

Atomistique

Prof. Khadija Haboubi

I- Structure des atomes.

Structure, numéro atomique, nombre de masse, isotope, masse atomique.

II- Les modèles classique de l'atome.

Modèle de Rutherford - Modèle de Bohr – Spectre atomique d'émission.

III- Le modèle quantique de l'atome.

Equation de Schrödinger (Résolution) : nombres quantiques. Configuration électronique d'un atome : Principe de Pauli, Règles de Klechkowski et de Hund.

IV- Tableau périodique des éléments chimiques.

Classification, périodes, groupes et familles, énergie d'ionisation, affinité électronique, électronégativité.

Chapitre I : Structure des atomes

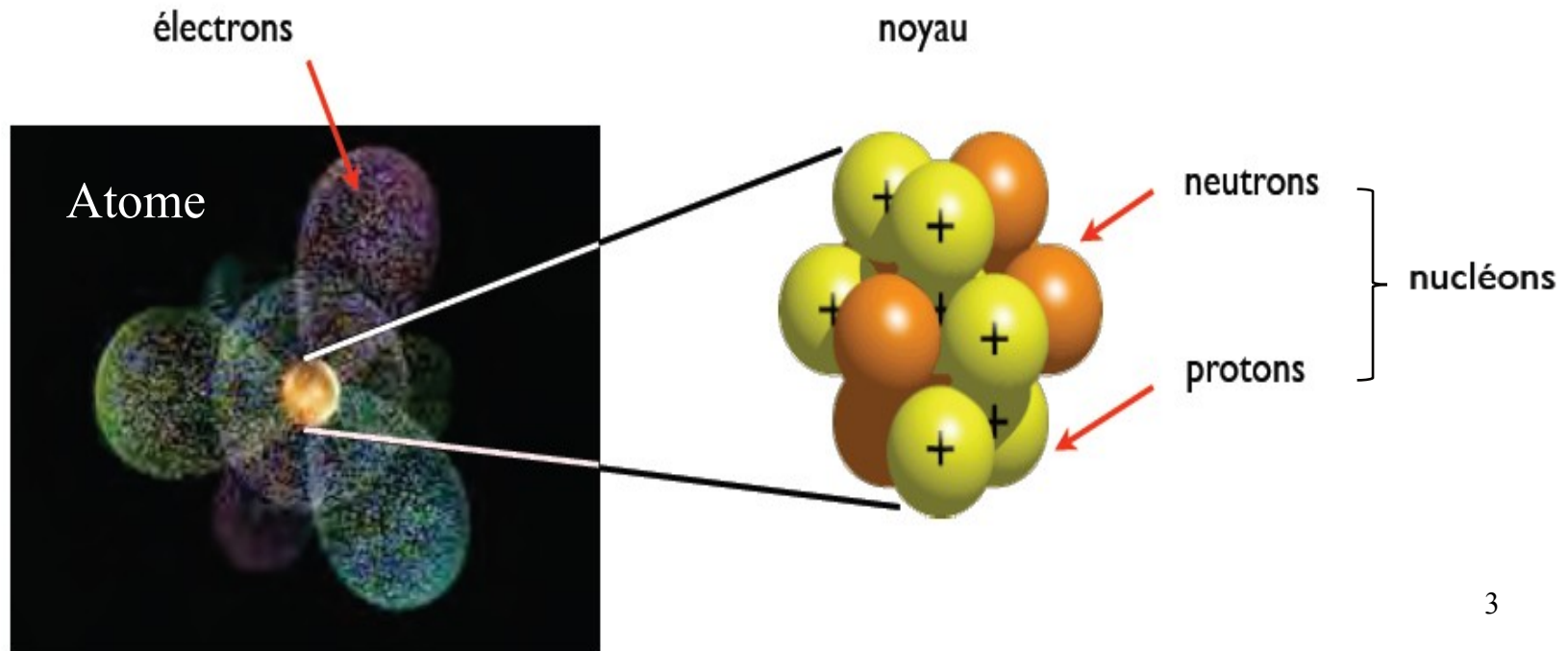
I. Structure des atomes

L'atome (du grec *atomos*, indivisible) est la plus petite unité de matière qui garde son identité en tant qu'élément chimique.

L'atome est constitué d'un noyau (protons et neutrons) et d'électrons.

Les microscopes optiques et électroniques montrent la présence de cristaux (de quelques millimètres au micromètre environ) et molécules (quelques Å à quelques milliers d'Å).

Certaines techniques de microscopie à forte résolution (microscopie électronique à transmission, microscopie à effet tunnel) permettent de « voir » les atomes.



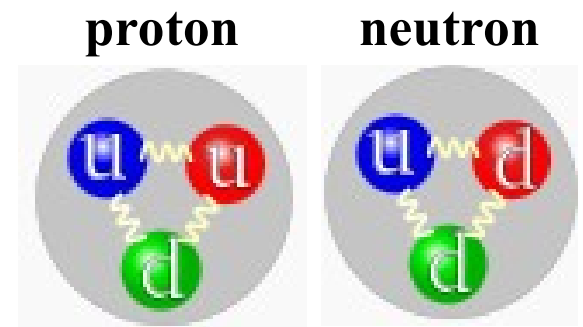
I-1. Caractéristique de l'atome, l'électron, le proton et le neutron

- Le rayon de l'atome est de l'ordre de quelques angström (Å) 10^{-10} m.
- Le rayon du noyau est de l'ordre de 10^{-15} à 10^{-14} m.
- La masse volumique du noyau est gigantesque par comparaison à celles des masses volumiques usuelles (environ 10^{12} g/cm³).
- **Les électrons (e⁻)** (du grec êlektron : ambre **عبر**) sont des particules de charge négative ($-e=1,60218 \cdot 10^{-19}$ C) et de masse $m_e=9,110 \cdot 10^{-31}$ Kg.
- **Les protons (p⁺)** (du grec prôtos : premier) sont des particules de charge positive ($+e=1,60218 \cdot 10^{-19}$ C) et de masse $m_p=1,6726 \cdot 10^{-27}$ Kg.
- **Les neutrons (n⁰)** sont des particules électriquement neutres et de masse

$m_n=1,6749 \cdot 10^{-27}$ Kg.
quarks u (up) quark d (down).

$$m_p \approx m_n = 1836 m_e$$

L'interaction forte est transmise par des gluons (représentés ici par un tracé sinusoïdal). La couleur des quarks fait référence aux trois types de charges de l'interaction forte : rouge, verte et bleue.



I-2. Représentation d'un atome

Un atome est représenté de la façon suivante

X est l'élément considéré

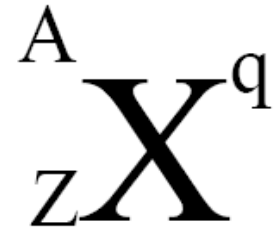
Z est le nombre de proton = Numéro atomique

A = Nombre de masse = $Z + N$ (nombre de neutron)

q = nombre de charge

Z détermine l'élément chimique

N détermine l'isotope



I-3. Notion d'ion

Un ion est une entité chargée, on distingue:

Anion = atome ou groupe d'atomes portant une ou plusieurs charge(s) **négative(s)**.

Cation = atome ou groupe d'atomes portant une ou plusieurs charge(s) **positive(s)**.

I-4. Notion d'élément

Un élément est caractérisé par son nom **X** et par son numéro atomique **Z**.

Dans un élément chimique, seul le nombre de protons (**Z**), est invariable : il représente la signature de l'élément et est directement lié à son nom et à son symbole chimique **X**.
Il y'a 118 éléments connues jusqu'ici.

I-5. La mole et le Nombre d'Avogadro

La mole est la quantité de matière qui contient autant d'atomes qu'il y a dans 12g de carbone 12.

1mole de $^{12}_6\text{C}$ pèse 12g et contient **N** atomes

Le nombre **N** est appelé *Nombre d'Avogadro* = $6,0221 \cdot 10^{23}$

Donc 1mole d'atome contient **N** atomes

1mole de molécules contient **N** molécules

I-6. La masse atomique et Unité de masse Atomique (u.m.a)

La masse atomique est égale à la somme des masses des constituants de l'atome: $m_{\text{atome}} = Zm_e + Zm_p + Nm_n$ (en kg) $\sim (Z + N)m_p \sim Am_p$.

L'utilisation du kg pour mesurer la masse des atomes n'est pas commode, depuis 1961 on utilise l'u.m.a plus facile à manipuler.

Par définition, l'unité de masse atomique qu'on note u.m.a est le 1/12 de la masse d'un atome de carbone 12 ($^{12}_6\text{C}$).

Une mole d'atomes de carbone 12 pèse 12g.

La masse d'un atome de $^{12}_6\text{C}$ vaut 12 u.m.a, donc : $12 \text{ g} = N \cdot 12 \text{ u.m.a}$

ou encore $1 \text{ u.m.a} = 1/N = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

I-7. Masse molaire : M (unité: u.m.a ou g/mol)

La masse d'une mole d'atomes d'un élément est appelée la masse molaire de l'atome.

I-8. Notion d'isotope

Ce sont des atomes de même numéro atomique Z et de nombre de masse A différent. Un élément peut avoir un ou plusieurs isotopes.

Exemple: Le $^{14}_6\text{C}$ possède 2 neutrons de plus que le $^{12}_6\text{C}$

Les isotopes ont des propriétés chimiques et physiques très voisines.
Les isotopes sont séparable par la spectroscopie de masse.

Autres définitions :

Isotones : des atomes ayant même N mais Z différent ($^{13}_6\text{C}$ et $^{14}_7\text{C}$).

Isoélectroniques : des atomes ayant même nombre d'électrons.

Isobare : des atomes ayant même A mais Z différent ($^{17}_7\text{N}$, $^{17}_8\text{O}$, $^{17}_9\text{F}$).

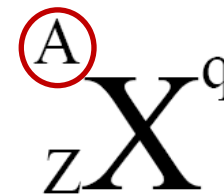
Isotopes de l'hydrogène et de l'hélium

X est l'élément considéré

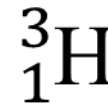
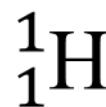
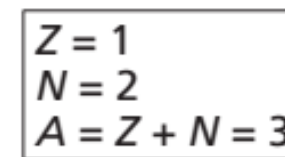
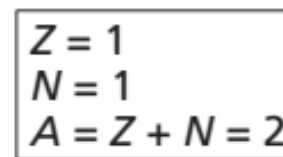
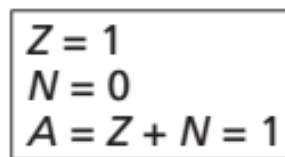
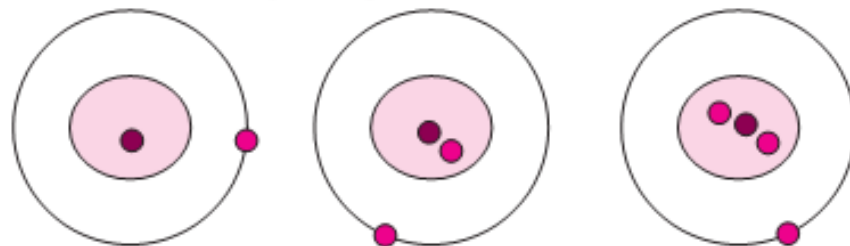
Z est le nombre de proton = Numéro atomique

A = Nombre de masse (Z + nombre de neutron **N**)

q = nombre de charge



représentation symbolique des trois isotopes de l'élément hydrogène

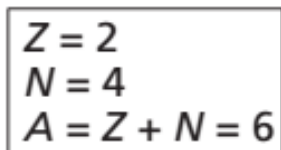
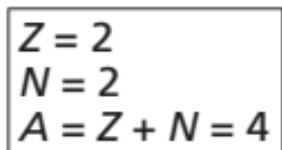
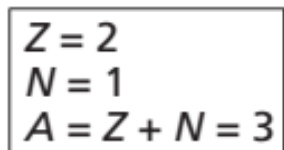
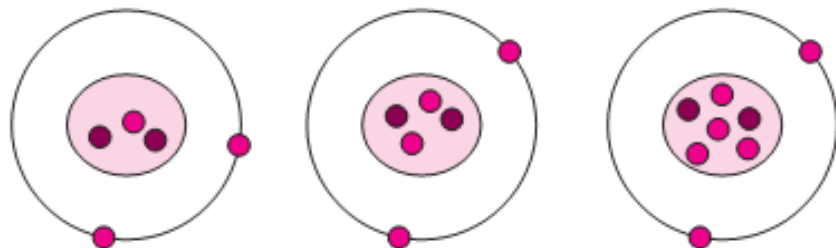


Hydrogène

Deutérium

Tritium

représentation symbolique des trois isotopes de l'élément hélium



Nucléides ou isotope



1-9. L'abondance relative des différents isotopes

Dans la pratique, pour la plupart des atomes, un seul des isotopes stables est présent en quantité appréciable dans la nature les autres isotopes étant présents à l'état de traces.

L'abondance naturelle est le pourcentage en nombre d'atomes de chacun des isotopes présents dans le mélange naturel. Cette abondance est équivalente à la fraction molaire de chaque isotope stable.

Masse Molaire de l'élément

La masse molaire moyenne d'un élément constitué d'un mélange d'isotopes est:

$$M = \sum_i a_i M_i$$

a_i : Abondance relative de l'isotope i de masse molaire M_i .

Exemple

Le chlore naturel est un mélange de deux isotopes ^{35}Cl et ^{37}Cl dont les abondances relatives sont respectivement 75% et 25%.

$$M = [75 \times 35 + 25 \times 37] / 100 = 35,5 \text{ g/mol.}$$

Énergie de cohésion (formation) du noyau

C'est l'énergie responsable de la stabilité d'un noyau notée (E).

La masse du noyau est toujours inférieure à celle des nucléons, pris séparément. Leur différence de masse est appelée le défaut de masse (Δm):

$$\Delta m = | m_{\text{noyau}} - (\sum m_p + \sum m_n) | \approx | m_{\text{atome}} - (\sum m_p + \sum m_n) |$$

Δm est transformé en énergie selon la relation:

$$E = \Delta mc^2 \text{ où } c \text{ est la vitesse de la lumière } (3 \cdot 10^8 \text{ m/s}).$$

La comparaison de la stabilité des noyaux se fait sur la base des rapports E/A.

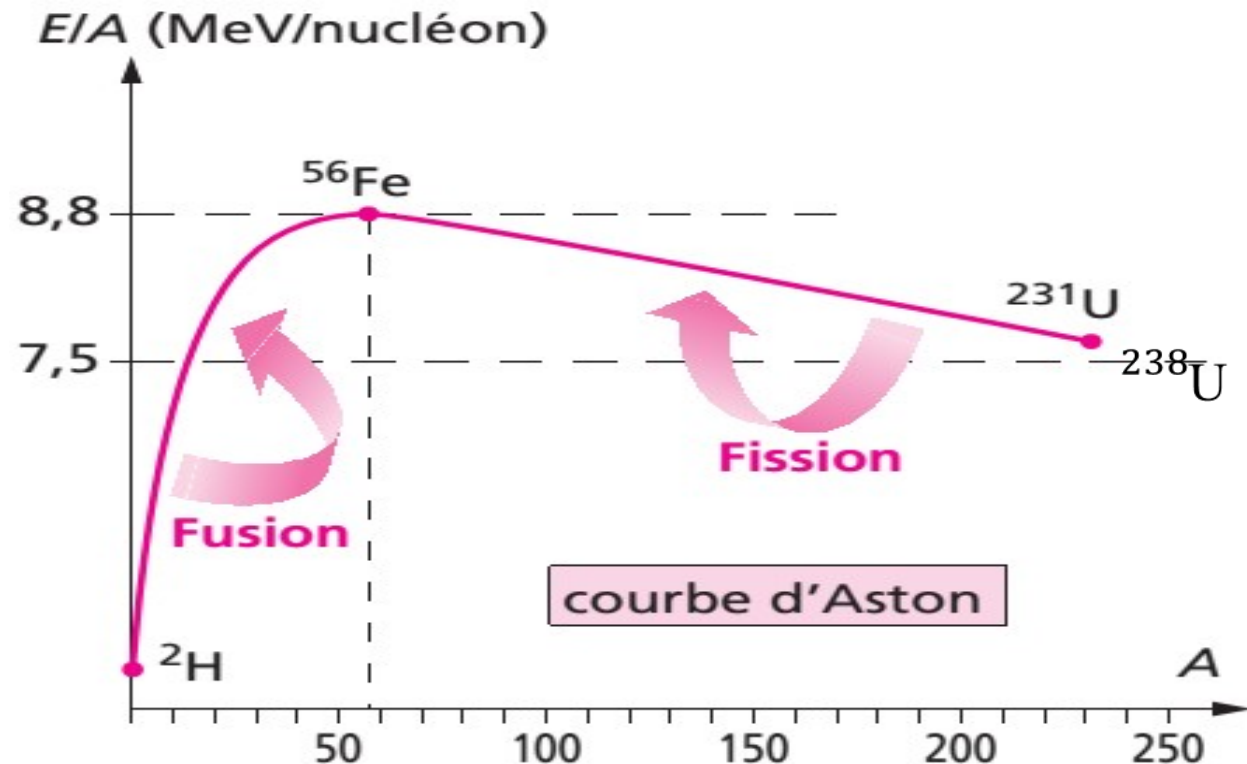
E/A : est l'énergie nucléaire de liaison par nucléon qu'il faut fournir au noyau pour le dissocier en ses nucléons, qui s'attirent du fait de l'interaction forte.

