

Partie I: 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).

$$E = h\nu$$

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:

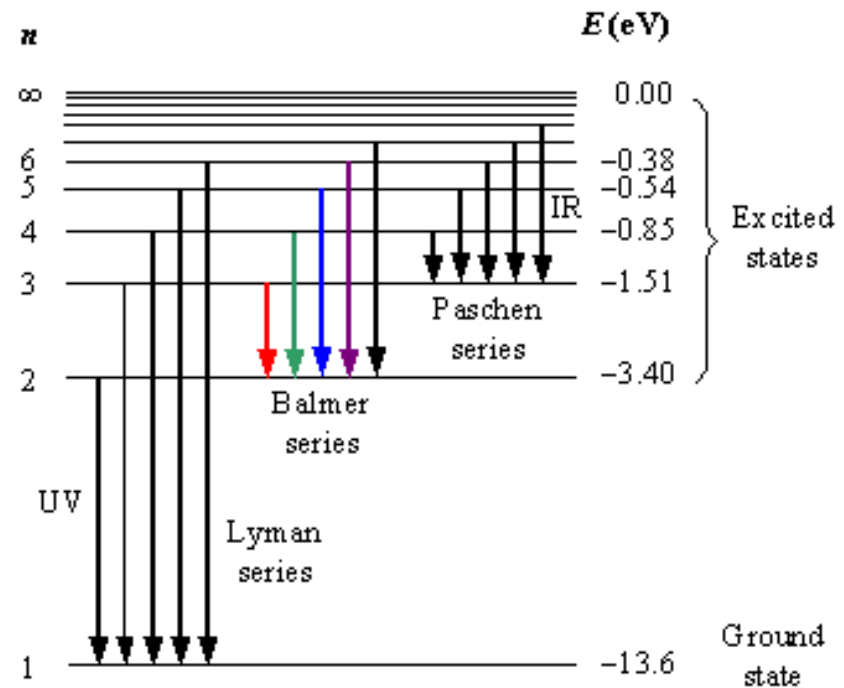
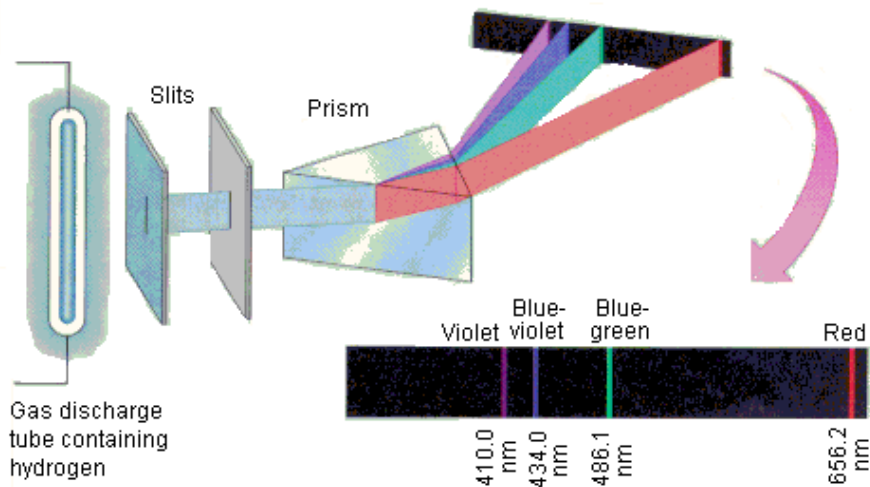
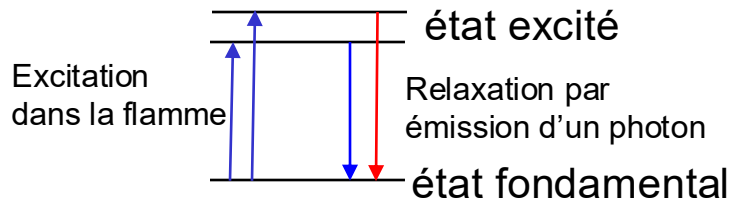
$$\lambda \nu = c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

