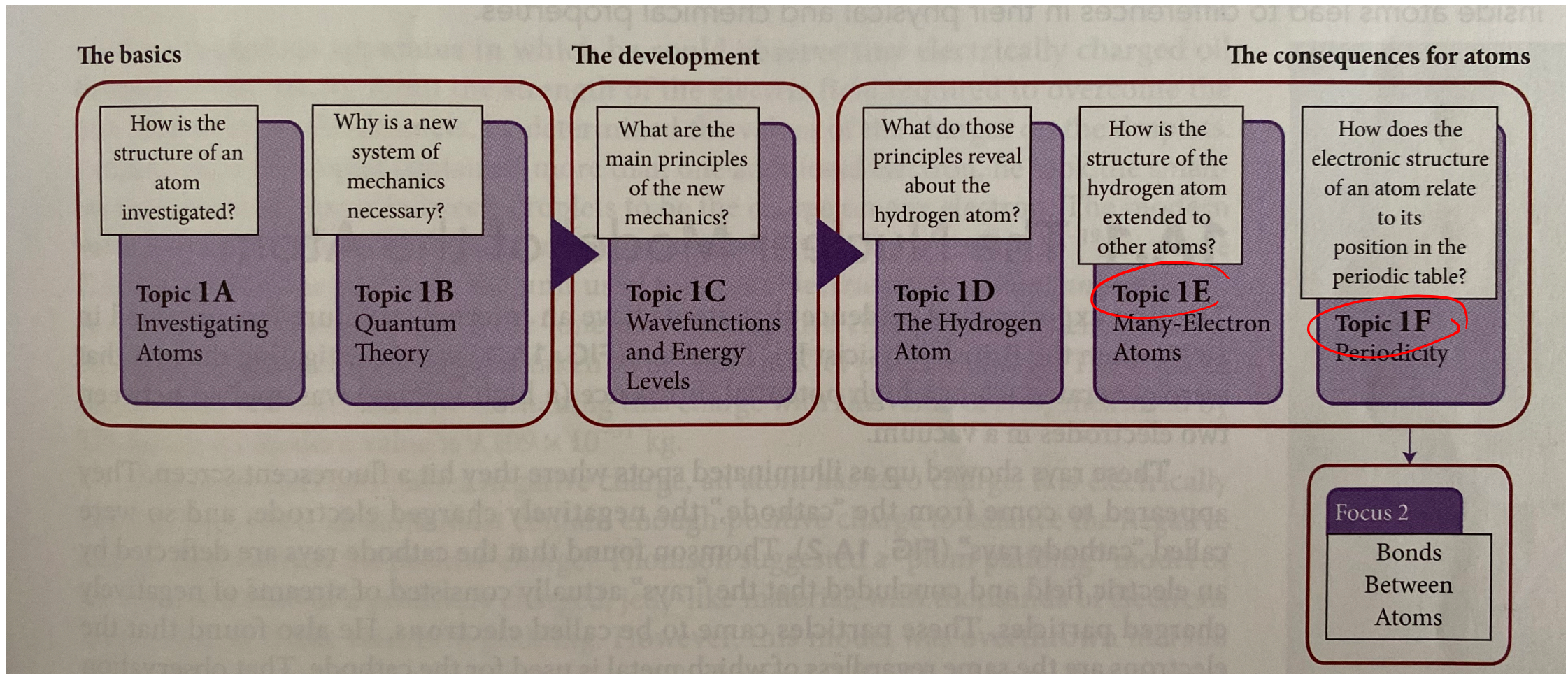




**CH-110 Chimie  
Générale Avancée I**

Prof. A. Steinauer  
angela.steinauer@epfl.ch

# Overview Chapitre 1 (Focus 1: Atomes)



Topic 1D.1 Les niveaux d'énergies

Topic 1D.2 Les orbitales atomiques

Topic 1D.3 Nombres quantiques, couches, sous-couches

**NOUS CONTINUONS ICI:** Topic 1D.4 La forme des orbitales

Topic 1D.5 Spin de l'électron

Topic 1D.6 La structure électronique de l'hydrogène: un résumé

POURQUOI FAUT-IL CONNAITRE CES  
SUJETS ?

- L'atome d'hydrogène est **l'atome le plus simple** et il est utilisé pour illustrer **les structures de tous les atomes**.
- Il est donc central à de nombreux concepts chimiques..

LES SUJETS QUE VOUS DEVRIEZ DÉJÀ  
MAITRISER ?

- Les caractéristiques du spectre atomique de l'hydrogène (Topic 1A)
- Les concepts de fonctions d'onde et de niveaux d'énergies en mécanique quantique (Topic 1C)

## 1D.4 La forme des orbitales

### Représentation de surface limite

- Contient la majorité du nuage électronique
- Facile à dessiner, mais les atomes ont en réalité des contours flous
- Quand même utile: représente où l'électron se trouve le plus probablement.

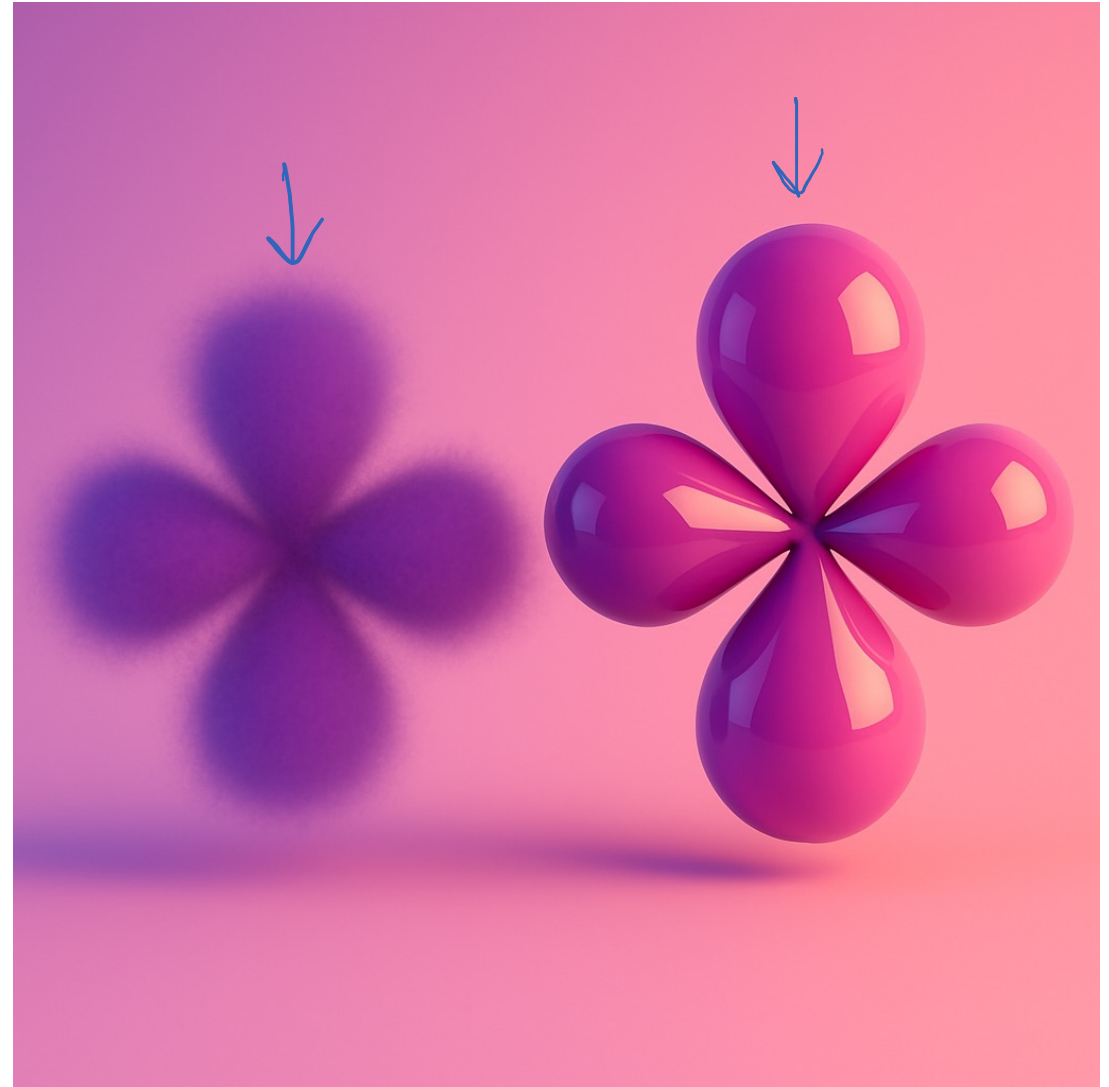
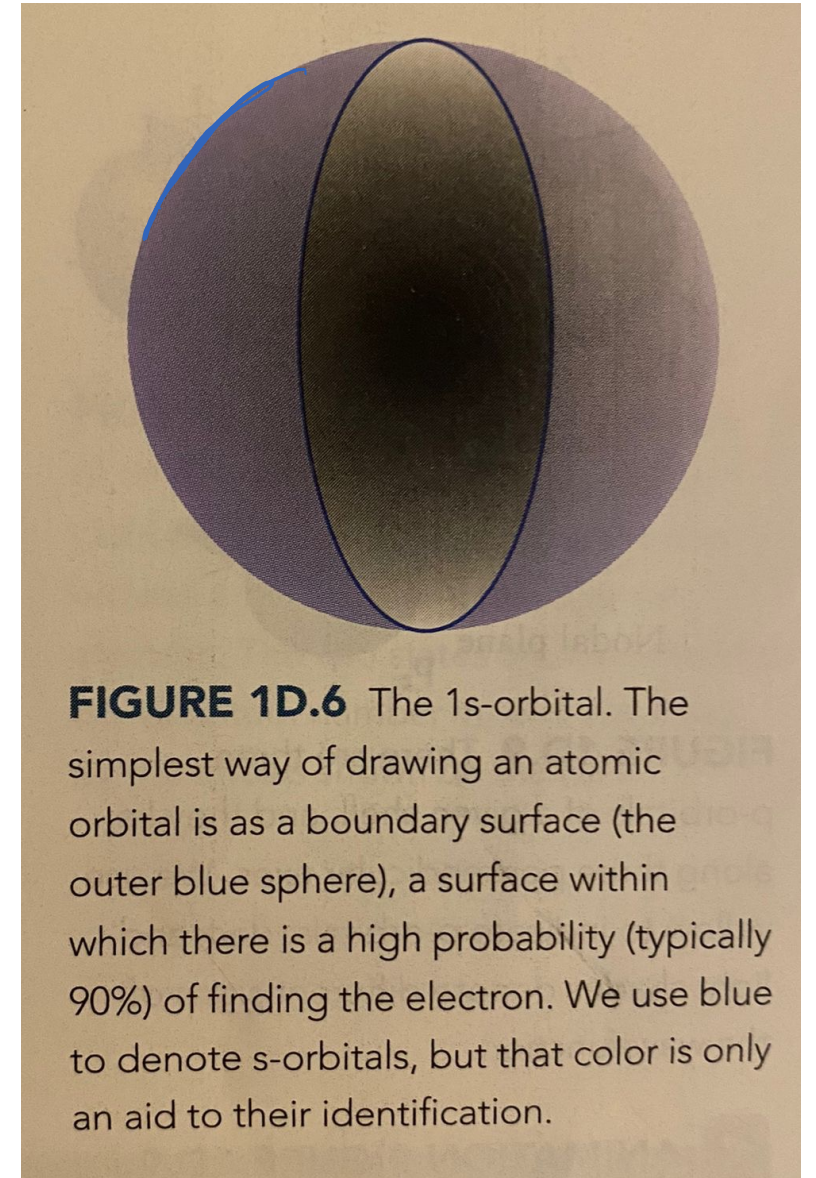


Image source: ChatGPT (2025).  
*Fuzzy Real vs. Boundary Surface.*

## 1D.4 La forme des orbitales

### Surface limite de l'orbitale 1s

- Rappel:  
La densité de probabilité n'est pas uniforme à l'intérieur de la surface limite.
- Une orbitale 1s a une surface limite sphérique car le nuage électronique a une forme sphérique.