Exemples:

Pour ${}^3_1\text{H}$
 $E/A = 2,71 \text{ MeV/nucléon}$

Pour ${}^{238}_{92}\text{U}$
 $E/A = 7,57 \text{ MeV/nucléon}$

(Le noyau de ${}^{238}_{92}\text{U}$ est plus stable que celui de ${}^3_1\text{H}$)



Chapitre II

Les Modèles classiques de l'atome

Chapitre II : Les Modèles classiques de l'atome

I- Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement

I-1- Le rayonnement électromagnétique

I-2- L'émission et l'absorption du rayonnement par la matière

I-3- L'analyse spectrale

I-4- Spectre d'émission d'Hydrogène

II – Les modèles classiques de l'atome

II-1 Modèle de RUTHERFORD

- Description du modèle

- Insuffisance du Modèle de RUTHERFORD

II- 2- Modèle de l'atome de BOHR

- Description (cas de l'atome d'hydrogène)

- Insuffisance du Modèle de Bohr

III – Application de la théorie de Bohr aux hydrogénoïdes

IV – Énergie d'ionisation

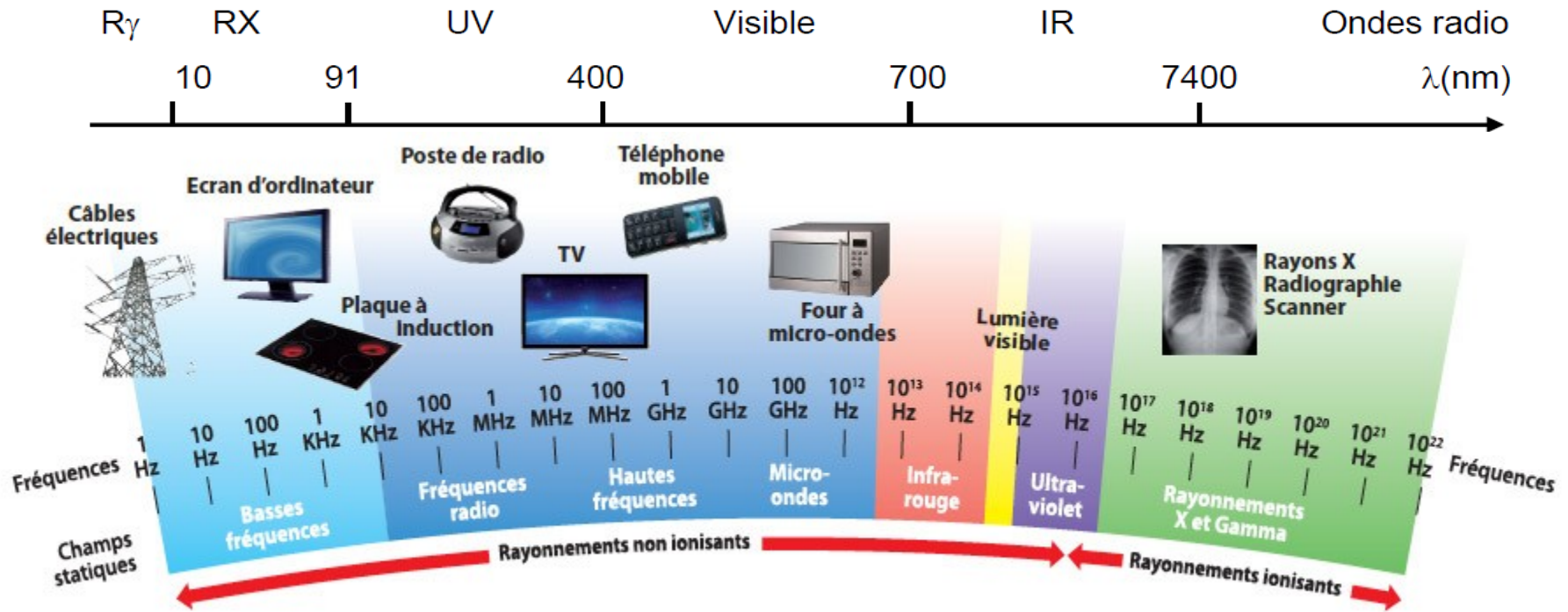
V – Insuffisance du Modèle de Bohr

Conclusion

I- Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement

I-1- le rayonnement électromagnétique

Le rayonnement électromagnétique est une forme d'énergie. C'est une onde caractérisée par une vitesse de propagation C , une fréquence ν (nombre de vibration/sec) et une longueur d'onde λ (distance parcourue pendant une vibration). Ces grandeurs sont liées entre elles par la relation suivante : $c = \lambda \cdot \nu$



Théorie quantique: Max Planck en 1900 puis Albert Einstein en 1905 attribuèrent à la lumière une nature discontinue sous forme de grains de lumière: photons, l'énergie associée à ces photons est donnée par la relation $E = h \nu$;

h : constante de Planck ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$) ν : fréquence du rayonnement
quanta (pluriel du terme latin *quantum*), quantités discontinues.

I-2- L'émission et l'absorption du rayonnement par la matière

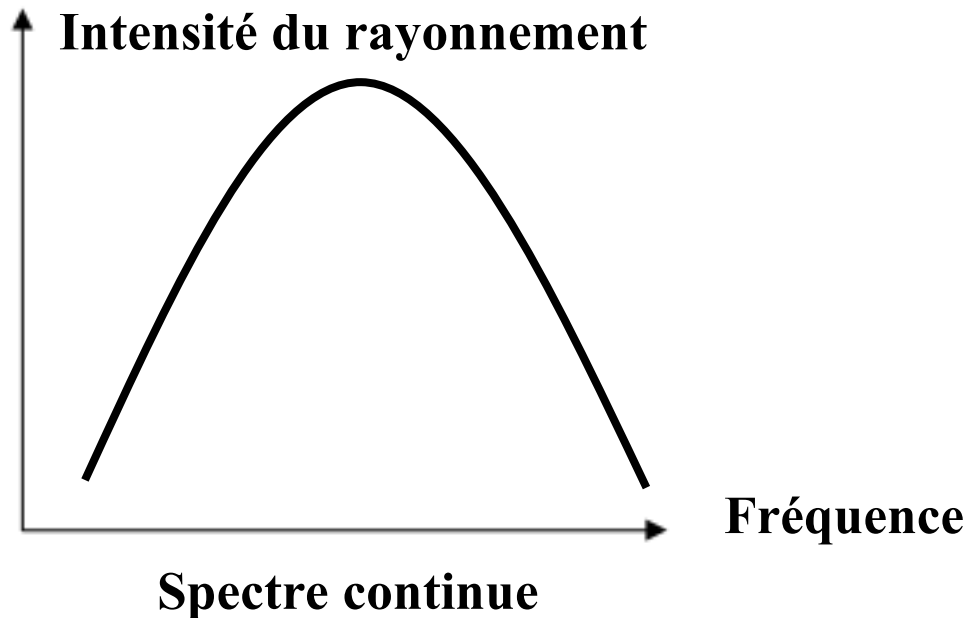
Il peut se produire des échanges entre la matière et le rayonnement dans deux sens :

L'émission : La matière émet du rayonnement (sources lumineuse).

L'absorption : L'énergie d'un rayonnement peut être absorbée par la matière (échauffement d'un objet au soleil).

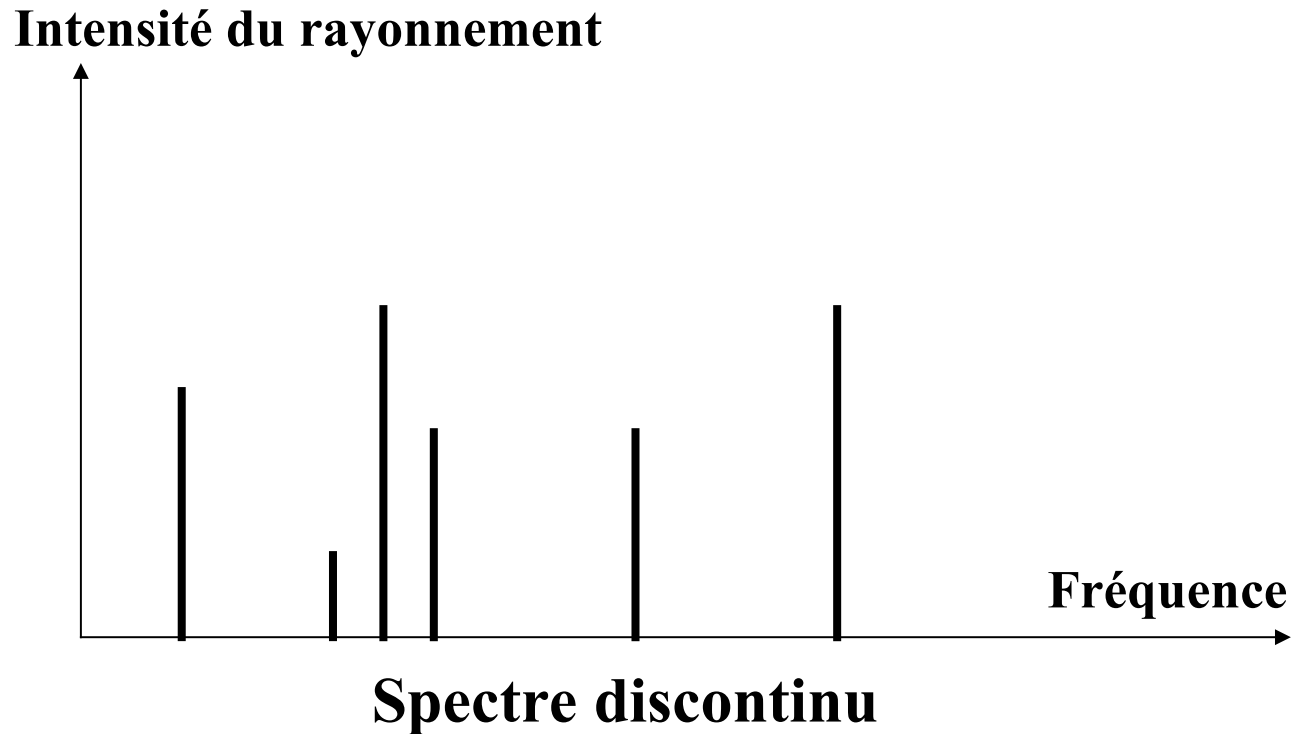
I- 3- L'analyse spectrale

a) **Spectre continu** : Un rayonnement peut comporter toutes les fréquences dans un intervalle donné.

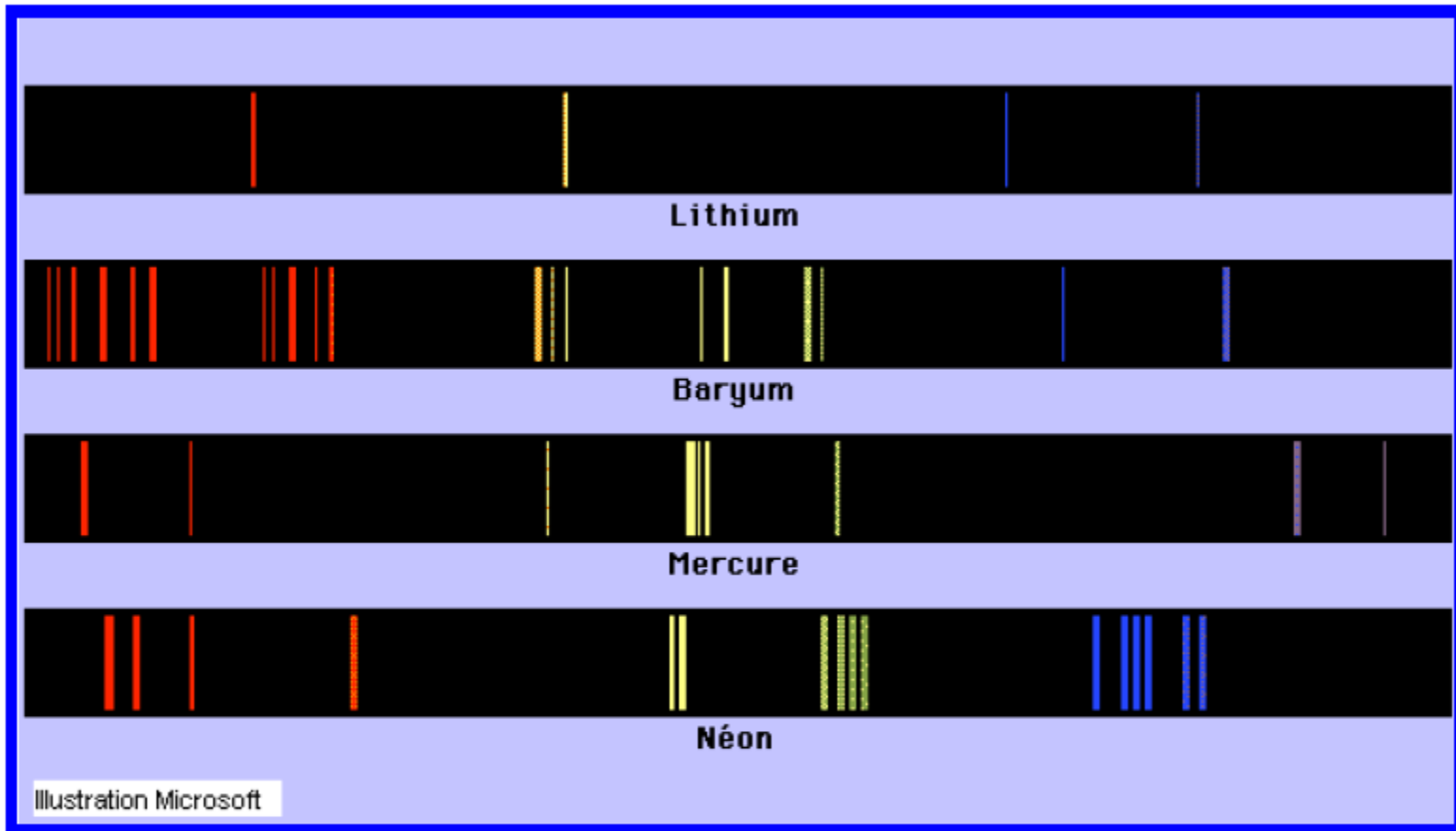


b) Spectre discontinu :

D'autres sources émettent du rayonnement comportant des fréquences bien précises. On dit que ce rayonnement possède un spectre discontinu (spectre des raies).



Spectre d'émission de quelques atomes (Lithium, Baryum, Mercure, Néon)

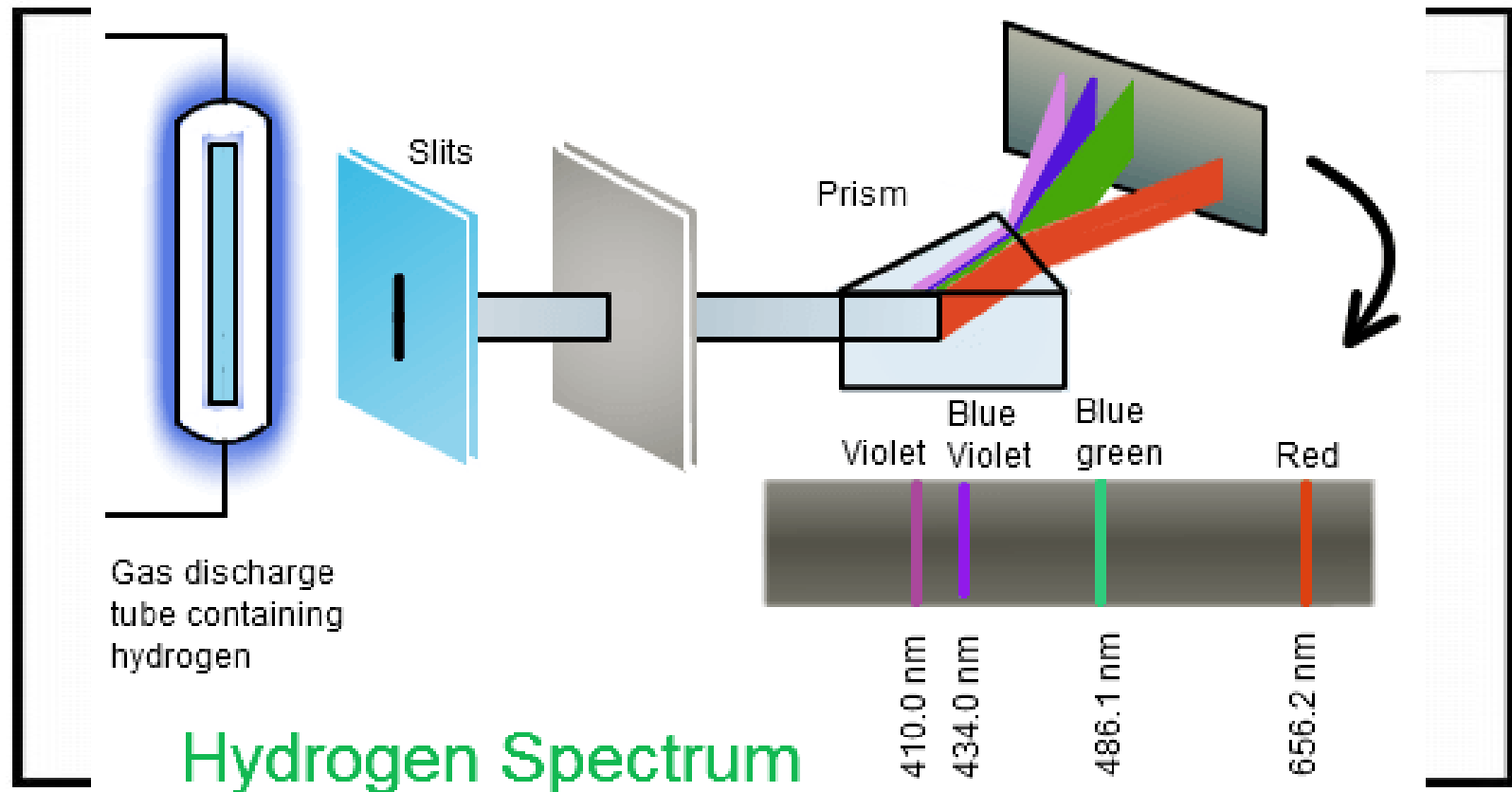


Spectres d'émission de quelques atomes
(illustration tirée de l'encyclopédie Microsoft Encarta)

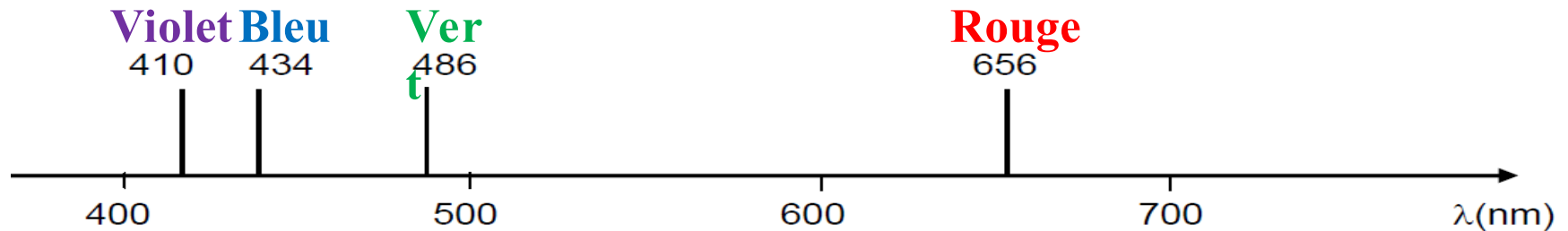
II-4- Spectre d'émission d'Hydrogène

Expérience

Quand un courant électrique passe dans un tube de verre contenant de l'hydrogène à basse pression, le tube émet de la lumière bleue. Lorsque cette lumière est passée à travers **un prisme** (comme le montre le graphique ci-dessous), quatre bandes étroites de lumière sont observés sur un fond noir.



- ✓ Le spectre de raie de l'atome d'hydrogène présente quatre principales raies dans le domaine visible.



