

On obtient donc l'ordre de remplissage suivant :

$$n + \ell = 1 : n=1, \ell=0 \rightarrow 1s$$

$$n + \ell = 2 : n=2, \ell=0 \rightarrow 2s$$

$$n + \ell = 3 : n=2, \ell=1 \rightarrow 2p$$

$$n=3, \ell=0 \rightarrow 3s$$

$$n + \ell = 4 : 3p \quad 4s$$

$$n + \ell = 5 : 3d \quad 4p \quad 5s$$

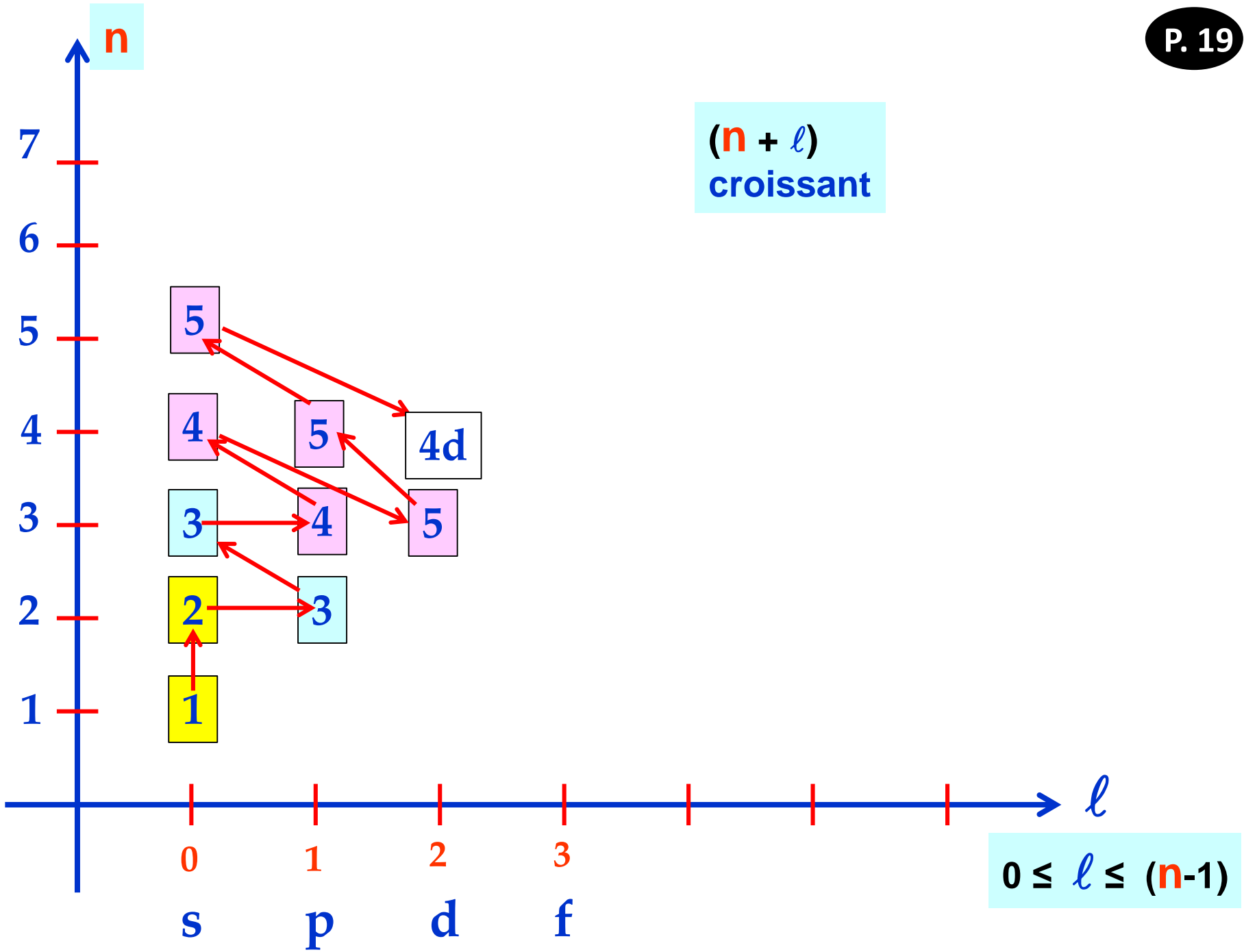