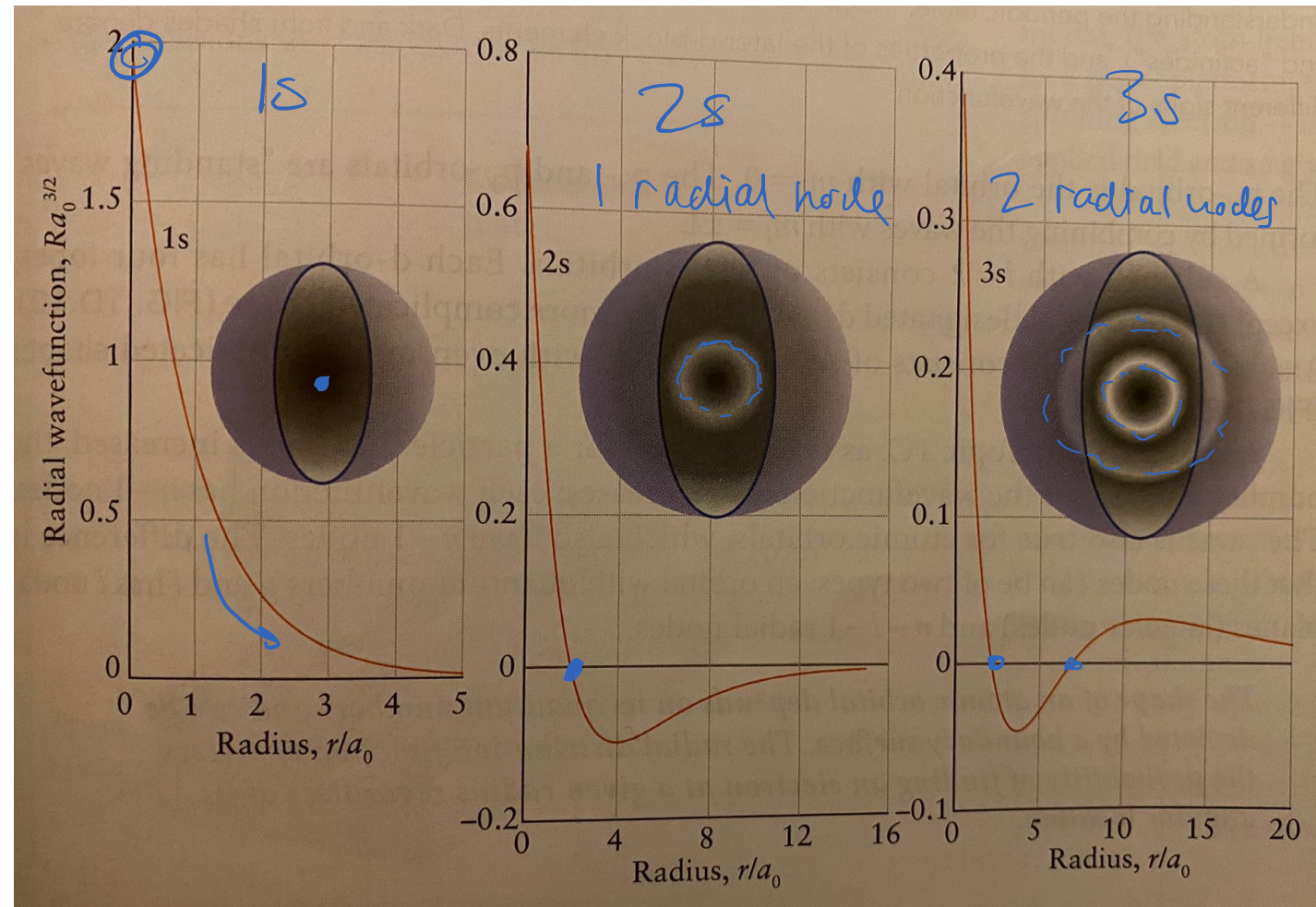


## 1D.3 Nombres quantiques, couches et sous-couches

### Surfaces limites des orbitales s d'ordre supérieur

- Les orbitales s de plus haute énergie ont des surfaces limites de plus grand diamètre.
- Elles possèdent aussi une fluctuation radiale plus complexe, avec **des nœuds radiaux** (les rayons auxquels la fonction d'onde est égale à zéro)

Figure 1D.7



## 1D.3 Nombres quantiques, couches et sous-couches

### Surfaces limites des orbitales s d'ordre supérieur

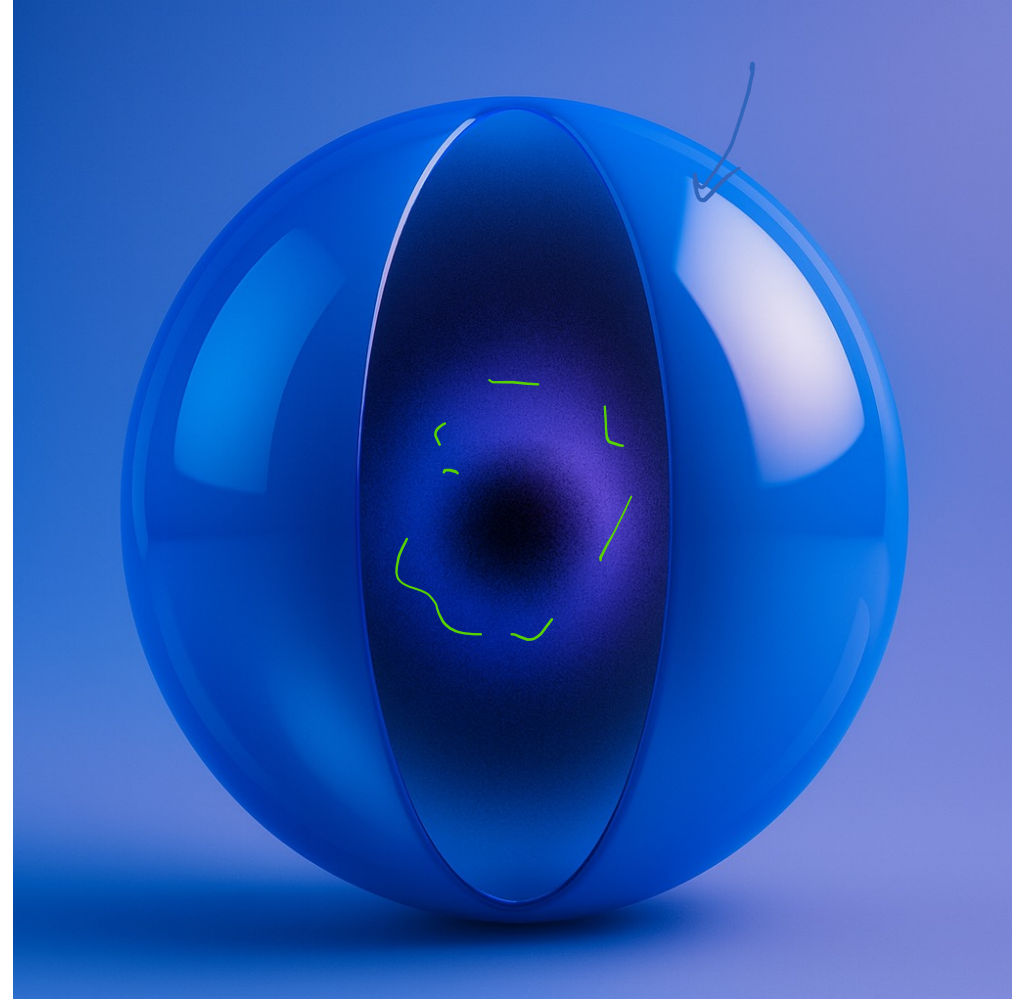
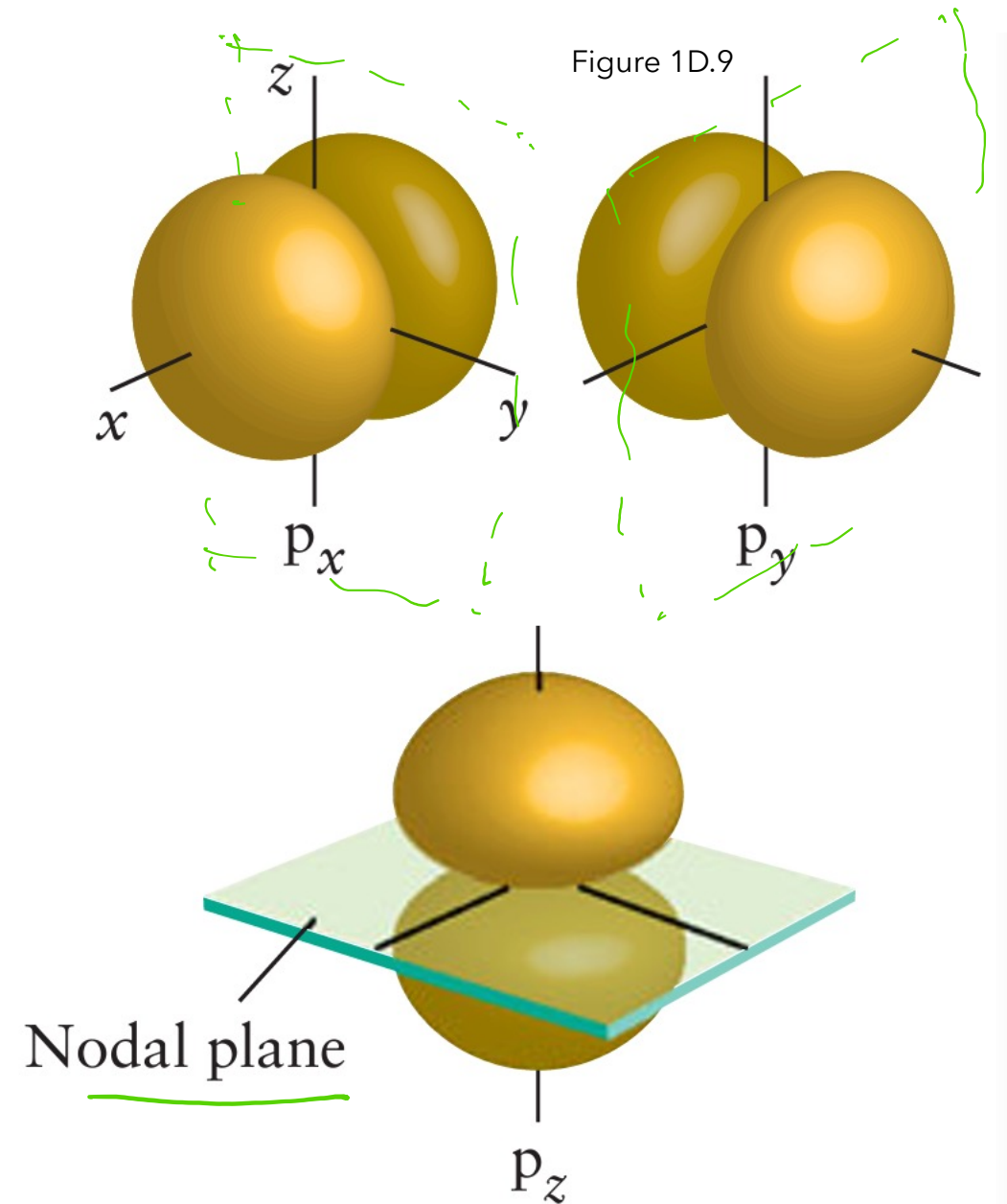


Image source: ChatGPT (2025).  
*A Glimpse inside a 2s Orbital.*

# 1D.4 La forme des orbitales

## Orbitales p

- Forme: deux lobes avec des signes opposés de la fonction d'onde (+/-)
- Séparés par un plan nodal passant par le noyau où  $\psi = 0$  (l'électron n'est jamais au niveau du noyau)
- Exemple:  $2p_z \propto \cos(\theta)$ , qui change de signe en traversant le plan nodal
- Trois orbitales p par sous-couche:  $p_x, p_y, p_z$
- Nombres quantiques:  $m_l = -1, 0, +1$
- Les électrons d'une l'orbitale p ont un moment angulaire non nulle



# 1D.4 La forme des orbitales

## Orbitales d

- Sous-couche  $l = 2$  contient **cinq orbitales d**
- Chaque orbitale-d possède 4 lobes, sauf  $d_{z^2}$