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



Réponse d'un atome d'hydrogène hors équilibre

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



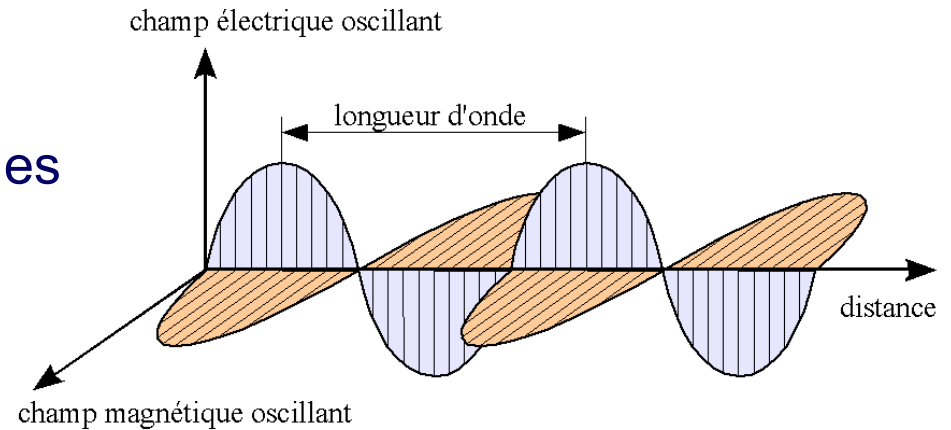
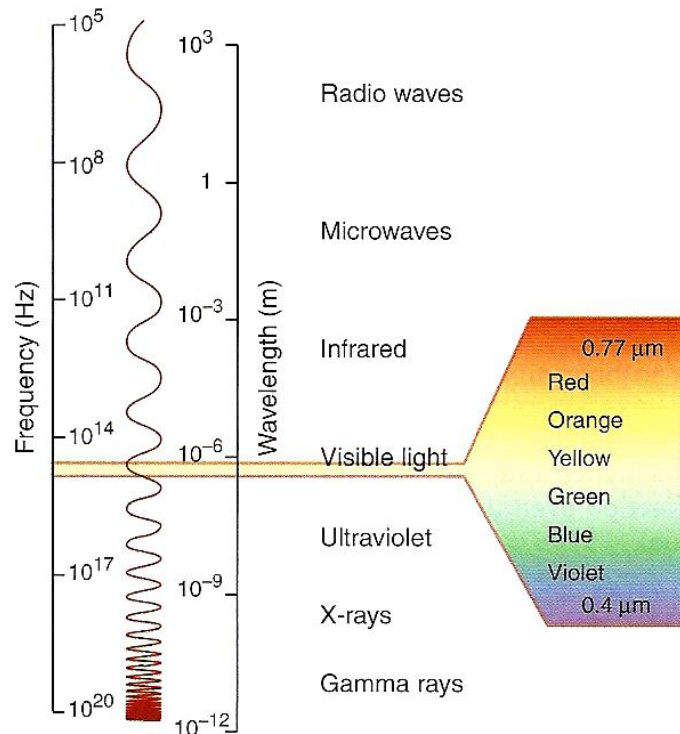
Spectre de l'hydrogène atomique

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

Qu'est-ce que la lumière?

C'est une onde électromagnétique qui résulte du mouvement de charge électriques.

Ce mouvement produit des oscillations des champs électrique et magnétique, qui se propagent dans l'espace.



Dans le vide:

$$\lambda \nu = c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

vitesse c

longueur d'onde λ

perméabilité du vide μ_0

permittivité du vide ϵ_0

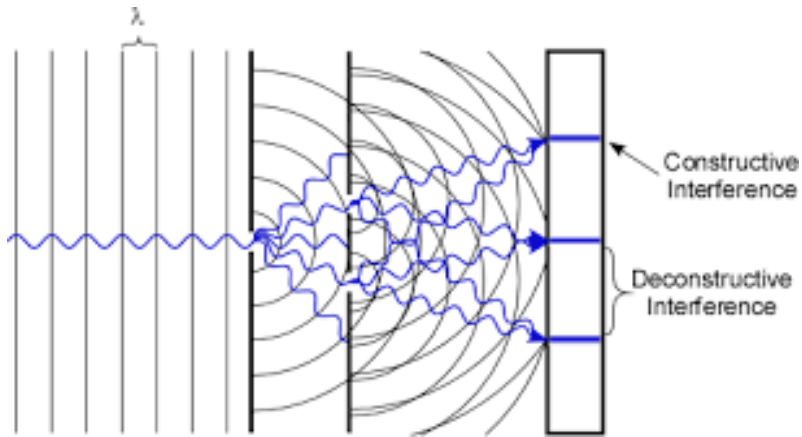
fréquence: $\nu = 7.5 - 3.75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$

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

Dualité onde-particule

ONDE

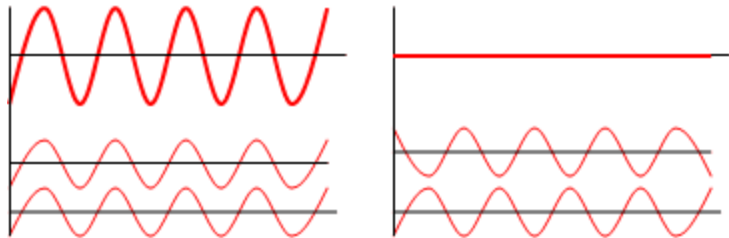
Observation de la diffraction



Interférence

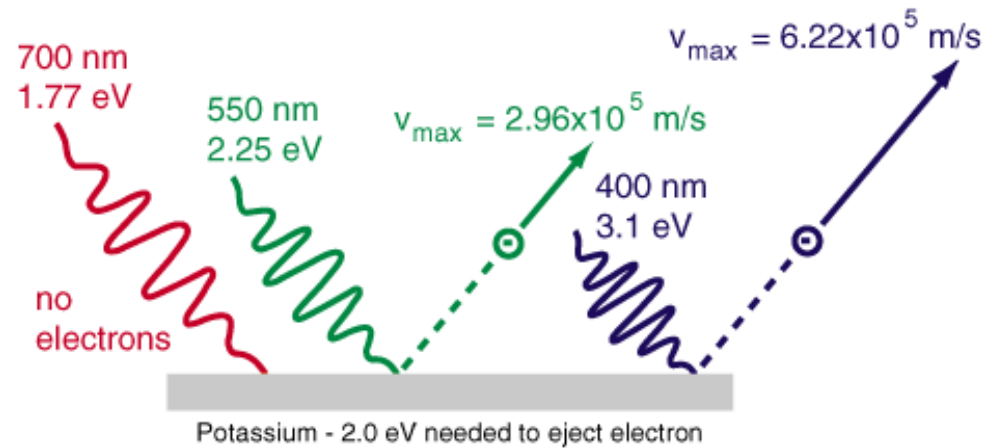
constructive

destructive



PARTICULE

Effet photoélectrique (potassium)



Un seul photon doit transmettre suffisamment d'énergie à un électron pour le déloger.

