

Les atomes / Le tableau périodique

V. Michaud (MX)

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne



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).

$$E = h\nu$$

E : énergie du photon en Joules

ν : fréquence en Hz, (s^{-1})

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

Dans le vide:

$$\lambda \nu = c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

vitesse c , longueur d'onde λ ,

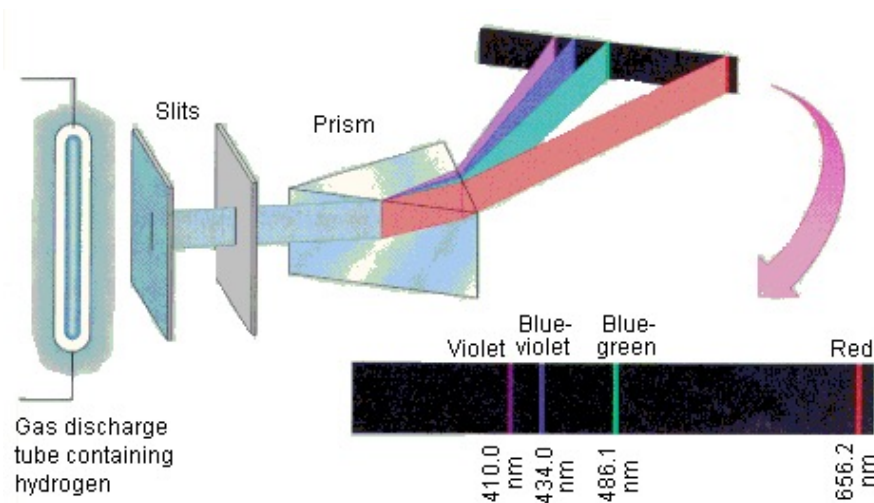
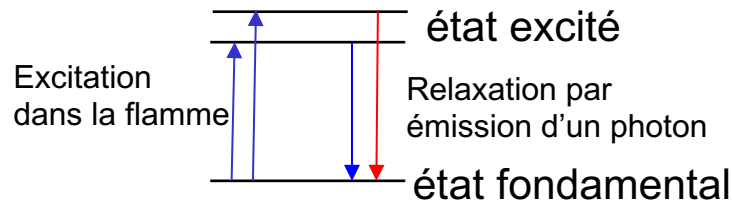
fréquence: $\nu = 7.5 - 3.75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$

$E = 1.25 - 2.5 \text{ eV}$

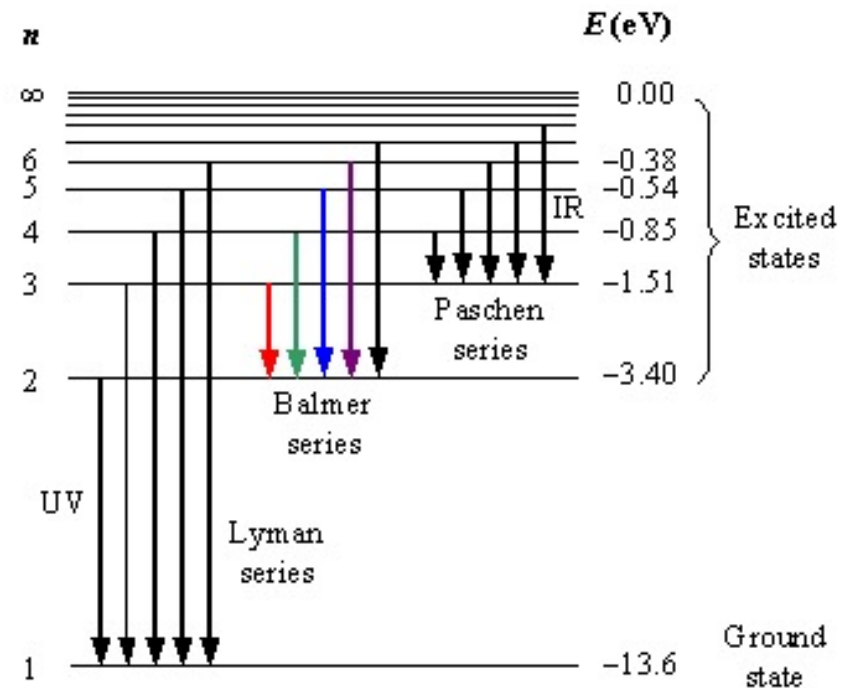


Réponse d'un atome d'hydrogène hors équilibre

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



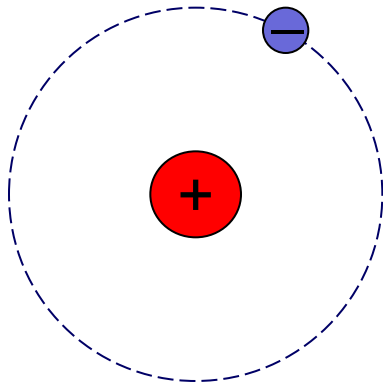
$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$



