

An abstract graphic at the top of the slide featuring a dense collection of overlapping circles and splatters in various colors. The colors transition from warm tones (yellows, oranges, reds) on the left to cool tones (purples, blues, cyan) on the right, creating a vibrant, multi-colored effect.

CH-110 Chimie Generale Avancée I

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

Housekeeping notes

- Les solutions des exercices du livre: disponible à la bibliothèque, sont aussi disponible sur Moodle
- Seulement pour les exercices de nombres impaires (les pairs sont très similaires)
- On a aussi ajouté un guide d'étude avec des résumés
- SESSION ID: 861684

L'Atome d'Hydrogène

Topic 1D

Semaine dernière (Mar): Topic 1D.1 Niveaux d'énergie

Semaine dernière (Mar): Topic 1D.2 Orbitales atomiques

Semaine dernière (Ven): Topic 1D.3 Nombres quantiques, couches et sous-couches

Semaine dernière (Ven): Topic 1D.4 Les formes des orbitales

Topic 1D.5 Spin de l'électron

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

POURQUOI VOUS DEVEZ CONNAITRE
CE SUJET ?

- L'atome d'hydrogène est le **plus simple atome parmi tous** et est utilisé pour dériver **la structure de tous les atomes**.
- Il est **au centre** de beaucoup d'explications en chimie

CE QUE VOUS DEVEZ DEJA SAVOIR ?

- Caractéristique du spectre de l'atome d'hydrogène (Topic 1A)
- Concepts de fonction d'ondes et de niveau d'énergie en mécanique quantique (Topic 1C)

Les Formes des Orbitales

Topic 1D.4



Recap de la dernière fois:

Transition de la particule dans la boîte aux orbitals atomiques

Recap de la Particule dans la Boîte:

Le modèle de la **Particule dans la boîte**: solution de l'équation de Schrödinger en 1D, derive les **fonctions d'ondes** et **les niveaux d'énergie** pour une particule confinée, des fonctions d'onde avec des modèles d'ondes stationnaires spécifiques qui décrivent la distribution de probabilité de trouver la particule à l'intérieur de la boîte.

Extension en Trois Dimensions:

Resoudre **l'équation de Schrödinger en 3D**: plus proche du comportement des électrons dans les atomes, les solutions de cette équation donne les fonctions d'ondes qui représentent le comportement de l'électron en 3D.

Orbitales Atomiques:

Fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène correspondent aux **orbitales** atomiques. Les orbitales décrivent des régions de l'espace où la probabilité de trouver un électron est élevée. La forme des orbitales atomiques est déterminée par le moment angulaire de l'électron.

Recap de la dernière fois:

Transition de la particule dans la boîte aux orbitals atomiques

Chaque fonction d'onde (= orbitale atomique) est caractérisée par un ensemble de **nombres quantiques** qui résultent de la solution de l'équation de Schrödinger :

1. **Le nombre quantique principal (n):** Niveau d'énergie et taille. Une plus haute valeur de n implique que l'électron est plus éloigné du noyau.
2. **Nombre quantique de moment angulaire orbital (l):** formes (s, p, d, f) et peut prendre les valeurs entières entre 0 to $n-1$.
3. **Nombre quantique magnétique (m_l):** Decris l'orientation de l'orbitale dans l'espace et prends les valeurs entre $-l$ et $+l$.
4. **Nombre qauntique de spin (m_s):** Tient compte du spin intrinsèque de l'électron, qui peut être soit $+1/2$, soit $-1/2$..

Concepts en relation:

Fonction d'onde du modèle de la particules dans la boîte décrit **des ondes stationnaires spécifiques**.

Fonction d'onde des orbitales atomiques decrit les **distributions spatiales des électrons autour du noyau**.

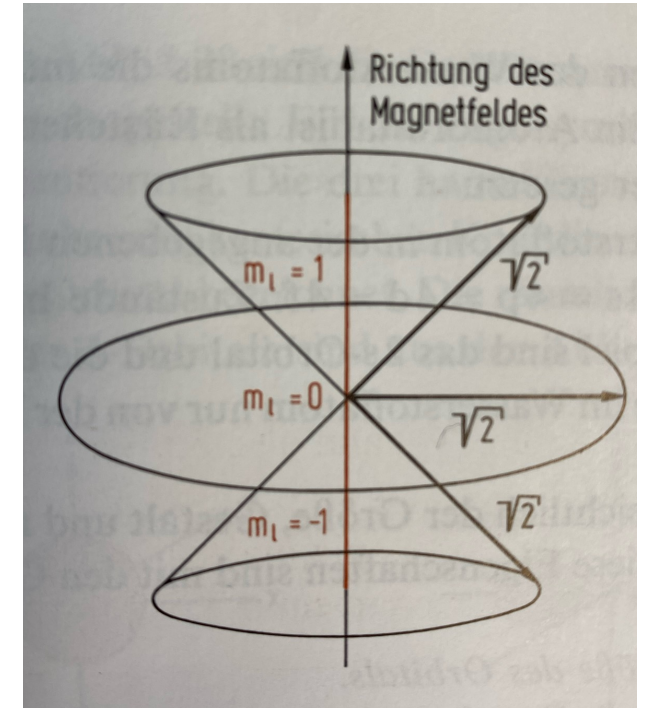
Les nombres quantiques servent de descripteurs essentiels de ces états, tout comme l'entier n indique les niveaux d'énergie autorisés dans la particule dans une boîte.

Recap de la dernière fois:

Nombre quantique de moment angulaire orbital vs. Nombre quantique magnétique (m_l)

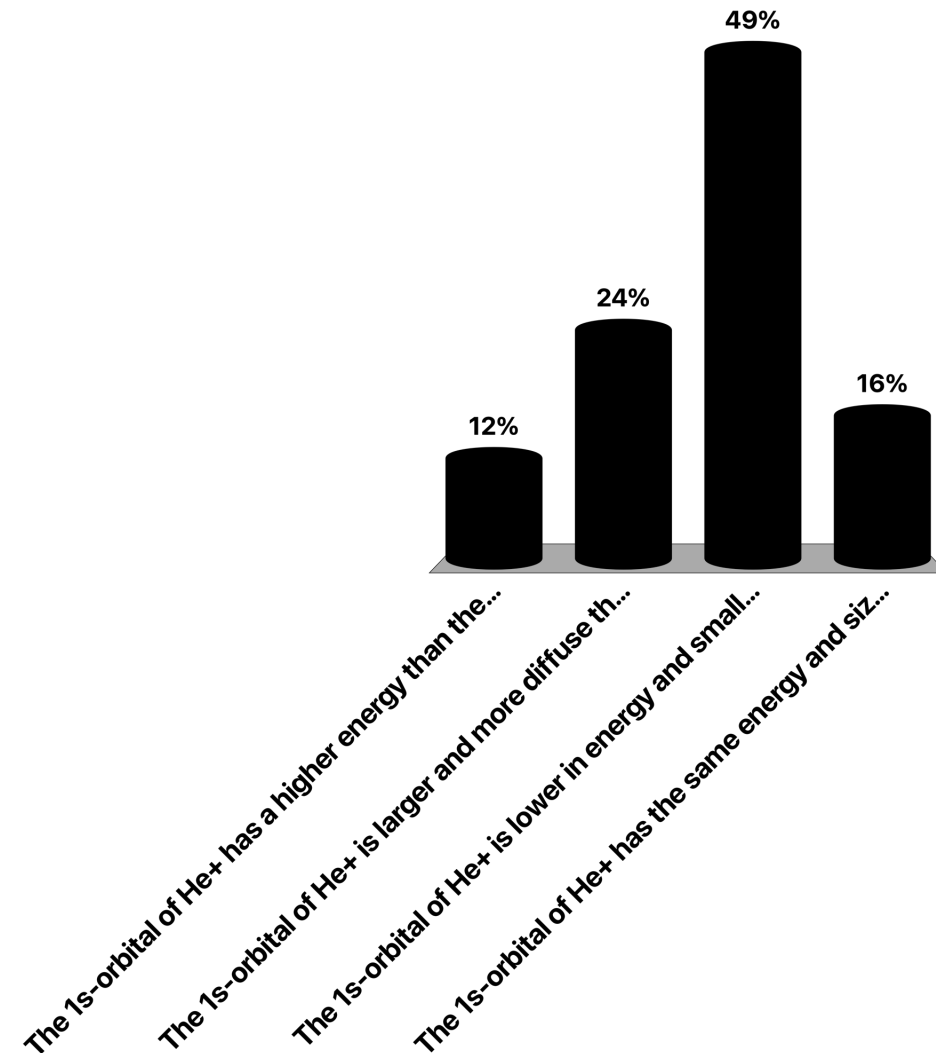
A retenir:

1. *Moment angulaire orbital* = $\sqrt{l(l+1)}\hbar$. Penser à un électron orbitant autour du noyau d'un atome comme une planète autour du soleil. Ce mouvement donne à l'électron un "moment orbital angulaire", qui est une mesure de la quantité de mouvement qu'il a lorsqu'il orbite.
2. Le moment angulaire orbital détermine la **forme** de l'orbitale (nombre quantique l).
3. La projection du moment orbital angulaire contre un axe spécifique (souvent l'axe z) est donnée par le nombre quantique magnétique m_l multiplié par $\hbar$. En d'autres mots: **La valeur de m_l nous indique l'orientation du mouvement de l'électron dans l'espace.** m_l peut prendre les valeurs entre $-l$ et $+l$, déterminant l'orientation de l'orbitale dans l'espace.



Comment l'orbitale 1s de He^+ est-elle différente de l'orbitale 1s de H ?

- A. L'orbitale 1s de He^+ a une plus haute énergie que l'orbitale 1s de H à cause d'une augmentation de la répulsion électron-électron.
- B. L'orbitale 1s de He^+ est plus large et diffuse que l'orbitale 1s de H à cause du plus grand nombre de protons dans le noyau.
- C. **L'orbitale 1s de He^+ est plus basse en énergie et plus petite en taille que l'orbitale 1s de H due à une charge nucléaire effective plus grande éprouvée par l'électron (CORRECTE)**
- D. L'orbitale 1s de He^+ a la même énergie et taille que l'orbitale 1s de H parce que les deux ont un électron.



1D.4 Les formes des orbitales

Question: Comment l'orbitale 1s de He^+ est-elle différente de l'orbitale 1s de H ?

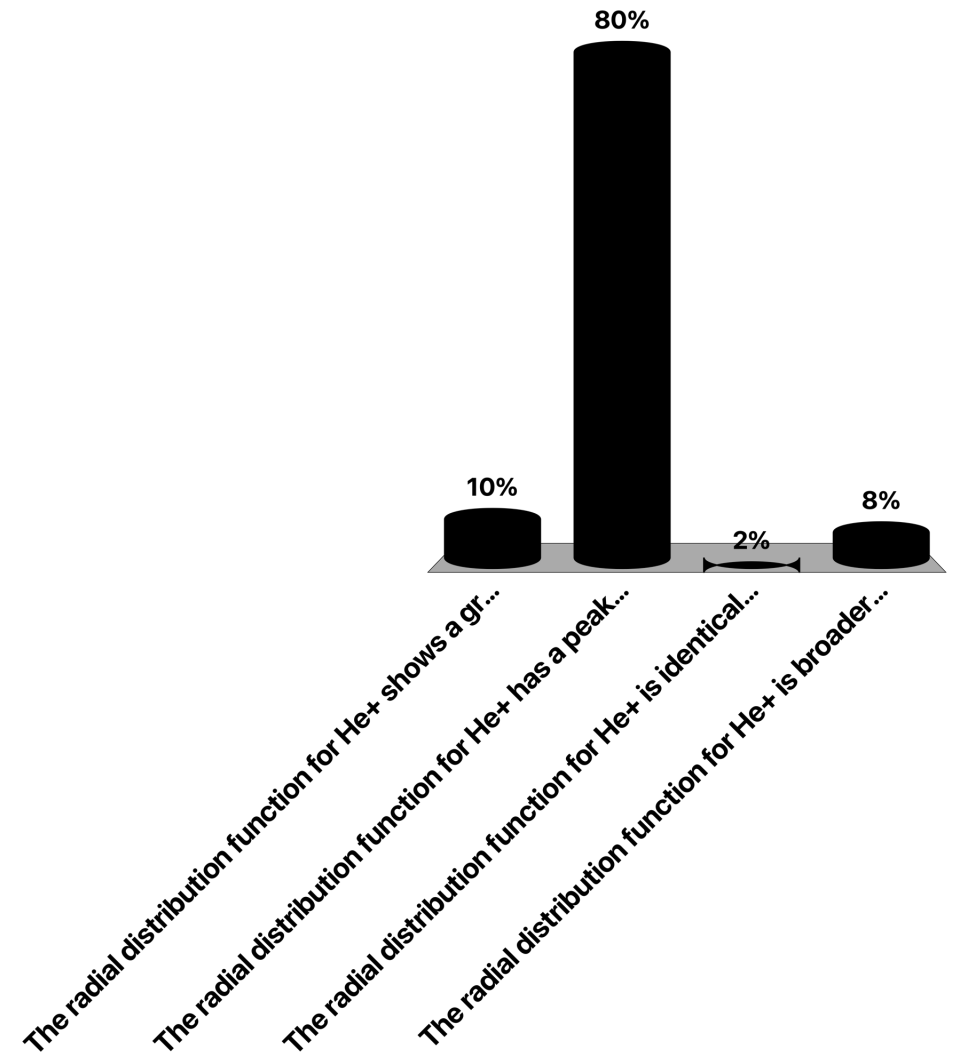
$$E_n = -\frac{Z^2 h R}{n^2} \text{ with } n = 1, 2, \dots$$

Z est le numéro atomique. Pour H, $Z = 1$. Pour He, $Z = 2$.

