Génie mécanique

Les atomes / Le tableau périodique

V. Michaud (MX)

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

EPFL

Table des matières

- Introduction, objectif du cours
- Rappels sur l'atome
- Les orbitales atomiques
- Le principe de construction des atomes
- Le tableau périodique

Objectifs du cours

- Rappel sur la structure des atomes, les orbitales atomiques.
- Rappel sur le tableau périodique des éléments

Rappels de la semaine dernière

- Les atomes sont constitués de protons, neutrons et électrons. Le noyau se compose de protons et de neutrons et il constitue la quasi-totalité de la masse de l'atome.
- Les ondes électromagnétiques sont créées par les mouvements des charges électriques dans les atomes.

Les radiations électromagnétiques transportent de l'énergie à travers l'espace.

➡ Une raie de radiation électromagnétique est un flux de nombreux « paquets » d'énergie électromagnétique appelés photons (pour la lumière).

énergie $E = h\,\nu$ ← fréquence

↑ constante de Planck

Dans le vide:

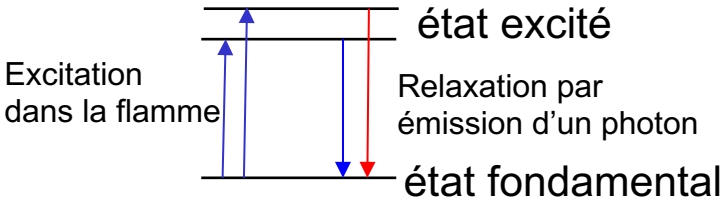
$$\lambda\,\nu = c = 3\,x\,10^{8}\ {}^{m}/_{s}$$

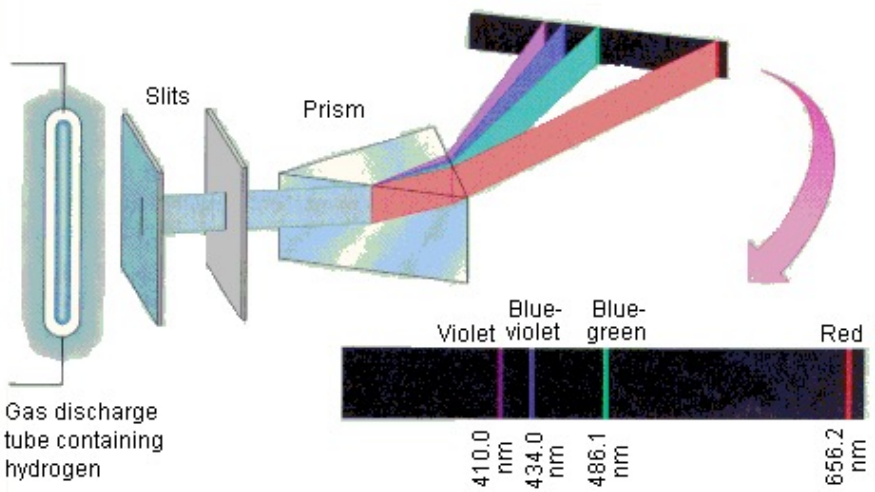
ν connu $\rightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{E}$

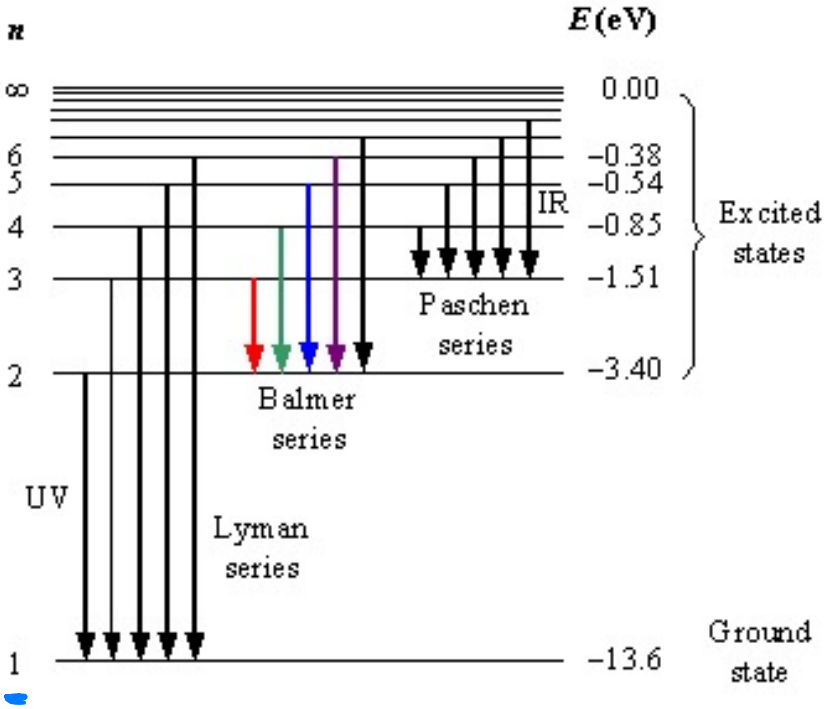
vitesse *c*, longueur d'onde λ,
fréquence: $\nu = 7.5 - 3.75 \times 10^{14}\ s^{-1}$
E = 1.25 – 2.5 eV

Réponse d'un atome d'hydrogène hors équilibre

= des photons! Mais seulement avec une énergie particulière, appelée quanta







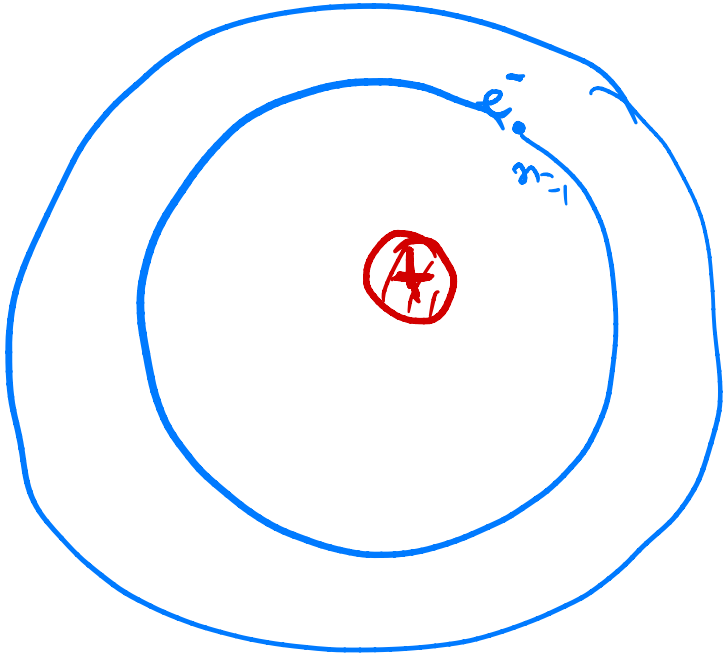
Spectre de l'hydrogène atomique

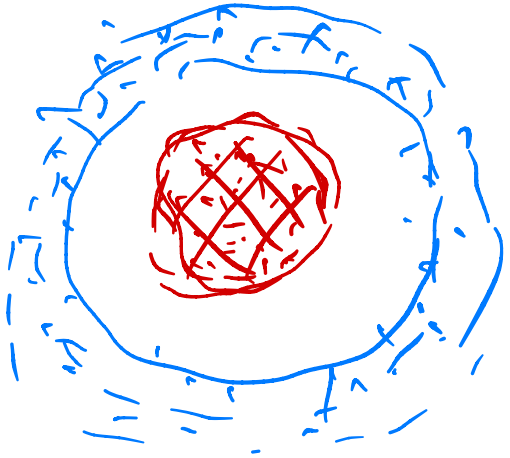
$$E_n = \frac{-13.6\ eV}{n^2}$$

Modèle actuel de structure de l'atome

La physique quantique a permis de comprendre la structure électronique des atomes

Hydrogène





Vision classique de Bohr

Vision quantique

Mécanique quantique: la fonction d'onde

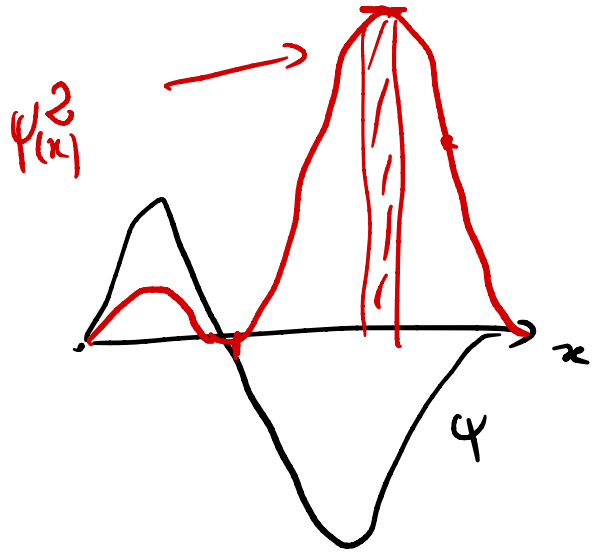
Schrödinger (1926):

$\Psi^2(x)$ densité de probabilité de présence de l'électron. On ne parle plus de position précise d'un électron, mais de probabilité de présence d'un électron dans un espace donné.

