

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

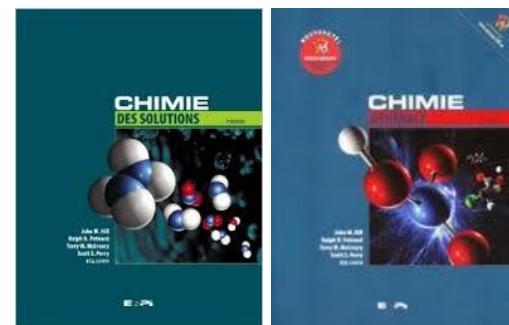
Support de cours

- 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

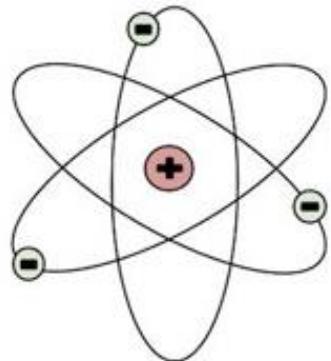
- Atomistique
- Liaison chimique
- Chimie quantitative (stoechiometrie, réactions totales)
- Thermodynamique des réactions chimiques
- Equilibres chimiques
- Propriétés des solutions
- Réactions acido-basiques
- Cinétique

COURS DE CHIMIE GENERALE

1. ATOMISTIQUE

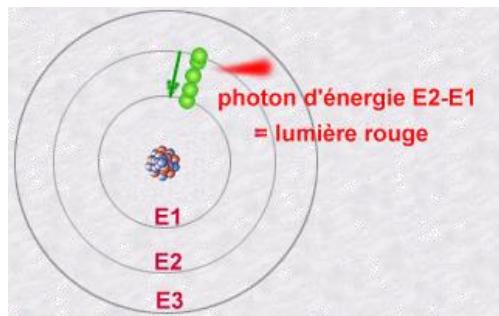
Quel est le modèle actuel de l'atome?

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

3



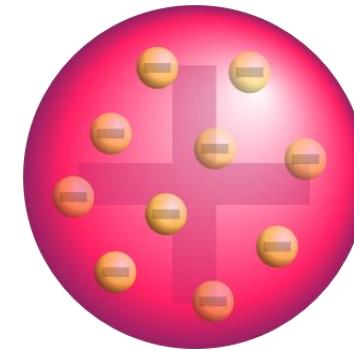
Électrons gravitent autour du noyau selon des orbites précises correspondant à des niveaux énergétiques

2



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

4



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

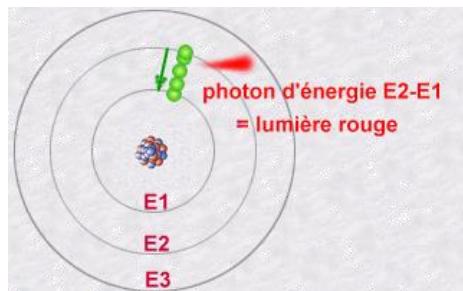
Modèle Rutherford

Source: découverte noyau



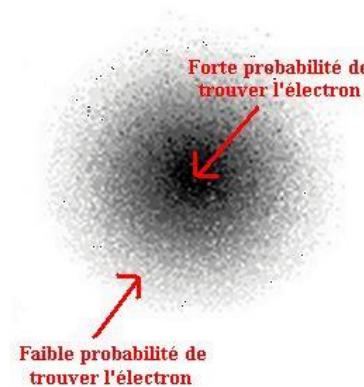
Modèle Bohr

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

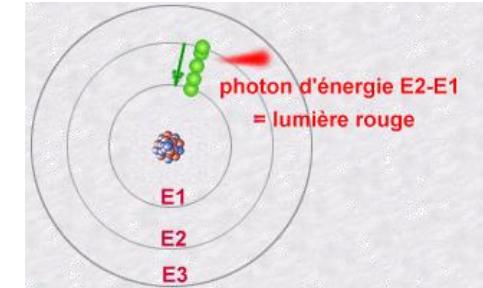
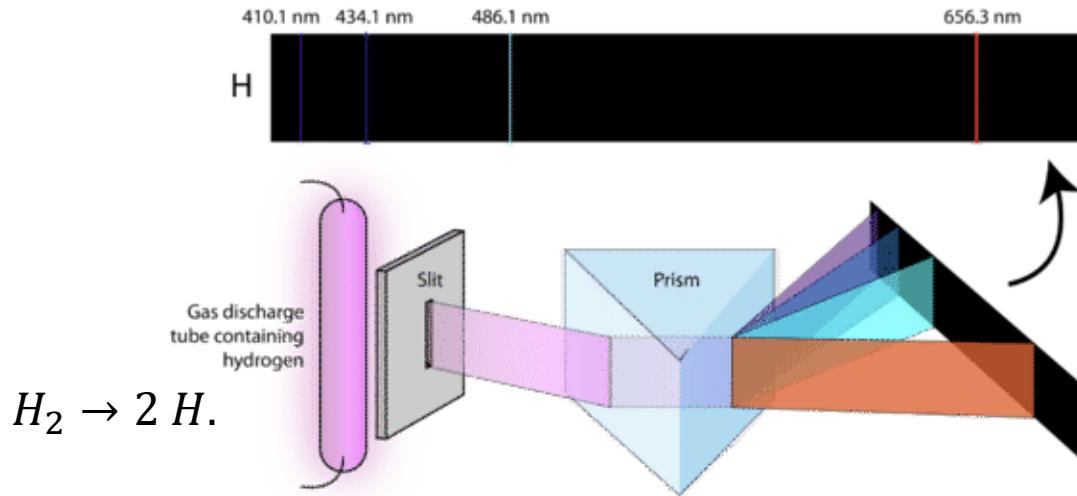


Modèle Thomson

Source: découverte électrons
obsolète



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

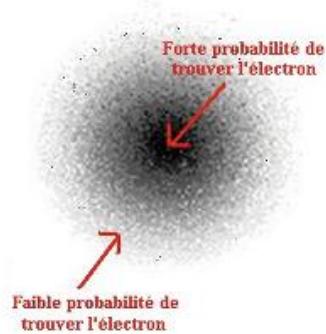
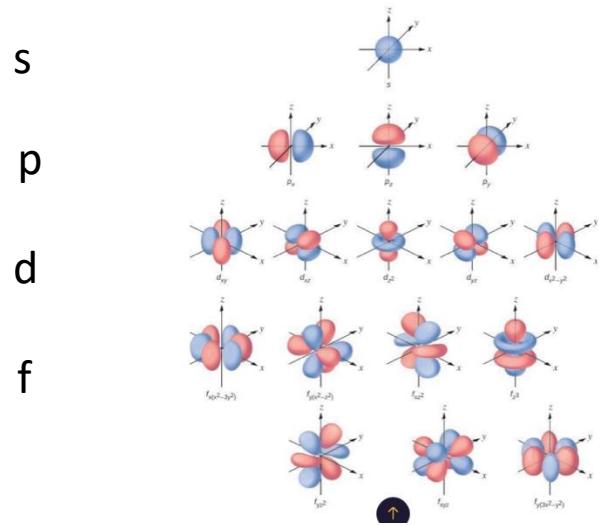


Une excitation permet la rupture de la liaison H-H dans H_2 qui produit des atomes excités d'hydrogène. Ces atomes se stabilisent en émettant de la lumière de longueur d'onde précise.

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

Déviation 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

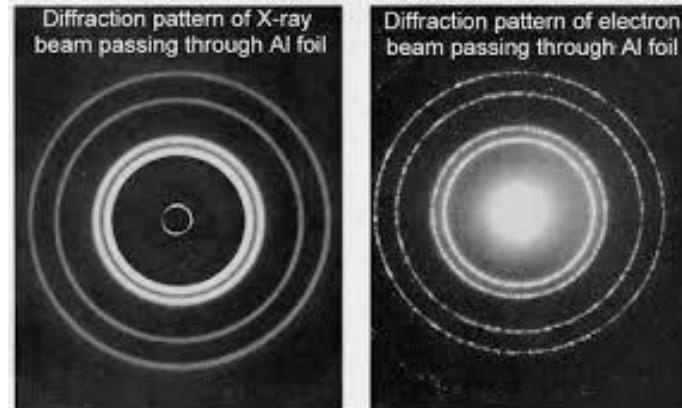
Passage d'un faisceau d'électrons à travers un arrangement régulier d'atomes

→ Comportement d'une onde (interférence)

Nouveauté quantique

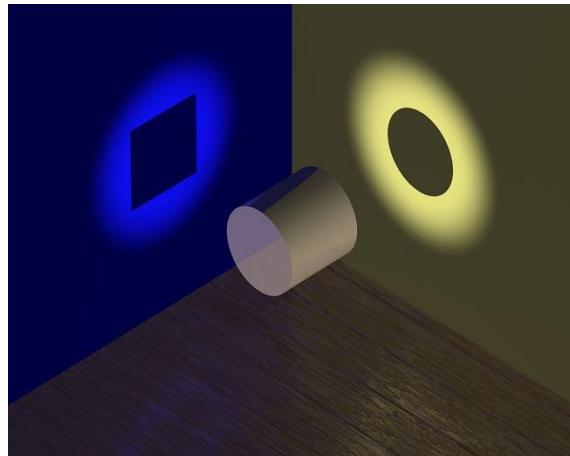


J.J Thomson Nobel prize 1906



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://lx.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

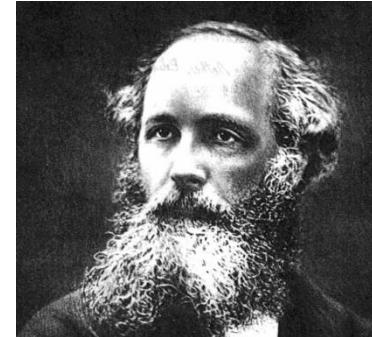
$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

C: vitesse de la lumière

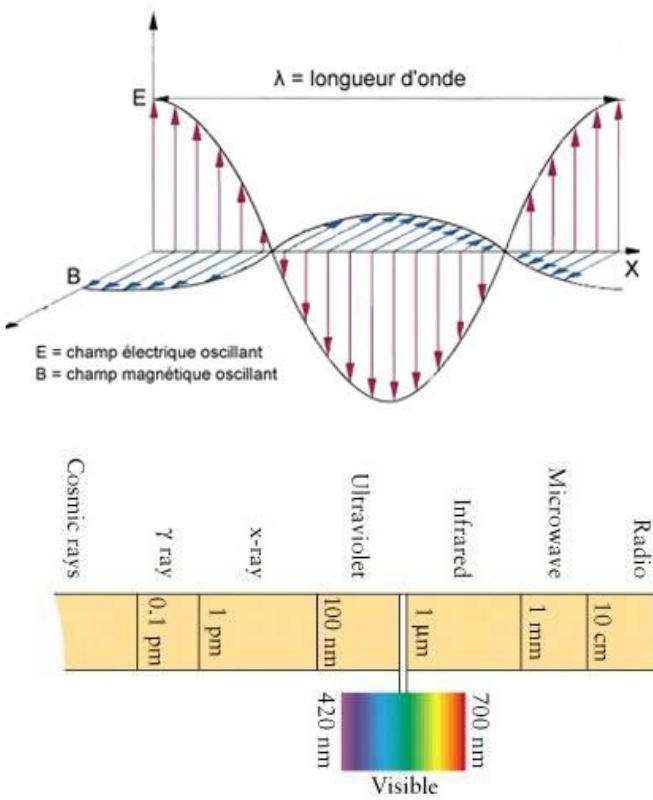
λ : longueur d'onde électromagnétique associée au photon

La lumière est une onde électromagnétique

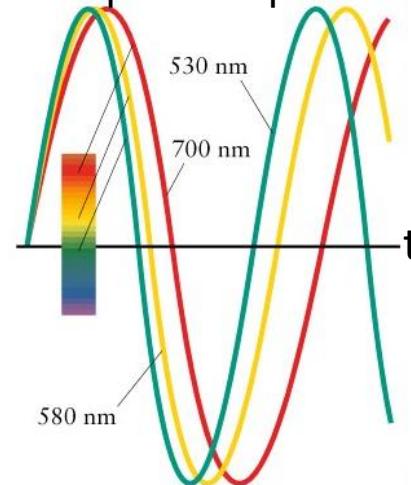
Conclusion “définitive” de la physique classique
qui explique les phénomènes d’interférence, polarisation etc.



