

## La structure de l'atome

Arianna Marchioro

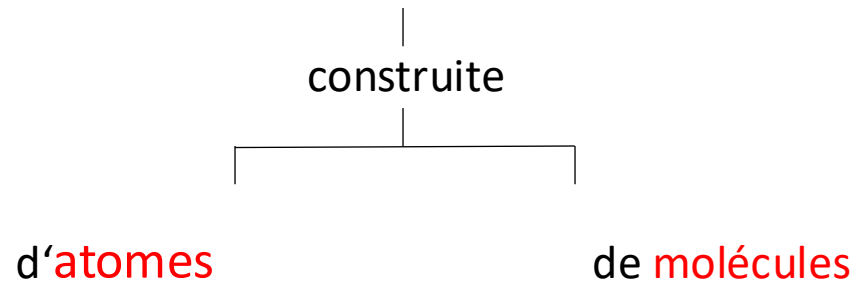
# Qu'est-ce que la chimie?

---

Étude de la **composition**, de la **structure**, des **propriétés** et des **changements** de la matière ainsi que de l'**énergie** reliée aux changements

## Matière

Toute chose qui occupe un espace et qui possède une masse



# Table des matières

---

- Étude des atomes – électron, proton, neutron
- Dualité onde – particule
- Modèle de Bohr – l'atome d'hydrogène
- Mécanique quantique – les orbitales
- Tableau périodique des éléments

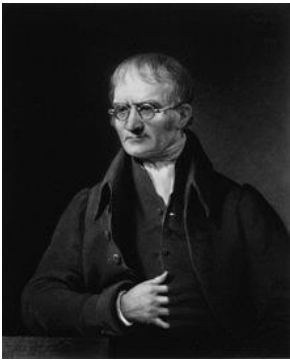
Références: Hill1, chap. 1.2; chap. 2 et 4

# Les pionniers de l'hypothèse atomique

---



- Au 4<sup>ème</sup> siècle avant notre ère, le philosophe Démocrite pense que la matière est formée de petites particules indivisibles
- Il nome ces particules atomes, du grec « *atomos* » = indivisible, insécable



*John Dalton*  
1766-1844

Au début du 19<sup>ème</sup> siècle, Dalton élabore un modèle atomique:

- Les atomes d'un même élément sont identiques en masse\*
- Les composés résultent de l'association, selon des proportions fixes, d'atomes d'éléments différents (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, etc...)
- Lors d'une réaction chimique, aucun atome n'est créé, ni détruit, ni divisé

\*Plus tard: Isotopes

# Étude des atomes – modèle nucléaire

---

- Concept d'atome indivisible: utilisé tout au long du XIXème siècle
- Fin XIXème – début XXème siècle: nouvelles expériences qui ont permis de comprendre la **structure interne des atomes**

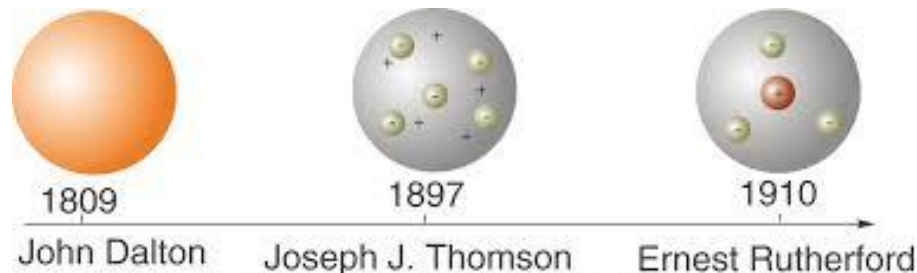
J.J. Thomson: rayons cathodiques

→ Découverte de l'électron comme particule chargée négativement

E. Rutherford:  $\alpha$ -particules ( $\text{He}^{2+}$ ) percutent contre une feuille de métal

→ Charge positive est concentrée au centre d'un atome

→ Hypothèse d'un noyau constitué de protons



# Étude des atomes - les neutrons

---

Jusqu'en 1920, on a cru que l'atome était composé de protons et d'électrons uniquement.