$$n + \ell = 6 : 4d \quad 5p \quad 6s$$

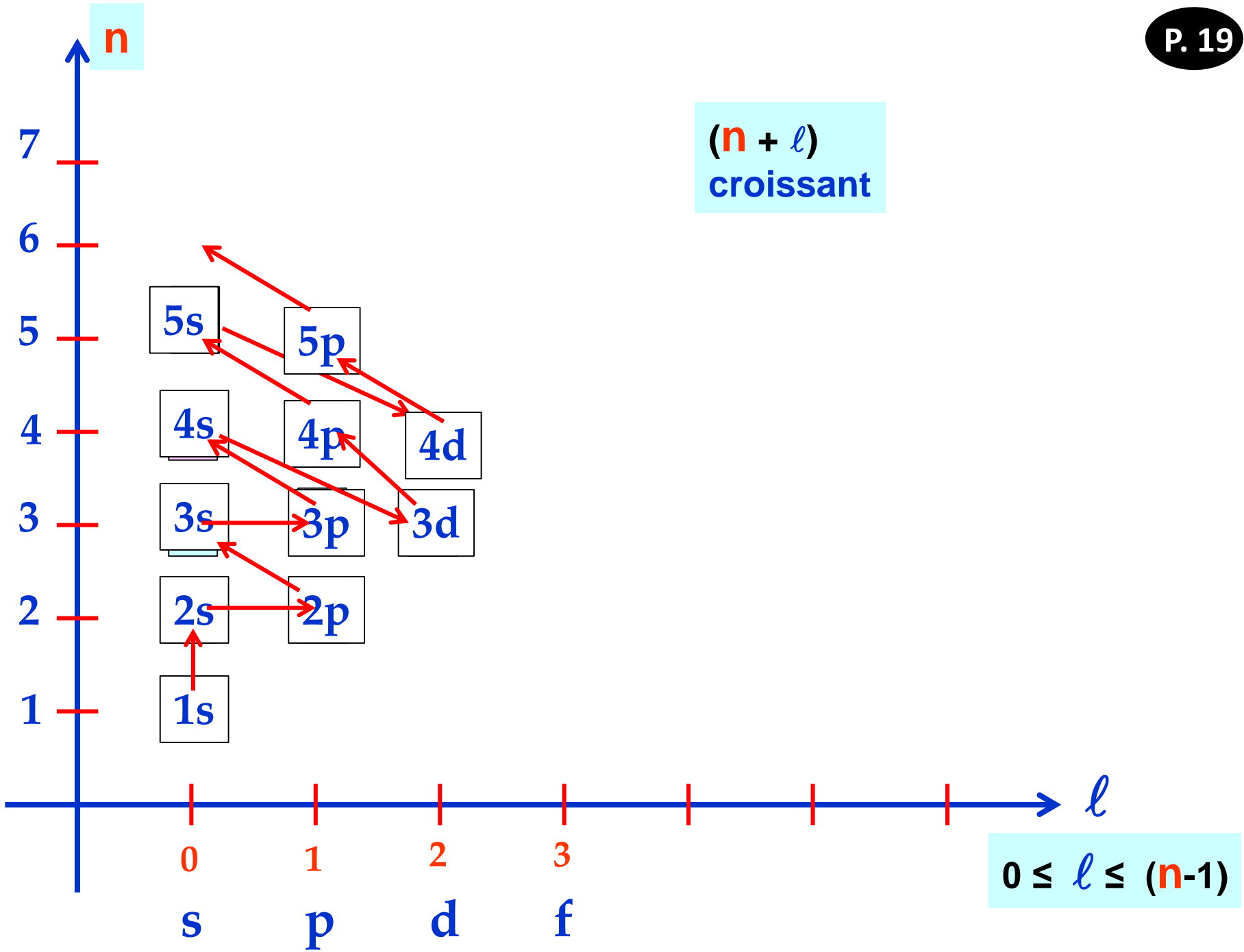
$$n + \ell = 7 : 4f \quad 5d \quad 6p \quad 7s \dots\dots\text{etc}\dots\dots$$

Cette règle traduit le fait que les orbitales se remplissent dans l'ordre suivant :

1s **2s** **2p** **3s** **3p** **4s** **3d** **4p** **5s** **4d** **5p** **6s** **4f** **5d** **6p**
7s **5f** **6d** **7p**