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx} + V(x)\psi = E\psi$$

ψ solution de cette équation



Mécanique quantique: la fonction d'onde

Schrödinger (1926):

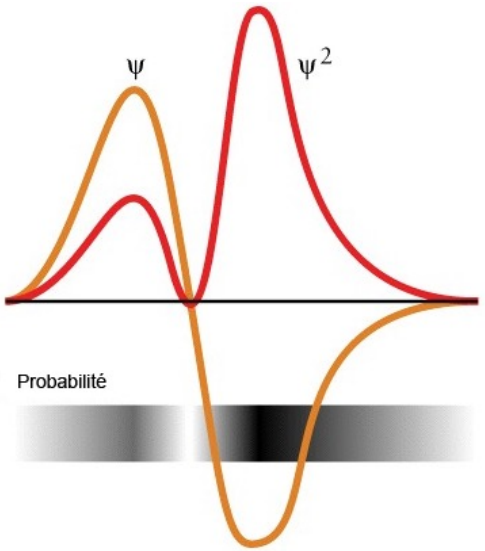
énergie cinétique + énergie potentielle = énergie totale

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

$$H\,\psi \qquad = E\,\psi$$

(H: hamiltonien; ψ = fonction d'onde, juste pour info, pas besoin de retenir cela!)

La fonction d'onde ψ, décrit les états d'énergie de l'atome, et est solution de l'équation donnée ici.



Interprétation de ψ:

$\Psi^2(x)$ densité de probabilité de présence de l'électron.

On ne parle plus de position précise d'un électron, mais de probabilité de présence d'un électron dans un espace donné.

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

Mécanique quantique: L'incertitude

Heisenberg (1925) :Il est impossible de connaître simultanément la position et la vitesse d'une particule aussi petite qu'électron. En voulant mesurer la position, on modifie sa vitesse et vice-versa.

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2}\hbar$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$h = 6.63 \cdot 10^{-34}\ J.s$

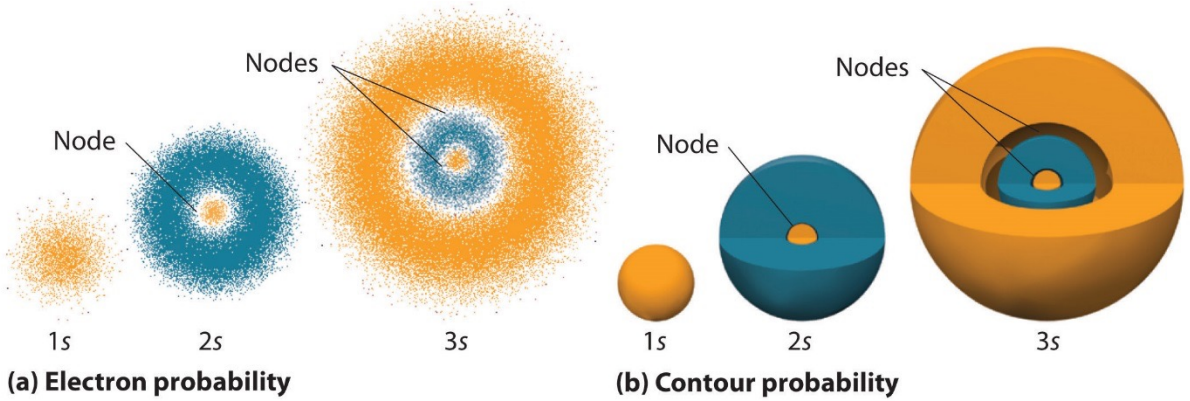
$\hbar \sim 10^{-34}\ J.s$

Δx: incertitude sur la position

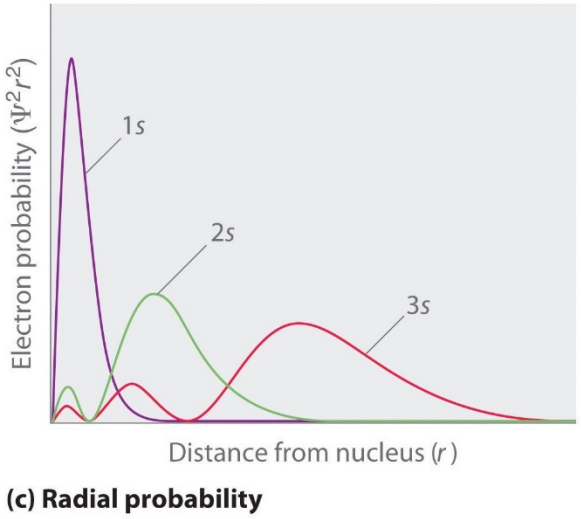
$\Delta p = m\Delta v$: incertitude sur la quantité de mouvement donc sur la vitesse

Solution de l'équation de Schrodinger: orbitales

Les diverses solutions de l'équation de Schrödinger sont des orbitales ($\psi_{n,l,ml}$) définies par 3 nombres entiers (appelés nombres quantiques): n, l, m_l



Une orbitale est une expression mathématique.



La fonction de distribution radiale donne la densité de probabilité de présence de l'électron pour un rayon donné sommée dans toutes les directions.

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 et orbitales

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

n : nombre quantique principal: $n \geq 1$
n détermine l'énergie et la "taille" de l'orbitale

$n = 1$ H, He

$n = 2$ - - - -

$n = 3$ - - —

$n = 4$

Les nombres quantiques et orbitales

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

$n = 1 \quad \ell = 0$

$n = 2 \quad \ell = 0, \ell = 1$

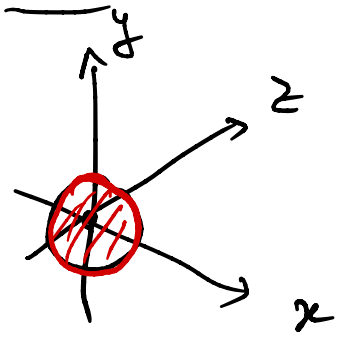
$n = 3 \quad \ell = 0, \ell = 1, \ell = 2$

ℓ : nombre quantique angulaire (secondaire):

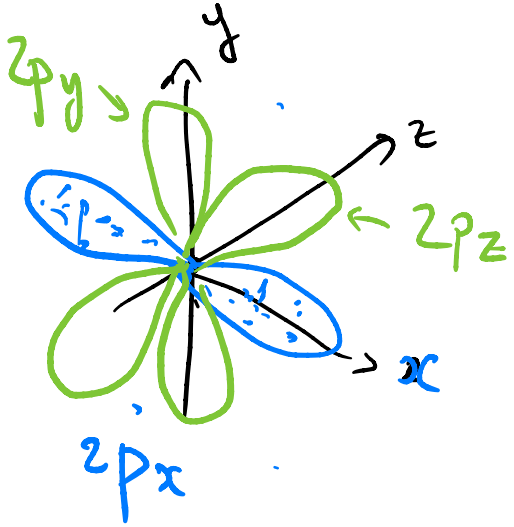
$0 \leq \ell \leq n - 1$

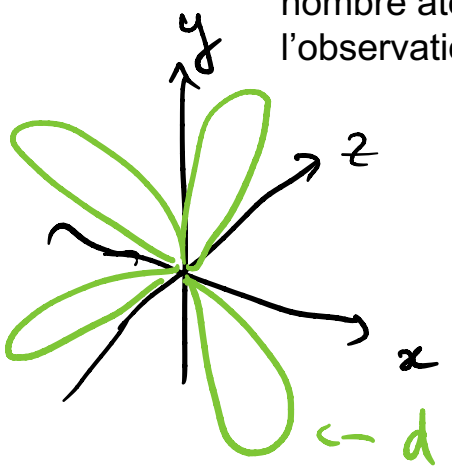
ℓ détermine la forme de l'orbitale

$\ell = 0$ $\ell = 1$ $\ell = 2$



orbitale s





La notation s, p, d et f pour le nombre atomique l est héritée de l'observation des raies d'absorption:

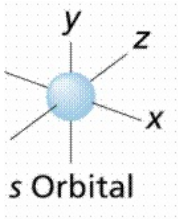
- s : sharp
- p : principal
- d : diffuse
- f : fundamental

Les nombres quantiques et orbitales

m_ℓ : nombre quantique magnétique: $-\ell \leq m_\ell \leq +\ell$

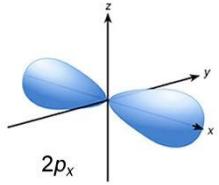
m_ℓ représente l'orientation de l'orbitale (2 x ℓ +1 orientations possibles pour un nombre quantique ℓ donné)