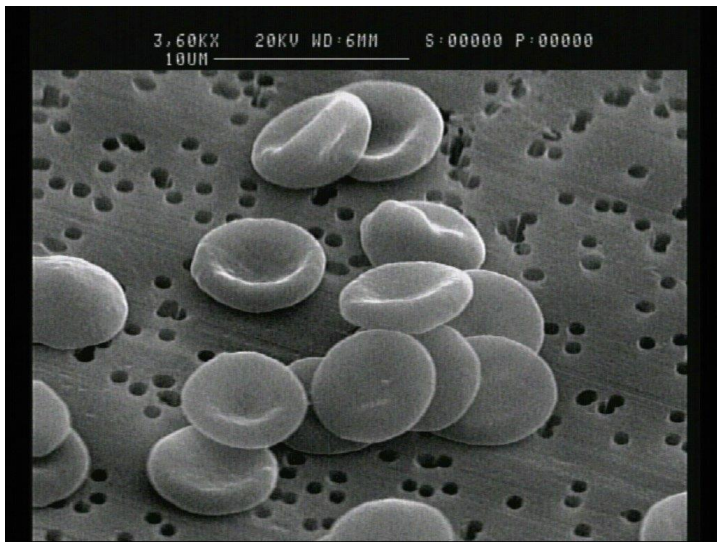
<https://www.youtube.com/watch?v=puT36rd9dkQ>

Nature ondulatoire de la matière

On a vu que la lumière est une onde et une particule (photons), mais est ce que la matière, qui est formée de particules, peut aussi être considérée comme une onde?

Suppositions de **Louis de Broglie** en 1923: une particule de masse m , qui se déplace à la vitesse v se comporte comme une onde de longueur d'onde λ :

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \text{ où } h : \text{ constante de Planck} = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$



L'hypothèse fut vérifiée quelques années plus tard, et a permis de développer le microscope électronique (faisceaux d'électrons au lieu de faisceaux de lumière à travers des lentilles, donc petite longueur d'onde et meilleure résolution)

Mécanique quantique: la fonction d'onde

Schrödinger (1926):

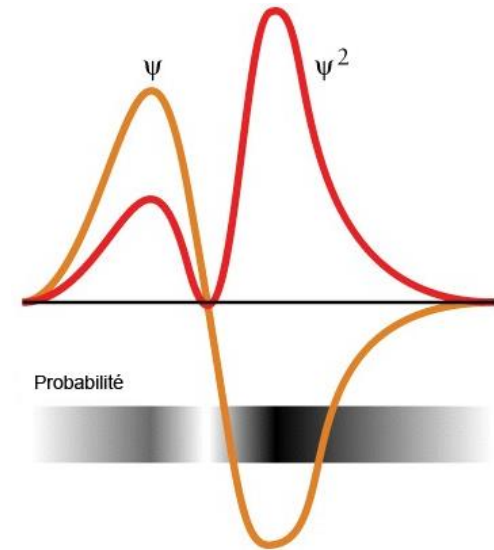
énergie cinétique + énergie potentielle = énergie totale

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

$$H\psi = E\psi$$

(H: hamiltonien; ψ = fonction d'onde)

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



Interprétation de ψ :

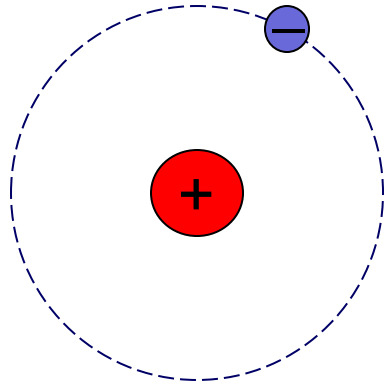
$\Psi^2(x)$ densité de probabilité de présence de l'électron.

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

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

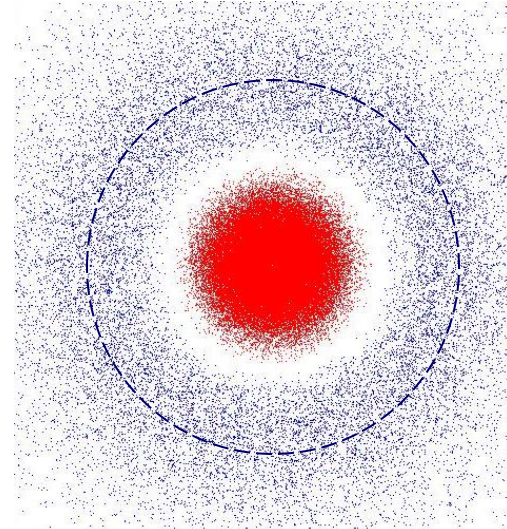
Modèle actuel de structure de l'atome

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):

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

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

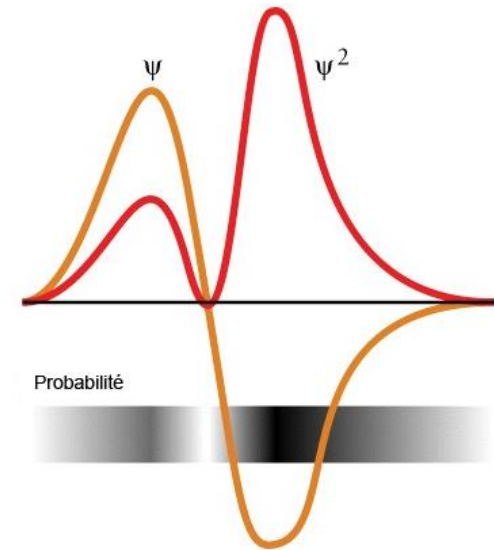
Interprétation de ψ :

$\Psi^2(x)$ 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.