2 angles nodes :  
planes & cones

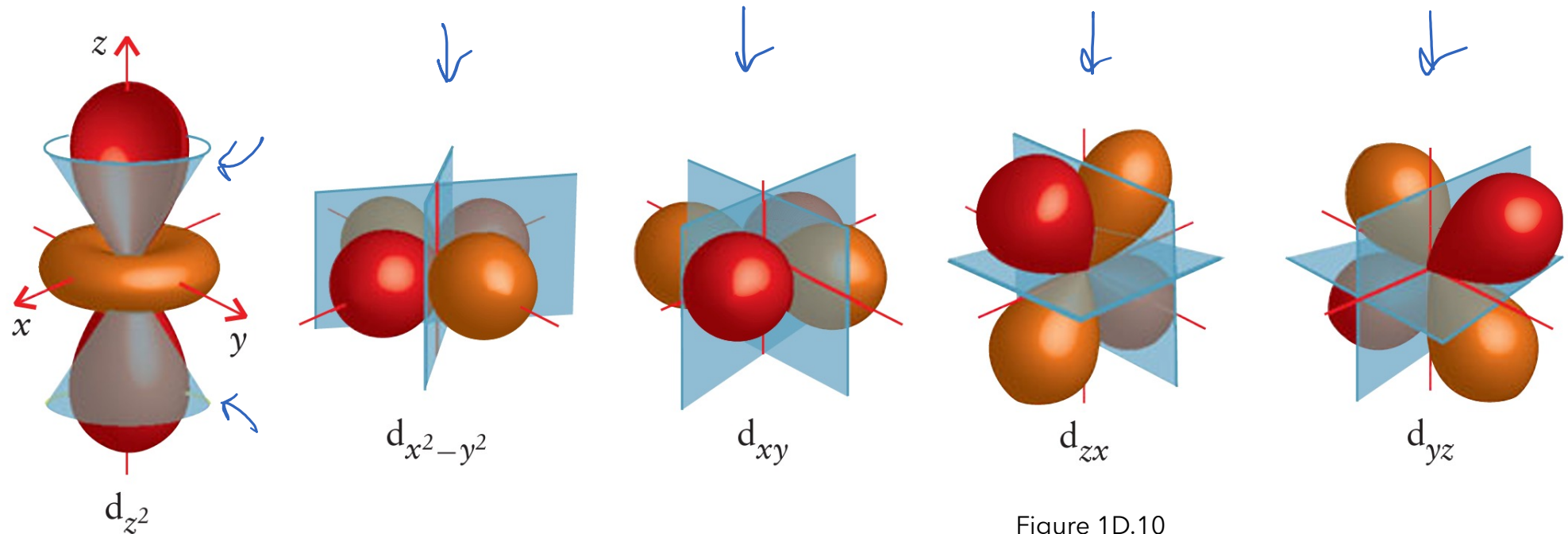


Figure 1D.10

# 1D.4 La forme des orbitales

## Orbitales f

- Sous-couche  $l = 3$  contient **sept orbitales f**.
- Forme plus **complexe**.
- Le détail des différentes formes ne sera pas discuté dans ce cours.
- Leur existence est importante pour **la compréhension du tableau périodique**, (lanthanides et actinides)

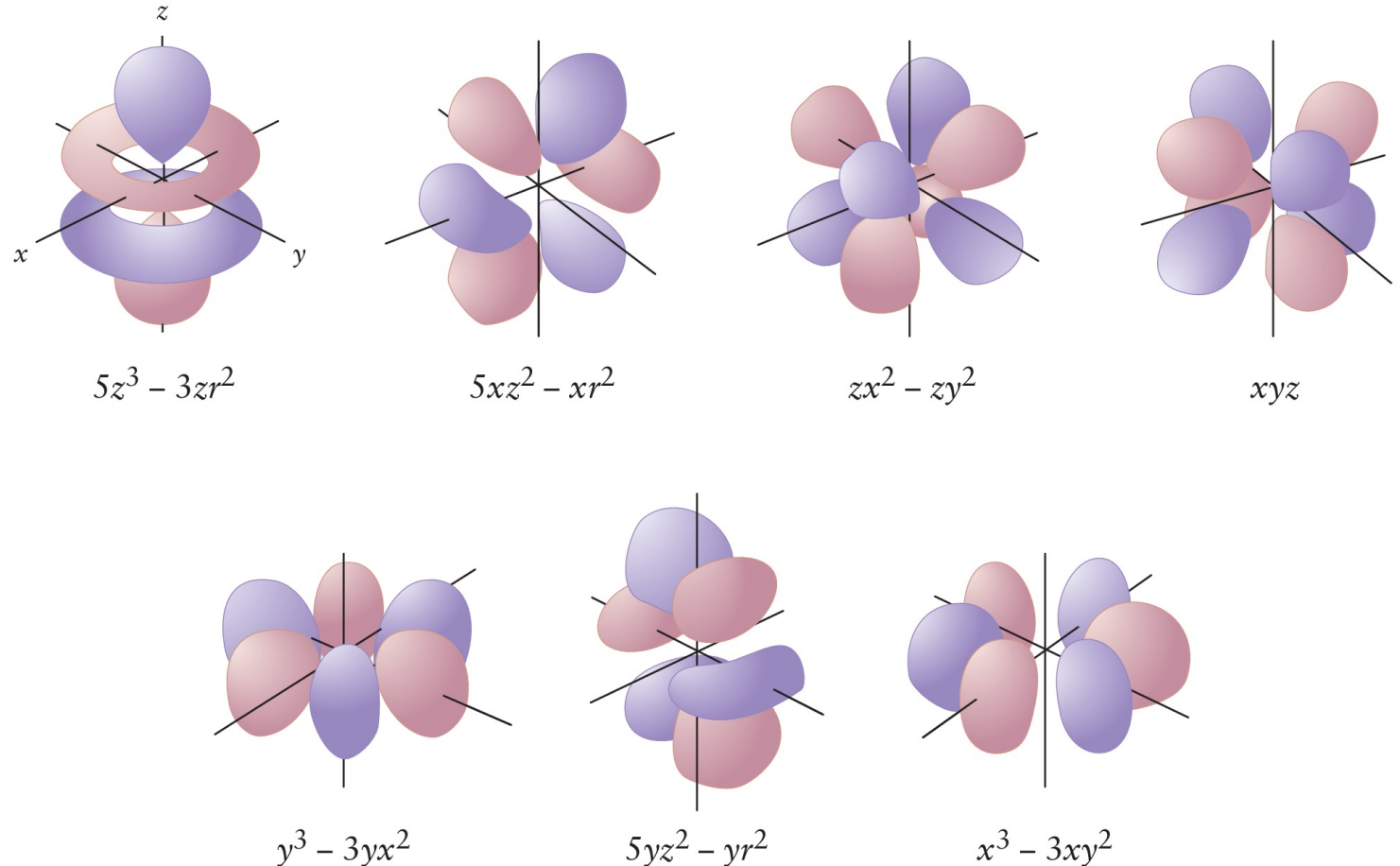


Figure 1D.11

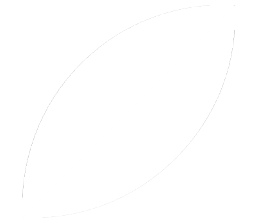
## 1D.4 La forme des orbitales

### Résumé

La forme d'une orbitale atomique dépend des nombres quantiques qui la caractérise et peut être représenté par une surface limite. La fonction de distribution radiale représente la probabilité de trouver un électron à une certaine distance du noyau peut importe son moment angulaire.

# Spin de l'électron

Topic 1D.5



## 1D.5 Spin de l'électron

### Spin $\uparrow$ and $\downarrow$

Penser à un électron pouvant tourner dans le sens anti-horaire (l'état  $\uparrow$ ) et horaire (l'état  $\downarrow$ ) exactement à la même fréquence.

Ces deux spins sont différenciables par un **quatrième nombre quantique**, le nombre **quantique magnétique de spin**,  $m_s$ .

Ce nombre quantique peut seulement avoir une de ces deux valeurs:  $+\frac{1}{2}$  ( $\uparrow$ ) et  $-\frac{1}{2}$  ( $\downarrow$ ).

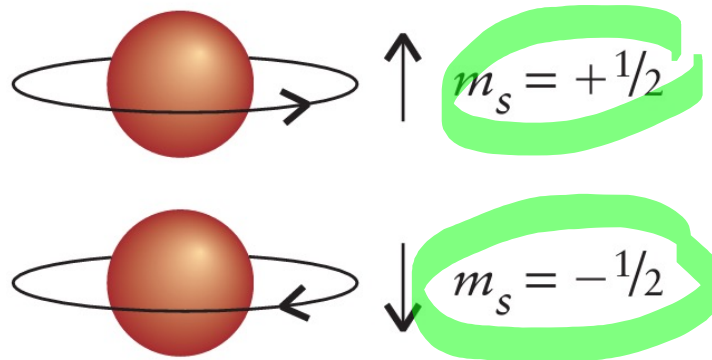


Figure 1D.12

## 1D.5 Electron spin

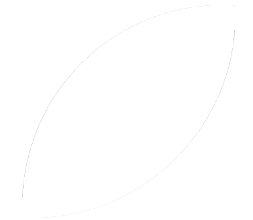
### Résumé

Un électron a une propriété de spin;

Le spin est décrit par le nombre quantique  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ .

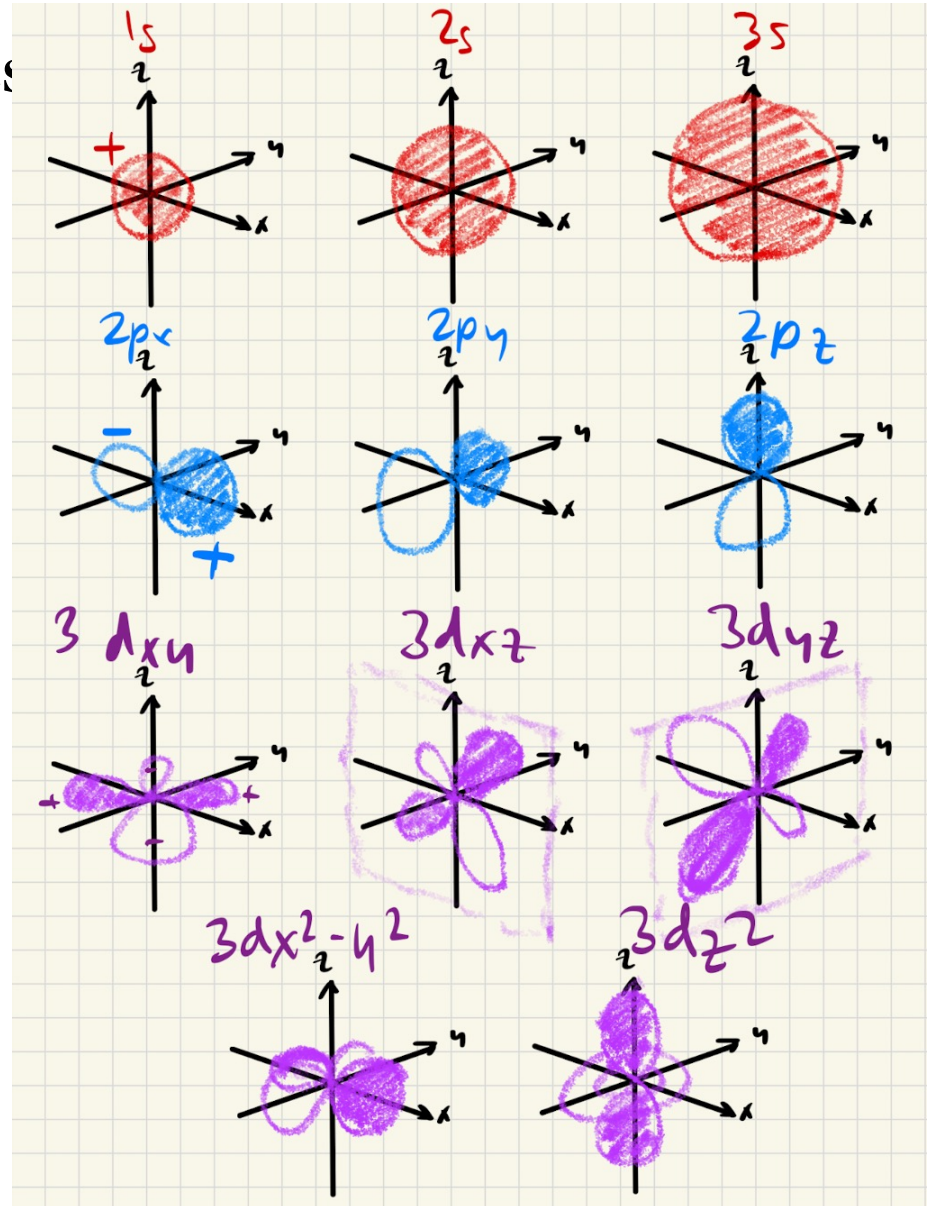
# La Structure Electronique de l'Hydrogène : Un Résumé

Topic 1D.6



# 1D.6 La structure électronique de l'hydrogène : un résumé

## Résumé des orbitales



## 1D.6 La Structure Electronique de l'Hydrogène : Un Résumé

### 1) Dans l'état fondamentale de l'hydrogène:

$$n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Les deux valeurs de  $m_s$  sont possible, l'orientation du spin n'affecte pas l'énergie.