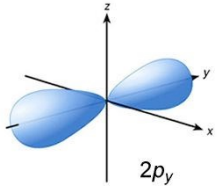
ℓ = 0 $m_\ell = 0$

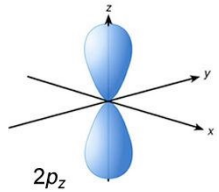


ℓ = 1

m_ℓ =-1, 0, 1

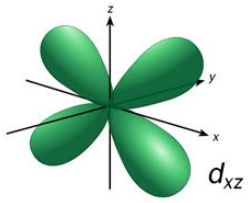


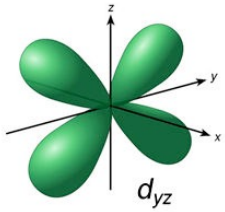


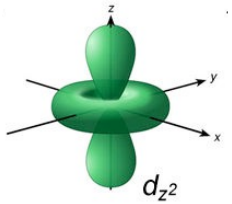


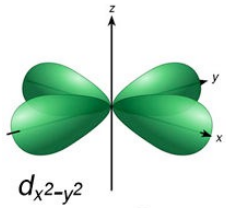
ℓ = 2

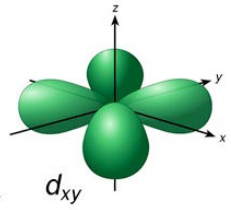
m_ℓ =-2, -1, 0, 1, 2











Les nombres quantiques et orbitales

Pour définir un électron dans une orbitale, on a besoin d'un 4eme nombre quantique:

m_s : nombre quantique de spin: +1/2 ou -1/2

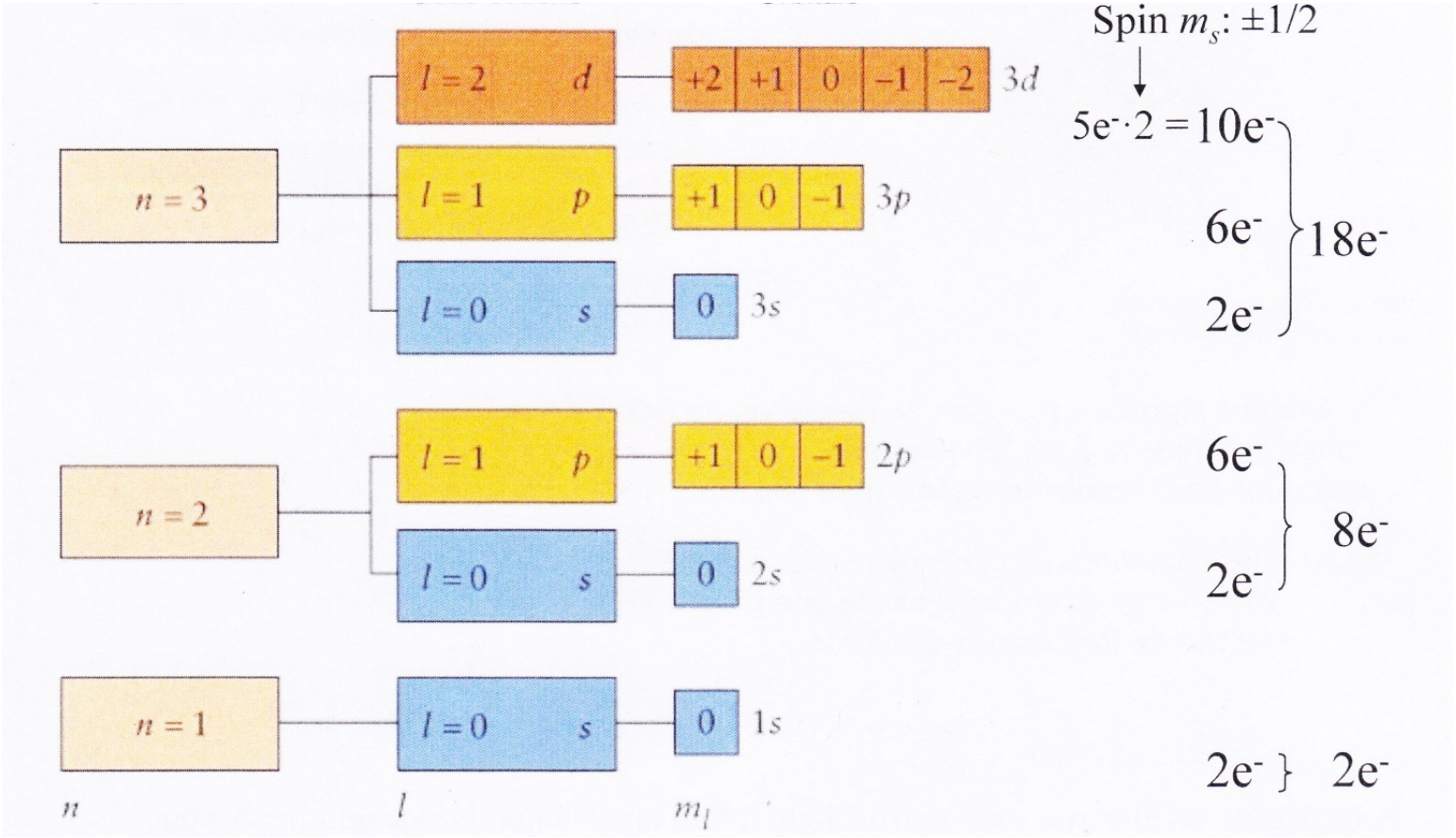
$+\frac{1}{2}\uparrow\downarrow -\frac{1}{2}$

1 atome = (n, ℓ, m_ℓ, m_s) carte d'identité.

Remplissage des orbitales

couche sous-couche orbitale

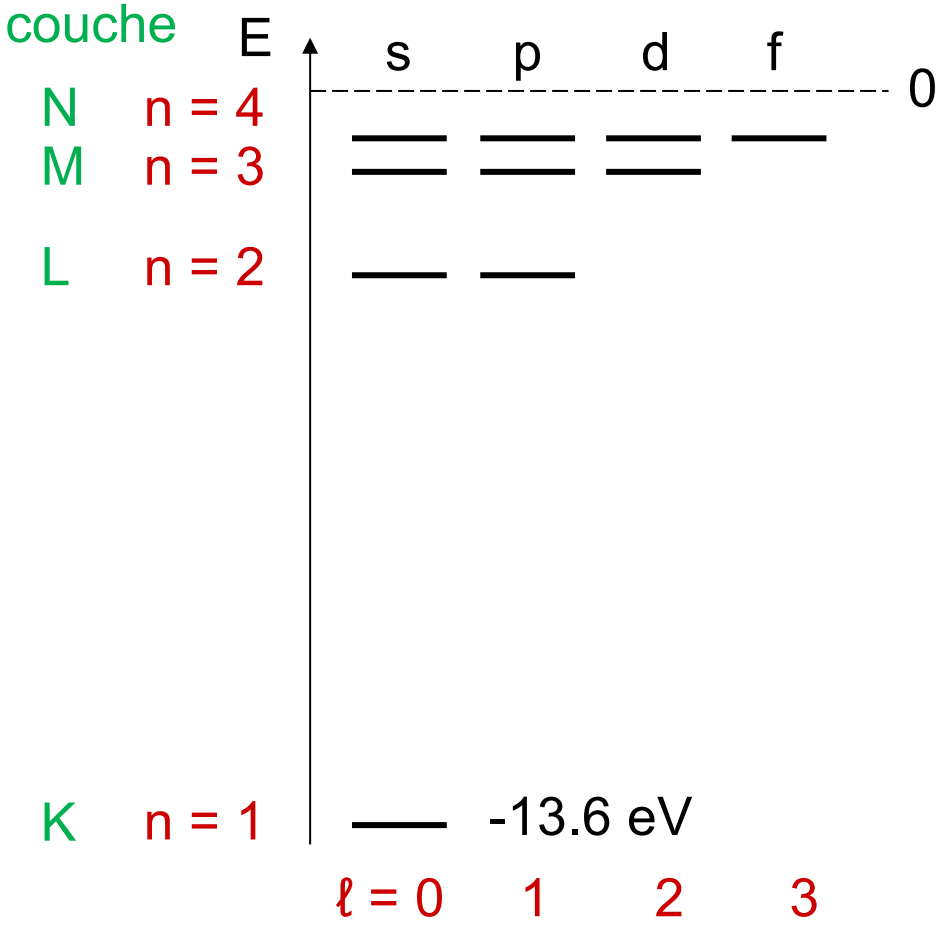
Nombres d'électrons: $2n^2$



Structure de l'atome d'hydrogène

Pour l'atome d'Hydrogène, tous les états pour un même *n* ont la même énergie.

On dit qu'ils sont dégénérés.