Spectre de l'hydrogène atomique

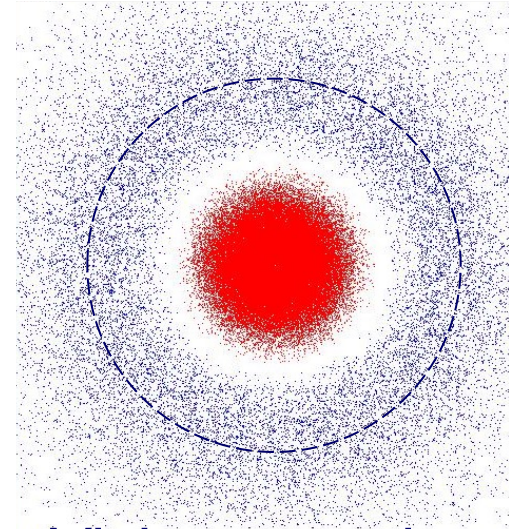
Modèle actuel de structure de l'atome

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



Hydrogène

Vision classique de Bohr



Vision quantique

L'électron est représenté par une fonction $\psi(\mathbf{r},t)$ telle que $||\psi||^2 dV$ représente la probabilité de le trouver dans un élément de volume dV

Mécanique quantique: la fonction d'onde

Schrödinger (1926):

$$\begin{array}{ccccc} \text{énergie} & & \text{énergie} & & \text{énergie} \\ \text{cinétique} & + & \text{potentielle} & = & \text{totale} \\ \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi & = & E\psi \\ \\ \underbrace{\hspace{10em}}_{H\psi} & = & E\psi \end{array}$$

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

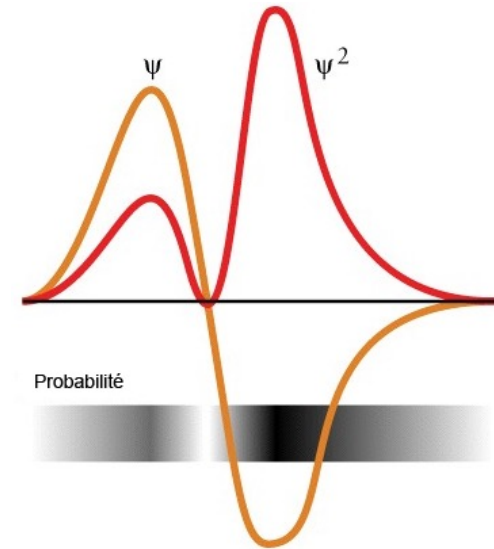
Interprétation de ψ :

$\Psi^2(x)$ 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.

