COURS DE CHIMIE GENERALE AVANCEE

0. INTRODUCTION

Cours de Chimie Générale Avancée

Cours destiné aux étudiants en

- SV
- Mardi, 16h15 – 17h00 : cours (CO1)

  17h15 - 19h00 : exercices (CM011,CM012,CM013, CM1106, CM1120)
- Mercredi, 14h15 – 16h00 : cours (CE6)

Les exercices ne débuteront qu'en deuxième semaine!

Supports de cours

Support de cours

- A télécharger depuis le site https://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=15740

Exercices à préparer

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

Ouvrage de travail

Exercices de chimie générale
Comninellis, Friedli,Sahil , PPUR

Ouvrages de référence

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

Examen

- Durée : 3 heures (environ 70% partie commune, environ 30% partie spécifique)
- Contenu : Vrai/Faux et des problèmes basés sur la matière enseignée
- Test de compréhension (aide-mémoire, liste de constantes, tableau périodique)

Programme du cours

semaines 1-10 (identique pour SIE, MX,)

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

TEST BLANC-1

semaines 11-14 (uniquement pour SV)

- Applications en biologie

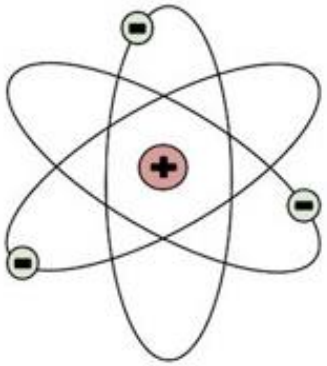
TEST BLANC-2

COURS DE CHIMIE GENERALE AVANCEE

1. ATOMISTIQUE

Quel est le modèle actuel de l'atome?

1

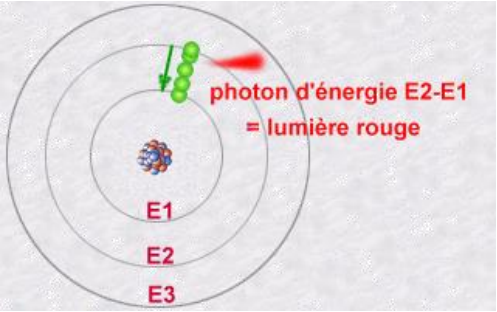


2

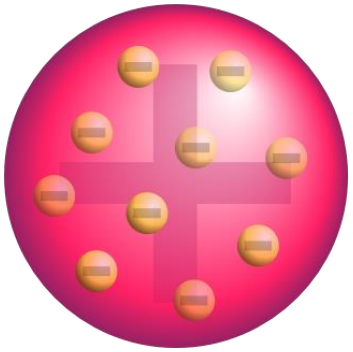
L'atome est composé d'un noyau, d'électrons et surtout de vide. Les électrons peuvent être sur n'importe quelle orbite circulaire.
Les électrons ont une vitesse plus élevée lorsque r est petit

On ne sait pas précisément où sont les électrons,
Modèle mathématique, non déterministe

3



4



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

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

Modèle Rutherford

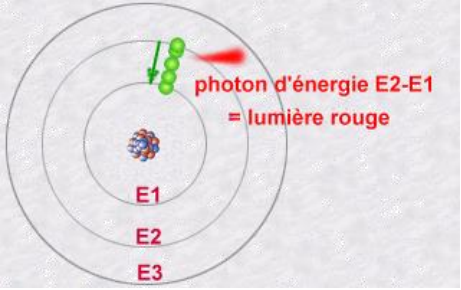
Source: découverte noyau

Modèle Schrödinger

Modèle actuel, quantique

Modèle Bohr

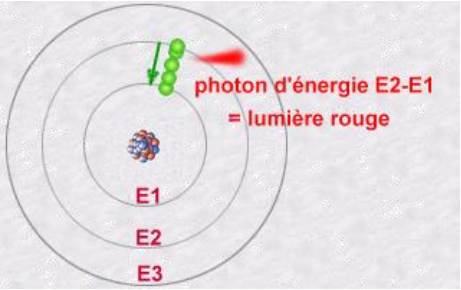
Physiquement faux, mais encore utilisable pour expliquer les discontinuités des émissions atomiques (et de manière quantitative pour l'atome d'hydrogène)

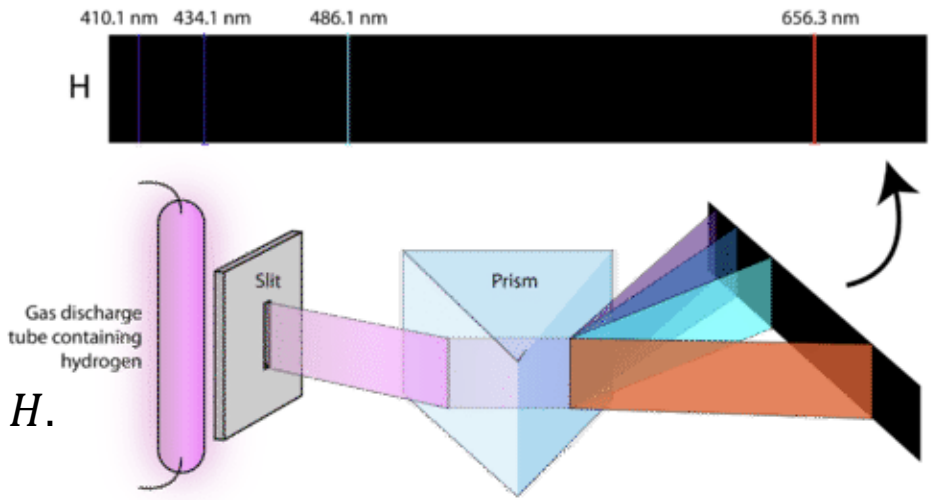


Modèle Thomson

Source: découverte électrons obsolète

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





$H_2 \rightarrow 2\ H.$

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

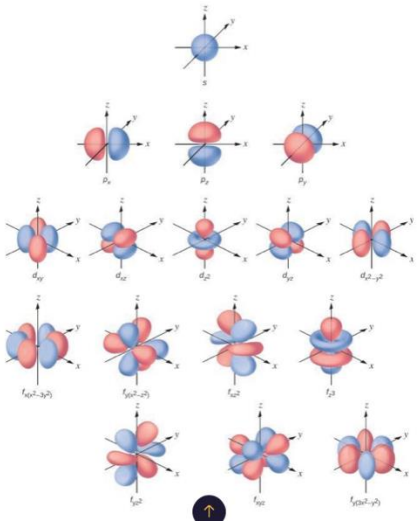
Modèle quantique de l'atome (Schrödinger,1926)

s

p

d

f



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

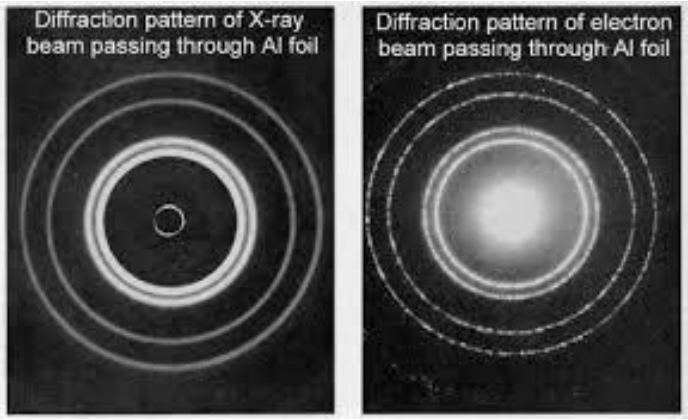
Conception classique

J.J Thomson Nobel prize 1906

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

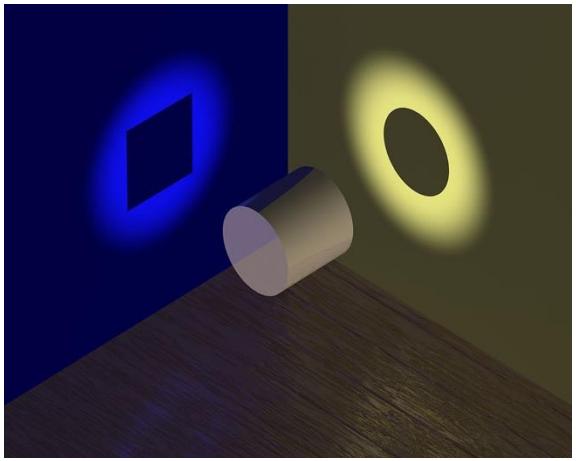
→ Comportement d'une onde (interférence)

Nouveauté quantique



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

Dualité onde-particule des objets quantiques



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

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

Voir par exemple une vidéo sur l'étrangeté de la lumière (4 minutes)
https://llx.fr/site/index.php/2011/12/13/cest-lhistoire-dun-photon/
et sur l'expérience des deux fentes (2 minutes)
https://toutestquantique.fr/dualite/

Dualité onde/particule de la lumière

Nous voulons faire apparaître les deux équations suivantes

$$E = h\nu$$

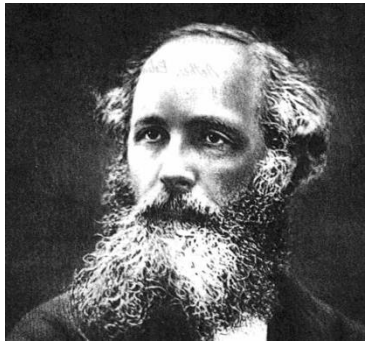
E: énergie d'un photon
h: constante de Planck
ν: fréquence de l'onde électromagnétique associée au photon

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

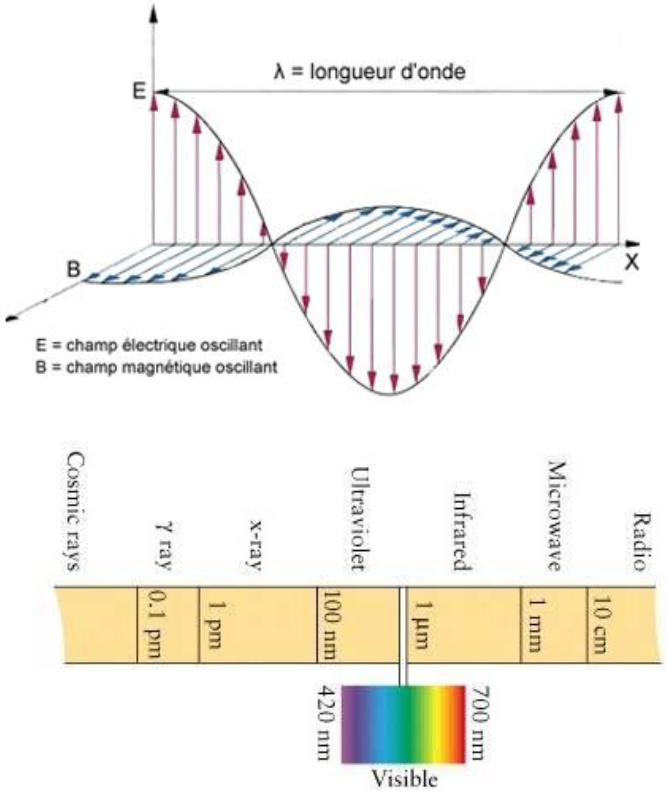
C: vitesse de la lumière
λ: longueur d'onde électromagnétique associée au photon

La lumière est une onde électromagnétique

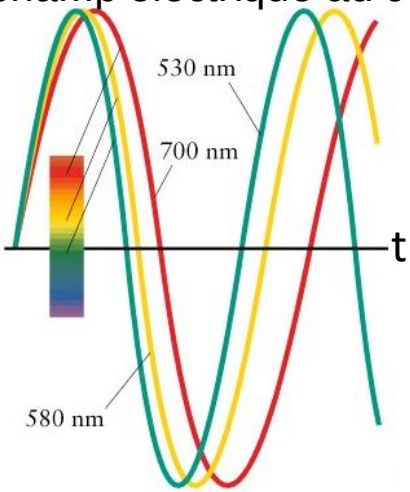
Conclusion “définitive“ de la physique classique
qui explique les phénomènes d’interférence, polarisation etc.