Maxwell 1865



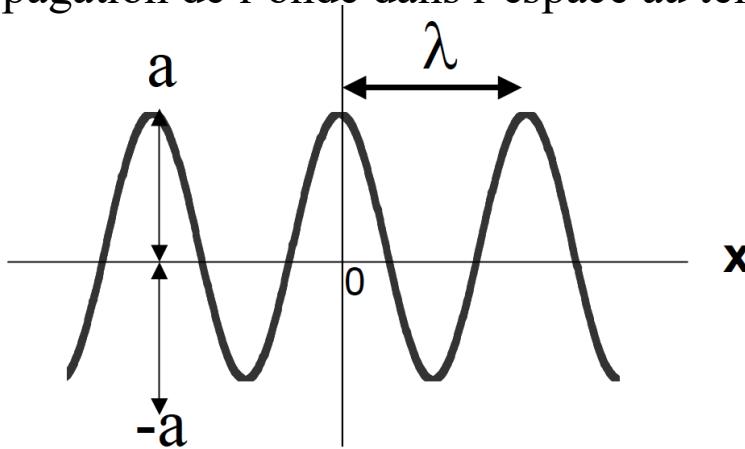
Amplitude du champ électrique au cours du temps



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

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

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



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

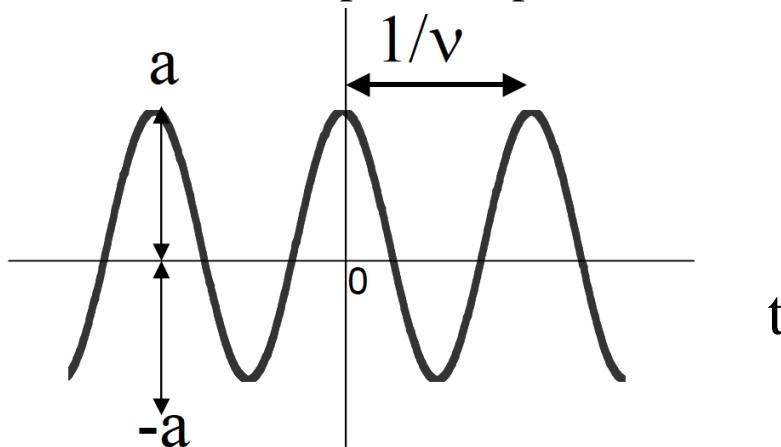
Distance = vitesse x temps

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 = 6.63×10^{-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})

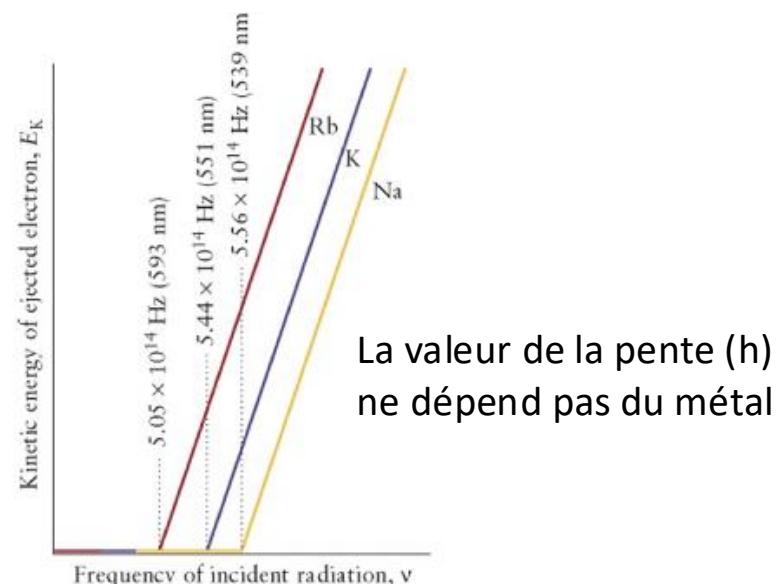
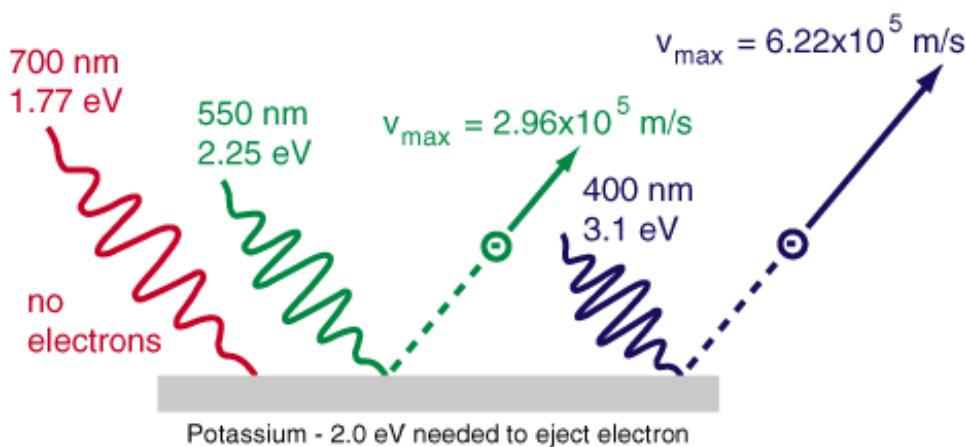
h : constante de Planck = 6.63×10^{-34} J.s

*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 $E = h\nu - \Theta$.



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 nm = 10^{-9} 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 W = 1 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

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

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



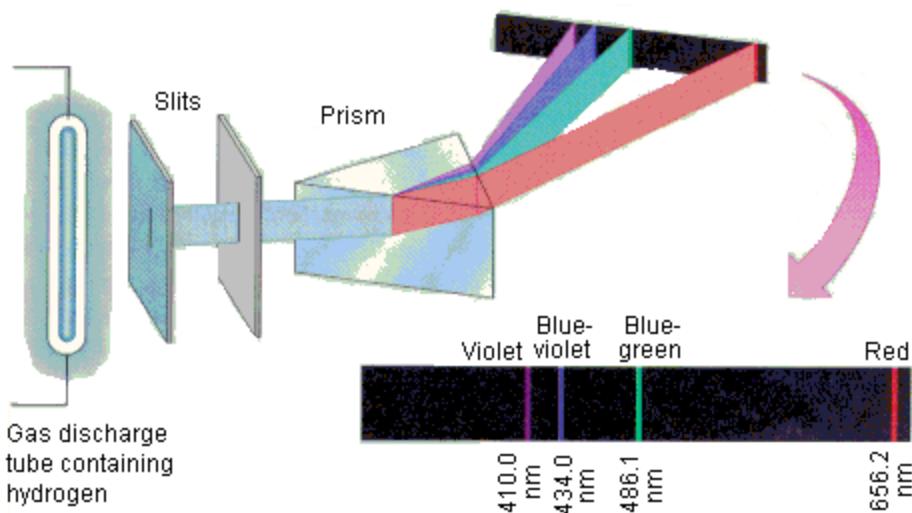
Niels Bohr

$n = \text{nombre entier } 1, 2, 3\dots$

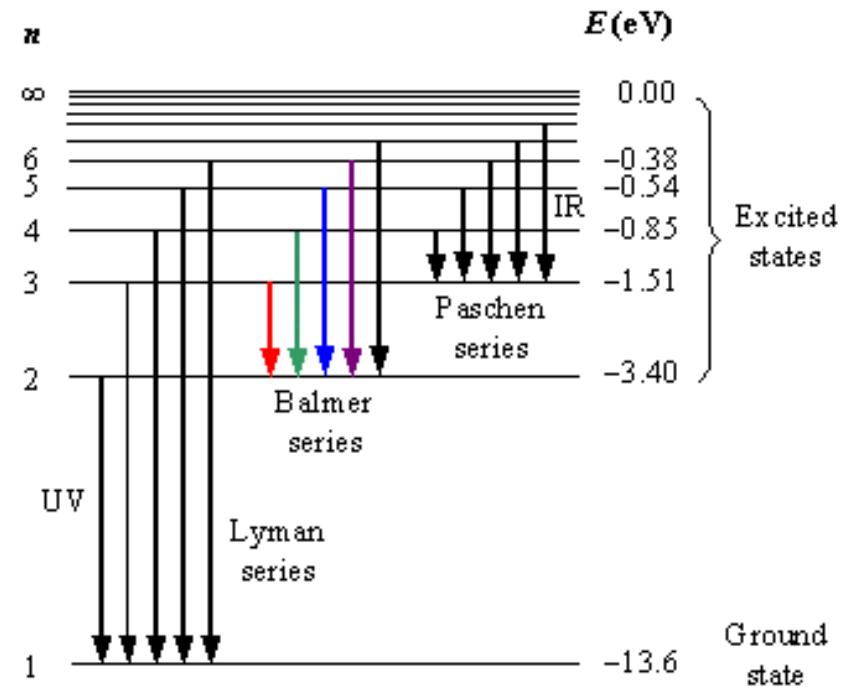
- **Postulat** : tant qu'un électron demeure à un niveau d'énergie donné, il ne peut pas émettre d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique
- Chaque valeur possible pour l'énergie correspond à une trajectoire circulaire et une distance noyau-électron
- **Le plus bas niveau d'énergie correspond 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

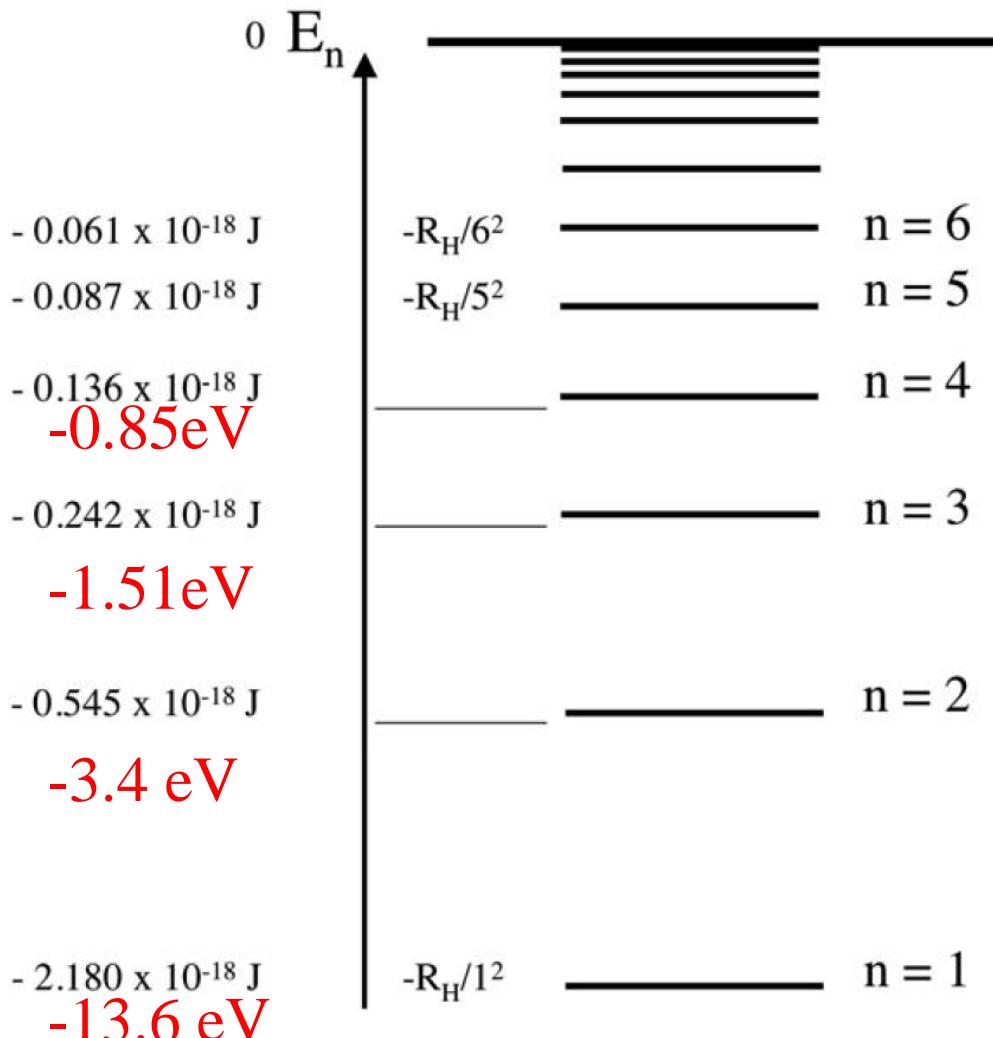


$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$



Spectre de l'hydrogène atomique

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



Ionisation: $E=0$ pour $n=\infty$

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

$$E_n = -\frac{2.18 \times 10^{-18} \text{ J}}{n^2}$$

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Convention:

- 1: le zéro correspond à l'électron libre
- 2: l'énergie notée négativement pour un électron lié au noyau

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:

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

- 1: $1/2 \cdot 13.6 \text{ eV}$
- 2: $3/4 \cdot 13.6 \text{ eV}$
- 3: $1/4 \cdot 13.6 \text{ eV}$
- 4: $-3/4 \cdot 13.6 \text{ eV}$

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

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

r: distance à l'origine

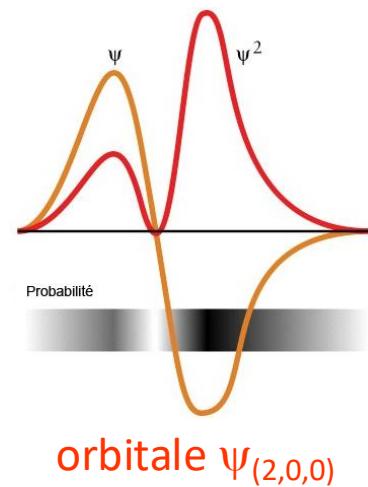
μ = masse réduite de l'atome d'hydrogène

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

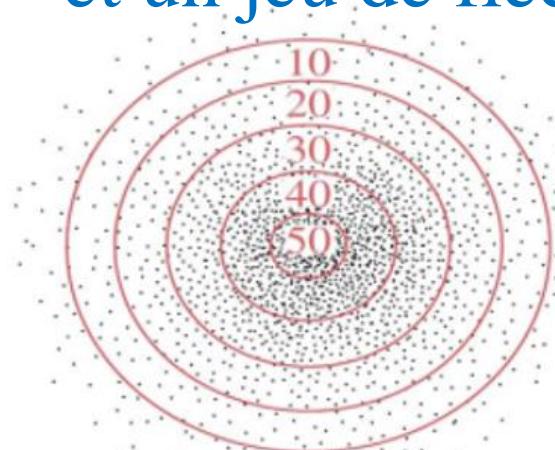
Solutions cherchées pour E et ψ : ($E_1, \psi_1; E_2, \psi_2, E_3, \psi_3; \square$)

- Interprétation de ψ : ?

