

COURS DE CHIMIE GENERALE

0. INTRODUCTION

Cours de Chimie Générale

Cours destiné aux étudiants en GC BA1
et IN, SC, PH (BA5 ou MA1)

- ▶ jeudi, 10h15 – 12h00 : cours (CO3)
- ▶ lundi, 14h15 – 15h00 : exercices (CM1100(?), CM1106, GCB331)

ATTENTION:

les séances d'exercices ne débuteront qu'en 3^{ème} semaine!



Supports de cours

Support de cours

- ▶ A télécharger depuis le site <https://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=3201>

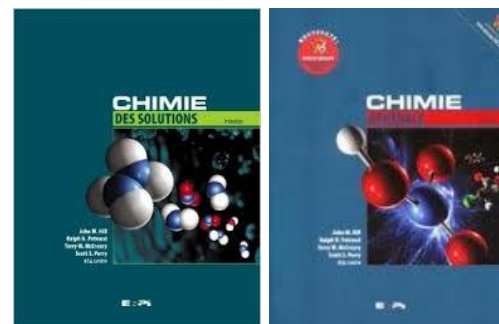
Autoinscription (si nécessaire): genchem2223

Exercices à préparer

- ▶ Indications une semaine à l'avance sur le site moodle,

Ouvrages de référence

- ▶ **Chimie Générale** (Petrucci, Hill)
- ▶ **Chimie des solutions** (Petrucci, Hill)



Examen

- ▶ Durée : 2 heures
- ▶ Contenu : Vrai/Faux et des problèmes basés sur la matière enseignée
- ▶ Test de compréhension (aide-mémoire, liste de constantes, tableau périodique)

Programme du cours

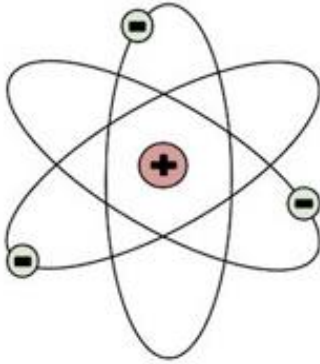
- Atomistique
- Liaison chimique
- Chimie quantitative (stoechiometrie, réactions totales)
- Thermodynamique des réactions chimiques
- Equilibres chimiques
- Propriétés des solutions
- Réactions acido-basiques
- Cinétique

COURS DE CHIMIE GENERALE

1. ATOMISTIQUE

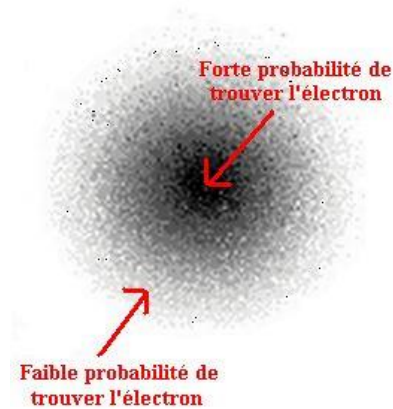
Quel est le modèle actuel de l'atome?

1



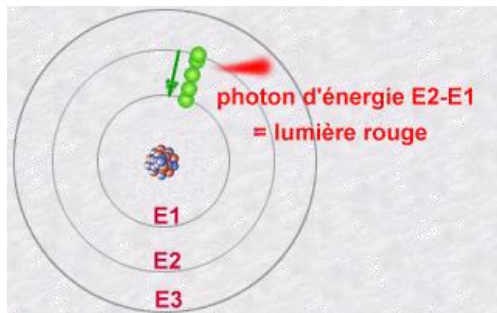
L'atome est composé d'un noyau, d'électrons et surtout de vide. Les électrons peuvent être sur n'importe quelle orbite circulaire. Il suffit que la force centrifuge compense la force d'attraction

2



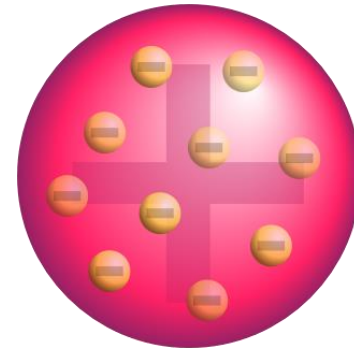
On ne sait pas précisément où sont les électrons
L'atome n'est pas fini
Modèle mathématique, non déterministe

3



Électrons gravitent autour du noyau selon des orbites précises correspondant à des niveaux énergétiques

4



Charge positive distribuée uniformément sur une sphère
Électrons distribués de manière à contrebalancer cette charge

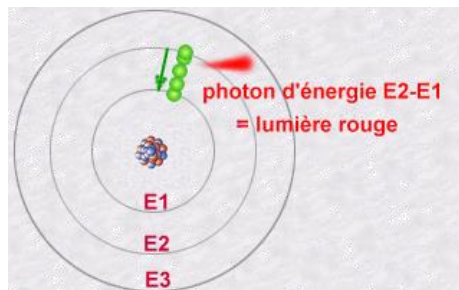
Modèle Rutherford

Source: découverte noyau



Modèle Bohr

Physiquement faux, mais encore utilisable pour expliquer les discontinuités des émissions atomiques (et de manière quantitative pour l'atome d'hydrogène)



Modèle Schrödinger

Modèle actuel, quantique

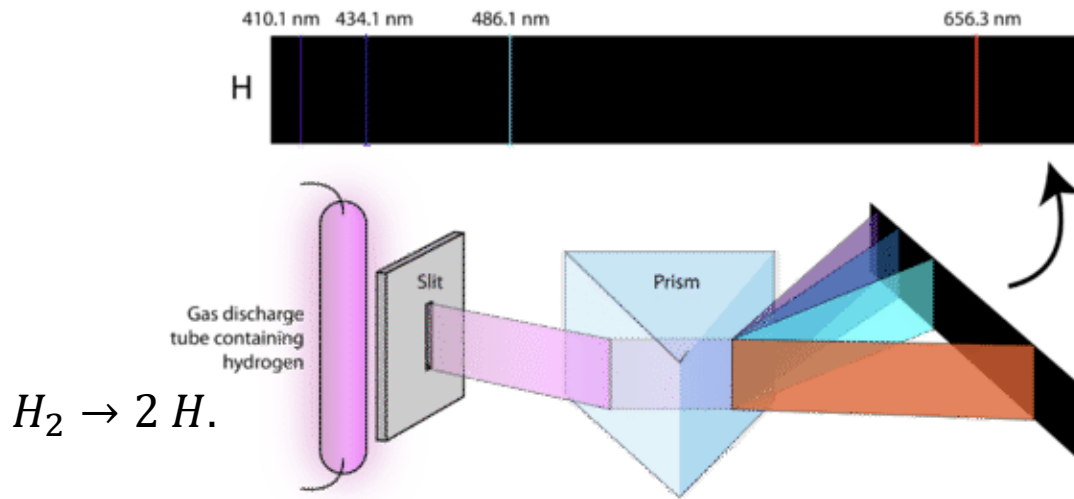
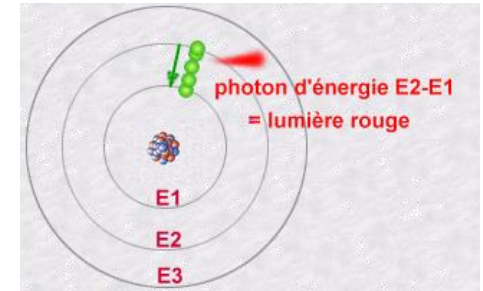


Modèle Thomson

Source: découverte électrons
obsolète



Modèle semi-quantique de l'atome (Bohr, 1913)

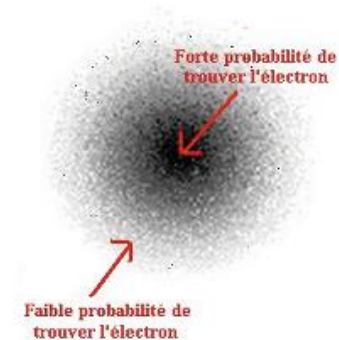
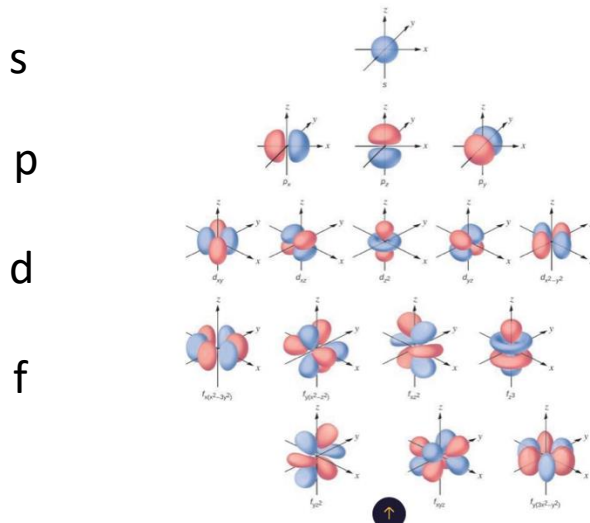


Une excitation permet la rupture de la liaison H-H dans H_2 qui produit des atomes excités d'hydrogène. Ces atomes se stabilisent en émettant de la lumière de longueur d'onde précise.

Modèle faux mais intuitif:

- Prédiction des différentes “couleurs” de la lumière émise par les atomes d'hydrogène
- Explication qualitative (et non quantitative) des spectres d'émission discontinus des atomes avec plusieurs électrons

Modèle quantique de l'atome (Schrödinger, 1926)



Modèle totalement cohérent qui “explique ” tous les phénomènes électromagnétiques mais abstrait et probabiliste

Difficulté conceptuelle (dualité onde-particule, intrication, etc.)

Information mathématique sur la probabilité de présence d'un électron dans l'espace pour une certaine énergie

Pour nous:

Représentation graphique simplifiée des orbitales

Structure électronique qualitative des atomes et ions

Dualité onde/particule de l'électron

Déviaton d'un faisceau d'électrons dans un tube cathodique à l'aide d'un champ électromagnétique



Comportement d'une particule avec une certaine charge et une certaine masse

Conception classique



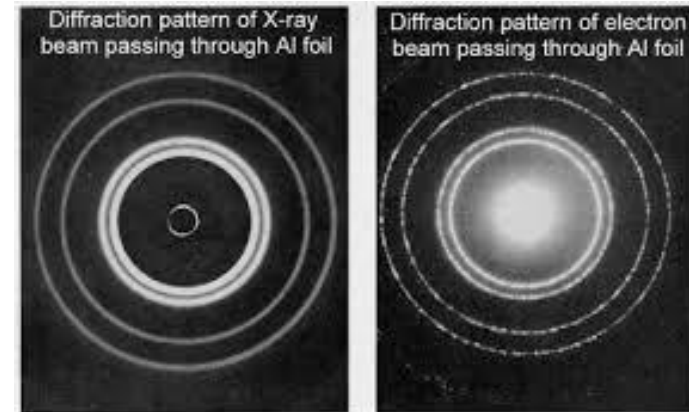
J.J Thomson Nobel prize 1906

Passage d'un faisceau d'électrons à travers un arrangement régulier d'atomes



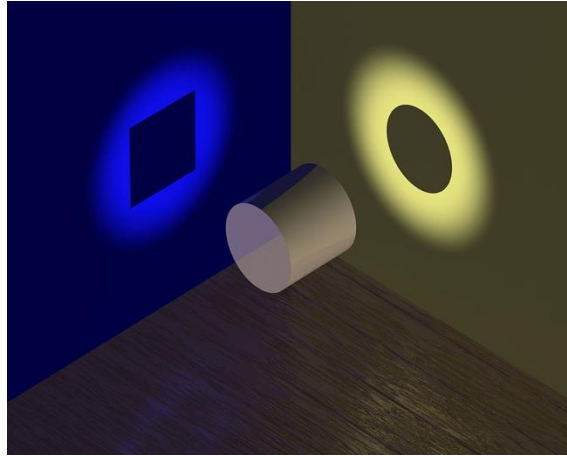
Comportement d'une onde (interférence)

Nouveauté quantique



G. P Thomson Nobel prize 1937
C. Davisson L. Germer

Dualité onde-particule des objets quantiques



Les objets quantiques (très petits) ne ressemblent à rien de macroscopique. Suivant comment on les observe ils apparaissent soit plutôt comme une onde, soit plutôt comme une particule. On ne peut observer simultanément les propriétés d'onde et de particule.

Etrangeté du monde quantique! Les expériences sont indubitables. Les résultats sont prévisibles par le calcul mais leur interprétation reste bien mystérieuse.

Voir par exemple une vidéo sur l'étrangeté de la lumière (4 minutes)

<https://llx.fr/site/index.php/2011/12/13/cest-lhistoire-dun-photon/>

et sur l'expérience des deux fentes

<https://toutestquantique.fr/dualite/>

(2 minutes)

Dualité onde/particule de la lumière



Nous voulons faire apparaître les deux équations suivantes

$$E = h\nu$$

E: énergie d'un photon

h: constante de Planck

ν : fréquence de l'onde électromagnétique associée au photon

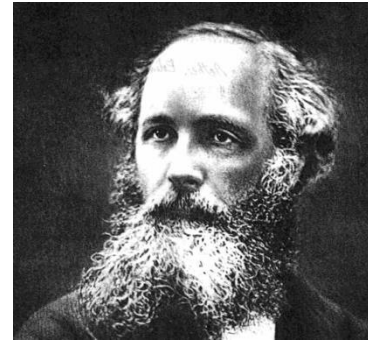
$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

C: vitesse de la lumière

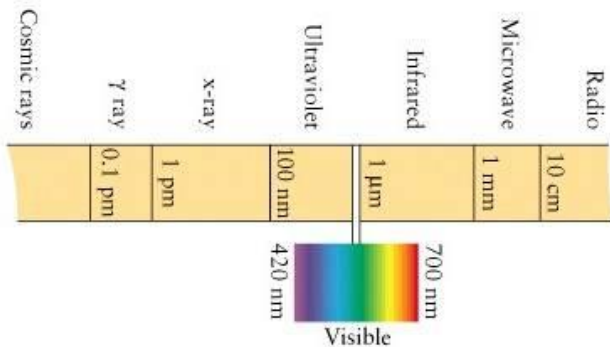
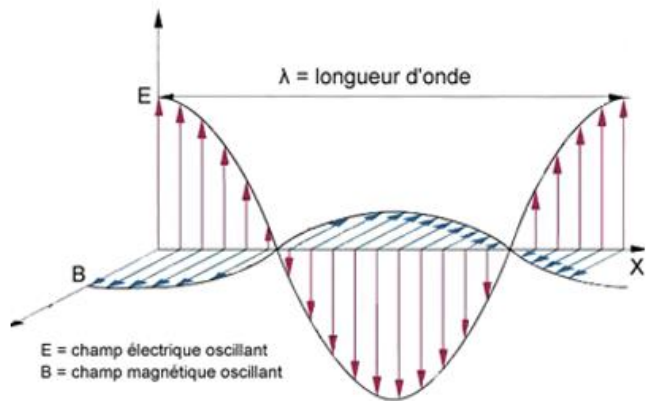
λ : longueur d'onde électromagnétique associée au photon

La lumière est une onde électromagnétique

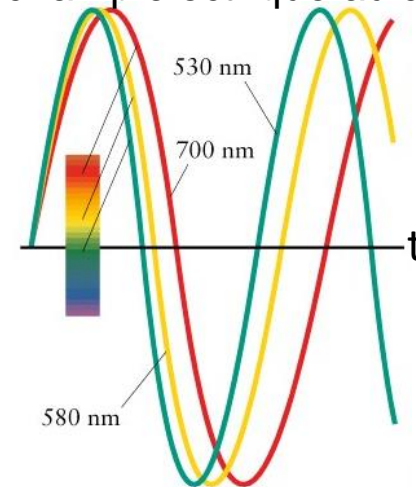
Conclusion “définitive” de la physique classique
qui explique les phénomènes d’interférence, polarisation etc.