- ✓ On constate que les longueurs d'ondes des raies émises par l'atome d'hydrogène ne sont pas quelconques et qu'on peut les calculer par une formule empirique relativement simple (Formule empirique de Balmer-Rydberg):

$$\sigma = 1/\lambda = R_H [1/2^2 - 1/n^2]$$

Avec n nombre entier ($n > 0$), σ est le nombre d'onde et R_H est la constante de Rydberg : $R_H = 1,096776 \cdot 10^{-7} \text{ m}^{-1}$

La formule empirique $\sigma = 1/\lambda = R_H[1/2^2 - 1/n^2]$ fut généralisée en:

$$\sigma = 1/\lambda = R_H(1/n^2 - 1/p^2)$$

n et p entiers, $n \geq 1$, $p \geq 2$

On trouve plusieurs séries de spectre selon l'état où se trouve l'électron

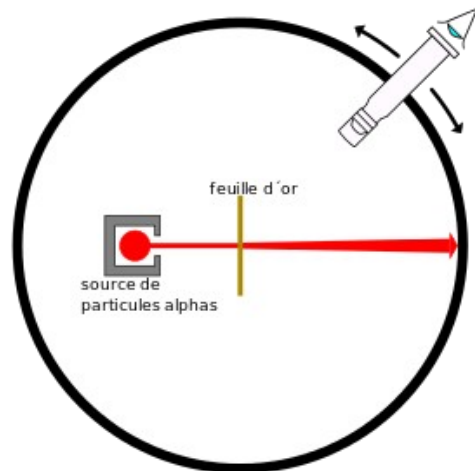
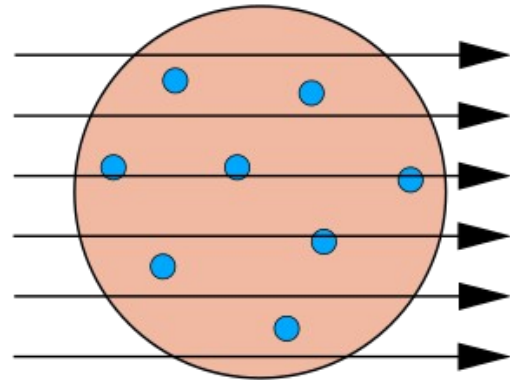
- Série de **Lyman** : $n=1$ et $p>1$
- Série de **Balmer** : $n=2$ et $p>2$
- Série de **Pachen** : $n=3$ et $p>3$
- Série de **Brachet** : $n=4$ et $p>4$
- Série de **Pfund** : $n=5$ et $p>5$

II-LES MODÈLES CLASSIQUES DE L'ATOME

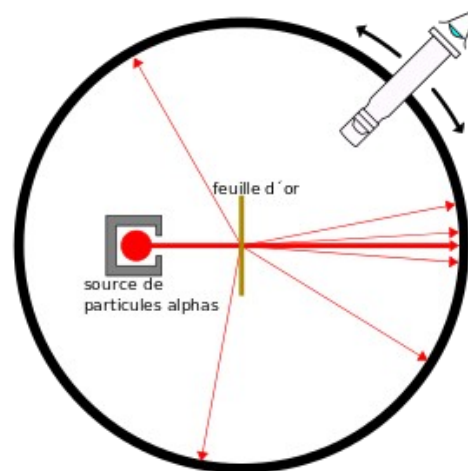
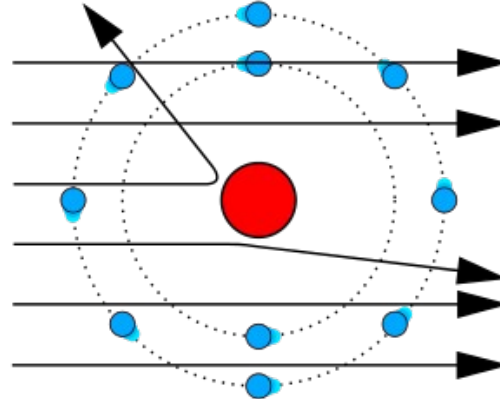
II-1. Modèle de Rutherford (Modèle Planétaire)

L'expérience (en 1909) consiste à envoyer sur une feuille très mince d'or un faisceau de particules α : ${}^4_2\text{He}^{2+}$.

MODÈLE THOMSON



MODÈLE RUTHERFORD



RESULTAT OBSERVÉ

Observations

- La plupart des particules traversent la feuille sans être déviées.
- 0,01 % des particules sont déviées comme si elles étaient repoussées par un corps de charge positive.

Conclusion

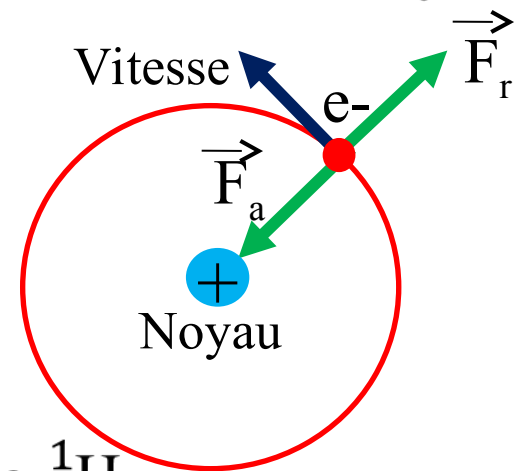
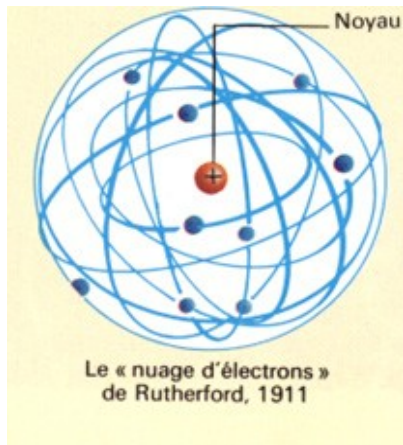
On met en évidence l'existence d'un **noyau positif** dans l'atome. La matière est constituée essentiellement de vide, puisque la plupart des particules ne sont pas déviées.

II-LES MODÈLES CLASSIQUES DE L'ATOME

II-1. Modèle de Rutherford (Modèle Planétaire)

Dans ce modèle de mécanique classique les électrons gravitent autour du noyau (comme les planètes autour du soleil: modèle planétaire).

La stabilité mécanique résulte de la compensation des forces d'attractions \vec{F}_a par les forces centrifuges \vec{F}_r dues à la rotation des électrons autour du noyau.



Etudions ce modèle dans le cas de l'atome d'hydrogène ${}^1_1\text{H}$

L'électron de l'atome d'hydrogène est soumis à:

❑ Une force d'attraction coulombienne du noyau:

$$F_a = (1/4\pi\epsilon_0) e^2 / r^2$$

❑ Une force de répulsion (force centrifuge) :

$$F_r = mv^2 / r$$

Calcul de l'énergie de l'électron $F_a = (1/4\pi\epsilon_0) e^2 / r^2$ $F_r = mv^2 / r$

$E_T = E_C + E_P$ avec E_c : Energie cinétique E_p : Energie potentielle

A l'équilibre $F_a = F_r$ d'où $(1/4\pi\epsilon_0) e^2 / r^2 = mv^2 / r$

$$E_C = 1/2 mv^2 = (1/8\pi\epsilon_0) e^2/r$$

$$E_P = q_1q_2/4\pi\epsilon_0r = - (1/4\pi\epsilon_0) e^2/r$$



$$E_T = [(1/8\pi\epsilon_0) e^2/r] + [- (1/4\pi\epsilon_0) e^2/r]$$

$$\boxed{E_T = - (1/8\pi\epsilon_0) e^2/r}$$

L'énergie de l'électron est donc fonction du rayon de sa trajectoire.

Cette trajectoire est circulaire avec une accélération normale à la trajectoire.

Insuffisance du modèle de Rutherford

On démontre en physique classique, qu'une particule accélérée rayonne de l'énergie.

L'électron accéléré va rayonner de l'énergie (donc en perdre) durant son mouvement, il finirait par s'écraser sur le noyau! Impossible car :

l'atome d'hydrogène existe et est stable.

L'énergie lumineuse émise varie de façon continue, donc le spectre obtenu sera un spectre continu, **or le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène est un spectre discontinu (spectre de raies).**

II-2. Modèle de Bohr

Pour pallier les insuffisances du modèle de Rutherford, Niels Bohr a proposé un modèle dans lequel l'électron ne peut se trouver que sur une orbite stationnaire qui a un niveau d'énergie donné sans émettre de l'énergie et admet que le moment cinétique de l'électron (mvr) ne peut prendre que des valeurs multiples et entières de $h / 2 \pi$.

Postulat de Bohr : $m v r = n (h / 2 \pi)$

h: la constante de Planck ($h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s)

n: un nombre entier non nul appelé nombre quantique principal

Calcul des rayons des orbitales circulaires et les énergies de l'électron de l'atome d'hydrogène sur ces orbites

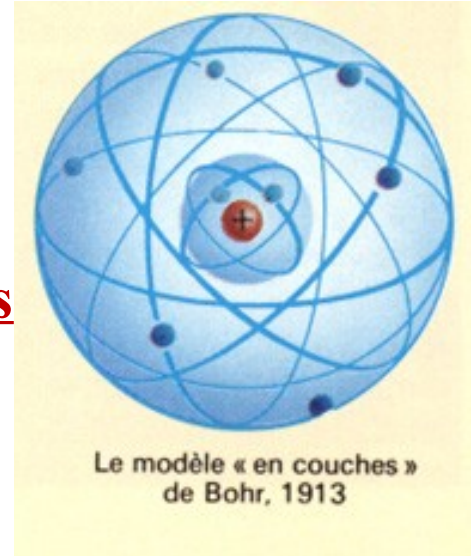
$$E_C = (1/2)mv^2 = (1/8\pi\epsilon_0)e^2/r \quad (1)$$

$$m^2v^2r^2 = n^2(h^2/4\pi^2) \quad (2)$$

$$\longrightarrow mr^2 = n^2(h^2\epsilon_0 r/\pi e^2) \text{ donc}$$

$$r = n^2(h^2\epsilon_0/\pi m e^2) = 0,529n^2 \quad (3)$$

Rayon de Bohr: $a_0 = h^2\epsilon_0/\pi m e^2 = 0.529 \text{ \AA}$



Le modèle « en couches » de Bohr, 1913

(2)/(1) $\rightarrow E_T = -(1/8\pi\epsilon_0)e^2/r$, en utilisant (3) on a:

Le rayon et **l'énergie** de l'électron dépendent du nombre entier **n**, ils sont donc quantifiés.

$$E_T = -(m e^4/8\epsilon_0^2 h^2)1/n^2$$

$$E_T = E_H(1/n^2)$$

$$E_T = -13,6(1/n^2)$$



Selon le modèle de Bohr, l'électron tourne autour du noyau, sur une couche électronique bien définie*.

(*) résultats de son expérimentation !



Sous l'effet de l'énergie thermique (chaleur) ou électrique ou encore par une onde électromagnétique (photon), l'électron est excité par cette énergie qu'il absorbe et saute sur une couche électronique plus énergétique.



L'électron est sur une couche électronique plus énergétique. Cette situation est **instable** et le besoin de stabilité l'amène à perdre cette énergie pour se rapprocher du noyau.



L'électron revient sur sa couche électronique, à son état fondamental. Lors de son retour, il libère, sous forme d'énergie lumineuse (photons), l'énergie thermique ou électrique qu'il avait absorbée.



L'électron est à nouveau sur sa couche électronique définie.

II-3. Spectre d'émission de l'atome l'hydrogène

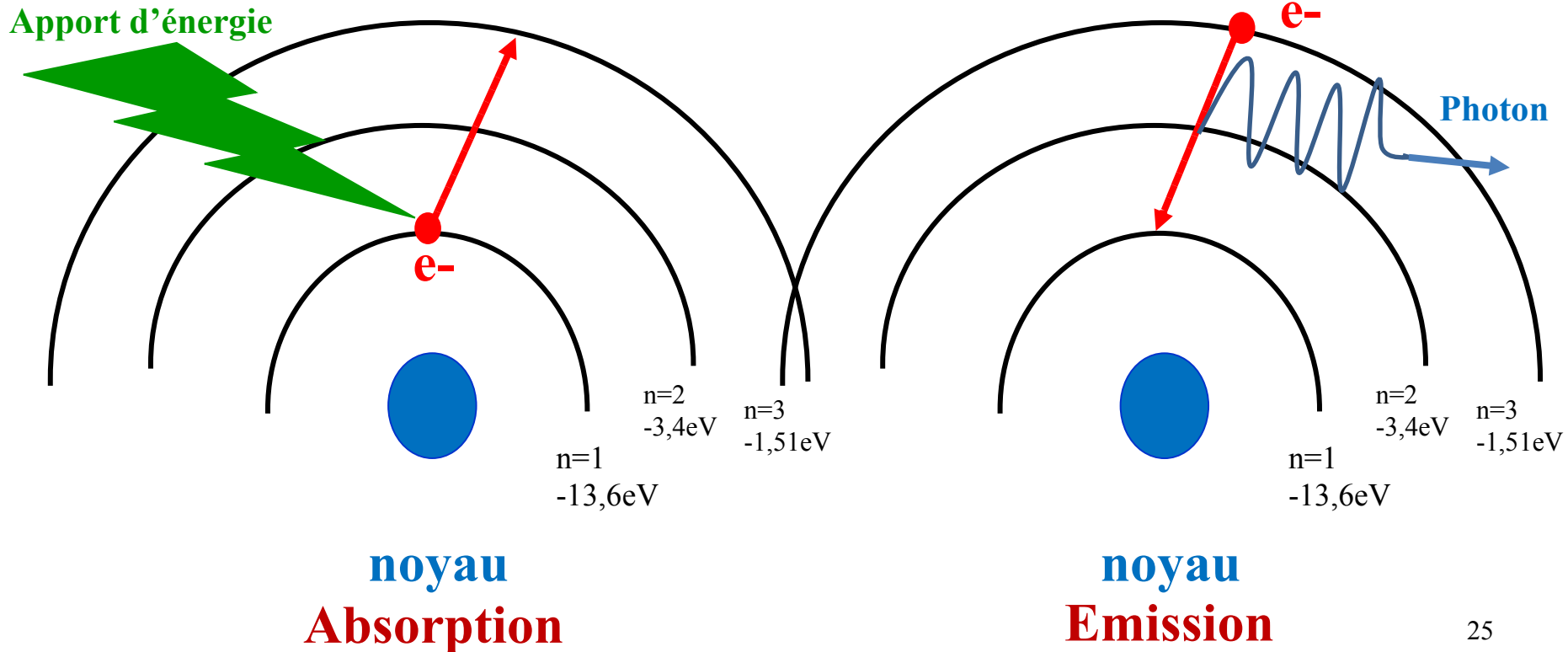
Imaginons que l'on excite un gaz d'hydrogène par un courant électrique.

Absorption de l'énergie

L'électron gravitant autour du noyau va alors acquérir de l'énergie et va passer sur un niveau **excité** (du niveau $n=1$ (**niveau fondamental**) au niveau $n=3$ par exemple).

Emission de photon

L'électron ne peut pas rester indéfiniment sur le niveau excité mais va revenir à son état initial en émettant un photon; c'est le phénomène d'émission.



$$r = 0,529n^2 \text{ (\AA)}$$

$$E_T = -13,6 (1/n^2) \text{ (eV)}$$

- Pour $n=1$ (état fondamental) : l'électron occupe l'orbite de rayon r_1 et d'énergie E_1

$r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA}$ c'est le rayon de Bohr ou rayon de la 1^{ère} orbite

$E_1 = -21,78 \cdot 10^{-19} \text{ j} = -13,6 \text{ eV}$ c'est l'énergie de l'e- de la 1^{ère} orbite ($1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ j}$)

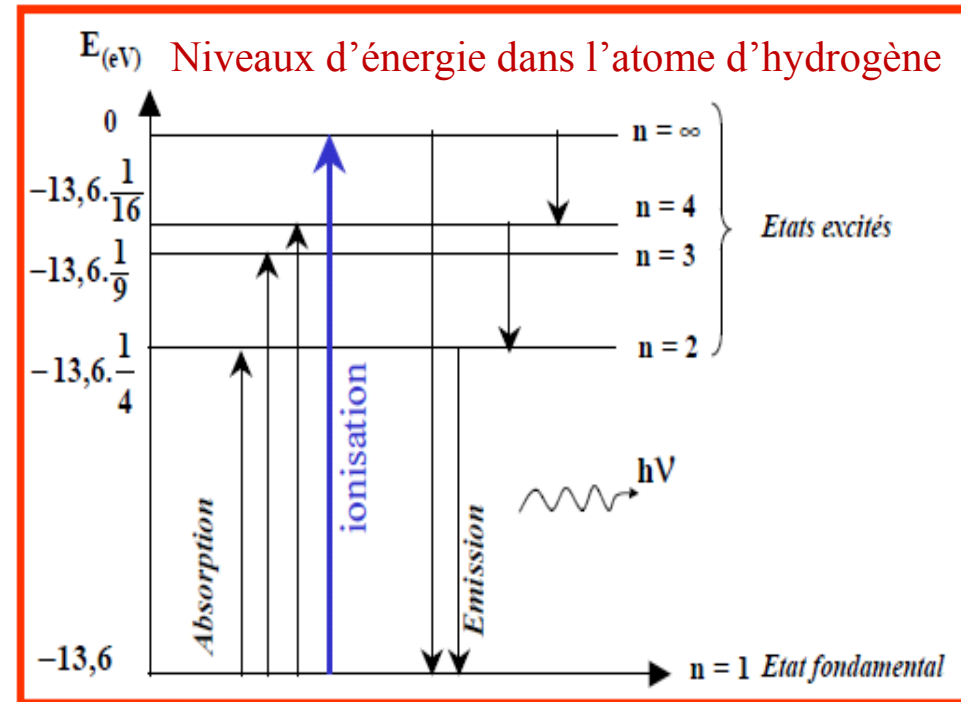
- Pour $n=2$ (Premier état excité)

$r_2 = 4r_1 = 2,116 \text{ \AA}$ et $E_2 = E_1/4 = -3,4 \text{ eV}$

- Pour $n=3$ (Deuxième état excité)

$r_3 = 9r_1 = 4,761 \text{ \AA}$ et $E_3 = E_1/9 = -1,51 \text{ eV}$

E_H est l'énergie à fournir à l'électron pour l'amener du niveau fondamental au dernier niveau excité qui correspond à une valeur infinie de n . Cette énergie est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène, c'est une grandeur accessible expérimentalement dont la valeur est $E_H = -13,6 \text{ eV}$.



Un électron ne peut absorber ou libérer de l'énergie c.à.d rayonner qu'en passant d'un niveau (orbite) à un autre.