### 2) Quand un atome obtient suffisamment d'énergie (en absorbant un photon) pour que son électron atteigne $n=2$ :

Il peut occuper n'importe quelle des quatre orbitales de cette couche: une orbitale  $2s$  et trois orbitales  $2p$  (dans le cas de l'hydrogène, ils ont tous la même):

# 1D.6 The electronic structure of hydrogen: a summary

## 3) L'atome obtient encore plus d'énergie:

L'électron peut aller dans la couche  $n = 3$

L'atome est encore plus large

Neuf orbitales sont disponibles (3s, 3p, 3d)

## 4) Encore plus d'énergie:

L'électron peut aller dans la couche  $n = 4$

avec 16 orbitales disponibles

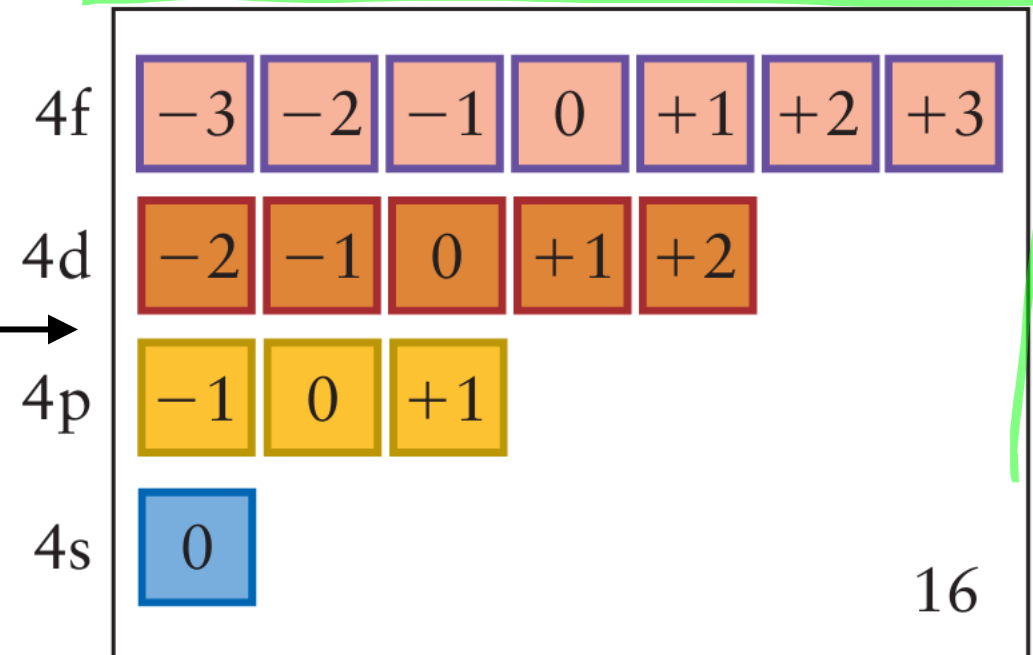


Figure 1D.13

## 1D.6 La structure électronique de l'hydrogène : un résumé

**TABLE 1.3** Quantum Numbers for Electrons in Atoms

Name	Symbol	Values	Specifies	Indicates
principal	$n$	$1, 2, \dots$	shell	size
orbital angular momentum*	$l$	$0, 1, \dots, n - 1$	subshell: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ s, p, d, f, g, ...	shape
magnetic	$m_l$	$l, l - 1, \dots, -l$	orbitals of subshell	orientation
spin magnetic	$m_s$	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	spin state	spin direction

\*Also called the azimuthal quantum number.

## 1D.6 The electronic structure of hydrogen: a summary

### Résumé

L'état d'un électron dans l'atome d'hydrogène est défini par les quatre nombres quantiques  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  and  $m_s$ ; quand la valeur de  $n$  augmente, la taille de l'atome augmente.

# Les compétences que vous avez acquises vous permettent:

- ✓ D'évaluer la probabilité de présence relative d'un électron à une distance donnée du noyau d'un atome.
- ✓ De nommer et expliquer la relation de chacun des quatre nombres quantiques aux propriétés et aux énergies relatives des orbitales atomiques.
- ✓ De décrire les propriétés du spin de l'électron.
- ✓ De décrire la structure de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental et dans ses états excités.

**Résumé:** Vous avez appris que l'électron d'un atome d'hydrogène est décrit par des fonctions d'onde appelés orbitales atomiques et chaque orbitales est spécifiée par trois nombres quantiques :  $n$ ,  $l$ , and  $m_l$ . Vous savez que la forme et les énergies d'une orbitale est trouvé en résolvant l'équation de Schrödinger pour un électron attiré par un noyau. Vous savez aussi que les transitions autorisées entre les niveaux d'énergies expliquent les motifs observés des raies spectroscopiques. Vous avez aussi rencontré la propriété qu'est le "spin de l'électron" et vous savez qu'il peut avoir l'une de deux orientations.

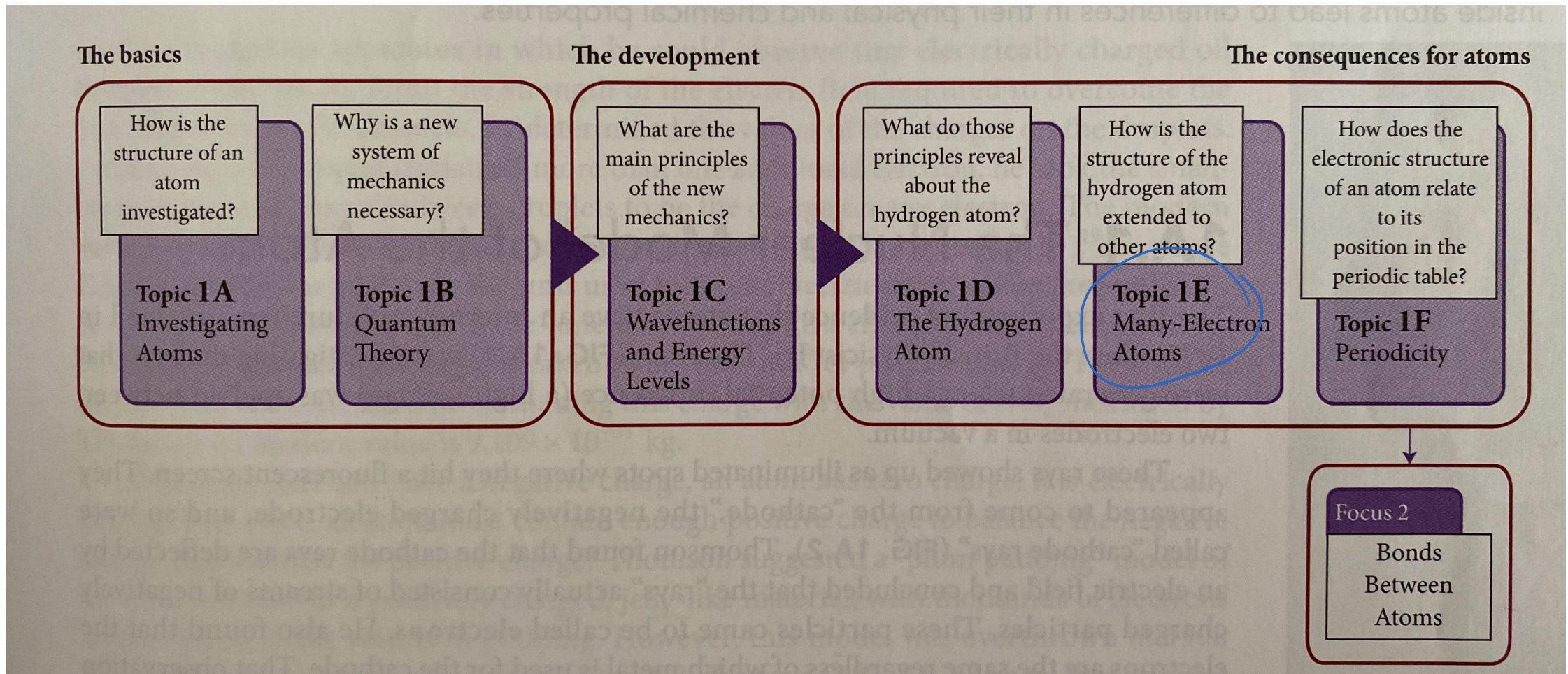
	Particule dans la boîte	L'atome d'hydrogène
Dimension dans l'espace	1D	3D
Limites	Limites physiques	Pas de limites physiques, les électrons sont confinés par l'attraction du noyau
Quantification	L'énergie est quantifiée	
Energie potentiel	L'énergie potentielle dans la boîte est égale à zéro	L'énergie potentielle est gouvernée par le potentiel de Coulomb
Forme des fonctions d'onde	Fonctions sinusoidales (sinus or cosinus)	Fonctions d'one (appelés <b>orbitales</b> ) sont plus complexes, souvent <b>sphérique</b> ou de forme <b>lobée</b> (harmoniques spheriques), avec des composantes radial et angulaire.
Nombres quantiques	Un nombre quantique, $n$ , qui représente le niveau d'énergie et est relié au nombre de nœuds de la fonction d'onde.	Trois nombres quantiques: <b><math>n</math></b> : nombres quantique principale (niveau d'énergie), <b><math>l</math></b> : nombre quantique de moment angulaire momentum (forme de l'orbitale), <b><math>m_l</math></b> : nombre quantique magnétique (orientation de l'orbitale).
Dégénérescence	Pas de dégénérescence: chaque niveau d'énergie a un unique état.	Dégénérescence des niveaux d'énergie: pour un nombre quantique principale $n$ donné, de multiples orbitales différentes (caractérisée par $l$ et $m_l$ ) ont la même énergie.
Conditions de bord	La fonction d'onde doit aller à <b>zéro aux bords</b> de la boîte.	La fonction d'onde doit aller à zéro à l'infini, loin du noyau.
Interprétation physique	La particule est <b>libre</b> dans la boîte mais ne peut pas s'en échapper à cause du potentiel infini	L'électron est <b>attaché</b> au noyau à cause de la force attractive de Coulomb, qui confine l'électron.

# Les Atomes Polyélectroniques

Topic 1E



# Overview Chapitre 1 (Focus 1: Atomes)



# Topic 1E.1 Energies des Orbitales

# Topic 1E.2 Le principe de construction

POURQUOI FAUT-IL CONNAITRE CES SUJETS ?

- La structure électronique des atomes polyélectroniques expliquent la **forme** du **tableau périodique** si important pour la chimie.

LES SUJETS QUE VOUS DEVRIEZ DÉJÀ MAITRISER ?