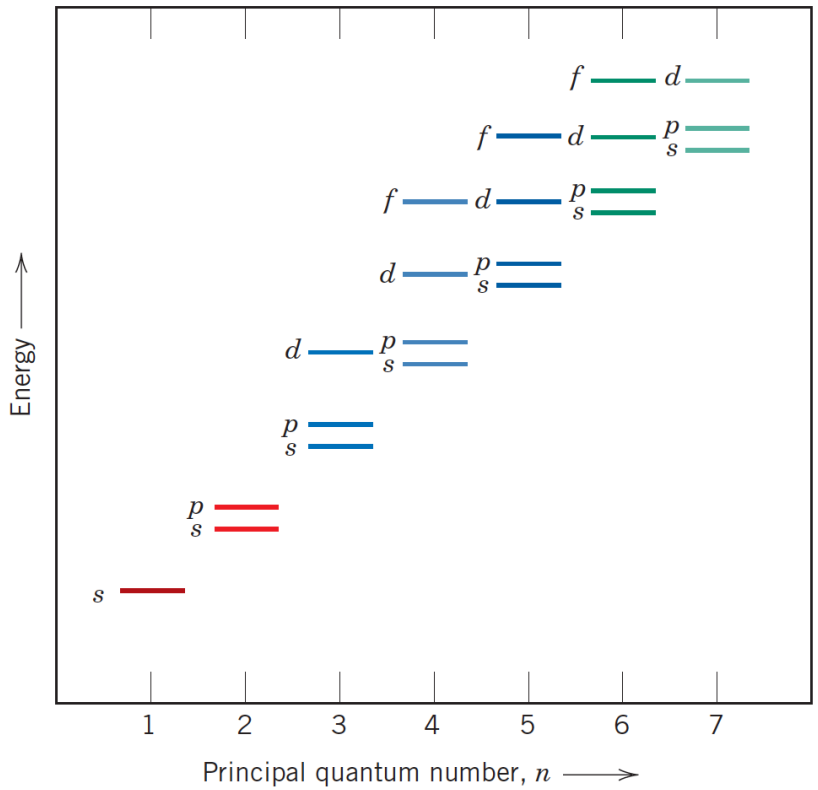


Nombre d'états au niveau n:

$$2\times\sum_{l=0}^{n-1}(2\times l+1)$$

Structure des atomes à plusieurs électrons

En considérant maintenant les atomes avec un nombre atomique Z > 1, les niveaux énergétiques des différentes orbitales ne sont plus dégénérés et leur ordre est également perturbé.

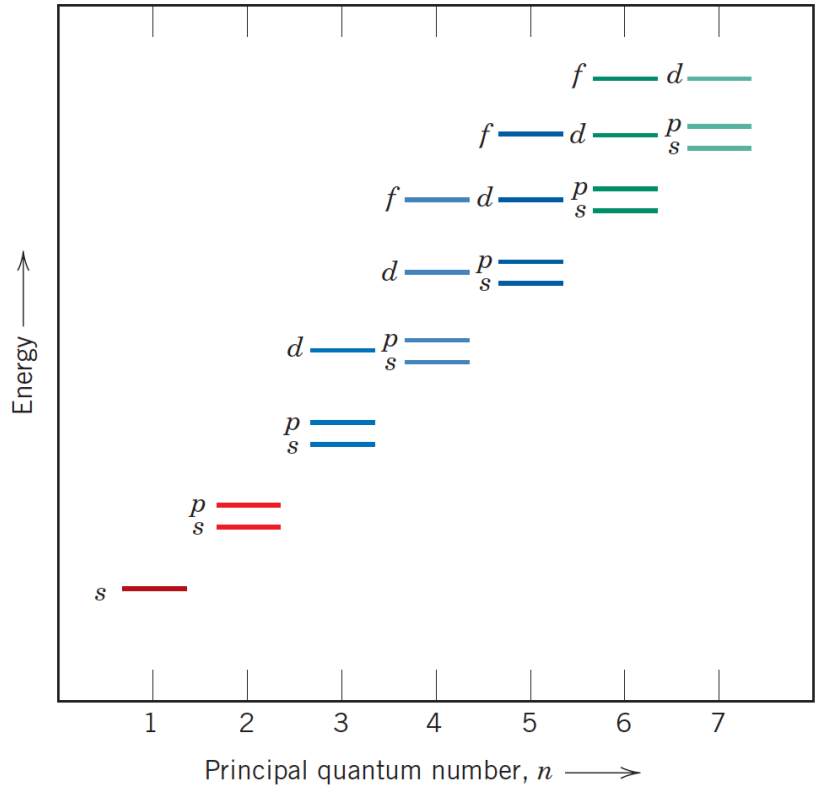


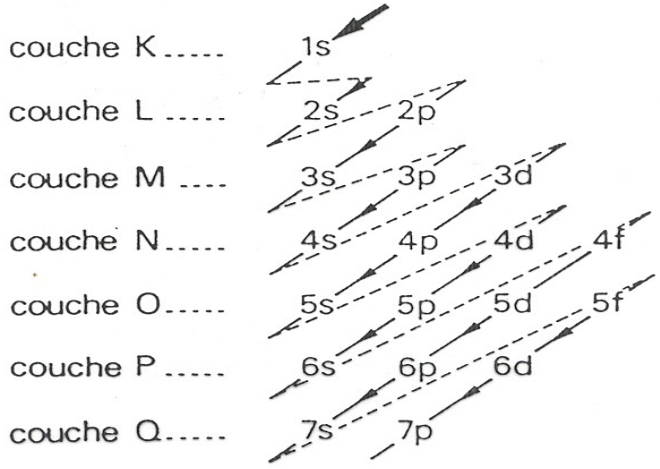
Règle Klechkowsky

1s
2s 2p
3s 3p 3d
4s 4p 4d 4f
⋮

Structure des atomes à plusieurs électrons

Règle de Klechkowsky:
Les électrons d'un atome (ou d'un ion) occupent dans l'état fondamental les orbitales atomiques de plus basse énergie



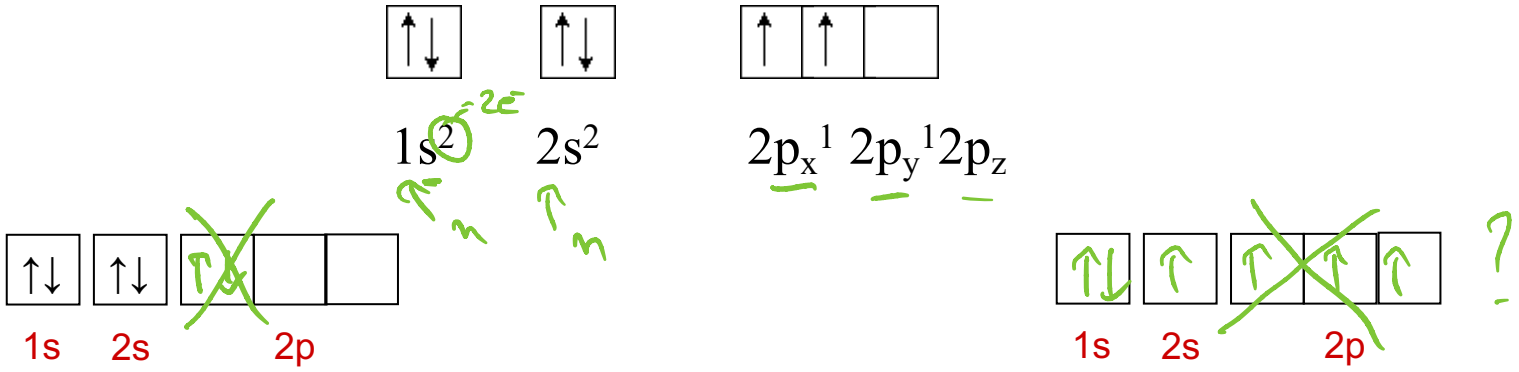


Principe de construction: 2 principes

Principe d'exclusion de Pauli

Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombre quantiques (un set (n, ℓ, m_ℓ, m_s) correspond à 1 seul e^-)
Une orbitale comprend au plus deux électrons et ces électrons sont nécessairement de spins opposés.

Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



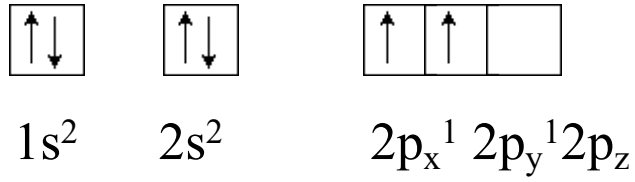
↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

Principe de construction: 2 principes

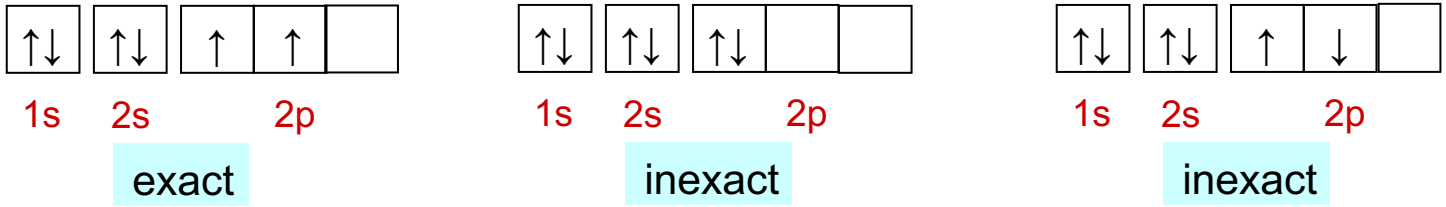
Règle de Hund

L' arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles (sur les orbitales (n, ℓ), on fixe d'abord m_s avant de varier m_ℓ)

Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



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



↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

Principe de construction: électrons de valence

H: $1s^1$

He: $1s^2$

Li: $1s^2\,2s^1$

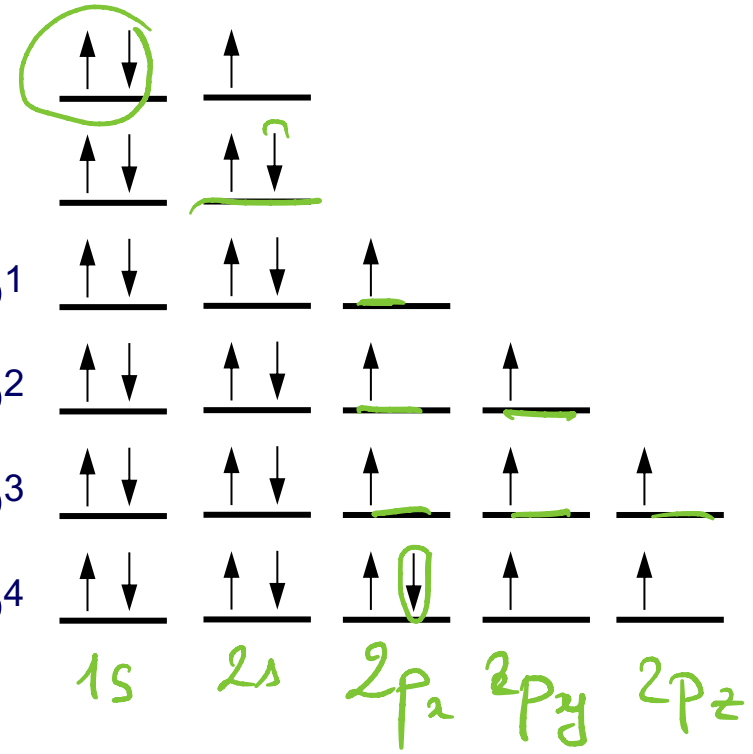
Be: $1s^2\,2s^2$

B: $1s^2\,2s^2\,2p^1$

C: $1s^2\,2s^2\,2p^2$

N: $1s^2\,2s^2\,2p^3$

O: $1s^2\,2s^2\,2p^4$



Électrons 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***

Tableau périodique des éléments

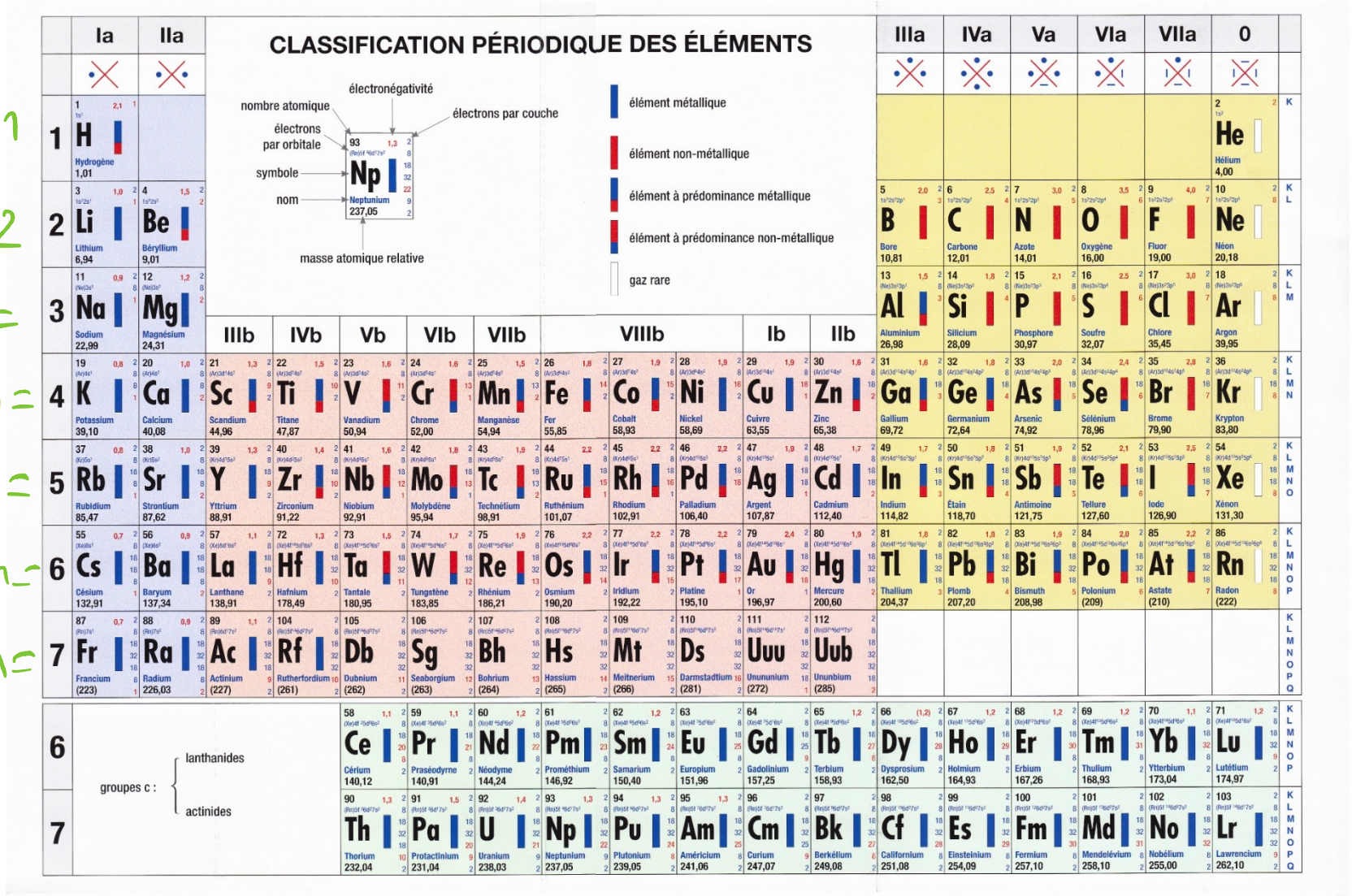
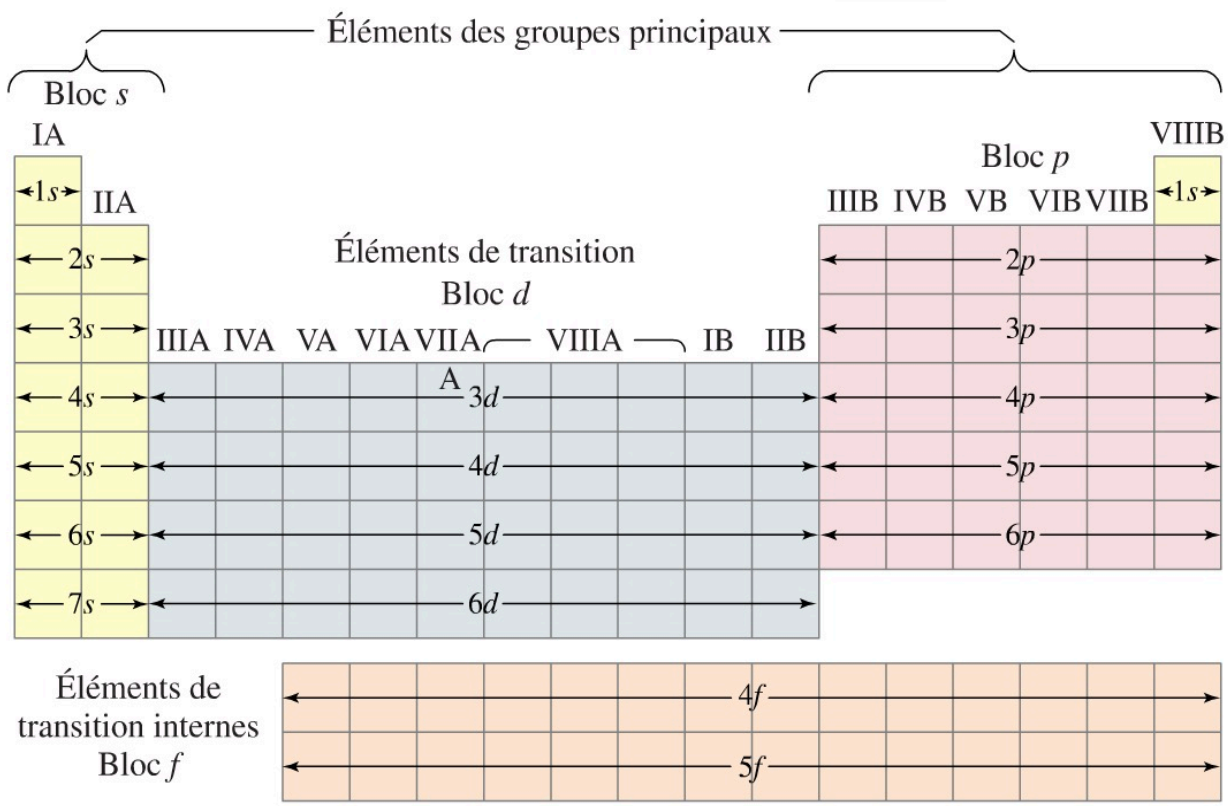