Maxwell 1865



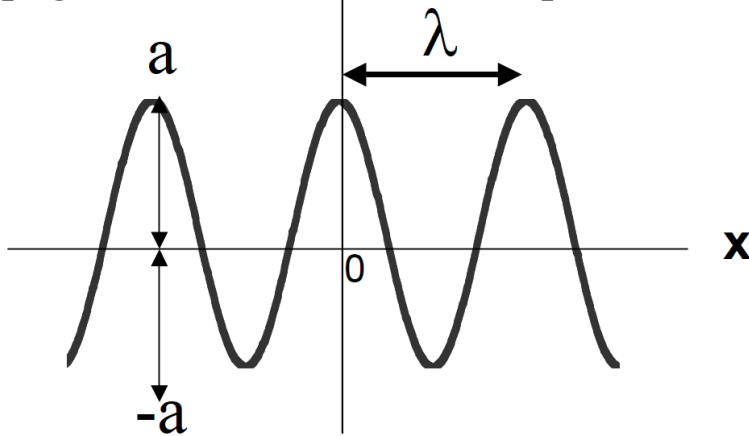
Amplitude du champ électrique au cours du temps



Vitesse de propagation d’une onde électromagnétique
dans le vide: $C = 3 \times 10^8$ m/s

Relation entre la longueur d'onde et la fréquence d'une onde électromagnétique

Propagation de l'onde dans l'espace au temps t



$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

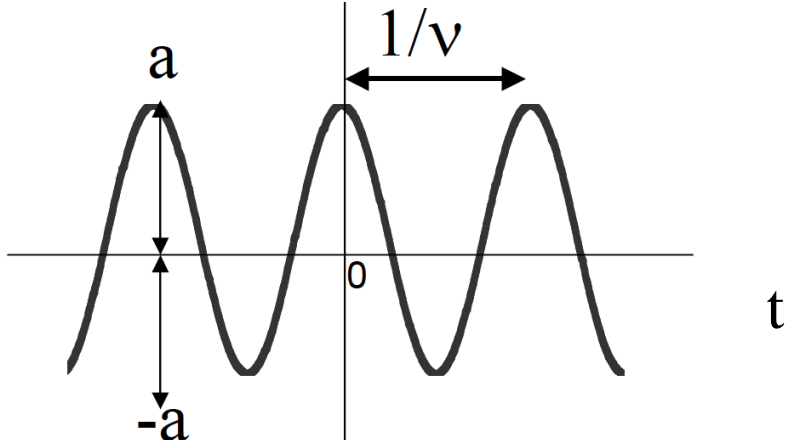
Distance = vitesse x temps

Vitesse: $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

a = amplitude maximale

λ = longueur d'onde (m)

onde dans le temps en un point donné



a = amplitude maximale

$T = 1/\nu$ = période (s)

ν = fréquence (s^{-1}),

(nombre de cycles par secondes)

La lumière est un ensemble de particules

La lumière est un ensemble de particules (photons) avec une énergie et une quantité de mouvement définie. Ces paquets discontinus d'énergie sont aussi appelés quanta

Théorie des quanta (Plank , 1900), Prix Nobel 1918

Rayonnement du corps noir

Échanges d'énergie sont quantifiés (non continus)

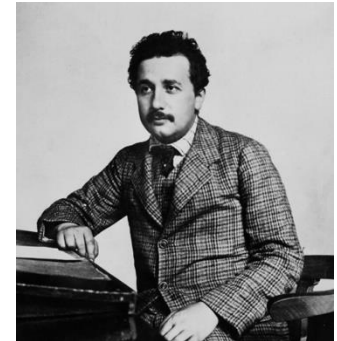
$$|\Delta E| = nh\nu$$

n: nombre entier positif, 0, 1, 2...
 ν : fréquence en Hz, (s⁻¹)
h : constante de Planck = 6.63 x 10⁻³⁴ J.s



*La lumière comme particule (Einstein, 1905), Prix Nobel 1921

Explication de l'effet photoélectrique



EQUATION DE PLANK-EINSTEIN DE LA LUMIERE

$$E = h\nu$$

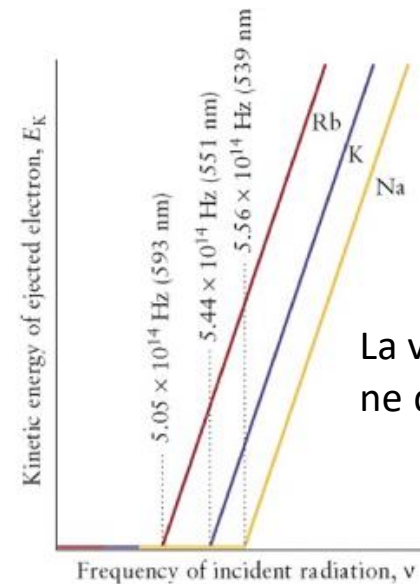
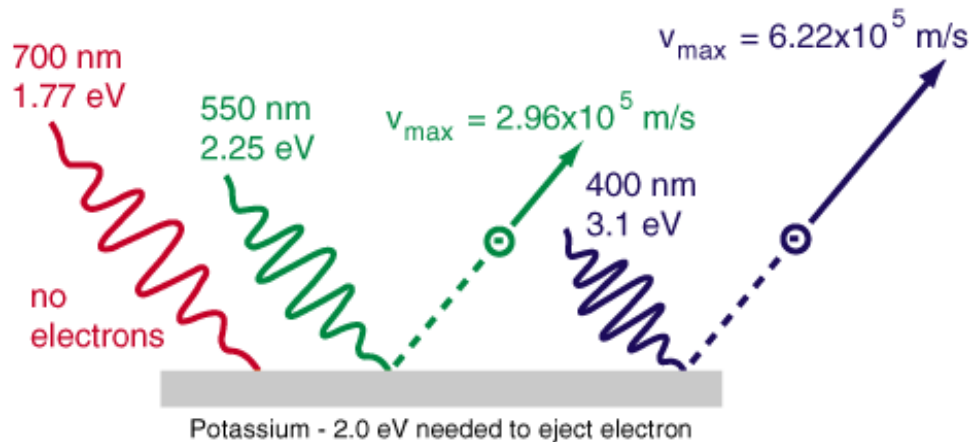
E: énergie d'un photon (en J)
 ν : fréquence de l'onde électromagnétique associée au photon Hz, (s⁻¹)
h : constante de Planck = 6.63 x 10⁻³⁴ J.s

*La dualité onde/particule de la lumière a été postulée par Einstein en 1909

Effet photoélectrique

Energie d'un photon = $h\nu$

- ▶ Un photon d'un faisceau lumineux transmet son énergie à un électron d'un atome de métal
- ▶ Au-delà d'une énergie seuil Θ (typique de chaque métal), les électrons excités échappent à l'attraction des noyaux et quittent la surface du métal
- ▶ L'énergie cinétique des électrons éjectés vaut $E = h\nu - \Theta$.



La valeur de la pente (h)
ne dépend pas du métal

Exercice

1. Calculer l'énergie d'un photon d'une onde électromagnétique de longueur d'onde $\lambda = 660 \text{ nm}$ ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$)
2. Calculer la fréquence de cette onde
3. Combien de photons de longueur d'onde 660 nm seraient émis par une lampe monochromatique de 100 W ($1 \text{ W} = 1 \text{ J s}^{-1}$) pendant 10 minutes.

Exercice

1. Calculer l'énergie d'un photon d'une onde électromagnétique de longueur d'onde $\lambda = 660 \text{ nm}$ ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$)

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{Js} \times 3.00 \times 10^8 \text{ms}^{-1}}{660 \times 10^{-9} \text{m}} = 3.01 \times 10^{-19} \text{ J} \quad (\text{Pour un photon})$$

2. Calculer la fréquence de cette onde

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8}{660 \times 10^{-9}} = 4.54 \times 10^{14} \text{ Hz}$$

3. Combien de photons de longueur d'onde 660 nm seraient émis par une lampe monochromatique de 100 W ($1 \text{ W} = 1 \text{ J s}^{-1}$) pendant 10 minutes.

Energie totale de la lumière: $E_{\text{tot}} = 100 \text{ J s}^{-1} \times 600 \text{ s} = 6 \times 10^4 \text{ J}$

Nombre de photons de 660 nm: Energie totale divisée par l'énergie d'un photon

$$n = \frac{6 \times 10^4 \text{ J}}{3.01 \times 10^{-19} \text{ J}} = 1.99 \times 10^{23} \text{ photons de } 660 \text{ nm}$$

Structure de l'atome – conception (semi)quantique

Travaux de Niels Bohr

- ▶ l'énergie d'un électron est quantifiée : niveaux d'énergie de l'atome

Valeurs permises
des niveaux d'énergie

$$E_n = - \frac{R_H}{n^2}$$

$$R_H = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$$

ou 13.6 eV



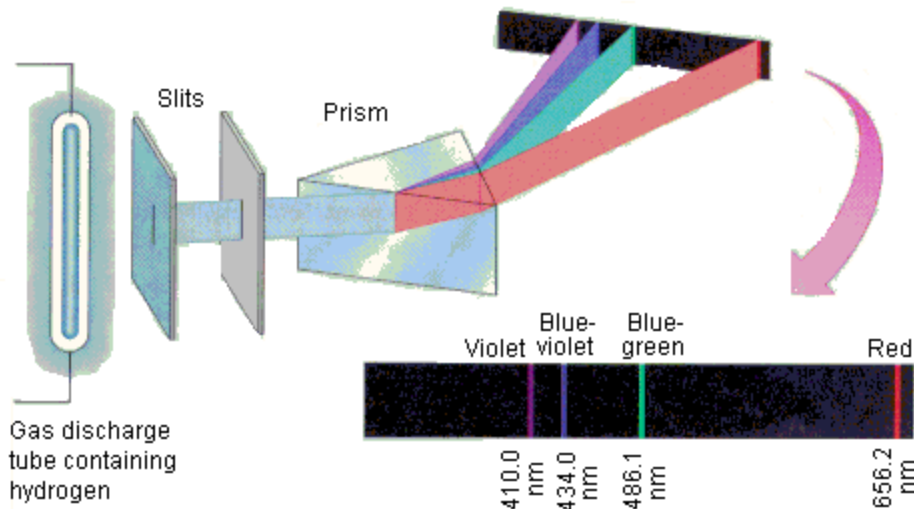
Niels Bohr

n = nombre entier 1, 2, 3...

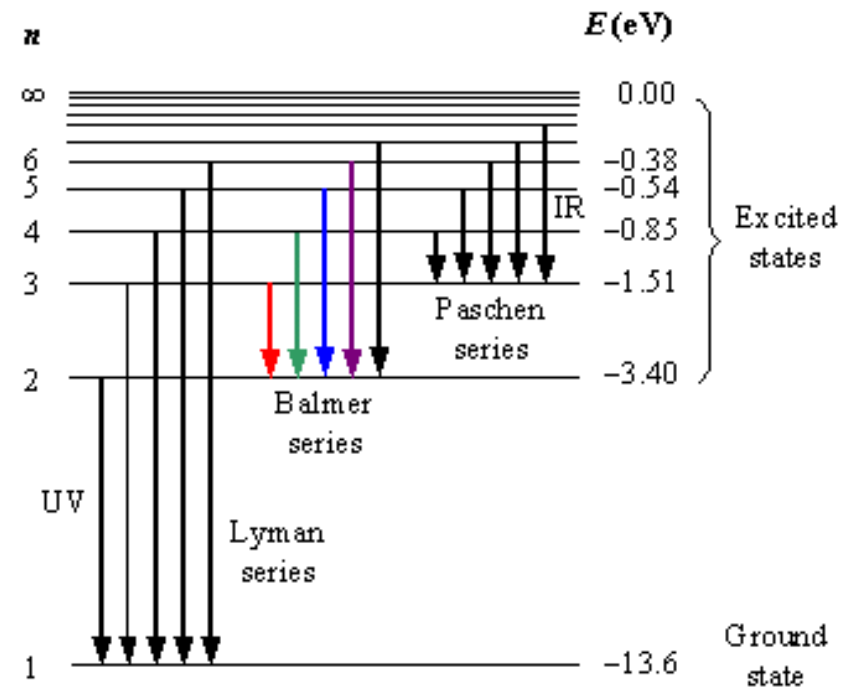
- ▶ **Postulat** : tant qu'un électron demeure à un niveau d'énergie donné, il ne peut pas émettre d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique
- ▶ Chaque valeur possible pour l'énergie correspond à une trajectoire circulaire et une distance noyau-électron
- ▶ **Le plus bas niveau d'énergie correspond à $n = 1$ et à l'orbite la plus proche du noyau**
- ▶ Sans excitation, l'électron se trouve au niveau énergétique le plus bas = **état fondamental**
- ▶ Changements d'énergie de l'électron : **état excité**, ne se font que par sauts discontinus

Modèle de Bohr (pour l'hydrogène)

Radiations émises par des atomes d'hydrogène excités

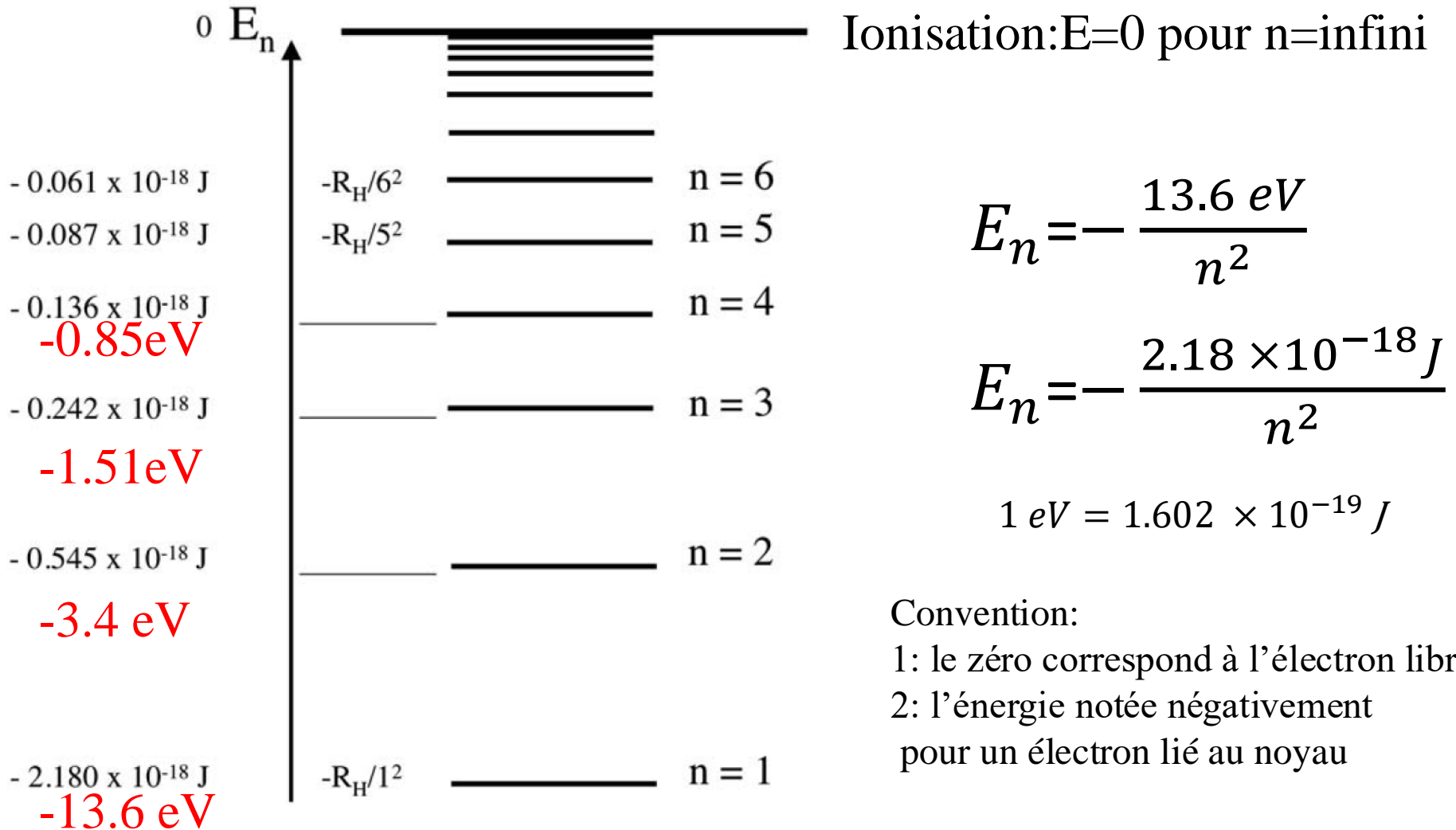


$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$



Spectre de l'hydrogène atomique

Modèle (semi-)quantique de Bohr pour l'atome



Les niveaux les plus stables correspondent aux orbites proches du noyau et ont une faible énergie (grande énergie négative)

QUESTION?

