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).

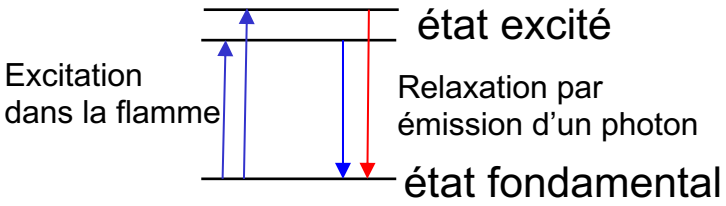
Dans le vide:

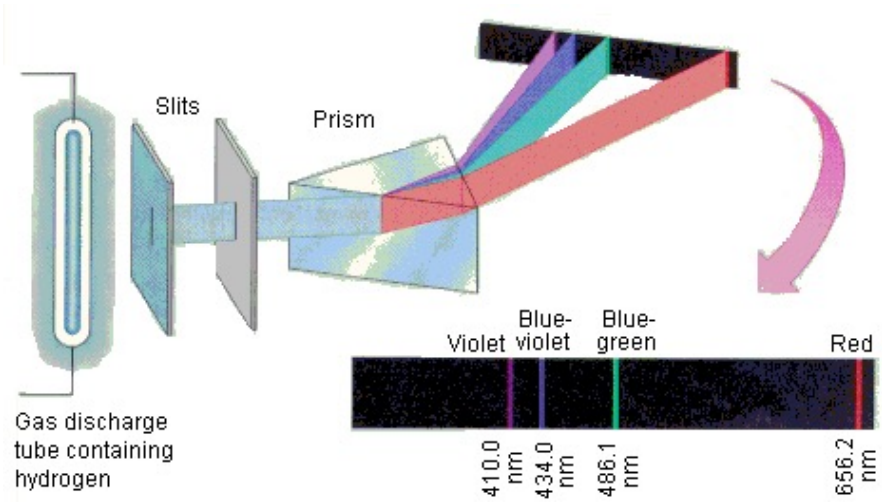
$$\lambda\, \nu = c = 3\, x\, 10^8\ {}^{m}/_{s}$$

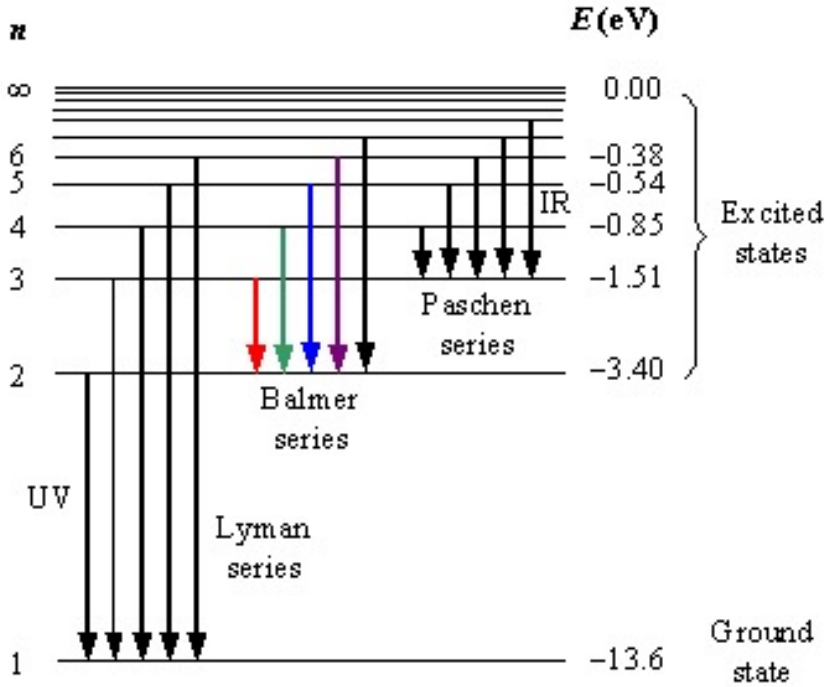
vitesse *c*, longueur d'onde λ,
fréquence: $\nu = 7.5 - 3.75 \times 10^{14}\ s^{-1}$
E = 1.25 – 2.5 eV

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.

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

Mécanique quantique: la fonction d'onde

Schrödinger (1926):

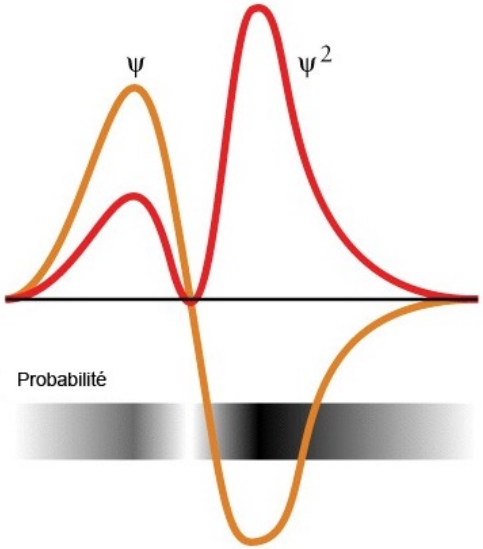
énergie cinétique + énergie potentielle = énergie totale

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

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

(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.

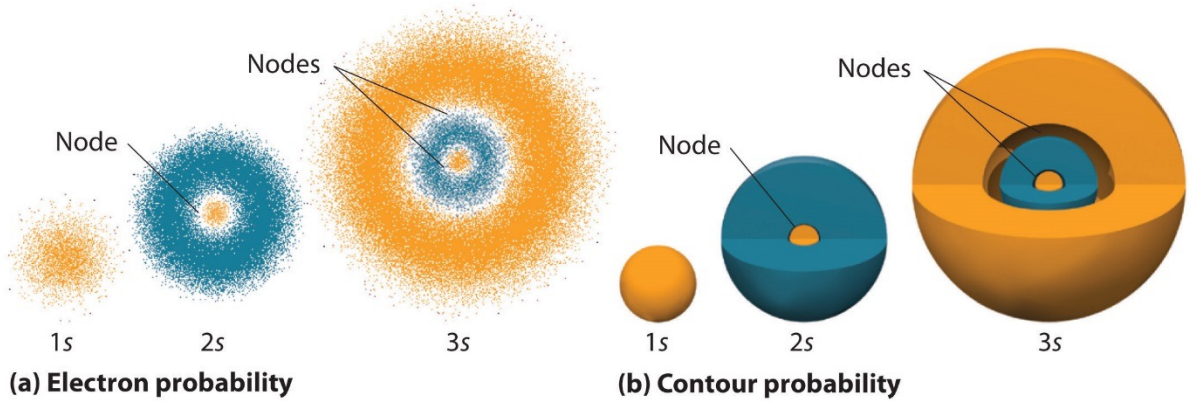
$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2}\hbar \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Δx: incertitude sur la position

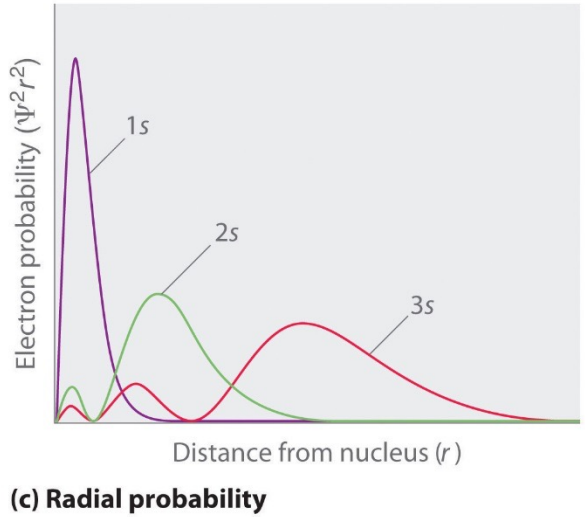
Δp = mΔv : incertitude sur la quantité de mouvement donc sur la vitesse