- **Charge:** He^+ a une plus grande charge nucléaire (+2e) que l'hydrogène (+1e).
- **Energie:** L'orbitale 1s de He^+ est plus faible en énergie (plus négative) comparée à celle de l'hydrogène.
- **Taille:** L'orbitale 1s de He^+ est plus petite et compacte que celle de l'hydrogène à cause d'une plus grande attraction électron-noyau.
- **Densité électronique:** La densité électronique est plus concentrée vers du noyau de He^+ .

Comment la fonction de distribution radiale diffère t'elle pour un électron de He^+ comparée à celle de H?

- A) La fonction de distribution radiale pour He^+ a une plus grande probabilité de trouver l'électron à une distance plus éloigné du noyau comparé à H.
- B) La fonction de distribution radiale He^+ a un pic à un rayon plus petit et plus défini que celle de H, indiquant une plus grande densité de probabilité proche du noyau. (CORRECTE)**
- C) La fonction de distribution radiale de He^+ est identique de celle de H parce que les deux système ont le même nombre de protons.
- D) La fonction de distribution radiale de He^+ est plus large et diffuse que celle de H, indiquant un nuage électronique plus diffus.



1D.4 Les formes des orbitales

Question: Comment la fonction de distribution radiale diffère t'elle pour un électron de He^+ comparée à celle de H ?

La réponse correcte est:

2) La fonction de distribution radiale He^+ a un pic à un rayon plus petit et plus défini que celle de H, indiquant une plus grande densité de probabilité proche du noyau.

Explication:

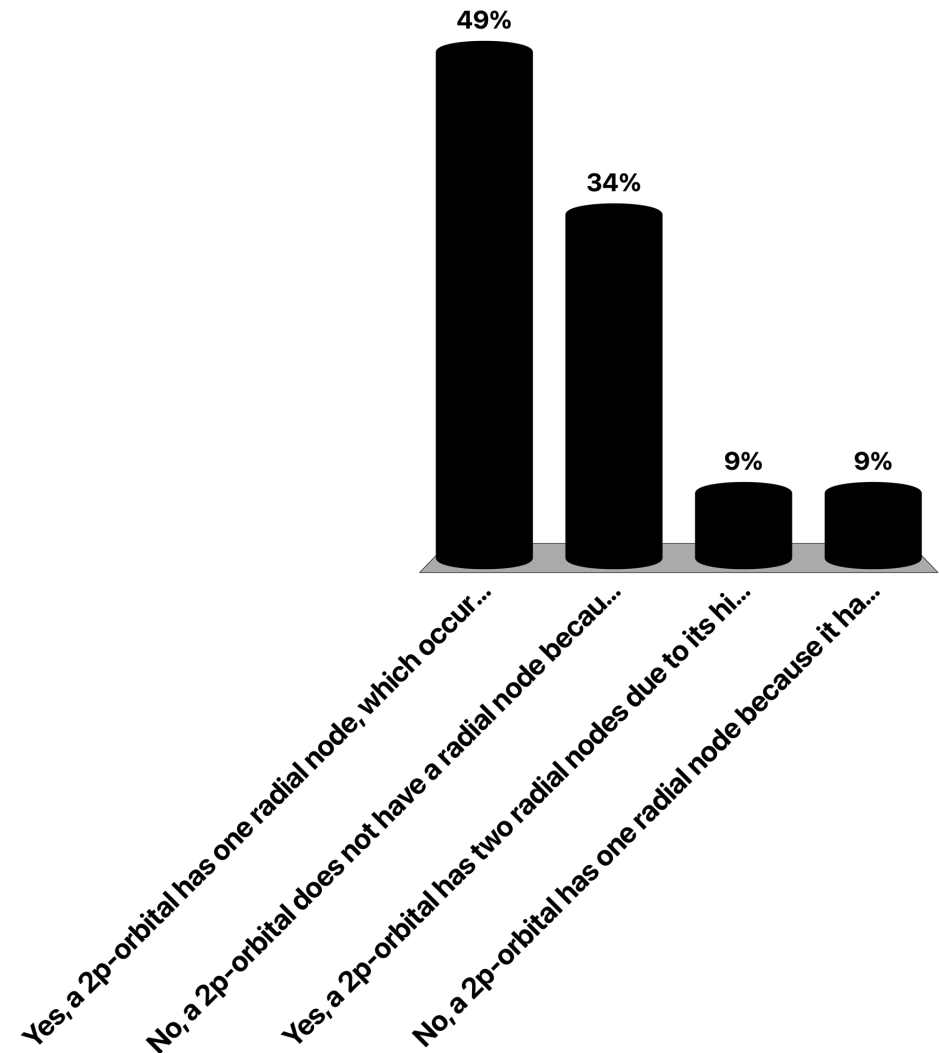
He^+ est un ion hydrogénoïde avec un électron, mais il a deux protons dans son noyau, créant une attraction coulombienne plus forte comparée à l'hydrogène (H), qui n'a qu'un proton.

A cause que cette charge nucléaire plus élevée (deux protons dans He^+ vs. un proton dans H), l'électron He^+ expérience une force attractive plus forte, tirant l'électron plus proche du noyau.

En conséquence, la fonction d'onde de l'électron et sa fonction de distribution radiale sont plus concentrée vers le noyau, impliquant un pic à un plus petit rayon et une plus grande densité de probabilité proche du noyau comparé à l'hydrogène.

Est-ce qu'une orbitale 2p a un noeud radial ? Indice: Pense à la définition d'un noeud radial.

- A) Oui, l'orbitale 2p a un noeud radial, qui survient à une certaine distance du noyau où la probabilité de trouver l'électron est zéro.
- B) Non, l'orbitale 2p n'a pas de noeud radial parce qu'il a seulement des noeuds angulaires. (CORRECTE)**
- C) Oui, l'orbitale 2p a deux noeuds radiaux à cause de sa plus haute énergie comparée à l'orbitale 1s.
- D) Non, l'orbitale 2p a un noeud radial parce qu'il a un noeud angulaire.



1D.4 Les formes des orbitales

Est-ce qu'une orbitale 2p a un noeud radial ? Indice: Pense à la définition d'un noeud radial.

La bonne réponse est:

Non, l'orbitale 2p n'a pas de noeud radial parce qu'il a seulement des noeuds angulaires.

Explication:

Les noeuds radiaux apparaissent lorsque la partie radiale de la fonction d'onde est égale à zéro à une certaine distance du noyau. Pour qu'une orbitale ait un noeud radial, sa fonction d'onde radiale doit passer par zéro.

Le nombre de noeuds radiaux est donné par $n-l-1$

Pour une **orbitale 2p**:

$$n=2, l=1$$

En utilisant la formule pour les noeuds radiaux:

$$n-l-1=2-1-1=0$$

Donc, l'orbitale 2p **n'a pas de noeud radial.**

Les noeuds angulaires sont déterminés par le nombre quantique azimutal l , et pour une orbitale p ($l=1$), il n'y a **qu'un noeud angulaire** (qui correspond au plan où la probabilité de trouver l'électron est égale à zéro, comme le plan xy pour l'orbitale 2p suivant l'axe z).

Ainsi, l'**orbitale 2p n'a pas de noeud radial** mais **un noeud angulaire.**

Spin de l'Electron

Topic 1D.5

1D.5 Spin de l'Electron

Une sphère en rotation

Des petites déviations ont été observés dans le spectre atomique de l'hydrogène.

Goudsmit et Uhlenbeck ont proposé que ces différences sont dues au fait que l'électron se comporte comme une sphère en rotation (comme une planète tournant autour de son axe).

Cette propriété est appelée le spin.

La théorie de Schrödinger n'a pas pris en compte le spin, et a émergé naturellement quand le physicien britannique Paul Dirac a trouvé un moyen (en 1928) de combiner la théorie de la relativité d'Einstein avec l'approche de Schrödinger.

D'après la mécanique quantique, un électron a deux états de spin représentés par les **flèches** $\uparrow$ **et** $\downarrow$ où les lettres grecques α et β .

1D.5 Spin de l'électron

Spin $\uparrow$ et $\downarrow$

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

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

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

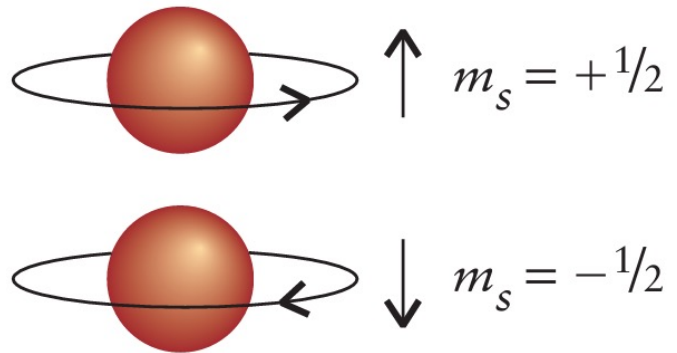


Figure 1D.12

1D.5 Spin de l'électron

Résumé

Un électron a une propriété de spin;

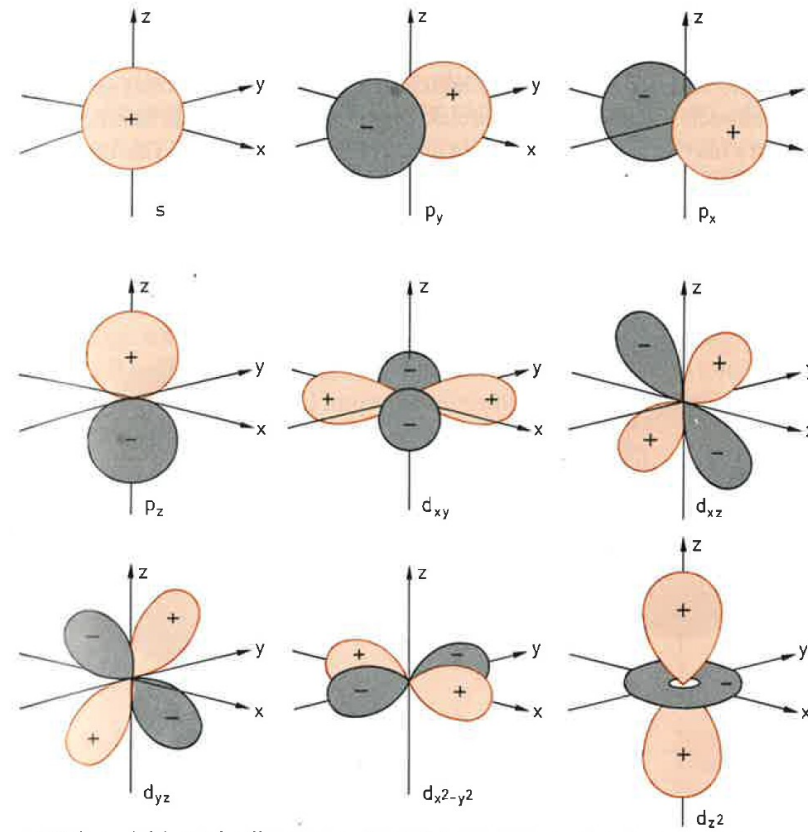
Le spin est décrit par le nombre quantique $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

La Structure Electronique de l'Hydrogène : Un Résumé

Topic 1D.6

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

Résumé du tableau



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

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

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

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

Il s'agit d'un électron s avec un spin défini.