L'énergie de l'état fondamental ($n=1$) d'un atome H est de -13.6 eV.

L'énergie nécessaire pour l'excitation de l'état fondamental à l'état $n=2$ est de:

1: $1/2 \cdot 13.6$ eV

2: $3/4 \cdot 13.6$ eV

3: $1/4 \cdot 13.6$ eV

4: $-3/4 \cdot 13.6$ eV

$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

Modèle de Bohr (résumé)

- 1) Proposition d'un atome stable (sans explication physique: postulat)
- 2) L'énergie d'un électron dans un atome est quantifiée
- 3) Bonne (mais imparfaite) explication du spectre de l'atome d'hydrogène et des atomes avec un seul électron
(correction coulombique pour ions He^+ , Li^{2+} etc. : $E = -Z^2 R_H / n^2$; Z: numéro atomique)

$$E_n = - \frac{Z^2 R_H}{n^2}$$



Z: numéro atomique (1 pour H)

n: nombre quantique principal

Limitations:

- 1) N'explique pas la structure fine des spectres d'hydrogène lorsqu'ils sont soumis à des champs magnétiques (manque une information: le spin)
- 2) Ne s'applique pas aux atomes avec plusieurs électrons

$$E_n = - \frac{Z_{\text{eff}}^2 R_H}{n^2}$$

Différences entre les modèles atomiques de Bohr et de Schrödinger

Modèle de Bohr

L'électron est décrit comme une particule avec une trajectoire précise.

Lois de la mécanique classique selon Newton.

Case quantique: définit seulement le niveau d'énergie de l'électron (orbite)

Modèle de Schrödinger

L'électron est décrit par une fonction d'onde Ψ liée à la probabilité de présence.

Lois de la mécanique quantique selon Schrödinger.

Orbitale: définit à la fois le niveau d'énergie et la probabilité de présence de l'électron.



Le modèle ondulatoire de l'atome

- Equation de Schrödinger (**indépendante du temps**) pour **l'atome d'hydrogène**

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi$$

E: énergie totale de l'atome d'hydrogène

q: charge de l'électron/proton

ψ : *fonction d'onde (orbitale)*

ϵ_0 : permittivité du vide

r: distance à l'origine

$$\hbar = h/2\pi$$

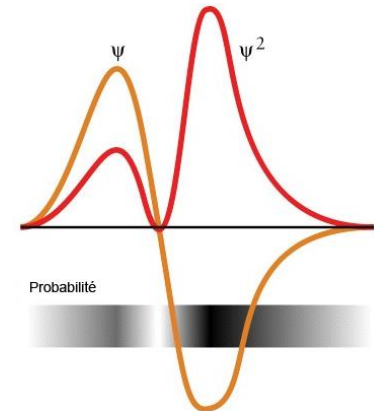
μ : masse réduite de l'atome d'hydrogène

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Solutions cherchées pour E et ψ : (E_1, ψ_1 ; E_2, ψ_2 , E_3, ψ_3 ; \square)

- Interprétation de ψ : ?

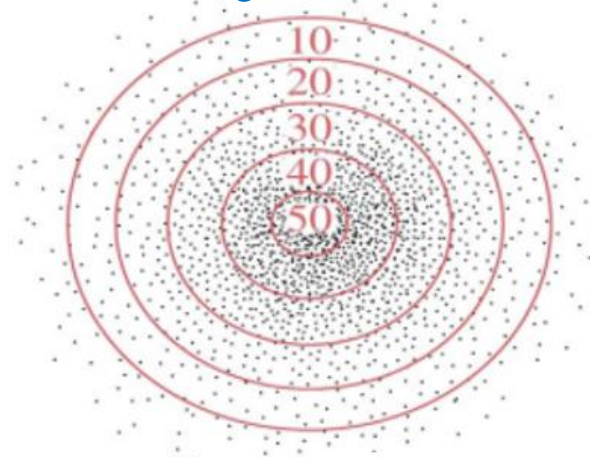
$\psi^2(x)$: **densité de probabilité de présence de l'électron**



orbitale $\psi_{(2,0,0)}$

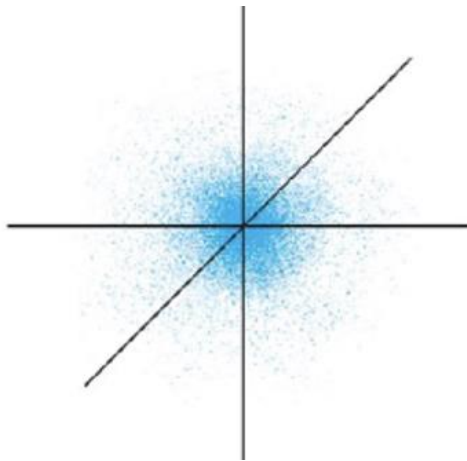
Analogie entre l'orbitale 1s d'un atome hydrogénoïde et un jeu de fléchettes

Une fléchette a été lancée 1500 fois.
 La planche contient 95% des essais
 La densité de fléchette la plus élevée: 50 (densité de probabilité ψ^2)
 Le score le plus probable: 30 (probabilité P)

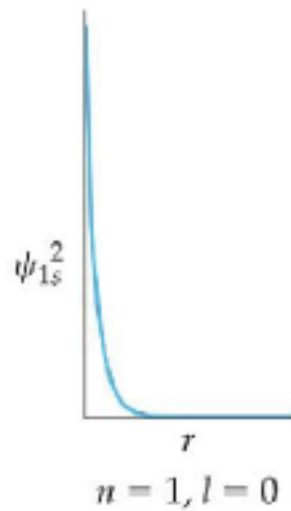


Densité de probabilité
 ψ^2

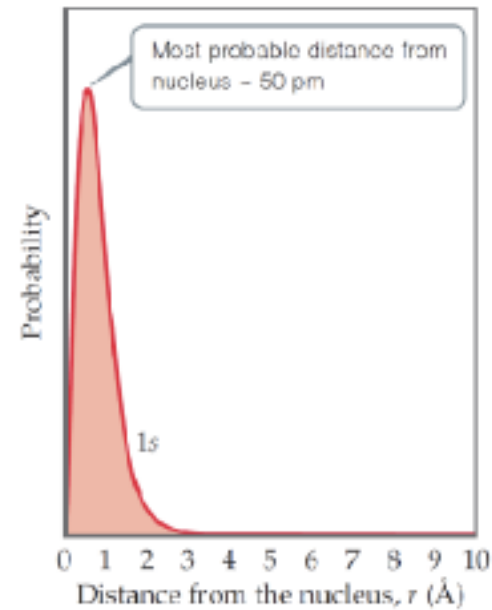
$$\Psi_{1s}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp(-Z r/a_0)$$



Densité électronique
 proportionnelle à la densité des points

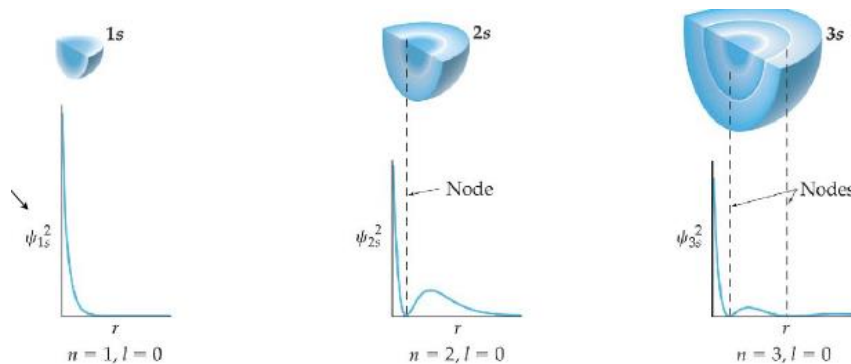


Probabilité: $P = 4\pi r^2 \psi^2 dr$

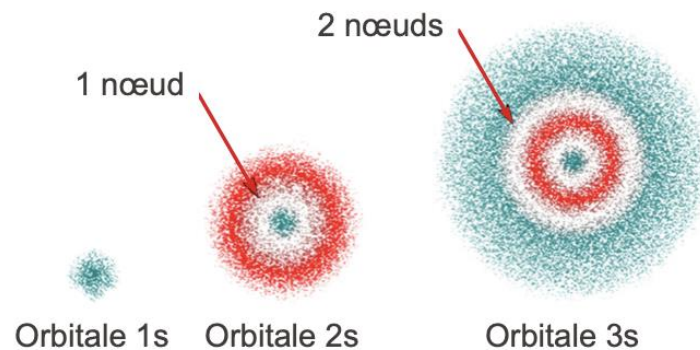


Probabilité maximale à une certaine distance du noyau (53 pm)
 $P = 0$ même si $\psi \neq 0$ pour $r = 0$ (sur le noyau)

Les orbitales (ψ) sont des fonctions mathématiques compliquées

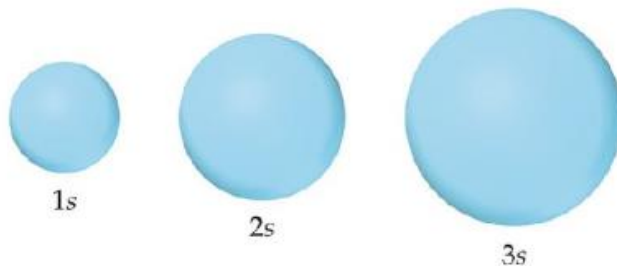


Fonction s'étend jusqu'à l'infini
La fonction ψ change de signe
Présence de nœuds
(probabilité de présence nulle)



La couleur indique le signe (la phase) de ψ
Pas d'interprétation physique profonde
mais explique les combinaisons d'orbitales

- Même signe: interférence constructive
- Signe opposé: interférence destructive



Représentation simplifiée:
enveloppe qui contient 95% de probabilité
de présence de l'électron

Les solutions de l'équation de Schrödinger

1. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène ou numérique pour les atomes à plusieurs électrons n'est pas au programme de ce cours
2. Les diverses solutions de l'équation de Schrödinger sont des orbitales $\psi(n, \ell, m_\ell)$ définies par 3 nombres entiers (appelés nombres quantiques): n, ℓ, m_ℓ □
3. Une orbitale est une expression mathématique.
La représentation géométrique des orbitales n'est possible que pour un pourcentage défini de probabilité de présence d'un électron (par exemple 95%) car l'expression mathématique de l'orbitale n'est pas finie.
4. Pour définir un électron dans une orbitale, nous avons besoin d'un 4^{ème} nombre quantique: le spin m_s
5. Cette description qualitative suffit à expliquer la configuration électronique et la réactivité chimique de la plupart des éléments (définie par les électrons de valence)

Les nombres quantiques

L'état d'un électron dans un atome (énergie, région d'espace) est défini par quatre nombres quantiques

n	ℓ	m_ℓ	m_s
(principal)	(secondaire)	(magnétique)	(magnétique de spin)

$$n \geq 1$$

$$0 \leq \ell \leq n-1$$

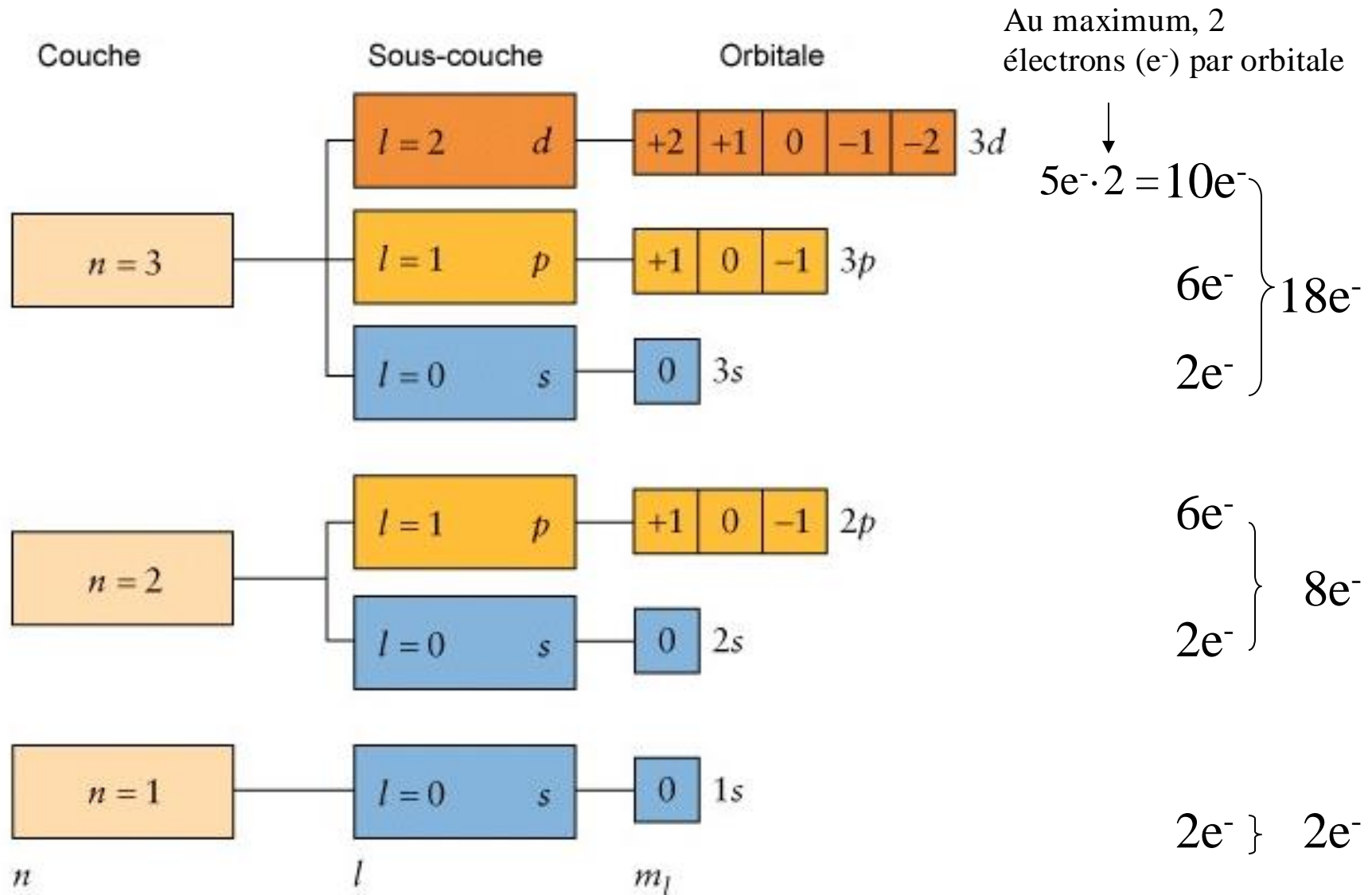
$$-\ell \leq m_\ell \leq \ell$$

$$m_s = \pm 1/2$$

Principe d'exclusion de Pauli:

Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombres quantiques.