La quantité d'énergie absorbée ou émise est égale à la différence d'énergie entre les deux niveaux (relation de Planck) :

$$\Delta E = E_{T(f)} - E_{T(i)} = h\nu$$

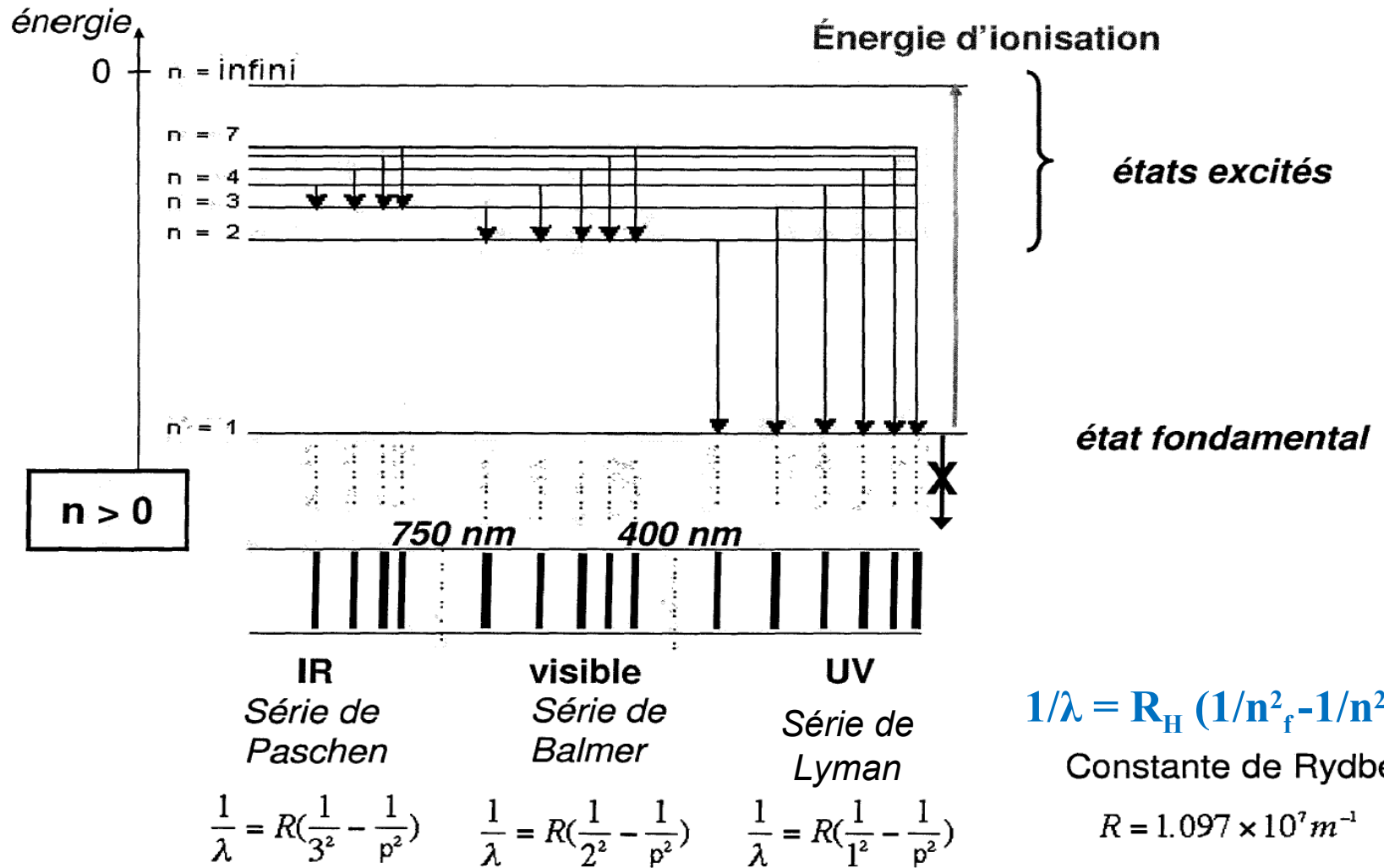
En tenant compte de l'expression de E_T , donnée auparavant, on obtient : $\Delta E = E_H (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$

Sachant que $\nu = C/\lambda$ (λ étant la longueur d'onde du rayonnement et C la célérité de la lumière) l'équation précédente donne :

$$\boxed{1/\lambda = \bar{\nu} = E_H/hC (1/n_f^2 - 1/n_i^2) = R_H (1/n_f^2 - 1/n_i^2)} \quad \text{Avec } n_i > n_f$$

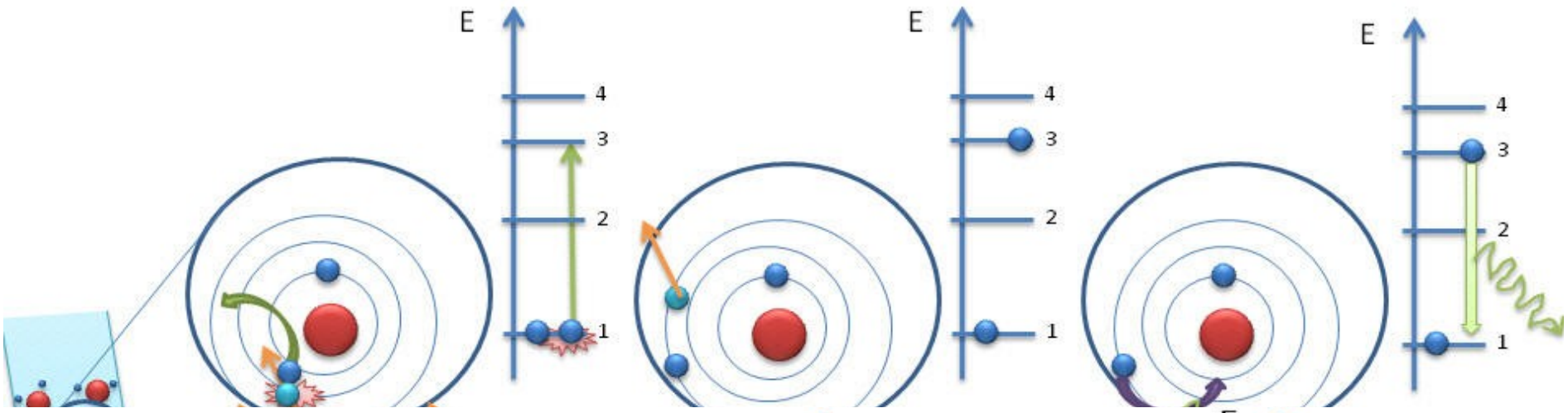
R_H constante de RYDBERG ($R_H = 10967758 \text{ m}^{-1}$) $\approx 10^7 \text{ m}^{-1}$

Spectre de raies de l'hydrogène. Transitions d'états

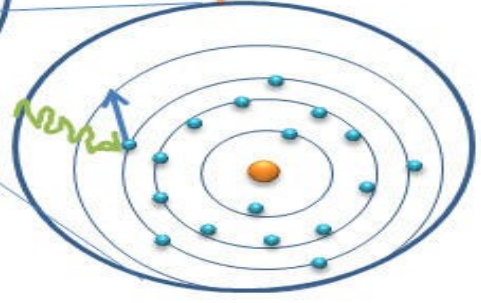
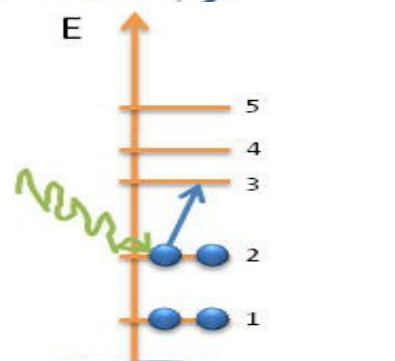
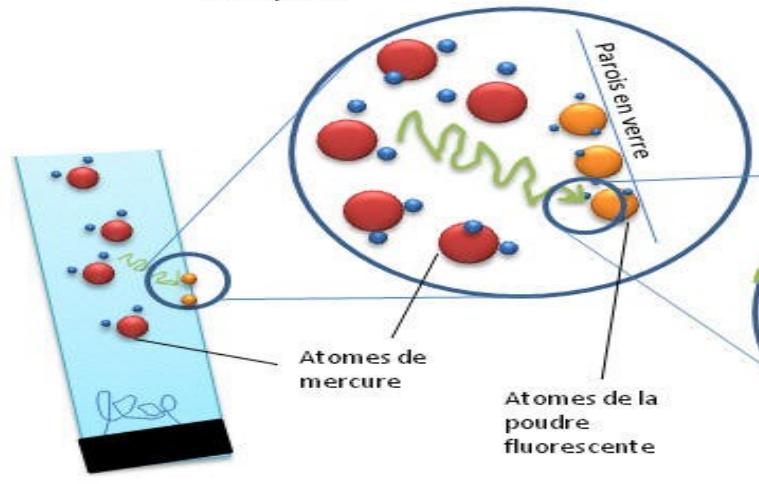


Série (n_i)	1	2	3	4	5
Nom	Lyman	Balmer	Paschen	Brackett	Pfund
Domaine	UV	Visible	IR	IR	IR

Application du modèle de Bohr : Les ampoules à décharges

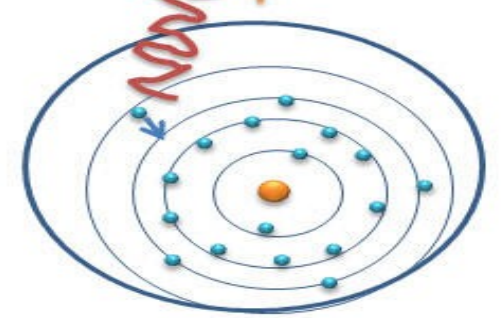
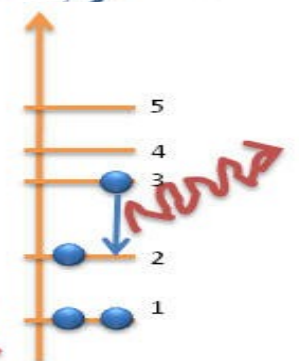


Le photon (l'énergie lumineuse sous forme UV) vient exciter les électrons de la poudre disposée sur la parois



t 1

L'électron utilise cette énergie pour passer sur une couche de plus haute énergie



t 2

L'électron est sur une couche de grande énergie instable, il retourne vers sa couche d'énergie stable en émettant un photon de lumière visible !

Application de la théorie de Bohr aux hydrogénéoïdes

Un hydrogénéoïde est un élément qui a perdu tous ses électrons sauf un.

Exemple : ${}_2\text{He}^+$, ${}_3\text{Li}^{2+}$, ${}_Z\text{X}^{(Z-1)+}$

L'étude de ce type d'atome revient à remplacer la charge du noyau (+e) de l'hydrogène par (+Ze) de l'hydrogénéoïde.

Les résultats obtenus sont les suivants :

L'énergie de l'e-

$$E_T = - (1/8\pi\epsilon_0) Ze^2/R$$

Le rayon $r = 0,529 n^2/Z$ (Å)

L'énergie de l'e- $E_n = -13,6 (Z^2/n^2)$ (eV)

${}_1\text{H}$

$$E_T = - (1/8\pi\epsilon_0) e^2/r$$

$$r = 0,529n^2$$

$$E_n = -13,6(1/n^2)$$

Insuffisance du Modèle de Bohr

La théorie de Bohr a confirmé les idées révolutionnaires de Planck sur la quantification de l'énergie et elle a connu un succès dans l'interprétation du spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

Or ce modèle est incapable d'expliquer l'origine des raies des atomes plus lourds possédant plusieurs électrons (**atomes poly électroniques**).

D'autre part, **Zeeman** a soumis l'atome d'hydrogène à un champ magnétique intense. Il a analysé le spectre des raies émises et il a observé qu'une raie de Balmer, par exemple, était décomposée en trois raies. Or, la théorie de **Bohr** reste incapable d'expliquer ce dédoublement de raies.

C'est en **1924**, à la suite d'une nouvelle conception de l'électron due à **Louis De Broglie**, qu'a pris naissance une autre mécanique : **la mécanique ondulatoire**, qui a conduit à la conception de l'atome.

"A part une petite difficulté dans le rayonnement, la Physique est terminée." Lord Kelvin

En fait il y a des sous-couches et les trajectoires des électrons ne sont pas circulaires. Ainsi est née la mécanique quantique.

Chapitre III

Le modèle quantique de l'atome

III- LE MODÈLE QUANTIQUE DE L'ATOME

III-1. Dualité onde - corpuscule : Postulat de Louis De Broglie

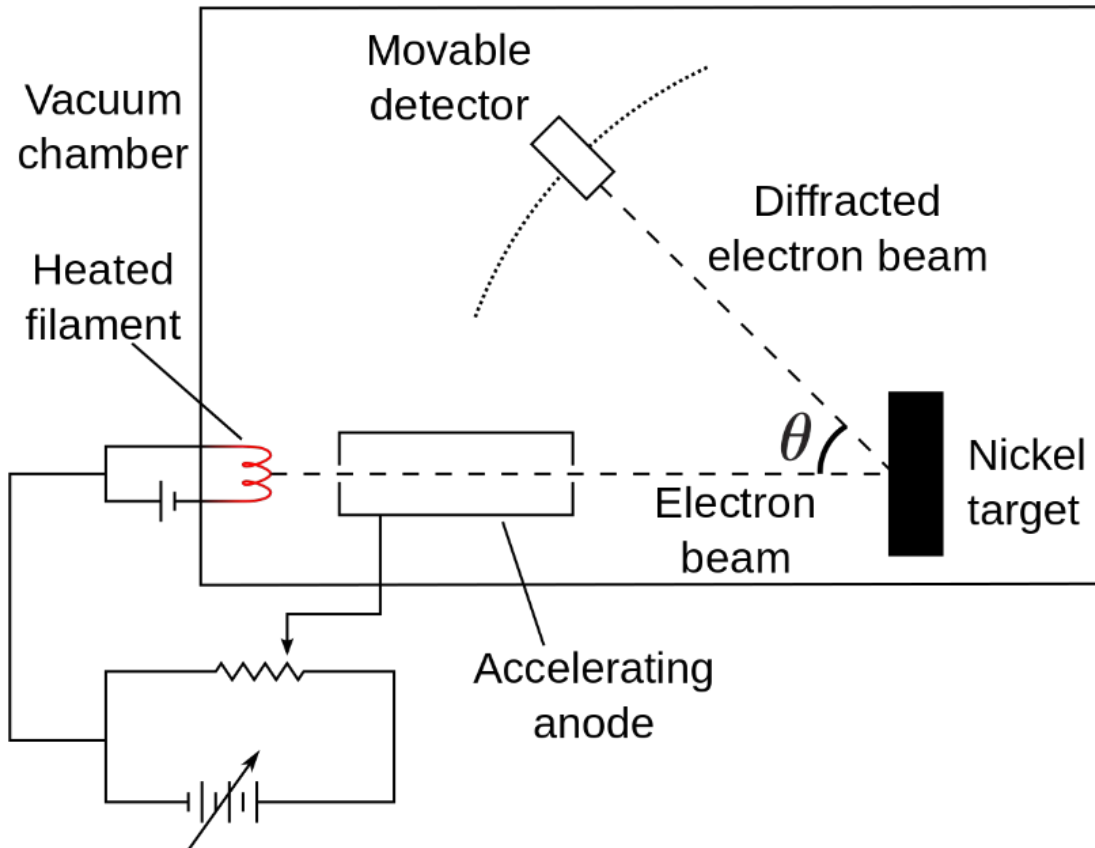
A toute particule (corpuscule) de masse m et de vitesse v est associée une onde de longueur d'onde λ . Ainsi l'électron est doté d'un caractère combiné *d'onde et de particule*.

La relation de De Broglie s'écrit : $\lambda = h/mv$ avec

λ : longueur d'onde

h : constante de Planck

mv : quantité de mouvement



En 1927, **Davisson et Germer** ont bombardé une cible de nickel cristallin par des électrons lents de 54 volts, soit une vitesse de 4 000 km/s. La dépendance angulaire de l'intensité électronique réfléchie a été mesurée, et sa figure de diffraction a été identifiée comme identique à celle prédite par Bragg ($2d\sin\theta=n\lambda$) pour les rayons X. Cette expérience, a confirmé l'hypothèse de De Broglie sur la nature ondulatoire de la matière.

III- LE MODÈLE QUANTIQUE DE L'ATOME

III-2. Principe d'incertitude d'Heisenberg

Il est impossible de définir avec précision à la fois la position et la vitesse d'une particule. Cela se traduit par la relation :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h/2\pi$$

Δx : incertitude sur la position

$\Delta p_x = m\Delta v_x$: incertitude sur la quantité de mouvement

L'application de ce principe à l'électron se trouvant dans l'espace atomique permet de conclure que ce dernier ne se déplace pas selon une trajectoire circulaire, mais il décrit plutôt un **nuage électronique**. La localisation de l'électron doit donc être exprimée en termes de **probabilité de présence** dans un volume donné.

III-3. Notion de la probabilité de présence

En mécanique classique (conception de Bohr), l'étude du mouvement d'un électron consiste à rechercher sa trajectoire (position) avec précision, par contre en mécanique quantique on parle de la **probabilité de trouver l'électron en un certain point de l'espace (il n'y a plus de trajectoire)**.

Cette délocalisation dans l'espace est donnée par une fonction d'état des coordonnées sphériques de l'électron appelée **fonction d'onde Ψ** .

La probabilité de présence de l'électron est : **$dP = |\Psi(x,y,z,t)|^2 dV$**

Avec **$dV = 4\pi r^2 dr$**

La fonction ψ n'a pas de sens physique, cependant le produit $\psi \psi^* = |\psi|^2$ représente la densité de probabilité de présence de l'électron.

La densité de probabilité de présence de l'électron est : **$|\psi|^2 = (dP/dV)$**

La fonction d'onde Ψ doit être **normée** : **$P = \int_{\text{espace}} |\Psi|^2 dV = 1$** c'est-à-dire l'électron se trouve forcément dans l'espace infini.

Donc pour un rayon infini, la probabilité de trouver l'électron dans tout l'espace égale à 1.

III-4. Equation de SCHRÖDINGER pour l'atome d'hydrogène

Le mouvement unidimensionnel stationnaire de l'électron est décrit par une équation d'onde (différentielle) de la forme: $\frac{d^2}{dx^2}Y + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} Y = 0$ (cette équation correspond à la dérivée seconde de la fonction d'onde $Y = a \cdot \sin(2\pi x/\lambda)$)

On appelle orbitales atomiques, les fonctions d'ondes des électrons atomiques.

En 1926, Schrödinger a montré que la fonction d'onde et l'énergie E sont solution d'une équation aux dérivées partielles du second ordre.

L'équation de Schrödinger s'écrit : **$H\Psi = E\Psi$**

$$[(-\hbar^2/8\pi^2m)\Delta + V] \Psi = E\Psi$$

m : masse de l'e-

V : Opérateur énergie potentiel

E : Energie totale du système, appelée valeur propre

Ψ : fonction d'onde appelée fonction propre

H : Opérateur Hamiltonien

$\Delta = \nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$; est le Laplacien.

La résolution de cette équation conduit aux différentes valeurs de E et Ψ

En mécanique quantique on démontre aussi la quantification de l'énergie:

C'est la même expression que celle trouvée par Bohr $E_n = -me^4/8\varepsilon_0^2h^2n^2$

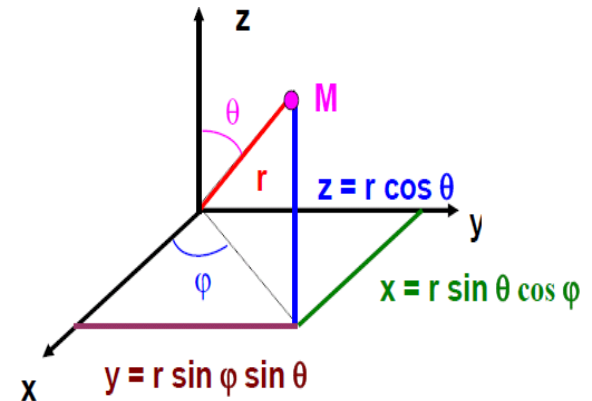
Pour la fonction d'onde Ψ (orbitale atomique), elle fait intervenir quatre nombres appelés "**nombres quantiques**" qui caractérisent l'état d'un électron. Ces quatre nombres sont : n , l , m_l (ou m) et m_s (ou s).