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

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

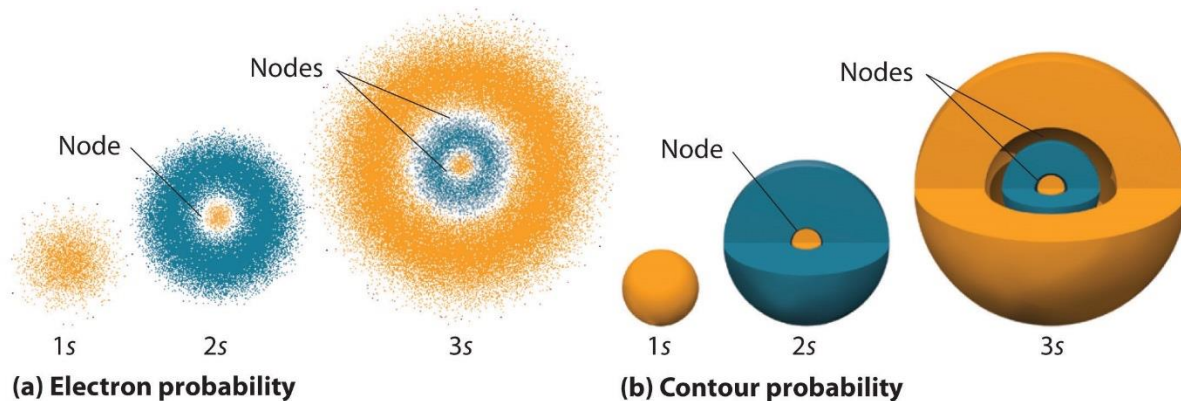
Δx : incertitude sur la position

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

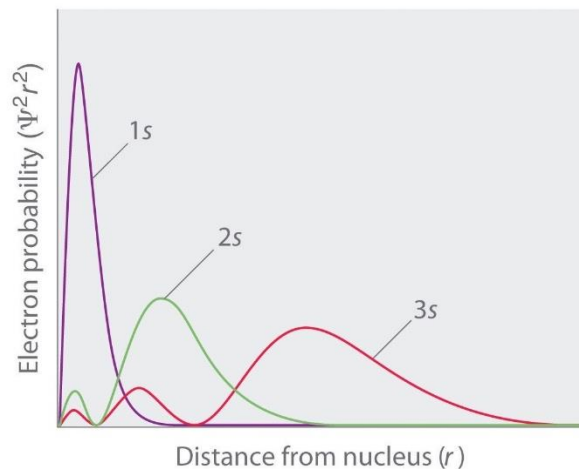


Solution de l'équation de Schrodinger: orbitales

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.



(c) Radial probability

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

$$\ell = 0$$

$$\ell = 1$$

$$\ell = 2$$

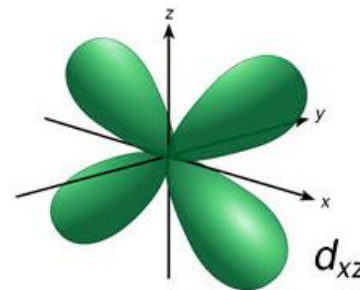
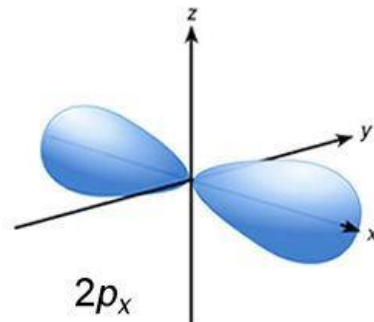
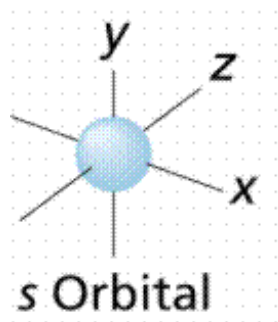
La notation s, p, d et f pour le nombre atomique l est héritée de l'observation des raies d'absorption:

s : sharp

p : principal

d : diffuse

f : fundamental

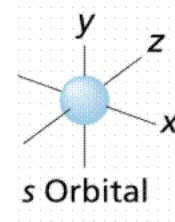


Les nombres quantiques et orbitales

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

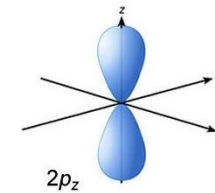
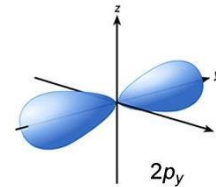
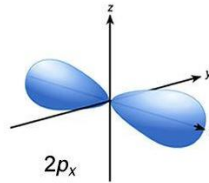
m_ℓ représente l'orientation de l'orbitale ($2 \times \ell + 1$ orientations possibles pour un nombre quantique ℓ donné)

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



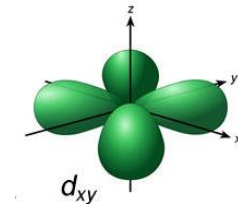
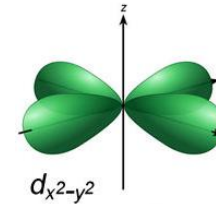
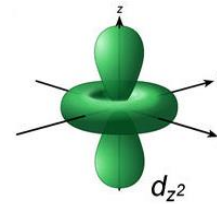
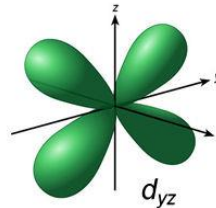
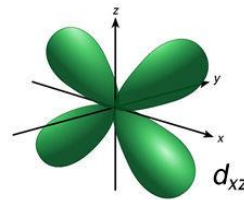
$\ell = 1$