Maxwell 1865



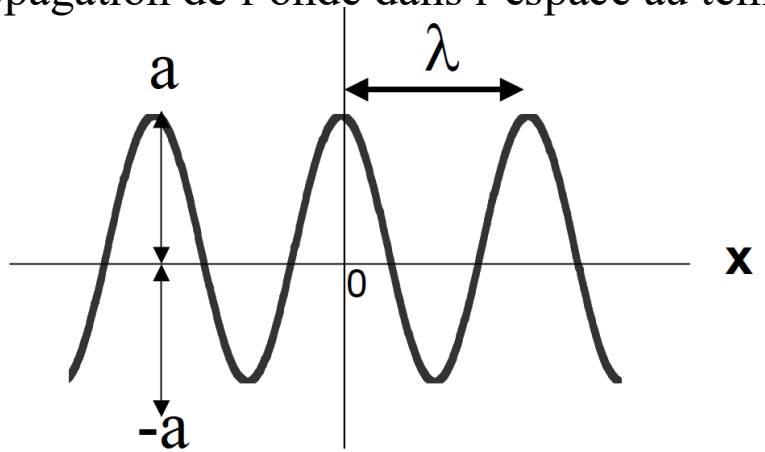
Amplitude du champ électrique au cours du temps



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

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

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



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

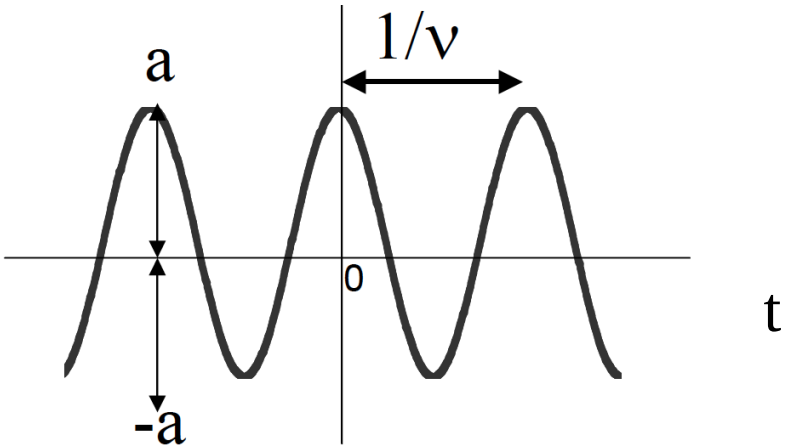
Distance = vitesse x temps

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

a= amplitude maximale

λ = longueur d'onde (m)

onde dans le temps en un point donné



a= amplitude maximale

T = 1/ν = période (s)

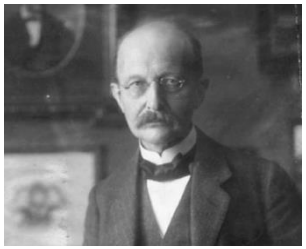
ν = fréquence (s^{-1}),

(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

$$\mathbf{E = h\nu}$$

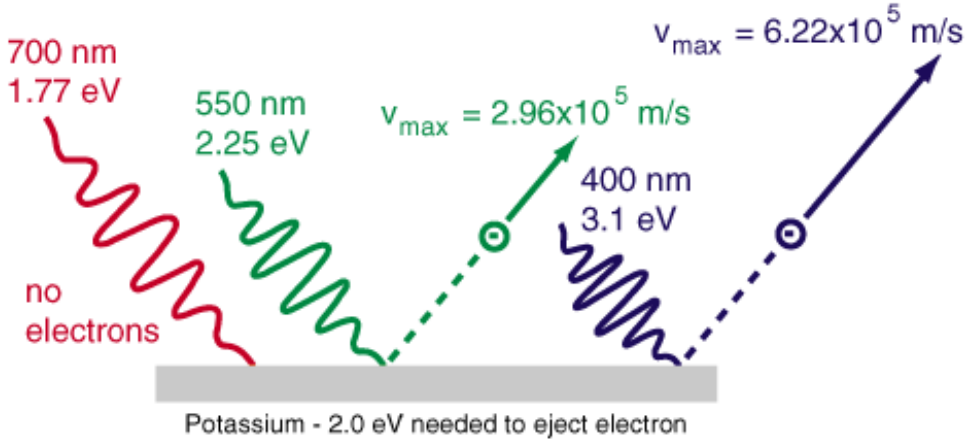
E: énergie d'un photon (en J)
ν : fréquence de l'onde électromagnétique associée au photon Hz, (s^{-1})
h : constante de Planck = 6.63×10^{-34} J.s

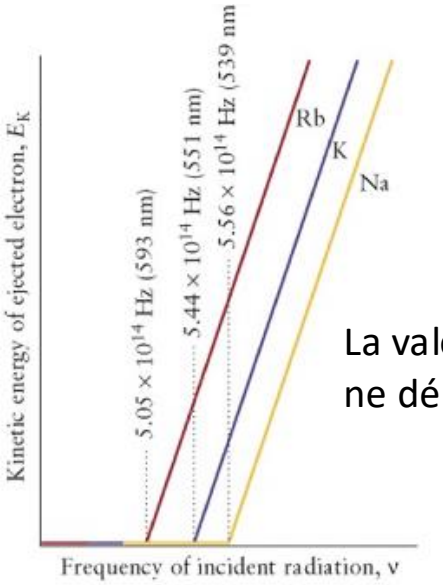
*La dualité onde/particule de la lumière a été postulée par Einstein en 1909

Effet photoélectrique

Energie d'un photon = hν

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





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

Exercice

1. Calculer l'énergie d'un photon d'une onde électromagnétique de longueur d'onde λ =660 nm (1 nm = 10^{-9} 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 W = 1 J s^{-1}) pendant 10 minutes.

Exercice

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

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{Js} \times 3.00 \times 10^{8} ms^{-1}}{660 \times 10^{-9} m} = 3.01 \times 10^{-19} \text{ J}$$ (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_{tot} = 100 J s^{-1} x 600 s = 6 x 10^4 J

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

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

Structure de l'atome – conception (semi)quantique

Travaux de Niels Bohr

Niels Bohr

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

Valeurs permises des niveaux d'énergie

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

$R_H = me^4/8(\varepsilon_0 h)^2$

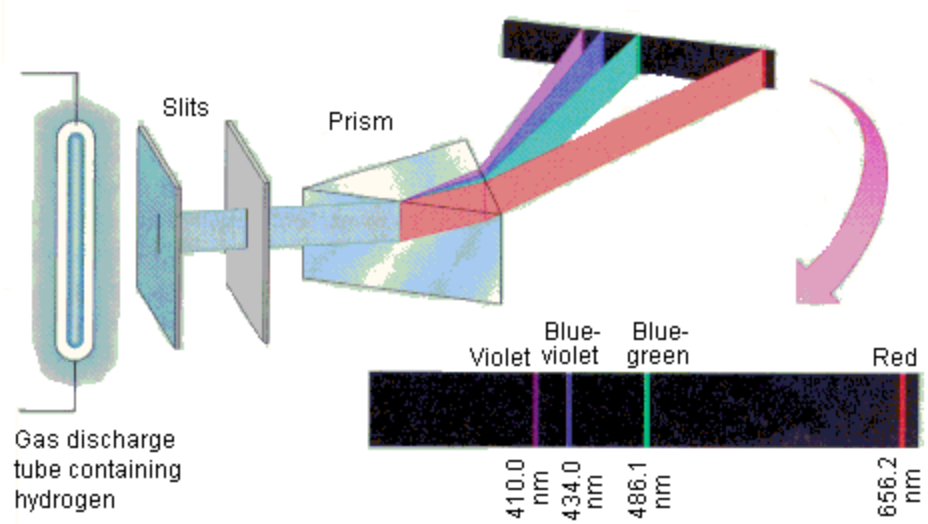
$R_H = 2.179 \times 10^{-18}$ J ou 13.6 eV

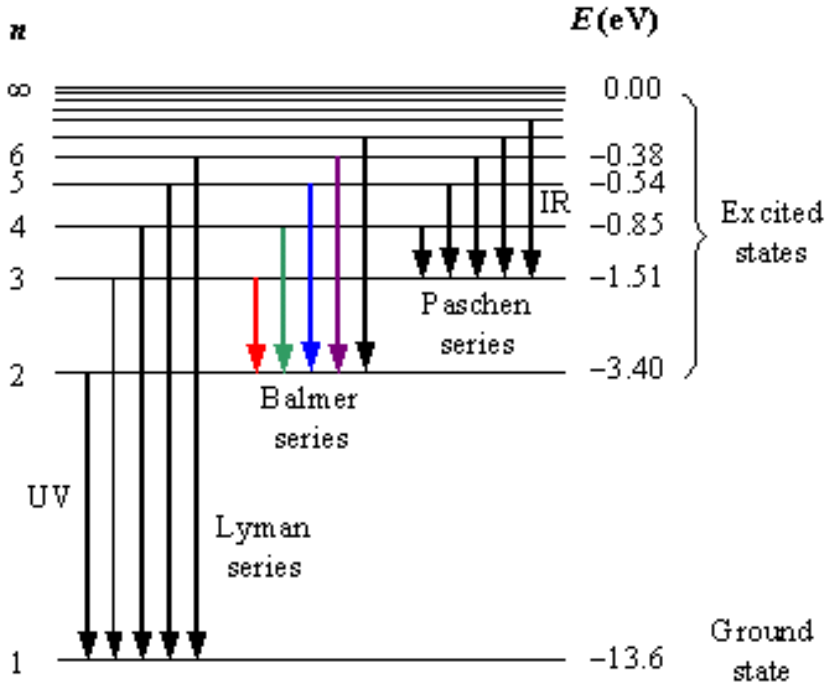
n = nombre entier 1, 2, 3…

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

Modèle de Bohr (pour l'hydrogène)

Radiations émises par des atomes d'hydrogène excités

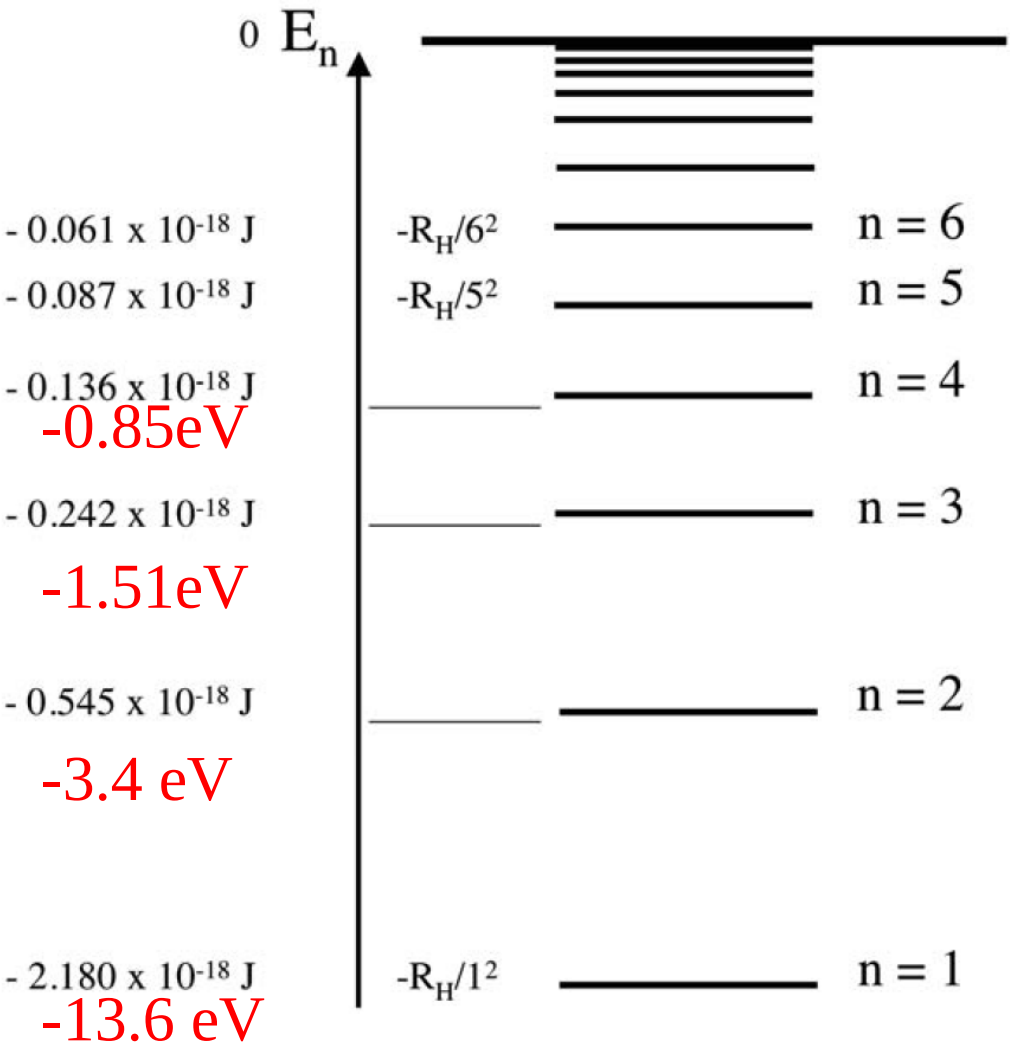




$$E_n = \frac{-13.6\ eV}{n^2}$$

Spectre de l'hydrogène atomique

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



Ionisation:E=0 pour n=infini

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

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

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

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: $1/2 \cdot 13.6$ eV

2: $3/4 \cdot 13.6$ eV

3: $1/4 \cdot 13.6$ eV

4: $-3/4 \cdot 13.6$ 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. : $E=-Z^2R_H/n^2$; 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

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

Différences entre les modèles atomiques de Bohr et de Schrödinger

Modèle de Bohr	Modèle de Schrödinger
L'électron est décrit comme une particule avec une trajectoire précise.	L'électron est décrit par une fonction d'onde Ψ liée à la probabilité de présence.
Lois de la mécanique classique selon Newton.	Lois de la mécanique quantique selon Schrödinger.
Case quantique: définit seulement le niveau d'énergie de l'électron (orbite)	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

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi$$

E: énergie totale de l'atome d'hydrogène

ψ: $fonction\ d'onde\ (orbitale)$

q: charge de l'électron/proton

ε_0: permittivité du vide

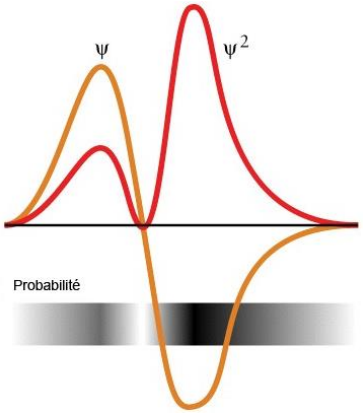
r: distance à l'origine

$\hbar = h/2\pi$

μ= masse réduite de l'atome d'hydrogène

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

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



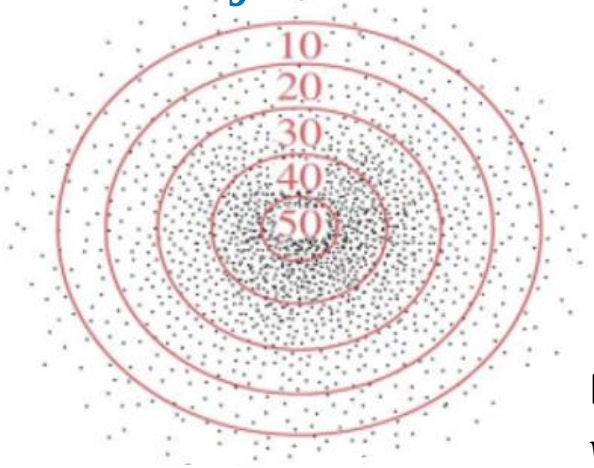
orbitale $\psi_{(2,0,0)}$

- Interprétation de ψ: ?