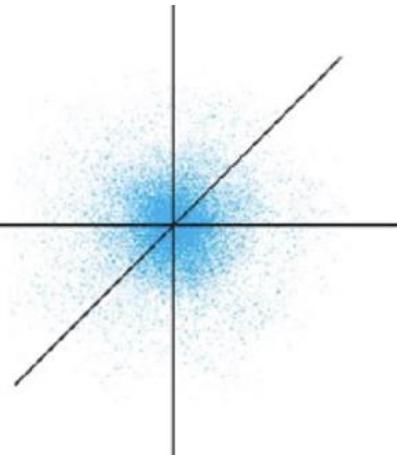
$\psi^2(x)$: **densité de probabilité de présence de l'électron**



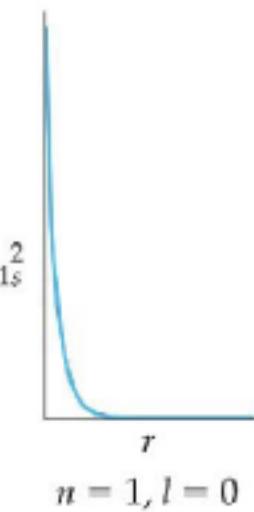
Analogie entre l'orbitale 1s d'un atome hydrogénoides et un jeu de fléchettes



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



Densité électronique proportionnelle à la densité des points



Une fléchette a été lancée 1500 fois.

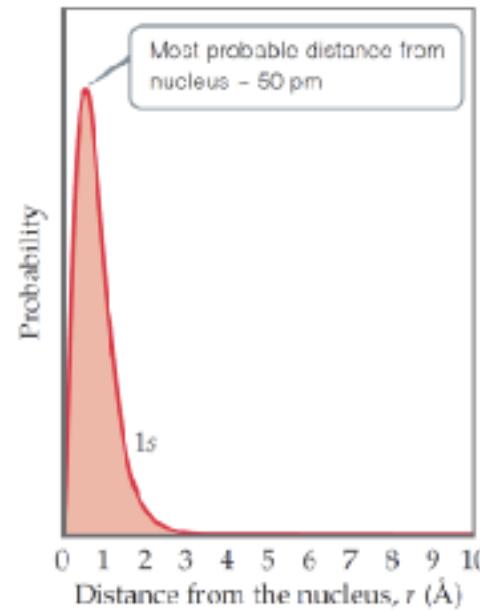
La planche contient 95% des essais

La densité de fléchette la plus élevée: 50 (densité de probabilité ψ^2)

Le score le plus probable: 30 (probabilité P)

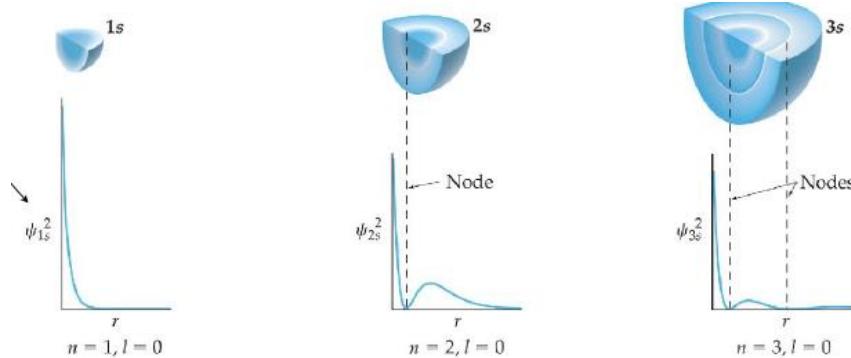
Densité de probabilité
 ψ^2

Probabilité: $P = 4\pi r^2 \psi^2 dr$

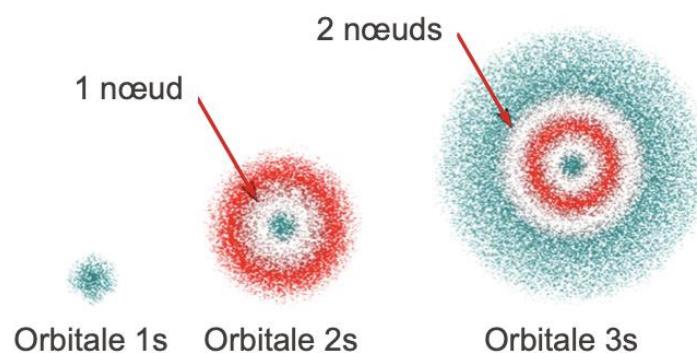


Probabilité maximale à une certaine distance du noyau (53 pm)
 $P = 0$ même si $\psi \neq 0$ pour $r = 0$ (sur le noyau)

Les orbitales (ψ) sont des fonctions mathématiques compliquées

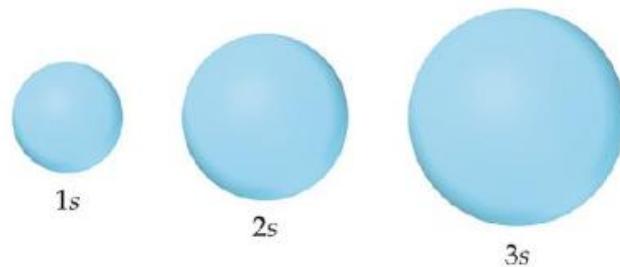


Fonction s'étend jusqu'à l'infini
 La fonction ψ change de signe
 Présence de nœuds
 (probabilité de présence nulle)



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 \square
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

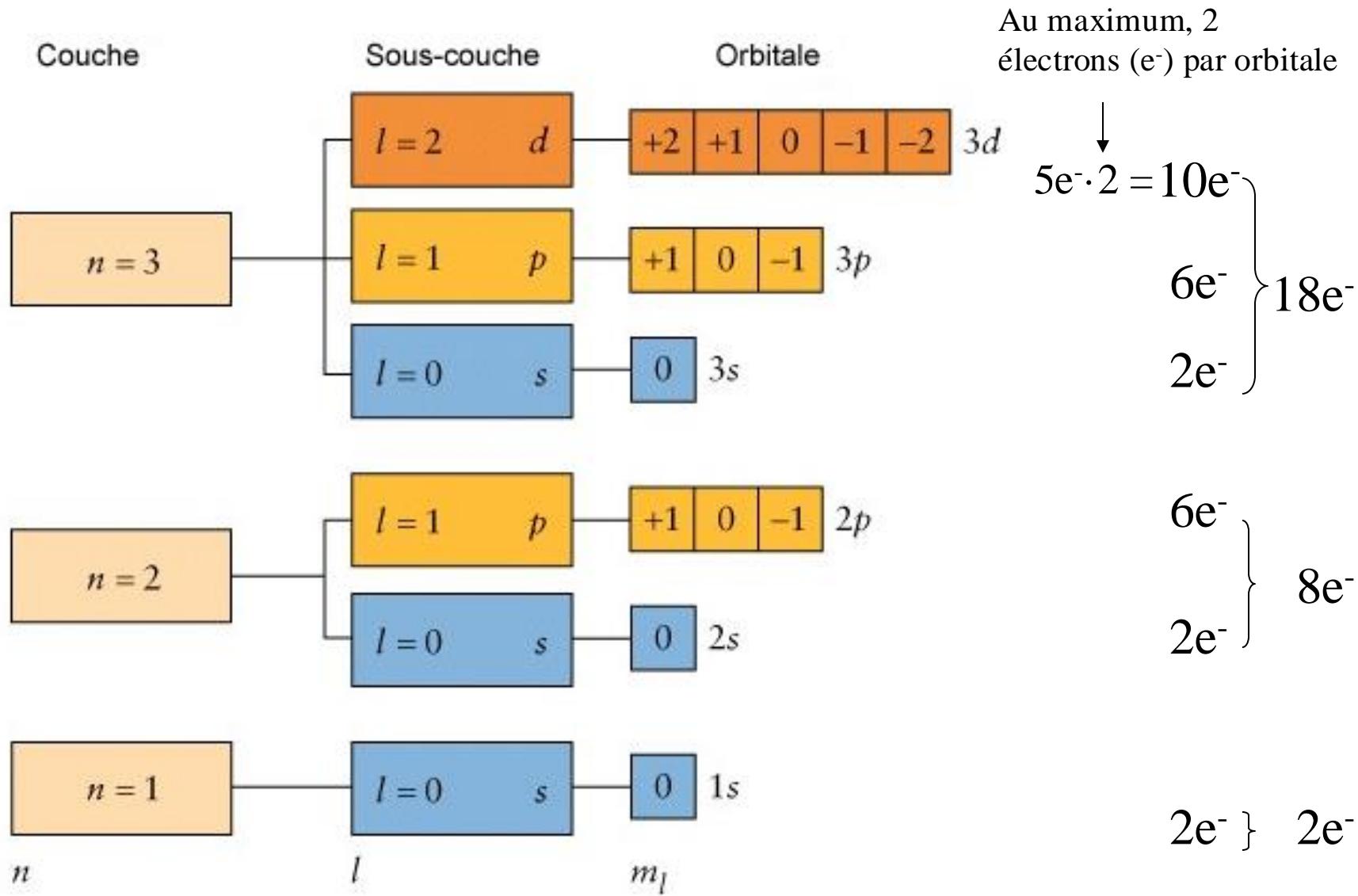
n (principal)	ℓ (secondaire)	m_ℓ (magnétique)	m_s (magnétique de spin)
--------------------	------------------------	--------------------------	-------------------------------

$n \geq 1$	$0 \leq \ell \leq n-1$	$-\ell \leq m_\ell \leq \ell$	$m_s = \pm 1/2$
------------	------------------------	-------------------------------	-----------------

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)

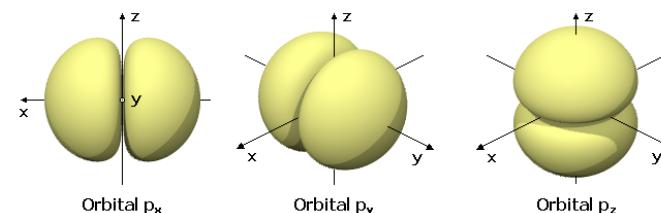
→ $\ell = 0$, orbitale atomique s

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



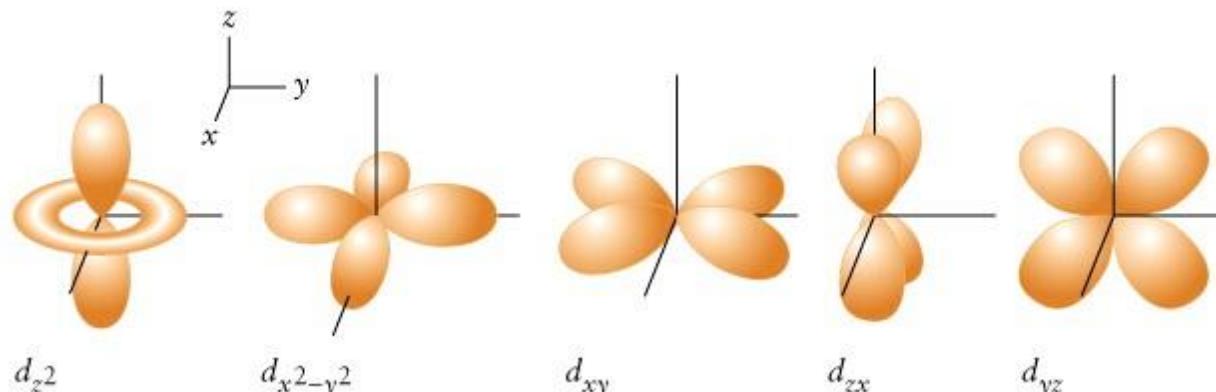
→ $\ell = 1$, orbitales atomiques p

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

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

2 électrons dans l'orbitale 1s
2 électrons dans l'orbitale 2s
3 électrons dans les orbitales 2p