**Problème:** La masse totale de l'atome ne peut s'expliquer par la masse/le nombre de protons

**Hypothèse:** Le noyau contient également de particules dont la masse est à peu près identique à celle du proton, mais sans charge électrique

**Découverte:** J. Chadwick, 1932: Bombardement d'atomes Be avec particules  $\alpha$  donne des particules jusque là inconnues: **les neutrons**

## → MODÈLE ACTUEL

- La charge positive et presque toute la masse sont concentrées dans un minuscule noyau
- Les électrons chargés négativement entourent le noyau
- Le nombre de protons dans le noyau va définir le numéro atomique Z

# Étude des atomes - les neutrons

---

Particule	Symbole	Masse relative approximative	Charge relative	Position dans l'atome
Proton	p+	1u	1+	Noyau
Neutron	n	1u	0	Noyau
Électron	e-	0,000 545u	1-	Autour du noyau

# Étude des atomes – les électrons

---

- Rutherford proposait de considérer l'atome comme un “système solaire miniature” avec le noyau au centre, les électrons en orbite et la force électrostatique à la place de la gravité
- Mécanique classique: l'électron finira un jour par s'écraser sur le noyau!
- De plus, cela n'explique pas les raies d'absorption ou d'émission discrètes observées expérimentalement (que l'on va voir juste après)
- En 1913, Bohr a postulé que le moment cinétique des électrons est quantifié



# Atome d'hydrogène: un électron et un proton

---

$n$  = Nombre quantique principal

- On ne peut pas donner n'importe quelle énergie pour passer d'un palier à l'autre!
- L'énergie ne peut être transférée que par quantités discrètes appelées **quanta** (non continue)
- L'énergie est nulle quand l'électron est infiniment loin du noyau ( $n$  très grand)

# Atomes et lumière

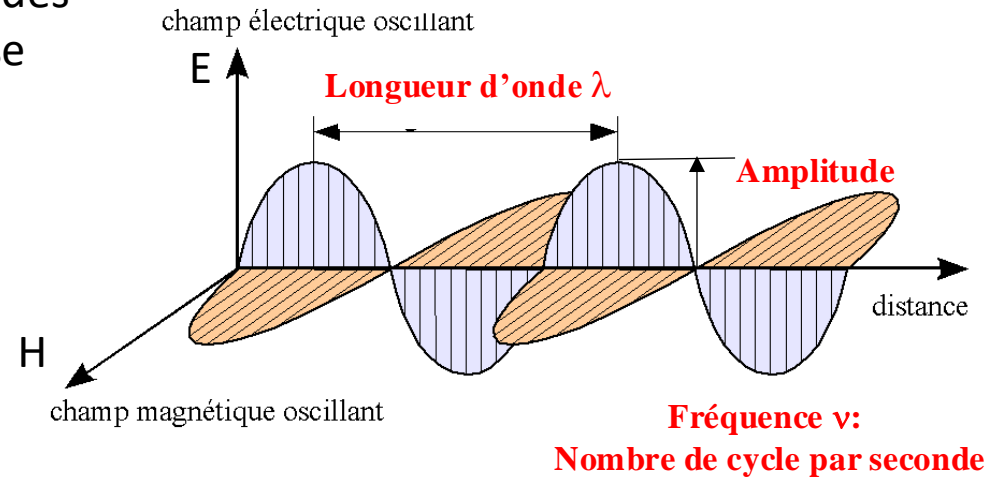
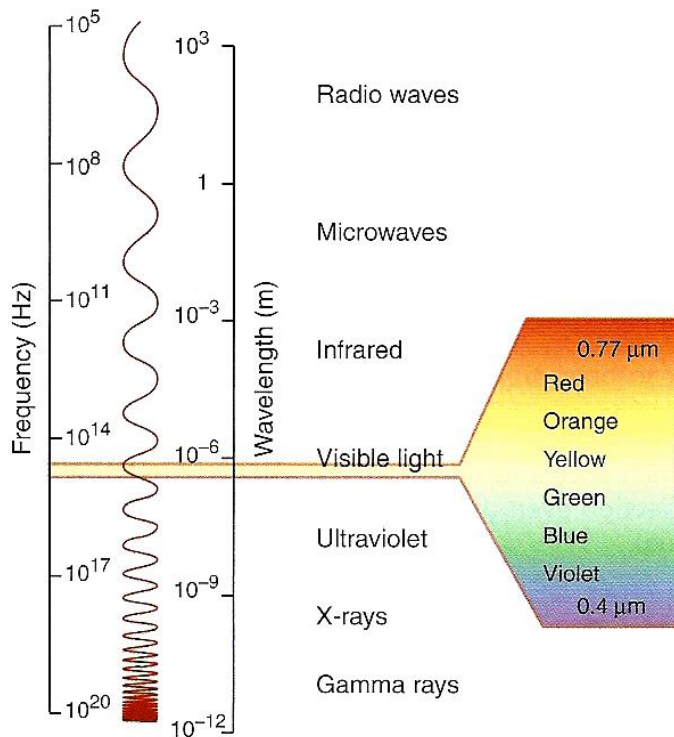
---