Liste des orbitales avec $n = 1, 2, 3$



Représentation simplifiée des orbitales ψ pour différentes valeurs de ℓ (pour une valeur donnée de n)

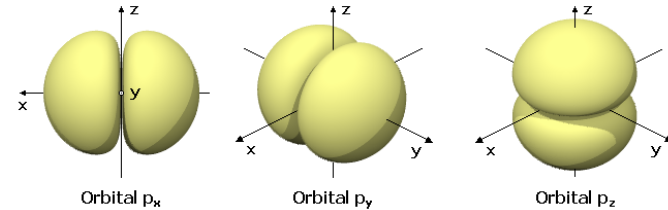
➡ $\ell = 0$, orbitale atomique s

Nuage sphérique dont la densité diminue lorsque la distance au noyau augmente

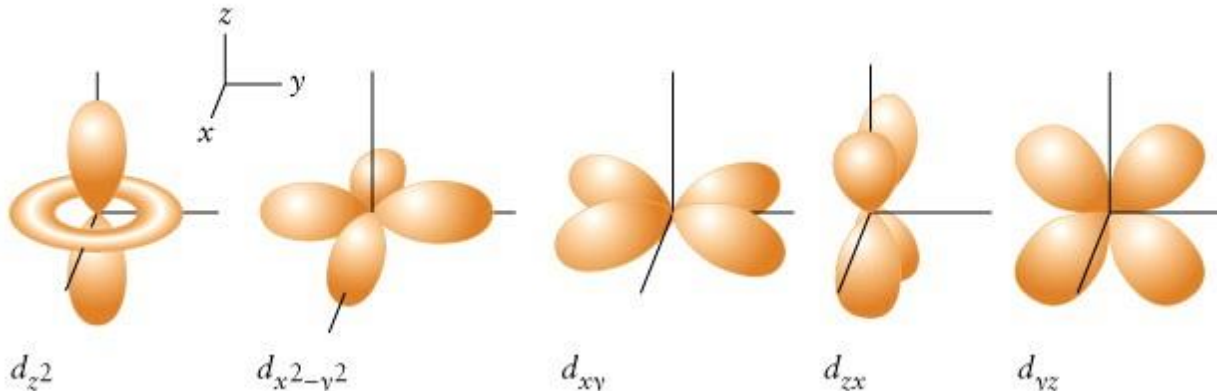


➡ $\ell = 1$, orbitales atomiques p

Nuage avec deux lobes de part et d'autre du noyau
Pas de densité électronique sur le noyau



➡ $\ell = 2$, orbitales atomiques d
Formes plus complexes. Pas de densité électronique au niveau du noyau.



Configuration électronique des atomes

Configuration électronique d'un atome

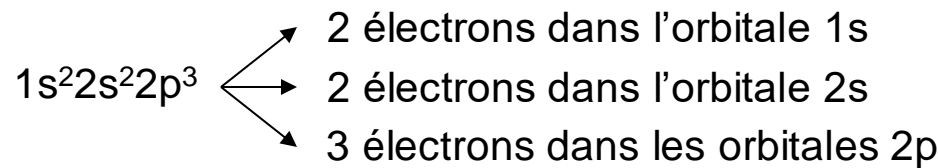
- décrit la distribution des électrons dans ses diverses orbitales

Notation spdf

Niveau d'énergie n ▸ désigné par un nombre

Type d'orbitale l ▸ désigné par une lettre

Exposant ▸ nombre d'électrons se trouvant dans l'orbitale représentée



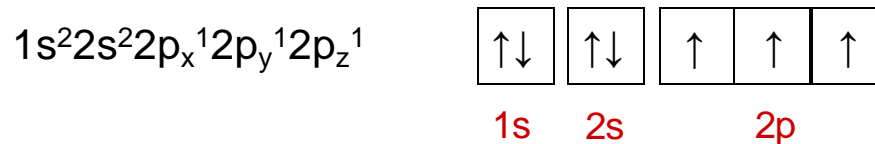
Notation spdf étendue

▸ distribution des électrons dans les orbitales

▸ Représentation des «**cases quantiques**»

Orbitales d'un même type ▸ représentées par des carrés

Electrons ▸ représentés par des flèches



Ce qu'il faut savoir (atomistique)

- Savoir qu'un atome est décrit par la physique quantique (probabiliste)
- Caractériser la lumière (fréquence, longueur d'onde, énergie) émise ou absorbée lors d'une transition électronique
- Calculer les niveaux énergétiques de l'atome d'hydrogène selon la formule de Bohr
- Connaître les combinaisons possibles des nombres quantiques et faire le lien avec les orbitales ou les électrons correspondants
- Etablir les configurations électroniques des atomes et des ions dans leur état fondamental
- Distinguer entre un état fondamental, activé ou impossible d'un atome
- Connaître les tendances périodiques (rayon atomique/ionique, énergie d'ionisation, électronégativité) du tableau des éléments pour les espèces chimiques neutres ou isoélectroniques

Répartition des électrons autour du noyau

- Répartition en couches $n = 1, 2, 3, \dots$ et sous couches (s, p, d, \dots)
- Le remplissage des couches et sous couches se fait selon la séquence d'énergie croissante (principe de construction => Aufbau)

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < \dots$$

- L'état fondamental s'établit à l'aide de:
 - **La règle d'exclusion de Pauli** : Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombres quantiques.
 - **La règle de Hund** : L'arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles.

Configuration électronique

Electrons de valence

Ce sont les électrons de la couche externe

➔ Les électrons occupant la couche ayant la plus grande valeur de n
Ils déterminent en grande partie les propriétés chimiques d'un élément

Quelques exemples

C (carbone), $Z = 6$



4 électrons de valence

N (azote), $Z = 7$



5 électrons de valence

O (oxygène), $Z = 8$



6 électrons de valence

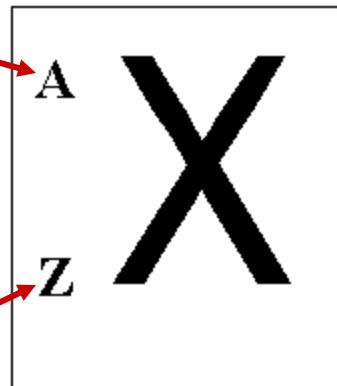
Principe d'exclusion de Pauli

Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombres quantiques.

Une orbitale comprend au plus deux électrons et ces électrons sont nécessairement de spins opposés.

Nombre de
masse
(nbre nucléons)
neutrons, protons =
= nucléons

Numéro
atomique



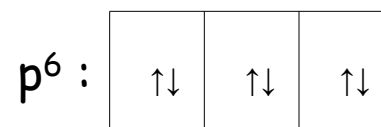
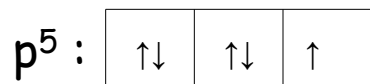
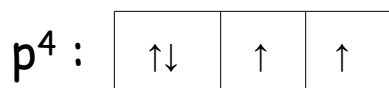
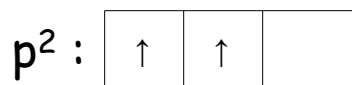
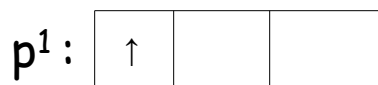
Wolfgang Pauli

Numéro atomique Z : nombre de protons du noyau Z est également égal au nombre d'électron (atome de charge nulle)

Règle de Hund

L'arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles.

Les 3 orbitales atomiques p ($l = 1$) se remplissent donc ainsi :



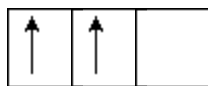
Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



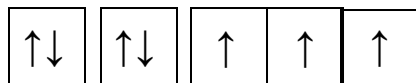
$1s^2$



$2s^2$



$2p_x^1 2p_y^1 2p_z$

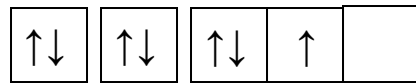


1s

2s

2p

exact

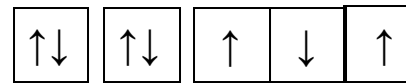


1s

2s

2p

inexact



1s

2s

2p

inexact

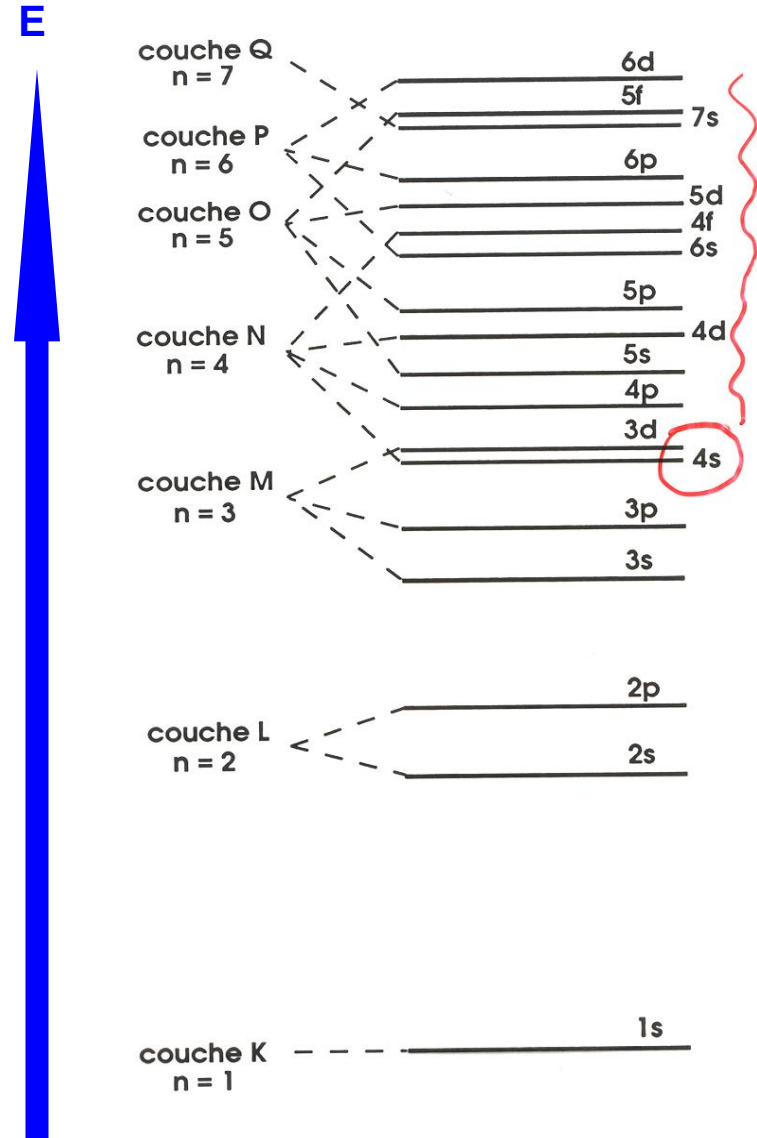
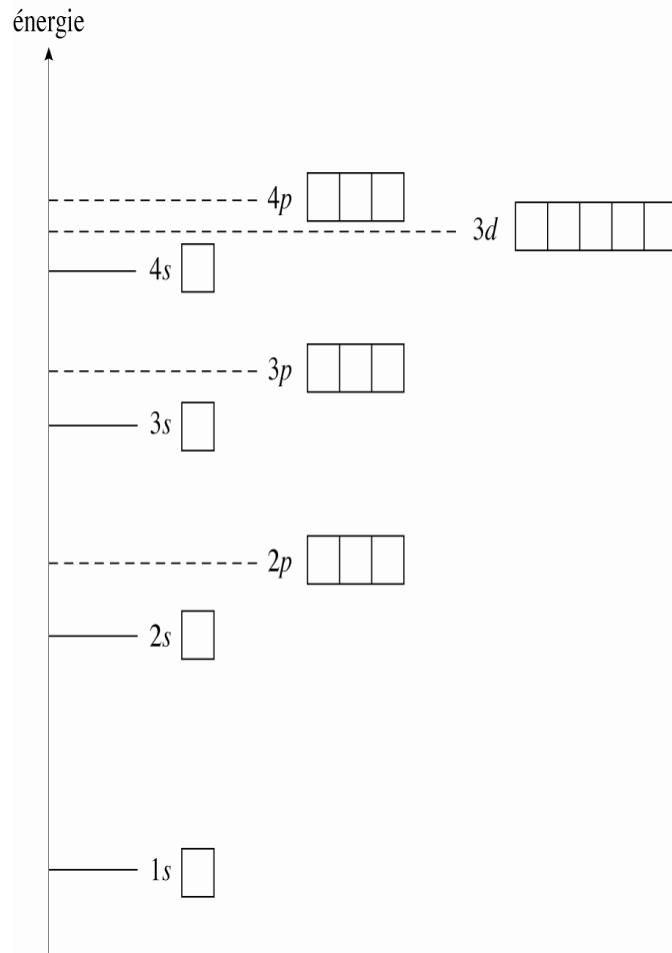


Friedrich Hund
(1896-1997)

↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

Configuration électronique des éléments

A l'état fondamental, les électrons occupent les orbitales correspondant aux **plus bas niveaux d'énergie possible**



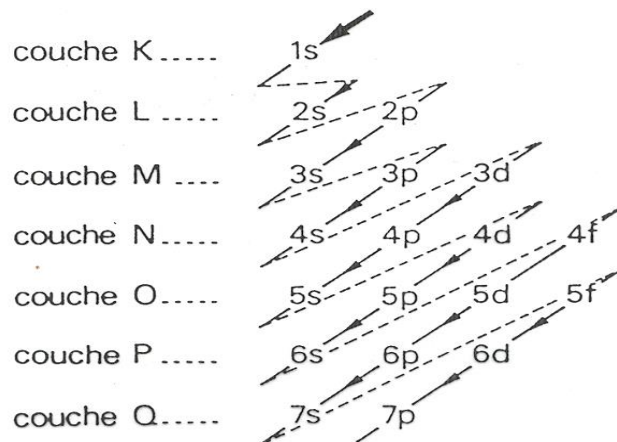
Règle de Klechkowsky ou principe de stabilité:

Les électrons d'un atome (ou d'un ion) occupent dans l'état fondamental les orbitales atomiques de plus basse énergie, c'est-à-dire dans l'ordre :

1s - 2s - 2p - 3s - 3p - 4s - 3d - 4p - 5s - 4d - 5p - 6s - 4f - 5d - 6p - 7s - 5f - 6d - 7p - 8s - ...