Notation spdf étendue

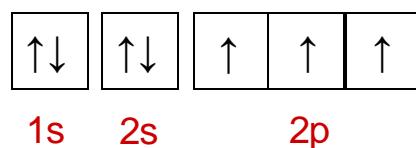
► distribution des électrons dans les orbitales

► Représentation des «**cases quantiques**»

Orbitales d'un même type ► représentées par des carrés

Electrons ► représentés par des flèches

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



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), $Z = 6$

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

4 électrons de valence

N (azote), $Z = 7$

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

5 électrons de valence

O (oxygène), $Z = 8$

$1s^2 2s^2 2p^4$

6 électrons de valence

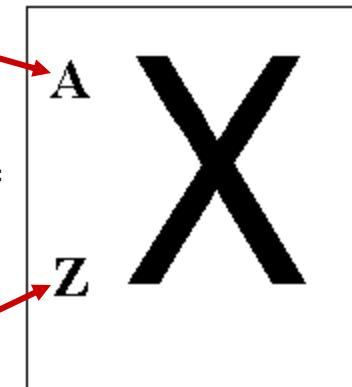
Principe d'exclusion de Pauli

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



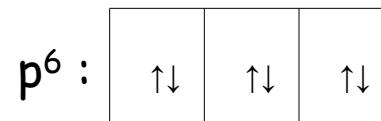
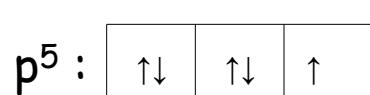
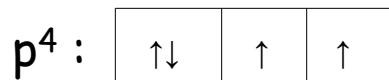
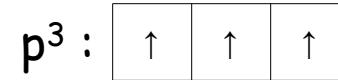
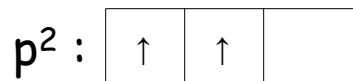
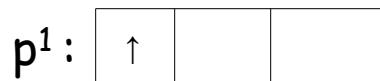
Wolfgang Pauli

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

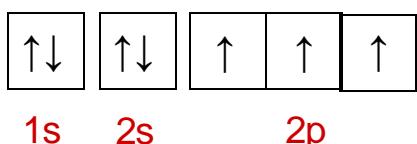
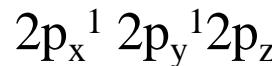
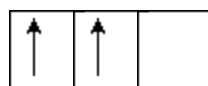
Règle de Hund

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 :

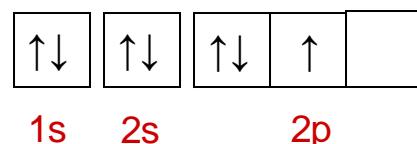


Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



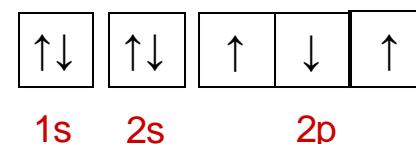
1s 2s 2p

exact



1s 2s 2p

inexact



1s 2s 2p

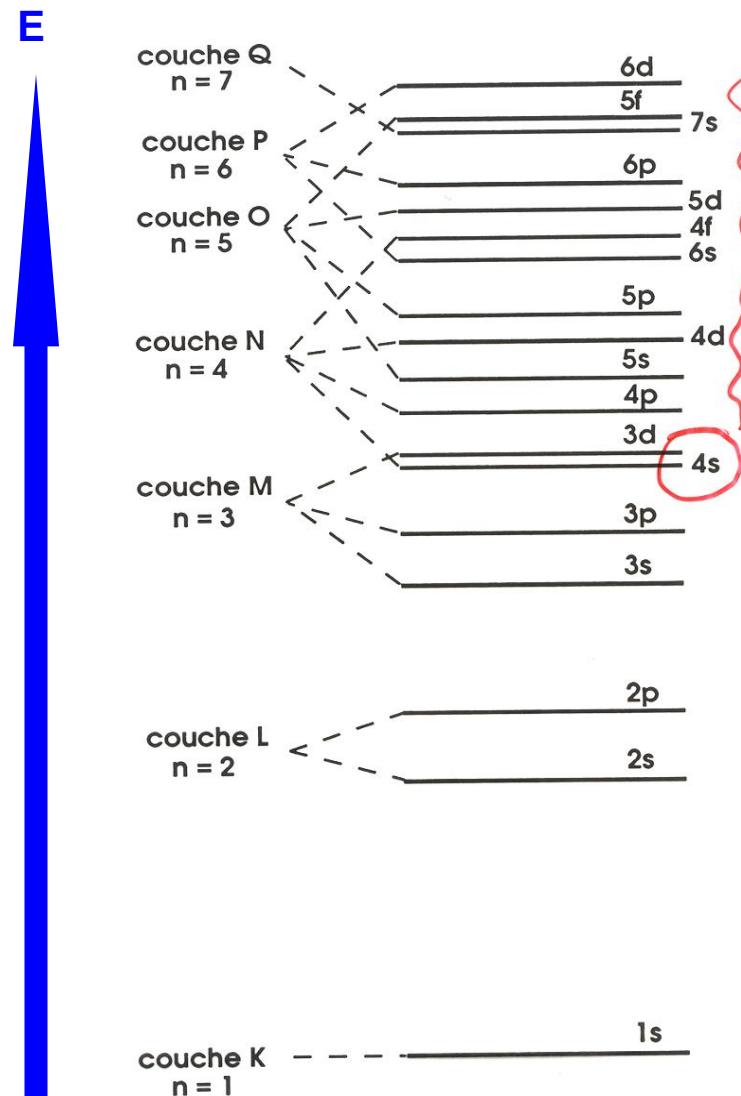
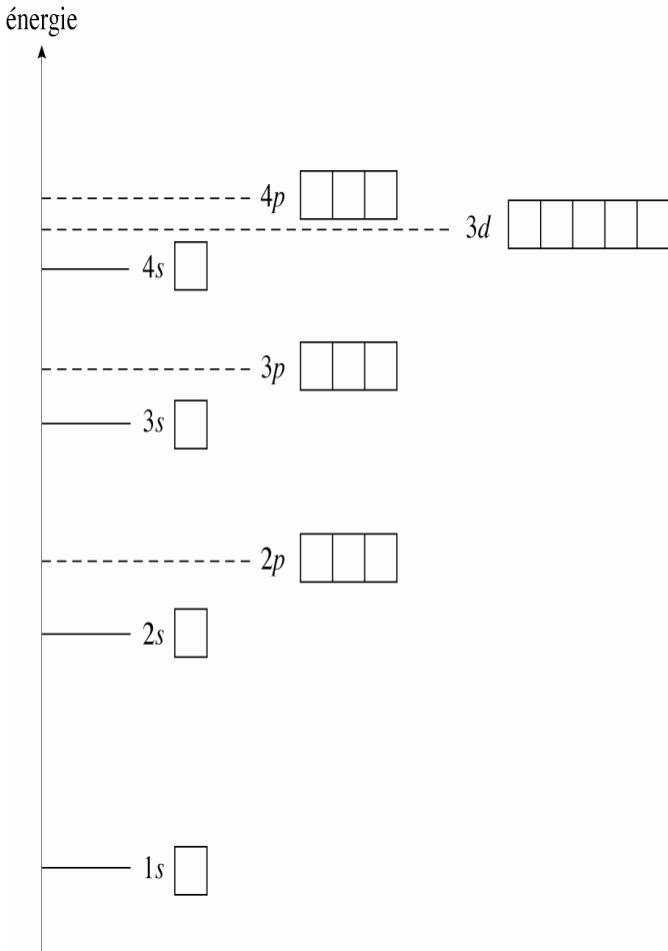
inexact

$\uparrow\downarrow$ électrons appariés \uparrow électron célibataire

Friedrich Hund
(1896-1997)

Configuration électronique des éléments

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



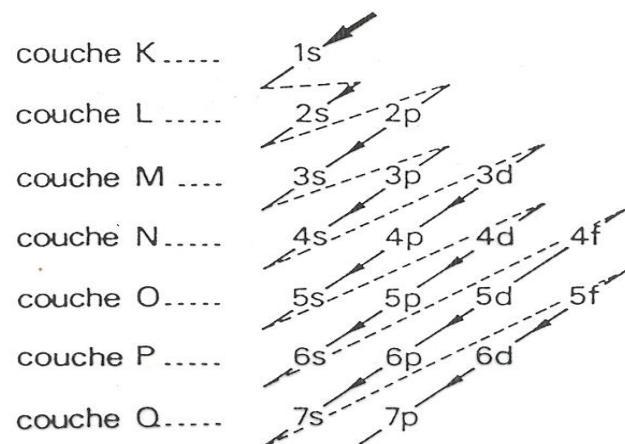
Règle de Klechkowsky ou principe de stabilité:

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

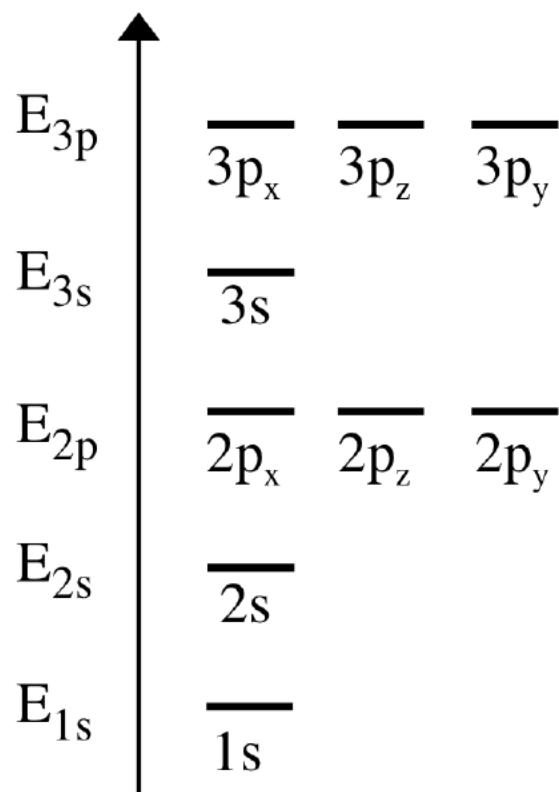
Procédure pour établir la configuration électronique des éléments dans leur état fondamental



Vsevolod Klechkowski
(1900-1972)

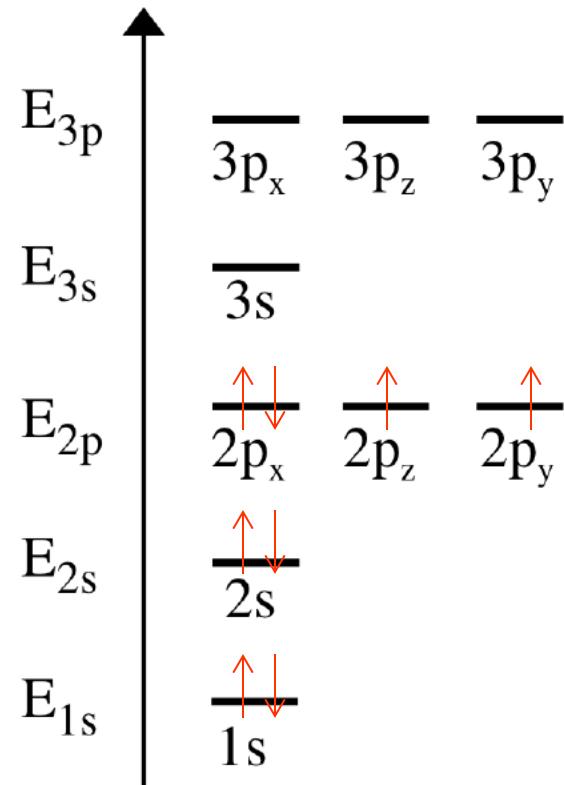
EXERCICE :

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



EXERCICE :