- La description des orbitales atomiques de l'hydrogène (**Topic 1D**), en particulier leur dépendance radiales et leurs formes angulaires.
- L'électron a une propriété appelée spin.
- La structure générale du tableau périodique (**Fondements B**)

# Energies des orbitales

Topic 1E.1



## 1E.1 Energies des orbitales

### La plus part des atomes ont plus d'un électron!

- Un atome neutre autre que l'hydrogène possède plus d'un électron et est appelé **atome à plusieurs électrons** (ou atome polyélectronique).
- In this Topic 1E, we will learn how the presence of more than one electron affects the **energies of atomic orbitals** and **how they are occupie**
- Dans ce Topic 1E, nous allons voir comment la présence de plus d'un électron affecte l'**énergie des orbitales atomiques** et **comment celles-ci sont occupées.**

# 1E.1 Energies des orbitales

## La plus part des atomes ont plus d'un électron

- Comme pour l'hydrogène, les électrons dans un atome polyélectronique **occupent des orbitales**. Avec deux différences principales:
  1. **Noyau est plus chargé** → attire plus fortement les électrons → abaisse l'énergie des orbitales
  2. **Les électrons se repoussent entre eux** → répulsion s'oppose à l'attraction nucléaire → augmente l'énergie des orbitales

# 1E.1 Energies des orbitales

## L'énergies de l'hydrogène vs. atomes polyelectroniques

Atome d'hydrogène	Atomes polyelectroniques
Un électron	Plusieurs électrons
Pas de répulsion électron-électron	Répulsion électron-électron
Toutes les orbitales d'un même couche sont dégénérées (ont la même énergie)	Répulsion électron-électron augmente l'énergie de l'orbitale 2p (2s et 2p ne sont pas dégénérées)
Les orbitales 2s et 2p ont la même énergie	L'énergie de l'orbitale 2p est plus grande que l'énergie de l'orbitale 2s


# 1E.1 Energies des orbitales

## Blindage

- Chaque électron est attiré par le noyau et **repoussé par les autres électrons**.
- L'électron est moins fortement attaché au noyau qu'il ne le sera si les autres électrons étaient absents: **l'électron est blindé de l'attraction totale du noyau** par les autres électrons du noyau.
- L'effet de blindage réduit l'attraction du noyau sur un électron.
- La **charge nucléaire effective**,  $Z_{eff}e$ , expérimentée par l'électron est toujours plus petite que la charge nucléaire totale,  $Ze$ . Les répulsions électron-électron travaillent contre l'attraction du noyau.

# 1E.1 Energies des orbitales

## Blindage dans les différentes orbitales

- L'étendue du blindage dépend de la forme de l'orbitale
  - **Électron s**: grande probabilité proche du noyau → faiblement blindé → ressent une charge nucléaire plus fortement → baisse l'énergie.
  - **Électrons p**: pas de probabilité au noyau, moins proche → plus blindé → ressent une charge nucléaire faible → augmente l'énergie.
  - **Électrons d**: encore plus éloigné → fortement blindé → attraction nucléaire la plus faible → l'énergie est la plus grande.
- 

# 1E.1 Energies des orbitales

## Fonctions de distribution radiale pour des orbitales s, p et d

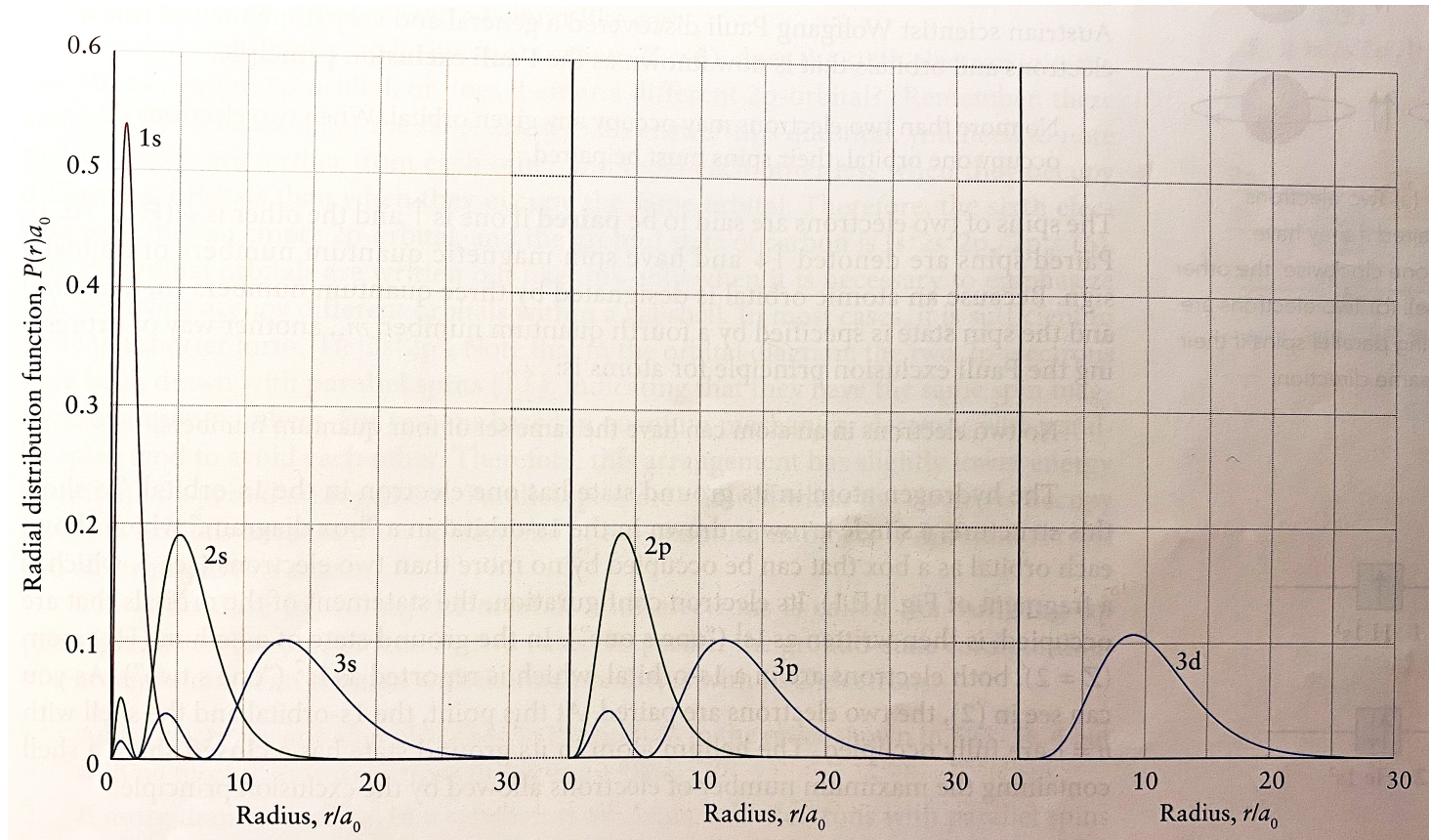


Figure 1E.2

- Pour la même couche: Le maximum de probabilité sont proches les uns des autres.
- $s > p > d$  en probabilité près du noyau

# 1E.1 Energies des orbitales

## Les effets du blindage peuvent être grand

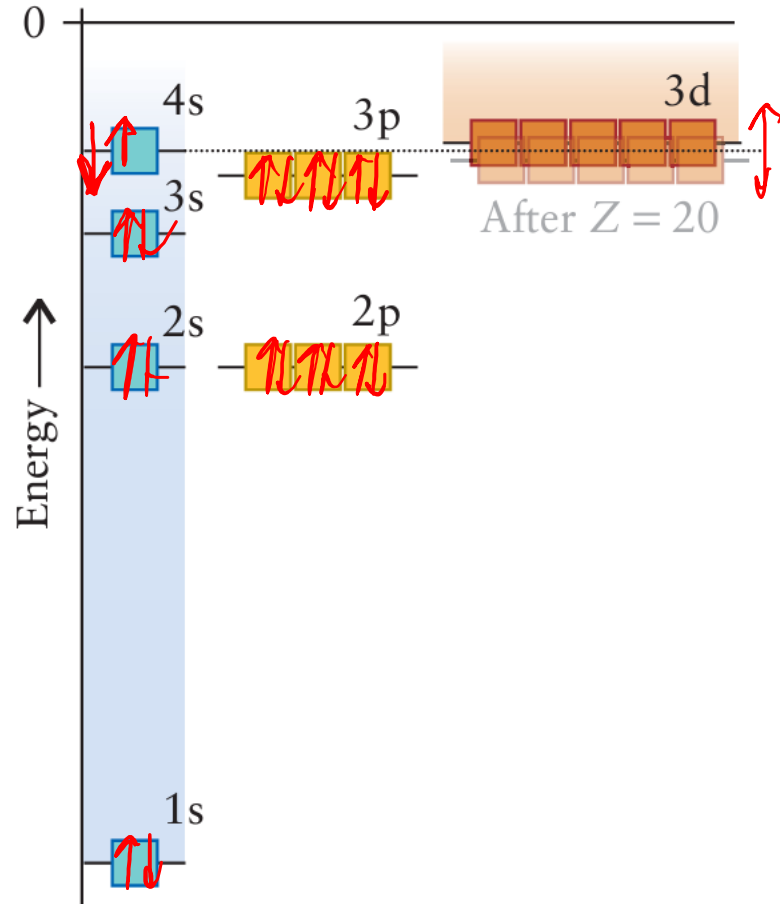


Figure 1E.1

- Un électron 4s a une énergie bien plus basse qu'un électron 3d d'un même atome.
- **L'ordre précis** des orbitales dépend du **nombre d'électrons** dans un atome aussi bien que de la charge nucléaire effective ressentie par les électrons (voir la prochaine section)

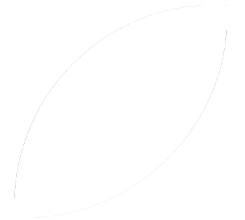
# 1E.1 Energies des orbitales

## Résumé

Dans un atome polyélectronique, à cause des effets de pénétration et de blindage, l'ordre des énergies des orbitales d'une couche donnée est  $s < p < d < f$ .

# Le Principe de Construction

Topic 1E.2



## 1E.2 Le principe de construction

### La structure électronique des atomes polyélectroniques

- La structure électronique d'un atome détermine ses propriétés chimiques.
- **La configuration électronique**: une liste de toutes ses orbitales occupées avec le nombre d'électrons occupant chacune d'entre elle.

## 1E.2 Le principe de construction

### Le principe d'exclusion de Pauli

- En 1925, le scientifique autrichien Wolfgang Pauli a découvert une règle générale et fondamentale à propos des électrons et des orbitales :

**Pas plus de deux électrons peuvent occuper une orbitale donnée. Quand deux électrons occupent une même orbitale, leurs spins doivent être appariés .  $\uparrow\downarrow$**

- Les spins de deux électrons sont appariés si l'un est  $\uparrow$  et l'autre  $\downarrow$ .
- Les spins appariés sont notés  $\uparrow\downarrow$  et ont des nombres quantiques magnétiques de spin de signes opposés.

## 1E.2 Le principe de construction

### Le principe d'exclusion de Pauli

- (a) Les deux spins des électrons sont **appariés** si l'un est  $\uparrow$  et l'autre  $\downarrow$ . Ils ont des signes opposés (un dans le sens horaire, l'autre dans le sens anti-horaire).
- (b) Deux électrons sont dits ayant des spins **parallèles** si leurs spins sont dans la même direction.

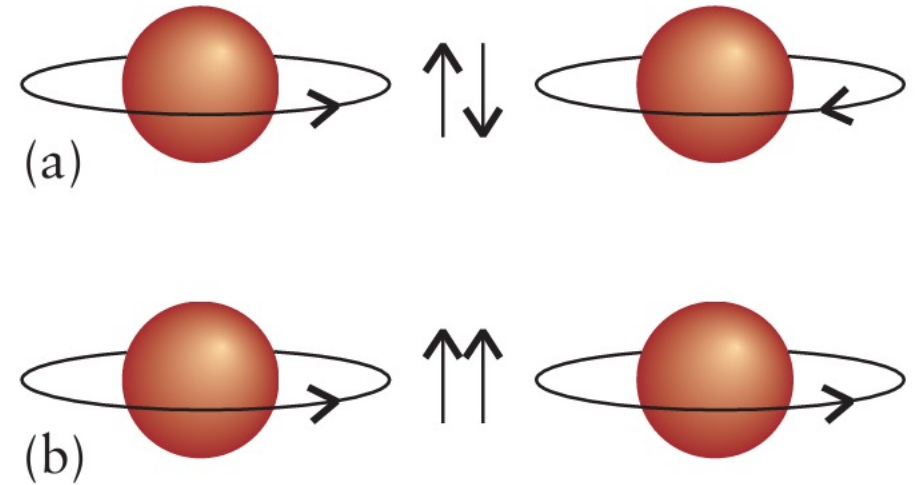


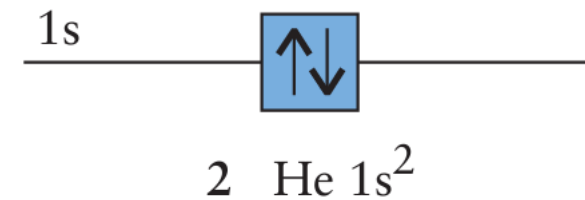
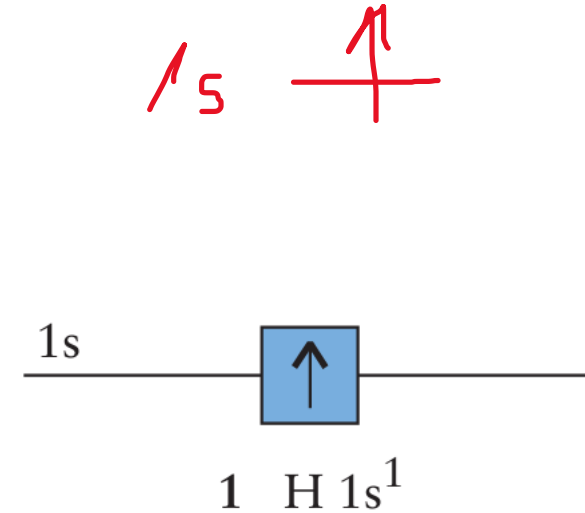
Figure 1E.3

## 1E.2 Le principe de construction

### Hydrogène et hélium

$$Z = 1$$

- L'hydrogène à l'état fondamental : un électron dans l'orbitale 1s: **1s<sup>1</sup>** (configuration électronique)
- La boîte indique la place pour deux électrons.
- Hélium à l'état fondamental: **1s<sup>2</sup>**
- Hélium a une orbitale 1s **entièrement occupée.**
- Hélium a une **couche complète**: une couche contenant le nombre maximum d'électrons autorisés par le principe d'exclusion.