Configuration électronique des éléments

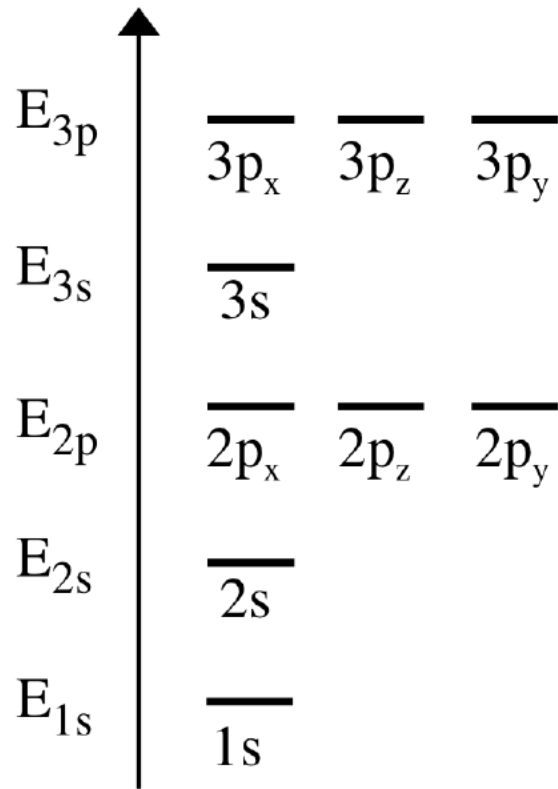
Procédure pour établir la configuration électronique des éléments dans leur état fondamental



Vsevolod Klechkowski
(1900-1972)

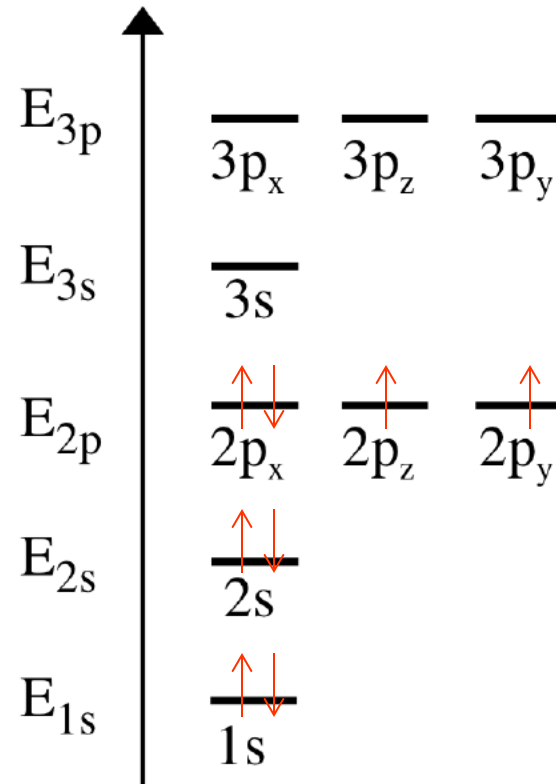
EXERCICE :

écrire la configuration électronique de l'oxygène ($z=8$)



EXERCICE :

écrire la configuration électronique de l'oxygène ($z=8$)



Configuration : $1s^2 2s^2 2p^4$

2 électrons célibataires

QUESTION?

Quelle série de nombres quantiques peut décrire une orbitale atomique?

$$n \geq 1 \quad 0 \leq l \leq n-1 \quad -l \leq m_l \leq l$$

1. $n = 0, \quad l = 0, \quad m_l = 0$

2. $n = 2, \quad l = 2, \quad m_l = 2$

3. $n = 2, \quad l = 1; \quad m_l = 2$

4. $n = 4, \quad l = 3, \quad m_l = -3$

QUESTION

Quelles séries de nombres quantiques peuvent représenter les 7^{ème} et 8^{ème} électrons de l'atome d'oxygène

1. $(2,0,0,+1/2)$ et $(2,0,1,+1/2)$
2. $(2,1,-1,+1/2)$ et $(2,1,+1,+1/2)$
3. $(2,1,-1,+1/2)$ et $(2,1,0,-1/2)$
4. $(2,2,-1,1/2)$ et $(2,2,-1,-1/2)$

Configuration électronique et tableau périodique

1s	Découpage du tableau périodique suivant le remplissage des sous-couches		1s
2s		2p	
3s		3p	
4s	*	3d	4p
5s		4d	5p
6s	*	5d	6p
7s	**	6d	
	*	4f	
	**	5f	

$1s^1$

$1s^2 2s^2$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

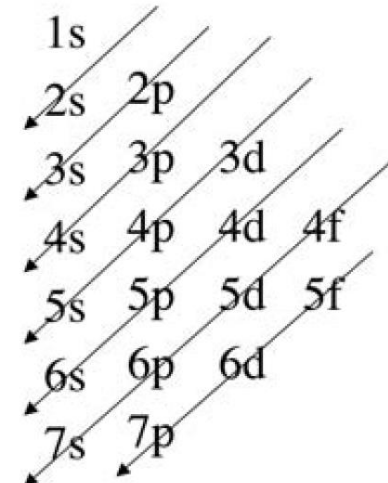
$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

$1s^2$

$1s^2 2s^2 2p^6$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

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

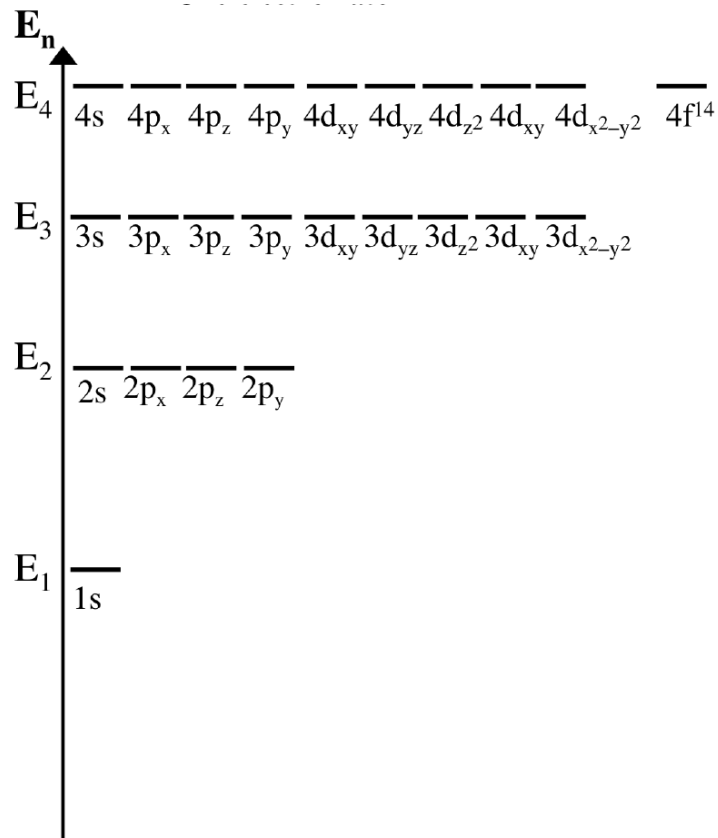


*Les électrons occupent l'orbitale 4s avant l'orbitale 3d (l'atome a une énergie plus basse lorsque l'électron occupe l'orbitale 4s plutôt que 3d).

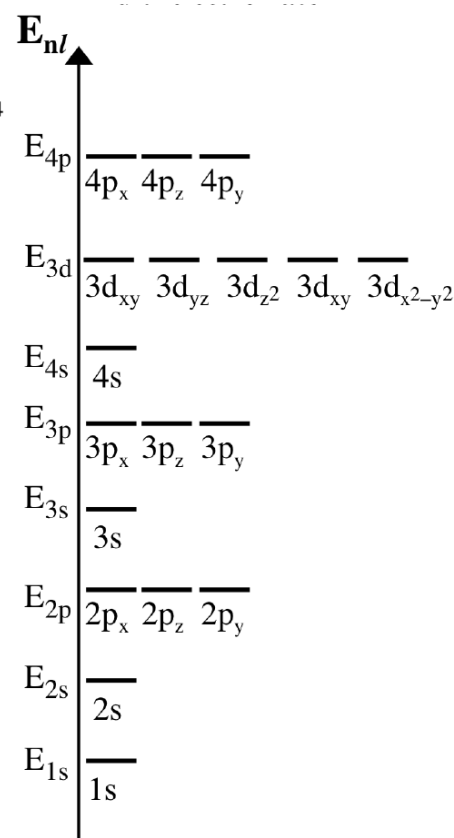
élément	configuration électronique
H	$1s^1$
He	$1s^2$
Li	$1s^2 2s^1$
Be	$1s^2 2s^2$
B	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Comparaison entre atomes hydrogénoïdes et atomes à plusieurs électrons

Atome à 1 électron



Atome à plusieurs électrons



Question

Quel est le **premier** élément du tableau périodique qui contient à coup sûr **un** électron avec les nombres quantiques suivants $n=5$ et $m_l=-3$

1. ${}_{63}\text{Eu}$
2. ${}_{89}\text{Ac}$
3. ${}_{95}\text{Am}$
4. ${}_{102}\text{No}$

Quelques exceptions à la règle de l'Aufbau

Pour décrire l'état fondamental, on ajoute (ou enlève) chaque électron de manière à avoir l'énergie la plus basse (l'atome le plus stable). Des exceptions peuvent apparaître lorsque les niveaux d'énergies des orbitales sont très proches et que des effets secondaires peuvent devenir dominants.

Les orbitales d à moitié ou complètement remplies sont plus stables que prévu et peuvent induire des exceptions à la règle de l'Aufbau.

Exemples: Cr: $[\text{Ar}] 4s^1 3d^5$ (au lieu de $4s^2 3d^4$)
Cu: $[\text{Ar}] 4s^1 3d^{10}$ (au lieu de $4s^2 3d^9$)

Il n'est pas nécessaire de connaître les éléments dérogent à la règle de l'Aufbau pour les atomes (électriquement neutres) du tableau périodique. Il faut juste savoir que ce type d'exception existe.

Exceptions au principe de l'Aufbau

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H Hydrogène 1s¹																	2 He Hélium 1s²
2	3 Li Lithium 1s²2s¹	4 Be Béryllium 1s²2s²				6 C Carbone 1s²2s²2p²							5 B Bore 1s²2s²2p¹	6 C Carbone 1s²2s²2p²	7 N Azote 1s²2s²2p³	8 O Oxygène 1s²2s²2p⁴	9 F Fluor 1s²2s²2p⁵	10 Ne Néon 1s²2s²2p⁶
3	11 Na Sodium [Ne]3s¹	12 Mg Magnésium [Ne]3s²											13 Al Aluminium [Ne]3s²3p¹	14 Si Silicium [Ne]3s²3p²	15 P Phosphore [Ne]3s²3p³	16 S Sulfure [Ne]3s²3p⁴	17 Cl Chlore [Ne]3s²3p⁵	18 Ar Argon [Ne]3s²3p⁶
4	19 K Potassium [Ar]4s¹	20 Ca Calcium [Ar]4s²	21 Sc Scandium [Ar]3d¹4s²	22 Ti Titane [Ar]3d²4s²	23 V Vanadium [Ar]3d³4s²	24 Cr Chrome [Ar]3d⁵4s¹	25 Mn Manganèse [Ar]3d⁵4s²	26 Fe Fer [Ar]3d⁶4s²	27 Co Cobalt [Ar]3d⁷4s²	28 Ni Nickel [Ar]3d⁸4s²	29 Cu Cuivre [Ar]3d¹⁰4s¹	30 Zn Zinc [Ar]3d¹⁰4s²	31 Ga Gallium [Ar]3d¹⁰4s²4p¹	32 Ge Germanium [Ar]3d¹⁰4s²4p²	33 As Arsenic [Ar]3d¹⁰4s²4p³	34 Se Sélénium [Ar]3d¹⁰4s²4p⁴	35 Br Brome [Ar]3d¹⁰4s²4p⁵	36 Kr Krypton [Ar]3d¹⁰4s²4p⁶
5	37 Rb Rubidium [Kr]5s¹	38 Sr Strontium [Kr]5s²	39 Y Yttrium [Kr]4d¹5s²	40 Zr Zirconium [Kr]4d²5s²	41 Nb Niobium [Kr]4d⁴5s¹	42 Mo Molybdène [Kr]4d⁵5s¹	43 Tc Technétium [Kr]4d⁵5s²	44 Ru Ruthénium [Kr]4d⁷5s¹	45 Rh Rhodium [Kr]4d⁸5s¹	46 Pd Paladium [Kr]4d¹⁰	47 Ag Argent [Kr]4d¹⁰5s¹	48 Cd Cadmium [Kr]4d¹⁰5s²	49 In Indium [Kr]4d¹⁰5s²5p¹	50 Sn Étain [Kr]4d¹⁰5s²5p²	51 Sb Antimoine [Kr]4d¹⁰5s²5p³	52 Te Tellure [Kr]4d¹⁰5s²5p⁴	53 I Iode [Kr]4d¹⁰5s²5p⁵	54 Xe Xénon [Kr]4d¹⁰5s²5p⁶
6	55 Cs Césium [Xe]6s¹	56 Ba Baryum [Xe]6s²	57 La Lanthane [Xe]5d¹6s²	72 Hf Hafnium [Xe]4f¹⁴5d²6s²	73 Ta Tantale [Xe]4f¹⁴5d³6s²	74 W Tungstène [Xe]4f¹⁴5d⁴6s²	75 Re Rhénium [Xe]4f¹⁴5d⁵6s²	76 Os Osmium [Xe]4f¹⁴5d⁶6s²	77 Ir Iridium [Xe]4f¹⁴5d⁷6s²	78 Pt Platine [Xe]4f¹⁴5d⁹6s¹	79 Au Or [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s¹	80 Hg Mercure [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²	81 Tl Thallium [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p¹	82 Pb Plomb [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p²	83 Bi Bismuth [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p³	84 Po Polonium [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁴	85 At Astate [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁵	86 Rn Radon [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁶
7	87 Fr Francium [Rn]7s¹	88 Ra Radium [Rn]7s²	89 Ac Actinium [Rn]6d¹7s²	104 Rf Rutherfordium [Rn]5f¹⁴6d²7s²	105 Db Dubnium [Rn]5f¹⁴6d³7s²	106 Sg Seaborgium [Rn]5f¹⁴6d⁴7s²	107 Bh Bohrium [Rn]5f¹⁴6d⁵7s²	108 Hs Hassium [Rn]5f¹⁴6d⁶7s²	109 Mt Meitnerium [Rn]5f¹⁴6d⁷7s²	110 Ds Darmstadtium [Rn]5f¹⁴6d⁸7s²	111 Rg Roentgenium [Rn]5f¹⁴6d⁹7s²	112 Cn Copernicium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²	113 Uut Ununtrium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p¹	114 Fle Flerovium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p²	115 Uup Ununpentium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p³	116 Lv Livermorium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p⁴	117 Uus Ununseptium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p⁵	118 Uuo Ununoctium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p⁶

Exceptions

à l'Aufbau

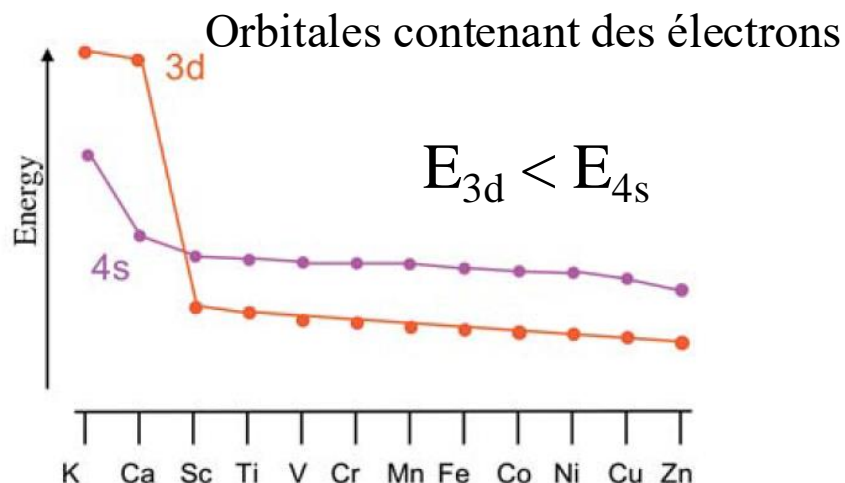
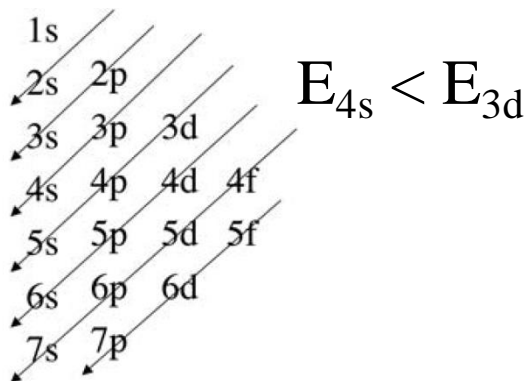
Supposé