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



Configuration : 1s² 2s² 2p⁴

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

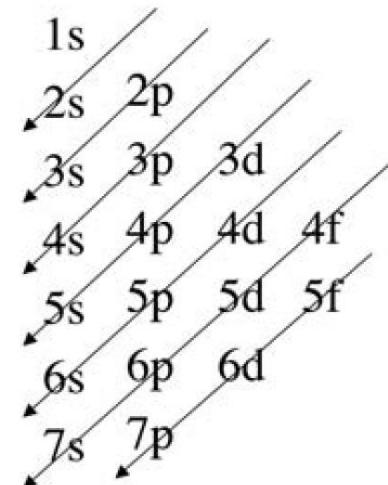
1. $(2,0,0,+1/2)$ et $(2,0,1,+1/2)$
2. $(2,1,-1,+1/2)$ et $(2,1,+1,+1/2)$
3. $(2,1,-1,+1/2)$ et $(2,1,0,-1/2)$
4. $(2, 2, -1, 1/2)$ et $(2, 2, -1, -1/2)$

Configuration électronique et tableau périodique

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

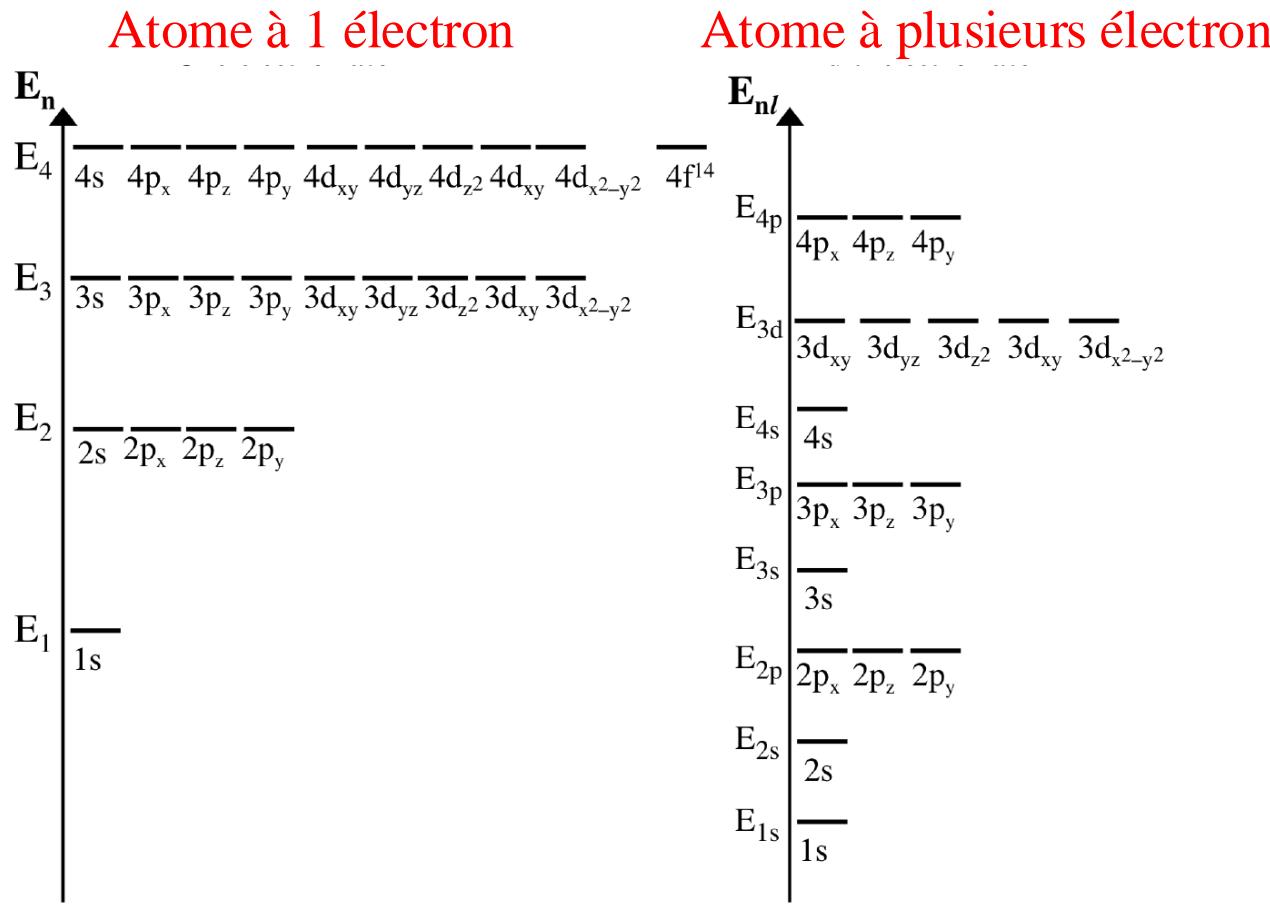
1s ¹	1s ²
1s ² 2s ²	1s ² 2s ² 2p ⁶
1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ¹⁰ 4p ⁶

*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 hydrogénoides et atomes à plusieurs électrons



1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1 H Hydrogène -11	2 He Hélium		s block		7s 7p 6s 6p 5s 5p 4s 4p 3s 3p 2s 2p	6d 5d 4d 3d	5f 4f											
2 Li Lithium 1	4 Be Béryllium 2		p block															
3 Na Sodium 1	12 Mg Magnésium 2		d block															
4 K Potassium 1	20 Ca Calcium 2	21 Sc Scandium 3	22 Ti Titane 4	23 V Vanadium 5	24 Cr Chrome 3 6	25 Mn Manganèse 2 4 7	26 Fe Fer 2 3	27 Co Cobalt 2 3	28 Ni Nickel 2	29 Cu Cuivre 2	30 Zn Zinc 2	31 Ga Gallium 3	32 Ge Germanium -4 2 4	33 As Arsenic -3 3 5	34 Se Sélenium -2 2 4 6	35 Br Brome -1 1 3 5	36 Kr Krypton 2	
5 Rb Rubidium 1	38 Sr Strontium 2	39 Y Yttrium 3	40 Zr Zirconium 4	41 Nb Niobium 5	42 Mo Molybdène 4 6	43 Tc Technétium 4 7	44 Ru Ruthénium 3 4	45 Rh Rhodium 3	46 Pd Palladium 2 4	47 Ag Argent 1	48 Cd Cadmium 2	49 In Indium 3	50 Sn Étain -4 2 4	51 Sb Antimoine -3 3 5	52 Te Tellure -2 2 4 6	53 I Iode -1 1 3 5 7	54 Xe Xénon 2 4 6	
6 Cs Césium 1	56 Ba Baryum 2	57-71	72 Hf Hafnium 4	73 Ta Tantale 5	74 W Tungstène 4 6	75 Re Rhénium 4	76 Os Osmium 4	77 Ir Iridium 3 4	78 Pt Platine 2 4	79 Au Or 3	80 Hg Mercure 1 2	81 Tl Thallium 1 3	82 Pb Plomb 2 4	83 Bi Bismuth 3	84 Po Polonium -2 2 4	85 At Astate -1 1	86 Rn Radon 2	
7 Fr Francium 1	88 Ra Radium 2		104 Rf Rutherfordium 4	105 Db Dubnium 5	106 Sg Seaborgium 6	107 Bh Bohrium 7	108 Hs Hassium 8	109 Mt Meitnérium 8	110 Ds Darmstadium 9	111 Rg Roentgenium 10	112 Cn Copernicium 11	113 Nh Nihonium 11	114 Fl Flérovium 12	115 Mc Moscovium 13	116 Lv Livermorium 14	117 Ts Tennessee 15	118 Og Oganesson 16	
Oxidation states are the number of electrons added to or removed from an element when it forms a chemical compound.																		
6																		
7																		
57 La Lanthane 3	58 Ce Cérium 3 4	59 Pr Praséodyme 3	60 Nd Néodyme 3	61 Pm Prométhium 3	62 Sm Samarium 3	63 Eu Europium 2 3	64 Gd Gadolinium 3	65 Tb Terbium 3	66 Dy Dysprosium 3	67 Ho Holmium 3	68 Er Erbium 3	69 Tm Thulium 3	70 Yb Ytterbium 3	71 Lu Lutécium 3				
89 Ac Actinium 3	90 Th Thorium 4	91 Pa Protactinium 5	92 U Uranium 6	93 Np Neptunium 5	94 Pu Plutonium 4	95 Am Américium 3	96 Cm Curium 3	97 Bk Berkélium 3	98 Cf Californium 3	99 Es Einsteinium 3	100 Fm Fermium 3	101 Md Mendélévium 3	102 No Nobélium 2	103 Lr Lawrencium 3				

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: [Ar] 4s¹ 3d⁵ (au lieu de 4s² 3d⁴)

Cu: [Ar] 4s¹ 3d¹⁰ (au lieu de 4s² 3d⁹)

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 H Hydrogène 1s ¹	2 He Hélium 1s ²				6 C Carbone 1s ² 2s ²	Numéro atomique symbole Nom de l'élément Configuration électronique				5 B Bore 1s ² 2s ¹	6 C Carbone 1s ² 2s 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 Néon 1s ² 2s ² 2p ⁶				
3 Li Lithium 1s ² 2s ¹	4 Be Béryllium 1s ² 2s ²									13 Al Aluminium 1s ² 2s ² 2p ⁶	14 Si Silicium 1s ² 2s ² 2p ⁶	15 P Phosphore 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	16 S Soufre 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	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				
11 Na Sodium 1s ² 2s ² 2p ¹	12 Mg Magnésium 1s ² 2s ² 2p ²									31 Ga Gallium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹	32 Ge Germanium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²	33 As Arsenic 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³	34 Se Sélenium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴	35 Br Brome 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵	36 Kr Krypton 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶				
19 K Potassium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	20 Ca Calcium 1s ² 2s ² 2p ⁶	21 Sc Scandium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹	22 Ti Titanium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ²	23 V Vanadium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ³	24 Cr Chrome 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵	25 Mn Manganèse 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵	26 Fe Fer 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁶	27 Co Cobalt 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁷	28 Ni Nickel 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁸	29 Cu Cuivre 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	30 Zn Zinc 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	31 Ga Gallium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹	32 Ge Germanium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ²	33 As Arsenic 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	34 Se Sélenium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	35 Br Brome 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	36 Kr Krypton 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶		
37 Rb Rubidium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹	38 Sr Strontium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ²	39 Y Yttrium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁹	40 Zr Zirconium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹	41 Nb Niobium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁴	42 Mo Molybdène 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵	43 Tc Technétium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵	44 Ru Ruthénium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁷	45 Rh Rhodium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁹	46 Pd Palladium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	47 Ag Argent 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	48 Cd Cadmium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	49 In Indium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	50 Sn Étain 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰	51 Sb Antimoine 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ²	52 Te Tellure 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	53 I Iode 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	54 Xe Xénon 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶		
55 Cs Césium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹ 4s ¹	56 Ba Baryum 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁹ 4s ²	57 La Lanthane 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁹ 4s ²	72 Hf Hafnium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹ 4s ²	73 Ta Tantale 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ²	74 W Tungstène 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ²	75 Re Rhénium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹	76 Os Osmium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ²	77 Ir Iridium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹	78 Pt Ptâtre 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ⁷	79 Au Or 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁴	80 Hg Mercure 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	81 Tl Thallium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	82 Pb Plomb 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	83 Bi Bismuth 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	84 Po Polonium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	85 At Astatine 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	86 Rn Radon 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵		
87 Fr Francium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹ 4s ²	88 Ra Radium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁹ 4s ²	89 Ac Actinium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁹ 4s ²	104 Rf Rutherfordium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ¹ 4s ² 4f ¹⁵	105 Db Dubnium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	106 Sg Seaborgium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	107 Bh Bohrium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	108 Hs Hassium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	109 Mt Meitnerium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	110 Ds Demstadium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	111 Rg Roentgenium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	112 Cn Copernicium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	113 Uut Ununtrium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	114 F Florium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	115 Uup Ununpentium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	116 Lv Livermorium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	117 Uus Ununseptium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵	118 Uuo Ununoctium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ⁵ 4s ² 4f ¹⁵		