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

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



Mécanique quantique: L'incertitude

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

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

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

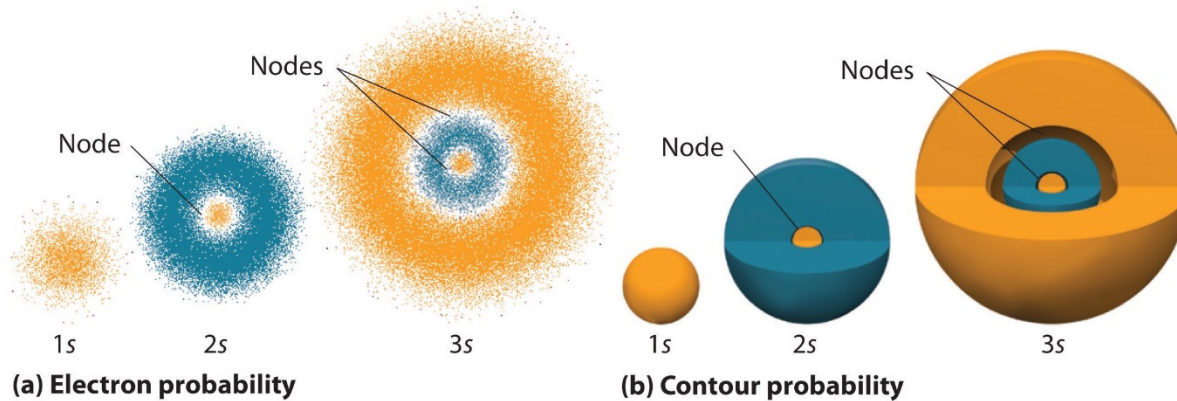
Δx : incertitude sur la position

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

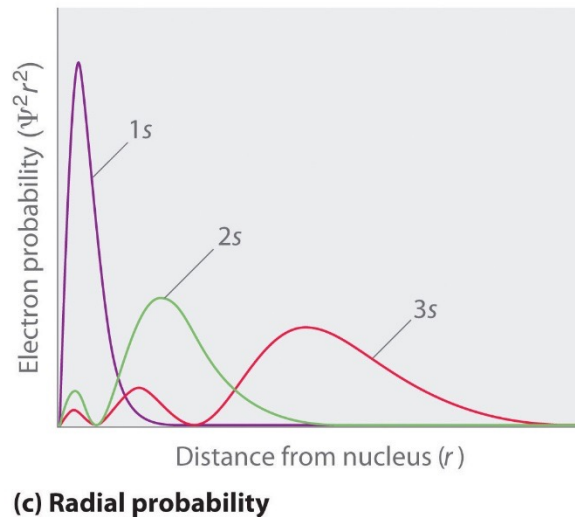


Solution de l'équation de Schrodinger: orbitales

Les diverses solutions de l'équation de Schrödinger sont des orbitales (ψ_{n,l,m_l}) 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

ℓ : nombre quantique angulaire (secondaire):

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

ℓ détermine la forme de l'orbitale

$$\ell = 0$$

$$\ell = 1$$

$$\ell = 2$$

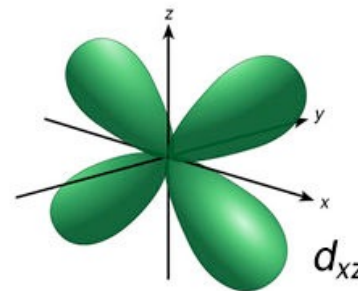
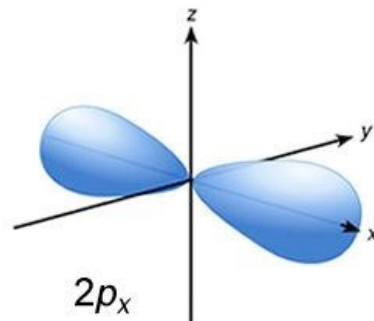
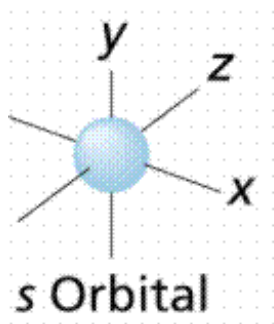
La notation s, p, d et f pour le nombre atomique l est héritée de l'observation des raies d'absorption:

s : sharp

p : principal

d : diffuse

f : fundamental

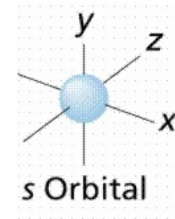


Les nombres quantiques et orbitales

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

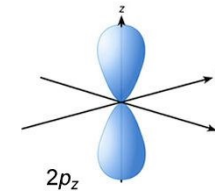
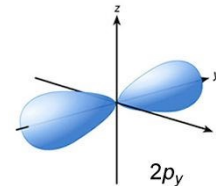
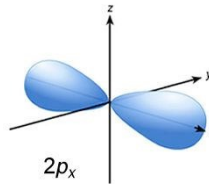
m_ℓ représente l'orientation de l'orbitale ($2 \times \ell + 1$ orientations possibles pour un nombre quantique ℓ donné)

$\ell = 0$ $m_\ell = 0$



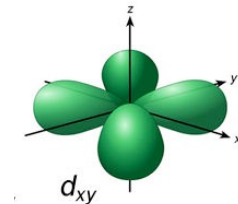
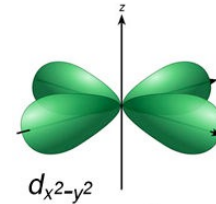
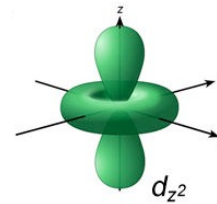
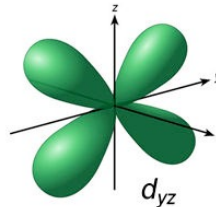
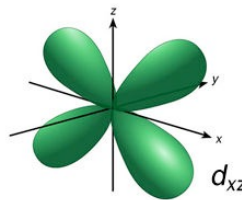
$\ell = 1$