58 Ce Cérium [Xe]4f¹5s²	59 Pr Praséodyme [Xe]4f³5s²	60 Nd Néodyme [Xe]4f⁴5s²	61 Pm Prométhium [Xe]4f⁵5s²	62 Sm Samarium [Xe]4f⁶5s²	63 Eu Europium [Xe]4f⁷5s²	64 Gd Gadolinium [Xe]4f⁷5s¹	65 Tb Terbium [Xe]4f⁹5s²	66 Dy Dysprosium [Xe]4f¹⁰5s²	67 Ho Holmium [Xe]4f¹¹5s²	68 Er Erbium [Xe]4f¹²5s²	69 Tm Thulium [Xe]4f¹³5s²	70 Yb Ytterbium [Xe]4f¹⁴5s²	71 Lu Lutécium [Xe]4f¹⁴5s²
90 Th Thorium [Rn]6d²7s²	91 Pa Protactinium [Rn]5f²6d¹7s²	92 U Uranium [Rn]5f³6d¹7s²	93 Np Neptunium [Rn]5f⁴6d¹7s²	94 Pu Plutonium [Rn]5f⁶7s²	95 Am Américium [Rn]5f⁷7s²	96 Cm Curium [Rn]5f⁷7s²	97 Bk Berkélium [Rn]5f⁹7s²	98 Cf Californium [Rn]5f¹⁰7s²	99 Es Einsteinium [Rn]5f¹¹7s²	100 Fm Fermium [Rn]5f¹²7s²	101 Md Mendélévium [Rn]5f¹³7s²	102 No Nobélium [Rn]5f¹⁴7s²	103 Lr Lawrencium [Rn]5f¹⁴7s²

Quelques exceptions à la règle de l'Aufbau

2ème type d'exception (valable pour les cations: espèces chimiques avec moins d'électrons que de protons). Empiriquement, on enlève d'abord les électrons avec le nombre quantique principal n le plus grand. On n'enlève pas toujours les électrons dans l'ordre prévu par la règle de l'Aufbau. Cette exception ne concerne pas les anions: espèces chimiques avec plus d'électrons que de protons).

Orbitales vides (règle de l'Aufbau)

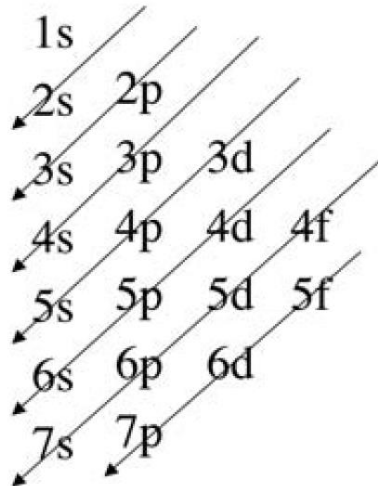


Pour orbitales contenant des électrons, l'énergie des orbitales 3d est plus faible que celle des orbitales 4s. Pour décrire l'état le plus stable d'un cation, on enlève les électrons des orbitales occupées d'énergies les plus élevées (4s dans cet exemple)

Question

La configuration électronique la plus stable de l'ion Fe^{2+} est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ (juste ou faux?)

Info : Fe: 26 électrons



Question

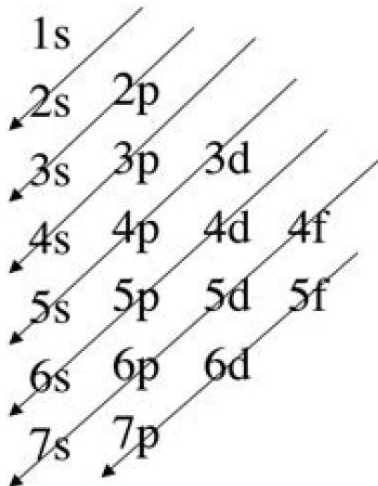
La configuration électronique la plus stable de l'ion Fe^{2+} est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ (juste ou faux?)

Info : Fe: 26 électrons

FAUX!

La configuration électronique de l'atome Fe est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

La configuration électronique de l'ion Fe^{2+} est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$



On enlève les deux électrons de la couche 4 s ($n = 4$)
avant les électrons de la couche 3d ($n = 3$)

La configuration électronique de ${}_{26}\text{Fe}^{2+}$ n'est pas
égale à celle de ${}_{24}\text{Cr}$ même s'ils ont
le même nombre d'électrons

Question

Quel est le nombre obtenu en additionnant les électrons célibataires des trois espèces chimiques suivantes (à l'état fondamental) :

Sn , Sn^{2+} et Sn^{4+}

1. 0

2. 2

3. 6

4. 8

Résumé

1. Modèle atomique:

Bohr (\pm valable pour atomes avec 1 seul électron)

Schrödinger: modèle actuel, très performant,

solution analytique pour atomes avec 1 électron

solutions numériques pour atomes polyélectroniques

2. Solutions de l'équation de Schrödinger: orbitales

partie de l'espace où on a une certaine probabilité de trouver un électron avec une certaine énergie.

notation physique: Ψ_{n,l,m_l}

notation chimique : s, p, d, f

3. Minimisation de l'énergie en fonction du remplissage des orbitales atomiques par des électrons aboutit au **tableau périodique**

Le tableau périodique des éléments

Sommaire

1. Règles modernes de construction (basées sur la configuration électronique)
2. Un petit retour en arrière (perspective historique)
3. Tendances périodiques (“lecture en diagonale”)

1. Théorie atomique de John Dalton 1850

2. Amadeo du Quaregna, comte d'Avogadro

La mole d'un corps gazeux occupe un volume de 22.4 l

aux conditions normales de pression (1 atm) et de température ($T=0^{\circ}\text{C}$)

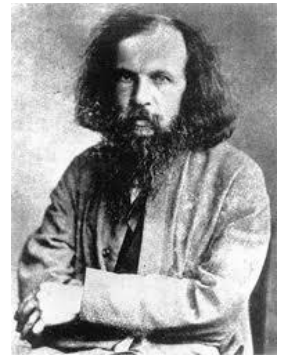
Pour un corps pur: on peut ainsi obtenir la masse atomique



Avogadro
1776-1856

3. Julius Lothar Meyer

1864: tentative de classification
utilisant la masse atomique et les propriétés chimiques



Dimitri Mendeleev
1834-1907

4: Dimitri Mendeleev

1869: classification périodique des éléments

reliant la masse et les propriétés chimiques

Postule l'existence d'éléments manquants encore à découvrir

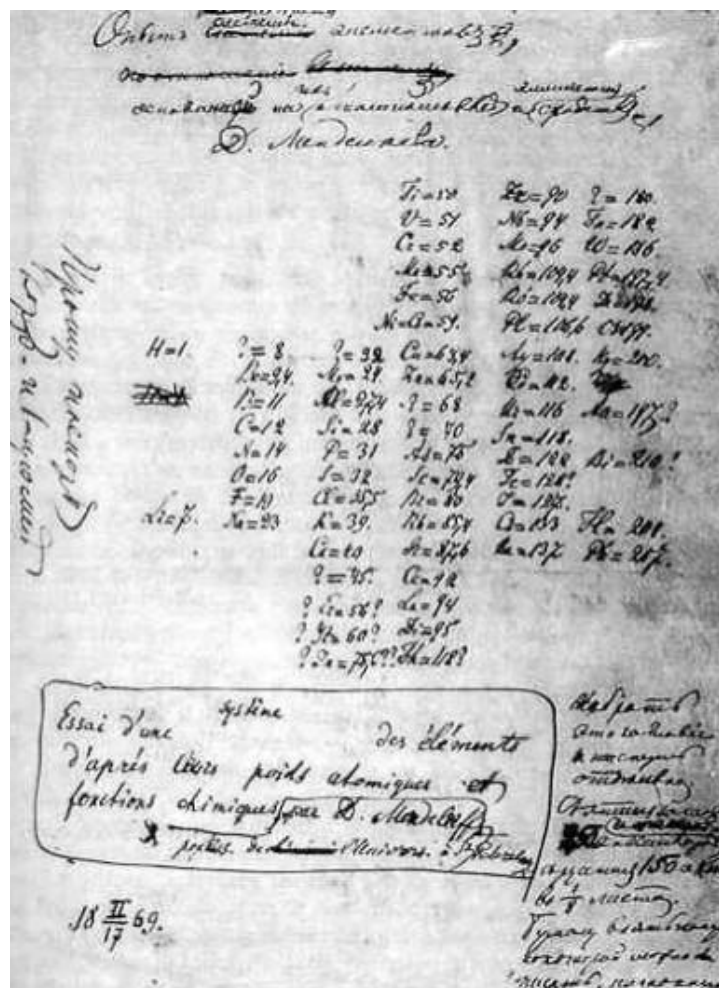
Triomphe après la découverte de certains de ces éléments manquants



Henry Moseley
1887-1915

5. Henry Moseley (1887-1915)

Découverte du numéro atomique (charge du noyau) à partir de l'émission des rayons X des éléments



I	II	III	IV	V	VI
			Ti = 50	Zr = 90	? = 180
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn = 55	Rh = 104.4	Pt = 197.4
			Fe = 56	Ru = 104.4	Ir = 198
			Ni = Co = 59	Pd = 106.6	Os = 199
H = 1	? = 8	? = 22	Cu = 63.4	Ag = 108	Hg = 200
	Be = 9.4	Mg = 24	Zn = 65.2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27.4	? = 68	Ur = 116	Au = 197
	C = 12	Si = 28	? = 70	Sb = 118	
	N = 14	P = 31	As = 75	Sn = 122	Bi = 210
	O = 16	S = 32	Se = 79.4	Te = 128 ?	
	F = 19	Cl = 35.5	Br = 80	I = 127	
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85.4	Cs = 133	Tl = 204
		Ca = 40	Sr = 87.6	Ba = 137	Pb = 207
		? = 45	Ce = 92		
		? Er = 56	La = 94		
		? Yt = 60	Di = 95		
		? In = 75.6	Th = 118 ?		

propriétés chimiques: lignes

colonnes: masse atomique

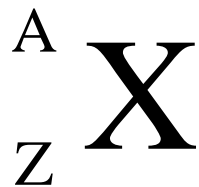
Tableau inversé par rapport au tableau d'aujourd'hui

Numéro Atomique Z

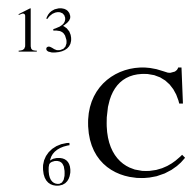
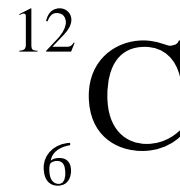
numéro atomique Z = nombre des protons
= nombre des électrons (pour atome neutre)

nombre de masse A = nombre de protons + neutrons

Masse atomique réelle doit tenir compte de la présence d'isotopes
et du défaut de masse due à l'énergie de liaison du noyau.



A nombre de masse
Z numéro atomique



A - Z = nombre de neutrons: 6 7

Les isotopes d'un élément se distinguent seulement par leur nombre de neutrons dans le noyau. Exemple: ${}_{92}^{235}\text{U}$; ${}_{92}^{238}\text{U}$

Classification périodique des éléments

- ➡ Classification des éléments selon l'ordre croissant du numéro atomique Z
- ➡ 92 premiers éléments: naturels. Pas d'autre possibilité, pas de case vide
- ➡ Les autres éléments (93- 118) ont été préparés artificiellement.
- ➡ Les **colonnes** sont désignées par un numéro de 1 à 18 ou par des symboles (IA, IIA, IIB...)
- ➡ Les éléments d'une **même colonne** constituent un **groupe** et certains portent un nom particulier (métaux alcalins, gaz rares, halogènes, alcalino-terreux...)
- ➡ Les **lignes** sont appelées **périodes**. Elles sont numérotées de 1 à 7
- ➡ Quatre **blocs** d'éléments (s, p, d, f) en fonction de la nature du niveau en cours de remplissage.

Les membres d'une même colonne ont tous le même nombre d'électrons de valence (électrons sur la dernière couche électronique de l'atome). Ils ont des propriétés semblables.

Le tableau périodique et le principe d'Aufbau

Diagram illustrating the distribution of elements in the periodic table, categorized by groups and blocks.

Éléments des groupes principaux (Main Group Elements):

- Bloc s** (Yellow): IA, IIA
- Bloc p** (Pink): IIIB, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII B

Éléments de transition (Transition Elements):

- Bloc d** (Blue): IIIA, IVA, VA, VIA, VIIA, VIIIA, IB, IIB

Éléments de transition internes (Inner Transition Elements):

- Bloc f** (Orange): 4f, 5f

The diagram shows the arrangement of elements across periods $n=1$ to $n=7$, with specific orbital designations (s, p, d, f) and group labels (IA, IIA, IIIA, IVB, VB, VIB, VIIB, VIII B, IB, IIB) indicating the position of each element.

Le tableau périodique est construit selon le principe de l'Aufbau, ajout d'un électron (et d'un proton) à l'atome dont le numéro atomique est immédiatement inférieur.

Le tableau périodique permet une lecture rapide de la configuration électronique d'un atome en se basant sur la configuration électronique du gaz rare précédent et sur la position de l'élément dans le tableau

3. Tendances périodiques

Rayon atomique

Energie d'ionisation

Affinité électronique

Electronégativité

Pouvoir oxydant

Caractère métallique

Structure atomique

données expérimentales

obtenues dans des gaz

Liaison chimique

molécules / matériaux

Rayon atomique

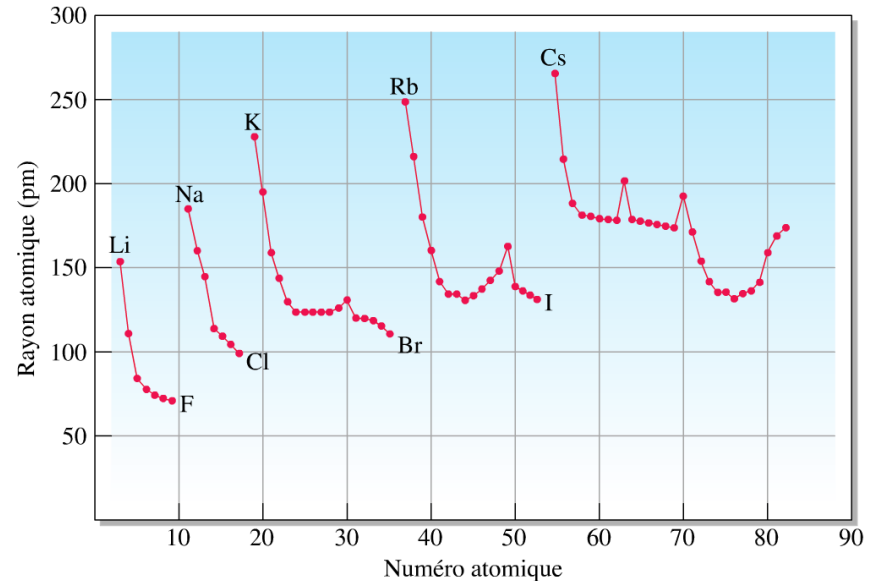
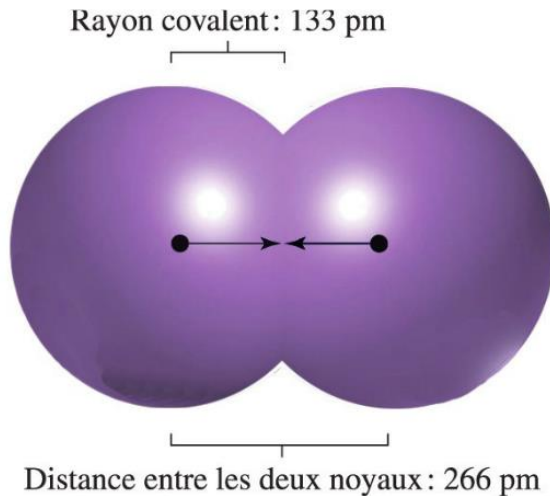
Définitions:

- 1) Calcul (90 % de probabilité de trouver l'électron)
- 2) Demi-distance entre les centres d'atomes voisins (données expérimentales)
- 3) Rayons covalents (mesurés dans une molécule diatomique) et ioniques
- 4) On distingue aussi entre rayon métallique (mesuré dans un solide) et van der Waals (distance mesurée lors d'un contact entre deux atomes)



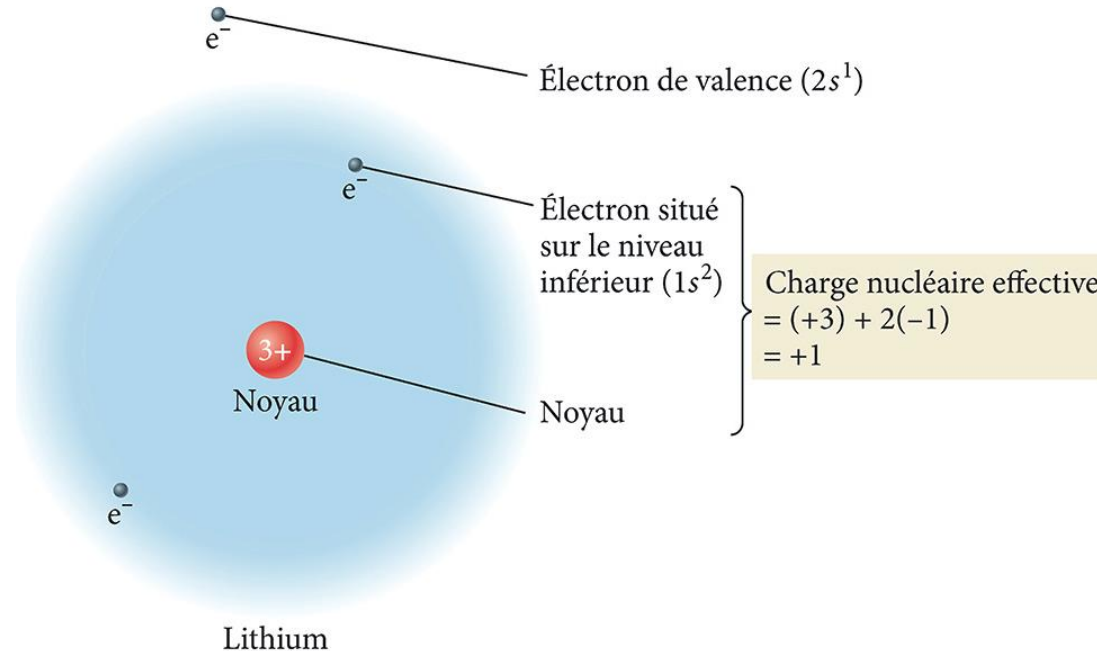
Représentation de la molécule de I_2

$1.33 \cdot 10^{-10} \text{ m}$



Charge nucléaire effective Z_{eff}

Charge effective Z_{eff} : charge nucléaire réelle – effet d'écran des autres électrons



Obtenu par calcul avec des méthodes avancées

Approximation avec les règles suivantes, pour un électron périphérique avec les nombres quantiques n, l :

Electrons avec la même valeur de n et l : effet écran négligeable

Électrons des niveaux inférieurs ($n' < n$): écran total

Electrons avec la même valeur de n mais avec $l' < l$: effet écran partiel

Rayon atomique

Définition: demi-distance entre les centres d'atomes voisins

n augmente de haut en bas
le long d'un groupe

	1	2	13	14	15	16	17	18
2	Li 157	Be 112	B 88	C 77	N 74	O 66	F 64	Ne
3	Na 191	Mg 160	Al 143	Si 118	P 110	S 104	Cl 99	Ar
4	K 235	Ca 197	Ga 153	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114	Kr
5	Rb 250	Sr 215	In 167	Sn 158	Sb 141	Te 137	I 133	Xe
6	Cs 272	Ba 224	Tl 171	Pb 175	Bi 182	Po 167	At	Rn

Z_{eff} augmente de gauche à droite le long d'une période

Z_{eff} varie très peu entre les métaux de transition d'une même période,
lanthanides, actinides (électrons supplémentaires: électrons de cœur)

$$r \propto \frac{n^2 a_0}{Z_{\text{eff}}} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}$$

Question

Qui a le plus grand rayon atomique?

1. K (numéro atomique 19)
2. Cl (numéro atomique 17)

	1	2	3	4										14	15	16	17	18
1	1 H Hydrogène 1s ¹																	2 He Hélium 1s ²
2	3 Li Lithium 1s ² 2s ¹	4 Be Béryllium 1s ² 2s ²				6 C Carbone 1s ² 2s ² 2p ²	Numéro atomique symbole Nom de l'élément Configuration électronique						5 B Bore 1s ² 2s ² 2p ¹	6 C Carbone 1s ² 2s ² 2p ²	7 N Azote 1s ² 2s ² 2p ³	8 O Oxygène 1s ² 2s ² 2p ⁴	9 F Fluor 1s ² 2s ² 2p ⁵	10 Ne Neon 1s ² 2s ² 2p ⁶
3	11 Na Sodium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	12 Mg Magnésium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²											13 Al Aluminium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹	14 Si Silicium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²	15 P Phosphore 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³	16 S Sulfure 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴	17 Cl Chlore 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵	18 Ar Argon 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
4	19 K Potassium [Ar] 4s ¹	20 Ca Calcium [Ar] 4s ²	21 Sc Scandium [Ar] 3d ¹ 4s ²	22 Ti Titane [Ar] 3d ² 4s ²	23 V Vanadium [Ar] 3d ³ 4s ²	24 Cr Chrome [Ar] 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn Manganèse [Ar] 3d ⁵ 4s ²	26 Fe Fer [Ar] 3d ⁶ 4s ²	27 Co Cobalt [Ar] 3d ⁷ 4s ²	28 Ni Nickel [Ar] 3d ⁸ 4s ²	29 Cu Cuivre [Ar] 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn Zinc [Ar] 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga Gallium [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	32 Ge Germanium [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	33 As Arsenic [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	34 Se Sélénium [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	35 Br Brome [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	36 Kr Krypton [Ar] 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

Question

Qui a le plus grand rayon ionique?

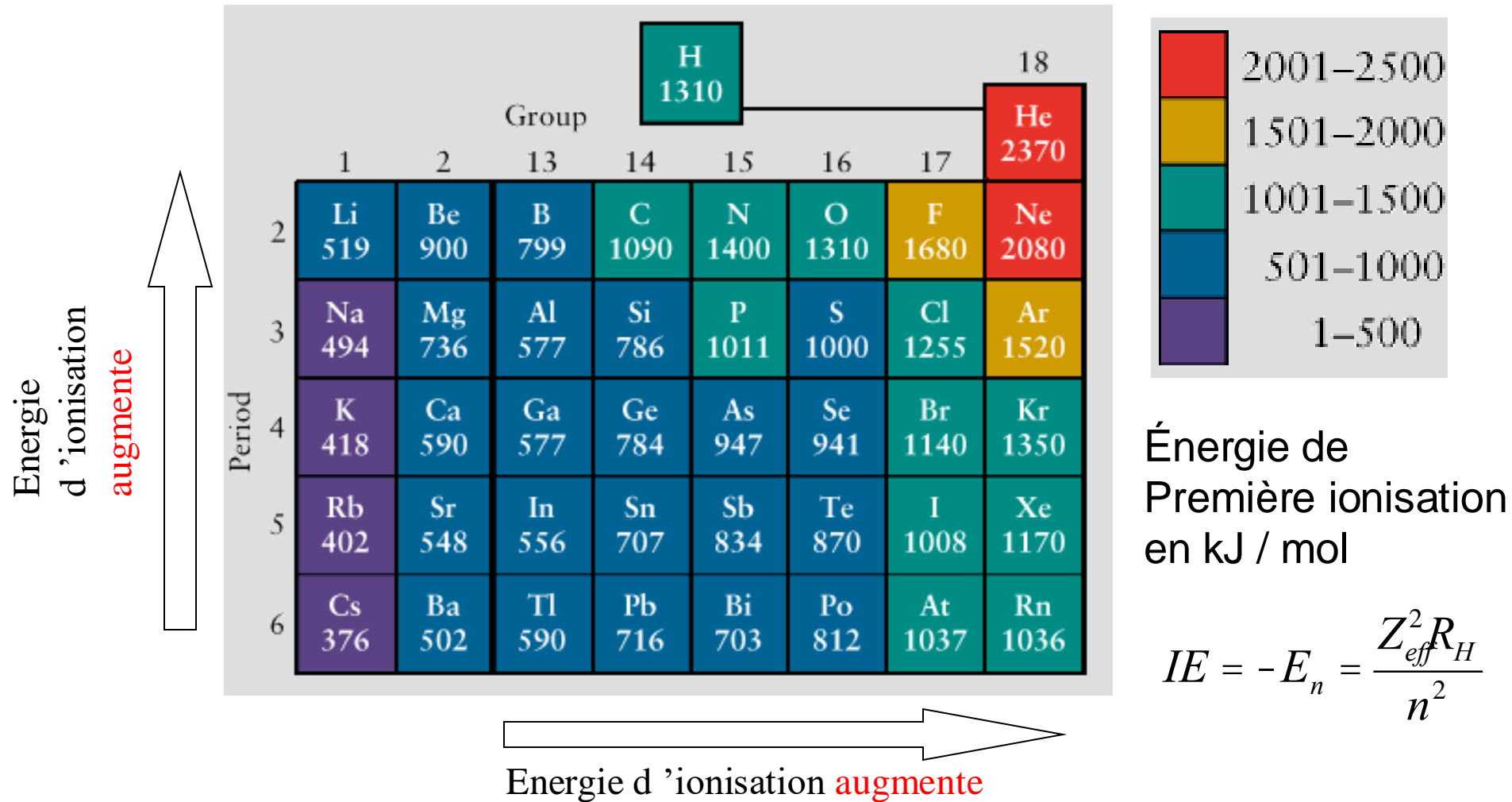
1. K^+
2. Cl^-

	1	2	3	4							14	15	16	17	18			
1	1 H Hydrogène 1s¹														2 He Hélium 1s²			
2	3 Li Lithium 1s²2s¹	4 Be Béryllium 1s²2s²			6 C Carbone 1s²2s²2p²	Numéro atomique symbole Nom de l'élément Configuration électronique					5 B Bore 1s²2s²2p¹	6 C Carbone 1s²2s²2p²	7 N Azote 1s²2s²2p³	8 O Oxygène 1s²2s²2p⁴	9 F Fluor 1s²2s²2p⁵	10 Ne Neon 1s²2s²2p⁶		
3	11 Na Sodium [Ne]3s¹	12 Mg Magnésium [Ne]3s²									13 Al Aluminium [Ne]3s²3p¹	14 Si Silicium [Ne]3s²3p²	15 P Phosphore [Ne]3s²3p³	16 S Soufre [Ne]3s²3p⁴	17 Cl Chlore [Ne]3s²3p⁵	18 Ar Argon [Ne]3s²3p⁶		
4	19 K Potassium [Ar]4s¹	20 Ca Calcium [Ar]4s²	21 Sc Scandium [Ar]3d¹4s²	22 Ti Titane [Ar]3d²4s²	23 V Vanadium [Ar]3d³4s²	24 Cr Chrome [Ar]3d⁵4s¹	25 Mn Manganèse [Ar]3d⁵4s²	26 Fe Fer [Ar]3d⁶4s²	27 Co Cobalt [Ar]3d⁷4s²	28 Ni Nickel [Ar]3d⁸4s²	29 Cu Cuivre [Ar]3d¹⁰4s¹	30 Zn Zinc [Ar]3d¹⁰4s²	31 Ga Gallium [Ar]3d¹⁰4s¹4p¹	32 Ge Germanium [Ar]3d¹⁰4s²4p²	33 As Arsenic [Ar]3d¹⁰4s²4p³	34 Se Sélénium [Ar]3d¹⁰4s²4p⁴	35 Br Brome [Ar]3d¹⁰4s²4p⁵	36 Kr Krypton [Ar]3d¹⁰4s²4p⁶

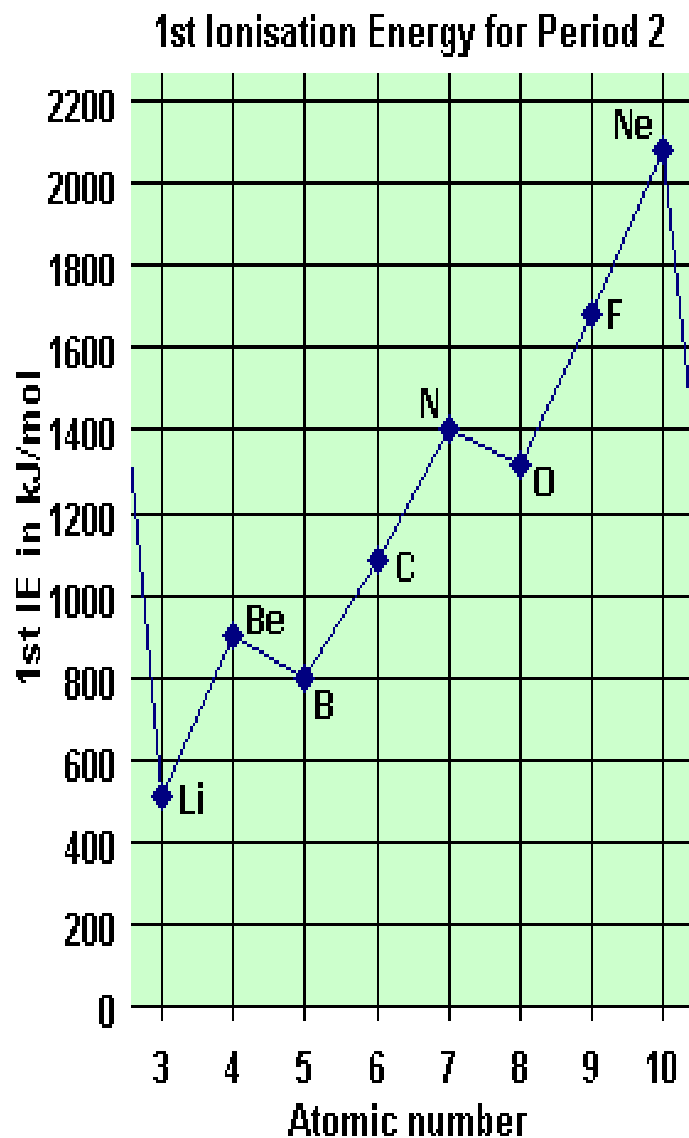
Energie d'ionisation

Energie nécessaire pour arracher un électron et former un ion positif. Ex: $\text{K} \longrightarrow \text{K}^+ + \text{e}^-$

Diminue de haut en bas d'un groupe et augmente le long d'une période



Valeur expérimentale de l'énergie de première ionisation



Tendance OK: augmentation de l'énergie d'ionisation
modèle simple

Anomalie: Schrödinger (influence de
la sous-couche)

N
[1s²2s²2p³]

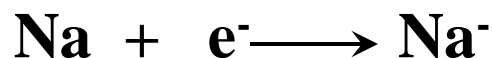
O
[1s²2s²2p⁴]

Be [1s²2s²]