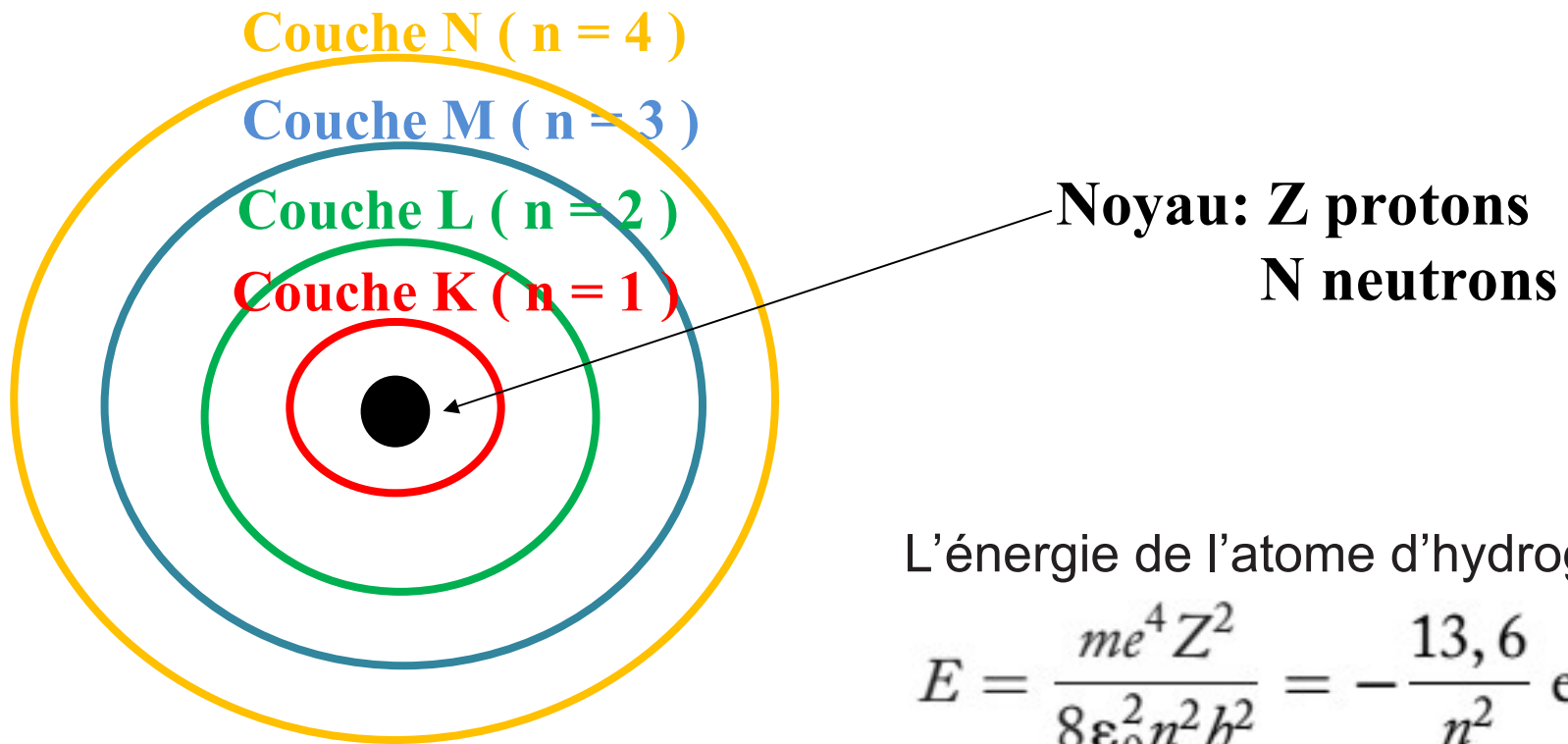
Pour des raisons de symétrie de l'espace atomique, les coordonnées cartésiennes (x,y,z) sont traduites en coordonnées sphériques (r,θ,ϕ) . Dans ce cas $\psi(x,y,z)$ devient $\psi(r,\theta,\phi)$. $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)$ est appelée orbitale atomique (OA).

III-5. Les nombres quantiques

a) Nombre quantique principale n

Ce nombre ($n = 1, 2, 3, \dots, \infty$) permet de déterminer la valeur de l'énergie totale de l'électron et définit la couche quantique (niveau d'énergie de l'électron). On appelle couche l'ensemble des orbitales qui possèdent la même valeur de n .





L'énergie de l'atome d'hydrogène

$$E = \frac{me^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

Chaque couche contient $2n^2$ électrons

La couche **K (n=1)** peut contenir 2 électrons.

La couche **L (n=2)** peut contenir 8 électrons.

La couche **M (n=3)** peut contenir 18 électrons.

Chaque électron se situant sur une couche a une énergie bien spécifique.

Tableau périodique: notion de couche

The diagram illustrates the periodic table with electron shells (K through Q) represented by colored blocks. The shells are filled in a step-wise manner across the periodic table. The shells are:

- K (green):** 2 electrons (1s²)
- L (magenta):** 8 electrons (2s² 2p⁶)
- M (blue):** 18 electrons (3s² 3p⁶ 3d¹⁰)
- N (red):** 18 electrons (4s² 4p⁶ 4d¹⁰)
- O (light green):** 18 electrons (5s² 5p⁶ 5d¹⁰)
- P (yellow):** 18 electrons (6s² 6p⁶ 6d¹⁰)
- Q (black):** 18 electrons (7s² 7p⁶ 7d¹⁰)

The diagram shows the filling of these shells across the periodic table, with 'Ge' and 'Ar' labeled in their respective positions. A separate block below shows a full P and Q shell.

b) Nombre quantique secondaire (ou azimutal) : l

Ce deuxième nombre quantique caractérise la sous-couche occupée par l'électron et détermine la géométrie (forme) des orbitales atomiques.

La valeur de l détermine le moment angulaire de l'électron. $L = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)}$

Les valeurs les plus élevées de l correspondent aux plus grands moments angulaires.

La valeur de l est fonction de celle du nombre quantique principal n :

$$0 \leq l \leq n - 1 \quad (\text{soit } n \text{ valeurs différentes})$$

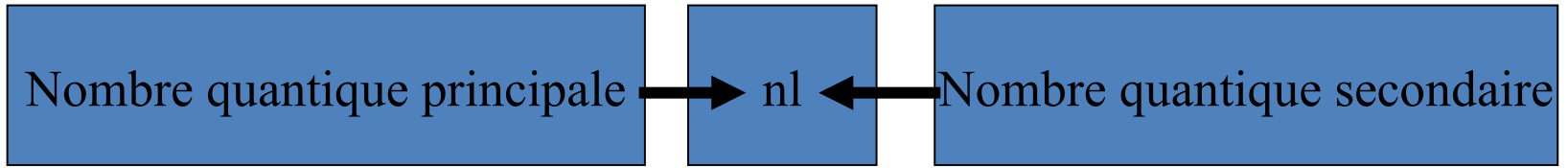
La sous-couche électronique est généralement désignée par une lettre minuscule au lieu de la valeur numérique de l .

l définit une catégorie de sous-couche d'électrons, désignée par la première lettre du nom des séries de raies spectrales dites « sharp, principal, diffuse, fundamental » (au-delà on utilise les lettres qui suivent f dans l'alphabet).

Valeur de l	0	1	2	3	4	5
--------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Symbole de la sous – couche	s	p	d	f	g	h
------------------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Chaque sous-couche individuelle est donc désignée par un symbole formé d'un chiffre qui est la valeur de n , et de la lettre minuscule associée à la valeur de l .




Couche	n	l	0	1	2	3
			s	p	d	f
K	1		1s			
L	2		2s	2p		
M	3		3s	3p	3d	
N	4		4s	4p	4d	4f

c) Nombre quantique magnétique : m_l ou m

Ce troisième nombre quantique, définit le nombre d'orientation prises par le moment cinétique de l'électron en présence d'un champ magnétique extérieur. Il définit la case quantique occupée par l'électron. On peut se représenter un électron possédant un moment angulaire comme un courant électrique accompagné d'un champ magnétique et circulant dans une boucle. La valeur de m_l détermine ce magnétisme. La théorie et l'expérience montrent que m_l peut avoir toutes les valeurs entières entre -1 et +1, incluant zéro.

$-1 \leq m \leq +1$ soit $(2l + 1)$ orbitales atomiques différentes

Pour symboliser graphiquement ce nombre quantique, on utilise un carré  qui peut être associée à 0, 1 ou 2 électrons.

On représentera autant de carrés qu'il y a de valeurs possibles de m .

d) Nombre quantique de spin : m_s ou s

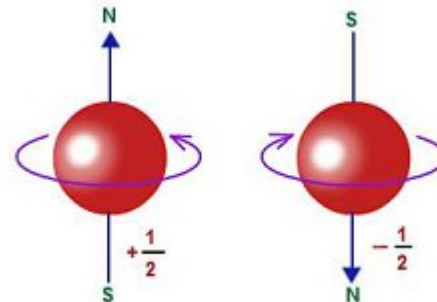
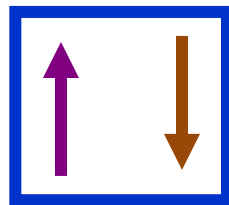
Ce quatrième nombre quantique caractérise la rotation de l'électron sur lui-même et autour du noyau et peut prendre seulement deux valeurs différentes.

En plus de l'effet magnétique produit par son mouvement angulaire, l'électron possède une propriété magnétique intrinsèque. Une particule chargée tournant autour de son axe se comporte comme un petit aimant; voilà pourquoi nous disons que l'électron a un spin.

Pour symboliser graphiquement ce nombre quantique de spin, on utilise :

- une flèche vers le haut (\uparrow) pour $s = +1/2$
- ou vers le bas (\downarrow) pour $s = -1/2$.

L'habitude veut que l'électron de spin $+1/2$ (\uparrow) soit placé à gauche et l'électron de spin $-1/2$ (\downarrow) à droite.



III-6. Représentation symbolique des états

Les quatre nombres quantiques constituent **"les papiers d'identité"** des électrons.

Un jeu de **4** valeurs (**n**; **l**; **m**; **s**) décrit totalement la position d'un électron dans un atome:

Couche (n) / sous-couche (l) / case quantique (m) / spin (s).

Afin de simplifier l'écriture, on utilise la notation suivante:

« l'état de l'électron est symbolisé à l'aide d'un chiffre suivie d'une lettre; le chiffre indique la valeur de **n** et la lettre indique la valeur de **l** ».

Les diverses couches successives :

1)

Couche K ($n = 1$) :

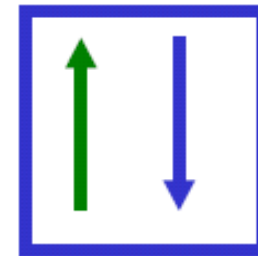
Cette première couche se décompose en 1 seule sous-couche **1s** puisque l ne peut prendre que la valeur 0.

$$n = 1 \quad 0 \leq l \leq n - 1 \quad \longrightarrow \quad l = 0 \quad \text{Sous-couche S}$$

$$l = 0 \quad -l \leq m \leq +l \quad \longrightarrow \quad m = 0 \quad \text{1 case quantique}$$

Cette sous couche 1s est composée d'une seule case puisque m ne peut prendre que la valeur 0.

Cette première couche pourra contenir au maximum deux électrons a spins anti-parallèles



1 s

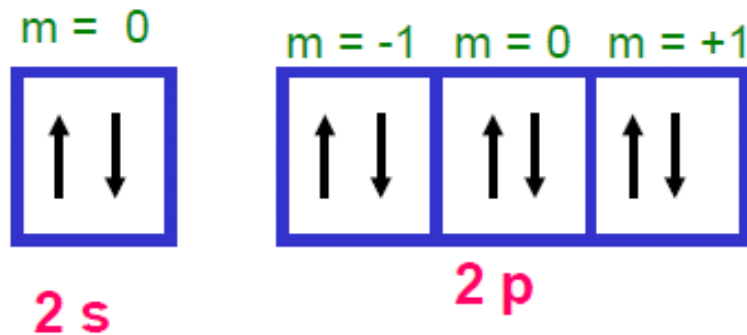
2)

Couche L (n = 2) :

$$n = 2 \quad 0 \leq l \leq n - 1 \quad \longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0 \quad \text{Sous-couche s} \\ l = 1 \quad \text{Sous-couche p} \end{array} \right.$$

$$l = 0 \quad -l \leq m \leq +l \quad \longrightarrow \quad m = 0 \quad \begin{array}{l} 1 \text{ case quantique} \\ 2 e^- \text{ maxi} \end{array}$$

$$l = 1 \quad -l \leq m \leq +l \quad \longrightarrow \quad m = -1 ; 0 ; +1 \quad \begin{array}{l} 3 \text{ cases quantiques} \\ 6 e^- \text{ maxi} \end{array}$$



8 e⁻ maxi au total

3)

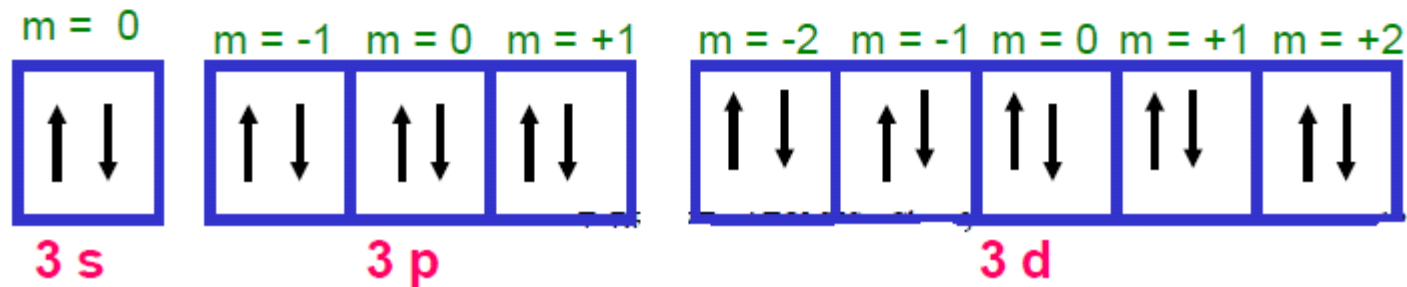
Couche M (n = 3) : 18 e⁻ maxi au total

$n = 3$ $0 \leq l \leq n - 1$ \longrightarrow $\left\{ \begin{array}{l} l = 0 \text{ Sous-couche s} \\ l = 1 \text{ Sous-couche p} \\ l = 2 \text{ Sous-couche d} \end{array} \right.$

$l = 0$ $-l \leq m \leq +l$ \longrightarrow $m = 0$ 1 case quantique 2 e⁻ maxi

$l = 1$ $-l \leq m \leq +l$ \longrightarrow $m = -1 ; 0 ; +1$ 3 cases quantiques
6 e⁻ maxi

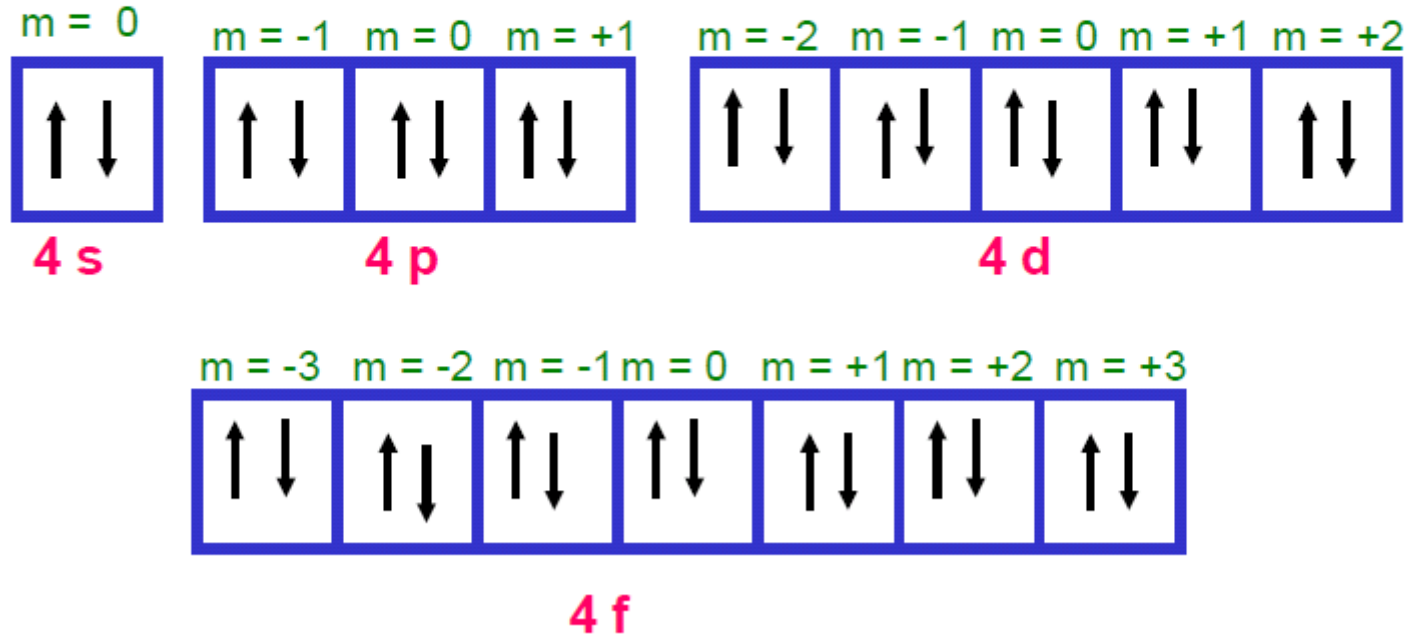
$l = 2$ $-2 \leq m \leq +2$ \longrightarrow $m = -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2$
5 cases quantiques 10 e⁻ maxi



4)

Couche N (n = 4) **32 e⁻ maxi au total**

$l = 0$ $l = 1$ $l = 2$ $l = 3$ $-3 \leq m \leq +3$
(4 s) (4 p) (4 d) (4 f)



Généralisation :

Retenons la règle générale permettant de prévoir le nombre d'électron maximal que peut contenir une couche donnée

$$n_{\text{max}} = 2 n^2$$

Sous-couche	s	p	d	f	g
Nombre de cases quantiques	1	3	5	7	9
Nombre maxi d'électron	2	6	10	14	18

Diagramme énergétique des Orbitales Atomiques (O.A)

-Les nombres quantiques qui caractérisent l'état d'un électron $\left\{ \begin{array}{l} n=1,2,3\dots \\ l=0,\dots,n-1 \\ m = -1,\dots,-1,0,1,\dots,1 \end{array} \right.$