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

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

La distance moyenne d'un électron du noyau augmente quand n augmente: l'atome « gonfle » sous l'effet de l'excitation énergétique.

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

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

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

L'atome est encore plus large

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

4) Encore plus d'énergie:

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

avec 16 orbitales disponibles

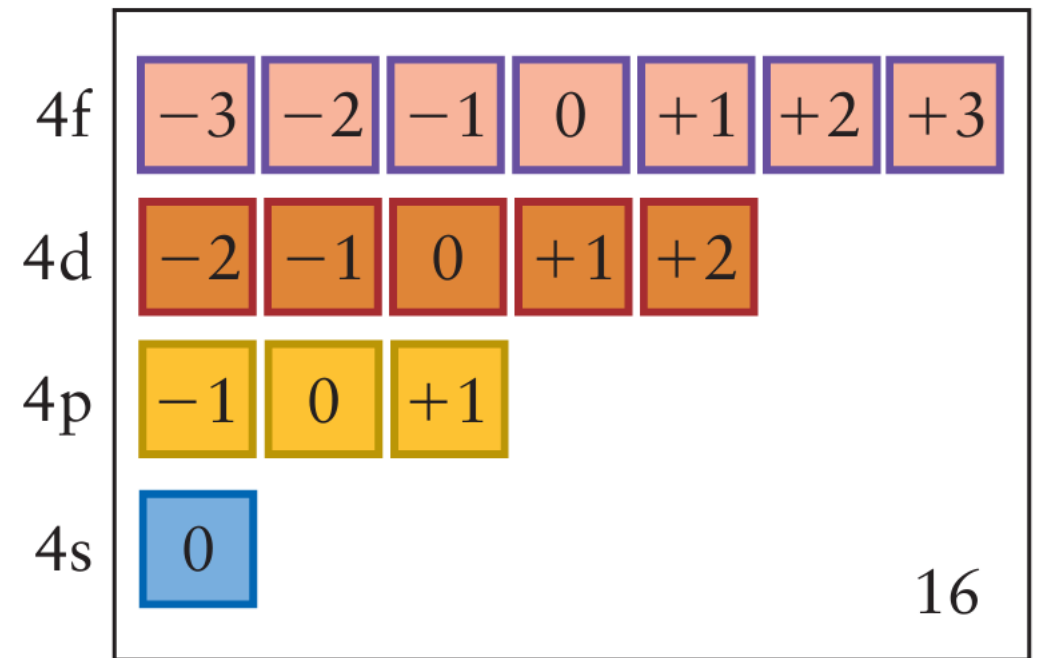


Figure 1D.13

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

TABLE 1.3 Quantum Numbers for Electrons in Atoms

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

*Also called the azimuthal quantum number.

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

Résumé

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

Les compétences que vous avez acquises vous permettent:

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

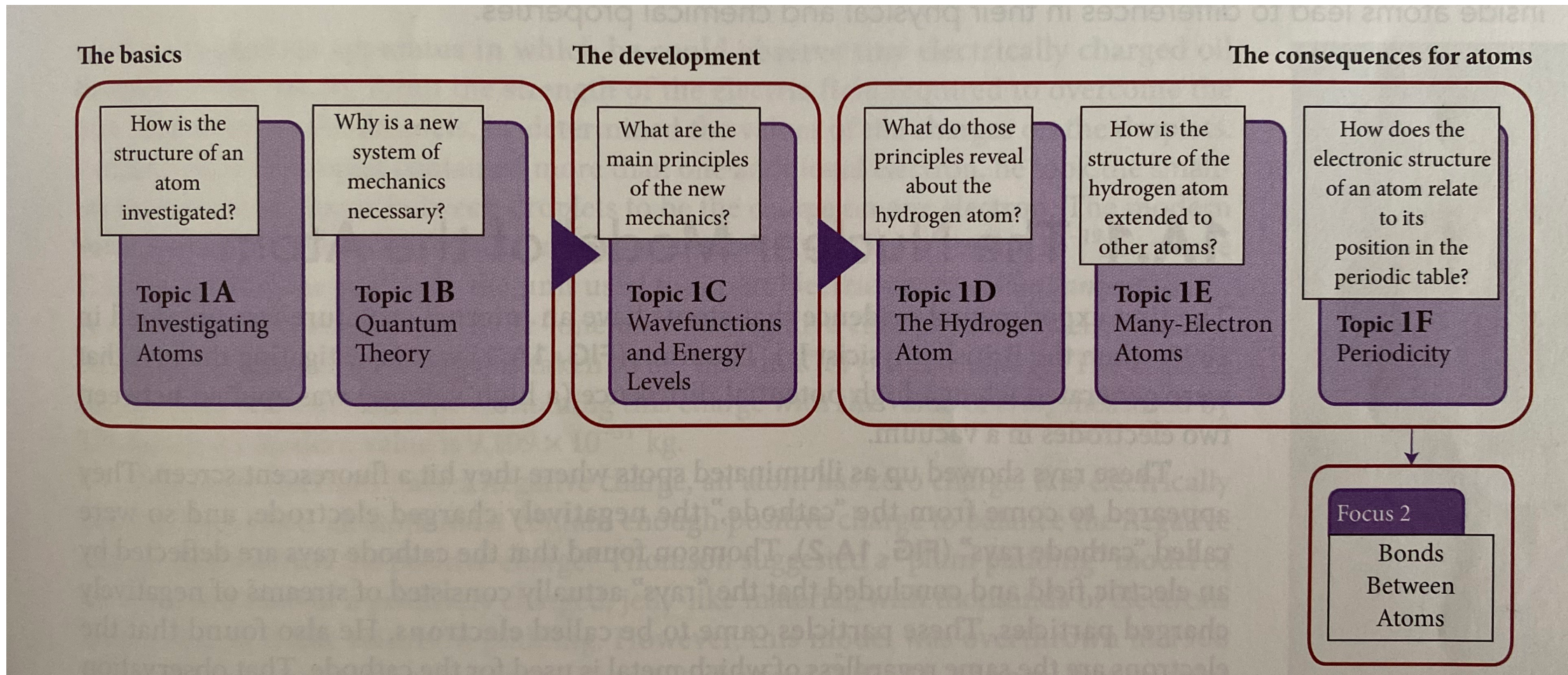
Résumé: Vous avez appris que l'électron d'un atome d'hydrogène est décrit par des fonctions d'onde appelés orbitales atomiques et chaque orbitales est spécifiée par trois nombres quantiques : n , l , and m_l . Vous savez que la forme et les énergies d'une orbitale est trouvé en résolvant l'équation de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

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

Les Atomes Polyélectroniques

Topic 1E

Survol du Chapitre 1 (Focus 1: Atomes)



Topic 1E.1 Energies des Orbitales

Topic 1E.2 Le principe de construction

POURQUOI VOUS DEVEZ CONNAITRE
CELA ?

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

CE QUE VOUS SAVEZ DEJA ?

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

Energies des orbitales

Topic 1E.1

1E.1 Energies des orbitales

La plus part des atomes ont plus d'un électron

- Un atome neutre à part l'hydrogène a plus qu'un électron et est connue comme un **atome à plusieurs électrons** (où atome polyélectronique)
- Dans ce sujet 1E, nous allons apprendre comment la présence de plusieurs électrons affecte les **énergies des orbitales atomiques** et **comment elles sont occupées.**

1E.1 Energies des orbitales

La plus part des atomes ont plus d'un électron

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

1E.1 Energies des orbitales

Energie pour l'atome d'Helium

Pour l'Helium, avec deux électrons, la charge du noyau est de $+2e$, l'énergie potentielle totale est donnée par trois termes:

$$V \propto \underbrace{-\frac{2e^2}{r_1}}_{\substack{\text{Attraction de} \\ \text{l'électron 1} \\ \text{vers le noyau}}} - \underbrace{\frac{2e^2}{r_2}}_{\substack{\text{Attraction de} \\ \text{l'électron 2} \\ \text{vers le noyau}}} + \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_{\substack{\text{Répulsion} \\ \text{entre les deux} \\ \text{électrons}}}$$

Avec r_1 : la distance de l'électron 1 du noyau, r_2 est la distance de l'électron 2 du noyau, et r_{12} est la distance entre les deux électrons.

1E.1 Energies des orbitales

Résoudre l'équation de Schrödinger pour l'atome d'Helium

- L'équation de Schrödinger basé sur le potentiel de la slide précédente est **impossible à résoudre exactement**.
- Des **solutions numériques** hautement précises peuvent être obtenues à l'aide d'ordinateurs.
- Aujourd'hui, les chimistes sont parmi les **plus grands utilisateurs d'ordinateurs**, les utilisant pour calculer des structures électroniques détaillées des atomes et molécules. (Au côté des casseurs de codes, météorologues et des biologistes moléculaires, des domaines comme la data science, le machine learning, la finance et l'ingénierie sont aussi devenus des utilisateurs de ressources computationnelle, augmentant la demande pour des techniques computationnelles sophistiquées pour résoudre des problèmes complexes venant de différentes disciplines).

1E.1 Energies des orbitales

Les énergies de l'hydrogène vs. atomes polyélectroniques

L'atome d'Hydrogène:

- Un électron et **pas de répulsions électron-électron**
- Toutes les orbitales d'une couche donnée sont **dégénérées** (ont la même énergie):
l'orbitale 2s et toutes les trois orbitales 2p ont la même énergie

Atomes polyélectroniques:

- **Les répulsions électron-électron** fait en sorte l'énergie des orbitales 2p soit plus élevée que celles de l'orbitale 2s.
- Pareil pour $n=3$: les orbitales 3d plus hautes que 3p, et 3p plus haute que 3s:

1E.1 Energies des orbitales

Les différences de niveau d'énergie des orbitales de la même couche

1E.1 Energies des orbitales

Blindage

- Chaque électron est attiré par le noyau et **repoussé par les autres électrons**.
- L'électron est moins fortement attaché au noyau qu'il ne le sera si les autres électrons étaient absents: **l'électron est blindé de l'attraction totale du noyau** par les autres électrons du noyau.
- L'effet de blindage réduit l'attraction du noyau sur un électron.
- La **charge nucléaire effective**, $Z_{eff}e$, expérimentée par l'électron est toujours plus petite que la charge nucléaire totale, Ze . Les répulsions électron-électron travaillent contre l'attraction du noyau.
- **Une forme approximative** de l'énergie d'un électron dans un atome polyélectronique est une version de l'équation donnée dans le sujet 1D ($E_n = -Z^2 hR/n^2$)

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

1E.1 Energies des orbitales

Blindage dans les différentes orbitales

- L'étendue du blindage dépend de l'endroit **où l'électron est le plus susceptible d'être trouvé** → **forme** de l'orbitale
- Un **électron s** de n'importe quelle couche peut être trouver très proche du noyau: il est dit qu'il pénètre au travers des couches internes
- Un **électron p** pénètre bien moins à cause de son moment angulaire orbitaire qui l'empêche de s'approcher du noyau.
- Un électron p a une densité de probabilité nulle au noyau.
- Parce qu'un électron p pénètre moins qu'un électron s au travers des couches internes, il est bien plus blindé du noyau → **Expérimente une charge nucléaire effective plus faible qu'un électron s**
- Un électron s est plus fortement attaché qu'un électron p et a une énergie légèrement plus basse (plus négative).
- Un électron d est moins fortement attaché d'un électron p, parce qu'il a un plus grand moment angulaire.