- L'énergie peut être transmise aux atomes par la chaleur, une décharge électrique, ou par **les radiations électromagnétiques**
- Les radiations électromagnétiques transportent de l'énergie à travers l'espace

Rappel: Qu'est-ce que une radiation électromagnétique?

# Onde électromagnétiques

- Résulte du mouvement de charge électriques
- Ce mouvement produit des oscillations des champs électrique et magnétique, qui se propagent dans l'espace
- Pas besoin de milieu pour se propager



Dans le vide:

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

Vitesse  $c$

Longueur d'onde  $\lambda$

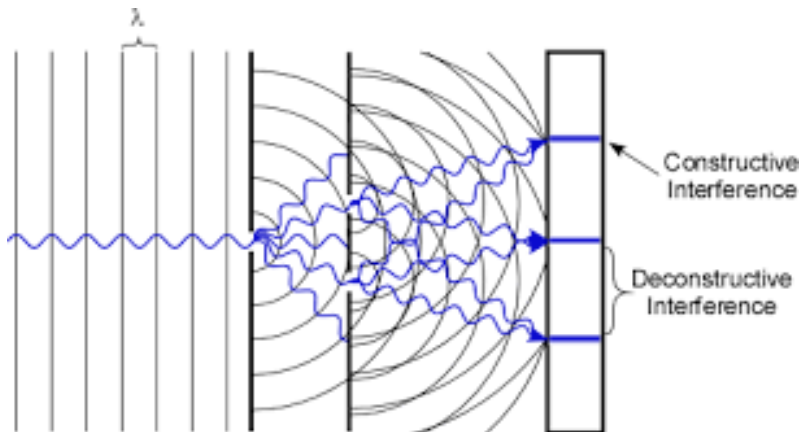
Perméabilité du vide  $\mu_0$

Permittivité du vide  $\epsilon_0$

# Dualité onde – particule

**ONDE**

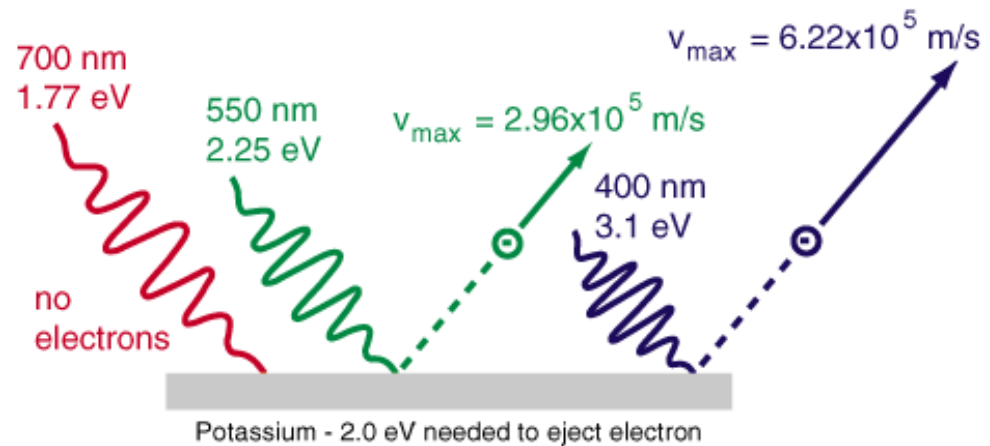
Observation de la diffraction:  
la lumière est une **onde**!