-L'énergie à fournir à l'électron pour l'amener du niveau fondamental au dernier niveau excité : $E_n = -13.6 Z^2 / n^2$

n	l	m	Notation des O.A	énergie
1	0	0	1s	$-13,6 Z^2$
2 4 OA de même énergie (4 OA dégénérées)	0	0	2s	$-13,6 Z^2/4$
	1	-1	2p _x	
		0	2p _z	
		1	2p _y	
3 9 OA de même énergie (9 OA dégénérées)	0	0	3s	$-13,6 Z^2/9$
	1	-1	3p _x	
		0	3p _z	
		1	3p _y	
	2	-2	3d _{xy}	
		-1	3d _{yz}	
		0	3d _{z²}	
		1	3d _{xz}	
		2	3d _{x²-y²}	

Diagramme énergétique des O.A. de l'atome monoélectronique (hydrogène et hydrogénoïde)

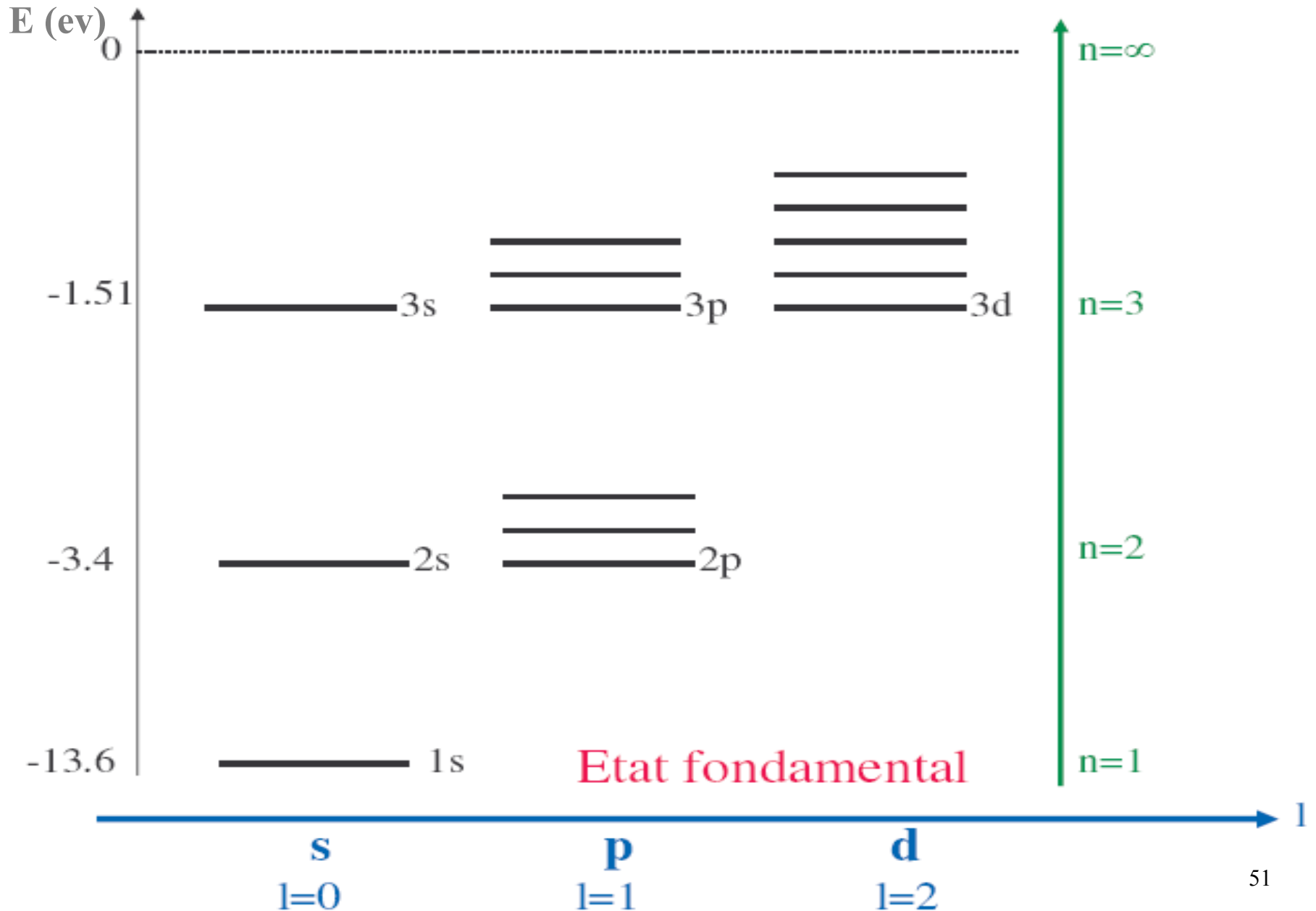
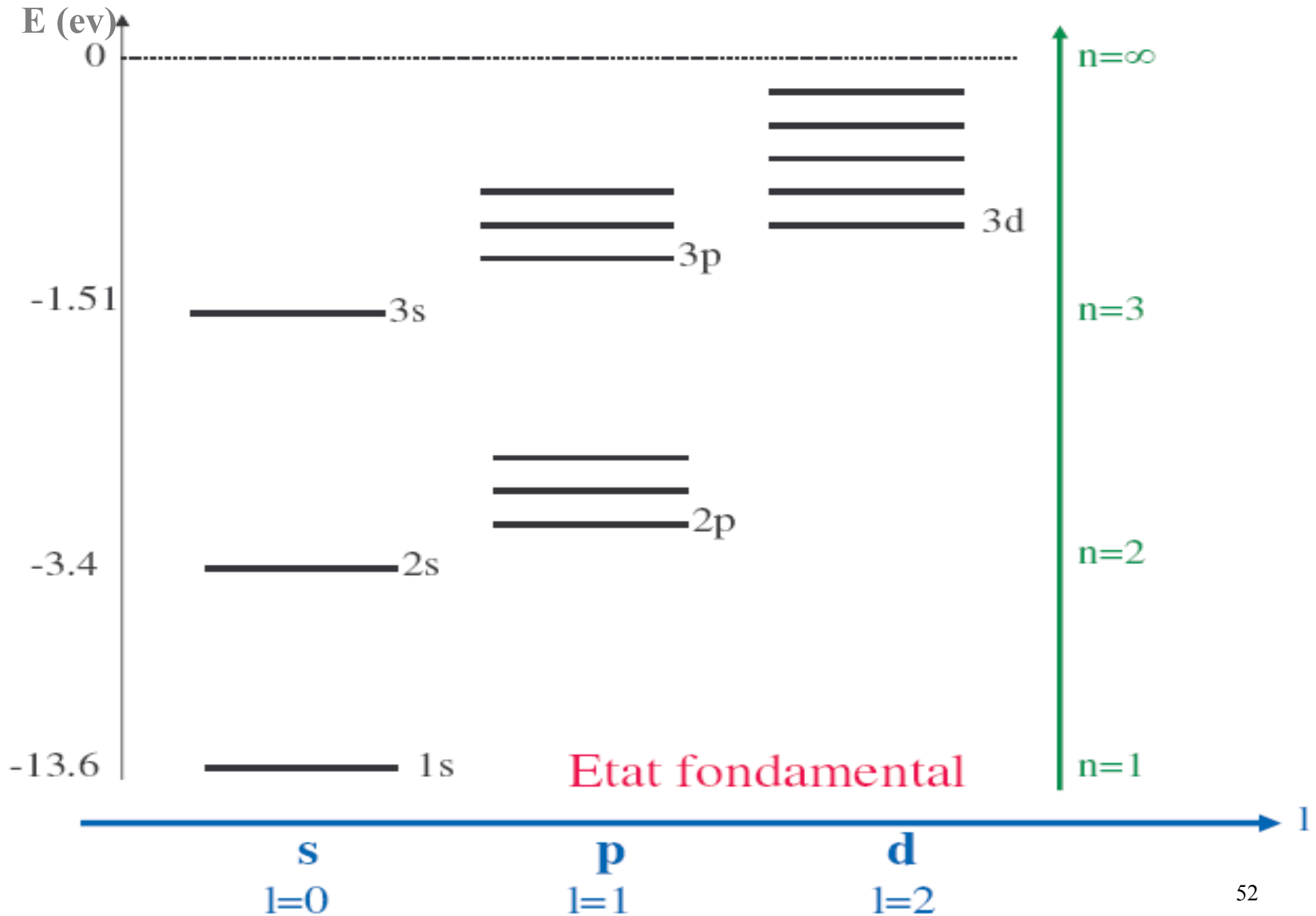


Diagramme énergétique des O.A. de l'atome polyelectronique



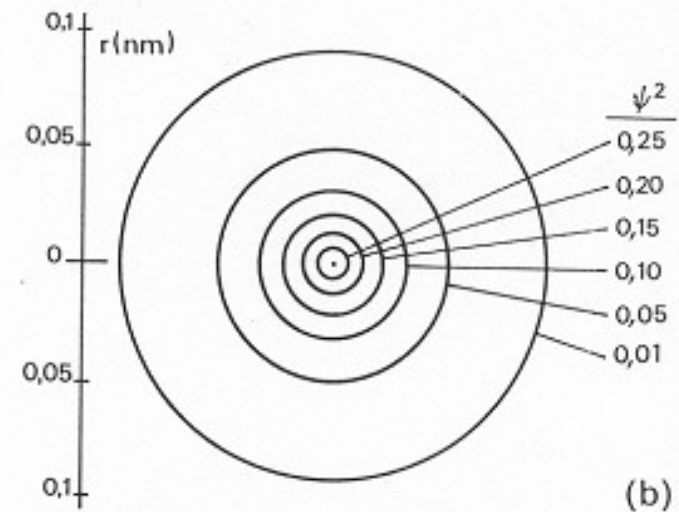
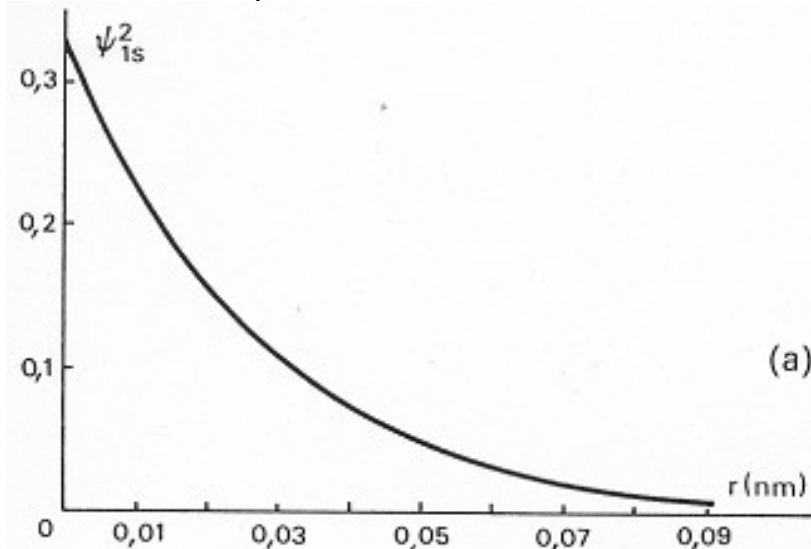
n	l	m_l	$\Psi_{n,l,m}$	OA	$\Psi_{n,l,m}$	Expressions mathématiques
1	0	0	$\Psi_{1,0,0}$	1s	$\Psi_{1,0,0}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$
2	0	0	$\Psi_{2,0,0}$	2s	$\Psi_{2,0,0}$	$\frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$
		1	0	$\Psi_{2,1,0}$	2p _z	$\Psi_{2,1,0}$
	1	1	$\Psi_{2,1,1}$	2p _x	$\Psi_{2,1,1}$	$\frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \sin\theta \cos\varphi$
		-1	$\Psi_{2,1,-1}$	2p _y	$\Psi_{2,1,-1}$	$\frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \sin\theta \sin\varphi$

Application :

Considérant l'électron de l'atome d'hydrogène dont le mouvement est décrit par la fonction $\Psi_{1,0,0}$, c'est à dire l'orbitale atomique 1s ; sa densité de probabilité de présence est :

$$\frac{dP}{dV} = |\psi|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \quad \frac{dP}{dr} = 4 \pi r^2 |\psi|^2 = \frac{4r^2}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$$

La variation de $|\psi|^2$ en fonction de r est représentée sur les figures (a) et (b).

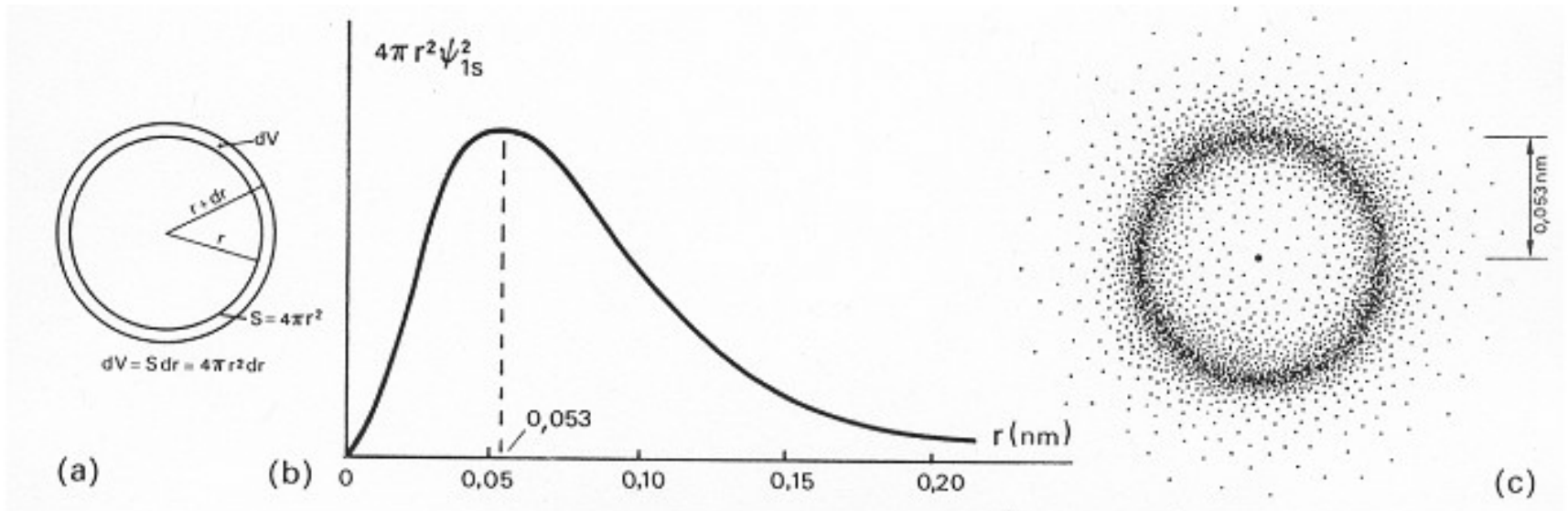


La densité de probabilité de présence est maximale lorsque r tend vers 0.

Cas de l'électron de l'atome d'hydrogène

$$\frac{dP}{dV} = |\psi|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$$

$$\frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 |\psi|^2 = \frac{4r^2}{a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)$$



Élément de volume

Représentation graphique

Densité électronique

La densité de probabilité radiale est maximale à $r = a_0 = 0,053$ nm du noyau (rayon de l'atome d'hydrogène à l'état fondamental).

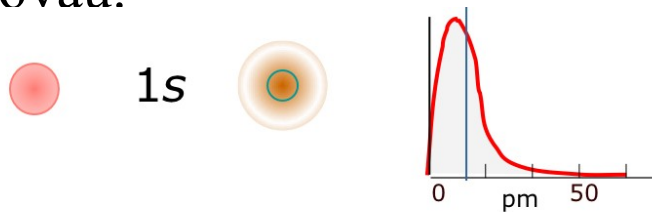
III-7. Représentation des Orbitales Atomiques (O.A)

Chaque orbitale représente à la fois la fonction d'onde Ψ et la distribution électronique qui en découle (probabilité de présence).

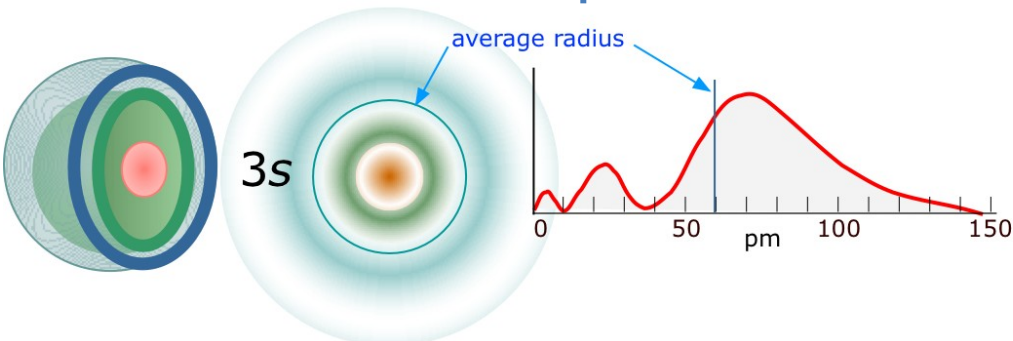
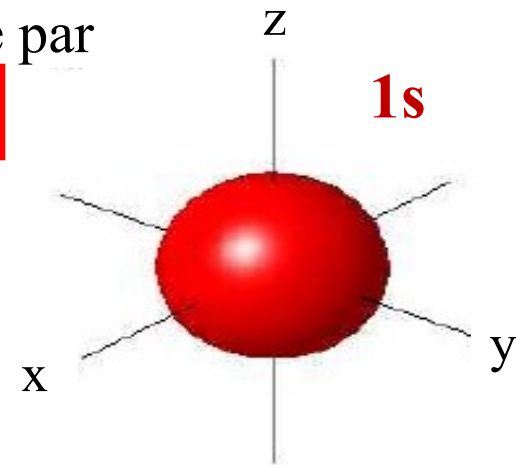
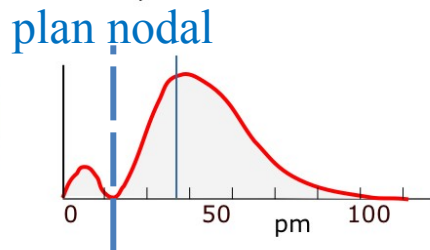
a) Orbitales s

Les orbitales s sont caractérisées par $l = 0$ et $m = 0$.

Toutes les orbitales s (ns) ; sont de symétrie sphérique car la probabilité de présence de l'électron varie de la même façon dans toutes les directions autour du noyau.



L'**O.A. s** est représentée par une case quantique



$\Psi_{n,0,m}$ (OA ns) ne dépend que de r , et par conséquent sa représentation graphique est de symétrie sphérique.