1E.1 Energies des orbitales

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

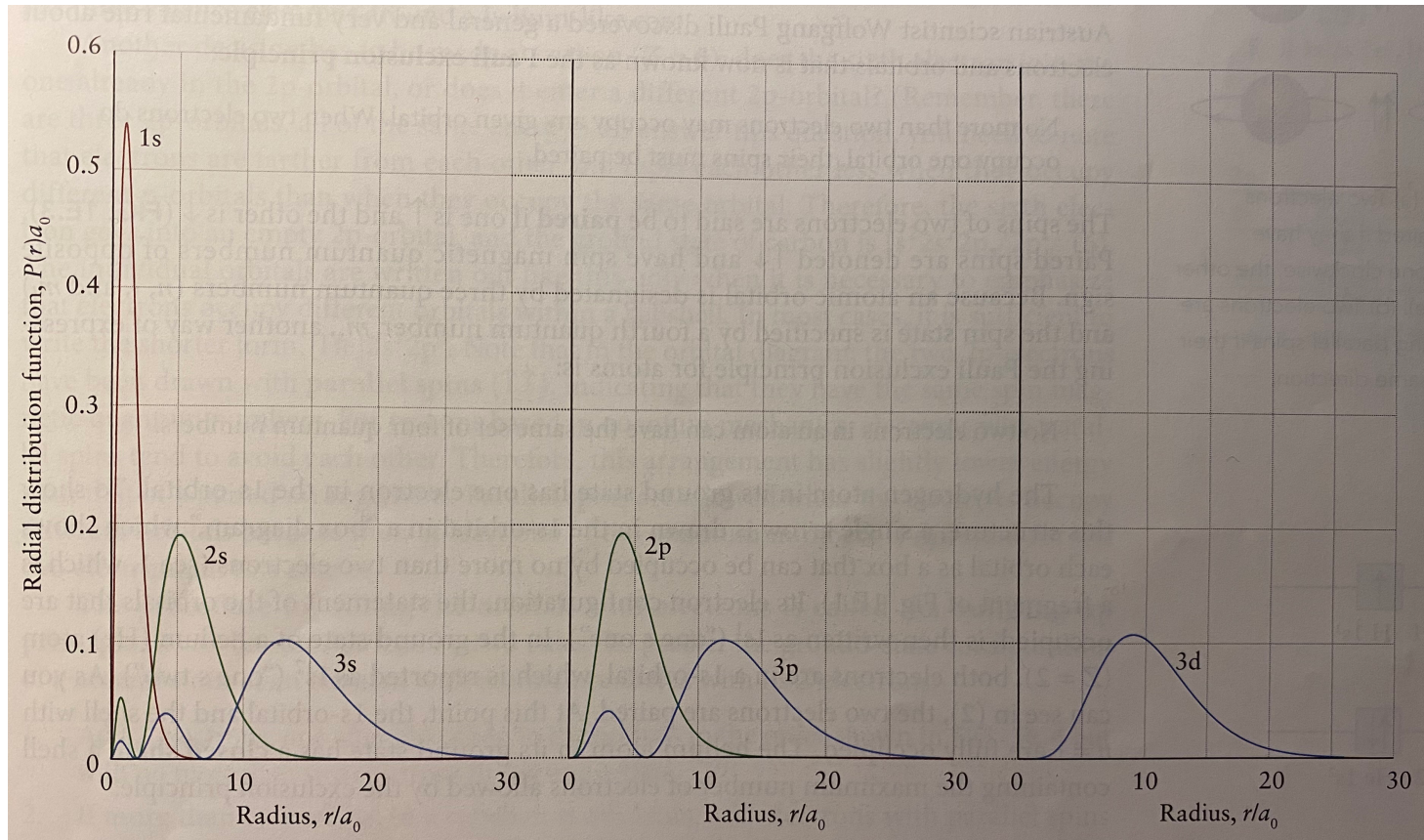


Figure 1E.2

- Trois premières couches de l'atome d'hydrogène.
- Le maximum de probabilité pour une orbitales d'une même couche sont proches les uns des autres.
- Un électron d'une orbitale ns a une plus grande probabilité d'être trouvé proche du noyau qu'un électron dans une orbitale np ou nd

1E.1 Energies des orbitales

Les effets du blindage peuvent être grand

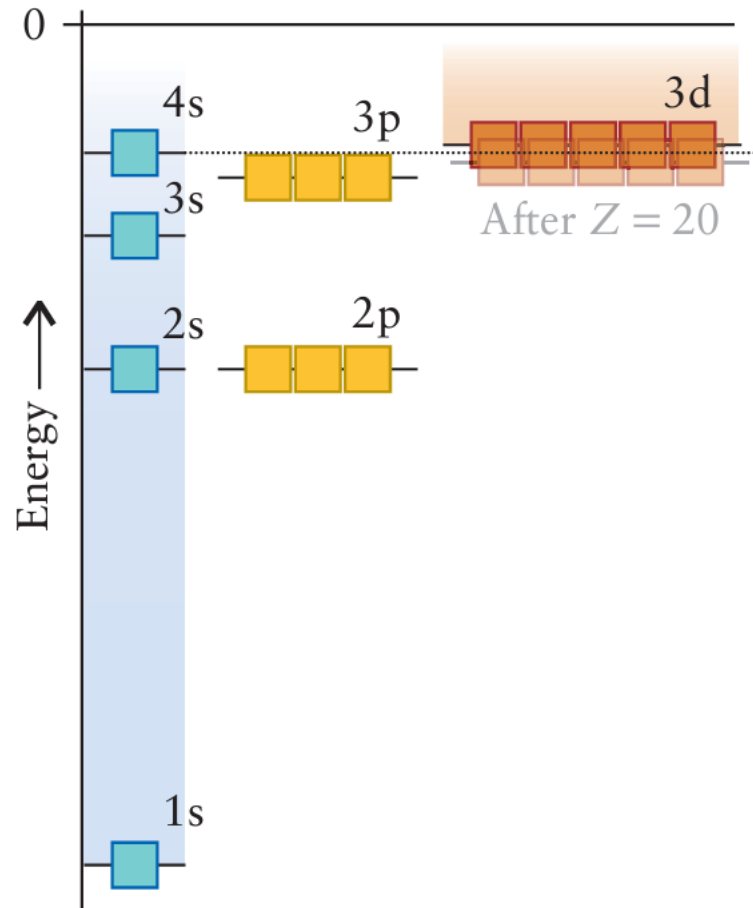


Figure 1E.1

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

1E.1 Energies des orbitales

Résumé

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

Le Principe de Construction

Topic 1E.2

1E.2 Le principe de construction

La structure électronique des atomes polyélectroniques

- La structure électronique d'un atome détermine ses propriétés chimiques.
- **La configuration électronique**: une liste de toutes ses orbitales occupées avec le nombre d'électrons occupant chacune d'entre elle.
- **L'état fondamental** d'un atome polyélectronique: les électrons occupent les orbitales atomiques de telle sorte que l'énergie totale de l'atome soit au minimum.
- **L'énergie totale d'un atome**: la somme des énergies cinétiques de chaque électron, l'attraction de chaque électron vers le noyau et la répulsion entre tous les électrons.
- A première vue: la plus faible énergie est obtenue si tous les électrons sont dans l'orbitale la plus faible en énergie (1s)
- Mais: A part l'hydrogène et l'hélium (seulement jusqu'à deux électrons), cela ne peut jamais se produire.

1E.2 Le principe de construction

Le principe d'exclusion de Pauli

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

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

- Les spins de deux électrons sont appariés si l'un est $\uparrow$ et l'autre $\downarrow$.
- Les spins appariés sont notés $\uparrow\downarrow$ et ont des nombres quantiques magnétiques de spin de signes opposés.
- Une autre façon de formuler le principe d'exclusion de Pauli :

Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir le même ensemble de quatre nombres quantiques.

1E.2 Le principe de construction

Le principe d'exclusion de Pauli

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

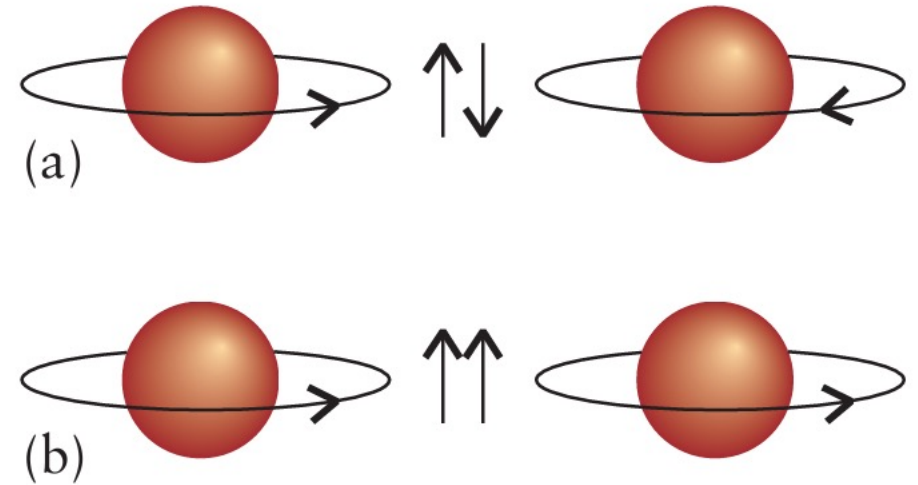
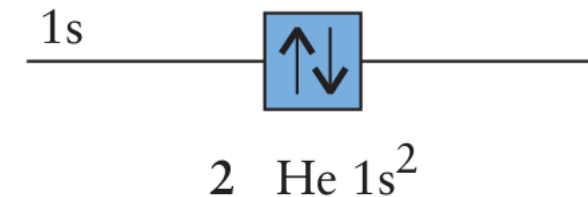
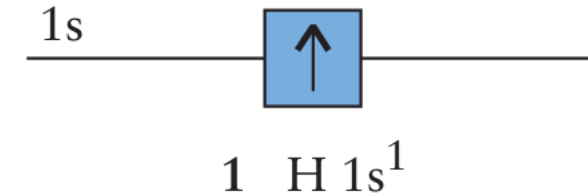


Figure 1E.3

1E.2 Le principe de construction

Hydrogène et hélium

- L'hydrogène à l'état fondamental : un électron dans l'orbitale 1s: une seule flèche dans le diagramme en boîte: $1s^1$ (configuration électronique)
- La boîte indique la place pour deux électrons.
- L'hélium à l'état fondamental: deux électrons dans l'orbitale 1s: deux électrons appariés dans le diagramme en boîte: $1s^2$
- L'hélium a totalement remplis son orbitale 1s
- L'hélium a une **couche complète** : une couche contenant le nombre maximum d'électrons autorisés par le principe d'exclusion.