**OU**

**PARTICULE ?**

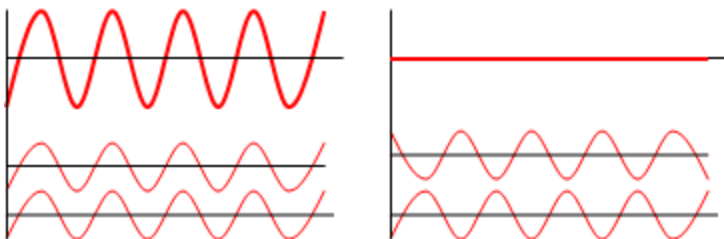
Effet photoélectrique: la lumière est  
une **particule**!



## Interférence

Constructive

Destructive



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

# Les photons

---

- Une raie de radiation électromagnétique est un flux de nombreux « paquets » d'énergie électromagnétique appelés **photons**
- L'énergie d'un rayonnement électromagnétique est nécessairement un **multiple entier** de la quantité fondamentale donnée par le photon

$$E = h\nu$$

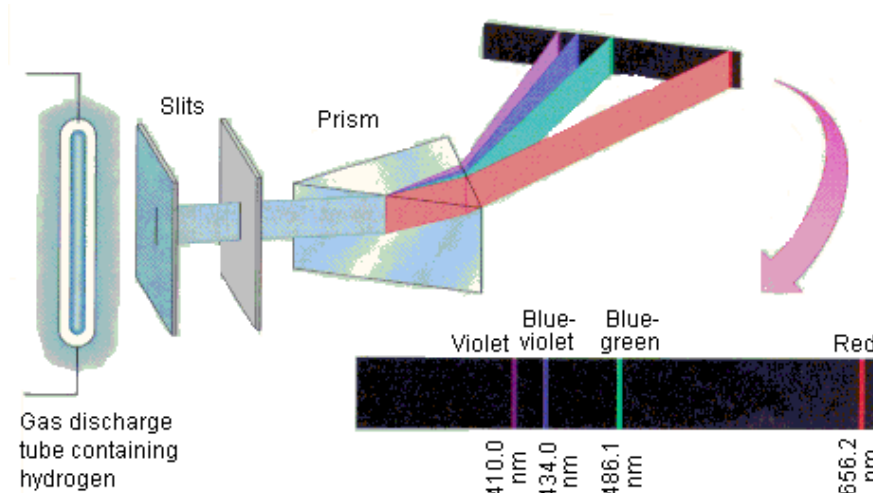
E : Energie en Joules (J)

$\nu$  : Fréquence en Hertz (Hz = s<sup>-1</sup>)

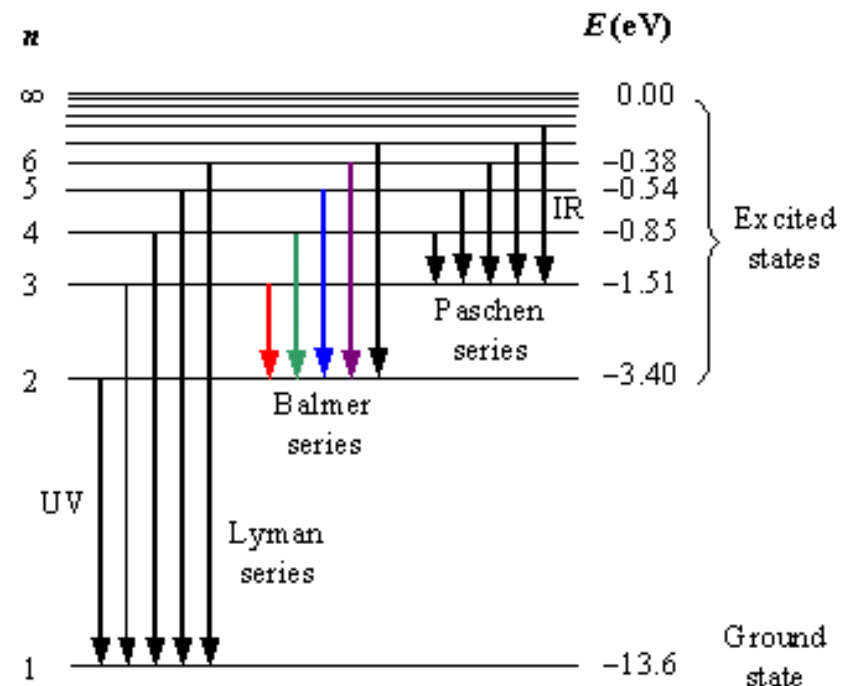
h : Constante de Planck = 6.63 x 10<sup>-34</sup> J·s