$m_\ell = -1, 0, 1$



$\ell = 2$

$m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$

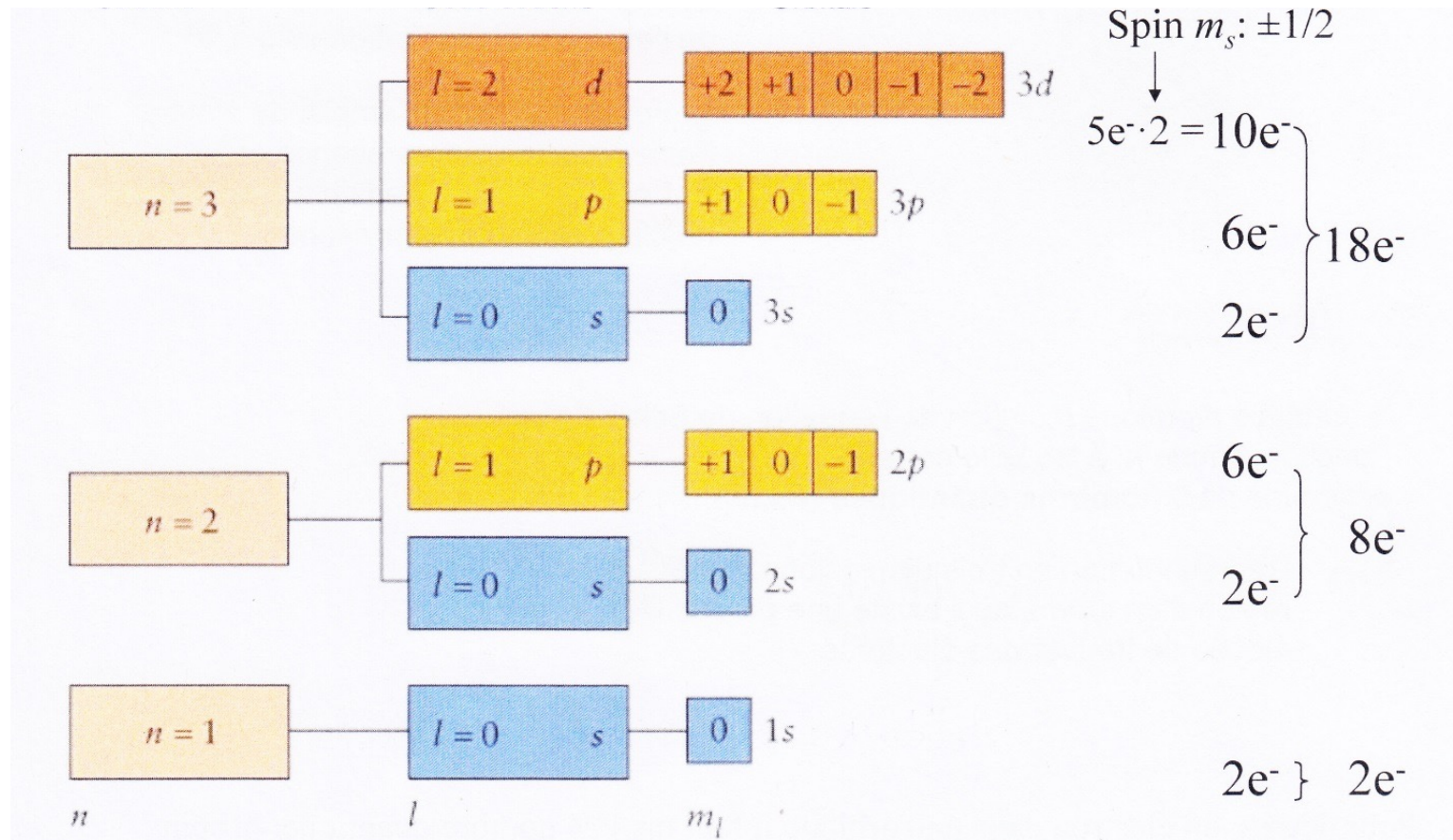


Pour définir un électron dans une orbitale, on a besoin d'un 4^{ème} nombre quantique:

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

Remplissage des orbitales

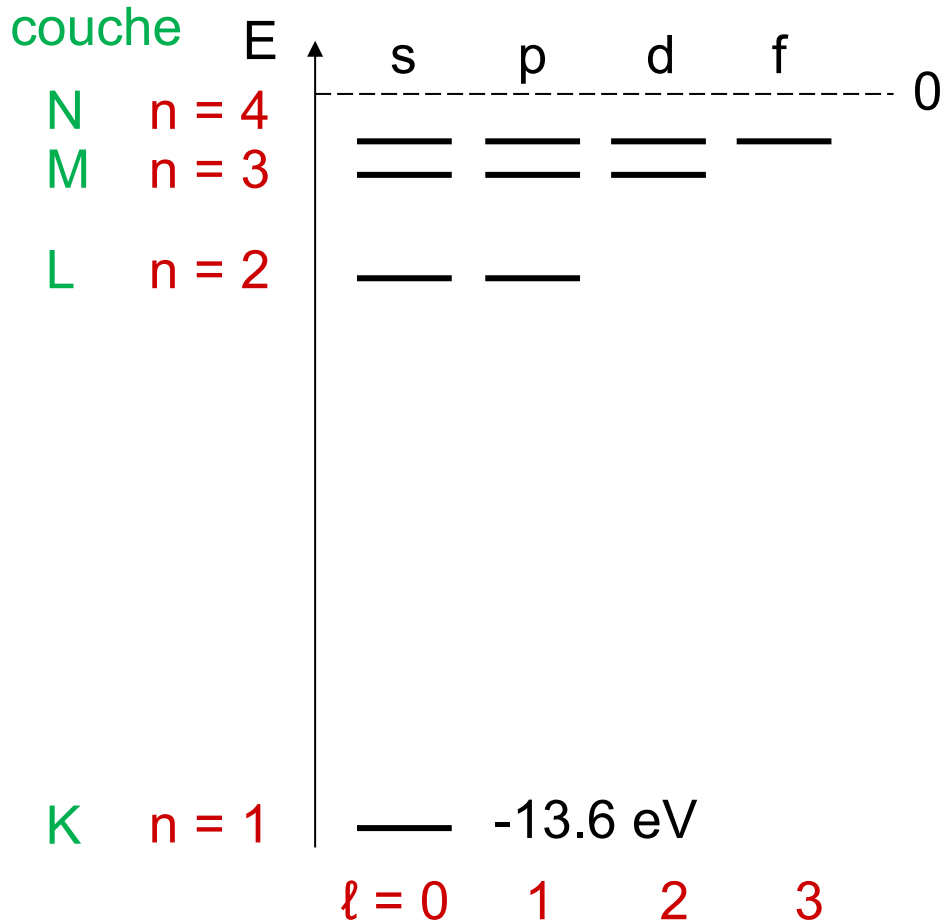
couche sous-couche orbitale Nombres d'électrons: $2n^2$