## 1E.2 Le principe de construction

### Les électrons de valence

- Orbitales internes, remplies: **cœur**
- Couche la plus externe: **électrons de valence**
- Les électrons de cœur sont dans les orbitales de faible énergies et sont attaché au noyau.
- Les électrons des orbitales les plus externes sont utilisés lors de la formation de liaisons chimiques (Sujet 2A), et l'une des théories de la formation des liaisons est appelé **théorie de la liaison de valence**, d'où le nom d'électron de valence

## 1E.2 Le principe de construction

### Lithium (Li)

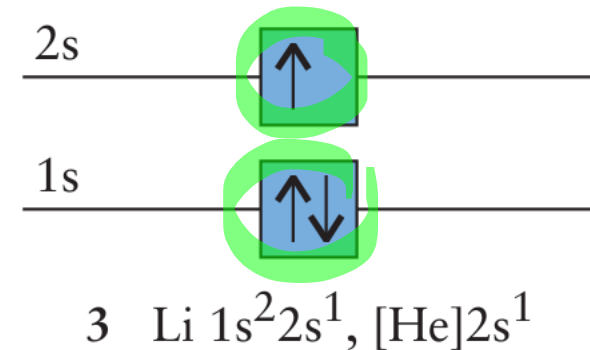
- Le lithium ( $Z = 3$ ) a trois électrons : Deux dans l'orbitale 1s, un dans l'orbitale 2s.

Etat fondamental du lithium :  $1s^2 2s^1$

Cœur du lithium:  $1s^2 = [\text{He}]$

Avec les électrons de valence :  $[\text{He}]2s^1$

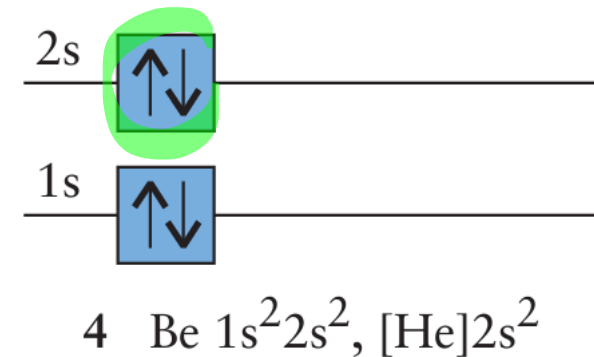
- Le lithium **perd seulement un électron** lorsqu'il forme des composés :  $\text{Li}^+$  plutôt que  $\text{Li}^{2+}$  ou  $\text{Li}^{3+}$



## 1E.2 Le principe de construction

### Béryllium (Be)

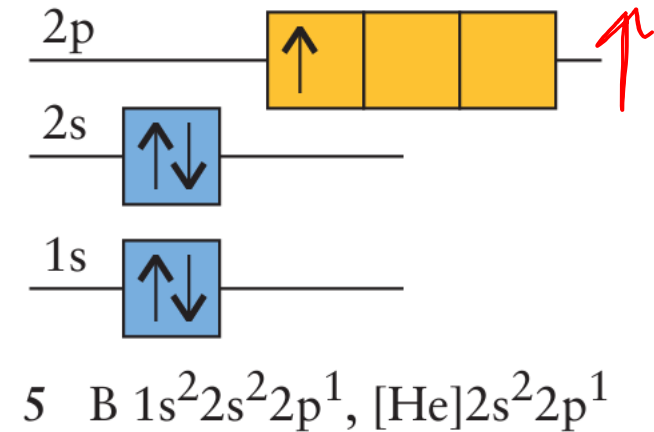
- Le béryllium ( $Z = 4$ ) a quatre électrons: deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s.
- Etat fondamental :  $1s^2 2s^2$
- Avec électrons de valence :  $[\text{He}] 2s^2$
- L'atome Be perd seulement ses électrons de la couche de valence lors de réactions chimiques : ion  $\text{Be}^{2+}$



# 1E.2 T Le principe de construction

## Bore (B)

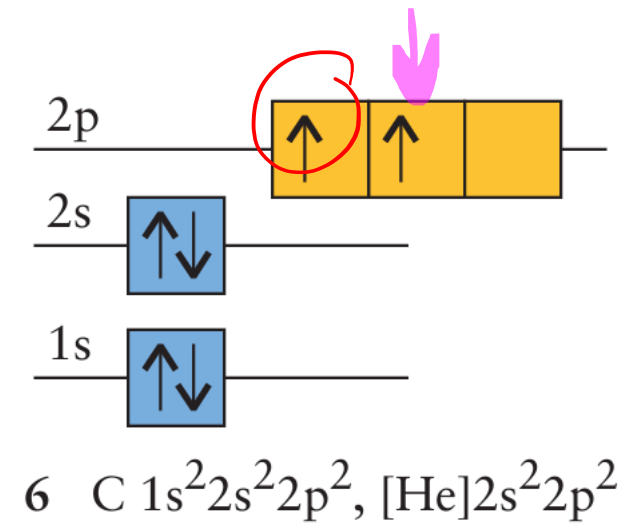
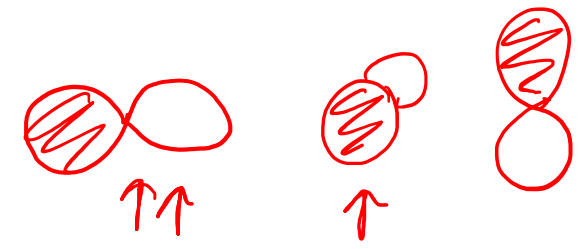
- Le bore ( $Z = 5$ ) a cinq électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, un dans l'orbitale one 2p.
- Etat fondamental:  $1s^2 2s^2 2p^1$
- Avec les électrons de valence:  $[\text{He}] 2s^2 2p^1$



# 1E.2 Le principe de construction

## Carbone (C)

- Le carbone ( $Z = 6$ ) a six électrons. Deux dans l'orbitale  $1s$ , deux dans l'orbitale  $2s$ -orbital, deux dans l'orbitale  $2p$ .
- Etat fondamental:  $1s^2 2s^2 2p^2$
- Avec les électrons de valence:  $[\text{He}] 2s^2 2p^2$
- **Décision**: électrons appariés ou parallèle dans les orbitales  $p$ ?
- Les électrons sont plus éloignés l'un des autres et se repousse moins lorsqu'ils occupent différentes orbitales  $p$  que si il occupent la même orbitale :
- $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$
- Spin parallèle!



## 1E.2 Le principe de construction

### Le principe de construction et la règle de Hund

Deux règles :

- 1. Ajouter  $Z$  électrons, l'un après l'autre, dans les orbitales selon l'ordre de la Fig. 1E.4 (Slide suivante) mais sans mettre plus de deux électrons dans une orbitale.**
- 2. Si une sous-couche contient plus d'une orbitale, placez les électrons dans les différentes orbitales de la sous-couche avec des spins parallèles plutôt que d'apparier deux électrons dans l'une des orbitales. (Règle de Hund, d'après le spectroscopiste allemand Friedrich Hund)**

- **La configuration** d'un atome est à la **plus faible énergie totale** : maximise l'attraction des électrons par le noyau et minimise leurs entre les électrons. .

# 1E.2 Le principe de construction

## Le tableau périodique

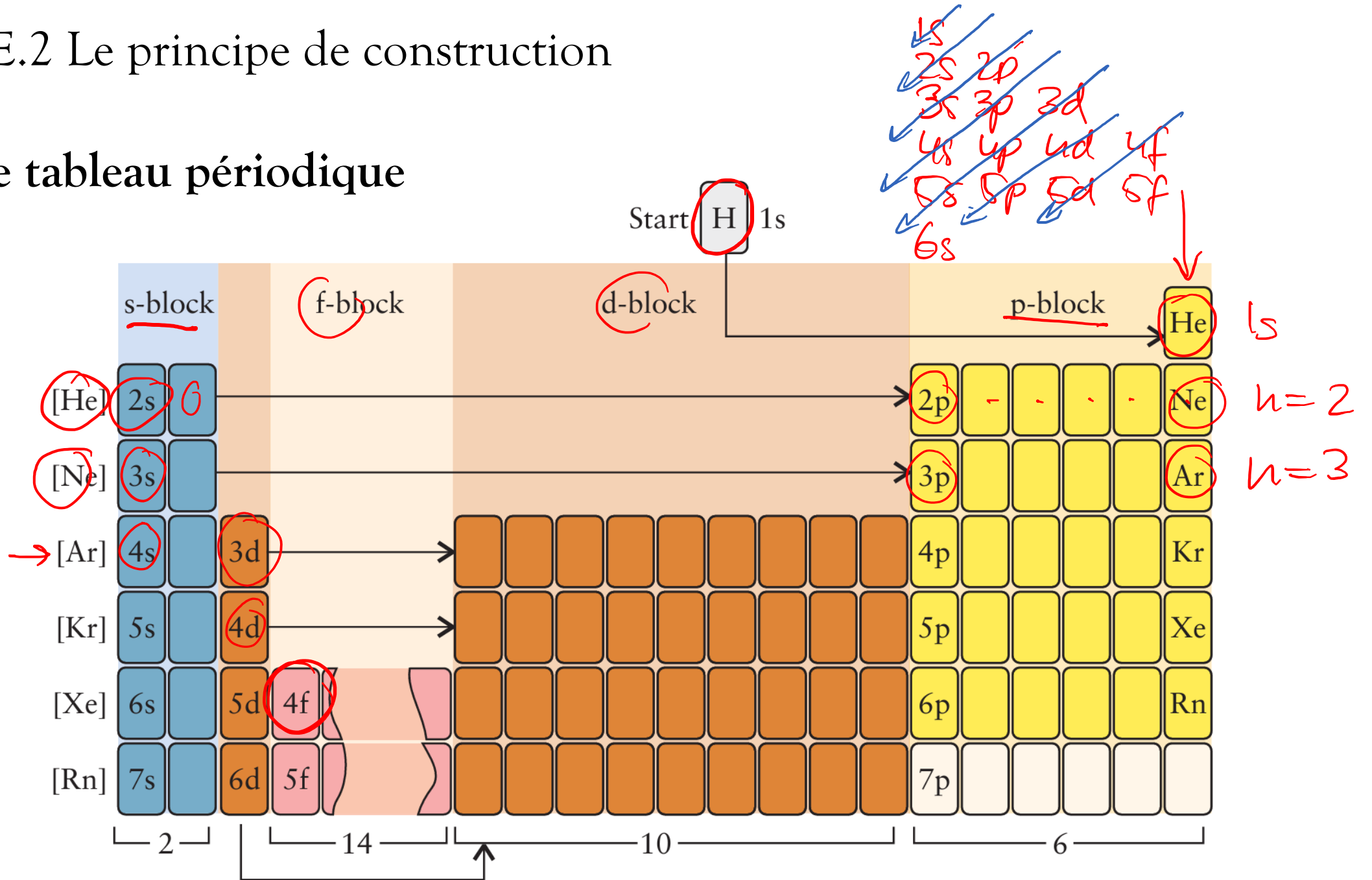


Figure 1E.4

## 1E.2 Le principe de construction

### L'état excité

- Un atome avec des électrons dans des niveaux d'énergie plus élevées que ceux prédit par Le principe de construction sont dans un **état excité**.
- Par exemple:  $[\text{He}]2s^12p^3$  représente un état excité de l'atome de carbone.
- Un état excité est **instable** et **retourne** rapidement à l'état fondamental, lorsque l'électron retourne dans une orbitale qui rétablit l'atome dans un état d'énergie inférieur, il **émet un photon**.