1E.2 Le principe de construction

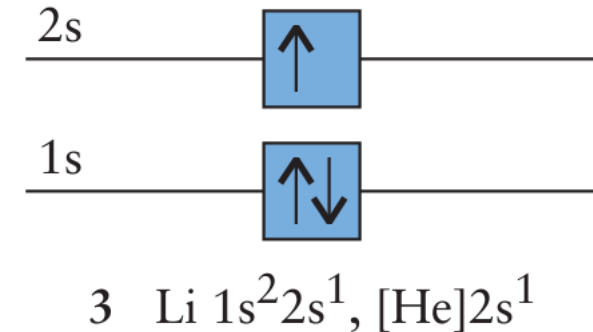
Les électrons de valence

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

1E.2 Le principe de construction

Lithium (Li)

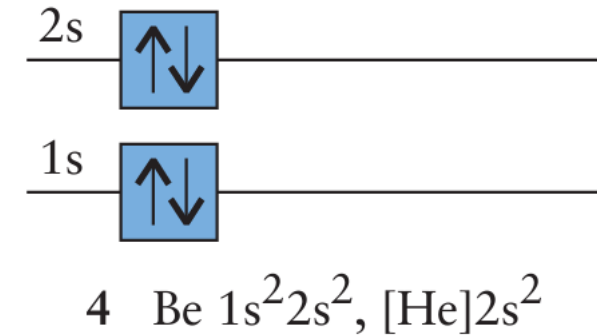
- Le lithium ($Z = 3$) a trois électrons : Deux dans l'orbitale $1s$, un dans l'orbitale $2s$.
- Etat fondamental du lithium: $1s^2 2s^1$
- Cœur du lithium: $1s^2 = [\text{He}]$
- Avec les électrons de valence: **$[\text{He}]2s^1$**
- Le lithium **perd seulement un électron** lorsqu'il forme des composés : Li^+ plutôt que Li^{2+} ou Li^{3+}



1E.2 Le principe de construction

Béryllium (Be)

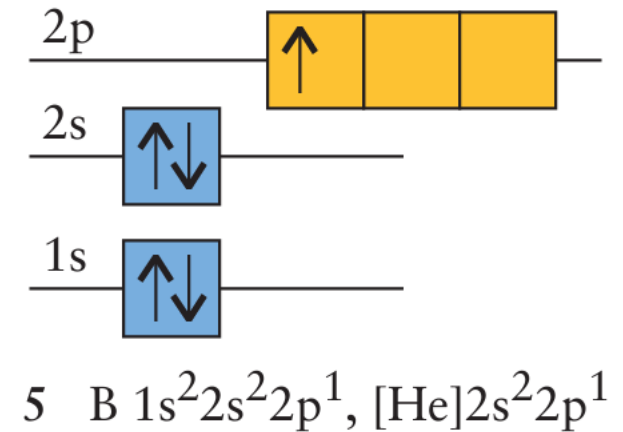
- Le béryllium ($Z = 4$) a quatre électrons: deux dans l'orbitale $1s$, deux dans l'orbitale $2s$.
- Etat fondamental: $1s^2 2s^2$
- Avec électrons de valence: **[He] $2s^2$**
- L'atome Be perd seulement ses électrons de la couche de valence lors de réactions chimiques : ion Be^{2+}



1E.2 Le principe de construction

Bore (B)

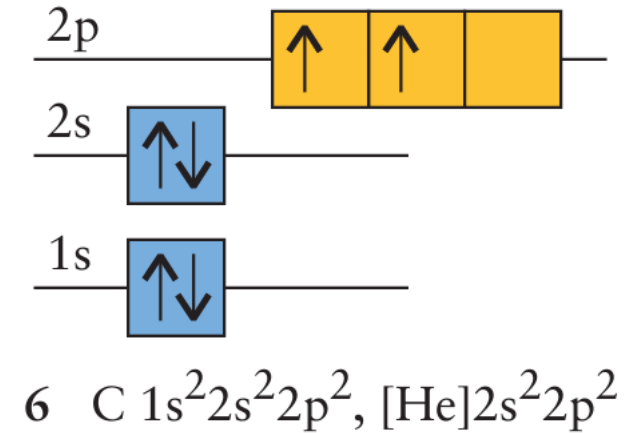
- Le bore ($Z = 5$) a cinq électrons. Deux dans l'orbitale $1s$, deux dans l'orbitale $2s$, un dans l'orbitale $2p$.
- Etat fondamental: $1s^2 2s^2 2p^1$
- Avec les électrons de valence: $[\text{He}] 2s^2 2p^1$



1E.2 Le principe de construction

Carbone (C)

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



1E.2 Le principe de construction

Le principe de construction et la règle de Hund

Deux règles:

1. Ajouter Z électrons, l'un après l'autre, dans les orbitales selon l'ordre de la Fig. 1E.4 (slide suivante) mais sans mettre plus de deux électrons dans une orbitale.
 2. Si une sous-couche contient plus d'une orbitale, placez les électrons dans les différentes orbitales de la sous-couche avec des spins parallèles plutôt que d'apparier deux électrons dans l'un des orbitales. (**Règle de Hund**, d'après le spectroscopiste allemand Friedrich Hund)
- **La configuration** d'un atome est à la **plus faible énergie totale** : maximise l'attraction des électrons par le noyau et minimise leurs entre les électrons.

1E.2 Le principe de construction

Le tableau périodique

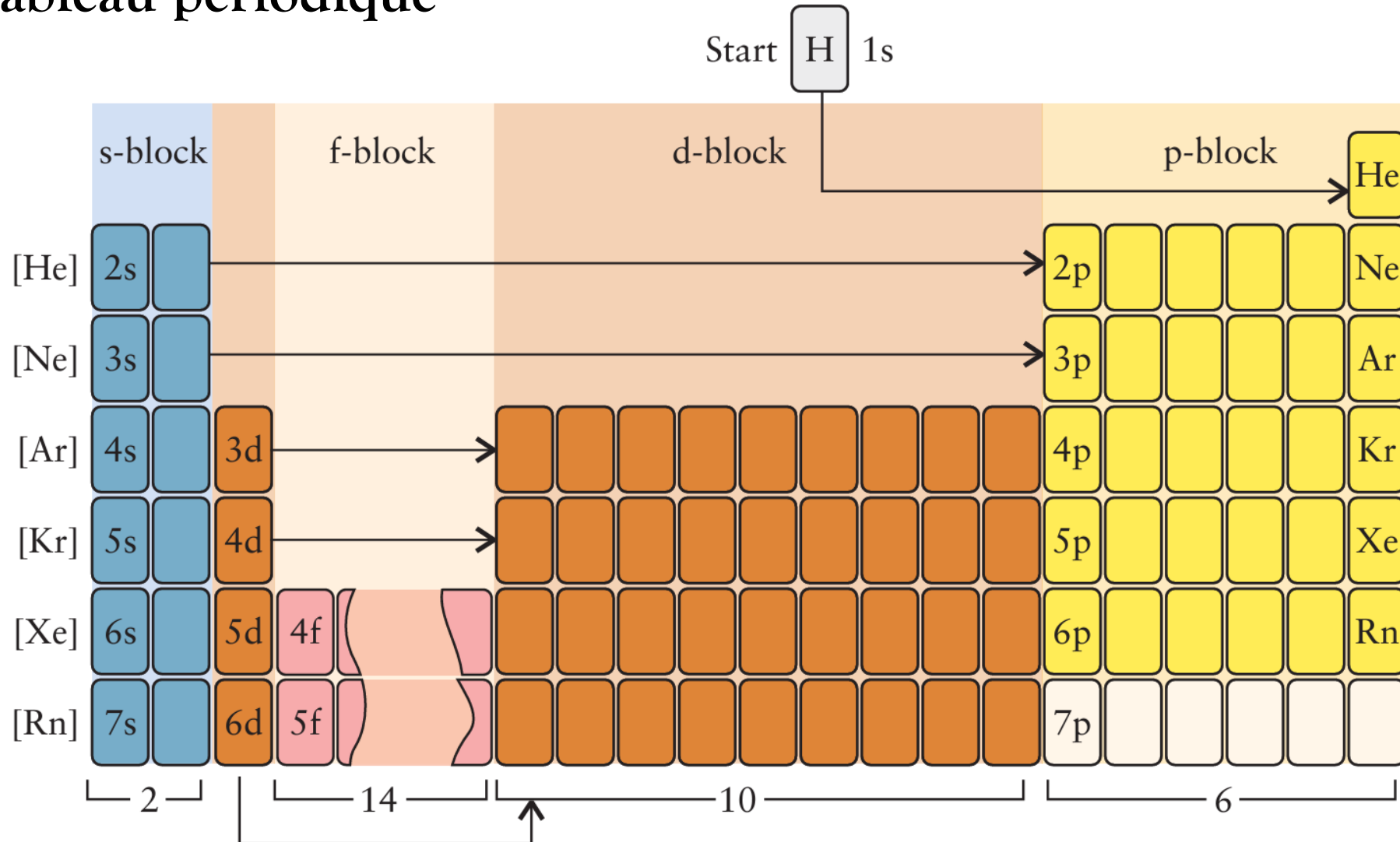


Figure 1E.4

1E.2 Le principe de construction

L'état excité

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

Le principe de construction est appelé communament **principe de l'Aufbau**, du terme allemand signifiant «construire».

- Pensez à n'importe quel atome: Un cœur de gaz noble entouré par des électrons de valence.
- La **couche de valence** est la couche occupée avec la valeur de n la plus élevée.

1E.2 Le principe de construction

L'organisation sous-jacente: Période

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

1E.2 Le principe de construction

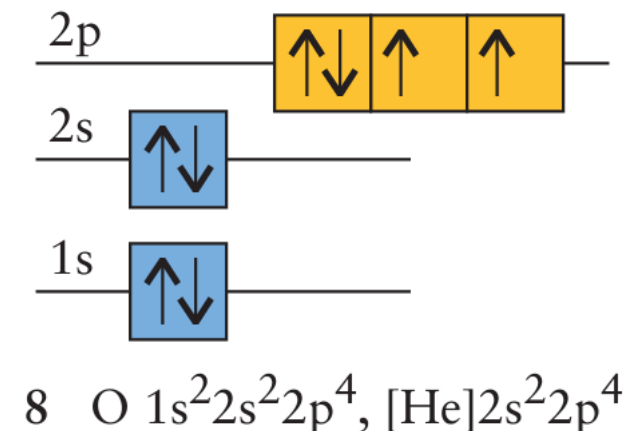
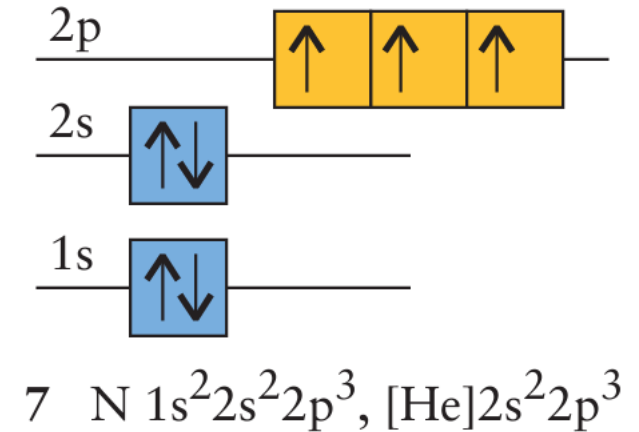
L'organisation sous-jacente: Groupes

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

1E.2 Le principe de construction

Azote et oxygène

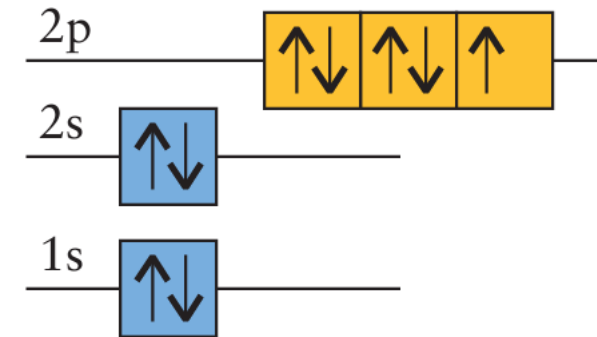
- **L'azote** ($Z = 7$) a sept électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, trois dans l'orbitale 2p.
- Etat fondamental: $1s^2 2s^2 2p^3$
- Avec électrons de valence: $[\text{He}] 2s^2 2p^3$
- **L'oxygène** ($Z = 8$) a huit électrons. Deux dans l'orbitale 1s, deux dans l'orbitale 2s, quatre dans l'orbitale 2p.
- Etat fondamental: $1s^2 2s^2 2p^4$
- Avec électrons de valence: $[\text{He}] 2s^2 2p^4$



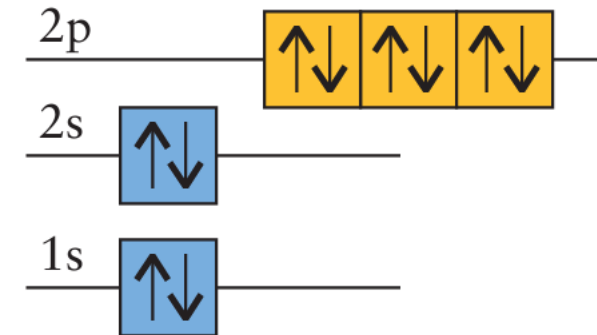
1E.2 Le principe de construction

Fluor et néon

- **Le fluor** ($Z = 9$) a neuf électrons. Deux dans l'orbitale $1s$, deux dans l'orbitale $2s$, cinq dans l'orbitale $2p$.
- Etat fondamental: $1s^2 2s^2 2p^5$
- Avec électrons de valence: $[\text{He}] 2s^2 2p^5$
- Seulement un électron n'est pas apparié
- **Néon** ($Z = 10$) a dix électrons. Deux dans l'orbitale $1s$, deux dans l'orbitale $2s$, six dans l'orbitale $2p$.
- Etat fondamental: $1s^2 2s^2 2p^6$
- Avec électrons de valence: $[\text{He}] 2s^2 2p^6$
- Tous les électrons sont appariés (couche complète $n=2$)
- Suivant: sodium, Na ($Z = 11$): $[\text{Ne}] 3s^1$



9 F $1s^2 2s^2 2p^5$, $[\text{He}] 2s^2 2p^5$



10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$, $[\text{He}] 2s^2 2p^6$

1E.2 Le principe de construction

Après que les orbitales 3p soit remplies ...