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



$\ell = 2$

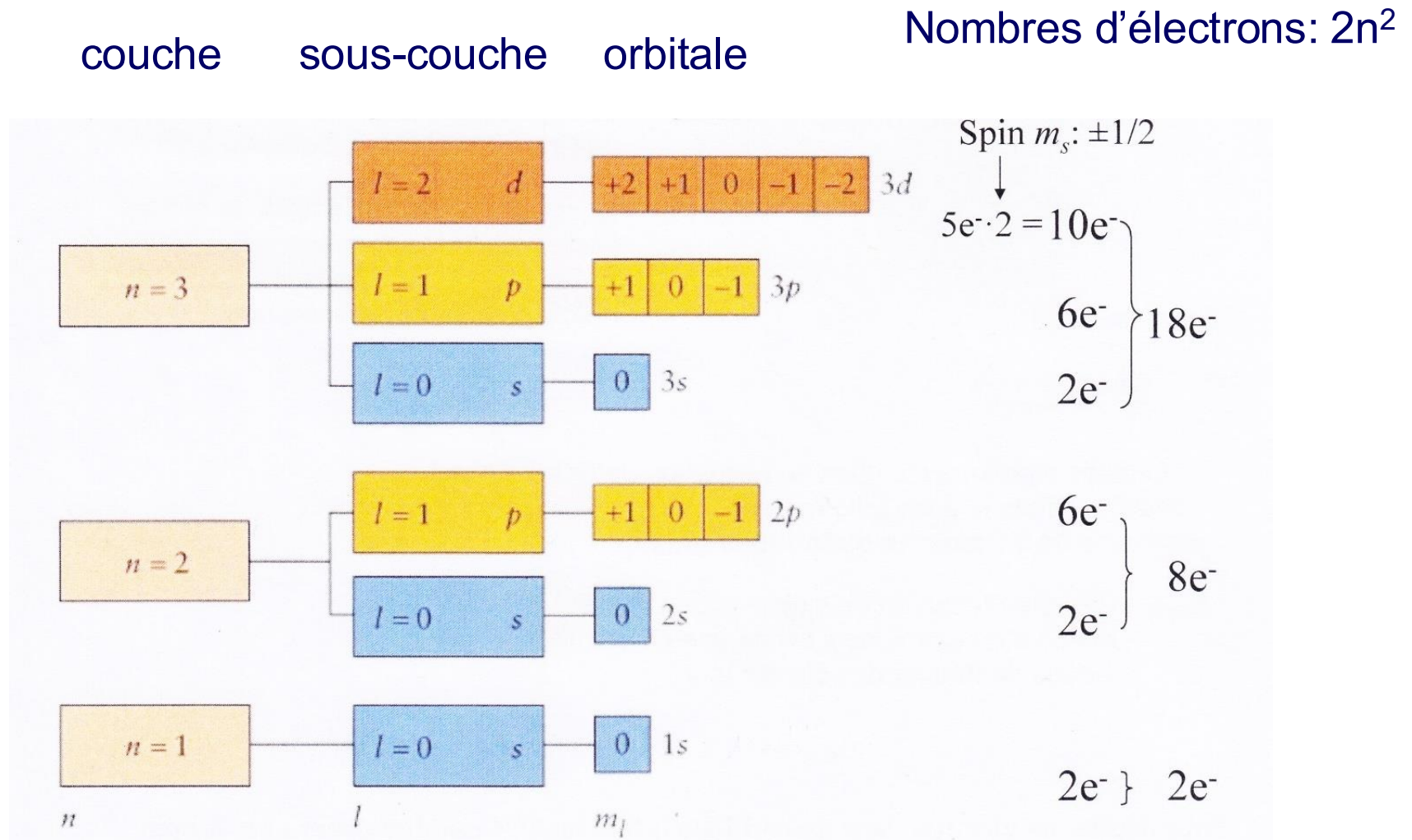
$m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$