## 1E.2 Le principe de construction

### L'organisation sous-jacente: Période

- Les lignes sont appelées **périodes**
- Tous les atomes des éléments des **groupes principaux** dans une période donnée ont une couche de valence avec le même nombre principale (égale au nombre de la période)
- Ex. La couche de valence des éléments de la période 2 (lithium au néon) est la couche avec  $n=2$ .
- Tous les atomes d'une période donnée ont le **même type** de cœur mais des **nombres différents d'électrons de valence**.
- Période 2: éléments qui ont un cœur  $1s^2$  de type hélium, noté [He]
- Période 3: éléments qui ont un cœur  $1s^2 2s^2 2p^6$  de type néon, noté [Ne]

## 1E.2 Le principe de construction

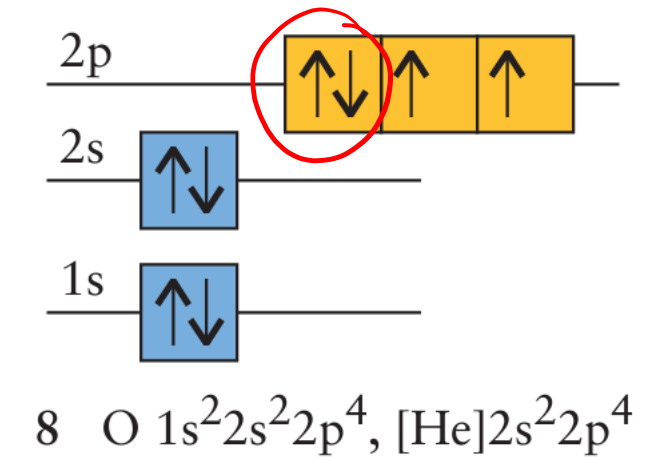
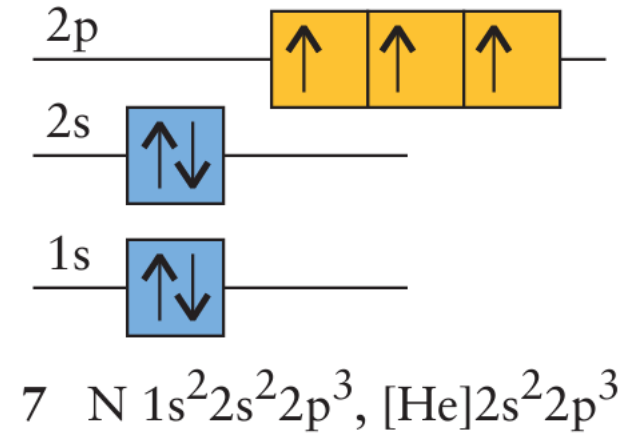
### L'organisation sous-jacente: Groupes

- **Les colonnes** sont appelées **groupes**: groupes principaux 1, 2, 13-18
- Dans un même groupe, les atomes ont des configurations de valences analogues, qui ne diffèrent que par la valeur de  $n$
- Ex. Tous les éléments du Groupe 1 ont une configuration de valence  $ns^1$
- Tous les éléments du Groupe 14 ont une configuration de valence  $ns^2np^2$
- **Des configurations électroniques similaires** donnent aux éléments d'un même groupe des **propriétés chimiques similaires**

## 1E.2 Le principe de construction

### Azote et oxygène

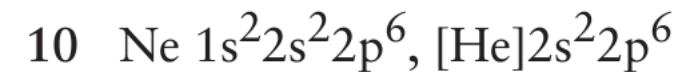
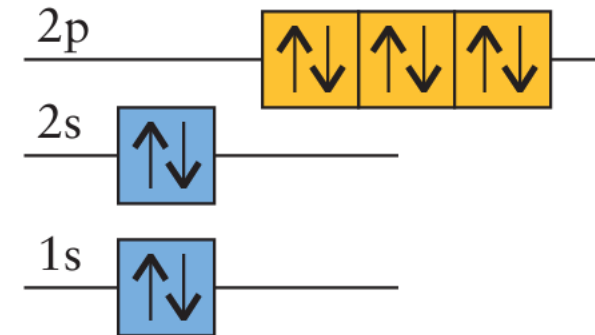
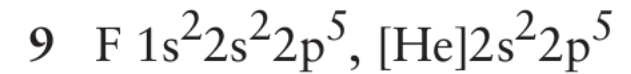
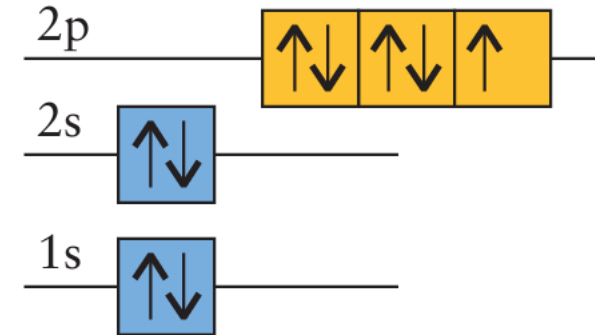
- **L'azote** ( $Z = 7$ ) a sept électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, trois dans l'orbitale 2p
- **L'oxygène** ( $Z = 8$ ) a huit électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, quatre dans l'orbitale 2p.



## 1E.2 Le principe de construction

### Fluor et néon

- **Fluor** ( $Z = 9$ ) a neuf électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, cinq dans l'orbitale 2p.
- Seulement un électron n'est pas apparié
- **Néon** ( $Z = 10$ ) a dix électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, six dans l'orbitale 2p.
- Tous les électrons sont appariés (couche complète  $n=2$ )



## 1E.2 Le principe de construction

### Après que les orbitales 3p soit remplies ...

- Les orbitales s et p de la couche  $n = 3$  sont remplies avec l'**argon**:  $[\text{Ne}]3s^23p^6$
- **L'orbitale 4s est la suivante** (pas 3d!) parce que les électrons s pénètre au travers des couches interne de manière plus significative que les électrons p ou d  $\rightarrow$  plus faible énergie
- Potassium  $[\text{Ar}]4s^1$  et calcium  $[\text{Ar}]4s^2$  sont les suivant
- $[\text{Ar}]$  indique un cœur  $1s^22s^22p^63s^23p^6$
- Ensuite les orbitales 3d sont remplies

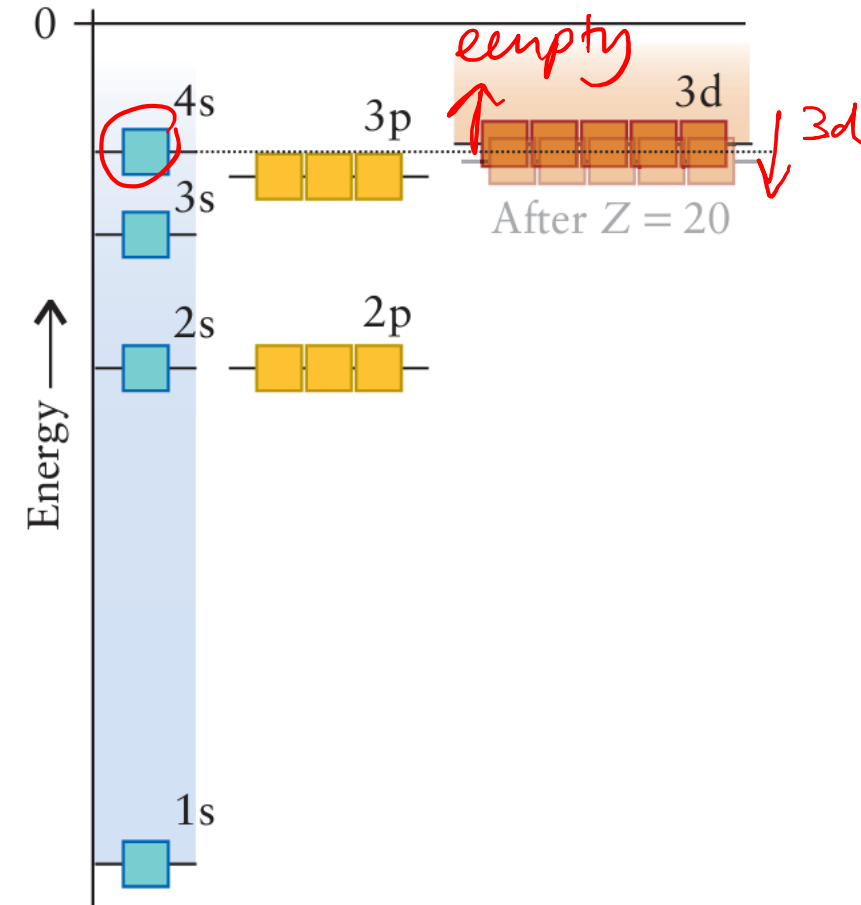


Figure 1E.1

## 1E.2 Le principe de construction

### Après que l'orbitale 4s soit remplie ...

- Changement de rythme: **orbitales 3d**
- De  $Z = 21$  à  $Z = 30$  (scandium au zinc)
- Scandium ( $Z = 21$ ):  $[\text{Ar}]3d^1 4s^2$
- Titane ( $Z = 22$ ):  $[\text{Ar}]3d^2 4s^2$
- Note: les orbitales 3d sont écrites avant l'orbitale 4s parce qu'elles deviennent plus basses en énergie comparée à la 4s **lorsqu'elles sont remplies avec des électrons**

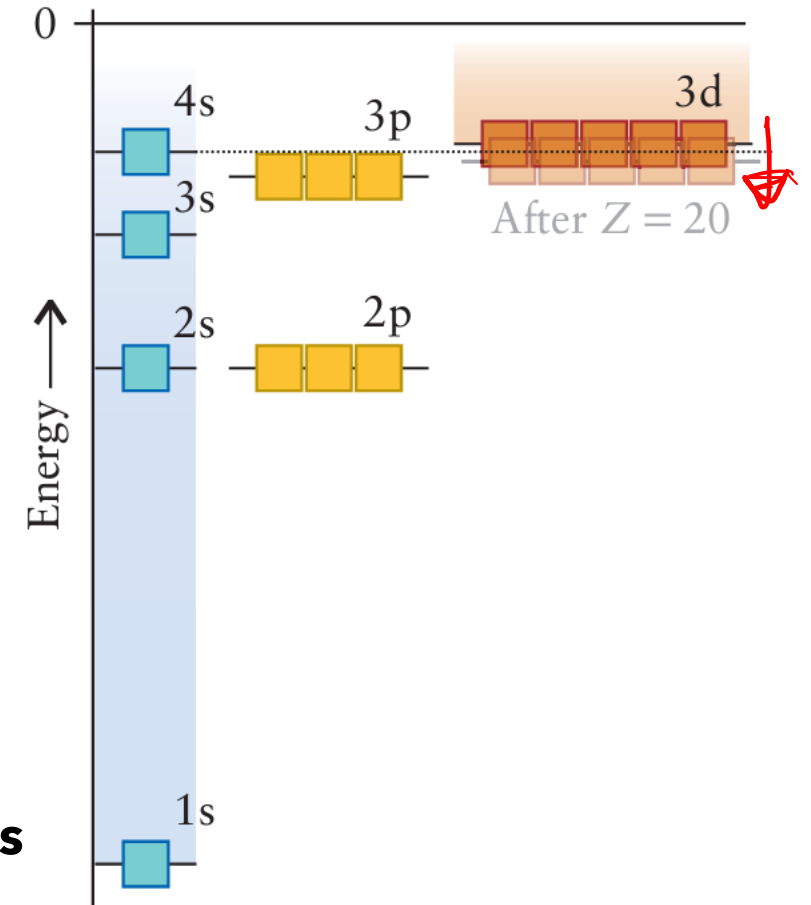


Figure 1E.1

## 1E.2 Le principe de construction

### Après que l'orbitale 4s soit remplie ...

- Les électrons suivants sont ajoutés aux orbitales d au fur et à mesure que Z augmente.
- Avec deux exceptions:
- Chrome (Z = 24):  $[\text{Ar}]3d^54s^1$  au lieu de  $[\text{Ar}]3d^44s^2$
- Cuivre (Z = 29):  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$  au lieu de  $[\text{Ar}]3d^94s^2$
- **La configuration de sous-couche à demi-complète**  $d^5$  et **la configuration de sous-couche complète**  $d^{10}$  ont une énergie plus faible

## 1E.2 Le principe de construction

### Après que les orbitales 3d soient remplies ...

- Note: Les configurations électroniques sont notées **dans l'ordre d'énergie croissante, pas dans l'ordre de remplissage**. Par exemple, le scandium est noté  $[\text{Ar}]3d^14s^2$  et non  $[\text{Ar}]4s^23d^1$
- Les orbitales 4p sont les prochaines (voir tableau périodique!)
- Germanium:  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^2$
- Arsenic:  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^3$
- La quatrième période contient **18 éléments**: Les orbitales 4s et 4p avec 8 électrons et les orbitales 3d avec 10 électrons
- La période quatre est la première **période longue** du tableau périodique

### CONCEPTUAL BASIS

Electrons occupy orbitals in such a way as to minimize the total energy of an atom by maximizing attractions and minimizing repulsions in accord with the Pauli exclusion principle and Hund's rule.