Tableau périodique des éléments



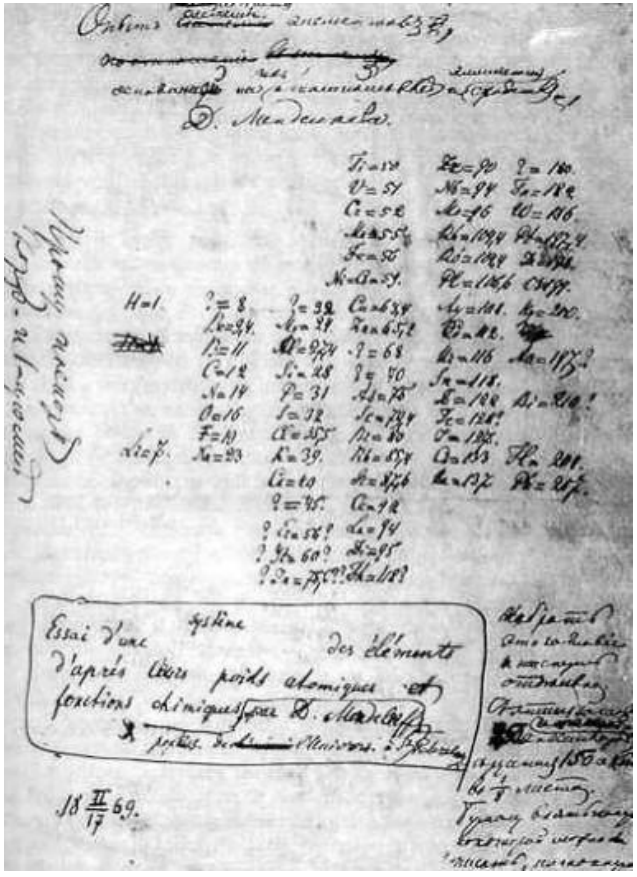
Le tableau périodique est construit selon le principe de l'Aufbau, ajout d'un électron (et d'un proton) à l'atome dont le numéro atomique est immédiatement inférieur.

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.

Un peu d'histoire

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



propriétés chimiques: lignes colonnes: masse atomique
Tableau inversé par rapport au tableau d'aujourd'hui

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 ?		

Définitions

numéro atomique Z = nombre de protons du noyau
= nombre d'électrons (pour un atome neutre)

nombre de masse A = nombre de nucléons (protons + neutrons)
La 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

$^{12}_{6}C$ $^{13}_{6}C$ $^{14}_{6}C$

A - Z = nombre de neutrons: 6 7 8

Définitions

Isotope: atomes ayant le même nombre de protons (numéro atomique identique) mais pas le même nombre de neutrons (masse atomique différente).

Nombre de neutrons = A – Z

A: nombre de masse de l'isotope
Z: numéro atomique

Isotope	Proportion en pourcentage	Proportion en fraction décimale
Carbone 12	98.892 %	0.988 92
Carbone 13	1.108 %	0.011 08
Carbone 14 instable(radioactif)	*0,000 000 000 1 %*	

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

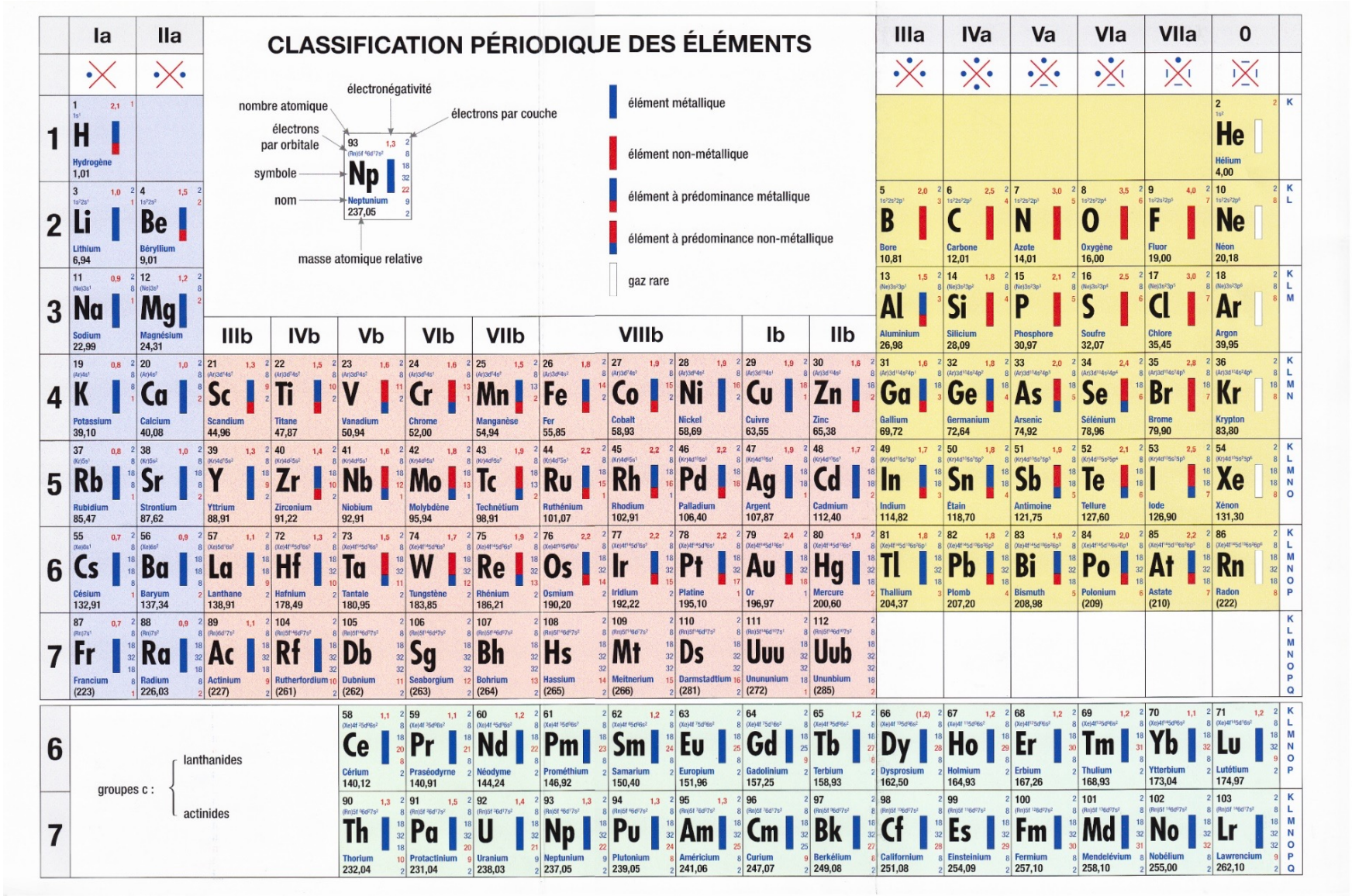
Quelques points sur le tableau périodique

- 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.

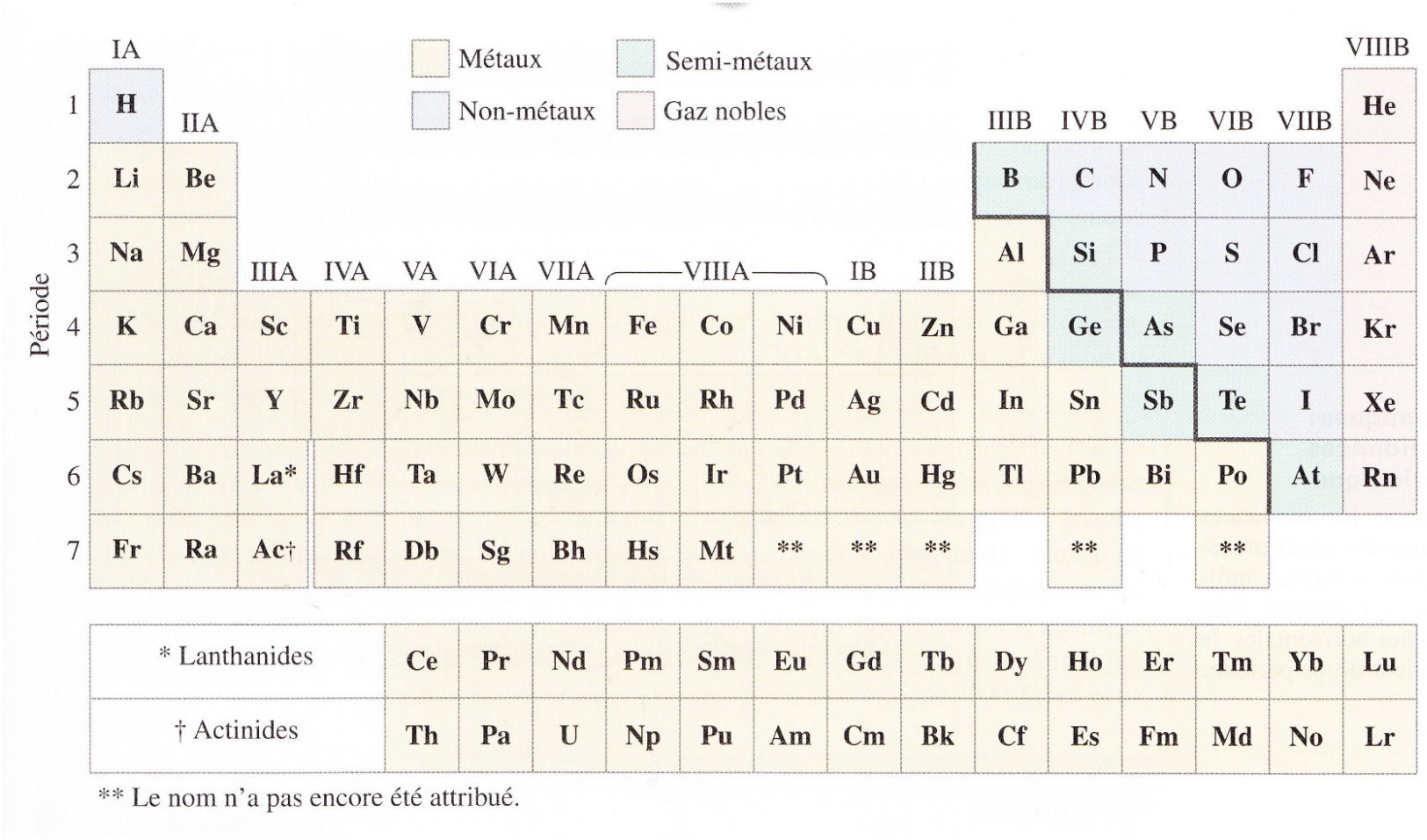
Les membres d'une même colonne ont tous le même nombre d'électrons de valence. Ils ont des propriétés semblables.