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**.

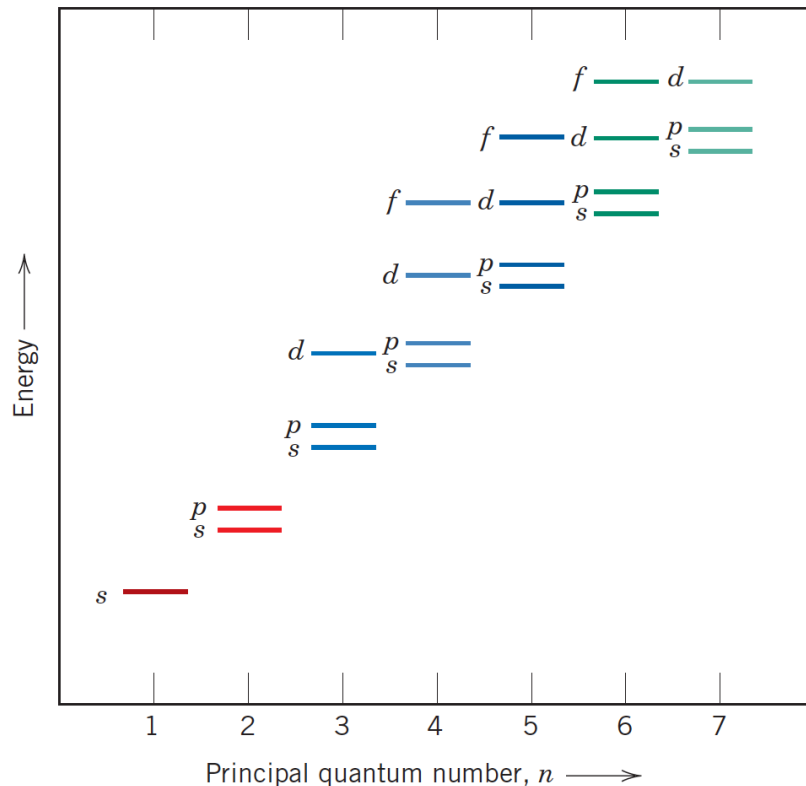


Nombre d'états
au niveau n :

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

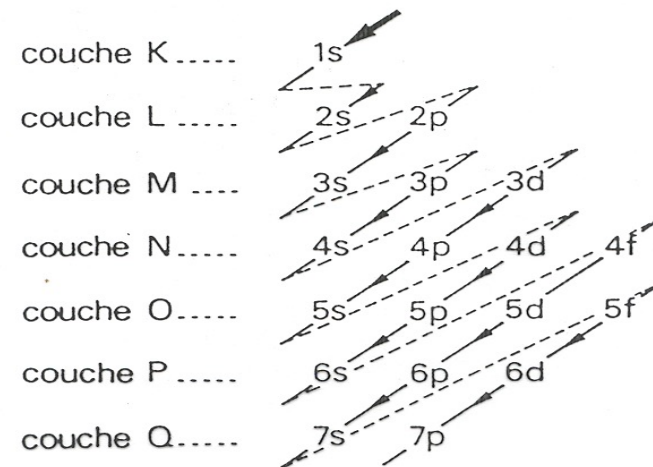
Structure des atomes à plusieurs électrons

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 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

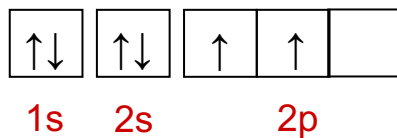
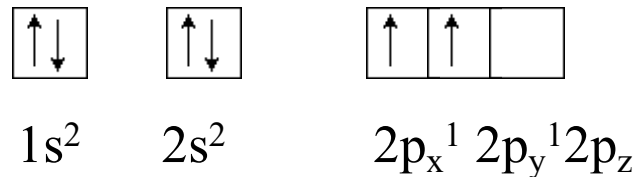
Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombre quantiques (un set (n, ℓ, m_ℓ, m_s) correspond à 1 seul e^-)

Une orbitale comprend **au plus deux électrons** et ces électrons sont nécessairement de spins opposés.