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

Les nombres quantiques et orbitales

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

ℓ : nombre quantique angulaire (secondaire):

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

ℓ détermine la forme de l'orbitale

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

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

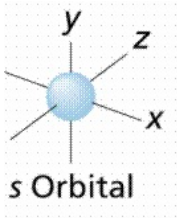
s : sharp
p : principal
d : diffuse
f : fundamental

Les nombres quantiques et orbitales

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

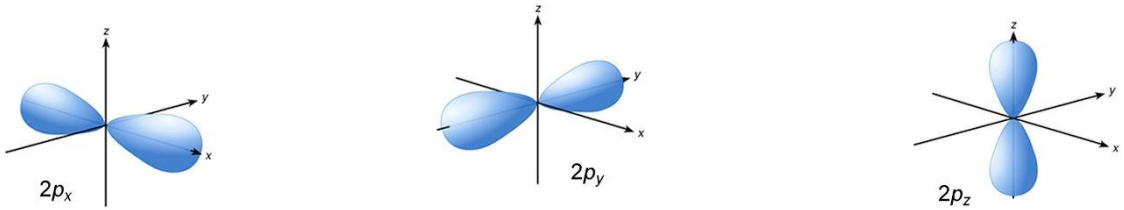
m_ℓ représente l'orientation de l'orbitale (2 x ℓ +1 orientations possibles pour un nombre quantique ℓ donné)

ℓ = 0 $m_\ell = 0$



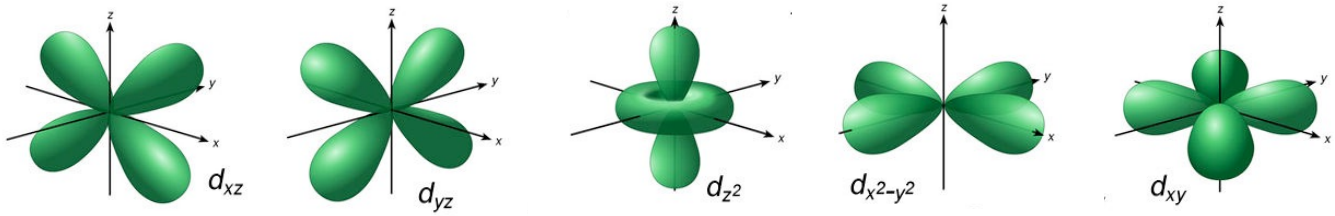
ℓ = 1

m_ℓ =-1, 0, 1



ℓ = 2

m_ℓ =-2, -1, 0, 1, 2



Les nombres quantiques et orbitales

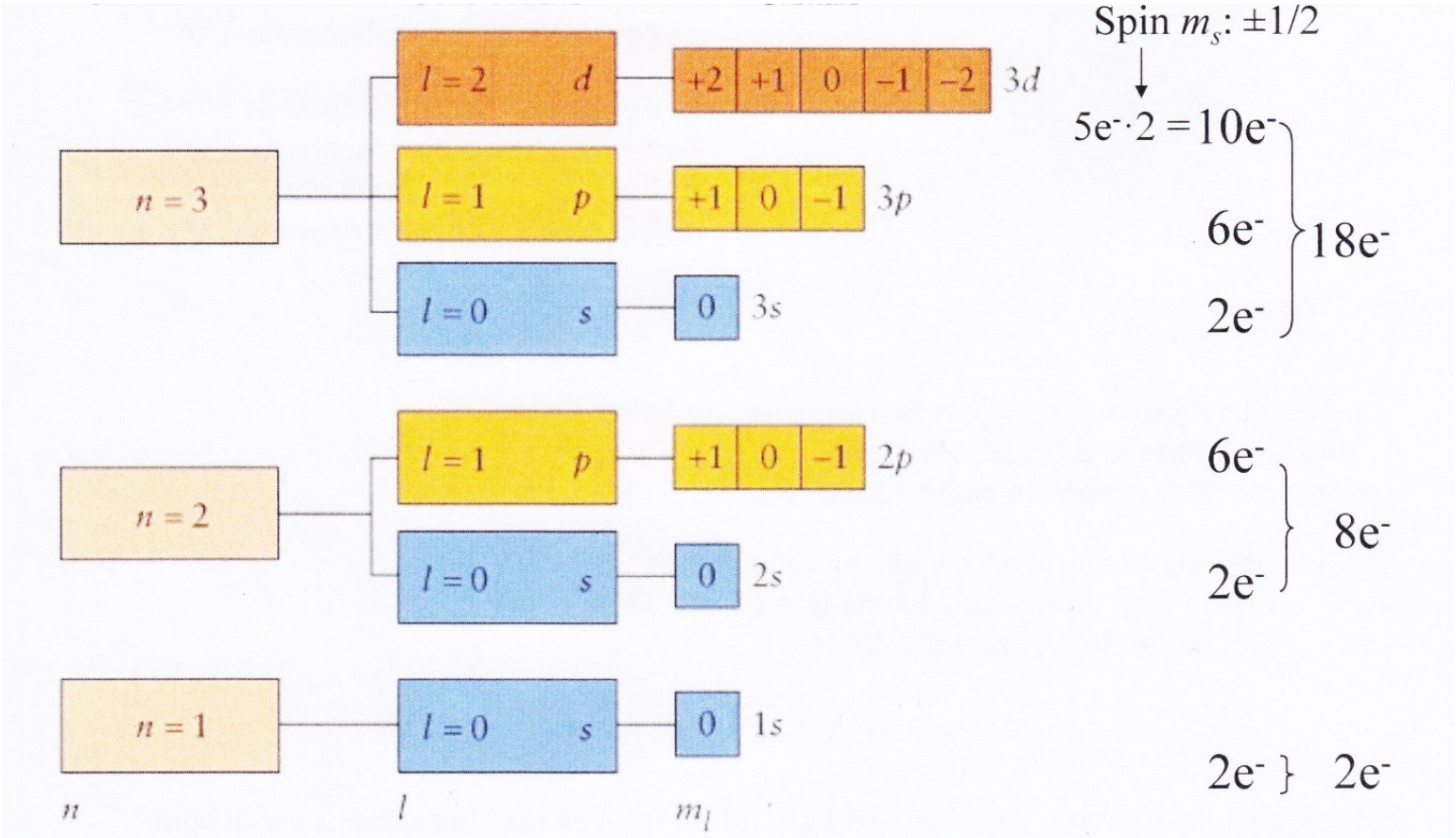
Pour définir un électron dans une orbitale, on a besoin d'un 4eme nombre quantique:

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

Remplissage des orbitales

couche sous-couche orbitale

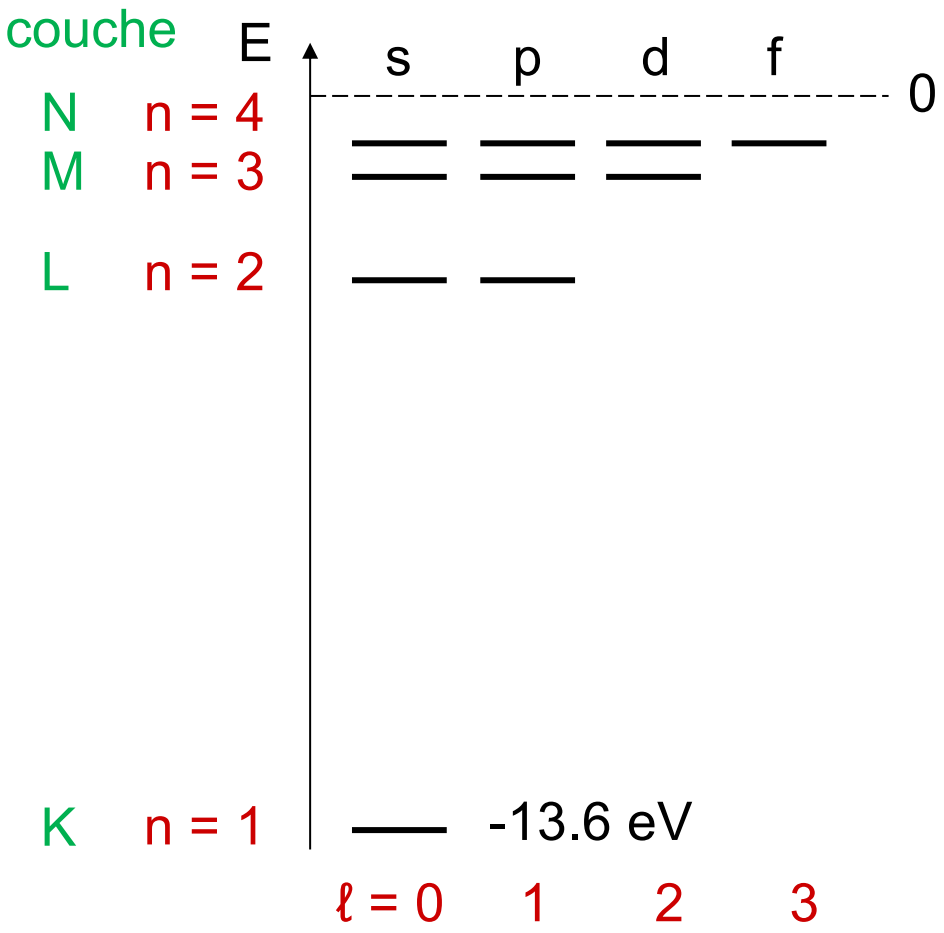
Nombres d'électrons: $2n^2$



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.

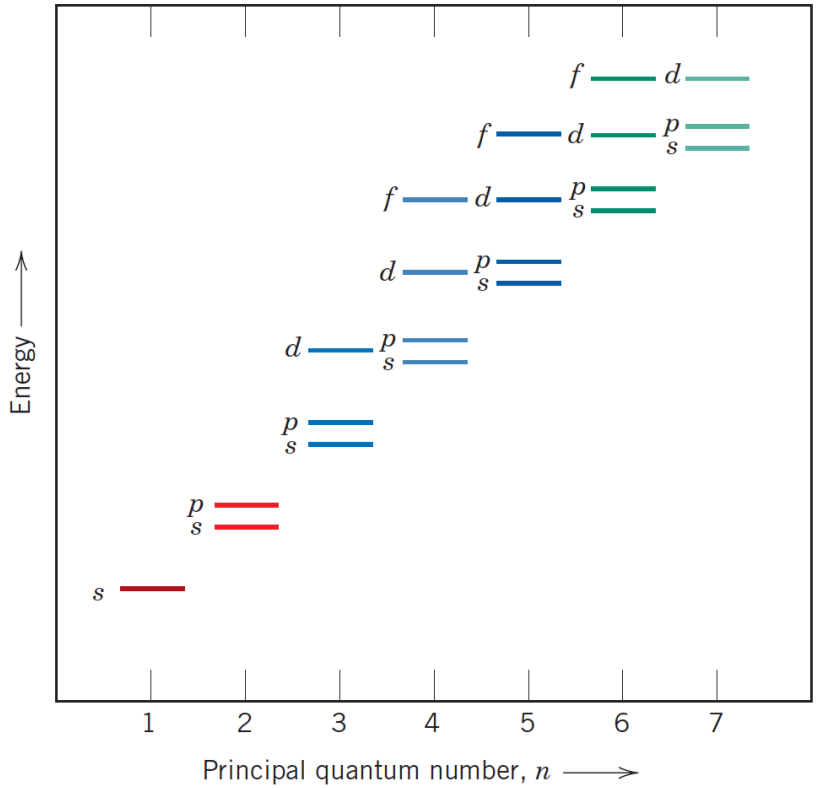


Nombre d'états au niveau n:

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

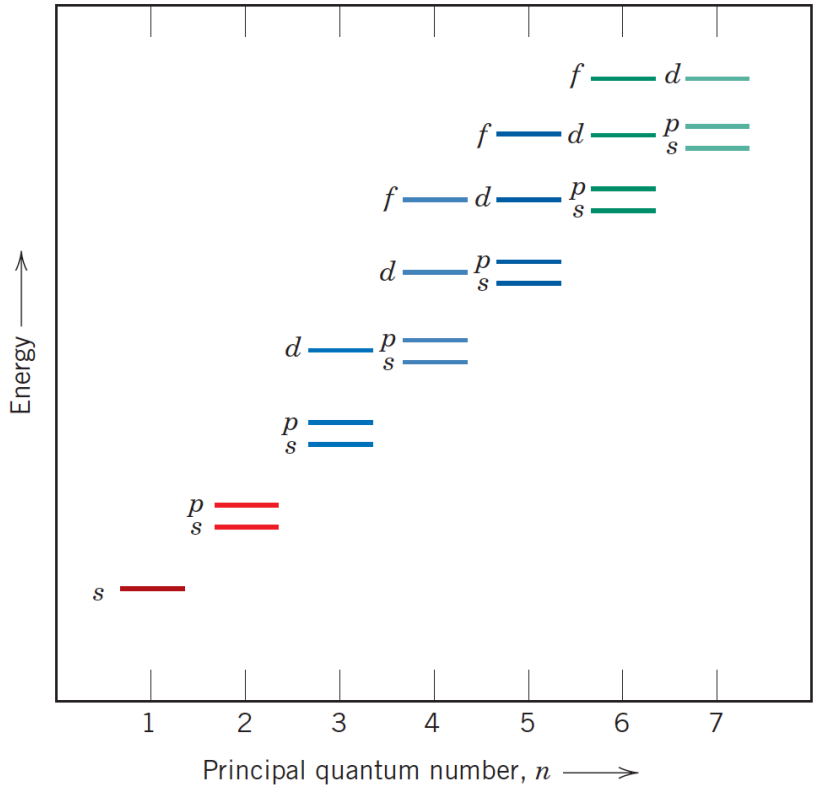
Structure des atomes à plusieurs électrons

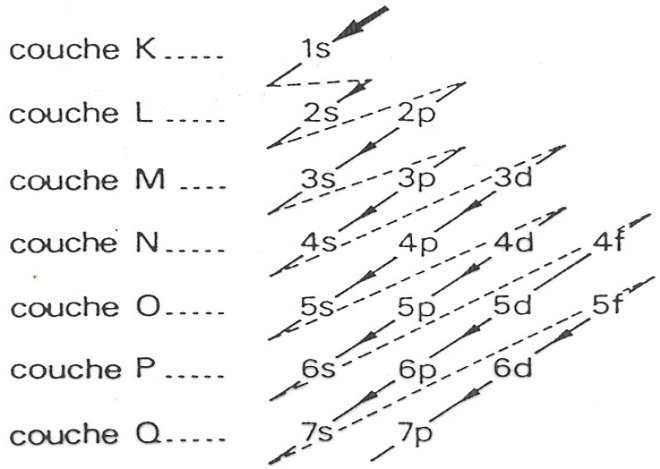
En considérant maintenant les atomes avec un nombre atomique Z > 1, les niveaux énergétiques des différentes orbitales ne sont plus dégénérés et leur ordre est également perturbé.