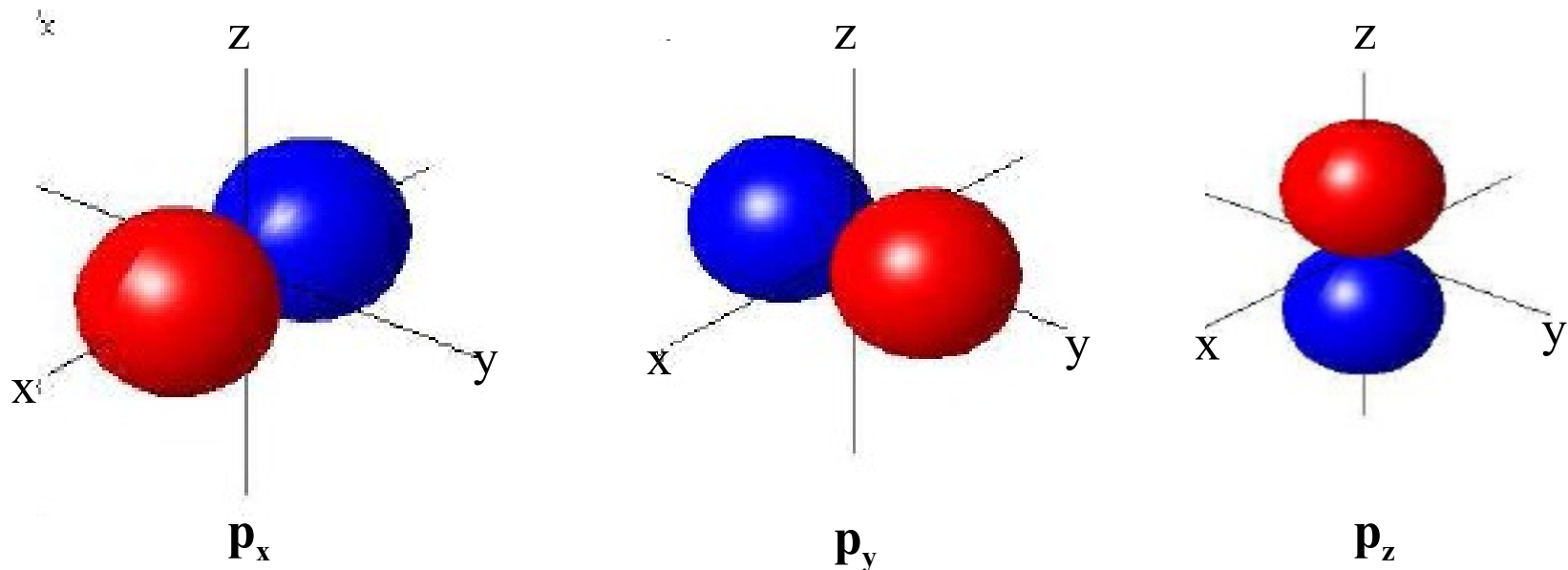
b) Orbitales p

Les fonctions $\psi_{n,1,m}$ (OA np) dépendant de r , θ et ϕ , possèdent une symétrie de révolution autour des axes Ox, Oy et Oz.

Pour $l = 1 \Rightarrow m = -1, 0$ ou $1 \Rightarrow 3$ orbitales p

On parle des orbitales p_x , p_y et p_z ayant la même forme, mais chacune est allongée sur une des trois axes perpendiculaires.

Une orbitale **p** possède un "plan nodal", dans lequel la probabilité de trouver l'électron est nulle. Ce plan passe par le noyau.



Les **O.A. p** qui possèdent la même énergie (valeur propre dégénérée) sont représentés par trois cases quantiques

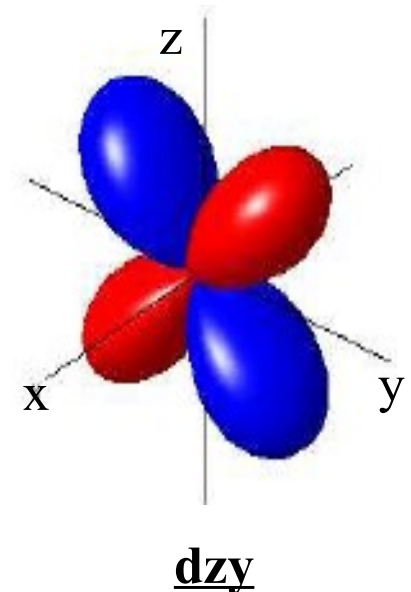
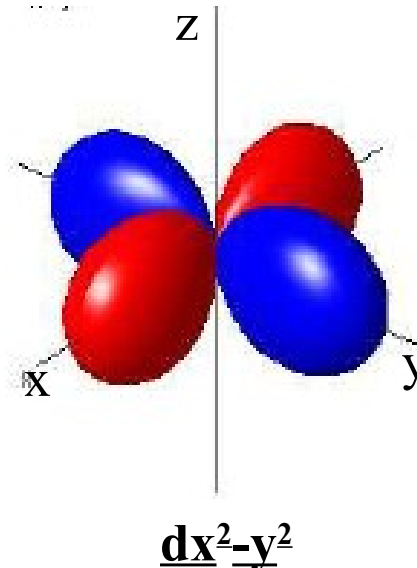
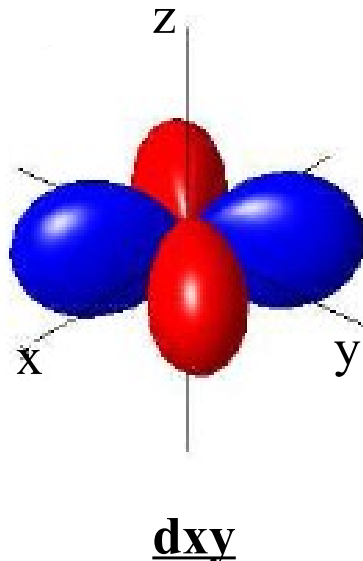
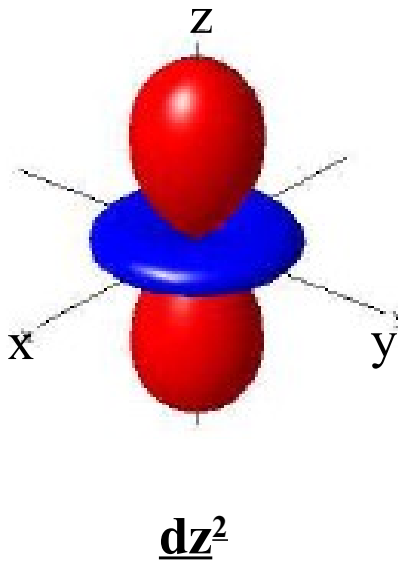
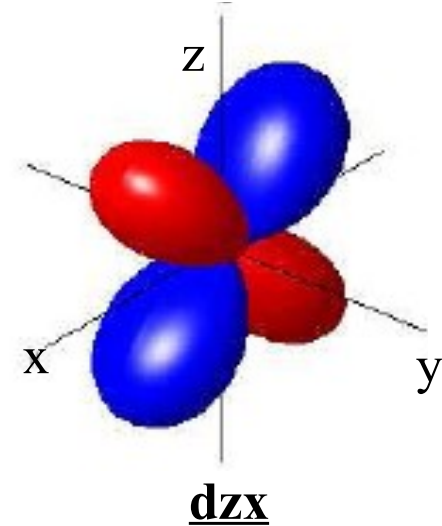


c) Orbitales d

Les fonctions $\psi_{n,2,m}$ (OA nd) dépendent de r , θ et ϕ .

$$l = 2, m_l = -2, -1, 0, +1, +2$$

5 orbitales centrosymétriques



Les **O.A. d** sont représentées par cinq cases quantiques



III-8. Extention aux atomes polyélectroniques

- Approximation hydrogénéode- Règle de SLATER

Contrairement aux atomes hydrogénoïdes ($E_n = E_H[Z^2/n^2]$), l'énergie totale (E) d'un électron appartenant à un atome polyélectronique ne peut pas être déterminée avec précision. Cependant, sa valeur approximative peut être connue en tenant compte de l'effet d'écran de type électrostatique, qui est dû à la présence des autres électrons dans l'espace noyau - électron considéré. Dans ce cas, l'expression de E s'écrit :

$$E_n = E_H[Z_{\text{eff}}^2/n^2]$$

Z_{eff} est la charge effective à laquelle est soumis l'électron considéré. Cette charge se trouve diminuée par comparaison à la charge du noyau (Z).

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

$\Sigma \sigma$ correspond à la somme des constantes d'écran σ dont les valeurs dépendent de la position de l'électron considéré vis-à-vis des autres électrons. Des valeurs de σ sont consignées dans le tableau suivant. 59

Valeurs des constantes d'écran de Slater

j i	1s	2s2p	3s3p	3d	4s4p	4f
1s	0,31					
2s2p	0,85	0,35				
3s3p	1	0,85	0,35			
3d	1	1	1	0,35		
4s4p	1	1	0,85	0,85	0,35	
4f	1	1	1	1	1	0,35

1s/2s2p/3s3p/3d/.....sont les groupes de Slater ;

i : électron considéré ; j électron faisant écran sur i.

III-9. Structure électronique des atomes

L'organisation générale en niveau d'énergie est la même pour tous les atomes.

On cherche à placer Z électrons (atome neutre) sur les différents niveaux, **Écriture de la configuration électronique.**

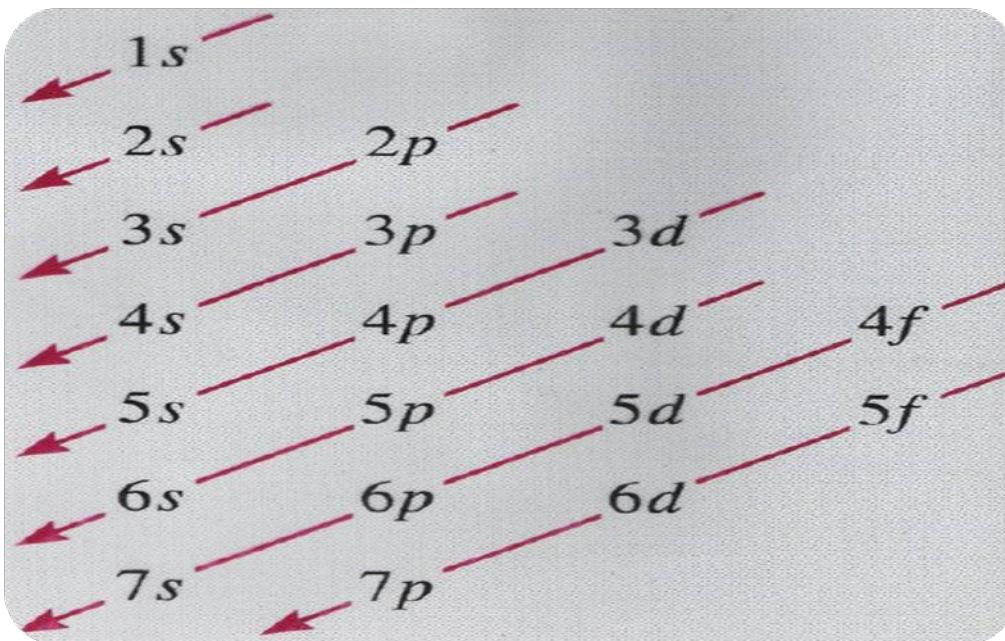
La configuration électronique d'un atome est la répartition de Z électrons de l'atome dans un état fondamental sur les orbitales atomiques.

Ce remplissage des orbitales atomiques s'effectue à l'aide des trois règles suivantes:

- Règle de **KLECHKOWSKY.**
- Règle de **PAULI.**
- Règle de **HUND.**

a) Règle de KLECHKOVSKI

- L'ordre des énergies croissantes est l'ordre des valeurs croissantes de la somme $(n + l)$.
- Si deux sous-couches correspondent à la même valeur de $(n + l)$, la sous-couche, avec la plus petite valeur de n , a l'énergie la plus basse.
- Les orbitales d'une même sous-couche ont la même énergie.



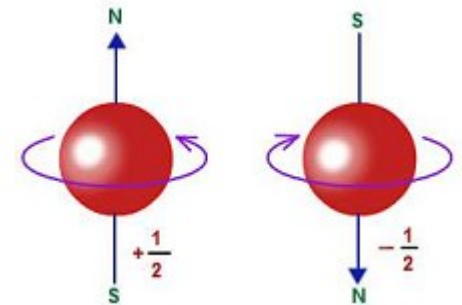
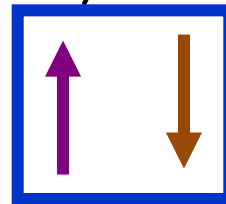
Expérimentalement **le niveau 4s a une énergie inférieure au niveau 3d**. Cette observation a des conséquences importantes pour la structure électronique des atomes, donc pour les propriétés chimiques des éléments. C'est notamment à cet effet que sont dues les séries des éléments de transition.

1s 2s 2p 3s3p **4s 3d** 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p...
1s 2s 2p 3s3p **3d 4s** 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p...

b) Principe d'exclusion de Pauli

Deux électrons d'un même atome ou d'un même ion monoatomique ne peuvent avoir les mêmes valeurs de leurs quatre nombres quantiques : deux quadruplets identiques ne peuvent coexister.

Deux électrons dans une même orbitale atomique doivent différer par leur nombre quantique de spin (leurs nombres de spin sont opposés on dit qu'ils sont **antiparallèles ou appariés**).

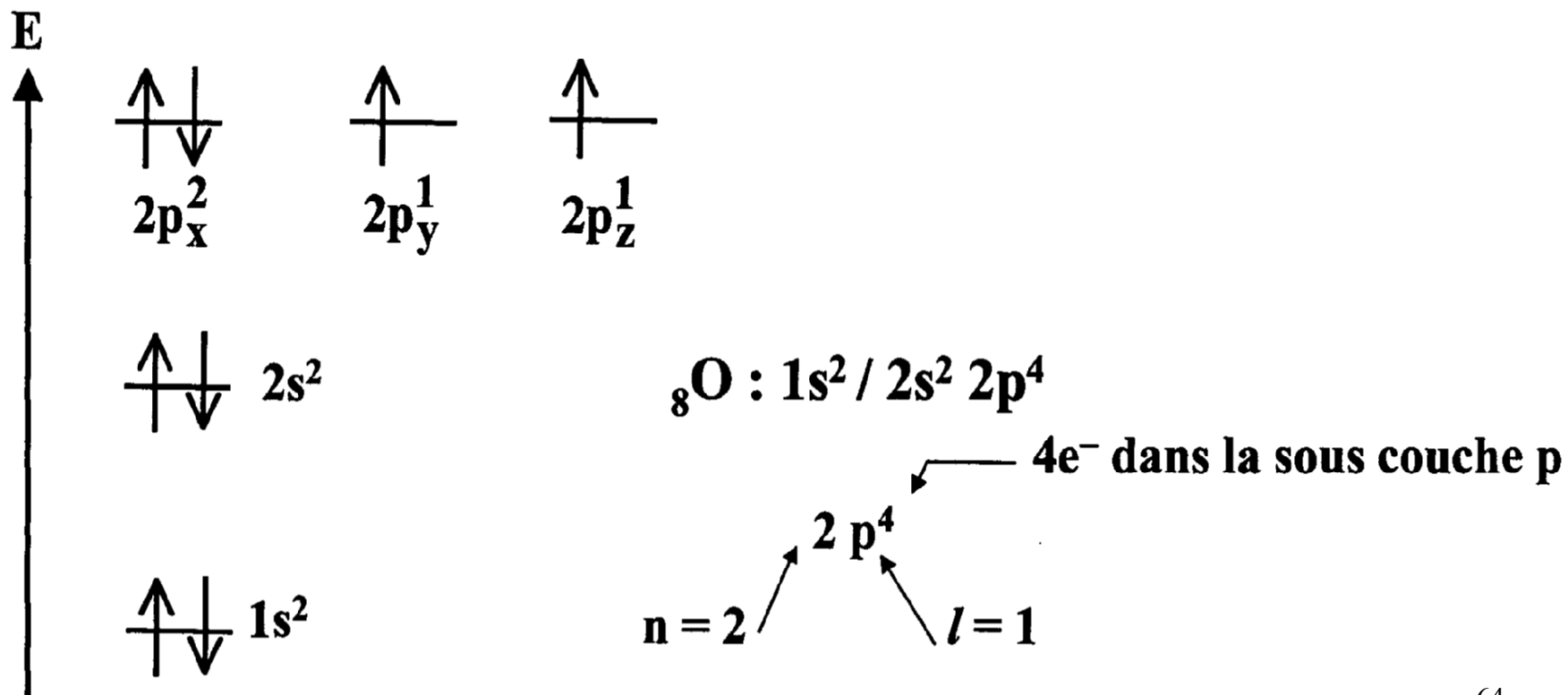


Si une orbitale ne contient qu'un électron, celui-ci est dit **célibataire ou non apparié**.

Une orbitale vide constitue une **lacune électronique**.

c) Principe de Hund (règle du spin maximal)

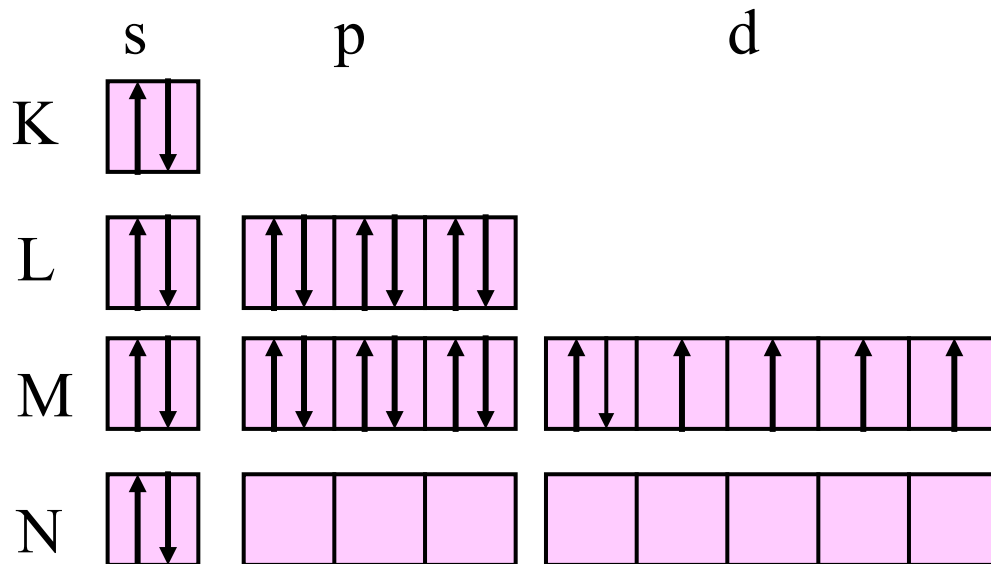
Lorsqu'une sous-couche n'est que partiellement occupée, la configuration de plus basse énergie, donc la plus stable et la plus probable, est celle correspondant à l'occupation du maximum d'orbitales atomiques. De ce fait, lorsque des orbitales atomiques ont la même énergie (dégénérées), les électrons se répartissent avec un nombre maximum de spins parallèles.