# Réponse d'un atome d'hydrogène

- Tant qu'un électron reste à un niveau donné d'énergie, il ne peut pas émettre de lumière
- La lumière est émise ou absorbée lors d'une transition



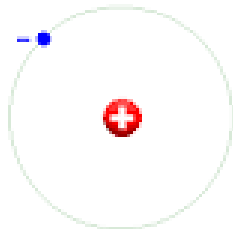
Radiations émises par des atomes d'hydrogène excités



Spectre de l'hydrogène atomique

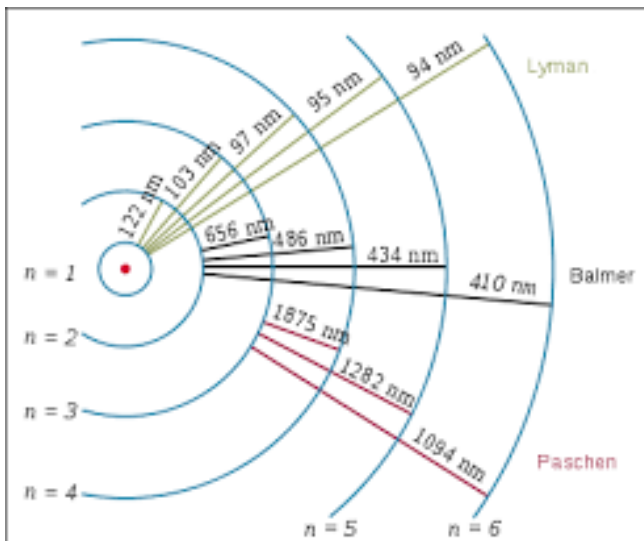
# Structure de l'atome – modèle de Bohr

**Modèle de Bohr (1913):** L'électron tourne autour du noyau, sur une couche/orbite électronique bien définie – on peut établir la relation:



Hydrogène (H)

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



Rayon atomique:  $r_{\text{Bohr}} = 0.53 \text{ \AA}$

Constante de Rydberg  $\mathcal{R}$  :  $\frac{1}{\lambda} = \frac{\mathcal{R}}{hc} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$

$$\mathcal{R} = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J} = 13.6 \text{ eV}$$

# Problème du modèle de Bohr

---

- Le modèle n'arrive pas à expliquer le spectre d'éléments à plusieurs électrons (même l'hélium!), ni la nature des liaisons chimiques
- **À partir de 1925:** La mécanique quantique va remplacer le modèle de Bohr pour expliquer la structure des atomes et les liaisons entre atomes
- La mécanique quantique va reconsidérer la nature de l'électron:

Est-ce:

... Une particule?

... Une onde?

... À la fois, onde et particule?

... Autre chose: ni onde, ni particule?

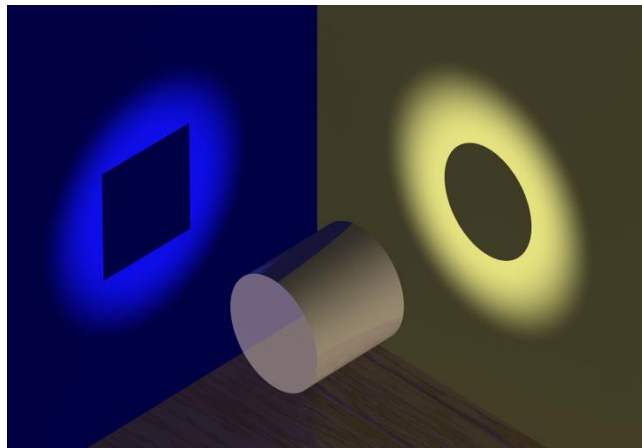


# Qu'est-ce qu'un électron?

---

## Dualité onde-particule de l'électron:

- L'électron ne ressemble à rien de macroscopique!
- Suivant comment on l'observe il apparaît soit plutôt comme une onde, soit plutôt comme une particule.
- Métaphore du cylindre : objet ayant à la fois les propriétés d'un disque et d'un rectangle



<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=2211486>

# Nature ondulatoire de la matière

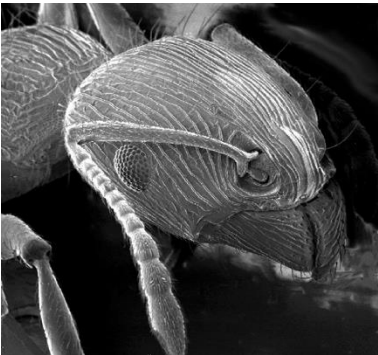
---

- Si le rayonnement électromagnétique, qui a été longtemps considéré comme étant de nature ondulatoire, a un caractère double...
- Si l'électron a un caractère double...