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





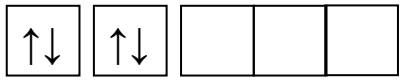
Principe de construction: 2 principes

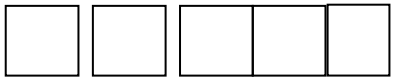
Principe d'exclusion de Pauli

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)

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





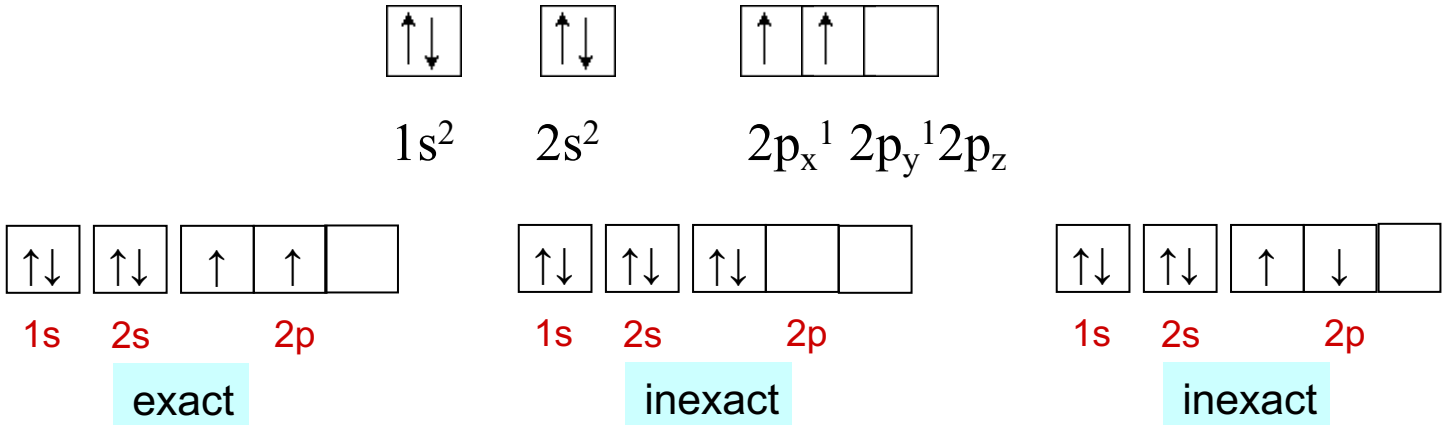
↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

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)



↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

Principe de construction: électrons de valence

H: $1s^1$

He: $1s^2$

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

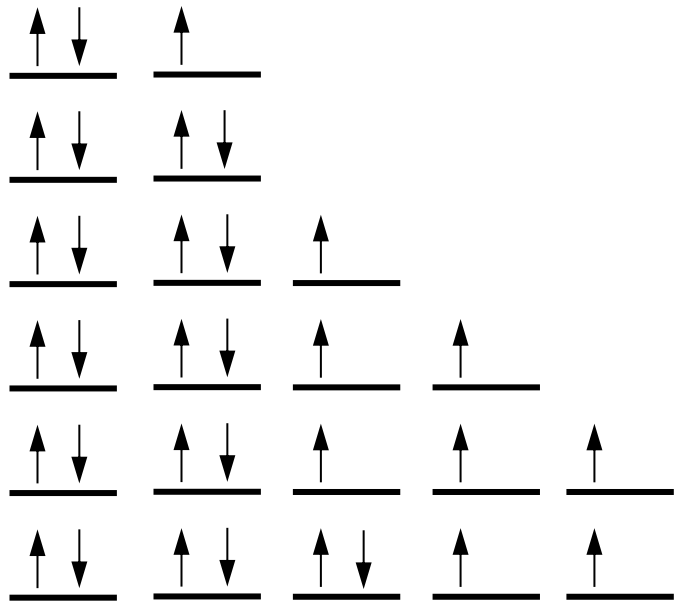
Be: $1s^2\,2s^2$

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

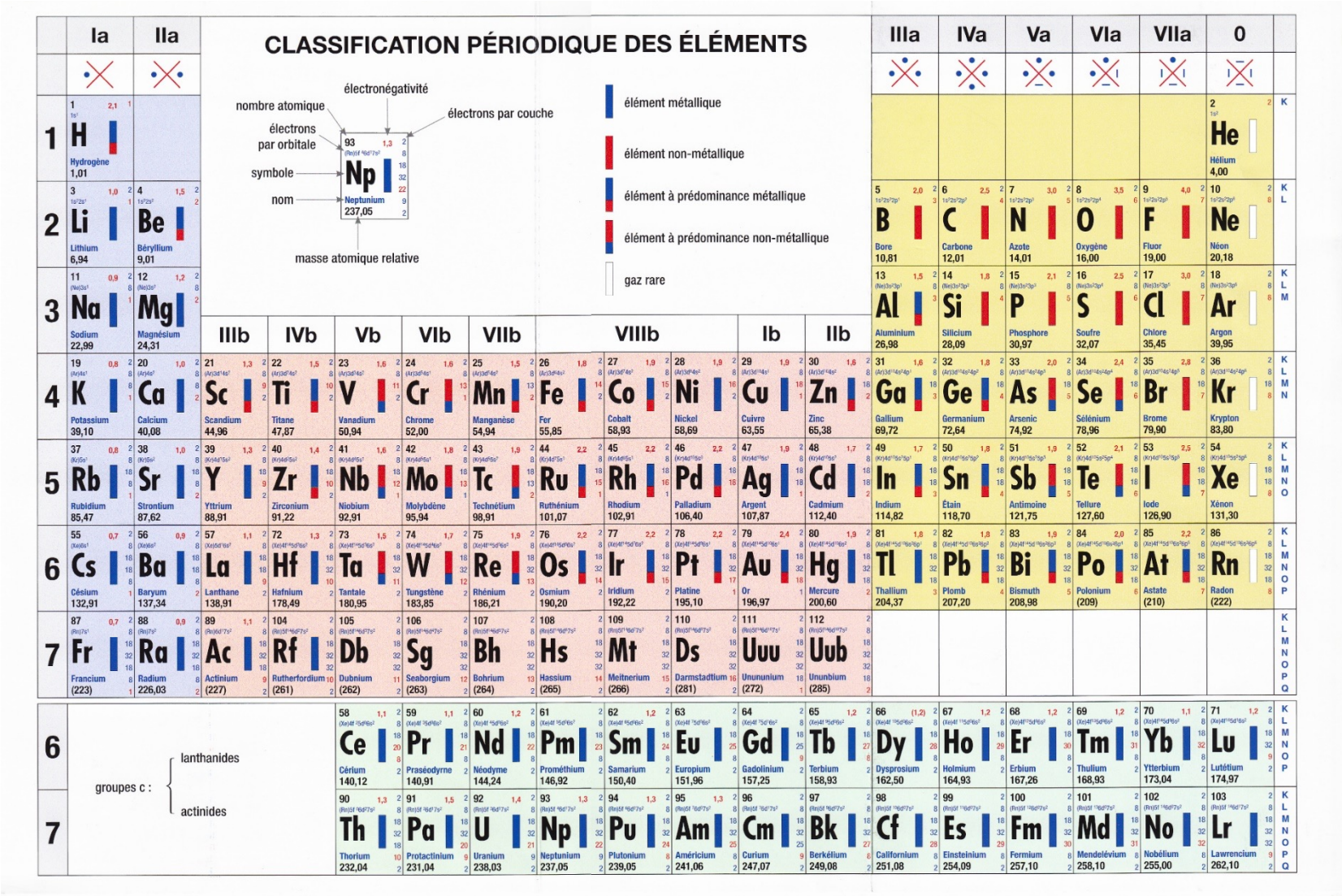
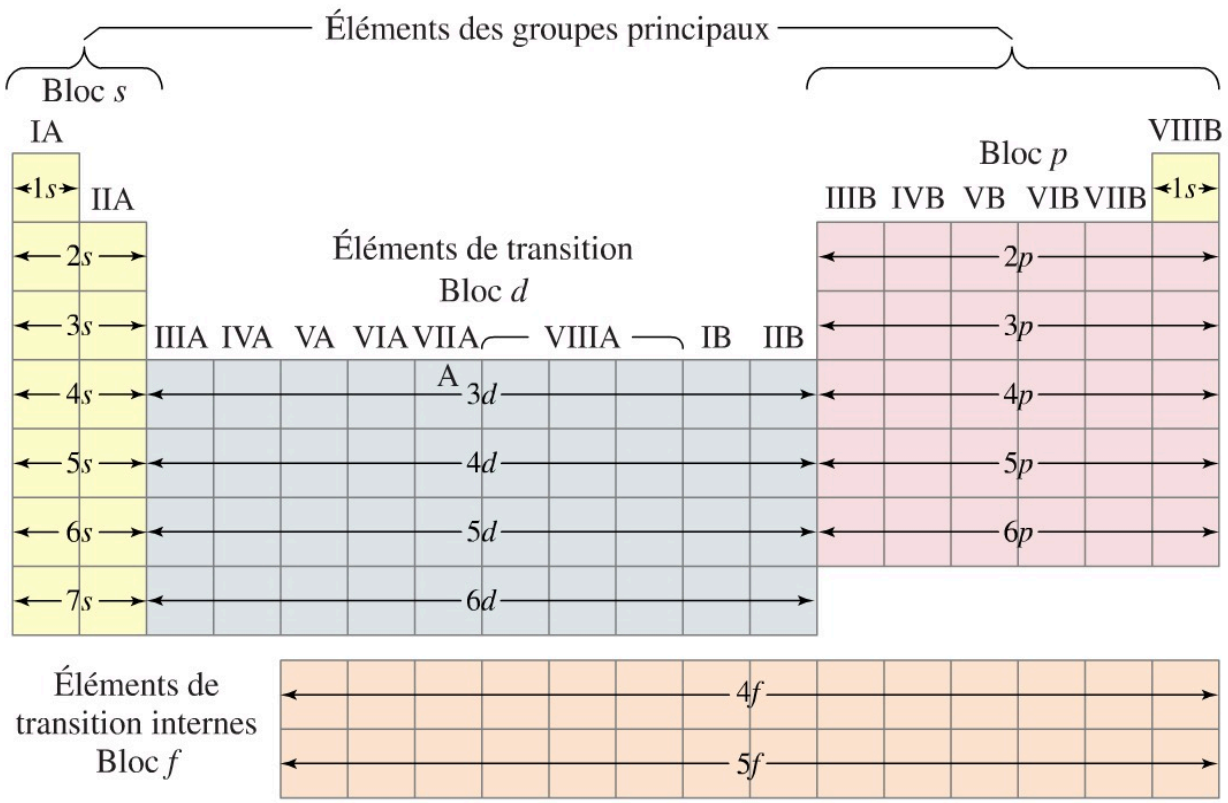


Tableau périodique des éléments



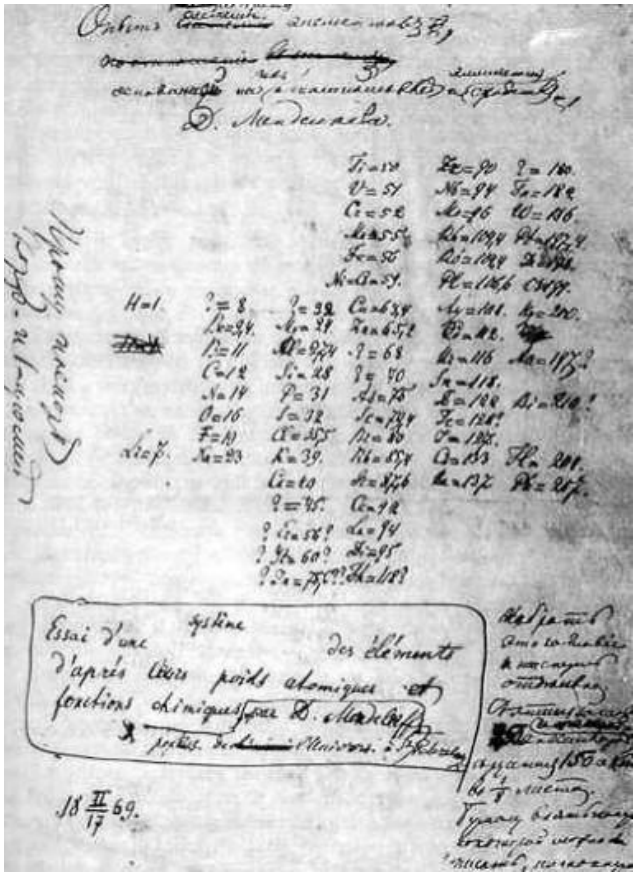
Le tableau périodique est construit selon le principe de l'Aufbau, ajout d'un électron (et d'un proton) à l'atome dont le numéro atomique est immédiatement inférieur.

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: $^{235}_{92}U$; $^{238}_{92}U$