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

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

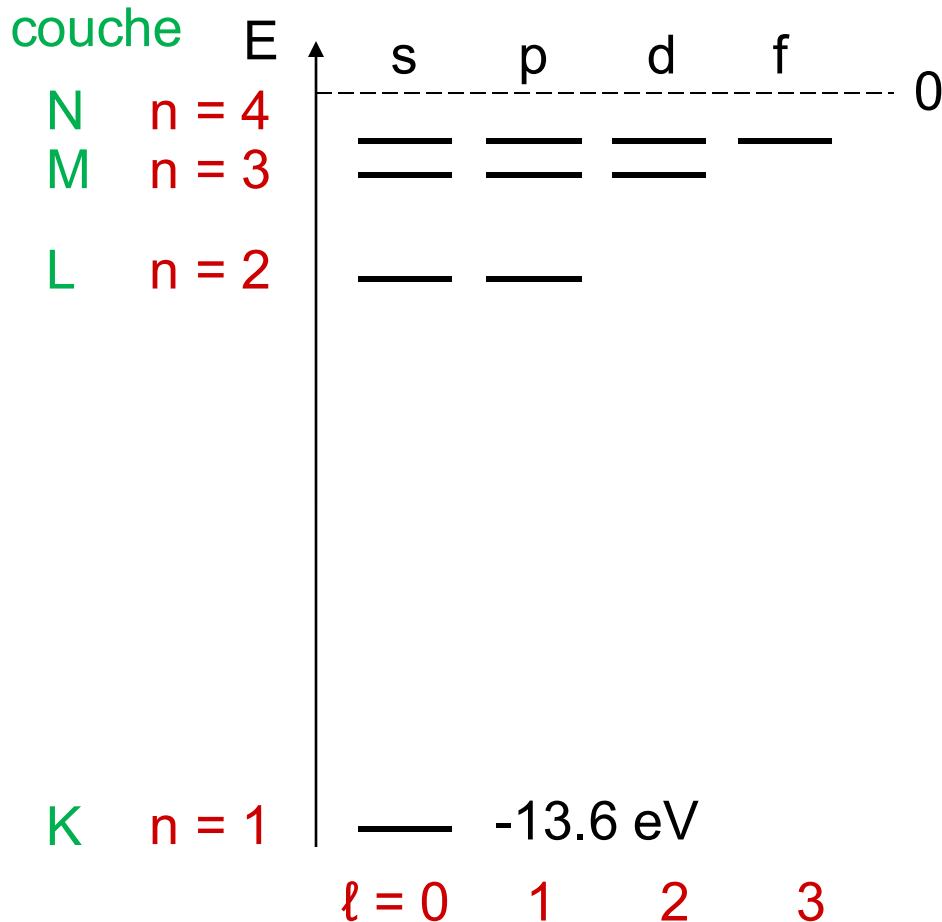
Remplissage des orbitales



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**.

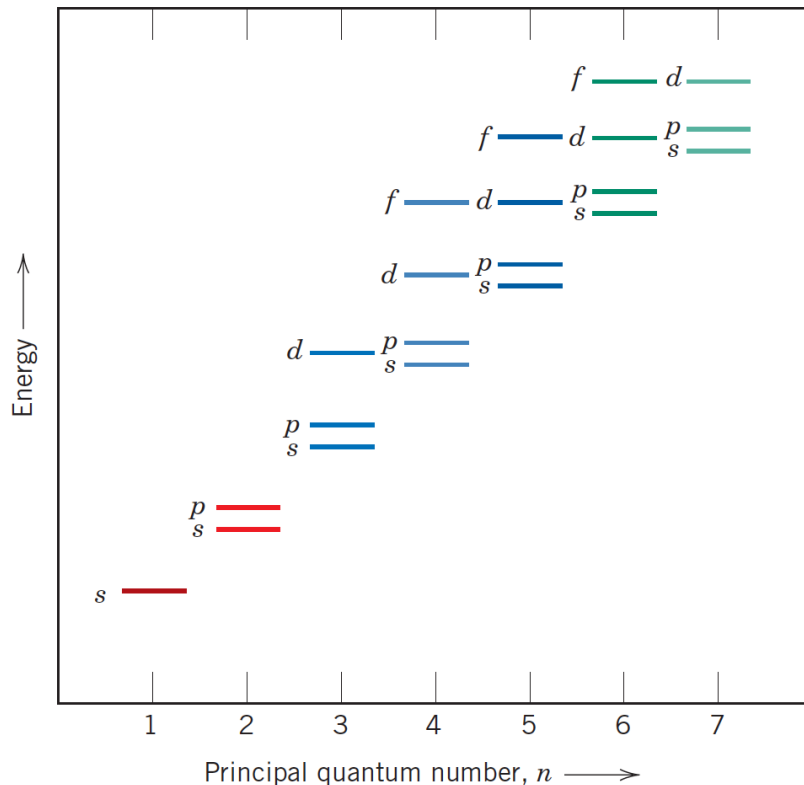


Nombre d'états
au niveau n :

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

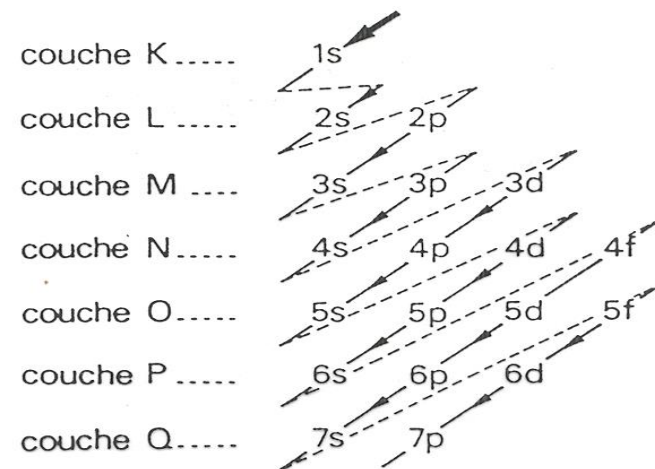
Structure des atomes à plusieurs électrons

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 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