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

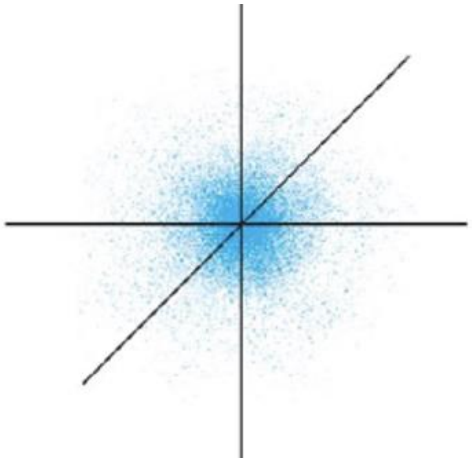
$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx$$

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



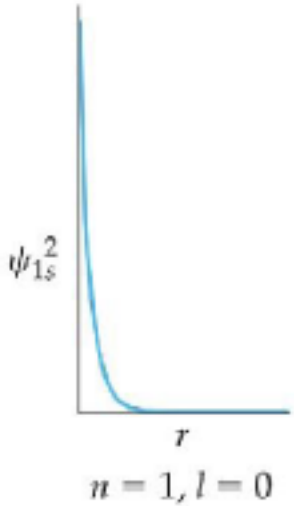
Une fléchette a été lancée 1500 fois.
La planche contient 95% des essais
La densité de fléchette la plus élevée: 50 (densité de probabilité ψ^2)
Le score le plus probable: 30 (probabilité P)

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

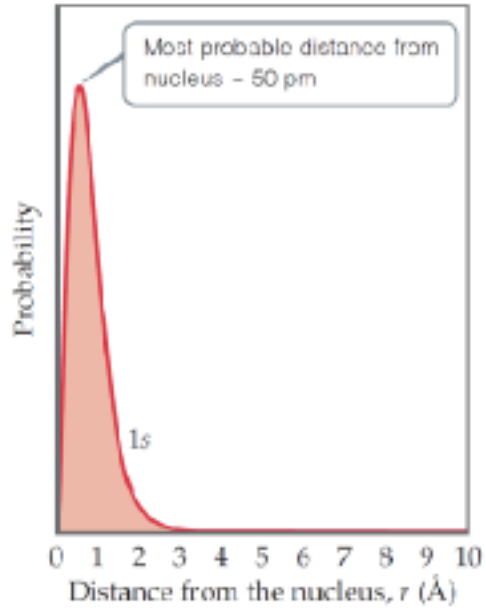


Densité électronique
proportionelle à la densité des points

Densité de probabilité
ψ^2

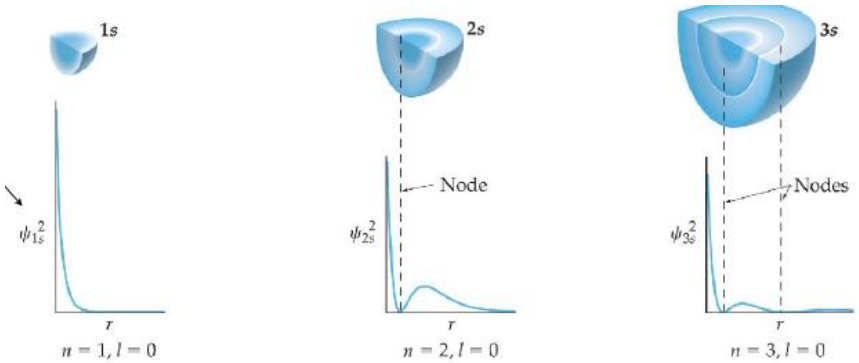


Probabilité: $P = 4\pi r^2\, \psi^2 dr$

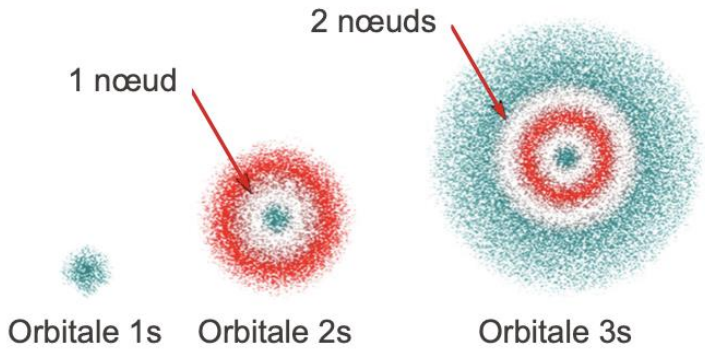


Probabilité maximale à une certain distance du noyau (53 pm)
$P = 0$ même si $\psi \neq 0$ pour $r = 0$ (sur le noyau)

Les orbitales (ψ) sont des fonctions mathématiques compliquées

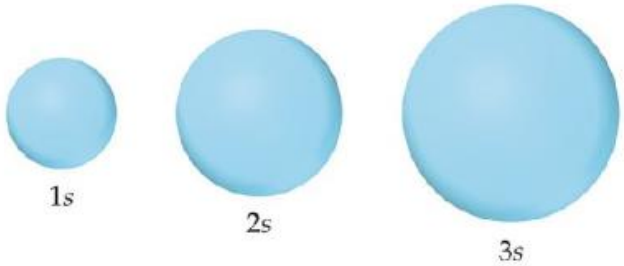


Fonction s'étend jusqu'à l'infini
La fonction ψ change de signe
Présence de nœuds
(probabilité de présence nulle)



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

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



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

Les solutions de l'équation de Schrödinger

1. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène ou numérique pour les atomes à plusieurs électrons n'est pas au programme de ce cours

2. Les diverses solutions de l'équation de Schrödinger sont des orbitales $\psi(n,\ell,m_\ell)$ définies par 3 nombres entiers (appelés nombres quantiques): n, ℓ, m_ℓ □

3. Une orbitale est une expression mathématique.
La représentation géométrique des orbitales n'est possible que pour un pourcentage défini de probabilité de présence d'un électron (par exemple 95%) car l'expression mathématique de l'orbitale n'est pas finie.

4. Pour définir un électron dans une orbitale,
nous avons besoin d'un 4ème 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

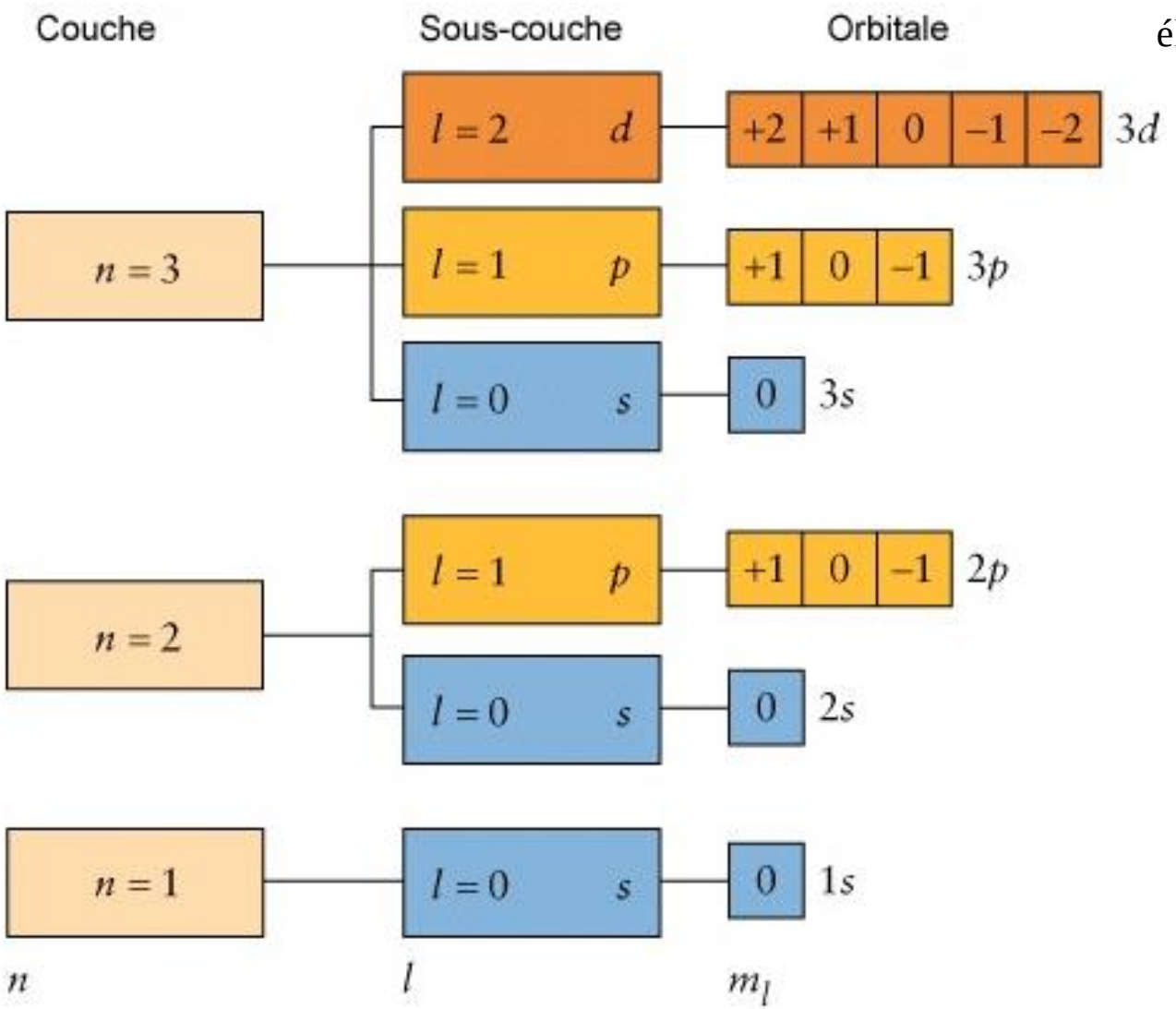
L'état d'un électron dans un atome (énergie, région d'espace) est défini par quatre nombres quantiques

$\boldsymbol{n}$	ℓ	$\boldsymbol{m}_l$	$\boldsymbol{m}_s$
(principal)	(secondaire)	(magnétique)	(spin)
$\boldsymbol{n} \geq 1$	$0 \leq \ell \leq n-1$	$-\ell \leq \boldsymbol{m}_\ell \leq \ell$	$\pm 1/2$

<u>Principe d'exclusion de Pauli:</u>

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



Au maximum, 2 électrons (e^-) par orbitale

$5e^- \cdot 2 = 10e^-$

$6e^-$

$2e^-$

$18e^-$

$6e^-$

$2e^-$

$8e^-$

$2e^-$

$2e^-$

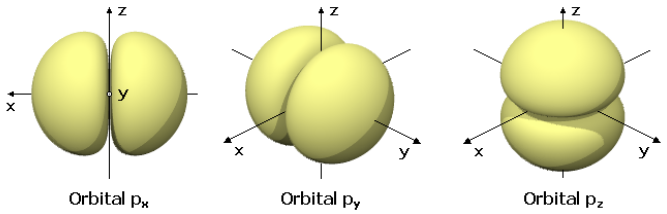
Représentation simplifiée des orbitales ψ pour différentes valeurs de ℓ (pour une valeur donnée de n)

➡ ℓ = 0, orbitale atomique s

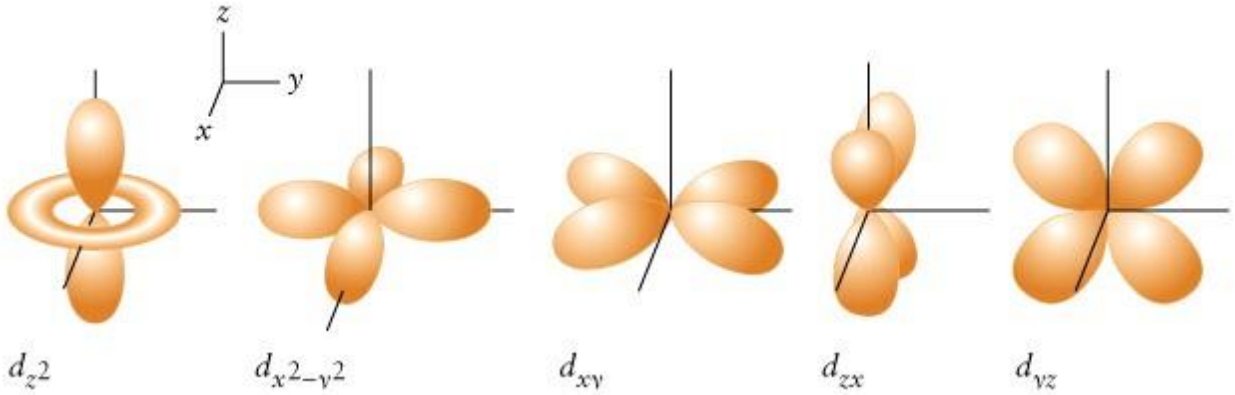
Nuage sphérique dont la densité diminue lorsque la distance au noyau augmente

➡ ℓ = 1, orbitales atomiques p

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



➡ ℓ = 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

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

↑↓	↑↓	↑	↑	↑
1s	2s	2p		

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

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d <\ldots.$$

- 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

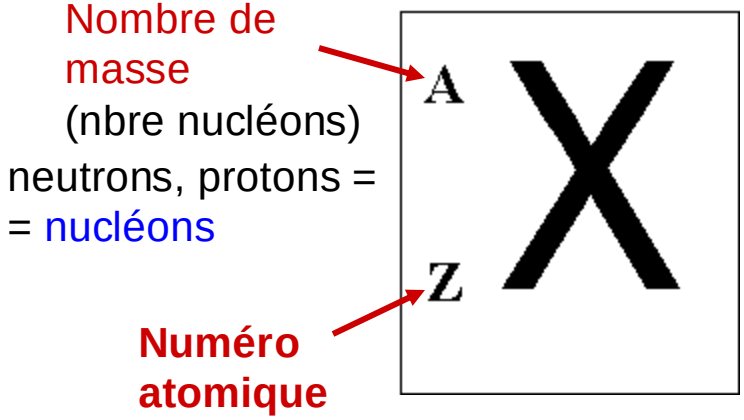
C (carbone), Z = 6
$1s^2 2s^2 2p^2$
4 électrons de valence

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.