Exemples

Exemple du Fer: 26 électrons

La configuration électronique du Fer: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$



Récapitulatif sur les nombres quantiques d'un électron d'un atome polyélectronique

Nom	Environnement	Notation	Domaine de définition	Règle de quantification	Nombre maximal d'e ⁻
Nombre quantique principal	couche	n	\mathbb{N}^*	$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$	$2n^2$
Nombre quantique secondaire	sous-couche	l	\mathbb{N}	$0 \leq l \leq n - 1$	$2(2l + 1)$
Nombre quantique magnétique	orbitale atomique	m	\mathbb{Z}	$-l \leq m \leq +l$	2
Nombre quantique de spin	électron	s	\mathbb{R}	$s = \pm \frac{1}{2}$	1

Les premiers éléments chimiques

Période	Z	Symbole	Nom	Structure électronique	Configuration électronique	Couche de valence	Notation de Lewis	Valence	
1 ^{ère}	1	H	Hydrogène	\uparrow 1s	1s ¹	1s ¹	H•	1	
	2	He	Hélium	$\uparrow\downarrow$ 1s	1s ²	1s ²	He	0	
2 ^{ème}	3	Li	Lithium	\uparrow 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ¹	2s ¹	Li•	1	
	4	Be	Béryllium	$\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ²	2s ²	Be	2	
	5	B	Bore	\uparrow 2p $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ² 2p ¹	2s ² 2p ¹	•B	3	
	6	C	Carbone	\uparrow 2p $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ² 2p ²	2s ² 2p ²	C: ou :C:	4	
	7	N	Azote	\uparrow 2p $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ² 2p ³	2s ² 2p ³	N•	3	
	8	O	Oxygène	$\uparrow\downarrow$ 2p $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ² 2p ⁴	2s ² 2p ⁴	∟O:	2	
	9	F	Fluor	$\uparrow\downarrow$ 2p $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ² 2p ⁵	2s ² 2p ⁵	┌F•	1	
	10	Ne	Néon	$\uparrow\downarrow$ 2p $\uparrow\downarrow$ 2s $\uparrow\downarrow$ 1s	1s ² 2s ² 2p ⁶	2s ² 2p ⁶	┌Ne┐	0	
	3 ^{ème}	11	Na	Sodium	[Ne] + \uparrow 3s	[Ne] 3s ¹	3s ¹	Na•	1
		12	Mg	Magnésium	[Ne] + $\uparrow\downarrow$ 3s	[Ne] 3s ²	3s ²	Mg	2

Définitions

- **Couche de valence**: C'est la couche de nombre quantique principal le plus élevé dans l'état fondamental. On l'appelle aussi couche externe ou couche périphérique. Les électrons de la couche externe sont appelés électrons de valence.
- Les **électrons de valence** d'un atome sont ceux dont le nombre quantique principal n est le plus grand ou qui appartiennent à une sous-couche en cours de remplissage : ce sont les électrons les plus périphériques et les moins liés au noyau, donc ceux qui sont susceptibles d'être impliqués dans des liaisons de covalence.
- Les **électrons de cœur** sont les autres électrons, occupant les couches les plus profondes, de plus basse valeur de n et donc de plus faible énergie : ce sont les électrons les plus liés au noyau.
- Le **schéma de Lewis** de l'atome ne représente que les électrons de valence.
- La **valence d'un atome** est le nombre de liaisons covalentes simples auxquelles peut participer cet atome.

Chapitre IV

Tableau périodique des éléments chimiques

Tableau Périodique des Éléments

1 IA New Original																	18 VIIIA	
1 H Hydrogène 1.00794																	2 He Hélium 4.002602	
3 Li Lithium 6.941	4 Be Béryllium 9.012182											5 B Bore 10.811	6 C Carbone 12.0107	7 N Azote 14.00754	8 O Oxygène 15.9994	9 F Fluor 18.9984032	10 Ne Néon 20.1797	
11 Na Sodium 22.989770	12 Mg Magnésium 24.3050	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9 VIIB	10 VIII	11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 Ar Argon 39.948	
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.955910	22 Ti Titane 47.867	23 V Vanadium 50.9415	24 Cr Chrome 51.9961	25 Mn Manganèse 54.938048	26 Fe Fer 55.8457	27 Co Cobalt 58.933200	28 Ni Nickel 58.6934	29 Cu Cuivre 63.546	30 Zn Zinc 65.409	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.64	33 As Arsenic 74.92160	34 Se Sélénium 78.96	35 Br Brome 79.904	36 Kr Krypton 83.798	
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90585	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90638	42 Mo Molybdène 95.94	43 Tc Technétium (98)	44 Ru Ruthénium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Paladium 106.42	47 Ag Argent 107.8682	48 Cd Cadmium 112.411	49 In Indium 114.818	50 Sn Étain 118.710	51 Sb Antimoine 121.760	52 Te Tellure 127.60	53 I Iode 126.90447	54 Xe Xénon 131.293	
55 Cs Césium 132.90545	56 Ba Baryum 137.327	57 to 71		72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantale 180.9479	74 W Tungstène 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.217	78 Pt Platine 195.078	79 Au Or 196.96655	80 Hg Mercure 200.59	81 Tl Thallium 204.3833	82 Pb Plomb 207.2	83 Bi Bismuth 208.98039	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 to 103		104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (266)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (268)	110 Ds Darmstadtium (271)	111 Rg Roentgenium (272)	112 Uub Ununbium (285)	113 Uut Ununtrium (284)	114 Uuq Ununquadium (289)	115 Uup Ununpentium (288)	116 Uuh Ununhexium (282)	117 Uus Ununseptium	118 Uuo Ununoctium

Atomic masses in parentheses are those of the most stable or common isotope.

Design Copyright © 1997 Michael Deay (michay@dayah.com) http://www.dayah.com/periodic

Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-116 are the Latin equivalents of those numbers.

57 La Lanthane 138.9055	58 Ce Cérium 140.116	59 Pr Praseodyme 140.90765	60 Nd Néodyme 144.24	61 Pm Prométhium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutétium 174.967
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232.0381	91 Pa Protactinium 231.03688	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Américium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkélium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobélium (259)	103 Lr Lawrencium (262)

IV-1. Description du tableau périodique de Mendeleiev

Le tableau périodique est une conséquence des configurations électroniques. La classification périodique est basée sur la formation de groupes constitués par les éléments (de numéro atomique Z) possédant des propriétés analogues.

-Le tableau périodique est constitué de 4 blocs : s, p, d et f.

-Les éléments d'une même ligne horizontale du tableau périodique constituent une période. Ils sont au nombre de 7.

-Les éléments d'une même colonne ayant la même configuration électronique de la couche externe constituent une famille ou groupe.

Le tableau périodique est constitué de 18 colonnes réparties en 9 groupes. Les 7 premiers comportent chacun deux sous-groupes A et B selon l'état des électrons externes.

Sous-groupe A : contient les éléments dont la couche externe est $ns\ np$.

Sous-groupe B : contient les atomes qui possèdent un état d.

Les indices I, II, III,... indiquent le nombre d'électrons sur la couche externe, appelés électrons de valence.

Alcalins

Alcalino-terreux

Terreux

Carbonides

Azotides

Sulfurides

Halogènes

GAS rares

Métaux de transition

Familles d'éléments chimiques

1	Ia	IIa											IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	VIIIa	2	He
1	H												B	C	N	O	F		Ne	
2	Li	Be											Al	Si	P	S	Cl		Ar	
3	Na	Mg	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb		IXb	Xb	11	12	13	14	15	16	17	18	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd		In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg		Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	Ac																	
Lanthanides			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71				
Actinides			90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103				
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

- La classification périodique est divisée en 4 blocs en fonction de la structure électronique externe des éléments.

IA													IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	
1													3	14	15	16	17	18
	IIA																	
	2																	
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIB		IB	IIB								
		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12							
													Ge					



IV-2. Principales familles du tableau périodique

Famille des alcalins : les éléments dont la configuration électronique externe est du type ns^1 .

Famille des alcalino-terreux: leurs configurations électroniques externes est du type ns^2 .

Famille des métaux de transition: Ses éléments possèdent des orbitales **d** incomplètement remplies du type $ns^x(n-1)d^y$.

Famille de l'oxygène ou chalcogènes: leurs structure électronique externe est du type: $ns^2 np^4$.

Famille des halogènes : leurs configurations électroniques externes est du type $ns^2 np^5$.

Famille des gaz rares: tous ces éléments ont une configuration électronique externe de la forme $ns^2 np^6$.

IV-3 Critères de reconnaissance chimique

Les métaux donnent des Cations, leurs oxydes sont basiques.



Les non-métaux donnent des Anions, leurs oxydes sont acides.



IV-3. a) Règle de Sanderson

Un élément est métallique si le nombre d'électron de sa couche de n le plus élevé est inférieur ou égal au numéro de sa période. (sauf H et Ge).

Exemple : Fe (Z=26) $3d^6 4s^2$ ici n le plus élevé est 4 \leq sa période 4

IV-3. Les propriétés chimiques des atomes

Les propriétés de l'atome dépendent particulièrement de sa configuration électronique externe, à savoir des électrons de la couche externe. Parmi les propriétés qui peuvent donner une idée sur le comportement chimique de l'atome on cite :

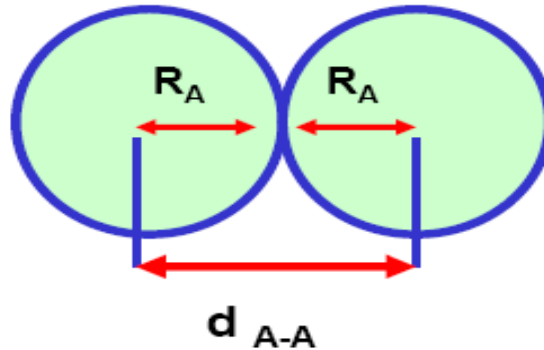
- L'aptitude à perdre ou gagner des électrons.
- La capacité de déformation du nuage électronique.

Règle de l'OCTET:

Un atome va réagir (gagner ou perdre des électrons) de façon à avoir comme structure électronique externe celle du gaz rare le plus proche.

a) Rayon atomique R_A

On peut définir le rayon atomique comme étant la moitié de la distance entre les centres des deux atomes liés par une liaison simple.



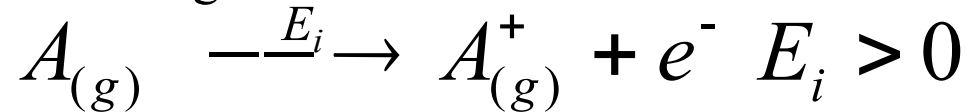
- Sur une période : si Z augmente alors R_A diminue.
- Sur une colonne : si Z augmente alors R_A augmente.



b) Energie d'ionisation (E.I)

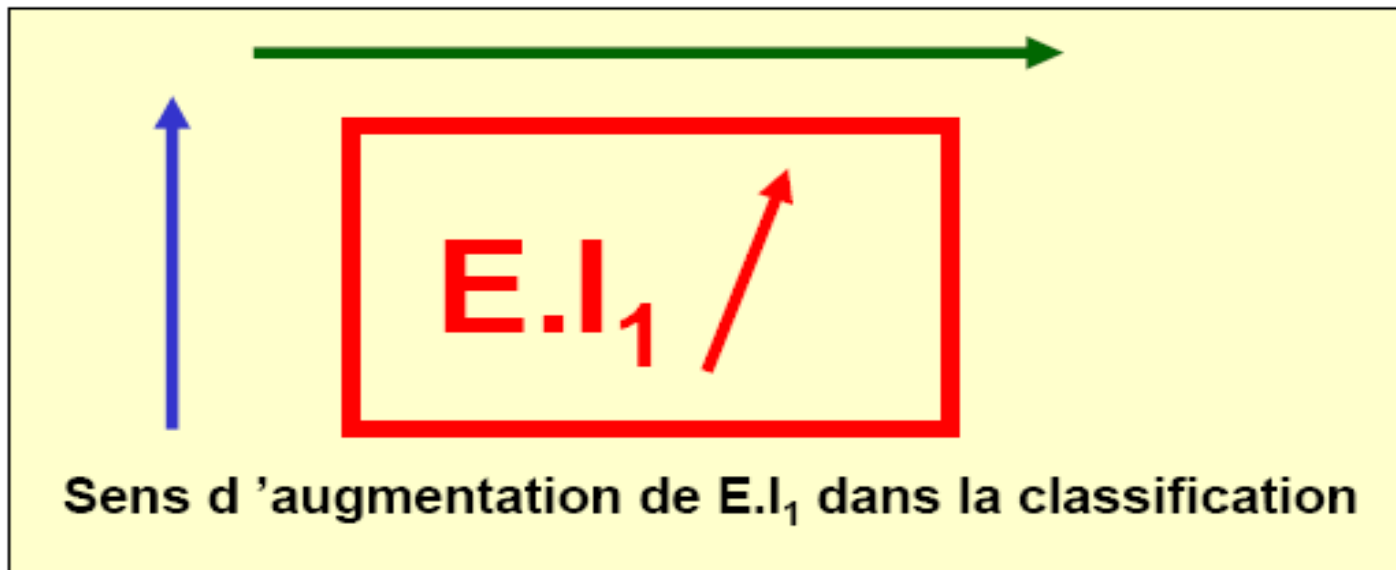
C'est l'énergie qu'il faut fournir pour arracher un électron à un atome (ou à un ion) dans l'état fondamental et à l'état gazeux.

- Sur une même période : si Z augmente alors E.I augmente.
- Sur un même groupe : si Z augmente alors E.I diminue.



$$E_i = E_n(A^+) - E_n(A) = (-13,6 Z(A^+)_{\text{eff}}^2/n^2)(x-1) + (13,6 Z(A)_{\text{eff}}^2/n^2)x$$

x: nombre d'électrons dans la couche où sera arraché l'électron

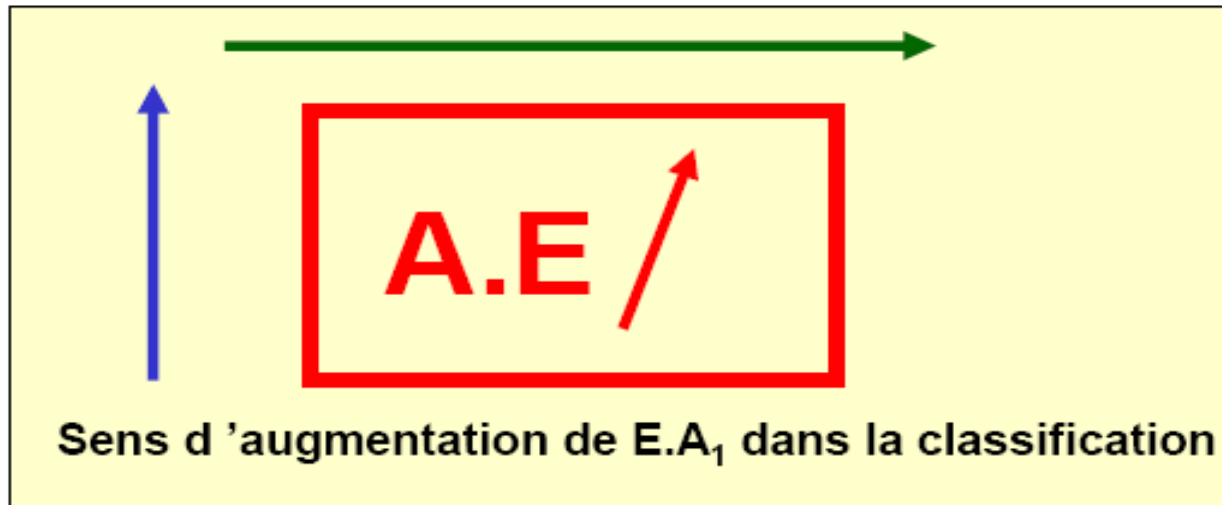
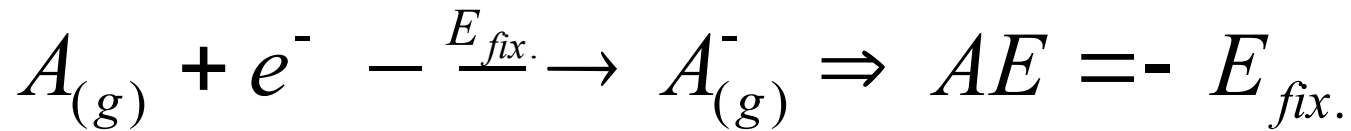


Energie d'ionisation varie en sens inverse du rayon atomique⁷⁸.

c) Affinité électronique (A.E)

C'est le phénomène inverse de l'ionisation.

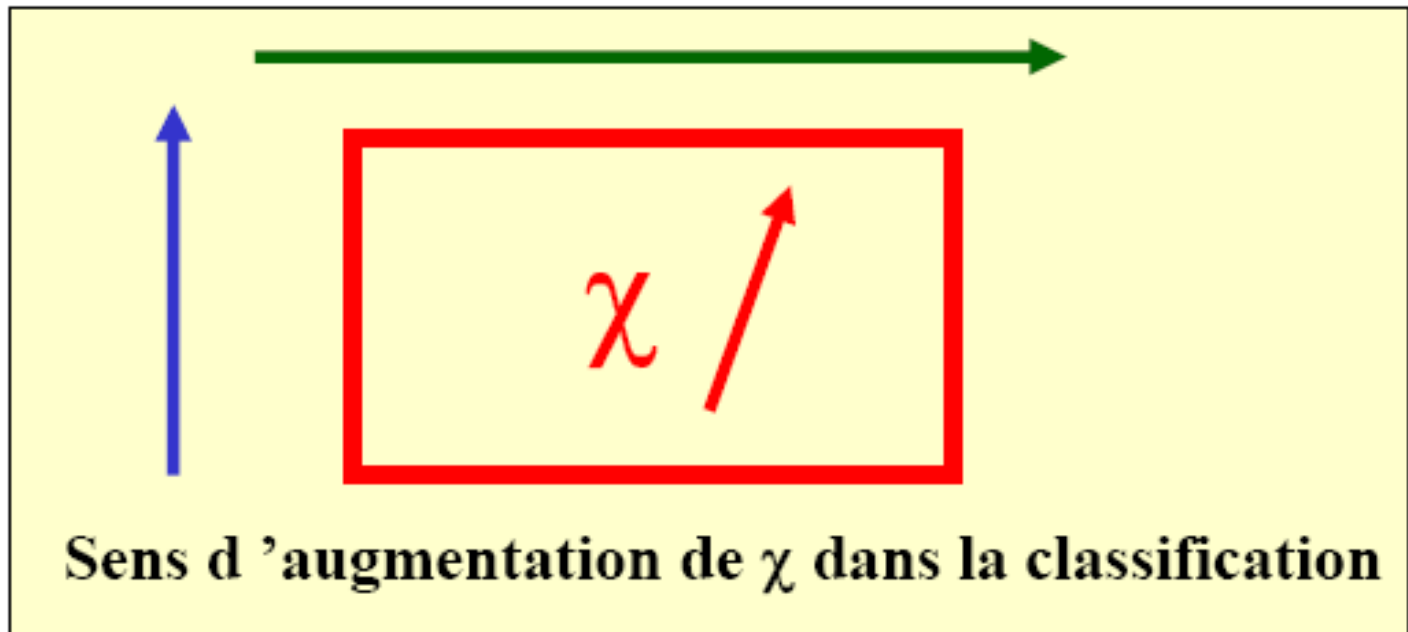
L'affinité électronique d'un atome X est l'énergie dégagée lorsque cet atome capte un électron.



L'affinité électronique varie comme l'énergie d'ionisation.

d) Electronégativité (χ)

C'est le pouvoir d'attirer un électron par un élément. Un élément qui perd facilement un ou plusieurs électrons est dit électropositif.



L'électronégativité varie comme l'énergie d'ionisation en sens inverse du rayon atomique.