électrons de valence: les électrons sur la dernière couche électronique de l'atome

Tableau périodique des éléments



Métaux et non-métaux

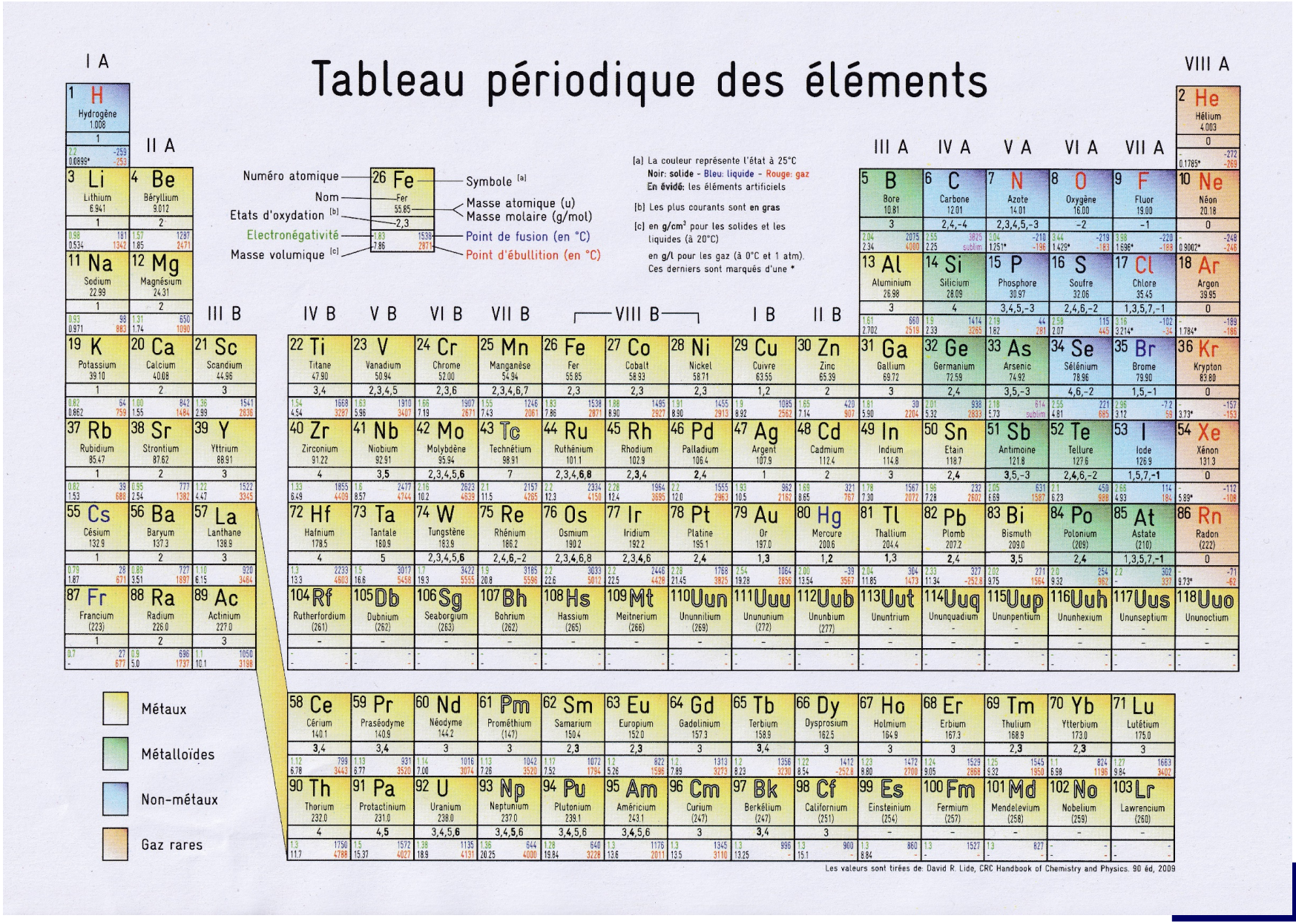


Période	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA			IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	**	**	**		**		**		

* Lanthanides	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
† Actinides	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

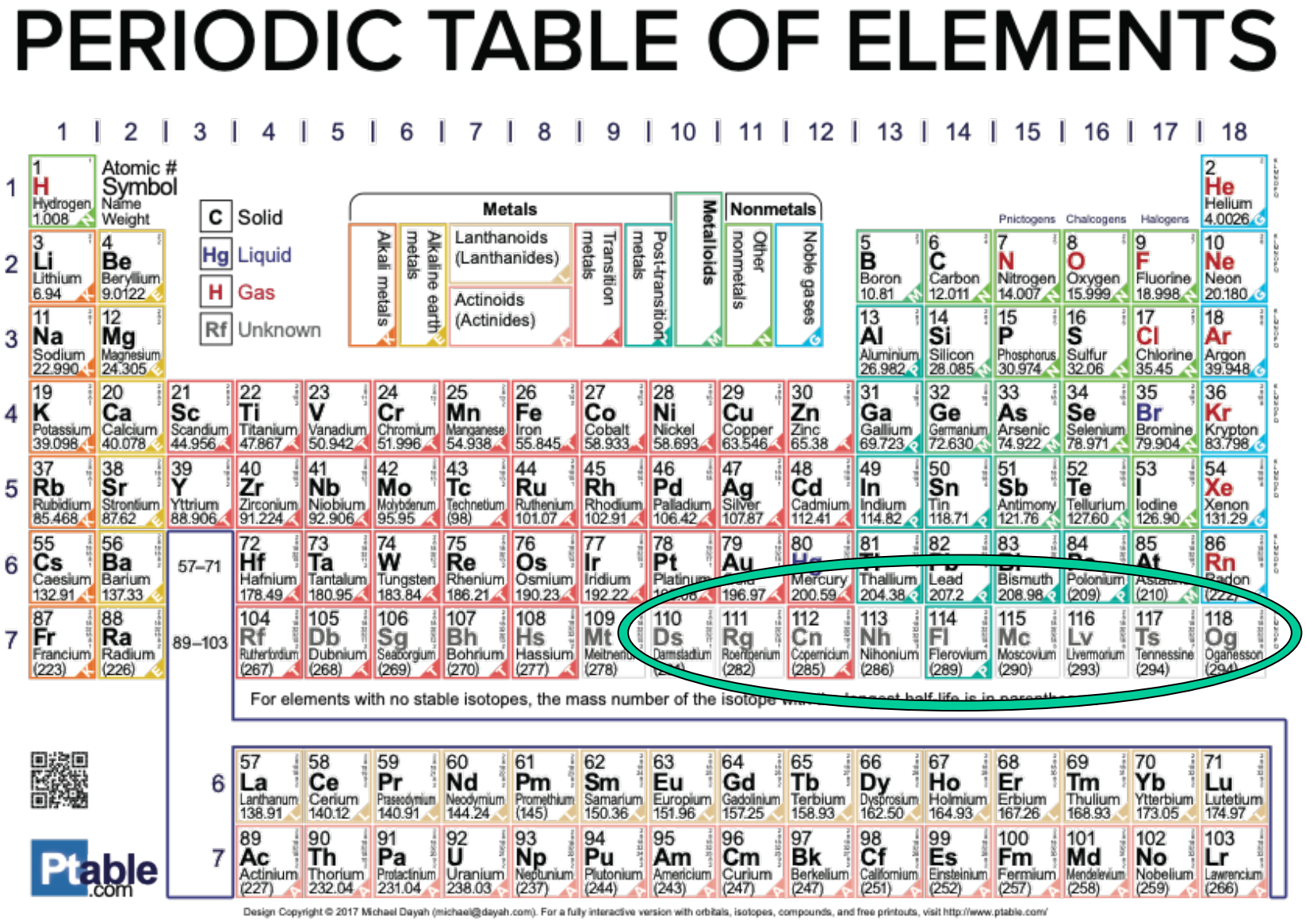
** Le nom n'a pas encore été attribué.