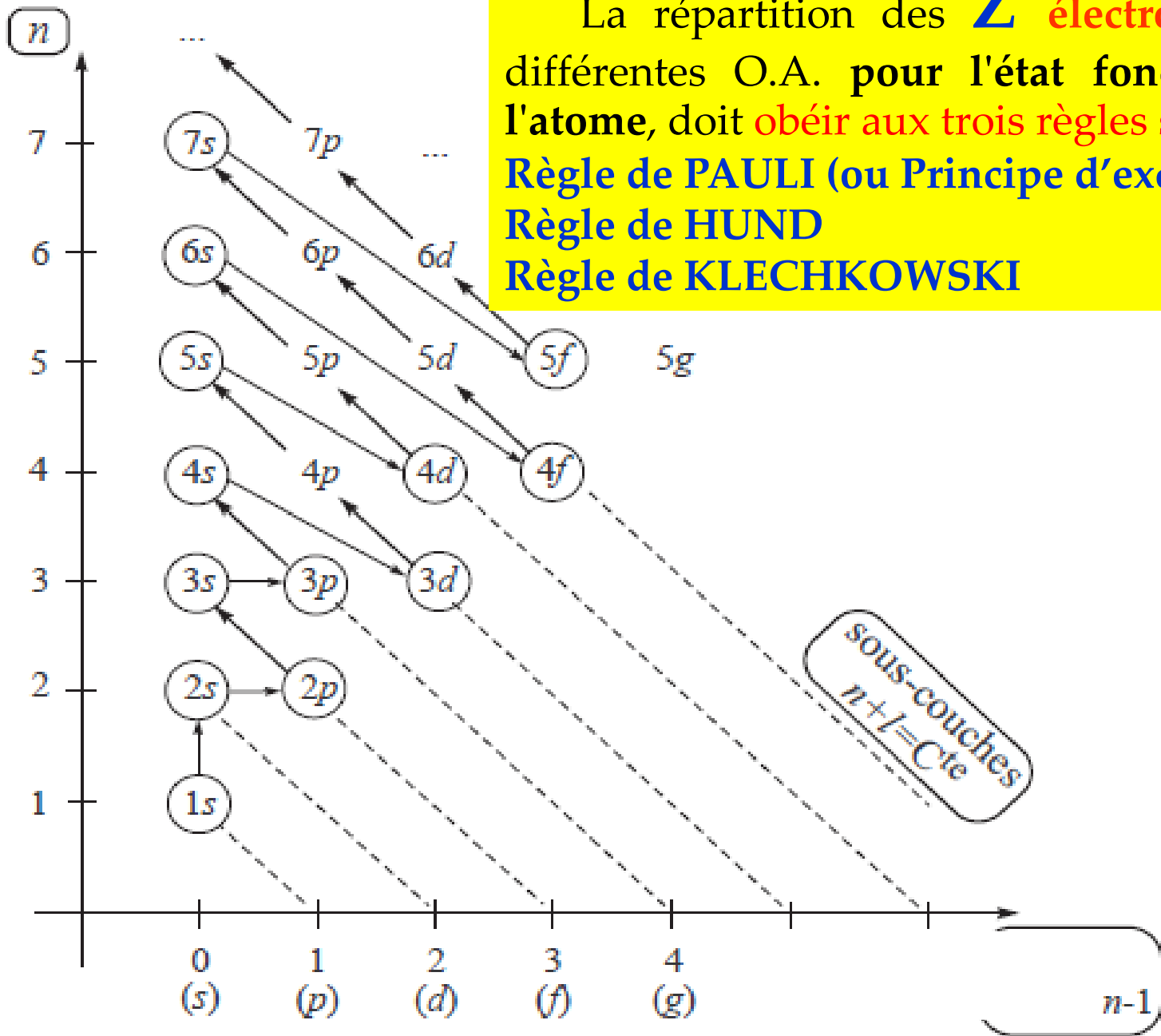
Pour une valeur de n on a : **n s** **(n-2) f** **(n-1) d** **n p**





La répartition des **Z électrons** dans les différentes O.A. pour l'état fondamental de l'atome, doit obéir aux trois règles suivantes :

- Règle de PAULI (ou Principe d'exclusion)
- Règle de HUND
- Règle de KLECHKOWSKI



La répartition des **Z électrons** dans les différentes O.A. pour l'état fondamental de l'atome, doit **obéir aux trois règles suivantes** :

- Règle de PAULI (ou Principe d'exclusion)
- Règle de HUND
- Règle de KLECHKOWSKI