### PROCEDURE

We use the following rules of the building-up principle to assign a ground-state configuration to a neutral atom of an element with atomic number  $Z$ :

- 1 Add  $Z$  electrons, one after the other, to the orbitals in the order shown in Figs. 1.41 and 1.44 but with no more than two electrons in any one orbital (the Pauli exclusion principle).
- 2 If more than one orbital in a subshell is available, add electrons to different orbitals of the subshell before doubly occupying any of them (Hund's rule).
- 3 Write the labels of the orbitals in order of increasing energy, with a superscript that gives the number of electrons in that orbital. The configuration of a filled shell is represented by the symbol of the noble gas having that configuration, as in [He] for  $1s^2$ .

- 4 When drawing a box diagram, show the electrons in different orbitals of the same subshell with parallel spins; electrons sharing an orbital have paired spins.

In most cases this procedure gives the ground-state electron configuration of an atom, the arrangement with the lowest energy. Any arrangement other than the ground state corresponds to an excited state of the atom. Note that we can use the structure of the periodic table to predict the electron configurations of most elements once we realize which orbitals are being filled in each block of the periodic table (see Fig. 1.44).

A useful shortcut for atoms of elements with large numbers of electrons is to write the valence electron configuration from the group number, which gives the number of valence electrons in the ground state of the atom, and the period number, which gives the value of the principal quantum number of the valence shell. The core consists of the preceding noble-gas configuration together with any completed d- and f-subshells.

**Example 1.10** shows how these rules are applied.

## 1E.2 Le principe de construction

### Après que les orbitales 4p soient remplies ...

- Période 5: **l'orbitale 5s** est remplie, en suite **les orbitales 4d**
- Comme dans la Période 4, les énergies des orbitales 4d sont plus faible en énergie que l'orbitale 5s après que deux électrons soient dans l'orbitale 5s
- Un effet similaire est observé dans la Période 6:
- Cérium:  $[\text{Xe}]4f^15d^16s^2$
- Les électrons continuent ensuite de remplir les sept orbitales 4f, qui sont complète après l'addition de 14 électrons, au ytterbium,  $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$

# PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

Group											13	14	15	16	17	18			
	1	2											III	IV	V	VI	VII	VIII VIIA	
	IA	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA		
Period 1											1 H hydrogen 1.0079 1s <sup>1</sup>						2 He helium 4.00 1s <sup>2</sup>		
2	3 Li lithium 6.94 2s <sup>1</sup>	4 Be beryllium 9.01 2s <sup>2</sup>											5 B boron 10.81 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	6 C carbon 12.01 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	7 N nitrogen 14.01 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	8 O oxygen 16.00 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	9 F fluorine 19.00 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	10 Ne neon 20.18 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	
3	11 Na sodium 22.99 3s <sup>1</sup>	12 Mg magnesium 24.31 3s <sup>2</sup>	3 IIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII B	9 VIII B	10 VIII B	11 IB	12 IIB	13 Al aluminum 26.98 3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	14 Si silicon 28.09 3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	15 P phosphorus 30.97 3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	16 S sulfur 32.06 3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>	17 Cl chlorine 35.45 3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	18 Ar argon 39.95 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	
4	19 K potassium 39.10 4s <sup>1</sup>	20 Ca calcium 40.08 4s <sup>2</sup>	21 Sc scandium 44.96 3d <sup>1</sup> 4s <sup>2</sup>	22 Ti titanium 47.87 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>	23 V vanadium 50.94 3d <sup>3</sup> 4s <sup>2</sup>	24 Cr chromium 52.00 3d <sup>5</sup> 4s <sup>1</sup>	25 Mn manganese 54.94 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>	26 Fe iron 55.84 3d <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	27 Co cobalt 58.93 3d <sup>7</sup> 4s <sup>2</sup>	28 Ni nickel 58.69 3d <sup>8</sup> 4s <sup>2</sup>	29 Cu copper 63.55 3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	30 Zn zinc 65.41 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup>	31 Ga gallium 69.72 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	32 Ge germanium 72.64 4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	33 As arsenic 74.92 4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	34 Se selenium 78.96 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>	35 Br bromine 79.90 4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	36 Kr krypton 83.80 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>	
5	37 Rb rubidium 85.47 5s <sup>1</sup>	38 Sr strontium 87.62 5s <sup>2</sup>	39 Y yttrium 88.91 4d <sup>1</sup> 5s <sup>2</sup>	40 Zr zirconium 91.22 4d <sup>2</sup> 5s <sup>2</sup>	41 Nb niobium 92.91 4d <sup>4</sup> 5s <sup>1</sup>	42 Mo molybdenum 95.94 4d <sup>5</sup> 5s <sup>1</sup>	43 Tc technetium (98) 4d <sup>5</sup> 5s <sup>2</sup>	44 Ru ruthenium 101.07 4d <sup>7</sup> 5s <sup>1</sup>	45 Rh rhodium 102.90 4d <sup>8</sup> 5s <sup>1</sup>	46 Pd palladium 106.42 4d <sup>10</sup>	47 Ag silver 107.87 4d <sup>10</sup> 5s <sup>1</sup>	48 Cd cadmium 112.41 4d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup>	49 In indium 114.82 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	50 Sn tin 118.71 5s <sup>2</sup> 5p <sup>2</sup>	51 Sb antimony 121.76 5s <sup>2</sup> 5p <sup>3</sup>	52 Te tellurium 127.60 5s <sup>2</sup> 5p <sup>4</sup>	53 I iodine 126.90 5s <sup>2</sup> 5p <sup>5</sup>	54 Xe xenon 131.29 5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup>	
6	55 Cs cesium 132.91 6s <sup>1</sup>	56 Ba barium 137.33 6s <sup>2</sup>	57 La lanthanum 138.91 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	72 Hf hafnium 178.49 5d <sup>2</sup> 6s <sup>2</sup>	73 Ta tantalum 180.95 5d <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	74 W tungsten 183.84 5d <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	75 Re rhenium 186.21 5d <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	76 Os osmium 190.23 5d <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	77 Ir iridium 192.22 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	78 Pt platinum 195.08 5d <sup>9</sup> 6s <sup>1</sup>	79 Au gold 196.97 5d <sup>10</sup> 6s <sup>1</sup>	80 Hg mercury 200.59 5d <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	81 Tl thallium 204.38 6s <sup>2</sup> 6p <sup>1</sup>	82 Pb lead 207.2 6s <sup>2</sup> 6p <sup>2</sup>	83 Bi bismuth 208.98 6s <sup>2</sup> 6p <sup>3</sup>	84 Po polonium (209) 6s <sup>2</sup> 6p <sup>4</sup>	85 At astatine (210) 6s <sup>2</sup> 6p <sup>5</sup>	86 Rn radon (222) 6s <sup>2</sup> 6p <sup>6</sup>	
7	87 Fr francium (223) 7s <sup>1</sup>	88 Ra radium (226) 7s <sup>2</sup>	89 Ac actinium (227) 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	104 Rf rutherfordium (261) 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	105 Db dubnium (262) 6d <sup>3</sup> 7s <sup>2</sup>	106 Sg seaborgium (264) 6d <sup>4</sup> 7s <sup>2</sup>	107 Bh bohrium (264) 6d <sup>5</sup> 7s <sup>2</sup>	108 Hs hassium (267) 6d <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	109 Mt meitnerium (268) 6d <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	110 Ds darmstadtium (271) 6d <sup>8</sup> 7s <sup>2</sup>	111 Rg roentgenium (272) 6d <sup>9</sup> 7s <sup>1</sup>	112*	113	114	115	116	117	118	
			Lanthanoids (lanthanides)		6	58 Ce cerium 140.12 4f <sup>1</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	59 Pr praseodymium 140.91 4f <sup>3</sup> 6s <sup>2</sup>	60 Nd neodymium 144.24 4f <sup>4</sup> 6s <sup>2</sup>	61 Pm promethium (145) 4f <sup>5</sup> 6s <sup>2</sup>	62 Sm samarium 150.36 4f <sup>6</sup> 6s <sup>2</sup>	63 Eu europium 151.96 4f <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	64 Gd gadolinium 157.25 4f <sup>7</sup> 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>	65 Tb terbium 158.93 4f <sup>9</sup> 6s <sup>2</sup>	66 Dy dysprosium 162.50 4f <sup>10</sup> 6s <sup>2</sup>	67 Ho holmium 164.93 4f <sup>11</sup> 6s <sup>2</sup>	68 Er erbium 167.26 4f <sup>12</sup> 6s <sup>2</sup>	69 Tm thulium 168.93 4f <sup>13</sup> 6s <sup>2</sup>	70 Yb ytterbium 173.04 4f <sup>14</sup> 6s <sup>2</sup>	71 Lu lutetium 174.97 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>
			Actinoids (actinides)		7	90 Th thorium 232.04 6d <sup>2</sup> 7s <sup>2</sup>	91 Pa protactinium 231.04 5f <sup>2</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	92 U uranium 238.03 5f <sup>3</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	93 Np neptunium (237) 5f <sup>4</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	94 Pu plutonium (244) 5f <sup>6</sup> 7s <sup>2</sup>	95 Am americium (243) 5f <sup>7</sup> 7s <sup>2</sup>	96 Cm curium (247) 5f <sup>7</sup> 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>	97 Bk berkelium (247) 5f <sup>9</sup> 7s <sup>2</sup>	98 Cf californium (251) 5f <sup>10</sup> 7s <sup>2</sup>	99 Es einsteinium (252) 5f <sup>11</sup> 7s <sup>2</sup>	100 Fm fermium (257) 5f <sup>12</sup> 7s <sup>2</sup>	101 Md mendelevium (258) 5f <sup>13</sup> 7s <sup>2</sup>	102 No nobelium (259) 5f <sup>14</sup> 7s <sup>2</sup>	103 Lr lawrencium (262) 6d <sup>1</sup> 7s <sup>2</sup>

Molar masses (atomic weights) quoted to the number of significant figures given here can be regarded as typical of most naturally occurring samples.

\*The names of the elements 112 and higher have not yet been determined; both 112 and 114 have been confirmed.

## 1E.2 Le principe de construction

### Résumé

La configuration électronique d'un atome à l'état fondamental est prédite en utilisant le principe de construction en conjonction avec la Fig. 1E.1, le principe d'exclusion de Pauli, et de la règle de Hund.

## Les compétences que vous avez acquises vous permettent:

- ❑ De décrire les facteurs qui affectent l'énergie de l'électron dans un atome polyélectronique.
- ❑ D'écrire la configuration électronique de l'état fondamental d'un élément.

**Résumé:** Vous avez appris que les structures des atomes polyélectroniques sont expliquées par le remplissage systématique des orbitales par des électrons, selon un ordre déterminé par les effets de pénétration et de blindage conjointement avec le principe d'exclusion de Pauli. Le principe de construction se reflète dans, et dans une certaine mesure explique, la structure générale du tableau périodique.