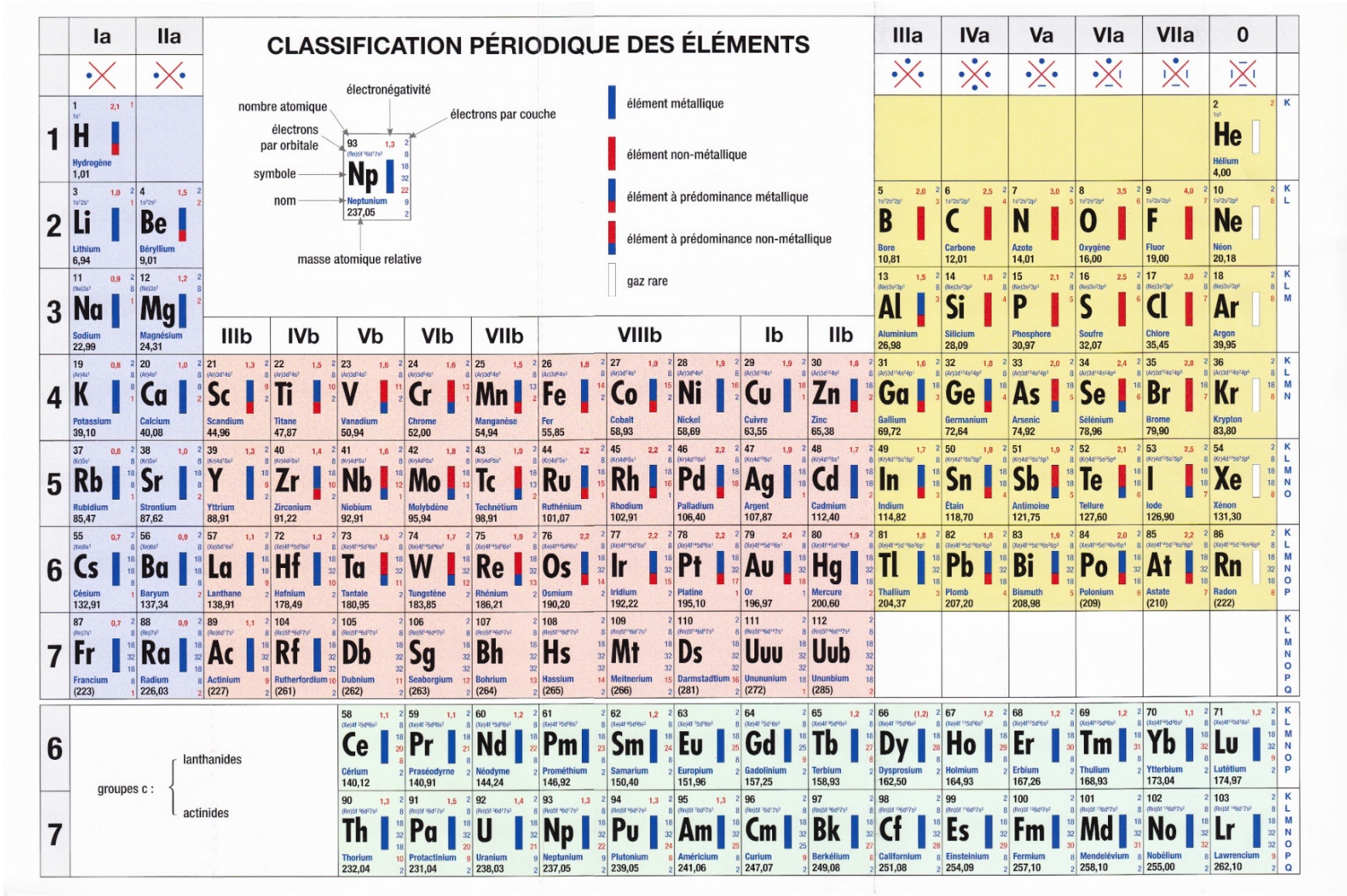
Quelques points sur le tableau périodique

- 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

Métaux | Semi-métaux | Non-métaux | Gaz nobles

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

Tableau périodique des éléments

Numéro atomique — Symbole [a]
Nom — Masse atomique (u)
Etats d'oxydation [b] — Masse molaire (g/mol)
Electronégativité — Point de fusion (en °C)
Masse volumique [c] — Point d'ébullition (en °C)

[a] La couleur représente l'état à 25°C
Noir: solide - Bleu: liquide - Rouge: gaz
En évidé: les éléments artificiels

[b] Les plus courants sont en gras

[c] en g/cm³ pour les solides et les liquides (à 20°C)
en g/l pour les gaz (à 0°C et 1 atm).
Ces derniers sont marqués d'une *

I A	II A	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII B			I B	II B	III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII A
1 H Hydrogène 1.008 1 2.2 0.0899* -259 -253																	2 He Hélium 4.003 0 - 0.1785* -272 -269
3 Li Lithium 6.941 1 0.98 0.534 181 1342	4 Be Béryllium 9.012 2 1.57 1.85 1287 2471											5 B Bore 10.81 3 2.04 2.34 2075 4000	6 C Carbone 12.01 2,4,-4 2.55 2.25 3825 sublim	7 N Azote 14.01 2,3,4,5,-3 2.04 1.251* -210 -196	8 O Oxygène 16.00 -2 3.44 1.429* -219 -183	9 F Fluor 19.00 -1 3.98 1.696* -220 -188	10 Ne Néon 20.18 0 - 0.9002* -249 -246
11 Na Sodium 22.99 1 0.93 0.971 98 883	12 Mg Magnésium 24.31 2 1.31 1.74 650 1090											13 Al Aluminium 26.98 3 1.61 2.702 660 2519	14 Si Silicium 28.09 4 1.9 2.33 1414 3265	15 P Phosphore 30.97 3,4,5,-3 2.19 1.82 44 281	16 S Soufre 32.06 2,4,6,-2 2.58 2.07 115 445	17 Cl Chlore 35.45 1,3,5,7,-1 3.16 3.214* -102 -34	18 Ar Argon 39.95 0 - 1.784* -189 -186
19 K Potassium 39.10 1 0.82 0.862 64 759	20 Ca Calcium 40.08 2 1.00 1.55 842 1484	21 Sc Scandium 44.96 3 1.36 2.99 1541 2836	22 Ti Titane 47.90 3,4 1.54 4.54 1668 3287	23 V Vanadium 50.94 2,3,4,5 1.63 5.96 1910 3407	24 Cr Chrome 52.00 2,3,6 1.66 7.19 1907 2671	25 Mn Manganèse 54.94 2,3,4,6,7 1.55 7.43 1246 2061	26 Fe Fer 55.85 2,3 1.83 7.86 1538 2871	27 Co Cobalt 58.93 2,3 1.88 8.90 1495 2927	28 Ni Nickel 58.71 2,3 1.91 8.90 1455 2913	29 Cu Cuivre 63.55 1,2 1.9 8.92 1085 2562	30 Zn Zinc 65.39 2 1.65 7.14 420 907	31 Ga Gallium 69.72 3 1.81 5.90 30 2204	32 Ge Germanium 72.59 2,4 2.01 5.32 938 2833	33 As Arsenic 74.92 3,5,-3 2.18 5.73 614 sublim	34 Se Sélénium 78.96 4,6,-2 2.55 4.81 221 685	35 Br Brome 79.90 1,5,-1 2.96 3.12 -7.2 58	36 Kr Krypton 83.80 0 - 3.73* -157 -153
37 Rb Rubidium 85.47 1 0.82 1.53 39 688	38 Sr Strontium 87.62 2 0.95 2.54 777 1382	39 Y Yttrium 88.91 3 1.22 4.47 1522 3345	40 Zr Zirconium 91.22 4 1.33 6.49 1855 4409	41 Nb Niobium 92.91 3,5 1.6 8.57 2477 4744	42 Mo Molybdène 95.94 2,3,4,5,6 2.16 10.2 2623 4639	43 Tc Technétium 98.91 7 2.1 11.5 2157 4265	44 Ru Ruthénium 101.1 2,3,4,6,8 2.2 12.3 2334 4150	45 Rh Rhodium 102.9 2,3,4 2.28 12.4 1964 3695	46 Pd Palladium 106.4 2,4 2.2 12.0 1555 2963	47 Ag Argent 107.9 1 1.93 10.5 962 2162	48 Cd Cadmium 112.4 2 1.69 8.65 321 767	49 In Indium 114.8 3 1.78 7.30 1567 2072	50 Sn Etain 118.7 2,4 1.96 7.28 232 2602	51 Sb Antimoine 121.8 3,5,-3 2.05 6.69 631 1587	52 Te Tellure 127.6 2,4,6,-2 2.1 6.23 450 988	53 I Iode 126.9 1,5,7,-1 2.66 4.93 114 184	54 Xe Xénon 131.3 0 - 5.89* -112 -108
55 Cs Césium 132.9 1 0.79 1.87 28 671	56 Ba Baryum 137.3 2 0.89 3.51 727 1897	57 La Lanthane 138.9 3 1.10 6.15 920 3464	72 Hf Hafnium 178.5 4 1.3 13.3 2233 4603	73 Ta Tantale 180.9 5 1.5 16.6 3017 5458	74 W Tungstène 183.9 2,3,4,5,6 1.7 19.3 3422 5555	75 Re Rhénium 186.2 2,4,6,-2 1.9 20.8 3185 5598	76 Os Osmium 190.2 2,3,4,6,8 2.2 22.6 3033 5012	77 Ir Iridium 192.2 2,3,4,6 2.2 22.5 2446 4428	78 Pt Platine 195.1 2,4 2.28 21.45 1768 3825	79 Au Or 197.0 1,3 2.54 19.28 1064 2856	80 Hg Mercure 200.6 1,2 2.00 13.54 -39 3567	81 Tl Thallium 204.4 1,3 2.04 11.85 304 1473	82 Pb Plomb 207.2 2,4 2.33 11.34 327 -252.8	83 Bi Bismuth 209.0 3,5 2.02 9.75 271 1564	84 Po Polonium (209) 2,4 2.0 9.32 254 962	85 At Astate (210) 1,3,5,7,-1 2.2 - 302 337	86 Rn Radon (222) 0 - 9.73* -71 -62
87 Fr Francium (223) 1 0.7 - 27 677	88 Ra Radium 226.0 2 0.9 5.0 696 1737	89 Ac Actinium 227.0 3 1.1 10.1 1050 3198	104 Rf Rutherfordium (261) -	105 Db Dubnium (262) -	106 Sg Seaborgium (263) -	107 Bh Bohrium (262) -	108 Hs Hassium (265) -	109 Mt Meitnerium (266) -	110 Uun Ununnilium (269) -	111 Uuu Unununium (272) -	112 Uub Ununbium (277) -	113 Uut Ununtrium -	114 Uuq Ununquadium -	115 Uup Ununpentium -	116 Uuh Ununhexium -	117 Uus Ununseptium -	118 Uuo Ununoctium -