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 :

p^1 :	↑		
p^2 :	↑	↑	
p^3 :	↑	↑	↑
p^4 :	↑↓	↑	↑
p^5 :	↑↓	↑↓	↑
p^6 :	↑↓	↑↓	↑↓

<u>Exemples</u> : configuration électronique du carbone (6 electrons)

↑↓	↑↓	↑ ↑
$1s^2$	$2s^2$	$2p_x^1\ 2p_y^1 2p_z$

↑↓	↑↓	↑	↑	↑
1s	2s	2p		
exact				

↑↓	↑↓	↑↓	↑	
1s	2s	2p		
inexact				

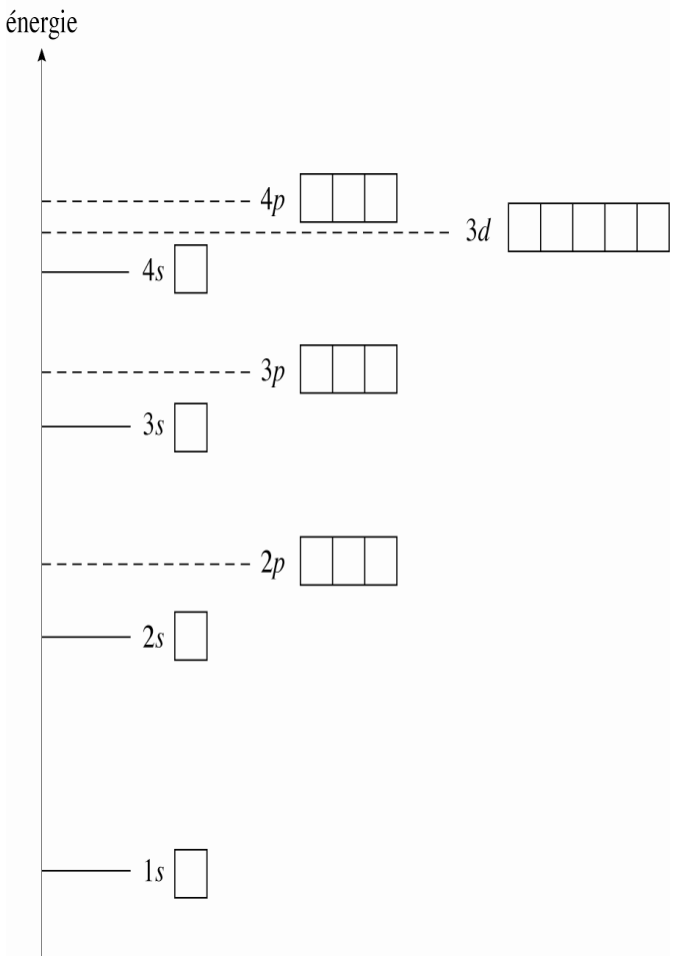
↑↓	↑↓	↑	↓	↑
1s	2s	2p		
inexact				

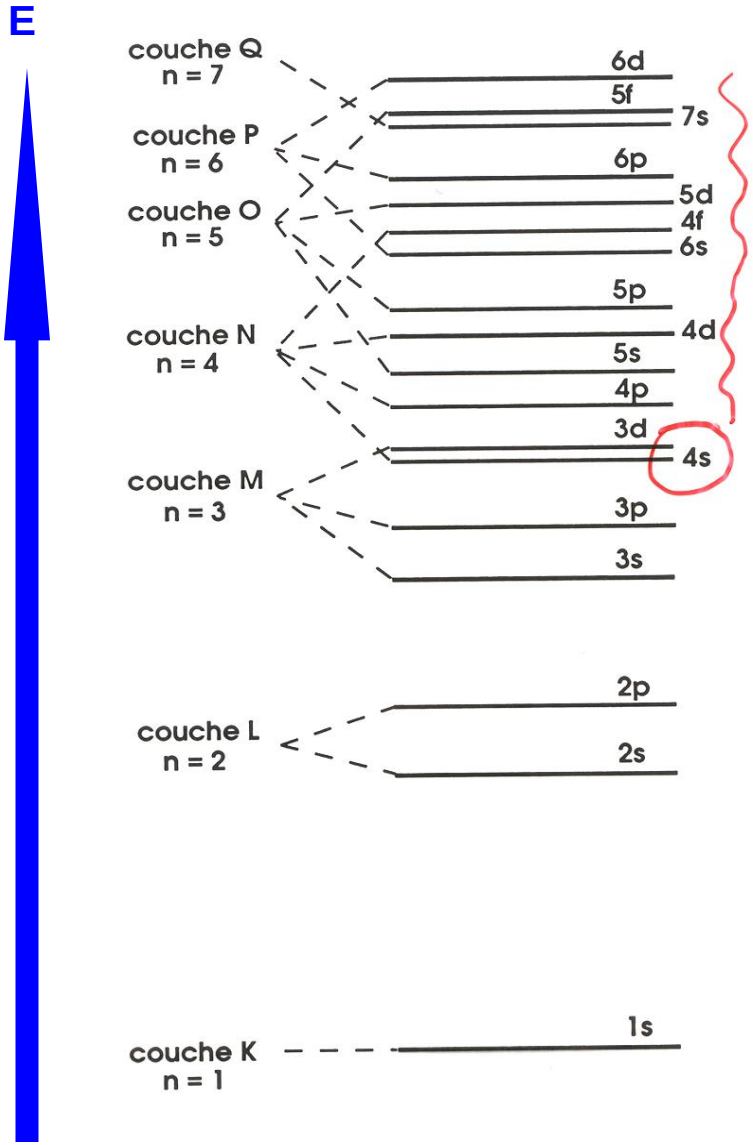
Friedrich Hund
(1896-1997)

↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

Configuration électronique des éléments

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





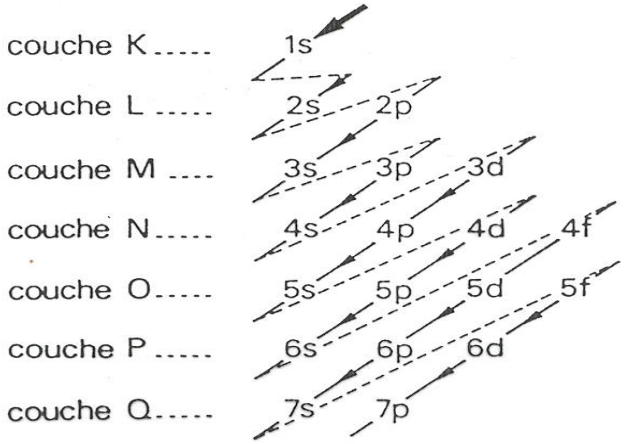
Règle de Klechkowsky ou principe de stabilité:

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

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

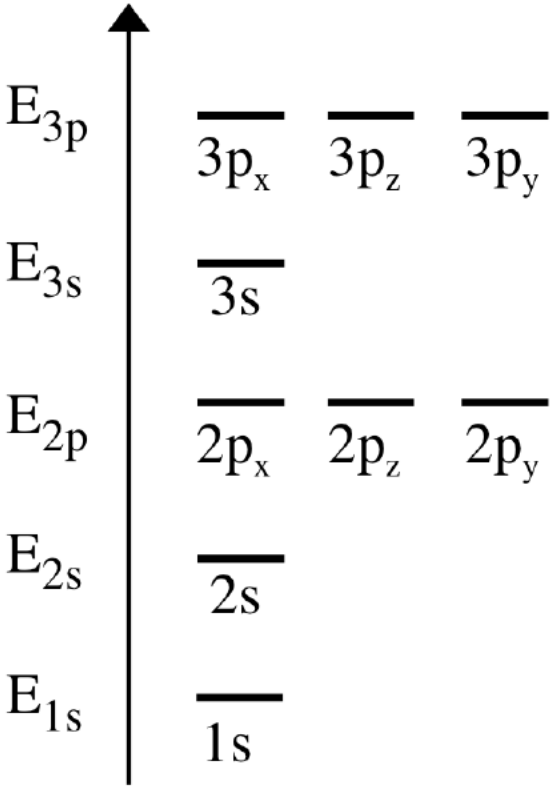
Configuration électronique des éléments

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

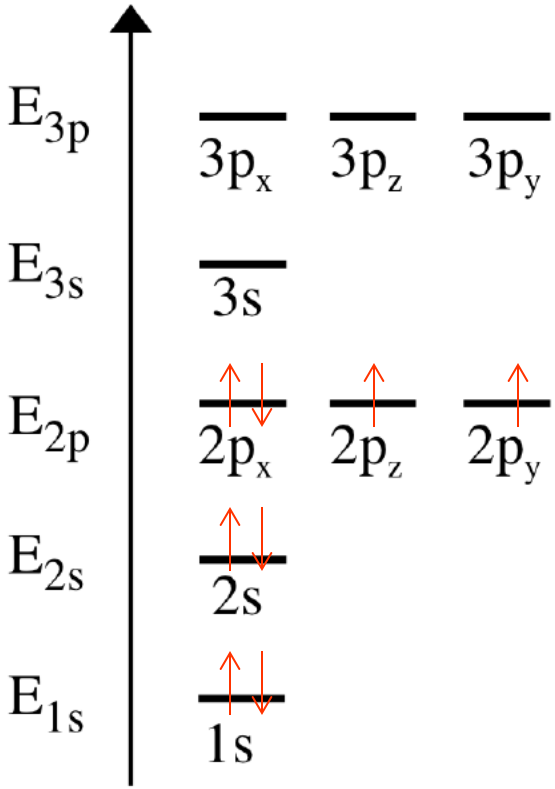


Vsevolod Klechkowski
(1900-1972)

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



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



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

2 électrons célibataires

QUESTION?

Quelle série de nombres quantiques peut décrire une orbitale atomique?

$\boldsymbol{n} \geq 1 \quad 0 \leq \boldsymbol{l} \leq \boldsymbol{n}\text{-}1 \qquad \text{-}\boldsymbol{l} \leq \boldsymbol{m}_l \leq \boldsymbol{l}$

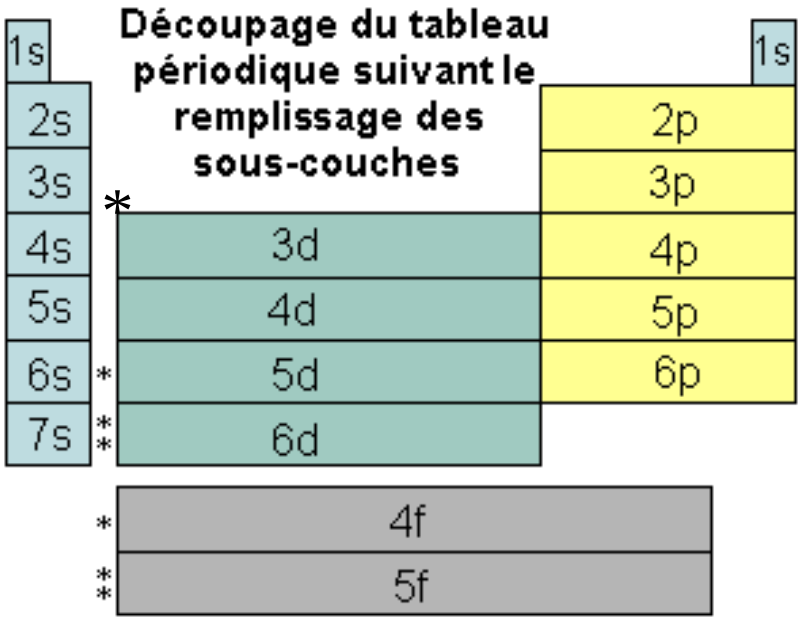
1. $n = 0, \quad l = 0, \qquad m_l = 0$
2. $n = 2, \quad l = 2, \qquad m_l = 2$
3. $n = 2, \quad l = 1; \qquad m_l = 2$
4. $n = 4, \quad l = 3, \qquad m_l = -3$

QUESTION

Quelles séries de nombres quantiques peuvent représenter les 7ème et 8ème 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, ½) et (2, 2, -1, -½)

Configuration électronique et tableau périodique



$1s^1$

$1s^2\ 2s^2$

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

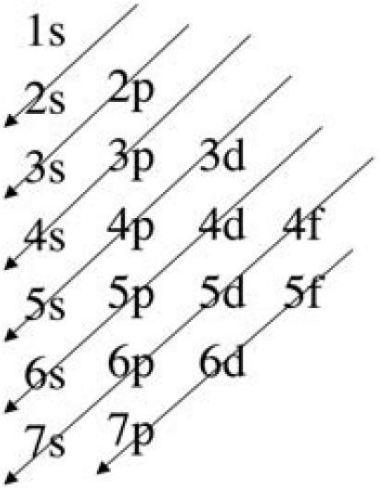
$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2 3p^6 4s^2$

$1s^2$

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

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

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

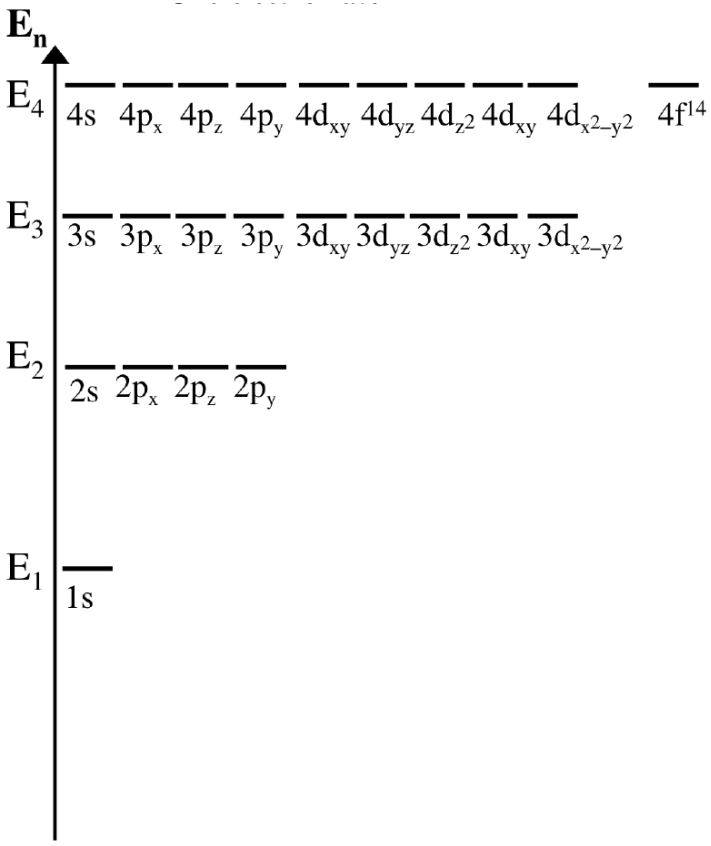


*Les électrons occupent l'orbitale 4s avant l'orbitale 3d (l'atome a une énergie plus basse lorsque l'électron occupe l'orbitale 4s plutôt que 3d).