*...La matière, qui depuis l'époque de Dalton a été considérée comme constituée de particules, pourrait-elle avoir des propriétés ondulatoires?*

- En 1924, De Broglie suggère que toutes les particules ont un caractère ondulatoire
- Une particule de masse  $m$ , qui se déplace à la vitesse  $v$  se comporte comme une onde de longueur d'onde  $\lambda$  :

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$



*Propriété à la base du microscope électronique: Petite longueur d'onde et grossissements beaucoup plus élevés que les microscopes optiques (jusqu'à x2 millions)*

# Le principe d'incertitude de Heisenberg

- La découverte de la dualité onde-particule va également perturber tous les fondements de la physique classique...
- Conséquence de la dualité onde-particule: Il est impossible de connaître simultanément la position et la vitesse d'électron
- **Exemple:** Possible de connaître la position et la quantité de mouvement d'une balle. Pour une corde de guitare, l'onde s'étend sur la corde et ne peut être localisée à un point précis...

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



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

# Mécanique quantique: la fonction d'onde

---

- Vu qu'un électron peut être décrit comme une onde ou une particule...
- ... on peut remplacer la trajectoire précise d'une particule par une fonction d'onde  $\psi$  : Schrödinger (1926)
- Interprétation de Born de la fonction d'onde: Densité de probabilité de présence de l'électron dans l'espace, puisque on ne peut connaître sa position précise

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

# Mécanique quantique: la fonction d'onde

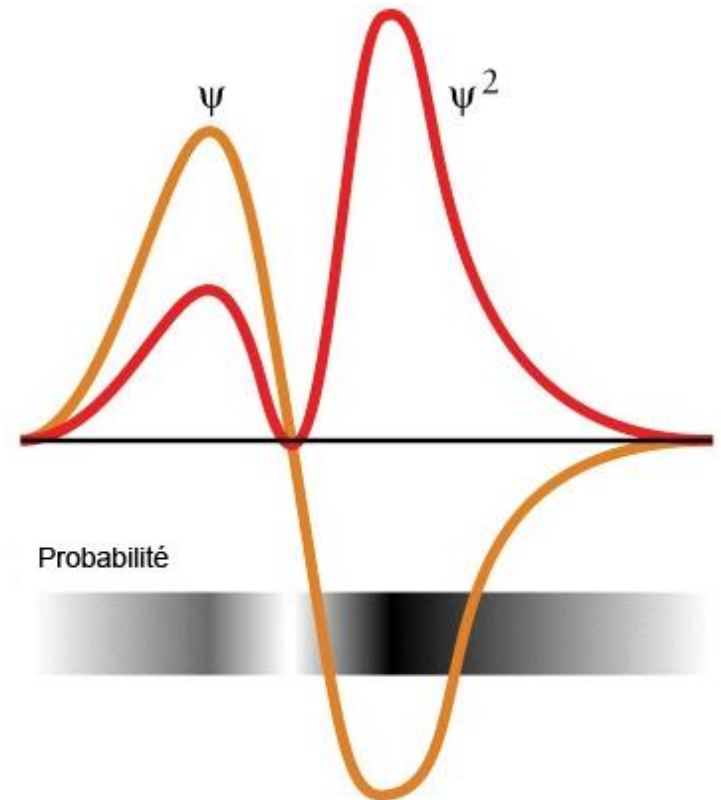
- Schrödinger (1926): La fonction d'onde  $\psi$  décrit les états d'énergie de l'atome et est solution de l'équation :