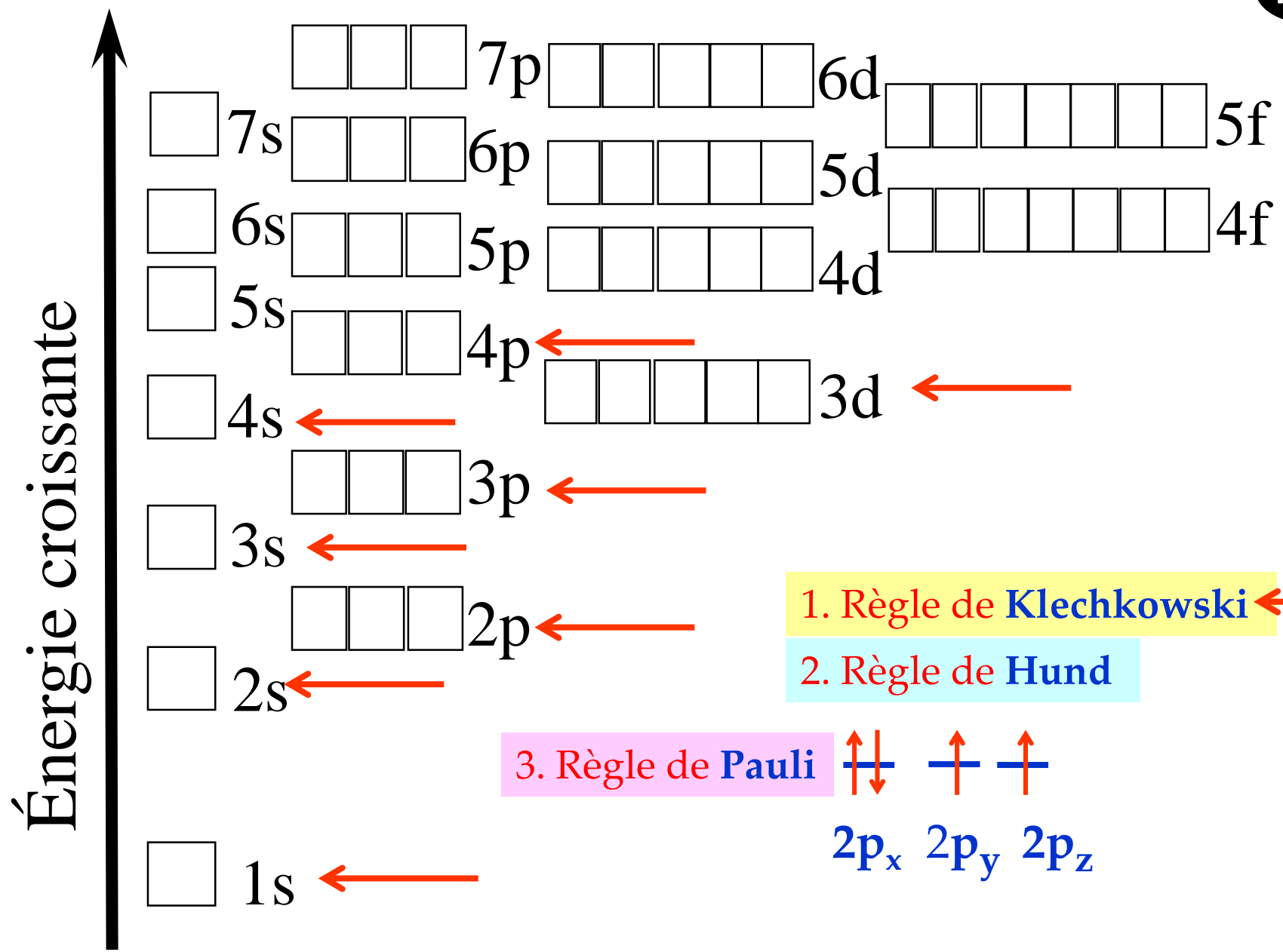
Attention:

Le **principe de Pauli** ne peut **jamais être contourné** : c'est la condition pour qu'un état électronique soit possible



Si la **règle de Hund** n'est pas respectée, on obtient aussi **un état excité**

Si la **règle de Klechkowski** n'est pas respectée, on obtient aussi **un état excité**



Applications

- La configuration électronique de l'atome de carbone ${}_6\text{C}$: dans son état fondamental s'écrit :