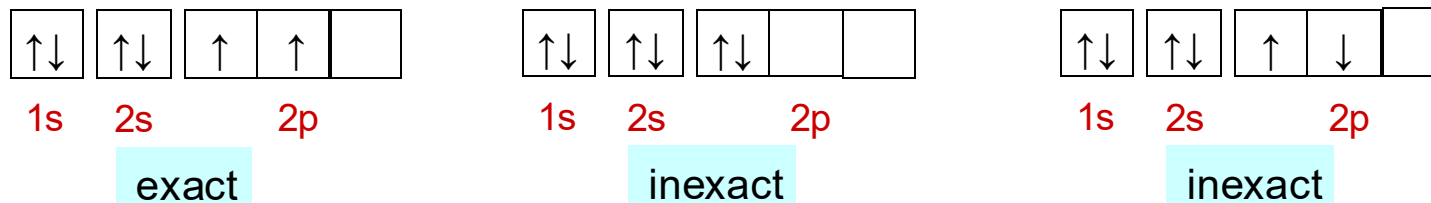
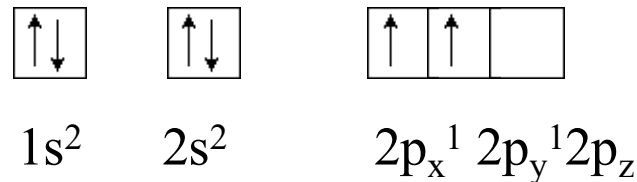
Principe d'exclusion de Pauli

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

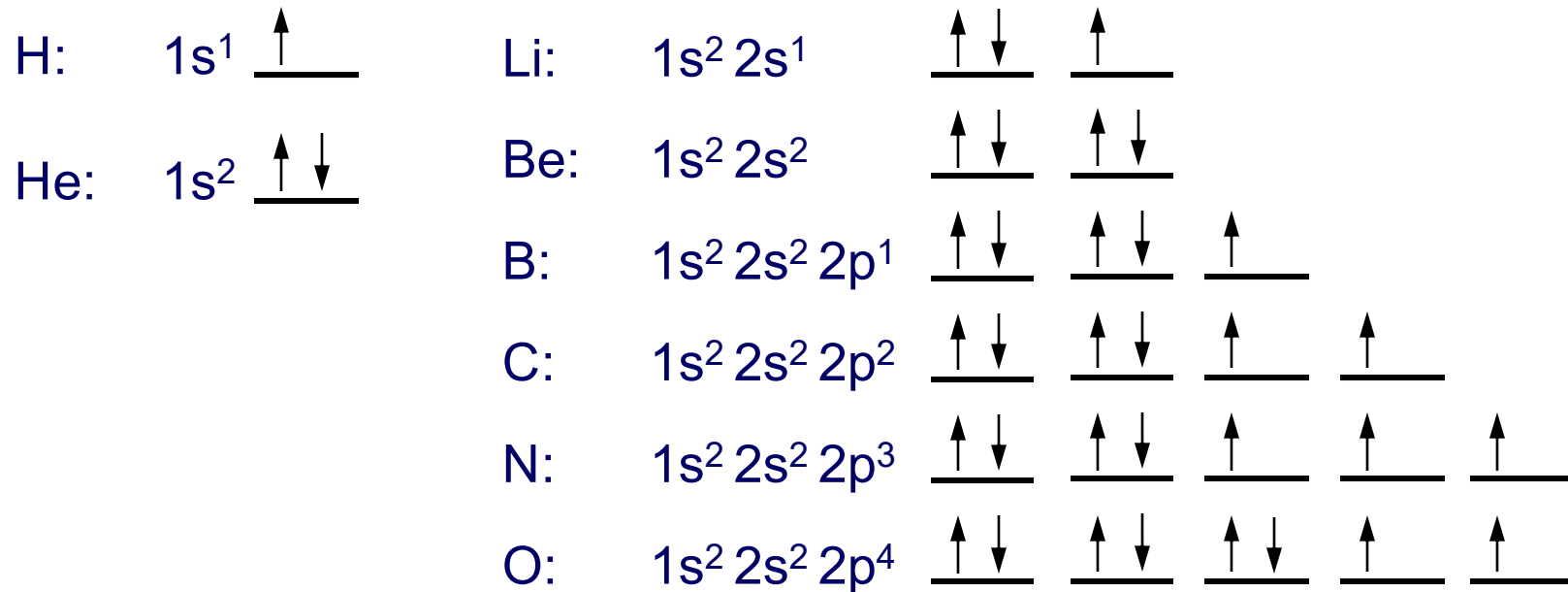
L'arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles (sur les orbitales (n, ℓ) , on fixe d'abord m_s avant de varier m_ℓ)

Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



$\uparrow\downarrow$ 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

CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

nombre atomique

électronégativité

électrons par couche

électrons par orbitale

symbole

nom

masse atomique relative

Np

Neptunium

93

237,05

élément métallique

élément non-métallique

élément à prédominance métallique

élément à prédominance non-métallique

gaz rare

		Ia	IIa	CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS																IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0			
		✕	✕																	✕	✕	✕	✕	✕	✕			
1	1 ^{1s¹}	H																								He	2	K
2	2 ^{1s² 2s¹}	Li	Be																							Ne	2	L
3	3 ^{1s² 2s² 2p¹}	Na	Mg																							Ar	2	M
4	4 ^{1s² 2s² 2p⁶ 3s¹}	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	2	K							
5	5 ^{1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p¹}	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	2	L							
6	6 ^{1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁴}	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	2	M							
7	7 ^{1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶}	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub								2	N						
6	groupes c : lanthanides actinides			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71				2	O						
7				Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				2	P						
				90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103				2	K						
				Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				2	L						

Tableau périodique des éléments

Éléments des groupes principaux

Bloc <i>s</i>		Éléments des groupes principaux																Bloc <i>p</i>	
IA																		VIIIB	
←1s→	IIA																	←1s→	
←2s→		Éléments de transition																	
		Bloc <i>d</i>																	
←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 <i>f</i>	
Bloc <i>f</i>																		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.

