion de Pauli)

Cela veut dire qu'il y a un maximum de

- 2 électrons dans une orbitale s
- 6 électrons dans une orbitale p
- 10 électrons dans une orbitale d
- 14 électrons dans une orbitale f

Pour savoir l'ordre dans lequel on remplit les orbitales, on peut suivre le diagramme ci-contre.

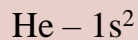


## Question pratique

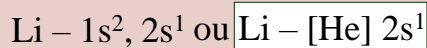
**Question** – Que serait la configuration électronique de He, de Li, et de Cl?

Réponse –

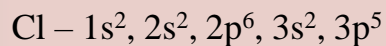
He a 2 électrons, donc



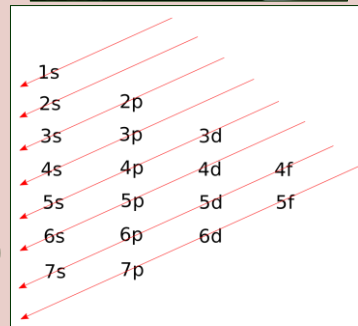
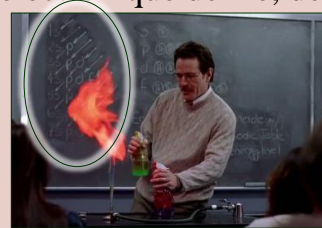
Li a 3 électrons, donc



Cl a 17 électrons, donc



la notation de cœur

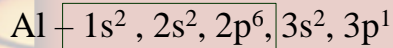




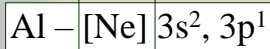
## La notation du cœur

La notation de cœur est une façon de montrer la configuration électronique en termes des électrons du cœur (semblable à la configuration d'un gaz noble) et les électrons « extérieurs ».

Ex. – La configuration électronique d'aluminium est le suivant



Ce sont les électrons de cœur ET c'est la même configuration que le gaz noble Ne, donc on peut l'écrire comme « [Ne] »



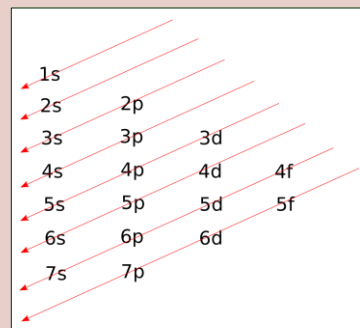
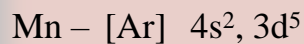
la notation de cœur

## Question pratique

**Question** – Écrivez la configuration électroniques de Na, de Mn, et de Kr en utilisant la notation de cœur.

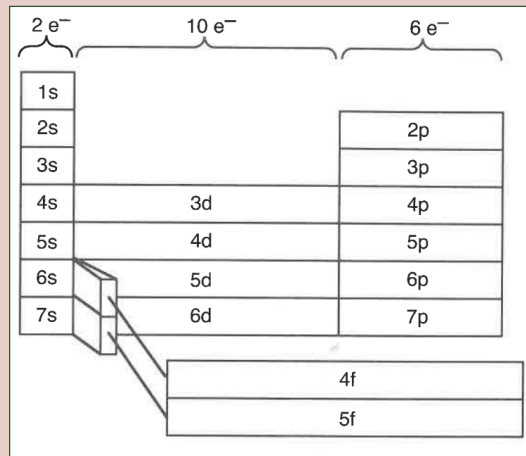
**Réponse** –

On trouve le gaz noble qui vient avant l'élément indiqué, et puis on remplit les orbitales qui le suivent.



## Un motif du tableau périodique

La configuration électronique et les de valence d'un élément donné peuvent être déterminés selon son emplacement sur le tableau périodique. L'orbitale des derniers électrons dépend dans quel « bloc » l'élément se trouve.



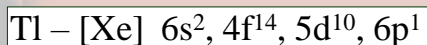
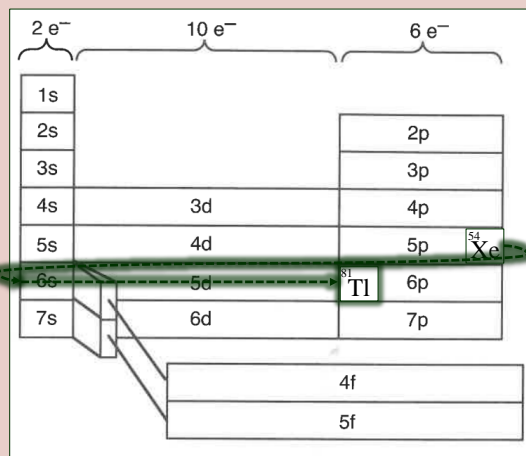
## Question pratique