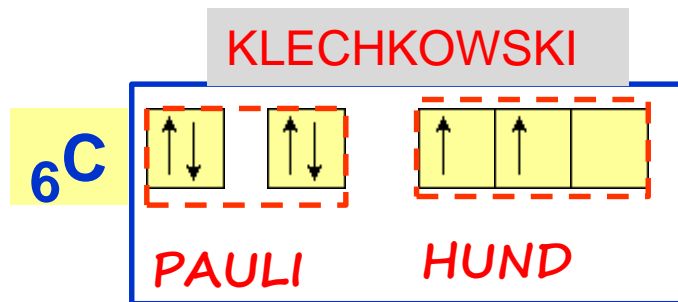


$$n=1 \quad n=2 \quad n=2 \quad n=2 \quad n=2$$

$$l=0 \quad l=0 \quad l=1 \quad l=1 \quad l=1$$

$$m=0 \quad m=0 \quad m=-1 \quad m=0 \quad m=+1$$

ou encore en matérialisant les O.A. à l'aide des cases quantiques.

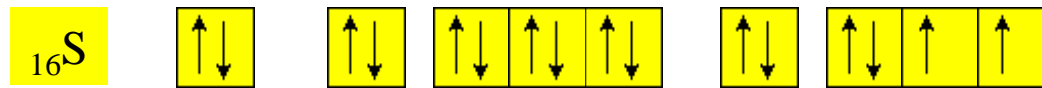


Sur cet exemple on constate que les **règles de remplissage** des orbitales atomiques **sont respectées**.

Ecrivons maintenant la configuration électronique de l'atome de soufre ($Z = 16$), dans son état fondamental :

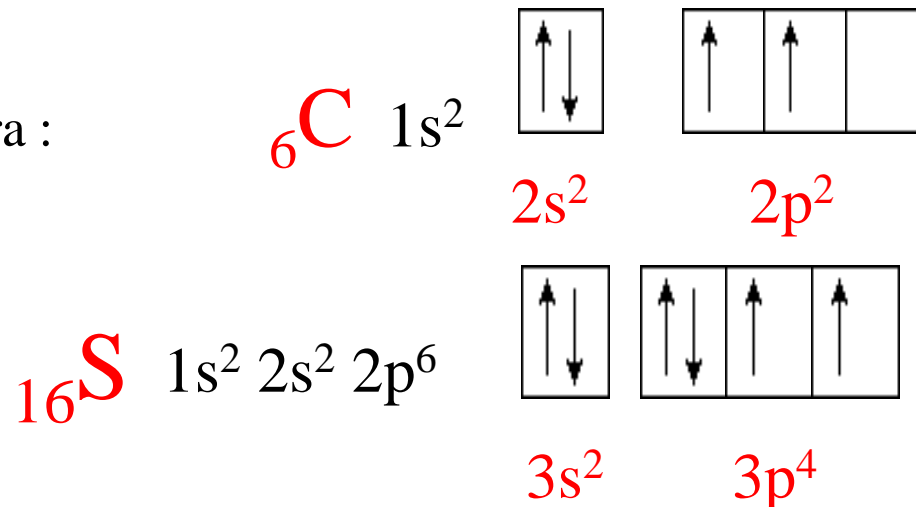


L'utilisation des cases quantiques conduit à :



Remarque : dans la pratique on n'utilisera la représentation à l'aide des **cases quantiques** que pour les orbitales de **plus haute énergie** c'est à dire caractérisées par la **plus grande valeur de n**.

Pour les exemples on écrira :



Orbitales de valence

Configuration électronique, exemples :

L'azote (Z = 7)



soit en rangeant par couches :

Le Fer Fe (Z = 26)



soit en rangeant par couches :

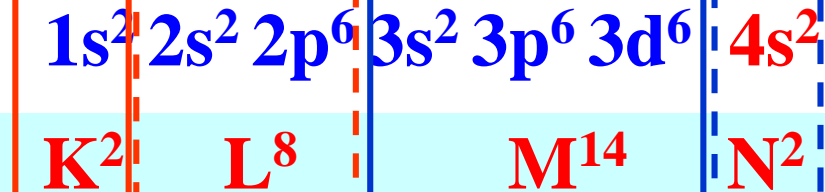


Configuration électronique, exemples :

Le Fer Fe (Z = 26)



soit en rangeant par couches :