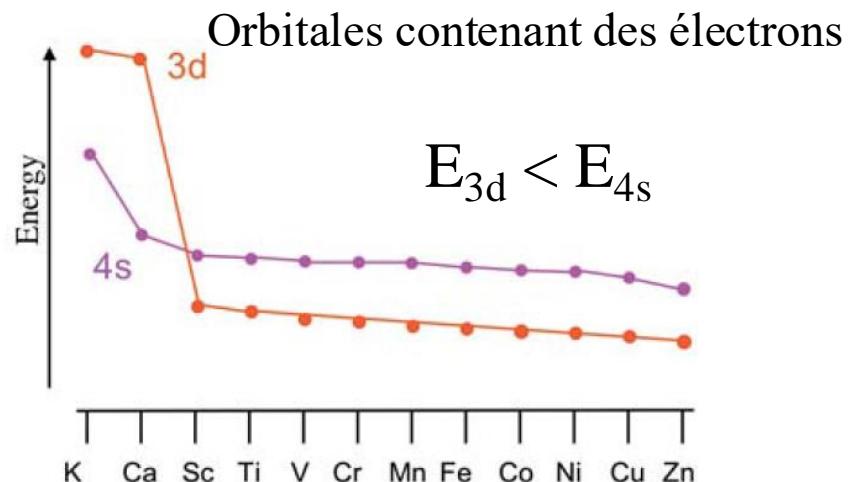
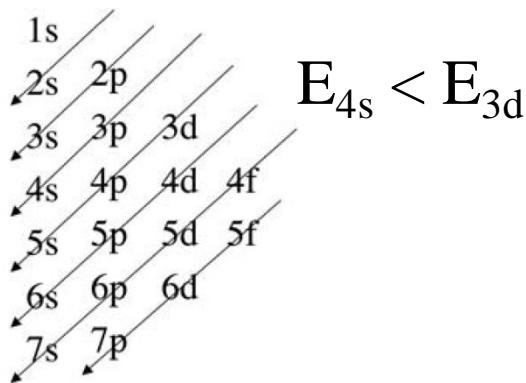
Exceptions
à l'Aufbau

Supposé

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)

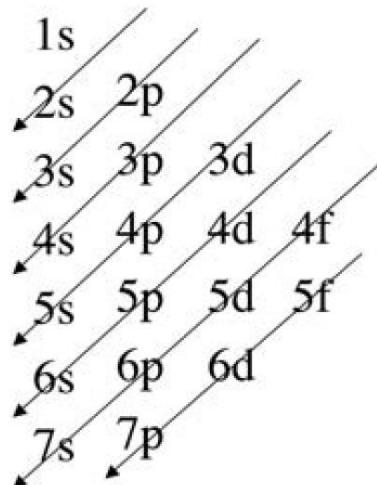


Pour orbitales **contenant des électrons**, l'énergie des orbitales 3d est plus faible que celle des orbitales 4s. Pour décrire l'état le plus stable d'un cation, on enlève les électrons des orbitales **occupées** d'énergies les plus élevées (4s dans cet exemple)

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

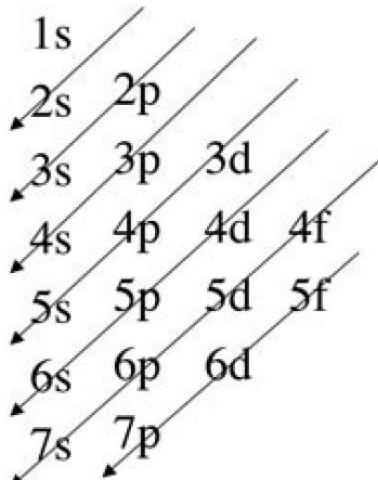
La configuration électronique la plus stable de l'ion Fe^{2+} est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ (juste ou faux?)

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

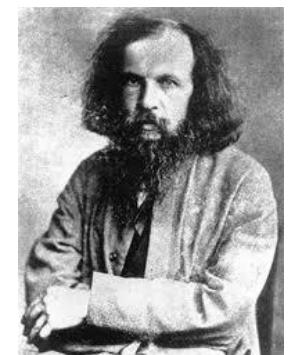
La mole d'un corps gazeux occupe un volume de 22.4 l
aux conditions normales de pression (1 atm) et de température (T=0° C)
Pour un corps pur: on peut ainsi obtenir la masse atomique



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



5. Henry Moseley (1887-1915)

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

Henry Moseley
1887-1915

Optime ~~auquel~~ auquel nous nous sommes mis à

comme un ~~bon~~ bon

comme nous nous sommes mis à ~~auquel~~ auquel

D. Mendeleïev.

T = 12 $\frac{Z=90}{N=94}$ $\frac{I=100}{T=182}$

V = 57 $\frac{Z=94}{N=94}$ $\frac{I=102}{T=182}$

Cr = 58 $\frac{Z=96}{N=96}$ $\frac{I=106}{T=186}$

Mn = 55 $\frac{Z=104.4}{N=104.4}$ $\frac{I=104.4}{T=186}$

Fe = 56 $\frac{Z=104.4}{N=104.4}$ $\frac{I=104.4}{T=186}$

Ni = 59 $\frac{Z=106.6}{N=106.6}$ $\frac{I=104.4}{T=199}$

H = 1 $\frac{Z=8}{N=8}$ $\frac{I=10.6}{T=10.6}$ $\frac{Cu=63.4}{Be=9.4}$

~~Be = 9.4~~ $\frac{Z=10.6}{N=10.6}$ $\frac{I=10.6}{T=10.6}$ $\frac{Cu=63.4}{Be=9.4}$

~~Be = 9.4~~ $\frac{Z=11}{N=11}$ $\frac{I=11.6}{T=11.6}$ $\frac{Cu=63.4}{Be=9.4}$

Essai d'une

système

d'après leurs poids atomiques et

fonctions chimiques par D. Mendeleïev

~~Be = 9.4~~ $\frac{Z=11}{N=11}$ $\frac{I=11.6}{T=11.6}$ $\frac{Cu=63.4}{Be=9.4}$

18 $\frac{II}{I}$ 69.

Helpmacher
Amsterdam
K. van der
Oudshoorn

Opmaatsche
Uitgeverij

1882

Opmaatsche
Uitgeverij

1882

Opmaatsche
Uitgeverij

1882

Opmaatsche
Uitgeverij

1882

Opmaatsche
Uitgeverij

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

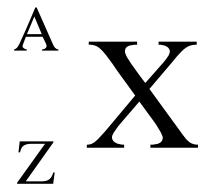
Tableau inversé par rapport au tableau d'aujourd'hui

Numéro Atomique Z

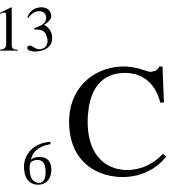
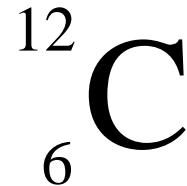
numéro atomique Z = nombre des protons
= nombre des électrons (pour atome neutre)

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



$$\text{A} - \text{Z} = \text{nombre de neutrons: } 6 \quad 7$$

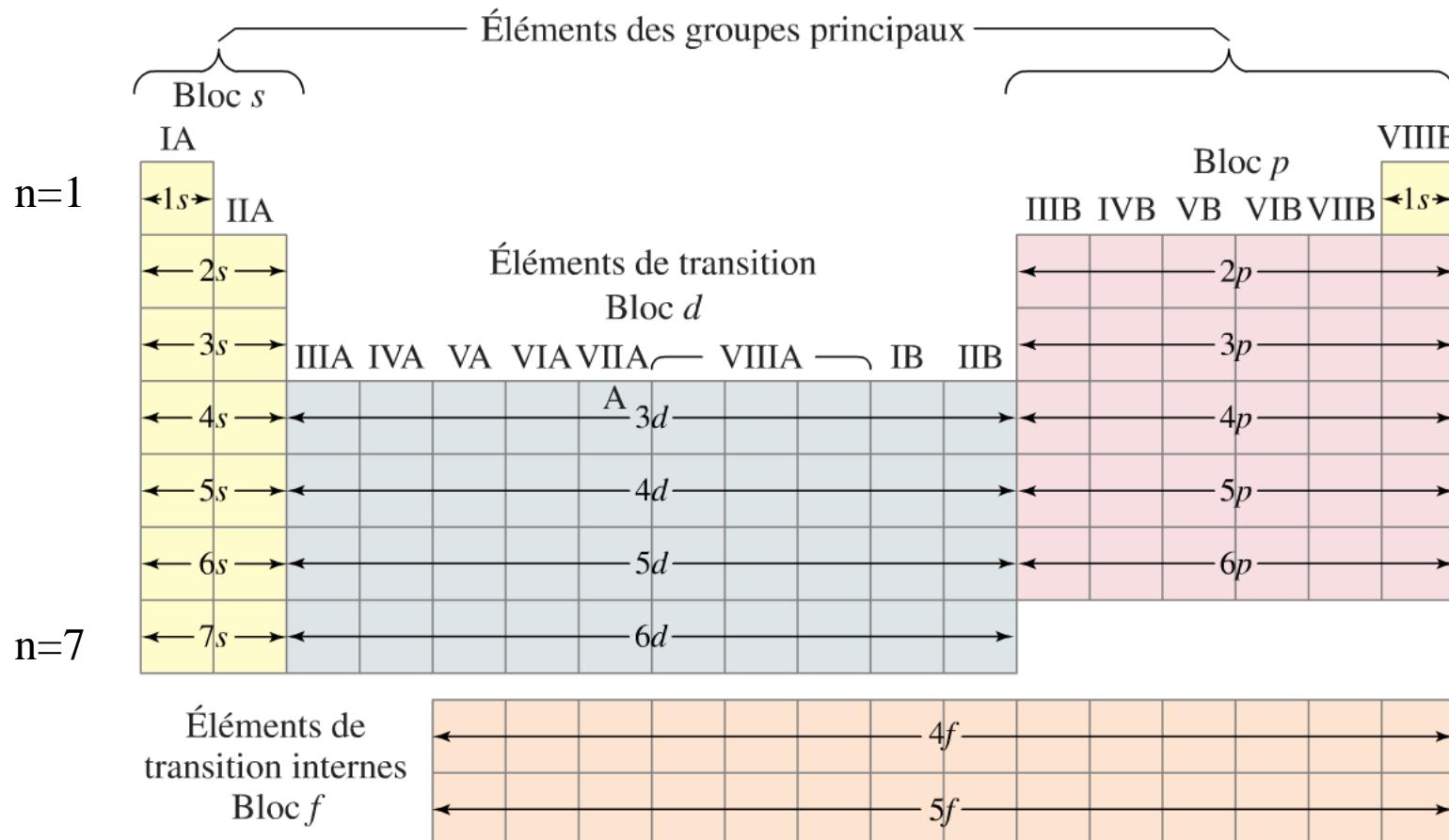
Les isotopes d'un élément se distinguent seulement par leur nombre de neutrons dans le noyau. Exemple: $_{\text{92}}^{\text{235}} \text{U}$; $_{\text{92}}^{\text{238}} \text{U}$

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



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

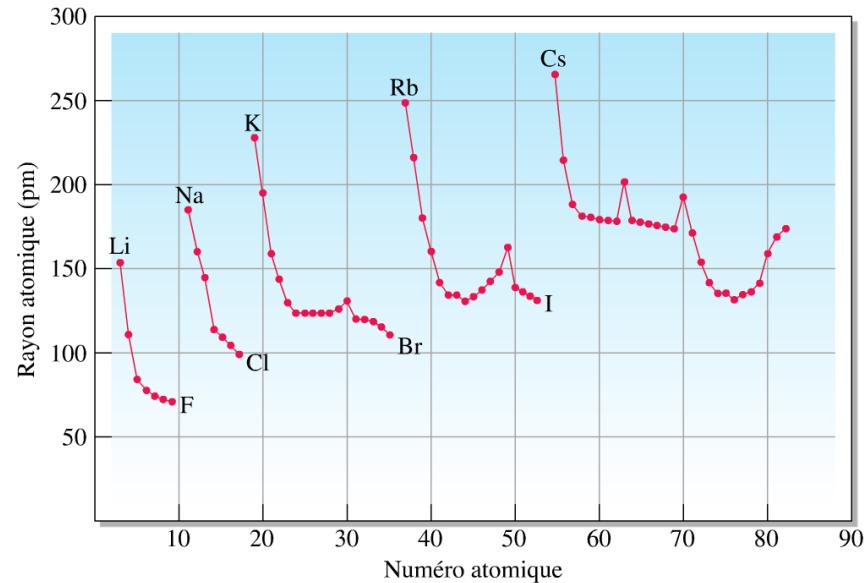
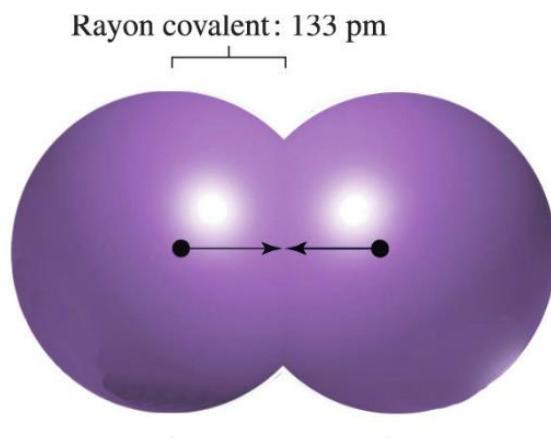
Définitions:

- 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)