**Question** – Utilisez l'image suivante pour écrire la notation du cœur de la configuration électronique de Thallium.

**Réponse** –

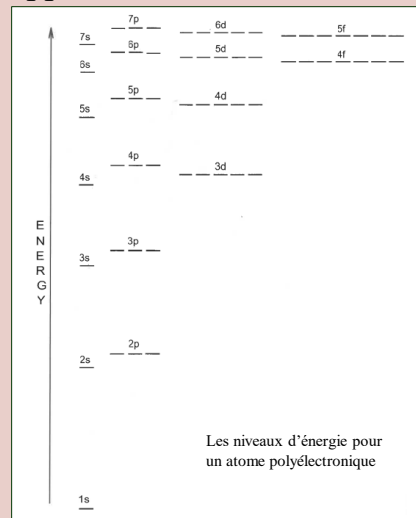
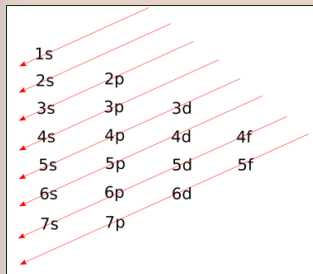
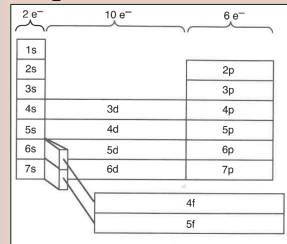
Le dernier gaz noble avant Tl est Xe

Donc, on passe de Xe à Tl en remplissant les orbitales



## Des outils dans l'aide-mémoire

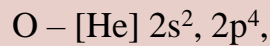
Vous avez, donc, accès à trois différentes images dans l'aide-mémoire pour vous aider à vous rappeler l'ordre des orbitales.



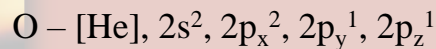
## La configuration spécifiée

Chez les orbitales p, d, et f, on peut spécifier quelles orbitales de chaque sous-couche sont remplies.

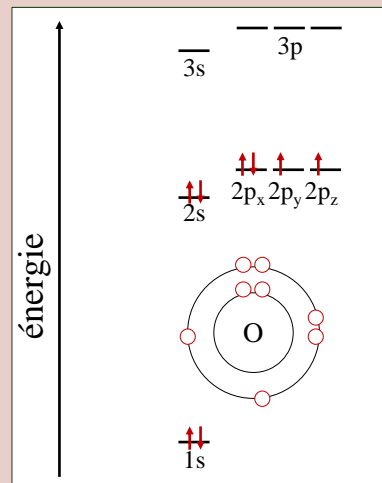
Ex. – au lieu de



on pourrait écrire



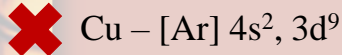
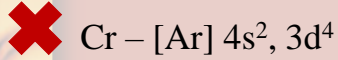
pour être plus spécifique



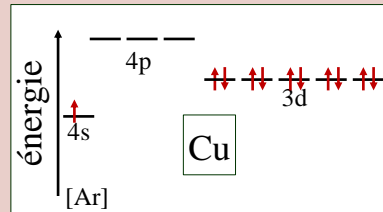
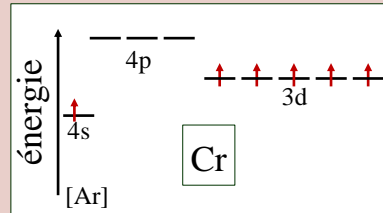
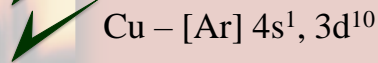
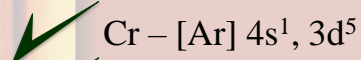
## Des exceptions

Il y a deux exceptions communes parmi des configurations normales – Cr et Cu

Au lieu de



on écrit



parce qu'une orbitale d moitié remplie ou complètement remplie est particulièrement stable

## La configuration électronique des ions

Pour un ion négatif, ajouter premièrement des électrons à l'orbitale non-remplie et puis aux prochaines orbitales si nécessaire. Ex. – O – [He] 2s<sup>2</sup>, 2p<sup>4</sup>, mais O<sup>2-</sup> – [He] 2s<sup>2</sup>, 2p<sup>6</sup>

Pour un ion positif, commencer avec la notation de l'atome neutre et enlever des électrons de la couche la plus externe (la plus grande valeur de  $n$ ) en premier (les électrons de valence)

Ex. – Y – [Kr] 5s<sup>2</sup>, 4d<sup>1</sup>, mais Y<sup>2+</sup> – [Kr] 4d<sup>1</sup>

S'il y a plusieurs sous-couches dans cette couche externe (ceux qui ne sont pas les électrons/couches de cœurs), les électrons dans l'orbitale p sont enlevés en premier et puis ceux de l'orbitale s, et puis ceux de l'orbitale d.