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

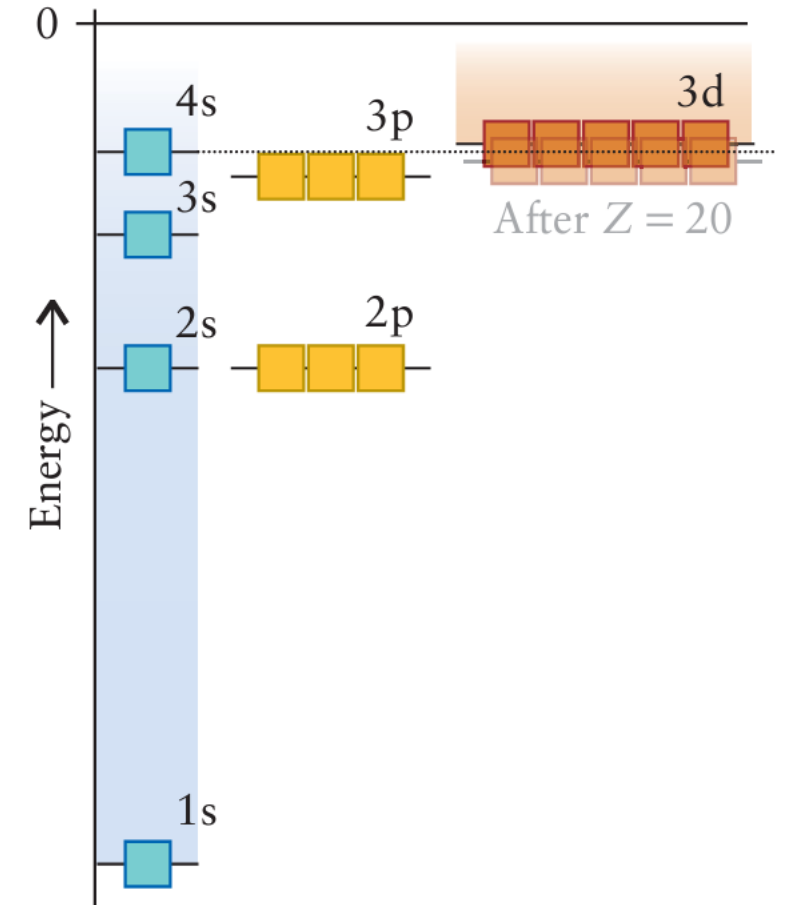


Figure 1E.1

1E.2 Le principe de construction

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

- Changement de rythme: **orbitales 3d**
- De $Z = 21$ à $Z = 30$ (scandium au zinc)
- Scandium ($Z = 21$): $[\text{Ar}]3d^14s^2$
- Titane ($Z = 22$): $[\text{Ar}]3d^24s^2$
- Note: les orbitales 3d sont écrites avant l'orbitale 4s parce qu'elles deviennent plus basses en énergie comparée à la 4s **lorsqu'elles sont remplies avec des électrons**
- La même relation s'applique pour des orbitales nd et $(n+1)s$ dans les périodes suivantes.

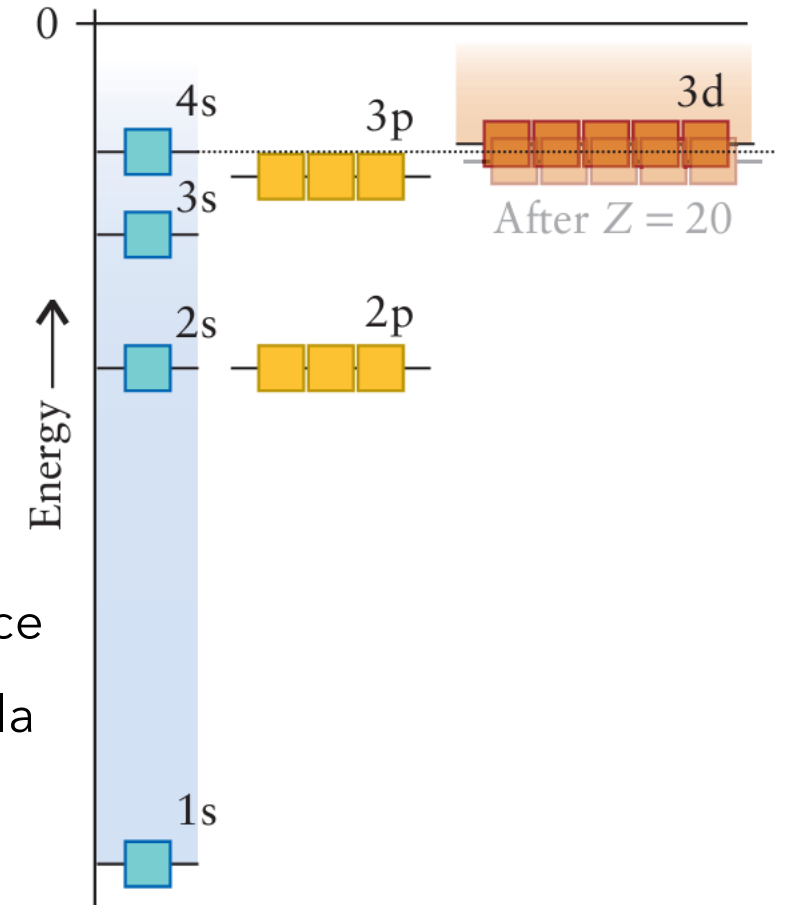


Figure 1E.1

1E.2 Le principe de construction

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

- Les électrons suivants sont ajoutés aux orbitales d au fur et à mesure que Z augmente.
- Avec deux exceptions:
- Chrome ($Z = 24$): $[\text{Ar}]3d^54s^1$ au lieu de $[\text{Ar}]3d^44s^2$
- Cuivre ($Z = 29$): $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$ au lieu de $[\text{Ar}]3d^94s^2$
- **La configuration de sous-couche à demi-complète** d^5 et **la configuration de sous-couche complète** d^{10} ont une énergie plus faible
- Plus d'exceptions au principe de construction peuvent être trouvées dans l'Appendix 2C avec la liste complète des configurations électroniques.

1E.2 Le principe de construction

Après que les orbitales 3d soient remplies ...

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

CONCEPTUAL BASIS

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

PROCEDURE

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

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

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

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

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

Example 1.10 shows how these rules are applied.

1E.2 Le principe de construction

Après que les orbitales 4p soient remplies ...

- Période 5: **l'orbitale 5s** est remplie, en suite **les orbitales 4d**
- Comme dans la Période 4, les énergies des orbitales 4d sont plus faible en énergie que l'orbitale 5s après que deux électrons soient dans l'orbitale 5s
- Un effet similaire est observé dans la Période 6 :
- Cérium: $[\text{Xe}]4f^15d^16s^2$
- Les électrons continuent ensuite de remplir les sept orbitales 4f, qui sont complète après l'addition de 14 électrons, au ytterbium, $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$
- Dans l'Appendix 2C: sept différences apparaissent dans l'ordre dans lesquelles les orbitales 4f sont remplies (parce que les orbitales 4f et 5d sont proche en énergie)
- Malgré ces exceptions, ces règles sont un bon point de départ

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS																		18
Group	1	2											13	14	15	16	17	VIII VIIA
	I IA	II IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He helium 4.00 1s ²
Period	Period 1																	
	1 H hydrogen 1.0079 1s ¹																	2 He helium 4.00 1s ²
	3 Li lithium 6.94 2s ¹	4 Be beryllium 9.01 2s ²											5 B boron 10.81 2s ² 2p ¹	6 C carbon 12.01 2s ² 2p ²	7 N nitrogen 14.01 2s ² 2p ³	8 O oxygen 16.00 2s ² 2p ⁴	9 F fluorine 19.00 2s ² 2p ⁵	10 Ne neon 20.18 2s ² 2p ⁶
	11 Na sodium 22.99 3s ¹	12 Mg magnesium 24.31 3s ²	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9 VIII	10 VIII	11 IB	12 IIB	13 Al aluminum 26.98 3s ² 3p ¹	14 Si silicon 28.09 3s ² 3p ²	15 P phosphorus 30.97 3s ² 3p ³	16 S sulfur 32.06 3s ² 3p ⁴	17 Cl chlorine 35.45 3s ² 3p ⁵	18 Ar argon 39.95 3s ² 3p ⁶
	19 K potassium 39.10 4s ¹	20 Ca calcium 40.08 4s ²	21 Sc scandium 44.96 3d ¹ 4s ²	22 Ti titanium 47.87 3d ² 4s ²	23 V vanadium 50.94 3d ³ 4s ²	24 Cr chromium 52.00 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn manganese 54.94 3d ⁵ 4s ²	26 Fe iron 55.84 3d ⁶ 4s ²	27 Co cobalt 58.93 3d ⁷ 4s ²	28 Ni nickel 58.69 3d ⁸ 4s ²	29 Cu copper 63.55 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn zinc 65.41 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga gallium 69.72 4s ² 4p ¹	32 Ge germanium 72.64 4s ² 4p ²	33 As arsenic 74.92 4s ² 4p ³	34 Se selenium 78.96 4s ² 4p ⁴	35 Br bromine 79.90 4s ² 4p ⁵	36 Kr krypton 83.80 4s ² 4p ⁶
	37 Rb rubidium 85.47 5s ¹	38 Sr strontium 87.62 5s ²	39 Y yttrium 88.91 4d ¹ 5s ²	40 Zr zirconium 91.22 4d ² 5s ²	41 Nb niobium 92.91 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo molybdenum 95.94 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc technetium (98) 4d ⁵ 5s ²	44 Ru ruthenium 101.07 4d ⁷ 5s ¹	45 Rh rhodium 102.90 4d ⁸ 5s ¹	46 Pd palladium 106.42 4d ¹⁰	47 Ag silver 107.87 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd cadmium 112.41 4d ¹⁰ 5s ²	49 In indium 114.82 5s ² 5p ¹	50 Sn tin 118.71 5s ² 5p ²	51 Sb antimony 121.76 5s ² 5p ³	52 Te tellurium 127.60 5s ² 5p ⁴	53 I iodine 126.90 5s ² 5p ⁵	54 Xe xenon 131.29 5s ² 5p ⁶
	55 Cs cesium 132.91 6s ¹	56 Ba barium 137.33 6s ²	57 La lanthanum 138.91 5d ¹ 6s ²	72 Hf hafnium 178.49 5d ² 6s ²	73 Ta tantalum 180.95 5d ³ 6s ²	74 W tungsten 183.84 5d ⁴ 6s ²	75 Re rhenium 186.21 5d ⁵ 6s ²	76 Os osmium 190.23 5d ⁶ 6s ²	77 Ir iridium 192.22 5d ⁷ 6s ²	78 Pt platinum 195.08 5d ⁹ 6s ¹	79 Au gold 196.97 5d ¹⁰ 6s ¹	80 Hg mercury 200.59 5d ¹⁰ 6s ²	81 Tl thallium 204.38 6s ² 6p ¹	82 Pb lead 207.2 6s ² 6p ²	83 Bi bismuth 208.98 6s ² 6p ³	84 Po polonium (209) 6s ² 6p ⁴	85 At astatine (210) 6s ² 6p ⁵	86 Rn radon (222) 6s ² 6p ⁶
7	87 Fr francium (223) 7s ¹	88 Ra radium (226) 7s ²	89 Ac actinium (227) 6d ¹ 7s ²	104 Rf rutherfordium (261) 6d ² 7s ²	105 Db dubnium (262) 6d ³ 7s ²	106 Sg seaborgium (266) 6d ⁴ 7s ²	107 Bh bohrium (264) 6d ⁵ 7s ²	108 Hs hassium (267) 6d ⁶ 7s ²	109 Mt meitnerium (268) 6d ⁷ 7s ²	110 Ds darmstadtium (271) 6d ⁹ 7s ²	111 Rg roentgenium (272) 6d ¹⁰ 7s ¹	112*	113	114	115	116	117	118
			Lanthanoids (lanthanides) 6															
			Actinoids (actinides) 7															
			58 Ce cerium 140.12 4f ¹ 5d ¹ 6s ²	59 Pr praseodymium 140.91 4f ³ 6s ²	60 Nd neodymium 144.24 4f ⁴ 6s ²	61 Pm promethium (145) 4f ⁵ 6s ²	62 Sm samarium 150.36 4f ⁶ 6s ²	63 Eu europium 151.96 4f ⁷ 6s ²	64 Gd gadolinium 157.25 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	65 Tb terbium 158.93 4f ⁹ 6s ²	66 Dy dysprosium 162.50 4f ¹⁰ 6s ²	67 Ho holmium 164.93 4f ¹¹ 6s ²	68 Er erbium 167.26 4f ¹² 6s ²	69 Tm thulium 168.93 4f ¹³ 6s ²	70 Yb ytterbium 173.04 4f ¹⁴ 6s ²	71 Lu lutetium 174.97 5d ¹ 6s ²		
			90 Th thorium 232.04 6d ² 7s ²	91 Pa protactinium 231.04 5f ² 6d ¹ 7s ²	92 U uranium 238.03 5f ³ 6d ¹ 7s ²	93 Np neptunium (237) 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	94 Pu plutonium (244) 5f ⁶ 7s ²	95 Am americium (243) 5f ⁷ 7s ²	96 Cm curium (247) 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	97 Bk berkelium (247) 5f ⁹ 7s ²	98 Cf californium (251) 5f ¹⁰ 7s ²	99 Es einsteinium (252) 5f ¹¹ 7s ²	100 Fm fermium (257) 5f ¹² 7s ²	101 Md mendelevium (258) 5f ¹³ 7s ²	102 No nobelium (259) 5f ¹⁴ 7s ²	103 Lr lawrencium (262) 6d ¹ 7s ²		
Molar masses (atomic weights) quoted to the number of significant figures given here can be regarded as typical of most naturally occurring samples.																		