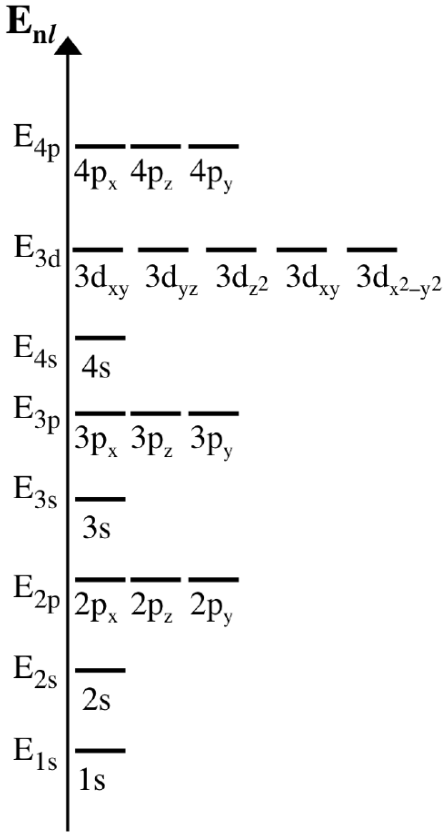
élément	configuration électronique
H	$1s^1$
He	$1s^2$
Li	$1s^2 2s^1$
Be	$1s^2 2s^2$
B	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2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

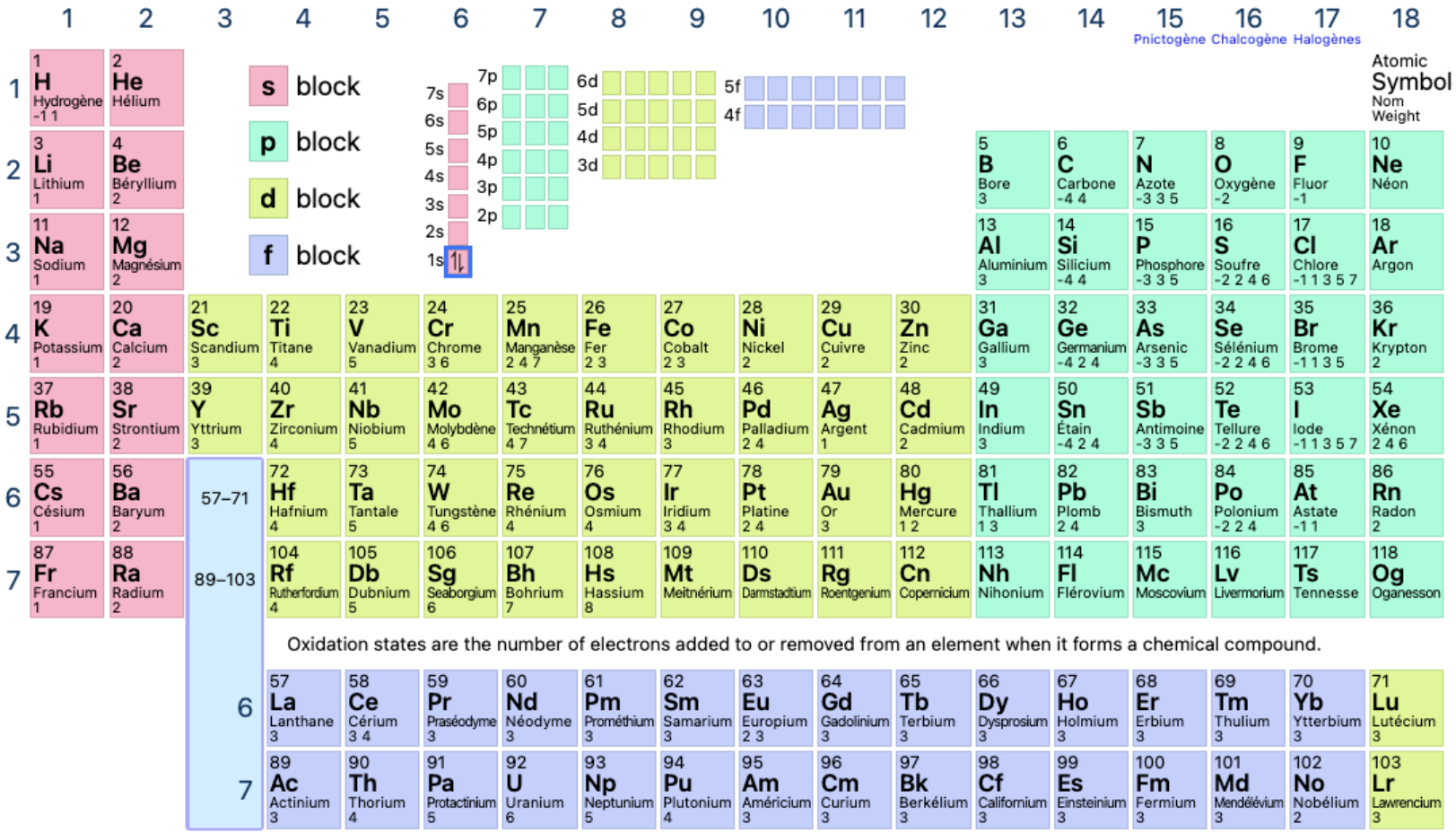
Comparaison entre atomes hydrogénoïdes et atomes à plusieurs électrons

Atome à 1 électron



Atome à plusieurs électrons




1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18
Pnictogène Chalcogène Halogènes
Atomic
Symbol
Nom
Weight
s block
p block
d block
f block
7s 6s 5s 4s 3s 2s 1s
7p 6p 5p 4p 3p 2p
6d 5d 4d 3d
5f 4f
1 H Hydrogène -1 1
2 He Hélium
3 Li Lithium 1
4 Be Béryllium 2
5 B Bore 3
6 C Carbone -4 4
7 N Azote -3 3 5
8 O Oxygène -2
9 F Fluor -1
10 Ne Néon
11 Na Sodium 1
12 Mg Magnésium 2
13 Al Aluminium 3
14 Si Silicium -4 4
15 P Phosphore -3 3 5
16 S Soufre -2 2 4 6
17 Cl Chlore -1 1 3 5 7
18 Ar Argon
19 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 Sélénium -2 2 4 6
35 Br Brome -1 1 3 5
36 Kr Krypton 2
37 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
55 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
87 Fr Francium 1
88 Ra Radium 2
89–103
104 Rf Rutherfordium 4
105 Db Dubnium 5
106 Sg Seaborgium 6
107 Bh Bohrium 7
108 Hs Hassium 8
109 Mt Meitnérium
110 Ds Darmstadtium
111 Rg Roentgenium
112 Cn Copernicium
113 Nh Nihonium
114 Fl Flérovium
115 Mc Moscovium
116 Lv Livermorium
117 Ts Tennesse
118 Og Oganesson
Oxidation states are the number of electrons added to or removed from an element when it forms a chemical compound.
6
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
7
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

ptable.com

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

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

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.

<u>1er type d'exception</u>

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

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

Exceptions au principe de l'Aufbau

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H Hydrogène $1s^1$																	2 He Hélium $1s^2$
2	3 Li Lithium $1s^2 2s^1$	4 Be Béryllium $1s^2 2s^2$											5 B Bore $1s^2 2s^2 2p^1$	6 C Carbone $1s^2 2s^2 2p^2$	7 N Azote $1s^2 2s^2 2p^3$	8 O Oxygène $1s^2 2s^2 2p^4$	9 F Fluor $1s^2 2s^2 2p^5$	10 Ne Néon $1s^2 2s^2 2p^6$
3	11 Na Sodium [Ne]$3s^1$	12 Mg Magnésium [Ne]$3s^2$											13 Aℓ Aluminium [Ne]$3s^2 3p^1$	14 Si Silicium [Ne]$3s^2 3p^2$	15 P Phosphore [Ne]$3s^2 3p^3$	16 S Soufre [Ne]$3s^2 3p^4$	17 Cℓ Chlore [Ne]$3s^2 3p^5$	18 Ar Argon [Ne]$3s^2 3p^6$
4	19 K Potassium [Ar]$4s^1$	20 Ca Calcium [Ar]$4s^2$	21 Sc Scandium [Ar]$3d^1 4s^2$	22 Ti Titane [Ar]$3d^2 4s^2$	23 V Vanadium [Ar]$3d^3 4s^2$	24 Cr Chrome [Ar]$3d^5 4s^1$	25 Mn Manganèse [Ar]$3d^5 4s^2$	26 Fe Fer [Ar]$3d^6 4s^2$	27 Co Cobalt [Ar]$3d^7 4s^2$	28 Ni Nickel [Ar]$3d^8 4s^2$	29 Cu Cuivre [Ar]$3d^{10} 4s^1$	30 Zn Zinc [Ar]$3d^{10} 4s^2$	31 Ga Gallium [Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^1$	32 Ge Germanium [Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^2$	33 As Arsenic [Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^3$	34 Se Sélénium [Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^4$	35 Br Brome [Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^5$	36 Kr Krypton [Ar]$3d^{10} 4s^2 4p^6$
5	37 Rb Rubidium [Kr]$5s^1$	38 Sr Strontium [Kr]$5s^2$	39 Y Yttrium [Kr]$4d^1 5s^2$	40 Zr Zirconium [Kr]$4d^2 5s^2$	41 Nb Niobium [Kr]$4d^4 5s^1$	42 Mo Molybdène [Kr]$4d^5 5s^1$	43 Tc Technétium [Kr]$4d^5 5s^2$	44 Ru Ruthénium [Kr]$4d^7 5s^1$	45 Rh Rhodium [Kr]$4d^8 5s^1$	46 Pd Palladium [Kr]$4d^{10}$	47 Ag Argent [Kr]$4d^{10} 5s^1$	48 Cd Cadmium [Kr]$4d^{10} 5s^2$	49 In Indium [Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^1$	50 Sn Étain [Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^2$	51 Sb Antimoine [Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^3$	52 Te Tellure [Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^4$	53 I Iode [Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^5$	54 Xe Xénon [Kr]$4d^{10} 5s^2 5p^6$
6	55 Cs Césium [Xe]$6s^1$	56 Ba Baryum [Xe]$6s^2$	57 La Lanthane [Xe]$5d^1 6s^2$	* 72 Hf Hafnium [Xe]$4f^{14} 5d^2 6s^2$	73 Ta Tantale [Xe]$4f^{14} 5d^3 6s^2$	74 W Tungstène [Xe]$4f^{14} 5d^4 6s^2$	75 Re Rhénium [Xe]$4f^{14} 5d^5 6s^2$	76 Os Osmium [Xe]$4f^{14} 5d^6 6s^2$	77 Ir Iridium [Xe]$4f^{14} 5d^7 6s^2$	78 Pt Platine [Xe]$4f^{14} 5d^9 6s^1$	79 Au Or [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^1$	80 Hg Mercure [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2$	81 Tℓ Thallium [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^1$	82 Pb Plomb [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$	83 Bi Bismuth [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$	84 Po Polonium [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^4$	85 At Astate [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^5$	86 Rn Radon [Xe]$4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$
7	87 Fr Francium [Rn]$7s^1$	88 Ra Radium [Rn]$7s^2$	89 Ac Actinium [Rn]$6d^1 7s^2$	° 104 Rf Rutherfordium [Rn]$5f^{14} 6d^2 7s^2$	105 Db Dubnium [Rn]$5f^{14} 6d^3 7s^2$	106 Sg Seaborgium [Rn]$5f^{14} 6d^4 7s^2$	107 Bh Bohrium [Rn]$5f^{14} 6d^5 7s^2$	108 Hs Hassium [Rn]$5f^{14} 6d^6 7s^2$	109 Mt Meitnerium [Rn]$5f^{14} 6d^7 7s^2$	110 Ds Darmstadtium [Rn]$5f^{14} 6d^9 7s^1$	111 Rg Roentgenium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^1$	112 Cn Copernicium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2$	113 Uut Ununtrium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^1$	114 Fℓ Flerovium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^2$	115 Uup Ununpentium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^3$	116 Lv Livermorium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^4$	117 Uus Ununseptium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^5$	118 Uuo Ununoctium [Rn]$5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^6$

6 C Carbone $1s^2 2s^2 2p^2$

Numéro atomique
symbole
Nom de l'élément
Configuration électronique

*	58 Ce Cérium [Xe]$4f^1 5d^1 6s^2$	59 Pr Praséodyme [Xe]$4f^3 6s^2$	60 Nd Néodyme [Xe]$4f^4 6s^2$	61 Pm Prométhium [Xe]$4f^5 6s^2$	62 Sm Samarium [Xe]$4f^6 6s^2$	63 Eu Europium [Xe]$4f^7 6s^2$	64 Gd Gadolinium [Xe]$4f^7 5d^1 6s^2$	65 Tb Terbium [Xe]$4f^9 6s^2$	66 Dy Dysprosium [Xe]$4f^{10} 6s^2$	67 Ho Holmium [Xe]$4f^{11} 6s^2$	68 Er Erbium [Xe]$4f^{12} 6s^2$	69 Tm Thulium [Xe]$4f^{13} 6s^2$	70 Yb Ytterbium [Xe]$4f^{14} 6s^2$	71 Lu Lutécium [Xe]$4f^{14} 5d^1 6s^2$	*
°	90 Th Thorium [Rn]$6d^2 7s^2$	91 Pa Protactinium [Rn]$5f^2 6d^1 7s^2$	92 U Uranium [Rn]$5f^3 6d^1 7s^2$	93 Np Neptunium [Rn]$5f^4 6d^1 7s^2$	94 Pu Plutonium [Rn]$5f^6 7s^2$	95 Am Américium [Rn]$5f^7 7s^2$	96 Cm Curium [Rn]$5f^7 6d^1 7s^2$	97 Bk Berkélium [Rn]$5f^9 7s^2$	98 Cf Californium [Rn]$5f^{10} 7s^2$	99 Es Einsteinium [Rn]$5f^{11} 7s^2$	100 Fm Fermium [Rn]$5f^{12} 7s^2$	101 Md Mendélévium [Rn]$5f^{13} 7s^2$	102 No Nobélium [Rn]$5f^{14} 7s^2$	103 Lr Lawrencium [Rn]$5f^{14} 7s^2 7p^1$	°