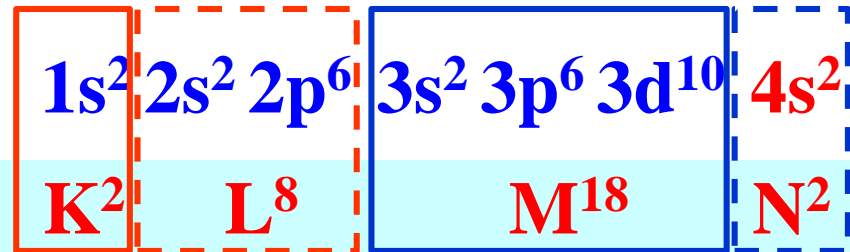
Le Zinc Zn (Z = 30)



La vraie écriture : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$

l'orbitale $3d^{10}$ pleine est plus stable que $4s^2$

soit en rangeant par couches :



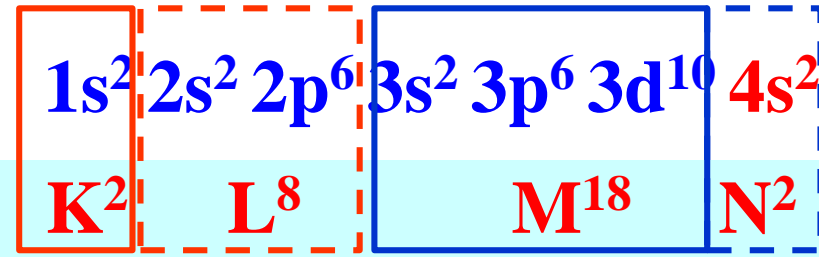
1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p

Le Zinc Zn (Z = 30)



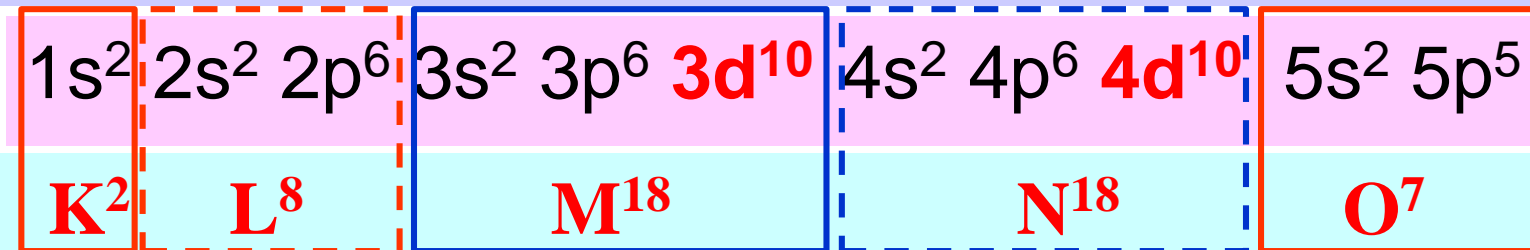
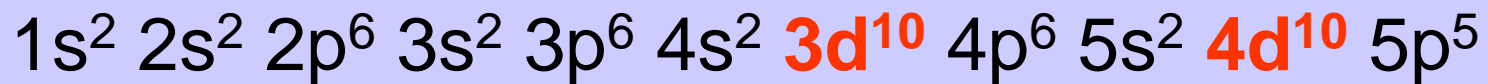
La vraie écriture : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$

soit en rangeant par couches :



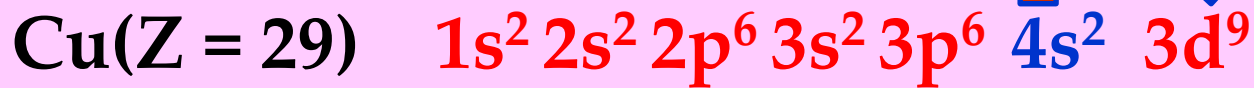
L'iode I (Z = 53)

Très stable



1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p

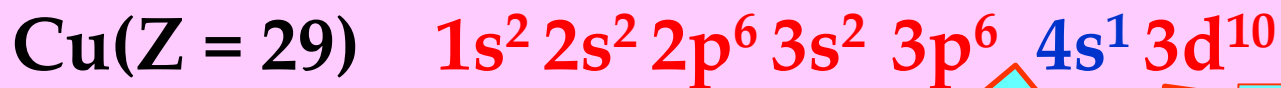
Exceptions de Klechkowski



Les orbitales « **d** » sont *plus stables* lorsqu'elles sont :