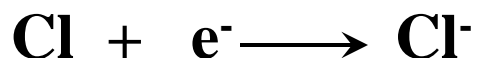
B
[1s²2s²2p¹]

Affinité électronique (AE)

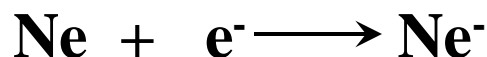
Energie associée à la fixation d'un électron par un atome en phase gazeuse.
(Stabilité relative de l'anion par rapport à l'atome neutre)



$$\text{AE} = -53 \text{ kJ/mol}$$



$$\text{AE} = -349 \text{ kJ/mol}$$



$$\text{AE} > 0$$

Tendance analogue à celle de l'énergie d'ionisation
Gaz nobles : exceptions (affinité électronique positive)



Il existe deux conventions
de signe différentes pour AE

Prédiction des propriétés des éléments

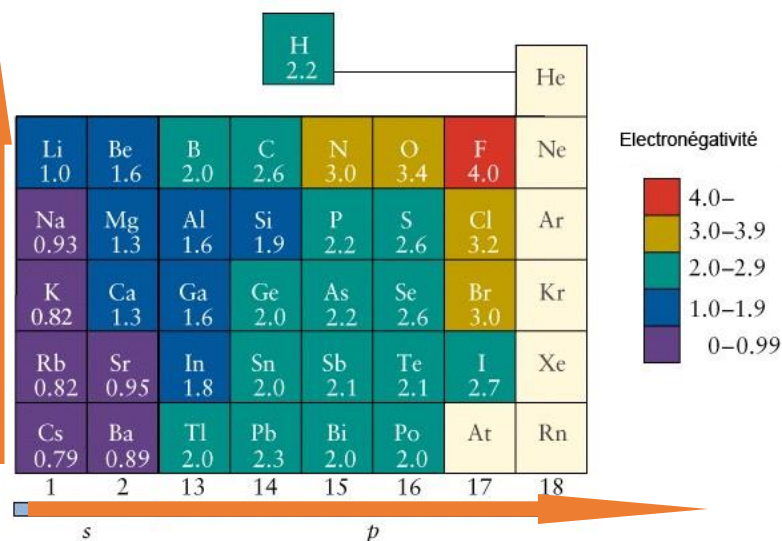
Electronégativité

- ➔ Traduit le pouvoir **electro-attracteur** d'un **atome lorsqu'il est engagé dans une liaison**. Echelle arbitraire proposée par Pauling allant de 0 à 4 en utilisant les énergies de liaison des molécules diatomiques.
- Echelle de Mulliken: électronégativité proportionnelle à la moyenne de l'énergie d'ionisation et de l'affinité électronique

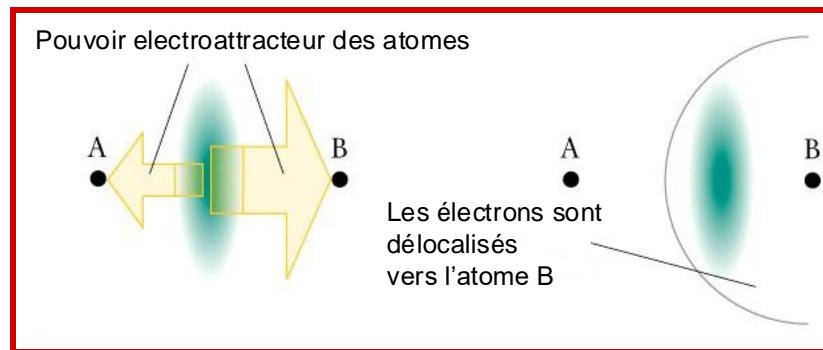


Linus Pauling

Electronégativité augmente



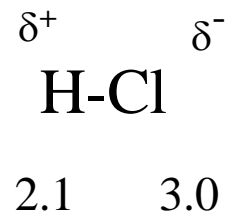
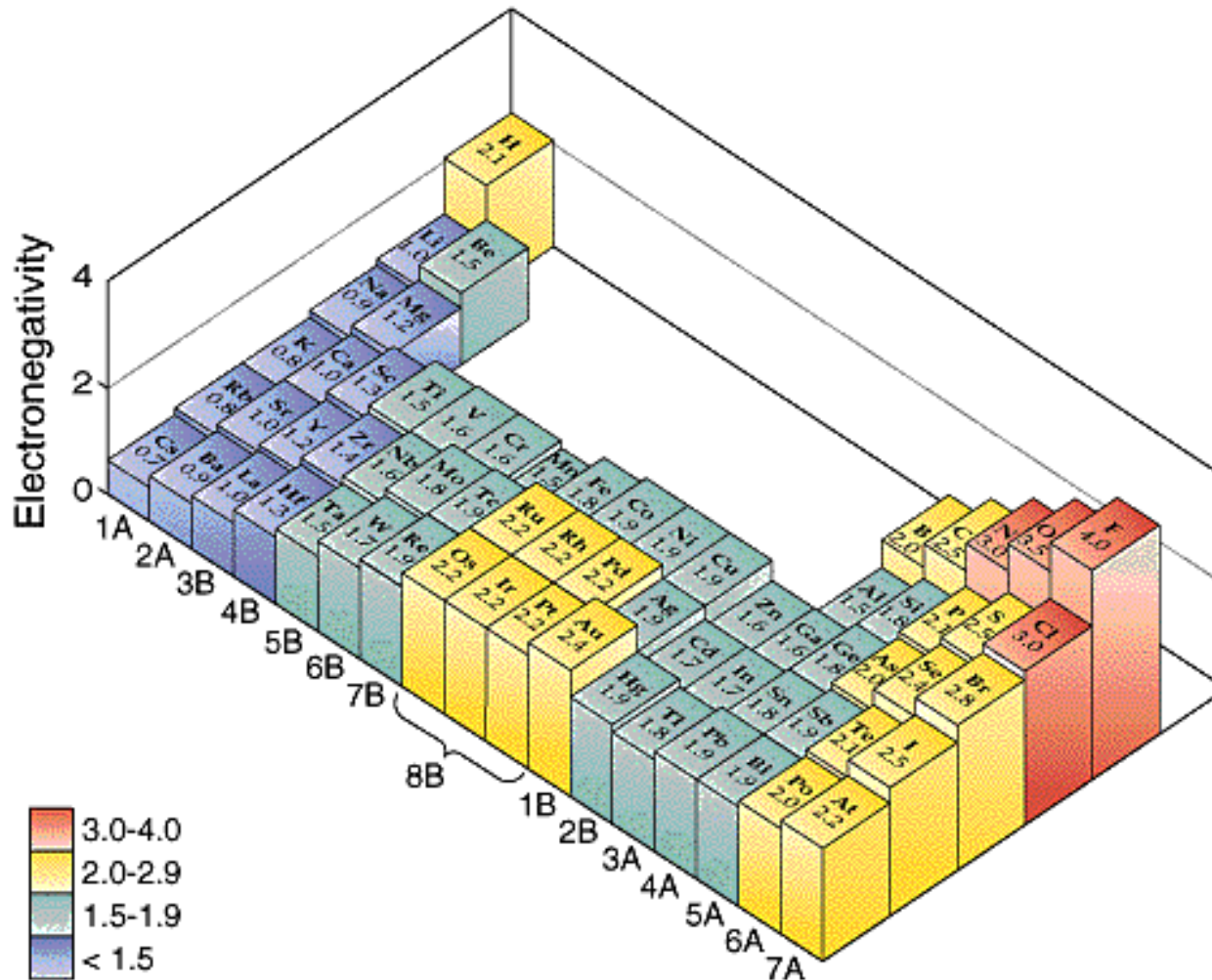
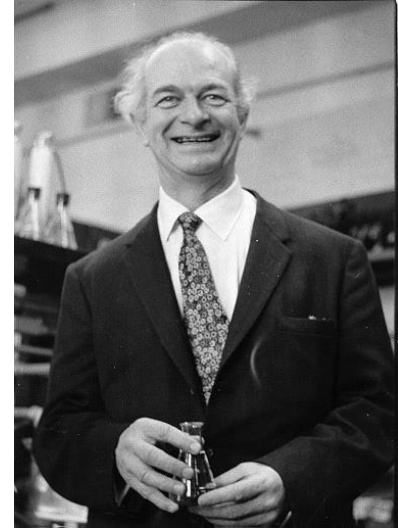
Electronégativité augmente



- Deux atomes d'électronégativités semblables partagent les électrons de façon égale dans la liaison.
- Lorsque les électronégativités sont très différentes les électrons sont délocalisés sur l'atome le plus électronégatif de la liaison.

Electronégativité

Traduit le pouvoir **électroattracteur** d'un atome lorsqu'il est engagé dans une liaison. **Echelle arbitraire** proposée par Pauling allant de 0 à 4.



Electronégativité et énergie d'ionisation

Atomes isolés

Energie d'ionisation
faible

molécule

Electronégativité
faible

molécule

Fort caractère
métallique

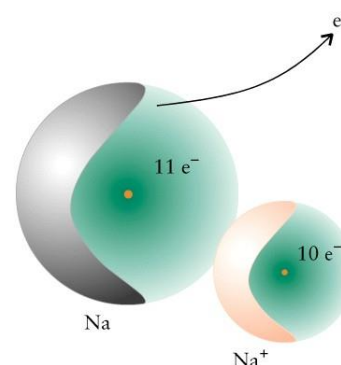
molécule

Fort pouvoir
réducteur



Electronégativité: 0.93

Energie d'ionisation: 494 kJ/mol



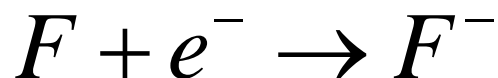
Tendance à
donner
des électrons

Energie d'ionisation
élevée

Electronégativité
élevée

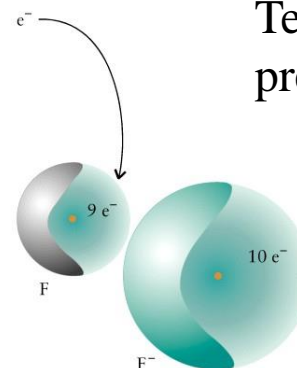
Caractère
Non métallique

Fort pouvoir
oxydant



Electronégativité: 4.0

Energie d'ionisation: 1680 kJ/mol



Tendance à
prendre des électrons

Caractère métallique

Plus le caractère métallique est élevé plus la conductivité électrique et thermique est grande

	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII	VIII	VIII	VIII	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	H	non-métaux																He
2	Li	Be	métaux										B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
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	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
* lanthanides			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
** actinides			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

Les métalloïdes : sont les éléments de chaque côté de la ligne en escalier. Ils possèdent certaines propriétés des métaux et des non-métaux. Les éléments suivants sont considérés comme des métalloïdes (B, Al, Si, Ge, As, Sb, Bi.....).

Résumé

Forte attraction des électrons
de valence par le noyau

F

Rayon atomique petit

Energie d'ionisation grande

Affinité électronique grande
(valeur absolue)

Électronégativité grande

Faible caractère métallique

Oxydant

Faible attraction des électrons
de valence par le noyau

Cs, Fr

Rayon atomique grand

Energie d'ionisation faible

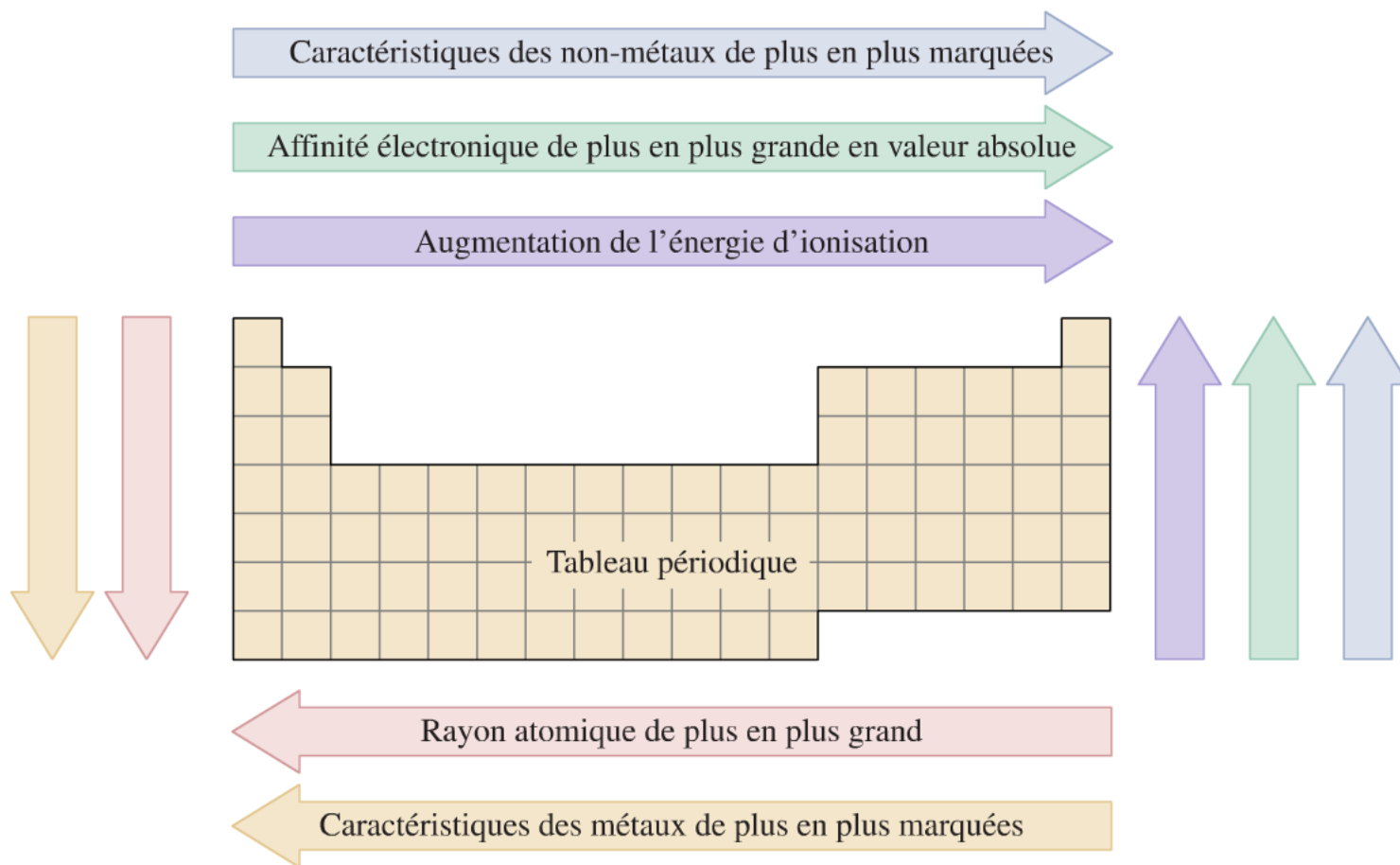
Affinité électronique faible
(valeur absolue)

Électronégativité faible

Fort caractère métallique

Réducteur

Récapitulatif des tendances périodiques



Ce qu'il faut savoir (atomistique)

- Savoir qu'un atome est décrit par la physique quantique (probabiliste)
- Caractériser la lumière (fréquence, longueur d'onde, énergie) émise ou absorbée lors d'une transition électronique
- Calculer les niveaux énergétiques de l'atome d'hydrogène selon la formule de Bohr
- Connaître les combinaisons possibles des nombres quantiques et faire le lien avec les orbitales ou les électrons correspondants
- Etablir les configurations électroniques des atomes et des ions dans leur état fondamental
- Distinguer entre un état fondamental, activé ou impossible d'un atome
- Connaître les tendances périodiques (rayon atomique/ionique, énergie d'ionisation, caractère métallique, électronégativité) du tableau des éléments pour les espèces chimiques neutres ou isoélectroniques