Dans le formulaire pour l'examen

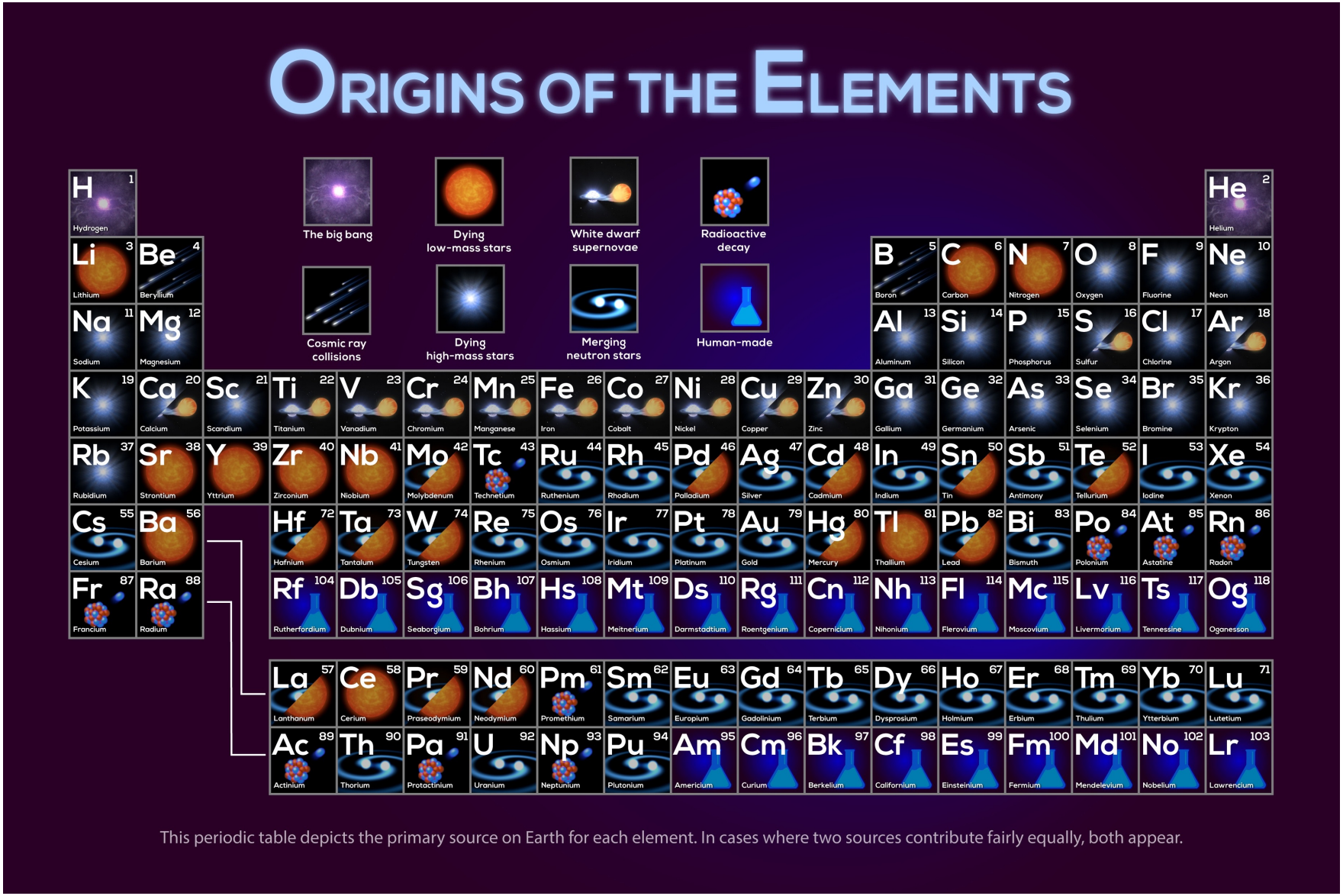


No 2.1

Et encore plus récent…2017



Et l'origine cosmique?



Source: NASA

Métaux et non-métaux

Les MÉTAUX: conduisent l'électricité, sont malléables

groupe des métaux alcalins (Ia)

groupe des métaux alcalino-terreux (IIa)

groupe des métaux de transition d

Sodium

Cuivre

Scandium

Magnésium

Les NON-MÉTAUX:

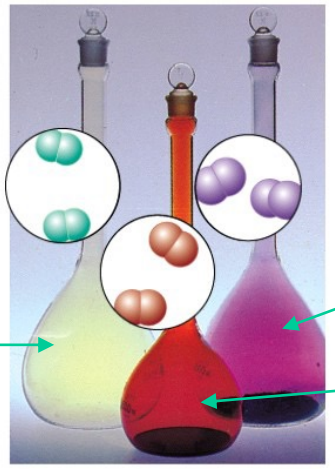
groupe du carbone

groupe de l'azote

groupe de l'oxygène

groupe des halogènes :

Fluor
gaz jaune-vert



Iode
solide bleu-noir

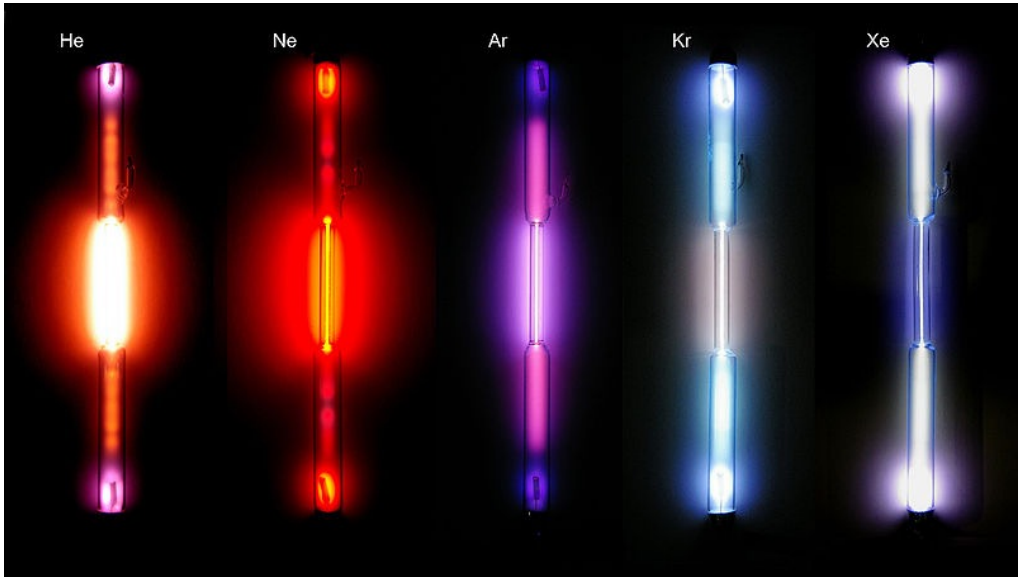
Brome
liquide rouge-brun

Gas nobles, semi-métaux

Les GAZ NOBLES (gaz rares):

configuration électronique $ns^2\ np^6$ (couche complète contenant 8 électrons)

Hélium (He), Néon (Ne), Argon (Ar), Krypton (Kr), Xénon (Xe), Radon (Ra)



Les SEMI-MÉTAUX (metalloïdes) sont les éléments de chaque côté de la ligne noire en escalier (voir p.19).

Ils possèdent certaines propriétés des métaux et des non-métaux.

Les éléments suivants sont considérés comme metalloïdes: B, Si, Ge, As, Sb, Bi, Te, At.

Résumé

- Les atomes sont constitués de protons, neutrons et électrons. Le noyau se compose de protons et de neutrons et il constitue la quasi-totalité de la masse de l'atome.

- Selon la mécanique quantique (que vous verrez en détail dans des cours de physique plus tard), l'état d'un électron dans un atome est défini par un set de 4 nombres quantiques (n,l,m_l, m_s).

- Le tableau périodique des éléments peut s'expliquer via les niveaux d'énergie des orbitales atomiques. Dans le cas des groupes principaux, le numéro de chaque groupe correspond au nombre d'électrons de valence des éléments qu'il contient (électrons situés au niveau d'énergie le plus élevé).

- Certaines propriétés atomiques reviennent périodiquement lorsqu'on examine les éléments par ordre croissant de numéro atomique

A retenir du cours d'aujourd'hui

- *Savoir calculer les niveaux d'énergies*
- *Savoir retrouver les remplissages des orbitales électroniques à partir du nombre Z d'un élément ou de sa place dans le tableau périodique. Savoir ce que sont les nombres quantiques et apprendre à les manipuler.*
- *Savoir lire le tableau périodique et y retrouver les éléments.*

Pour la prochaine fois

- *Si ces concepts ne constituent pas un rappel des cours de chimie pour vous, lisez le chapitre 1 et 4 du livre de Hill, Chimie générale.*