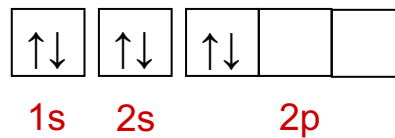
Règle de Hund

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)

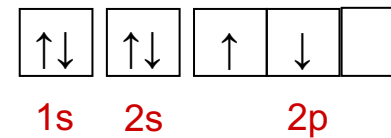
Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



exact



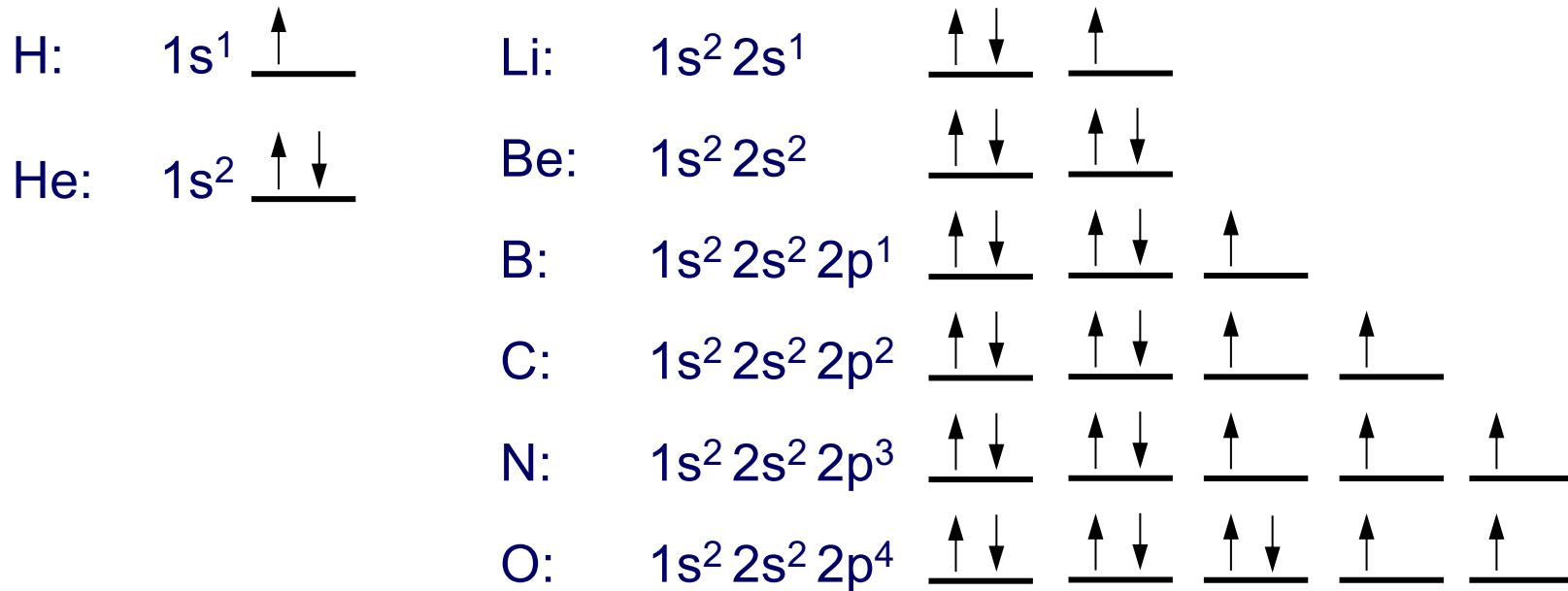
inexact



inexact

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

Principe de construction: électrons de valence



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

Ia		IIa		CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS																		IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
				électronégativité nombre atomique électrons par couche électrons par orbitale symbole nom masse atomique relative 93 (No) Np Neptunium 237,05 élément métallique élément non-métallique élément à prédominance métallique élément à prédominance non-métallique gaz rare																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
1	H Hydrogène 1,01																								2	He Hélium 4,00																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																												
2	Li Lithium 6,94	Be Béryllium 9,01																								10	Ne Neon 20,18																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
3	Na Sodium 22,99	Mg Magnésium 24,31																								18	Ar Argon 39,95																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
4	K Potassium 39,10	Ca Calcium 40,08	Sc Scandium 44,96	Ti Titane 47,87	V Vanadium 50,94	Cr Chrome 52,00	Mn Manganèse 54,94	Fe Fer 55,85	Co Cobalt 58,93	Ni Nickel 58,69	Cu Cuivre 63,55	Zn Zinc 65,38	Ga Gallium 69,72	Ge Germanium 72,64	As Arsenic 74,92	Se Sélénium 78,96	Br Brome 79,90	Kr Krypton 83,80																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				