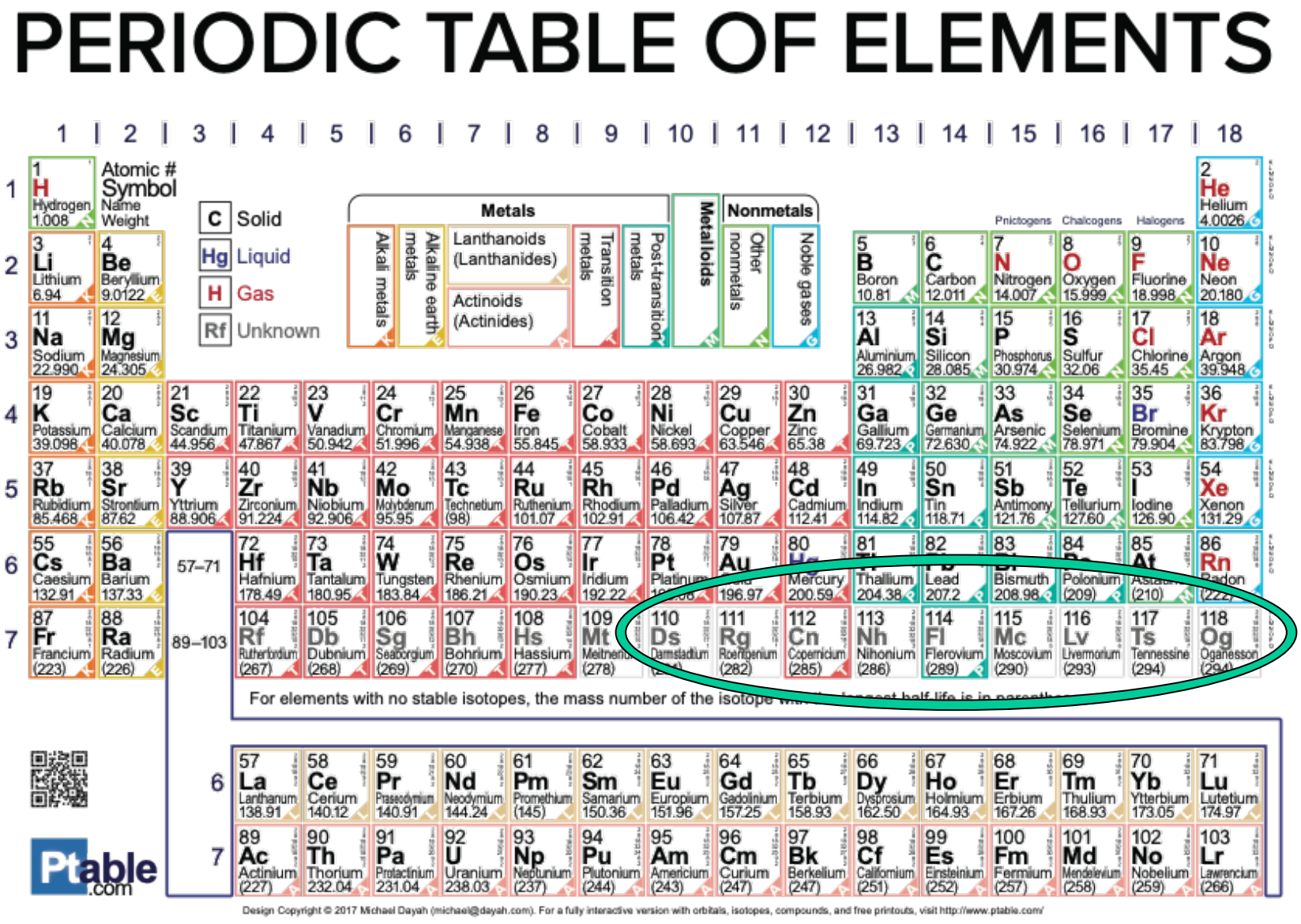
58 Ce Cérium 140.1 3,4 1.12 6.78 799 3443	59 Pr Praséodyme 140.9 3,4 1.13 6.77 931 3520	60 Nd Néodyme 144.2 3 1.14 7.00 1016 3074	61 Pm Prométhium (147) 3 1.13 7.26 1042 3520	62 Sm Samarium 150.4 2,3 1.17 7.52 1072 1794	63 Eu Europium 152.0 2,3 1.2 5.26 822 1596	64 Gd Gadolinium 157.3 3 1.2 7.89 1313 3273	65 Tb Terbium 158.9 3,4 1.2 8.23 1356 3230	66 Dy Dysprosium 162.5 3 1.22 8.54 1412 -252.8	67 Ho Holmium 164.9 3 1.23 8.80 1472 2700	68 Er Erbium 167.3 3 1.24 9.05 1529 2868	69 Tm Thulium 168.9 2,3 1.25 9.32 1545 1950	70 Yb Ytterbium 173.0 2,3 1.1 6.98 824 1196	71 Lu Lutétium 175.0 3 1.27 9.84 1663 3402
90 Th Thorium 232.0 4 1.3 11.7 1750 4788	91 Pa Protactinium 231.0 4,5 1.5 15.37 1572 4027	92 U Uranium 238.0 3,4,5,6 1.38 18.9 1135 4131	93 Np Neptunium 237.0 3,4,5,6 1.36 20.25 644 4000	94 Pu Plutonium 239.1 3,4,5,6 1.28 19.84 640 3228	95 Am Américium 243.1 3,4,5,6 1.3 13.6 1176 2011	96 Cm Curium (247) 3 1.3 13.5 1345 3110	97 Bk Berkélium (247) 3,4 1.3 13.25 996 -	98 Cf Californium (251) 3 1.3 15.1 900 -	99 Es Einsteinium (254) - 1.3 8.84 860 -	100 Fm Fermium (257) - 1.3 - 1527 -	101 Md Mendélévium (258) - 1.3 - 827 -	102 No Nobelium (259) - - - - -	103 Lr Lawrencium (260) - - - - -