Exceptions à l'Aufbau

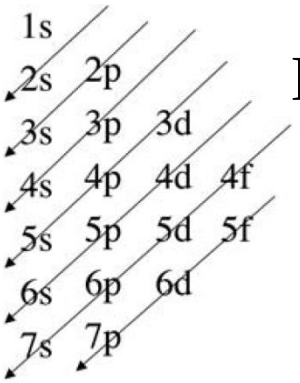
Supposé

Sources: http://iupac.org/reports/periodic_table/. This version is dated September 27th 2012. (accessed 06.12)

Quelques exceptions à la règle de l'Aufbau

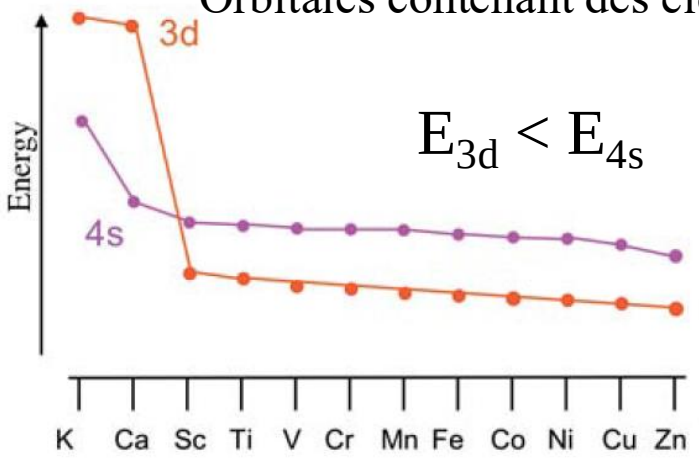
2ème type d'exception (valable pour les cations: espèces chimiques avec moins d'électrons que de protons). Empiriquement, on enlève d'abord les électrons avec le nombre quantique principal *n* le plus grand. On n'enlève pas toujours les électrons dans l'ordre prévu par la règle de l'Aufbau. Cette exception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

Orbitales vides (règle de l'Aufbau)



$E_{4s} < E_{3d}$

Orbitales contenant des électrons



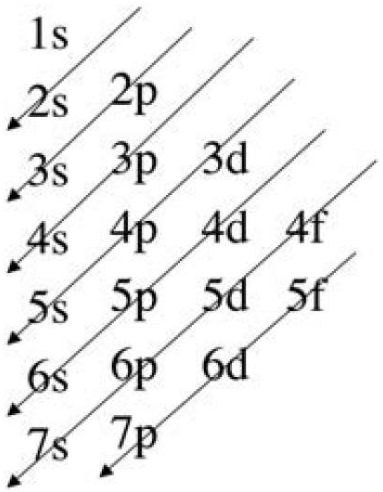
$E_{3d} < E_{4s}$

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



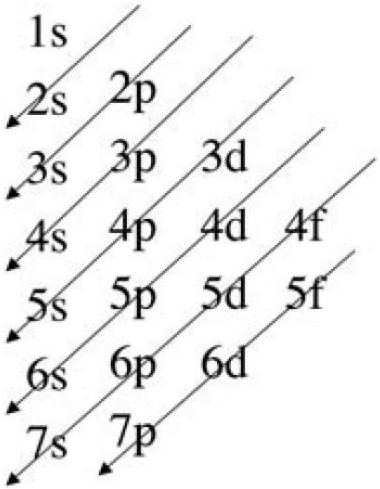
Question

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

Résumé

1.Modèle atomique:

Bohr (± 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: $\Psi_{n,l,ml}$

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“)

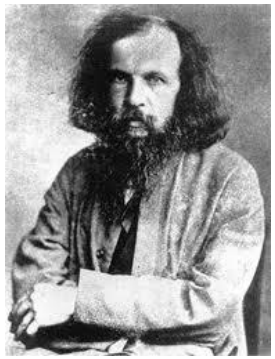
1. Théorie atomique de John Dalton 1850
2. Amadeo du Quaregna, comte d'Avogadro

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

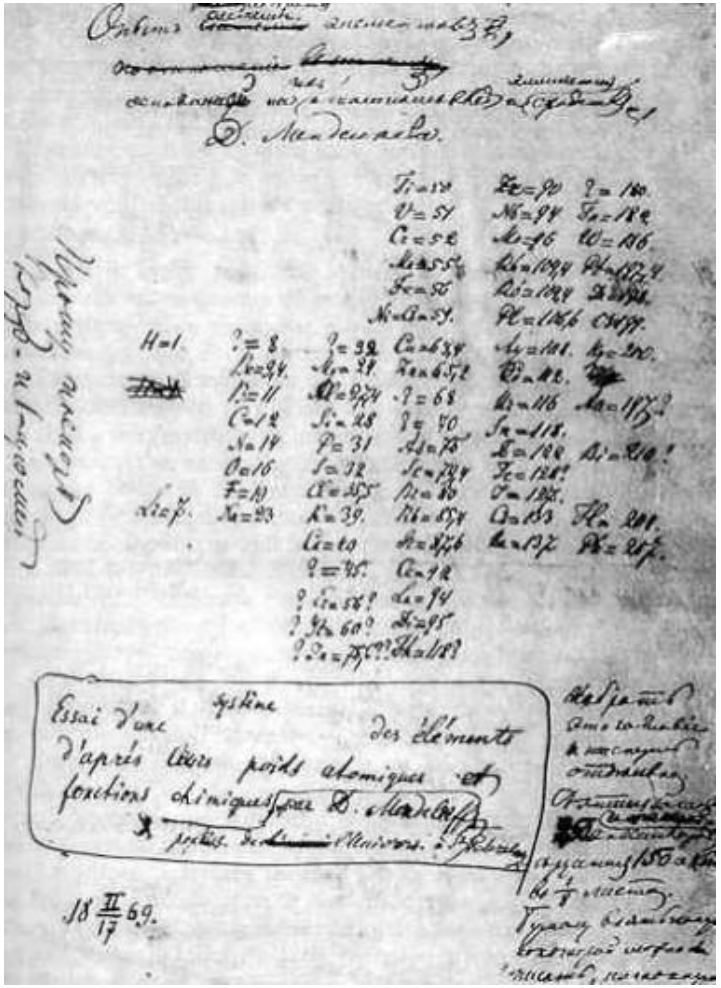
4: Dimitri Mendeleev

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

Henry Moseley
1887-1915

5. Henry Moseley (1887-1915)

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



I	II	III	IV	V	VI
			Ti = 50	Zr = 90	? = 180
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn= 55	Rh=104,4	Pt= 197,4
			Fe = 56	Ru=104,4	Ir = 198
			Ni=Co=59	Pd=106,6	Os = 199
H = 1	? = 8	? = 22	Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200
	Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27,4	? = 68	Ur =116	Au = 197
	C =12	Si =28	? = 70	Sb = 118	
	N =14	P =31	As = 75	Sn = 122	Bi = 210
	O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te= 128 ?	
	F =19	Cl =35,5	Br = 80	I = 127	
Li = 7	Na =23	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133	Tl = 204
		Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137	Pb = 207
		? = 45	Ce = 92		
		? Er = 56	La = 94		
		? Yt = 60	Di = 95		
		? In = 75,6	Th = 118 ?		

propriétés chimiques: lignes
colomnes: 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.

$^{A}_{Z}X$ A nombre de masse
Z numéro atomique

$^{12}_{6}C$ $^{13}_{6}C$

A - Z = nombre de neutrons: 6 7

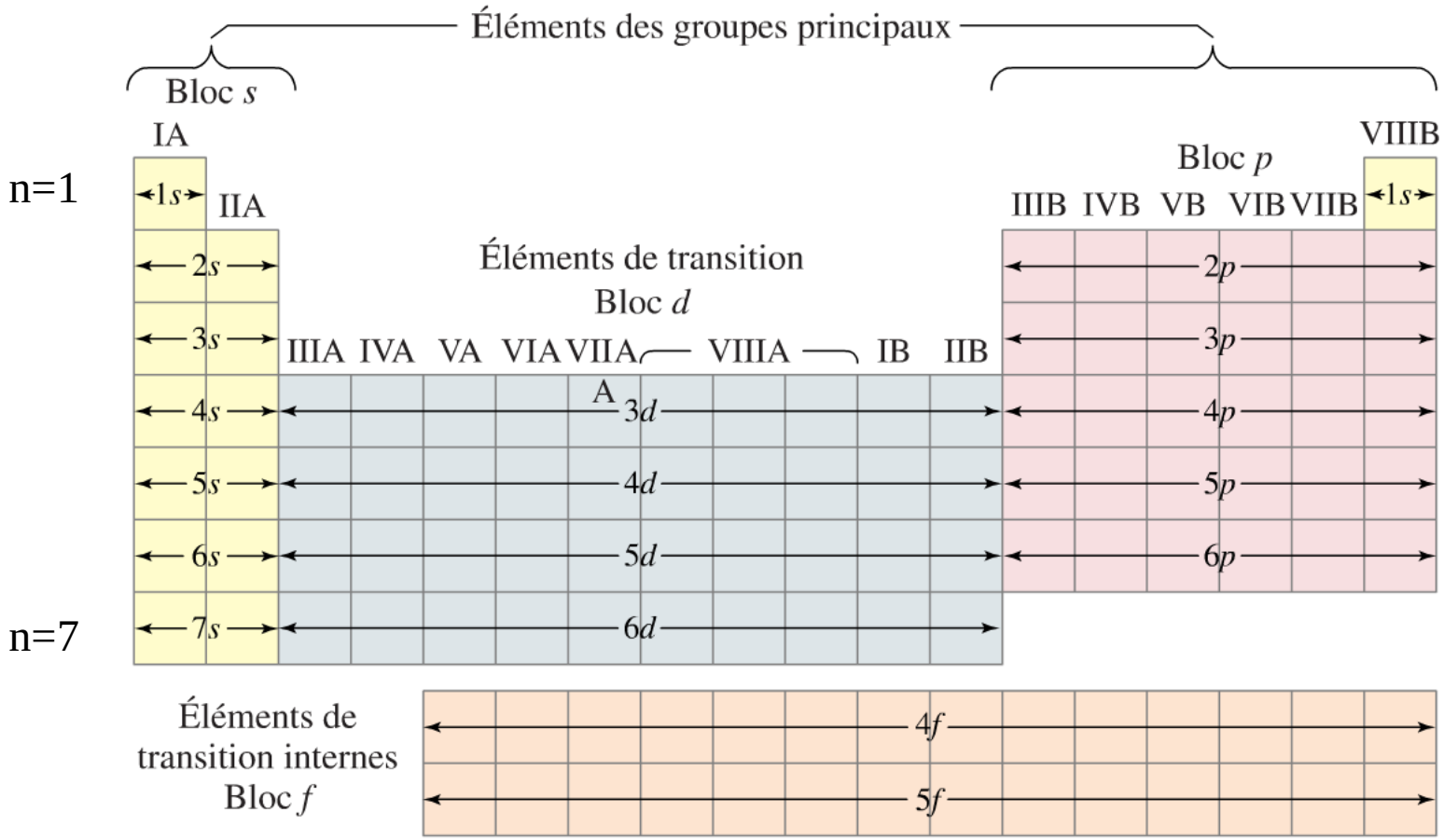
Les isotopes d'un élément se distinguent seulement par leur nombre de neutrons dans le noyau. Exemple: $^{235}_{92}U$; $^{238}_{92}U$

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

Structure atomique
données expérimentales
obtenues dans des gaz

Electronégativité
Pouvoir oxydant
Caractère métallique

Liaison chimique
molécules / matériaux

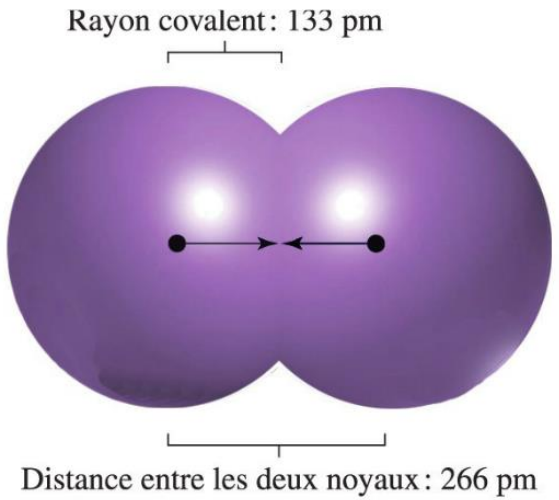
Rayon atomique

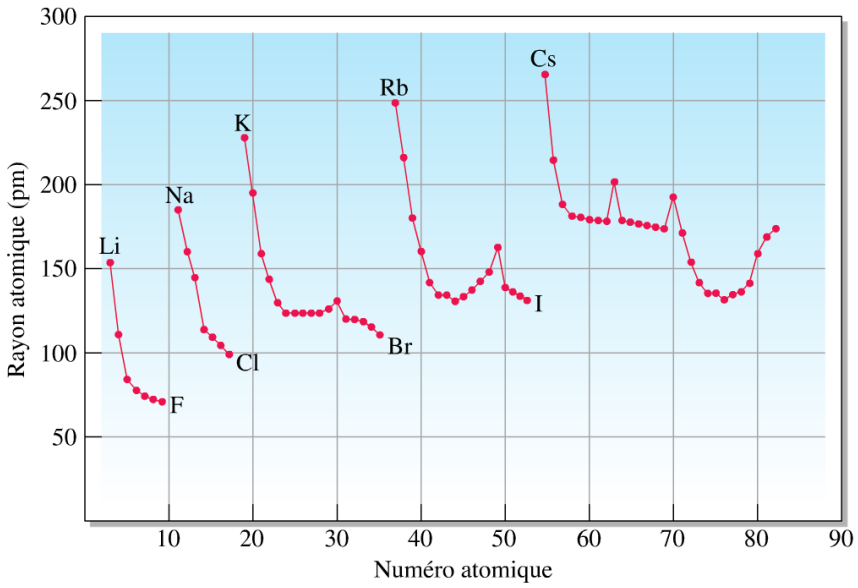
Définitions:

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

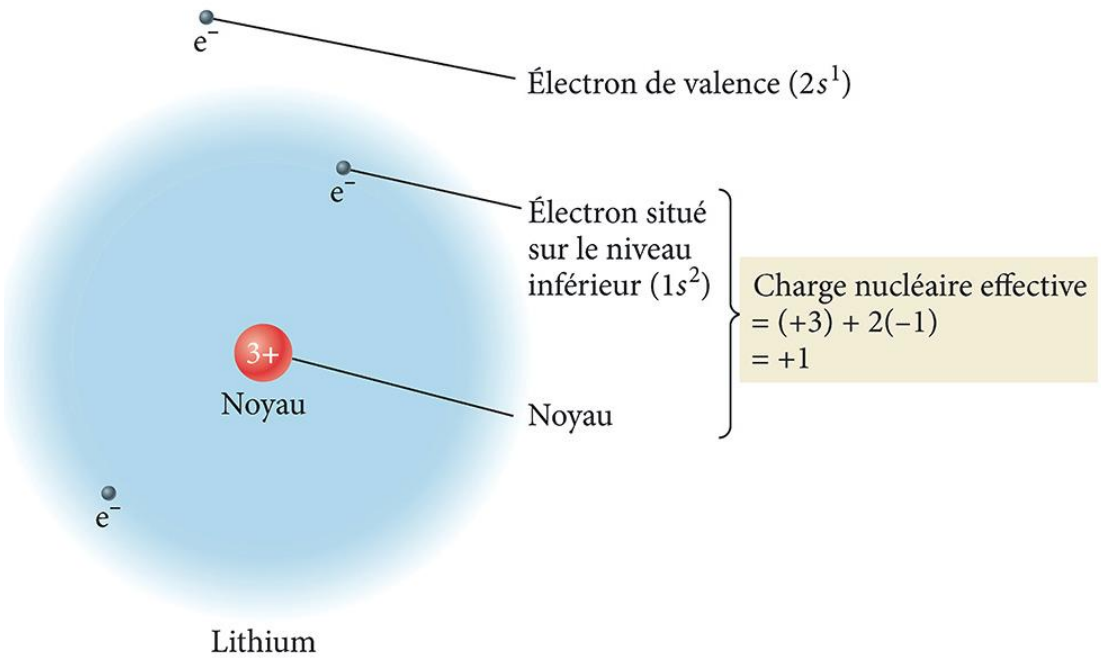
$1.33\ 10^{-10}$ m





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

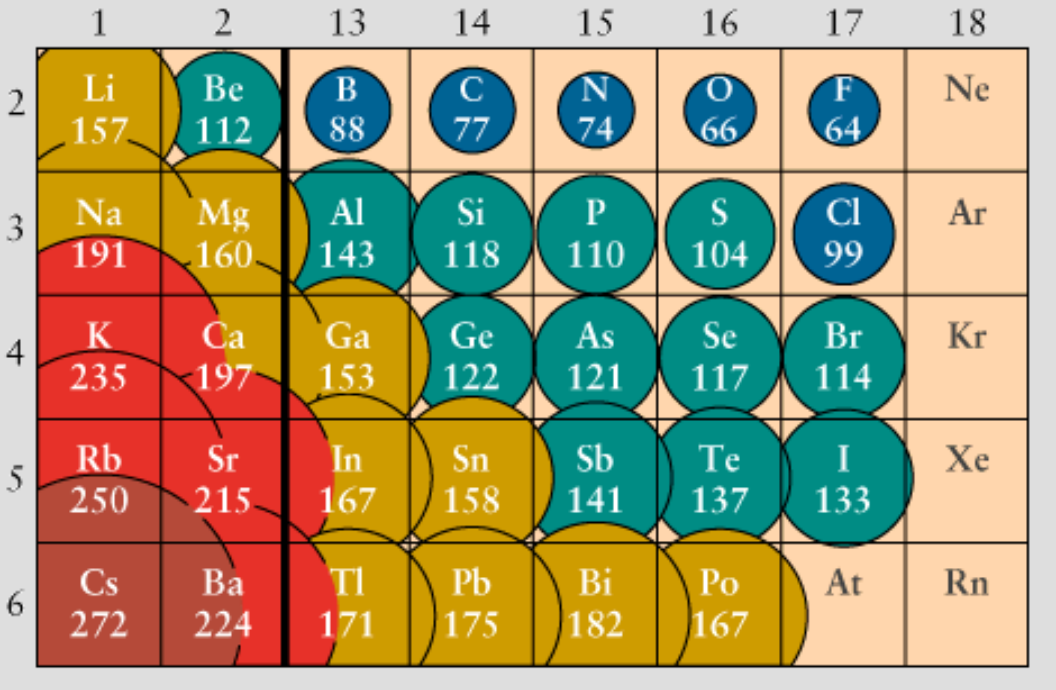
Électrons des niveaux inférieurs (n' < n): écran total

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



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

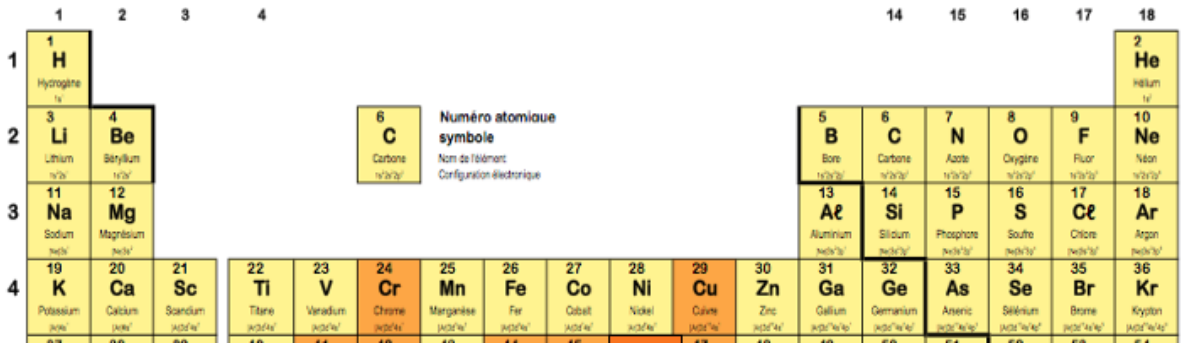
Z_{eff} augmente de gauche à droite le long d'une période

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

Question

Qui a le plus grand rayon atomique?

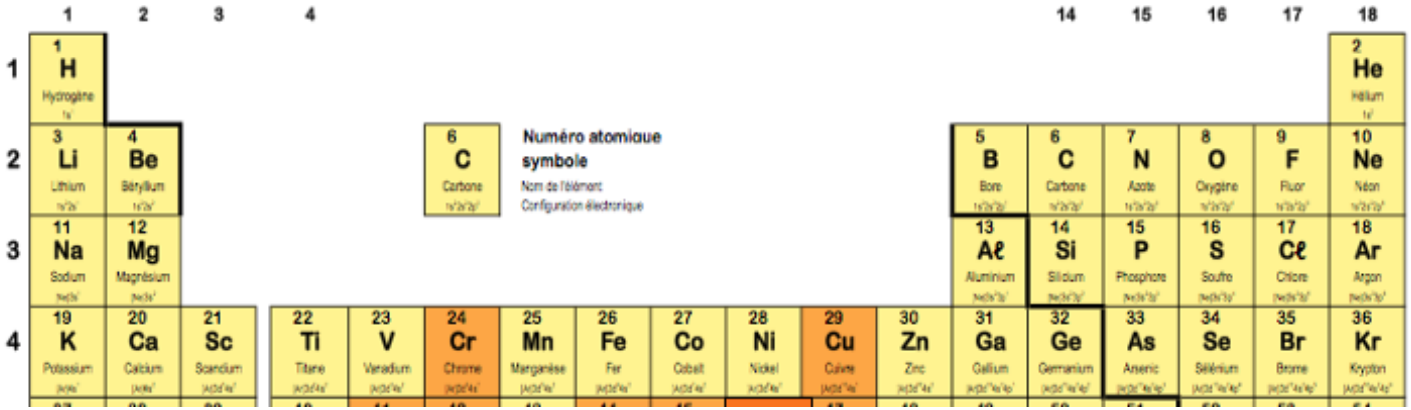
1. K (numéro atomique 19)
2. Cl (numéro atomique 17)



Question

Qui a le plus grand rayon ionique?

1. K^+
2. Cl^-



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

Energie d ’ionisation augmente

Period	1	2	13	14	15	16	17	18
				H 1310				He 2370
2	Li 519	Be 900	B 799	C 1090	N 1400	O 1310	F 1680	Ne 2080
3	Na 494	Mg 736	Al 577	Si 786	P 1011	S 1000	Cl 1255	Ar 1520
4	K 418	Ca 590	Ga 577	Ge 784	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1350
5	Rb 402	Sr 548	In 556	Sn 707	Sb 834	Te 870	I 1008	Xe 1170
6	Cs 376	Ba 502	Tl 590	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 1037	Rn 1036

Group

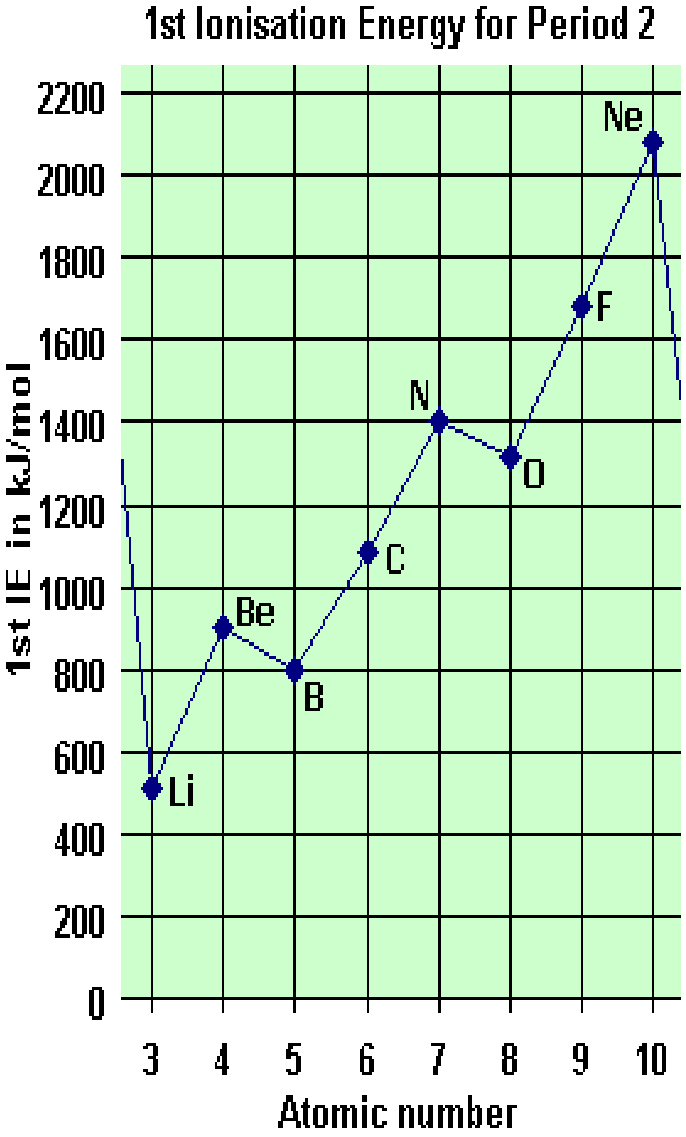
2001–2500
1501–2000
1001–1500
501–1000
1–500

Énergie de Première ionisation en kJ / mol

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

Energie d ’ionisation augmente

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
$[1s^2 2s^2 2p^3]$
O
$[1s^2 2s^2 2p^4]$