Tableau périodique des éléments

Éléments des groupes principaux																
Bloc s						Bloc p										
IA											VIIIB					
←1s→ IIA											IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	←1s→
←2s→	Éléments de transition										2p					
Bloc d																
←3s→	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA	IB	IIB	3p							
←4s→					A	3d				4p						
←5s→						4d				5p						
←6s→						5d				6p						
←7s→						6d										
Éléments de transition internes																
Bloc f																
4f																
5f																

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

Handwritten manuscript of Mendeleev's periodic table. The table is organized by increasing atomic weight, with elements grouped into columns. The text is in Russian, and the elements are labeled with their chemical symbols and atomic weights. The table is titled "Система элементов" (System of elements) and "Д. Менделѣевъ" (D. Mendeleev). The table is organized into columns labeled I through VI. The elements are listed in order of increasing atomic weight, with gaps indicating predicted elements. The table is titled "Система элементов" (System of elements) and "Д. Менделѣевъ" (D. Mendeleev). The table is organized into columns labeled I through VI. The elements are listed in order of increasing atomic weight, with gaps indicating predicted elements.

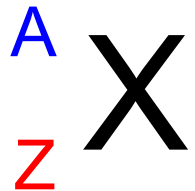
I	II	III	IV	V	VI
			Ti = 50	Zr = 90	? = 180
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4
			Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198
			Ni = Co = 59	Pd = 106,6	Os = 199
H = 1	? = 8	? = 22	Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200
	Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27,4	? = 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

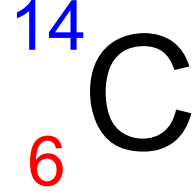
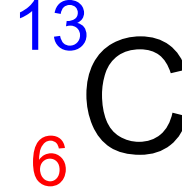
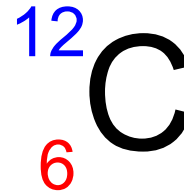
numéro atomique Z = nombre de **protons** du noyau
= nombre d'**électrons** (pour un atome neutre)

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 nombre de masse
 Z numéro atomique



$A - Z$ = nombre de neutrons: 6 7 8

C'est le numéro atomique Z , qui définit un atome

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
<i>Carbone 14</i> <i>instable(radioactif)</i>	<i>0,000 000 000 1</i> <i>%</i>	

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

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

Ia		IIa		CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS																IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0
1	1 H Hydrogène 1,01																							2 He Hélium 4,00	
2	3 Li Lithium 6,94	4 Be Béryllium 9,01															5 B Bore 10,81	6 C Carbone 12,01	7 N Azote 14,01	8 O Oxygène 16,00	9 F Fluor 19,00	10 Ne Néon 20,18			
3	11 Na Sodium 22,99	12 Mg Magnésium 24,31															13 Al Aluminium 26,98	14 Si Silicium 28,09	15 P Phosphore 30,97	16 S Soufre 32,07	17 Cl Chlore 35,45	18 Ar Argon 39,95			
4	19 K Potassium 39,10	20 Ca Calcium 40,08	21 Sc Scandium 44,96	22 Ti Titane 47,87	23 V Vanadium 50,94	24 Cr Chrome 52,00	25 Mn Manganèse 54,94	26 Fe Fer 55,85	27 Co Cobalt 58,93	28 Ni Nickel 58,69	29 Cu Cuivre 63,55	30 Zn Zinc 65,38	31 Ga Gallium 69,72	32 Ge Germanium 72,64	33 As Arsenic 74,92	34 Se Sélénium 78,96	35 Br Brome 79,90	36 Kr Krypton 83,80							
5	37 Rb Rubidium 85,47	38 Sr Strontium 87,62	39 Y Yttrium 88,91	40 Zr Zirconium 91,22	41 Nb Niobium 92,91	42 Mo Molybdène 95,94	43 Tc Technétium 98,91	44 Ru Ruthénium 101,07	45 Rh Rhodium 102,91	46 Pd Palladium 106,40	47 Ag Argent 107,87	48 Cd Cadmium 112,40	49 In Indium 114,82	50 Sn Étain 118,70	51 Sb Antimoine 121,75	52 Te Tellure 127,60	53 I Iode 126,90	54 Xe Xénon 131,30							
6	55 Cs Césium 132,91	56 Ba Baryum 137,34	57 La Lanthane 138,91	58 Ce Cérium 140,12	59 Pr Praseodyme 140,91	60 Nd Néodyme 144,24	61 Pm Prométhée 144,91	62 Sm Samarium 150,36	63 Eu Europium 151,96	64 Gd Gadolinium 157,25	65 Tb Terbium 158,93	66 Dy Dysprosium 162,50	67 Ho Holmium 164,93	68 Er Erbium 167,26	69 Tm Thulium 168,93	70 Yb Ytterbium 173,04	71 Lu Lutétium 174,97								
7	87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium 226,03	89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium 232,04	91 Pa Protactinium 231,04	92 U Uranium 238,03	93 Np Neptunium 237,05	94 Pu Plutonium 239,05	95 Am Américium 241,06	96 Cm Curium 247,07	97 Bk Berkélium 249,08	98 Cf Californium 251,08	99 Es Einsteinium 254,09	100 Fm Fermium 257,10	101 Md Mendelevium 258,10	102 No Nobélium 259,10	103 Lr Lawrencium 262,10								
6	lanthanides		58 Ce Cérium 140,12	59 Pr Praseodyme 140,91	60 Nd Néodyme 144,24	61 Pm Prométhée 144,92	62 Sm Samarium 150,40	63 Eu Europium 151,96	64 Gd Gadolinium 157,25	65 Tb Terbium 158,93	66 Dy Dysprosium 162,50	67 Ho Holmium 164,93	68 Er Erbium 167,26	69 Tm Thulium 168,93	70 Yb Ytterbium 173,04	71 Lu Lutétium 174,97									
	actinides		90 Th Thorium 232,04	91 Pa Protactinium 231,04	92 U Uranium 238,03	93 Np Neptunium 237,05	94 Pu Plutonium 239,05	95 Am Américium 241,06	96 Cm Curium 247,07	97 Bk Berkélium 249,08	98 Cf Californium 251,08	99 Es Einsteinium 254,09	100 Fm Fermium 257,10	101 Md Mendelevium 258,10	102 No Nobélium 259,10	103 Lr Lawrencium 262,10									