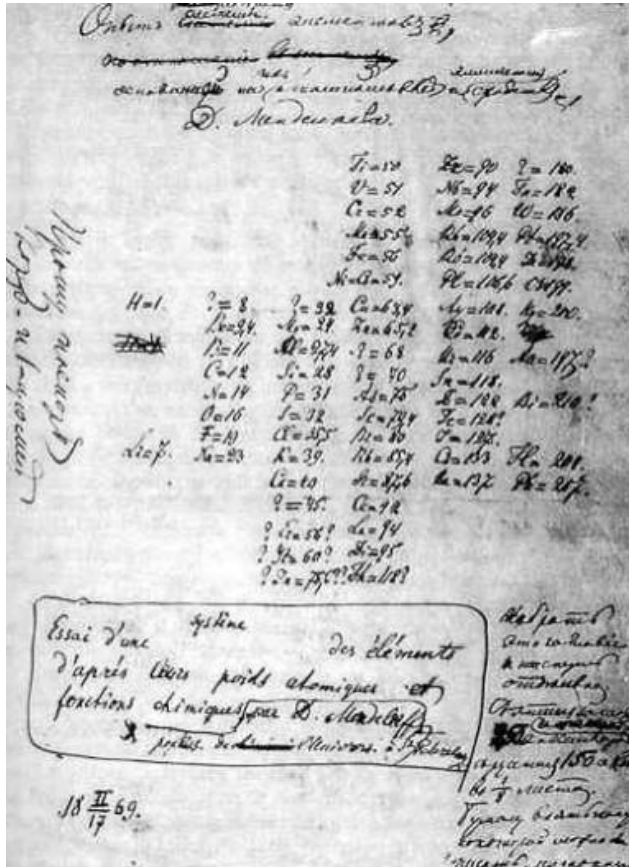
Le tableau périodique permet une lecture rapide de la configuration électronique d'un atome en se basant sur la configuration électronique du gaz rare précédent et sur la position de l'élément dans le tableau.

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



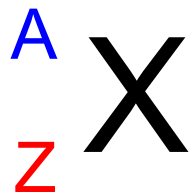
I	II	III	IV	V	VI
			Ti = 50	Zr = 90	? = 180
			V = 51	Nb = 94	Ta = 182
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4
			Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198
			Ni = Co = 59	Pd = 106,6	Os = 199
H = 1	? = 8	? = 22	Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200
	Be = 9,4	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
	B = 11	Al = 27,4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

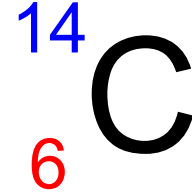
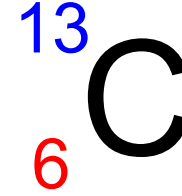
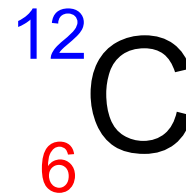
numéro atomique Z = nombre de **protons** du noyau
= nombre d'**électrons** (pour un atome neutre)

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

Métaux et non-métaux

Période	IA											VIII B						
	H											He						
1	H											VIII B						
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	III A	IV A	V A	VIA	VII A	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	**	**	**		**		**		

* 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

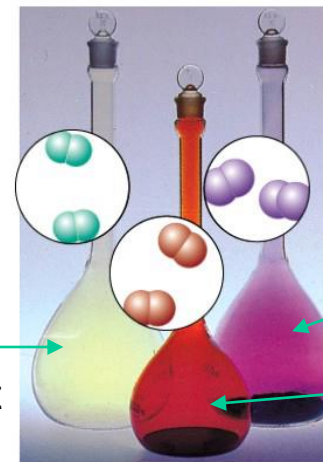


Magnésium

Les **NON-MÉTAUX**:

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

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



Fluor

Iode
solide bleu-noir

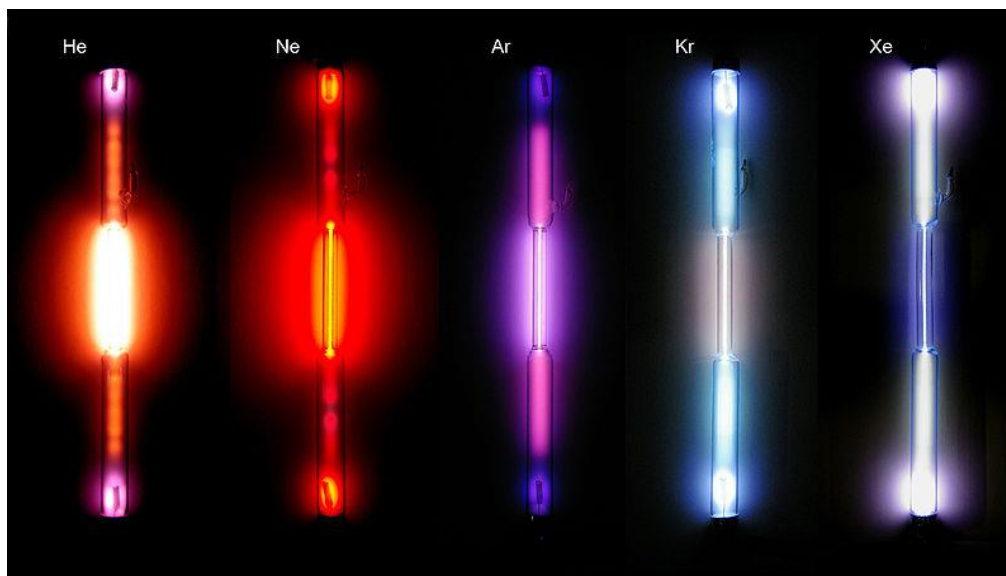
Brome
liquide rouge-brun

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.*