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

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

1E.2 Le principe de construction

Exemple 1E.1 Prédire la configuration électronique d'un atome lourd

- (a) vanadium
- (b) plomb

1E.2 Le principe de construction

Example 1E.1 Prédire la configuration électronique d'un atome lourd

EXAMPLE 1.10 Predicting the ground-state electron configuration of a heavy atom

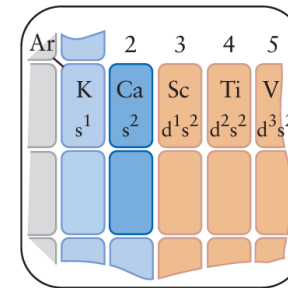
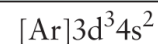
Predict the ground-state electron configuration of (a) a vanadium atom and (b) a lead atom.

Anticipate Because vanadium is a member of the d-block, we should expect its atoms to have a partially filled set of d-orbitals. Because lead is in the same group as carbon, we should expect the configuration of its valence electrons to be similar to that of carbon (s^2p^2).

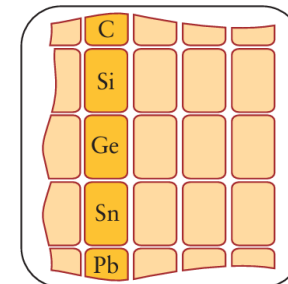
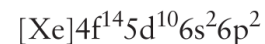
PLAN Follow the procedure in Toolbox 1.1.

SOLVE

(a) Vanadium is in Period 4, and so it has an argon core. Add two electrons to the 4s-orbital, and the last three electrons to three separate 3d-orbitals.



(b) Lead belongs to Group 14/IV and Period 6. It therefore has four electrons in its valence shell, two in a 6s-orbital and two in different 6p-orbitals. The atom has complete 5d- and 4f-subshells, and the preceding noble gas is xenon.



1E.2 Le principe de construction

Exemple 1E.1 Prédire la configuration électronique d'un atome lourd dans son état fondamental

Evaluate As expected, vanadium has an incomplete set of d-electrons and the valence-shell configuration of lead is analogous to that of carbon.

Self-Test 1.12A Write the ground-state configuration of a bismuth atom.

[*Answer:* $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$]

Self-Test 1.12B Write the ground-state configuration of an arsenic atom.

We account for the ground-state electron configuration of an atom by using the building-up principle in conjunction with Fig. 1.41, the Pauli exclusion principle, and Hund's rule.

1E.2 Le principe de construction

Résumé

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

Citations des étudiants

"LA CHIMIE PEUT EXPLIQUER LE MONDE DANS LEQUEL ON VIT, ET IL Y A BEAUCOUP DE CHOSES DIFFERENTES QU'ON PEUT ETUDIER EN CHIMIE."

"PARCE QUE LA CHIMIE EST PARTOUT."

"J'AI CHOISI LA CHIMIE CAR C'EST UNE SCIENCE PROCHE DE LA NATURE."

"COMPRENDRE COMMENT LES CHOSES FONCTIONNENT ET COMMENT CREER DE NOUVELLES CHOSES."

Connection à la leçon d'aujourd'hui: Ces citations se réfèrent au **principe de l'Aufbau** car elles mettent l'accent sur la compréhension du fonctionnement des choses en construisant des connaissances de manière structurée, de la même manière que le principe d'Aufbau décrit le remplissage progressif des orbitales électroniques pour expliquer le comportement des atomes et de la matière dans le monde naturel.

Les compétences que vous avez acquises vous permettent:

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

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

Questions d'étudiant

Dans cette équation:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{(p)^2}{2m} = \frac{\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

Question: Pourquoi cette condition est valide pour « $\lambda = \frac{2L}{n}$, with $n = 1, 2, \dots$ »? et pas: « $\lambda = \frac{nL}{2}$ »?

Parce que pour $n=1$, la moitié d'une longueur d'onde tient (voir graph): $\lambda = \frac{1L}{2} = \frac{1}{2}L$

Pour $n=2$: $\lambda = \frac{2L}{2} = L$, pour $n=3$: $\lambda = \frac{3L}{2}$ etc.

Réponse: λ n'est pas le nombre de longueur d'onde qui tiennent dans la boîte, mais la longueur par rapport à L de la boîte qui correspond à une longueur d'onde (pic à pic). Donc pour $n=1$, une longueur d'onde correspond à $2L$ ($\lambda = \frac{2L}{1}$) parce que la moitié d'une longueur d'onde tient dans $1 L$. Pour $n=2$, une longueur d'onde correspond à $1L$ ($\lambda = \frac{2L}{2}$), pour $n=3$, une longueur d'onde correspond au $2/3$ de la longueur de la boîte ($\lambda = \frac{2L}{3}$).

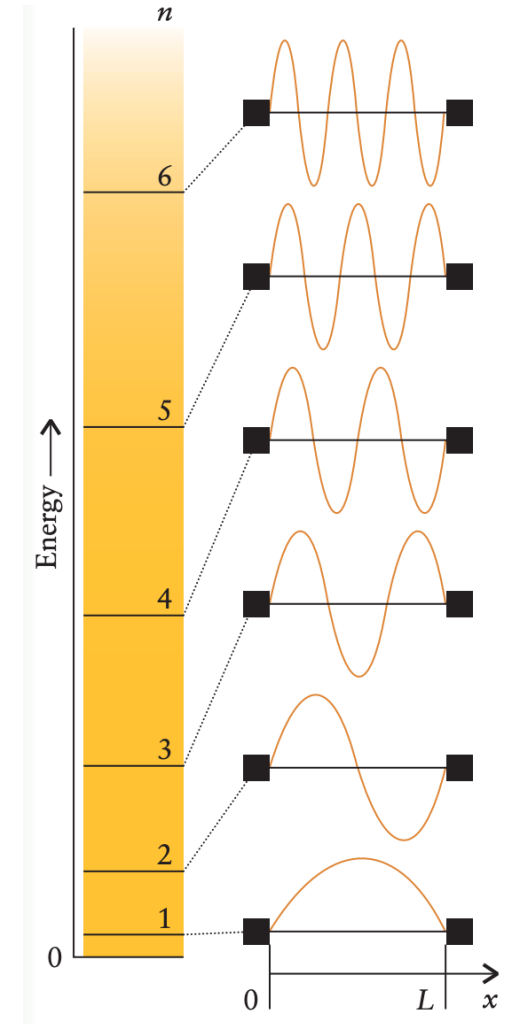


Figure 1C.3

Questions d'étudiants

Nœuds angulaires vs. radiaux ?

Les nœuds angulaires sont **planaires** (ex. Toutes les orbitales d sauf d_{z^2} ont deux nœuds angulaires planaires) ou de régions **coniques** (d_{z^2} a deux nœuds angulaires coniques) où la probabilité de trouver un électron est nulle.

Les nœuds radiaux sont des surfaces **sphériques** où la probabilité de trouver un électron est nulle. Le nombre de nœuds angulaires est égale à la valeur de l pour une orbitale donnée. Le nombre de nœuds radiaux est calculée avec la formule suivante: $n - l - 1$

Questions d'étudiants

Qu'est-ce qu'une onde stationnaire ? Est-ce que l'orbitales atomiques sont des ondes stationnaires ?

Une onde stationnaire est une onde qui reste fixe dans l'espace avec des nœuds et des antinœuds spécifiques. Les orbitales atomiques peuvent être considérées comme des ondes stationnaires car elles sont décrites par des fonctions d'onde qui définissent les distributions de probabilité des électrons dans les atomes, avec des nœuds distincts correspondant à des zones de probabilité zéro

Questions d'étudiants

Fonction de distribution radiale vs. Fonction d'onde radiale ?

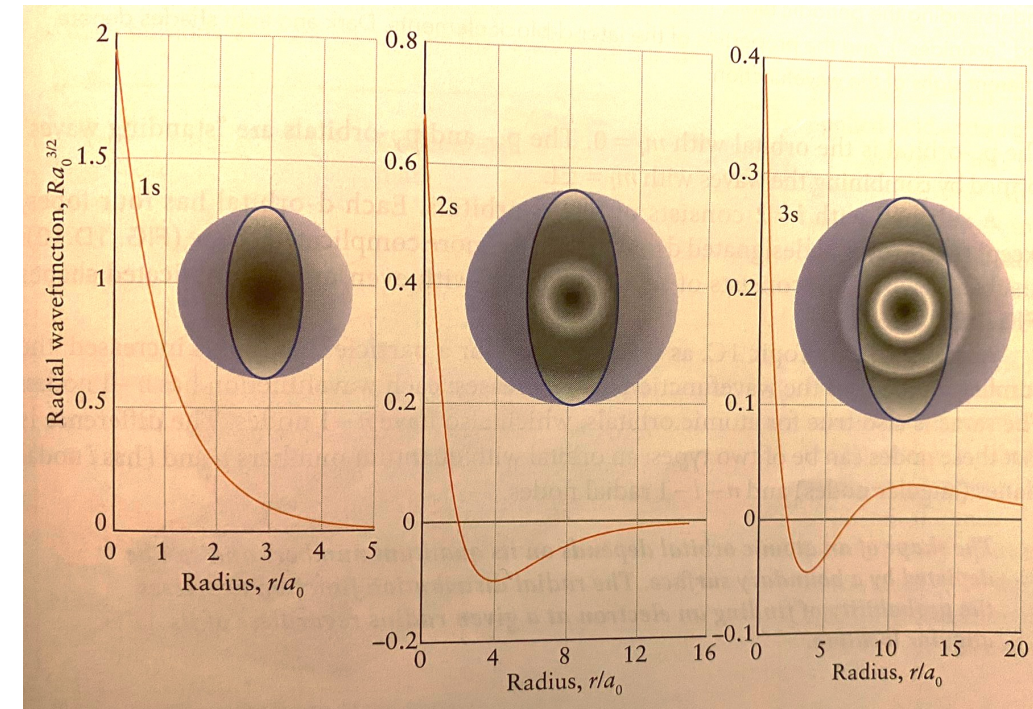
(1) Fonction d'onde radiale

- Définition:** La fonction d'onde radiale souvent notée $R(r)$, fait partie de la fonction d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ d'un électron dans un atome, en coordonnées. Il décrit comment l'amplitude de la probabilité de trouver un électron varie en fonction de la distance r du noyau.
- Forme mathématique:** La fonction d'onde radiale est dérivée de la solution de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène (où atome hydrogénoïde). Par exemple, pour une orbitale 1s:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \text{ où } a_0 \text{ est le rayon de Bohr}$$

- Interprétation:** La fonction d'onde radiale en elle-même ne donne pas directement de probabilité. Elle fournit l'amplitude de la fonction d'onde qui varie en fonction de la distance par rapport au noyau.