- * totalement saturées (pleines) d^{10}
- ** à moitié pleines d^5

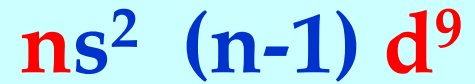
Pour le cuivre un électron passera de **4s** vers **3d**



+ stable



Exceptions de Klechkowski

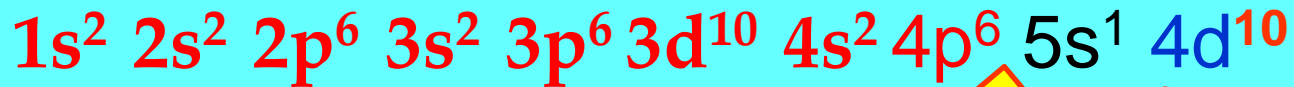


$3d^{10}$ (totalement remplies)
est + stable que $4s^2$

La configuration électronique est alors :



Pour stabiliser $4d$

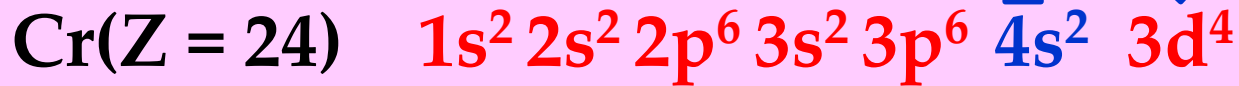
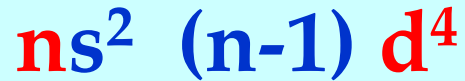


$4d^{10}$ + stable que $5s^1$



Exceptions de Klechkowski

Cr (24)

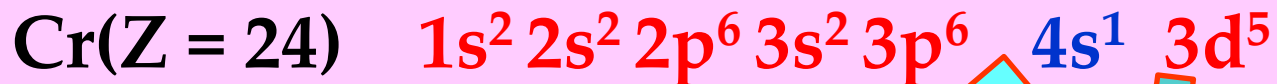


Les orbitales « **d** » sont *plus stables* lorsqu'elles sont :

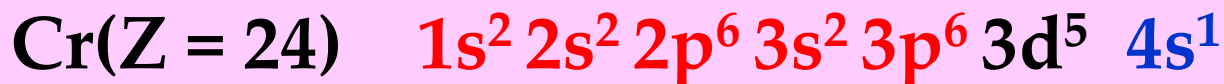
* totalement saturées (pleines) d^{10}

** à moitié pleines d^5

Pour le chrome un électron passera de **4s** vers **3d**



+ stable



Electrons de valence et électrons de cœur

Les propriétés chimiques d'un élément chimique sont dues aux possibilités de former des **liaisons**

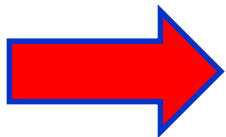
= mise en commun d'électrons

par perte ou de gain d'électrons entre atomes liés (**ionisation**).

Ceci se fait par l'intervention des **e-** les moins liés au reste de l'atome dans son état fondamental,

→ ceux de la "**couche périphérique**" (**n le plus grand**)
+ ceux de la **souche sous-jacente** (d ou f) **non saturée**

= Ces **e-** sont appelés "**électrons de valence**".



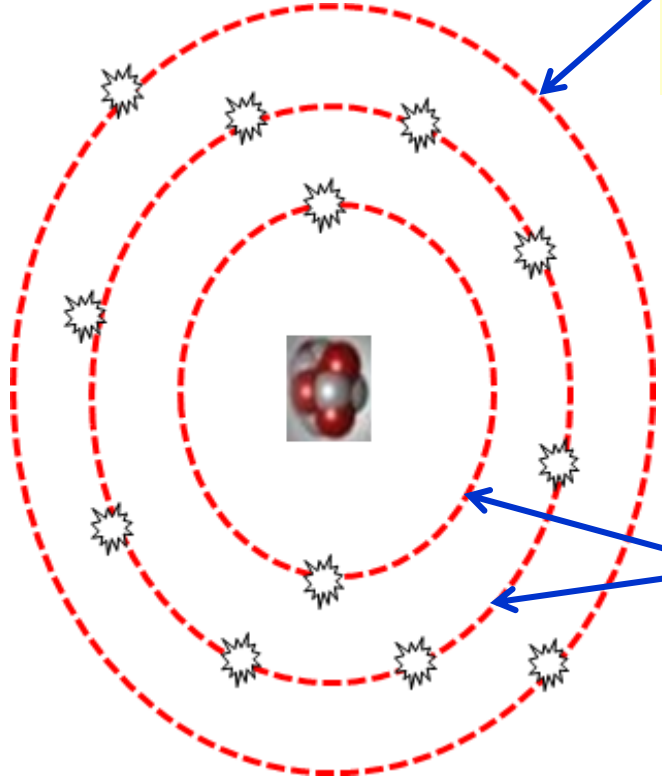
Les **e-** des autres couches profondes (fortement liées au noyau) sont appelés "**électrons de cœur**".