Métaux et non-métaux

	IA																		VIIIB
1	H	IIA																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII A			IB	IIB	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	**	**	**		**		**			

Métaux

Semi-métaux

Non-métaux

Gaz nobles

* 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.

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

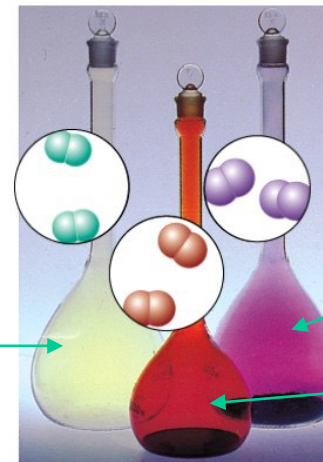


Magnésium

Les **NON-MÉTAUX**:

groupe du **carbone**
groupe de **l'azote**
groupe de **l'oxygène**

groupe des **halogènes** : gaz jaune-vert



Fluor

gaz jaune-vert

Iode

solide bleu-noir

Brome

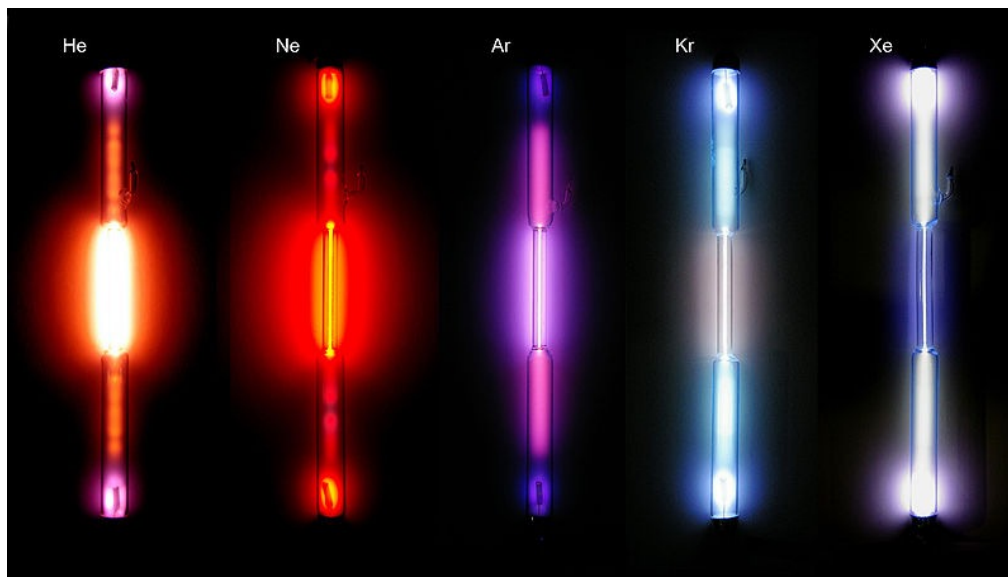
liquide rouge-brun

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.*