Figure 1D.7



Questions d'étudiants

Fonction de distribution radiale vs. Fonction d'onde radiale ?

(2) Fonction de distribution radiale

- Définition:** La fonction de distribution radiale, souvent noté $P(r)$, représente la **probabilité de trouver un électron dans une fine couche sphérique** située entre r et $r + \delta r$ du noyau, en tenant compte du volume de cette couche.
- Forme mathématique:** La fonction de distribution radiale est donnée par:

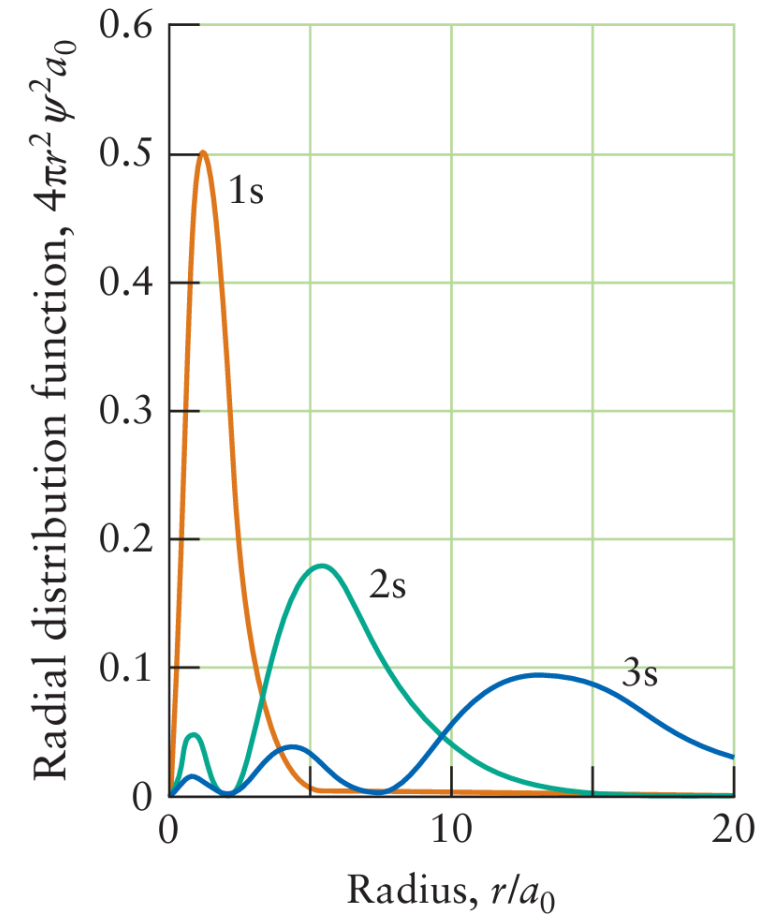
$$P(r) = r^2 R^2(r)$$

Pour des orbitales s: $P(r) = 4\pi r^2 \psi^2(r)$

Ici, $R^2(r)$ est la probabilité de densité associée avec la fonction d'onde radiale, et r^2 tient compte du volume de la couche sphérique, qui augmente avec le carré du rayon.

- Interprétation:** La fonction de distribution radiale donne une image plus claire de l'endroit où les électrons sont susceptibles de se trouver dans l'espace. Elle indique la probabilité de trouver un électron à une certaine distance r du noyau, en intégrant les contributions de la fonction d'onde radiale sur tous les angles.

Figure 1D.5



Questions d'étudiants

Quels sont les électrons de valence du vanadium?

Couche extérieur, sans inclure le cœur de gaz noble: $3d^34s^2$

Vanadium a cinq électrons de valence, deux dans l'orbitale 4s et trois dans l'orbitale 3d

Questions d'étudiants

Pourquoi le potentiel d'énergie est négatif pour l'atome d'hydrogène ? Comment une énergie peut être négative?

Parce que le potentiel d'énergie est défini comme étant négatif lorsque l'électron est lié au noyau (i.e., quand r est fini et positif), **l'énergie peut être moins que zéro**:

$$V(r) = \frac{(-e) \times (+e)}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Les niveaux d'énergie négatifs indiquent que l'électron est **lié** au noyau. Il faut de l'énergie pour enlever l'électron de l'influence du noyau, ce qui correspond au point au quel l'énergie potentielle est égale à zéro.

Le plus l'énergie est négative, plus l'électron est stable et étroitement lié au noyau.

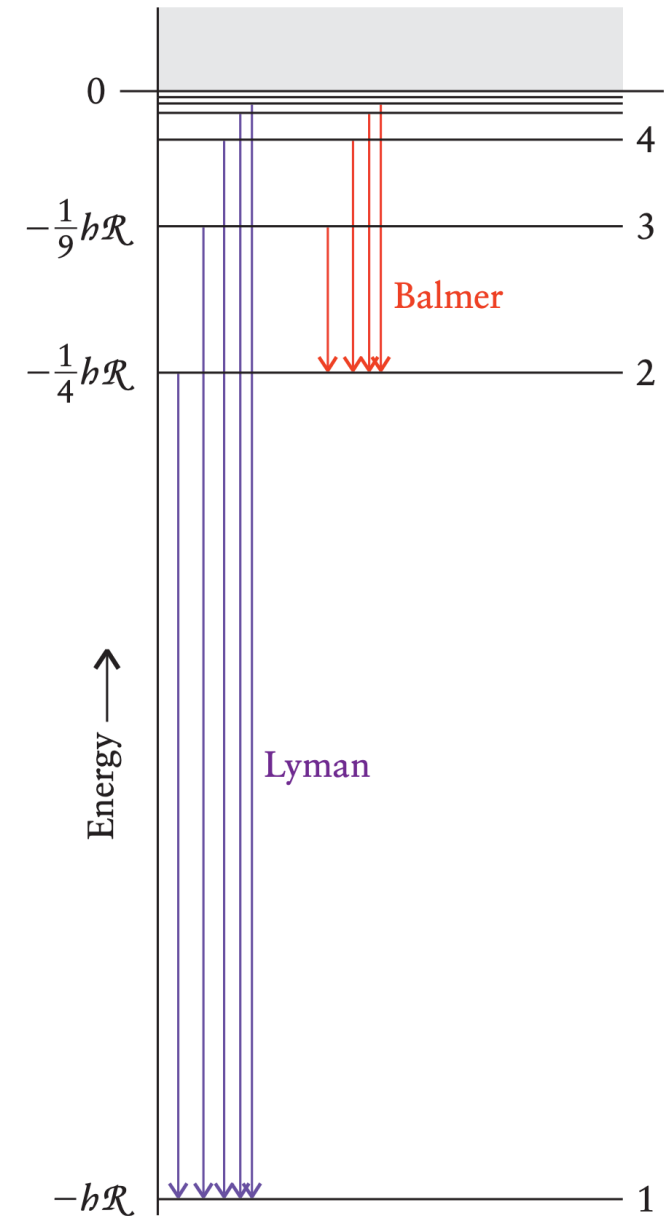


Figure 1D.1

Questions d'étudiants

Est-ce qu'il y a un moyen de déduire logiquement les formes des orbitales x^2-y^2 et z^2 ?

Oui, si l'on résout l'équation de Schrödinger et que l'on examine les fonctions d'ondes individuelles. Cependant, cela dépasse le cadre de cette classe. Ce qu'il faut savoir pour déduire les formes :

Chaque orbitale d a deux nœuds angulaires (soit plans ou cône nodaux)

- d_{xy} , d_{xz} , et d_{yz} ont deux plans nodaux :
- Pour d_{xy} , les plans nodaux sont les axes x et y.
- Pour d_{xz} , les plans nodaux sont les axes x et z.
- Pour d_{yz} , les plans nodaux sont les axes y et z.
- $d_{x^2-y^2}$ a deux nœuds angulaires qui sont alignés sur les plans diagonaux $y=x$ et $y=-x$.
- d_{z^2} a deux nœuds coniques, qui sont les régions en forme de cône autour de l'axe z.

1D.4 La forme de orbitales

Orbitales d

- La sous-couche $l = 2$ est composée de **cinq orbitales d**
- Chaque orbitale d a quatre lobes, sauf la d_{z^2}

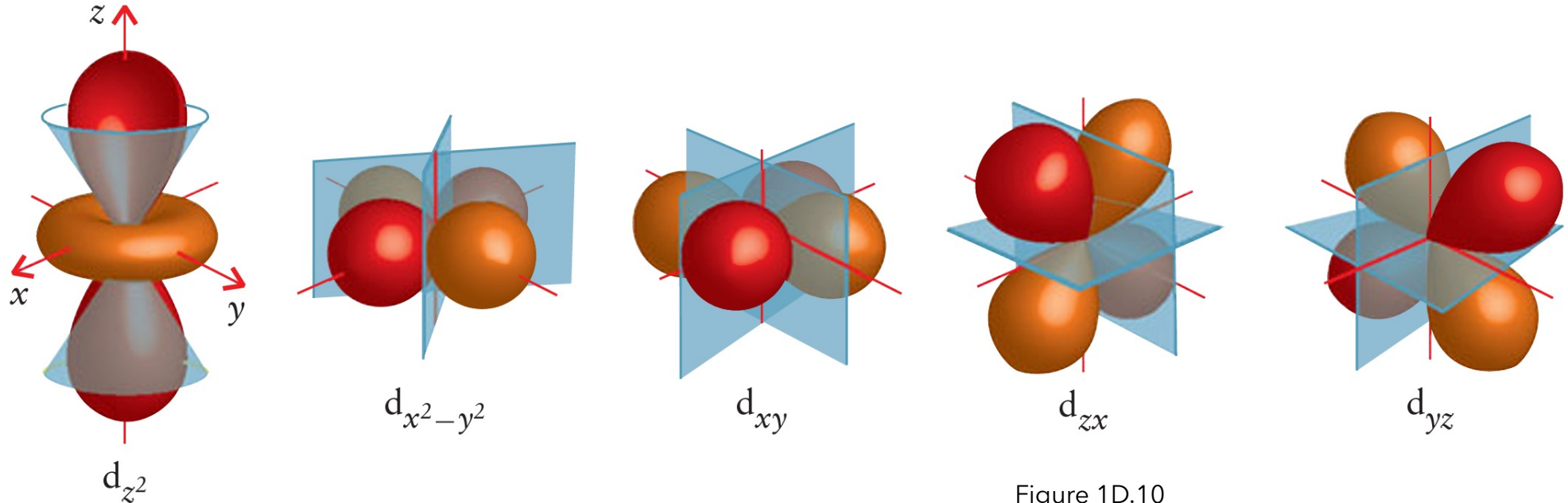


Figure 1D.10