Be $[1s^2 2s^2]$
B
$[1s^2 2s^2 2p^1]$

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)

$$\mathbf{Na + e^- \longrightarrow Na^-}$$ AE = -53 kJ/mol

$$\mathbf{Cl + e^- \longrightarrow Cl^-}$$ AE = -349 kJ/mol

$$\mathbf{Ne + e^- \longrightarrow Ne^-}$$ AE > 0

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

Il existe deux conventions de signe différentes pour AE

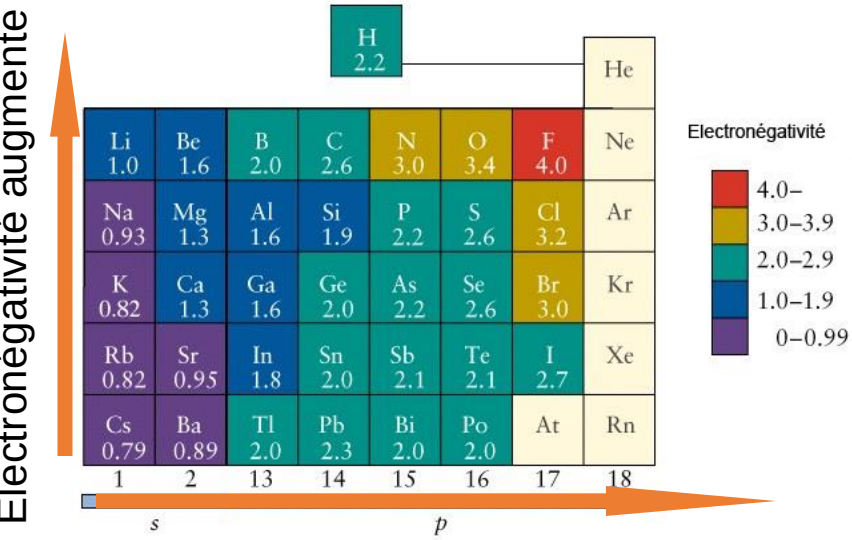
69

Prédiction des propriétés des éléments

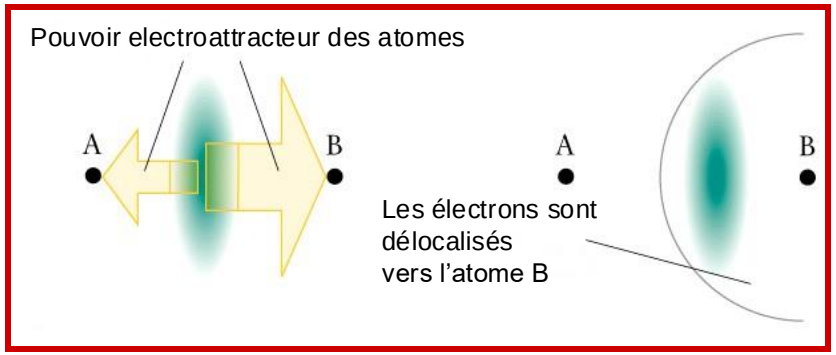
Electronégativité

- 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



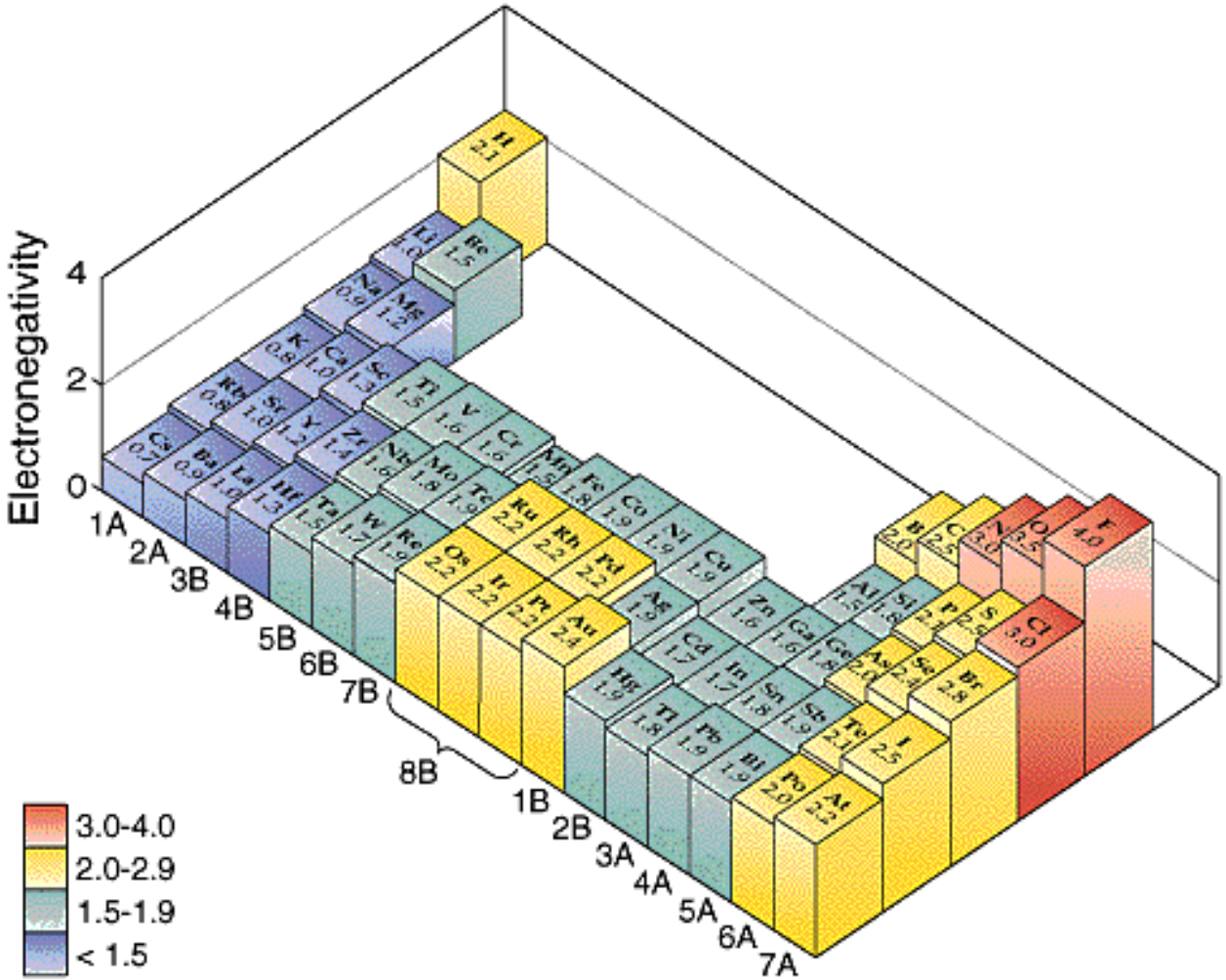
Electronégativité augmente



- 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.



δ^+ δ^-

H-Cl

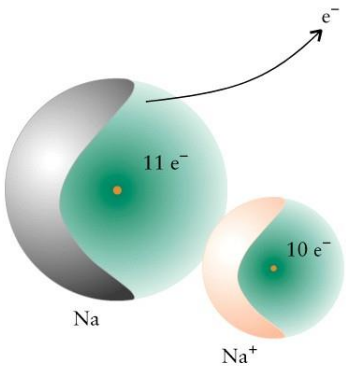
2.1 3.0

Electronégativité et énergie d'ionisation

Atomes isolés		molécule		molécule		molécule
Energie d'ionisation faible	⟷	Electronégativité faible	⟷	Fort caractère métallique	⟷	Fort pouvoir réducteur

$$Na \rightarrow Na^{+} + e^{-}$$

Electronégativité: 0.93
Energie d'ionisation: 494 kJ/mol

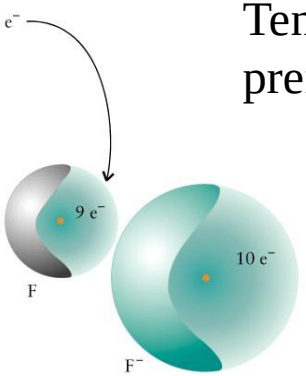


Tendance à donner des électrons

Energie d'ionisation élevée	⟷	Electronégativité élevée	⟷	Caractère Non métallique	⟷	Fort pouvoir oxydant

$$F + e^{-} \rightarrow F^{-}$$

Electronégativité: 4.0
Energie d'ionisation: 1680 kJ/mol

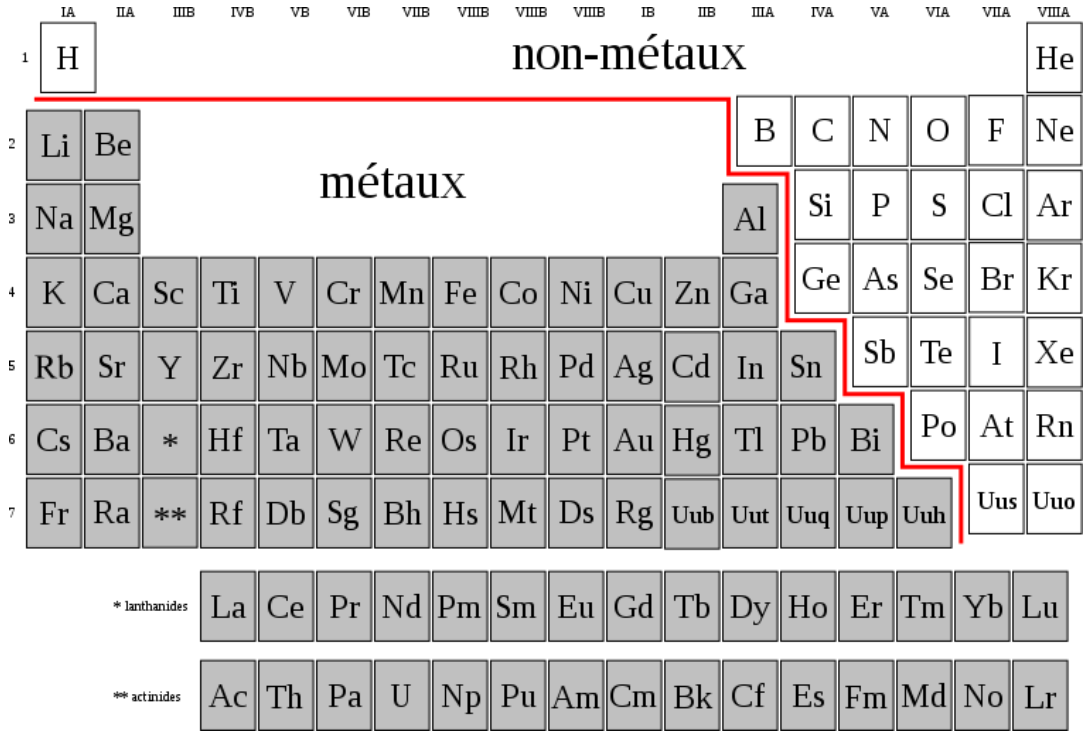


Tendance à prendre des électrons

72

Caractère métallique

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

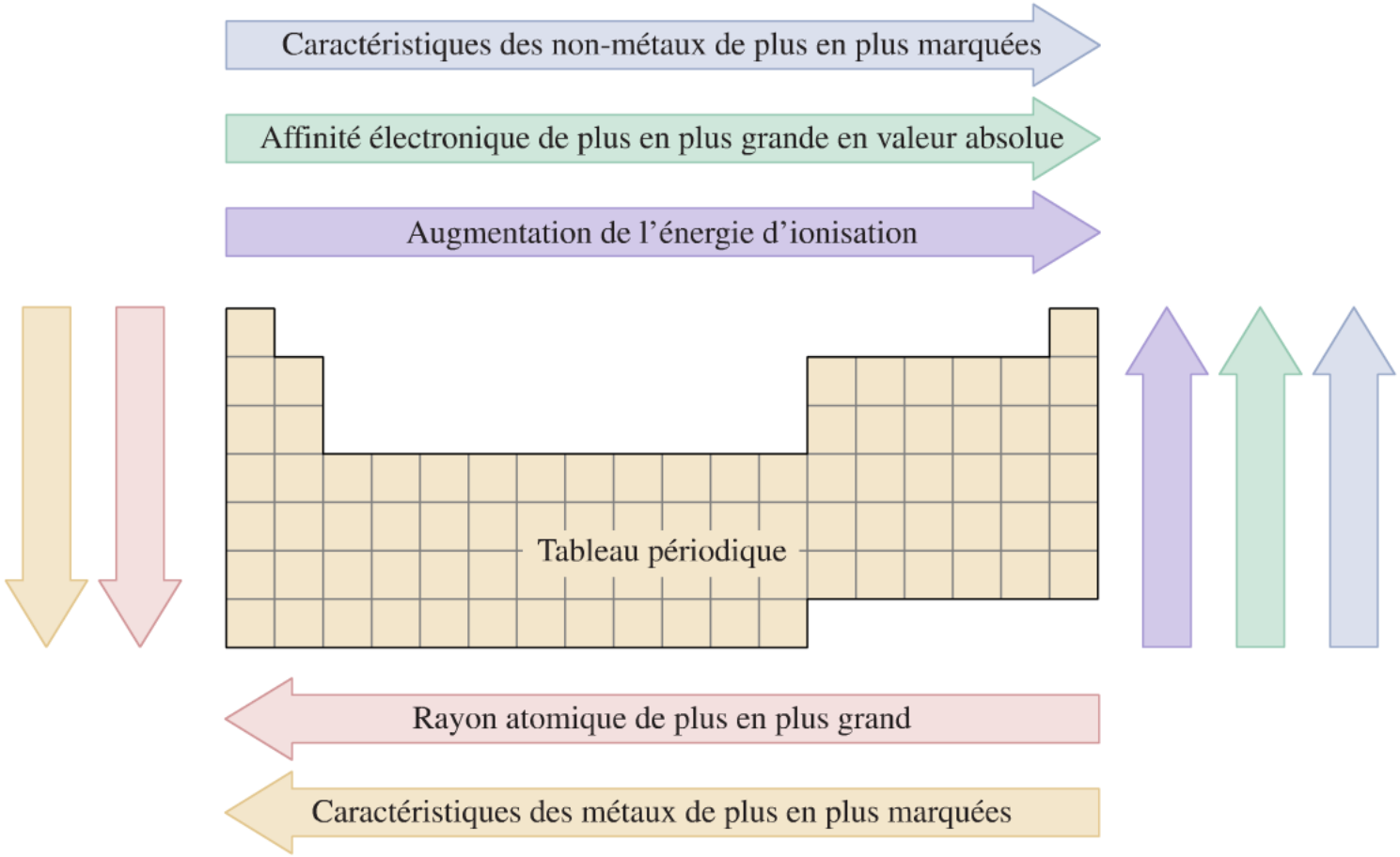


Les métalloïdes : sont les éléments de chaque côté de la ligne en escalier. Ils possèdent certaines propriétés des métaux et des non-métaux. Les éléments suivants sont considérés comme des métalloïdes (B, Al, Si, Ge, As, Sb, Bi…..).

Résumé

Forte attraction des électrons de valence par le noyau F	Faible attraction des électrons de valence par le noyau Cs, Fr
Rayon atomique petit	Rayon atomique grand
Energie d'ionisation grande	Energie d'ionisation faible
Affinité électronique grande (valeur absolue)	Affinité électronique faible (valeur absolue)
Électronégativité grande	Électronégativité faible
Faible caractère métallique	Fort caractère métallique
Oxydant	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