Métaux
Métalloïdes
Non-métaux
Gaz rares

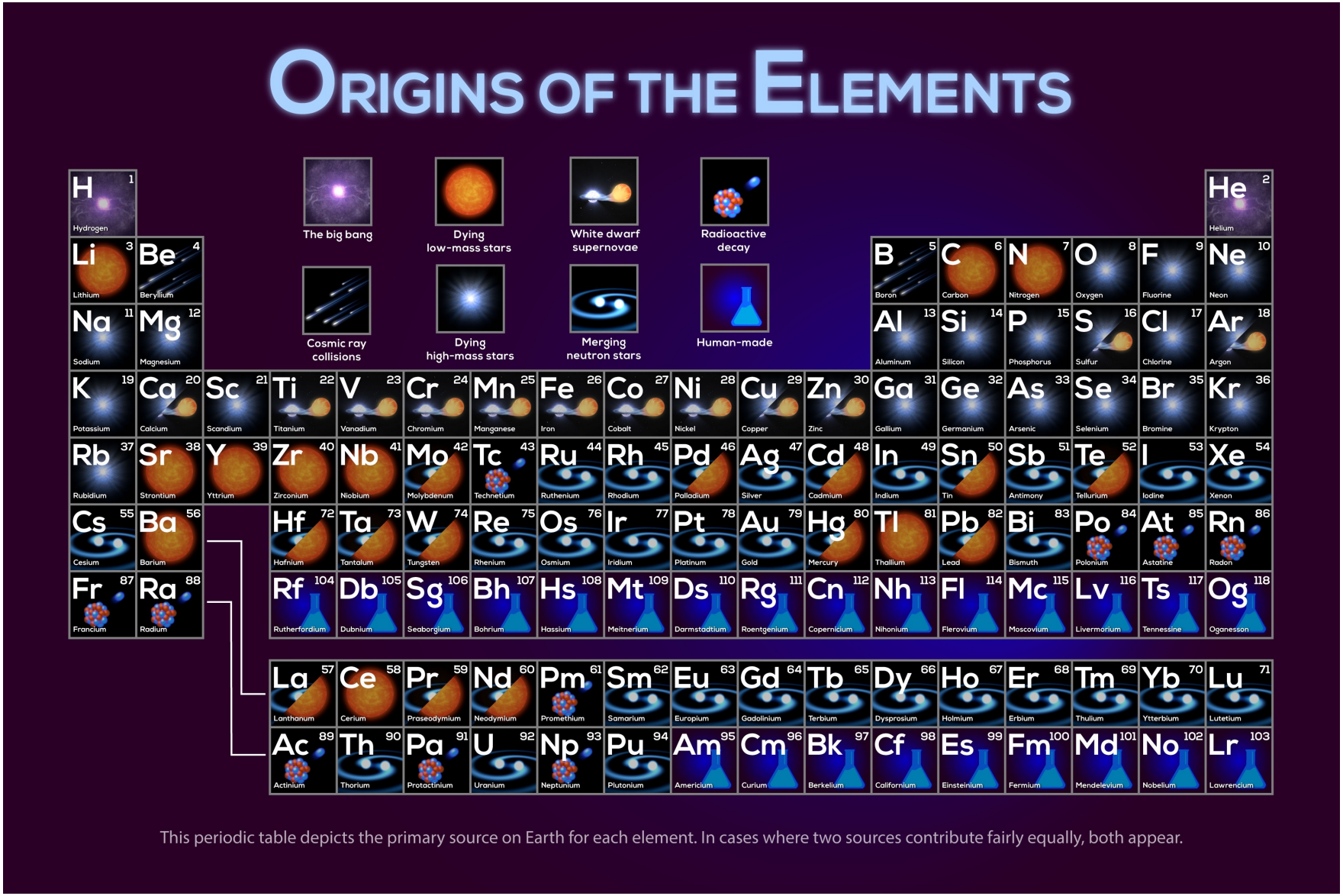
Les valeurs sont tirées de: David R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics. 90 éd, 2009

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

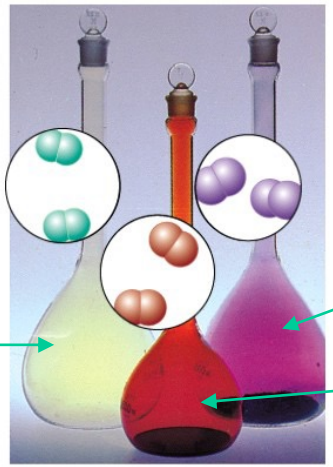
Les NON-MÉTAUX:

groupe du carbone

groupe de l'azote

groupe de l'oxygène

groupe des halogènes :



Fluor
gaz jaune-vert

Iode
solide bleu-noir

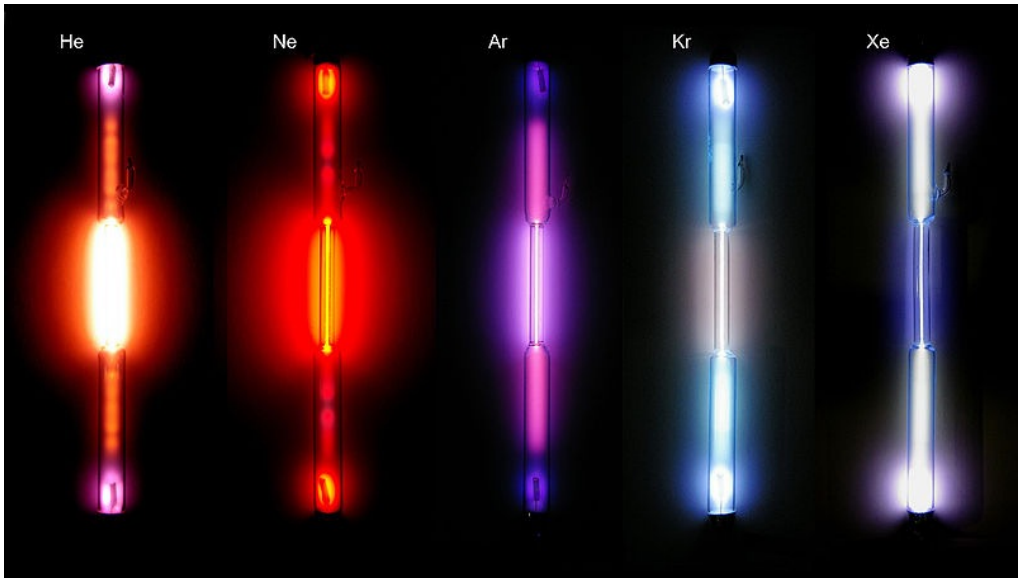
Brome
liquide rouge-brun

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.*