Ex. – Sn – [Kr] 5s<sup>2</sup>, 4d<sup>10</sup>, 5p<sup>2</sup>, mais Sn<sup>4+</sup> – [Kr] 4d<sup>10</sup>

## Question pratique

**Question** – Écrivez la configuration électronique avec la notation du cœur pour les ions suivants.

**Réponse** – Commencez avec la notation de cœur de l'atome neutre, puis ajoutez ou enlevez des électrons selon le cas.

<u>ion</u>	<u>la notation de cœur de l'atome neutre</u>	<u>la notation de cœur de l'ion</u>
Se <sup>2-</sup>	[Ar] 4s <sup>2</sup> , 3d <sup>10</sup> , 4p <sup>4</sup>	[Ar] 4s <sup>2</sup> , 3d <sup>10</sup> , 4p <sup>6</sup>
Sr <sup>2+</sup>	[Kr] 5s <sup>2</sup>	[Kr] → [Ar] 4s <sup>2</sup> , 3d <sup>10</sup> , 4p <sup>6</sup>
Cd <sup>2+</sup>	[Kr] 5s <sup>2</sup> , 4d <sup>10</sup>	[Kr] 4d <sup>10</sup>
Ru <sup>3+</sup>	[Kr] 5s <sup>2</sup> , 4d <sup>6</sup>	[Kr] 4d <sup>5</sup>
Fe <sup>2+</sup>	[Ar] 4s <sup>2</sup> , 3d <sup>6</sup>	[Ar] 3d <sup>6</sup>
Tl <sup>+</sup>	[Xe] 6s <sup>2</sup> , 4f <sup>14</sup> , 5d <sup>10</sup> , 6p <sup>1</sup>	[Xe] 6s <sup>2</sup> , 4f <sup>14</sup> , 5d <sup>10</sup>

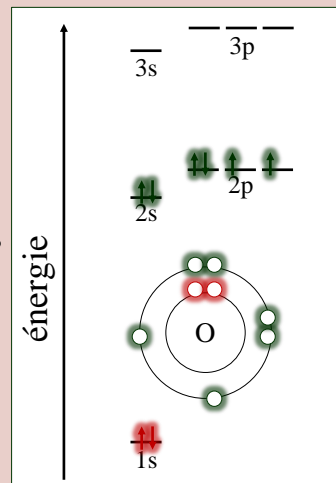
## Les électrons de cœur et les électrons de valence

On peut diviser les électrons d'un atome ou d'un ion en électrons de cœurs et les électrons de valences.

Les **électrons de cœur** sont ceux dans les couches intérieures qui ont la même configuration d'un gaz noble.

Les **électrons de valences** sont ceux qui participent dans les réactions chimiques, ce sont tous électrons SAUF –

- ceux du cœur (représenté par la configuration d'un gaz noble)
- les électrons dans les orbitales d et f pleines



## Question pratique

**Question** – Combien d'électrons de valence se trouvent dans les particules suivantes?

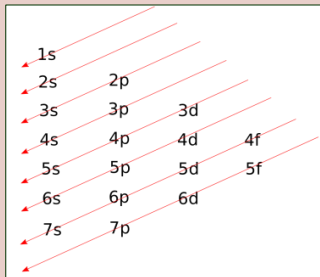
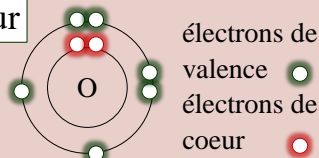
**Réponse** –

Il faut déterminer la configuration électronique en premier

- O – [He]  $2s^2, 2p^4$  – il y a 6 électrons de valence  
 Sn – [Kr]  $5s^2, 4d^{10}, 5p^2$  – il y a 4 électrons de valence  
 Pb – [Xe]  $6s^2, 4f^{14}, 5d^{10}, 6p^2$  – il y a 4 électrons de valence  
 V – [Ar]  $4s^2, 3d^3$  – il y a 5 électrons de valence  
 Nb<sup>3+</sup> – [Ar]  $4d^2$  – il y a 2 électrons de valence  
 Xe – [Kr]  $5s^2, 4d^{10}, 5p^6$  – il y a 0 électrons de valence

## Récapitulons!

La notation de cœur peut être utilisée pour exprimer la configuration électronique. O – [He]  $2s^2, 2p^4$



	s	p <sub>z</sub>	p <sub>x</sub>	p <sub>y</sub>	d <sub>z<sup>2</sup></sub>	d <sub>xz</sub>	d <sub>yz</sub>	d <sub>xy</sub>	d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	f <sub>z<sup>3</sup></sub>	f <sub>xz<sup>2</sup></sub>	f <sub>yz<sup>2</sup></sub>	f <sub>xyz</sub>	f <sub>z(x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup>)</sub>	f <sub>x(x<sup>2</sup>-3y<sup>2</sup>)</sub>	f <sub>y(3x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup>)</sub>
n = 1	·															
n = 2	·															
n = 3	·															
n = 4	·															
n = 5	·									...	...	...	...	...	...	...
n = 6	·				...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
n = 7	·		...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...