Couche de valence, Electrons de valence et électrons de cœur

la **couche de valence de l'atome** = La couche la plus externe de l'atome fixe les propriétés chimiques (**c'est la couche la plus importante**)

= **couche dont le nombre n est le plus élevé**
+ **couche sous-jacente**,

plus exactement des sous couches **d et f**,
si elles sont **non saturées**.



Les **couches de cœur de l'atome**
= Les couches les plus **profondes**

Les trois couches occupées par des électrons ne jouent pas un rôle équivalent.

Exemples :

${}^8\text{O}$



$n = 2 \rightarrow$ couche de Valence / **6 e- de valence**

${}^{20}\text{Ca}$



$n = 4 \rightarrow$ couche de Valence / **2 e- de valence**

${}^{17}\text{Cl}$



couche de cœur

$n = 3 \rightarrow$ couche de Valence / **7 e- de valence**

la **couche de valence de l'atome** = La couche la plus externe de l'atome fixe les propriétés chimiques (**c'est la couche la plus importante**)

= couche dont le nombre **n** est le plus élevé)
+ **couche sous-jacente,**

plus exactement des sous couches **d et f,**
si elles sont **non saturées.**

Exemples :

Z = 13 $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2, 3p^1$ $n = 3 \Rightarrow$ couche de Valence

Z = 23 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ $4s^2 3d^3$
 $4s^2 :$ $n = 4 \Rightarrow$ Valence
 $3d^3 :$ **Sous-couche incomplète \Rightarrow Valence**

Z = 26 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ $4s^2 3d^6$
 $4s^2 :$ $n = 4 \Rightarrow$ Valence
 $3d^6 :$ **Sous-couche incomplète = Valence**

Z = 13 $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2, 3p^1$ $n = 3 \Rightarrow$ couche de Valence

Z = 23 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ $4s^2 3d^3$

$4s^2$: $n = 4 \Rightarrow$ Valence

$3d^3$: Sous-couche incomplète \Rightarrow Valence

Z = 26 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ $4s^2 3d^6$

$4s^2$: $n = 4 \Rightarrow$ Valence

$3d^6$: Sous-couche incomplète = Valence

Z = 32 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ $4s^2 4p^2$

$4s^2 4p^2$: $n = 4 \Rightarrow$ Valence

$3d^{10}$: Sous-couche **complète** = **coeur**

Représentation de Lewis

Dans la représentation de **Lewis** d'un atome (ou d'un ion simple) on **note** autour du symbole de l'élément chimique les **électrons de valence** avec :

* un tiret 

pour chaque **doublet d'e⁻** (2 e⁻ de valence dans la même orbitale de valence)

* un point  ou bien une croix **x**

pour chaque **e⁻ célibataire** dans les orbitales de

Représentation de Lewis

Oxygène $Z = 8$

$1s^2$

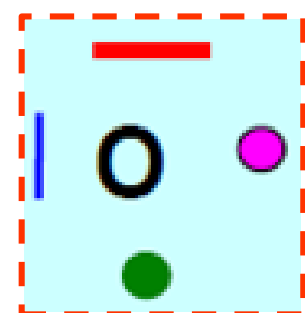
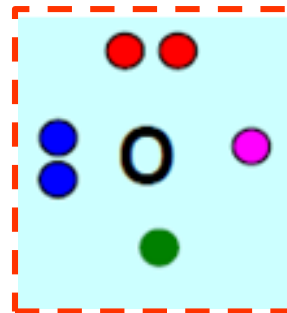
$2s^2 2p^4$

couche
de coeur

$2s^2 2p^4$

$n = 2 \Rightarrow$ couche de Valence

Schéma avec cases quantiques



Azote $Z = 7$



couche de coeur

$2s^2 2p^3$
 $n = 2 \Rightarrow$ couche de Valence