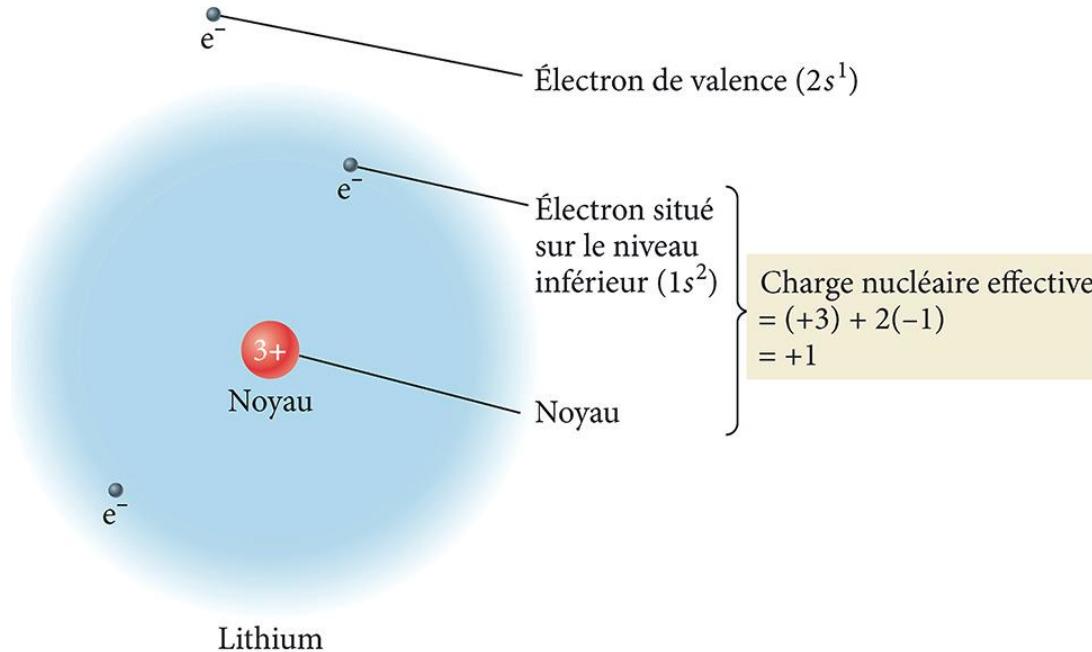
Représentation de la molécule de I_2

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



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

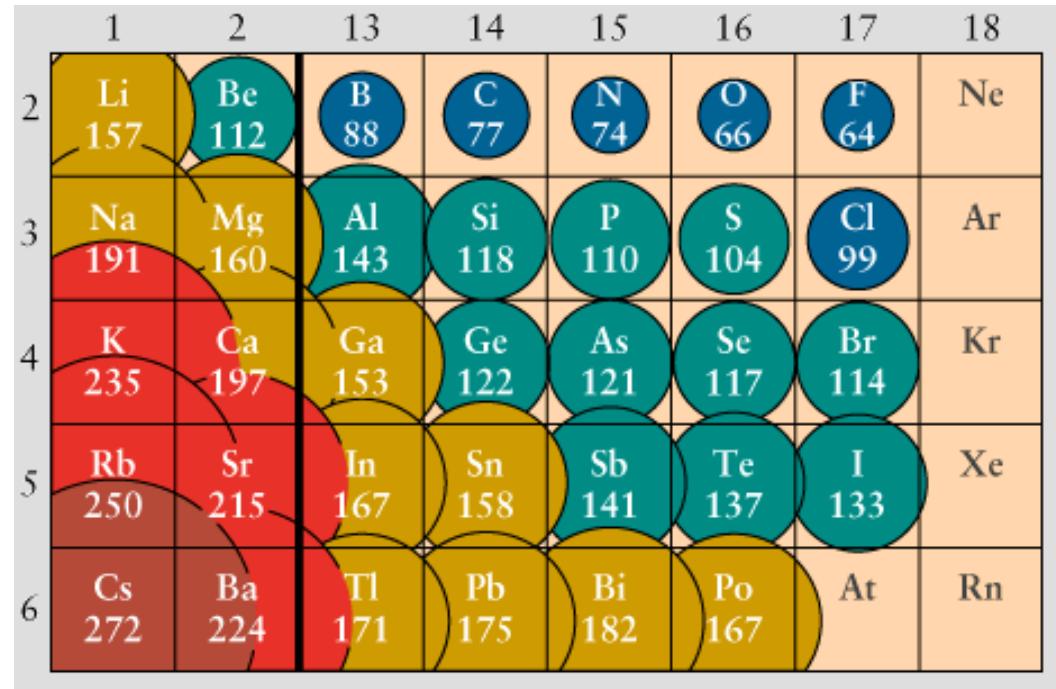
Électrons des niveaux inférieurs ($n' < n$): écran total

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



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 H Hydrogène 1s ¹	2 Be Béryllium 1s ² 2s ²	3 Li Lithium 1s ² 2s ¹	4 C Carbone 1s ² 2s ² 2p ²		14 B Bore 1s ² 2s ² 2p ¹	15 C Carbone 1s ² 2s ² 2p ²	16 N Azote 1s ² 2s ² 2p ³	17 O Oxygène 1s ² 2s ² 2p ⁴	18 He Hélium 1s ²	
2 Na Sodium 1s ² 2s ² 2p ¹	3 Mg Magnésium 1s ² 2s ² 2p ⁴				13 Al Aluminium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	14 Si Silicium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	15 P Phosphore 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³	16 S Soufre 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴	17 Cl Chlore 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵	
4 K Potassium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹	20 Ca Calcium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	21 Sc Scandium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹	22 Ti Titane 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²	23 V Vanadium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³	24 Cr Chrome 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn Manganèse 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁵ 4s ²	26 Fe Fer 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁶ 4s ²	27 Co Cobalt 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁷ 4s ²	28 Ni Nickel 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁸ 4s ²	29 Cu Cupre 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹
			30 Zn Zinc 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga Gallium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	32 Ge Gérasme 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	33 As Antimoni 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	34 Se Sélénium 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	35 Br Brome 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	36 Kr Krypton 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	

Question

Qui a le plus grand rayon ionique?

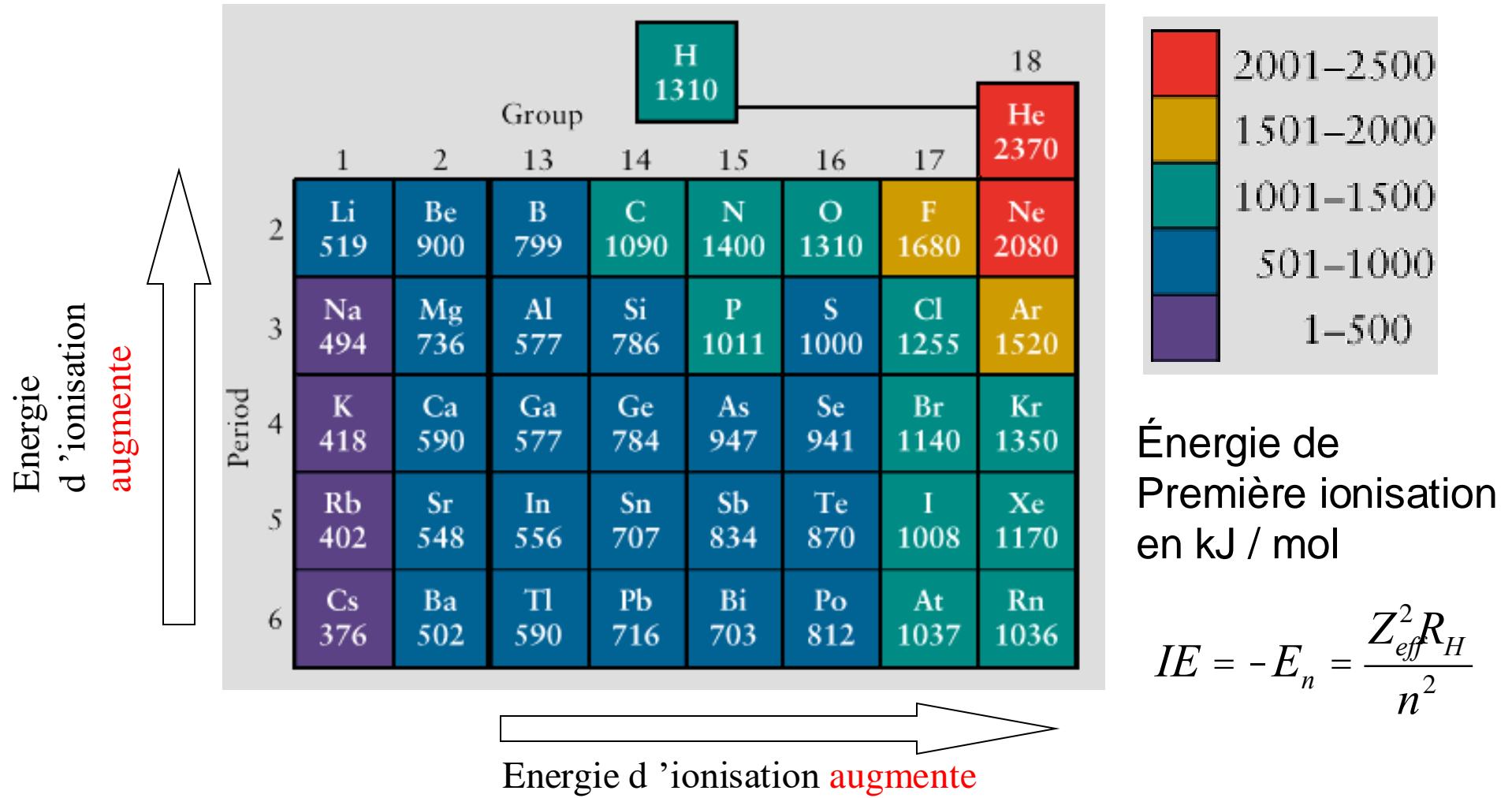
1. K^+
2. Cl^-

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

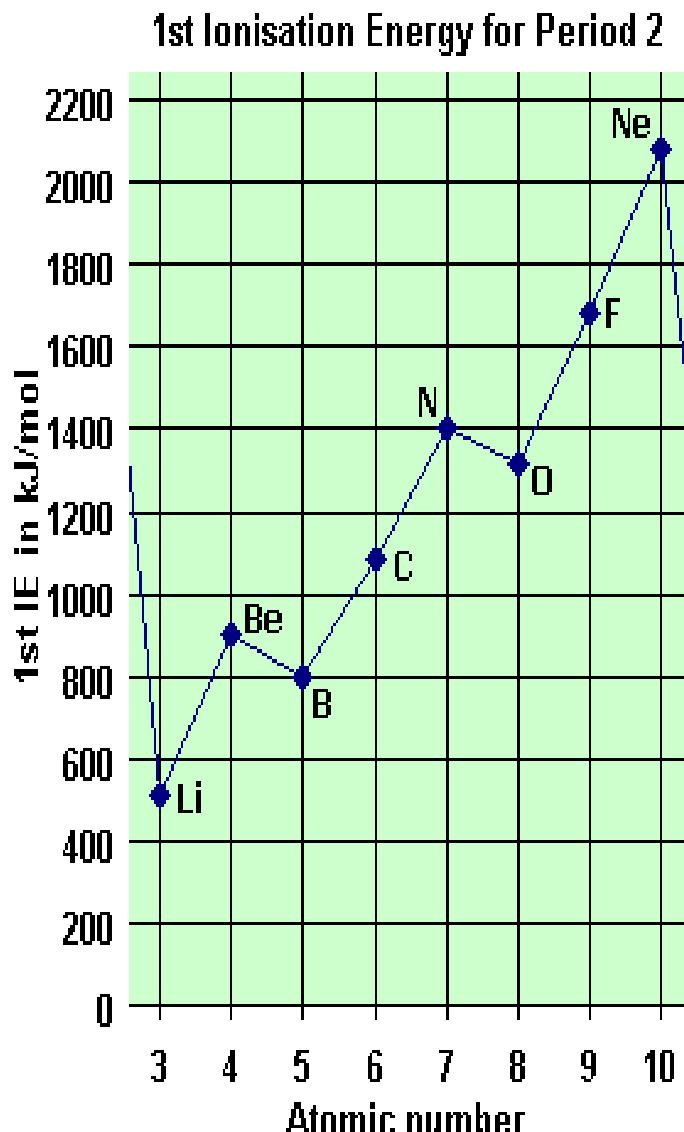
Energie d'ionisation

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

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)



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



Il existe deux conventions
de signe différentes pour AE

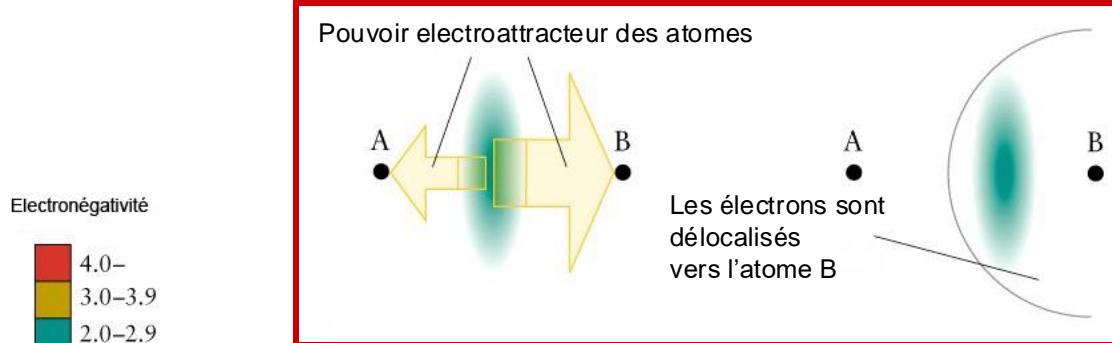
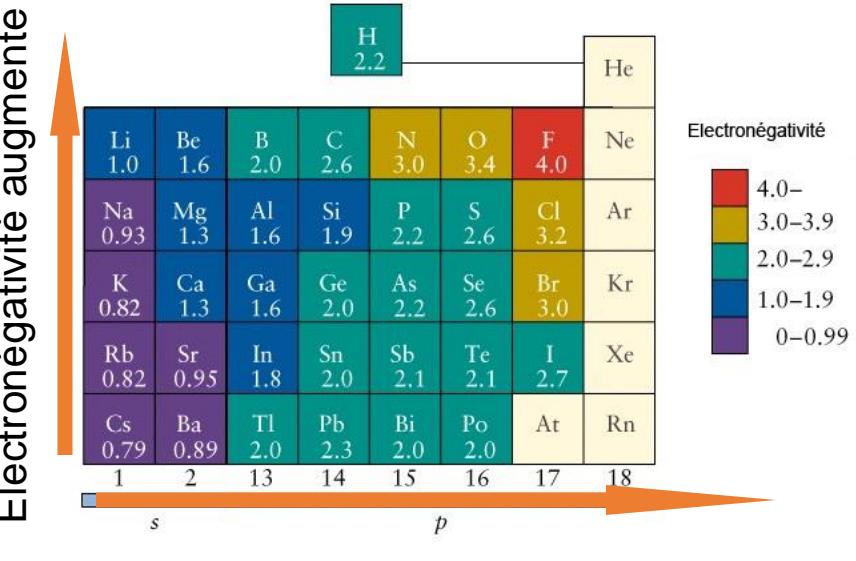
Prédiction des propriétés des éléments

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: electronégativité proportionnelle à la moyenne de l'énergie d'ionisation et de l'affinité électronique



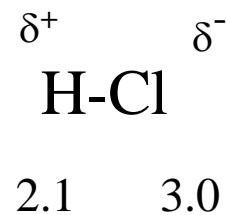
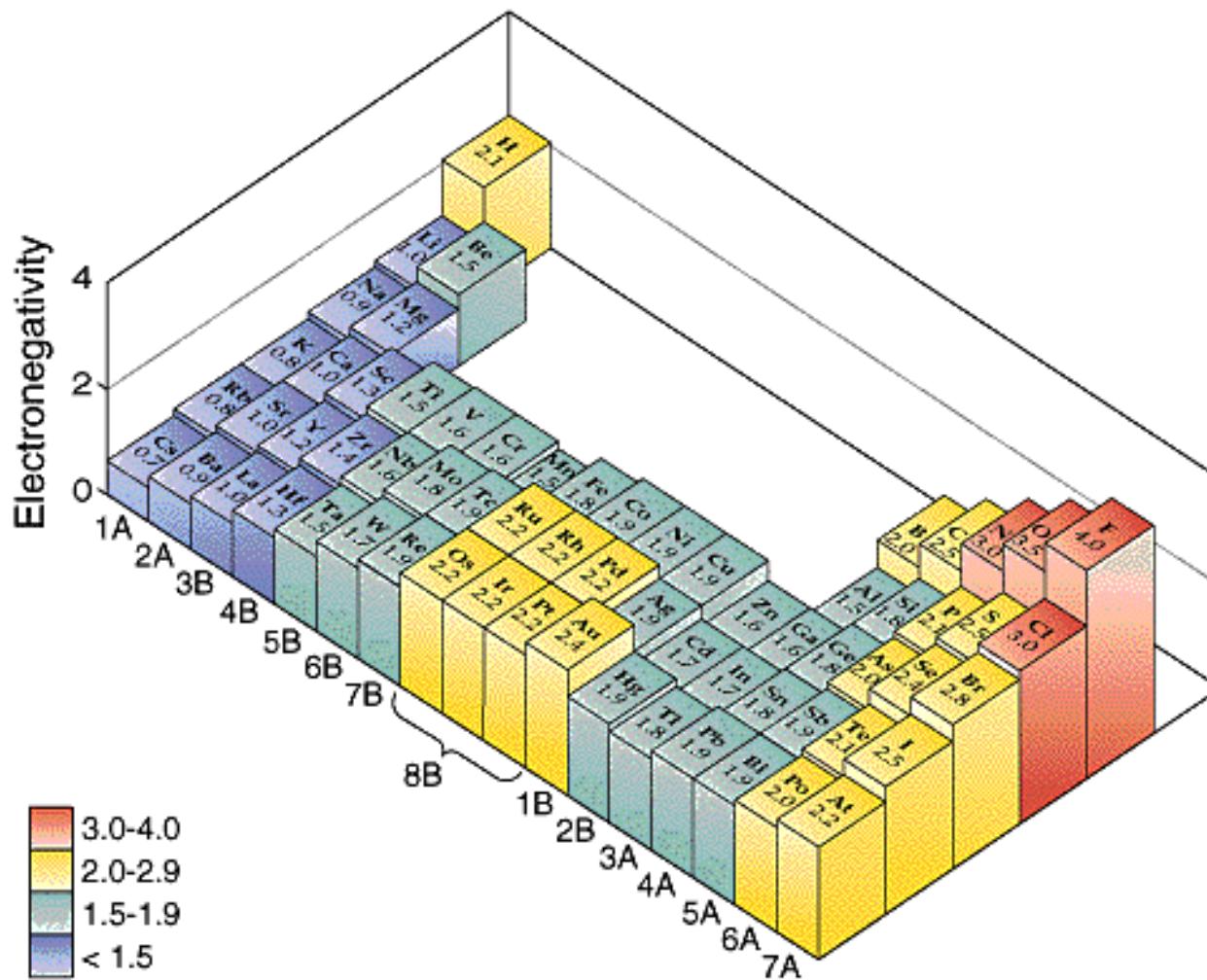
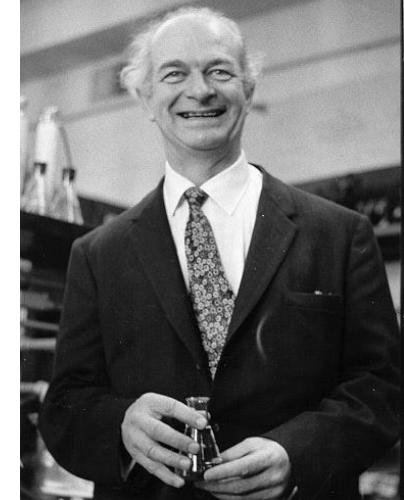
Linus Pauling



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



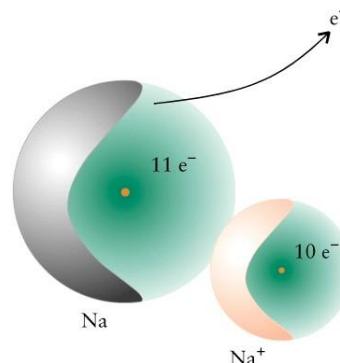
molécule

Fort pouvoir
réducteur



Electronégativité: 0.93

Energie d'ionisation: 494 kJ/mol



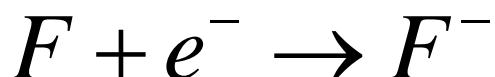
Tendance à
donner
des électrons

Energie d'ionisation
élevée

Electronégativité
élevée

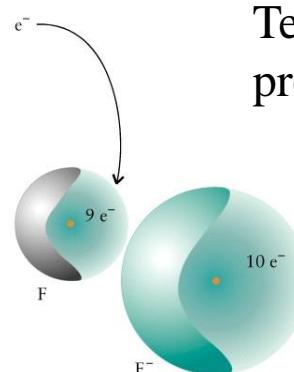
Caractère
Non métallique

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	VIIIB	VIIIB	VIIIB	IB	IB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA	
1	H															He		
2	Li	Be								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																		
** actinides																		
La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu																		
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

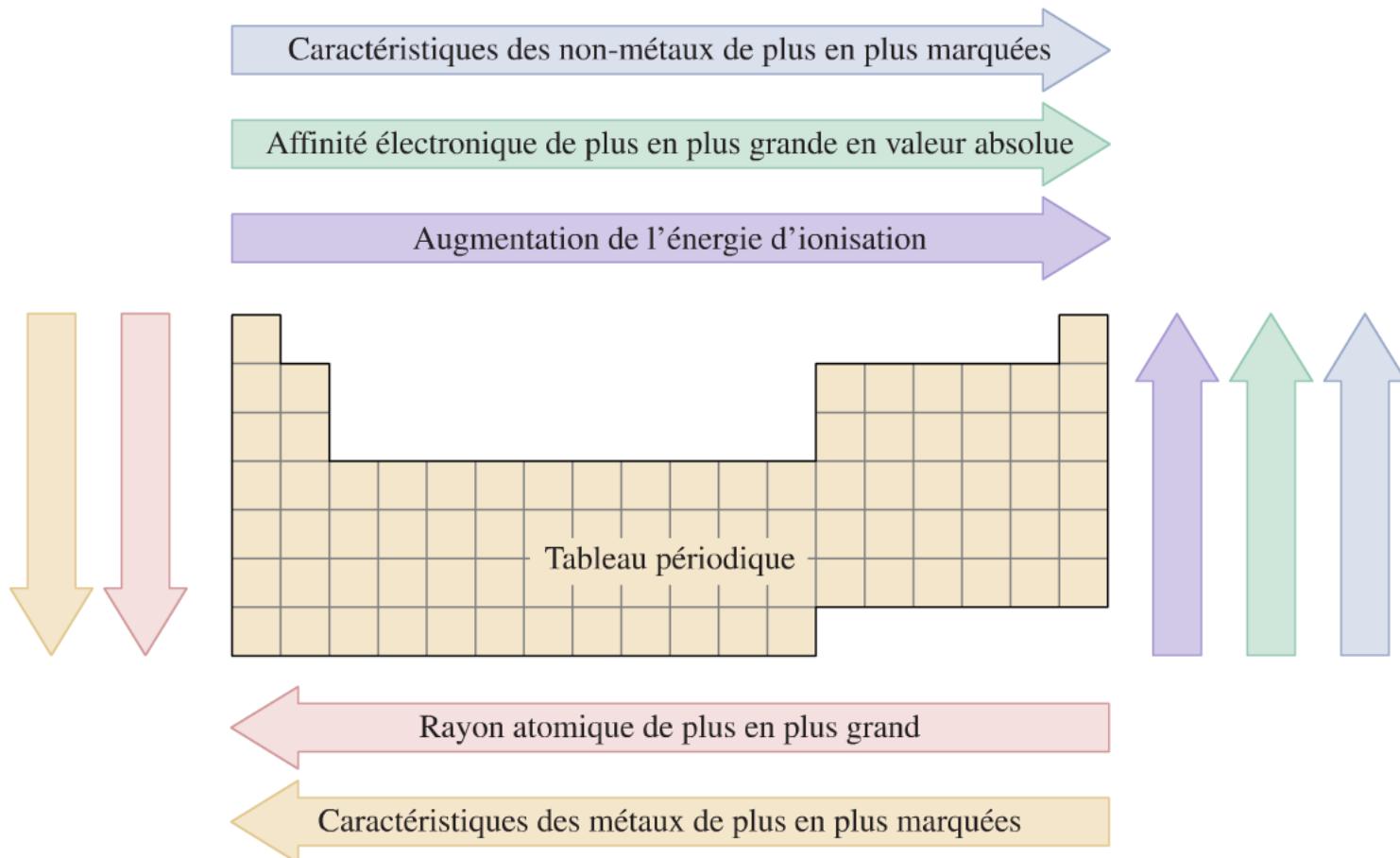
Affinité électronique faible (valeur absolue)

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