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

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{H \psi}$$

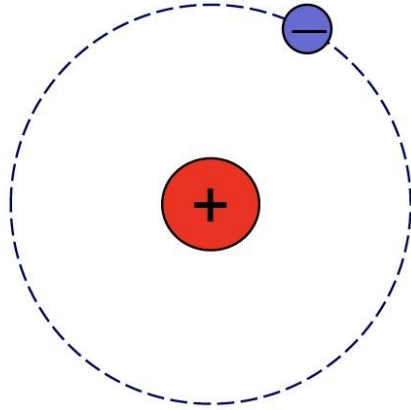
$H$  = Hamiltonien

$\psi$  = Fonction d'onde

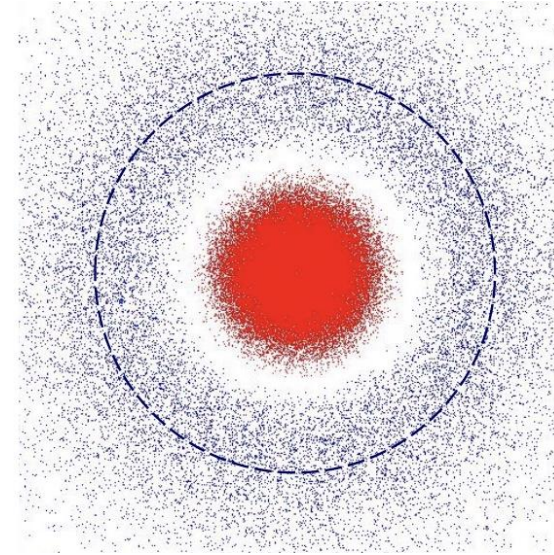


# Modèle actuel de la structure des atomes

---



Hydrogène



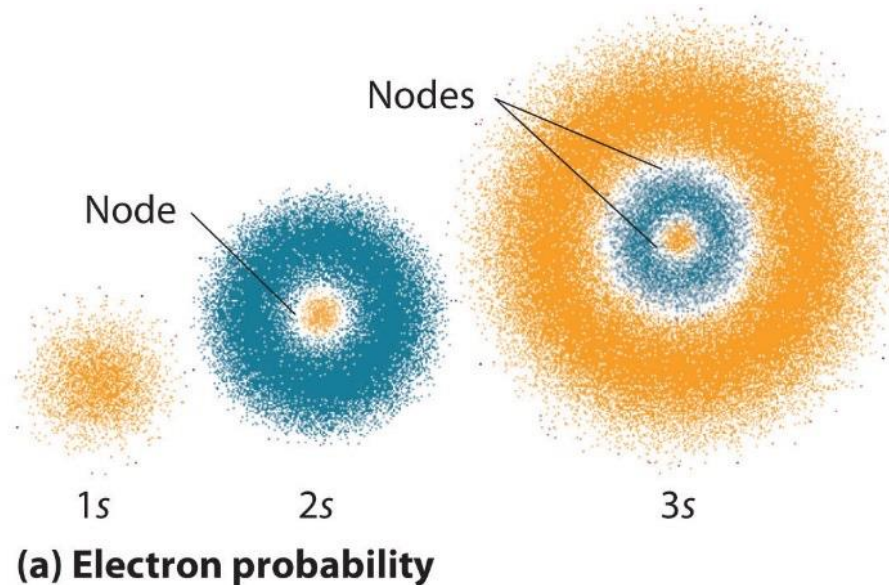
- On peut donc représenter l'expression mathématique de la fonction d'onde qui décrit un électron par une région géométrique dans laquelle existe une probabilité donnée de le trouver
- Orbitale considérée comme un “nuage de charges”

# Les solutions de l'équation de Schrödinger: les orbitales

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

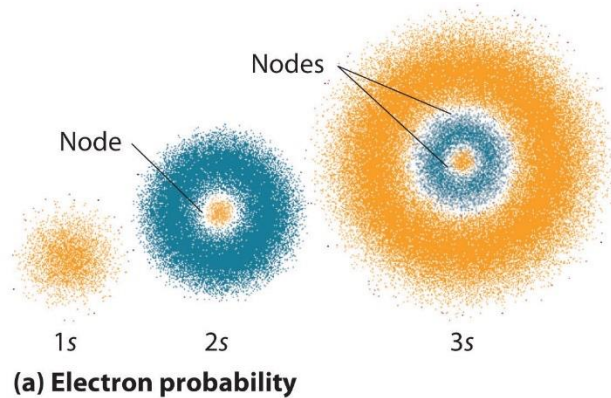
- $n$  : nombre quantique principal:  $n \geq 1$

→ Détermine l'énergie et la "taille" de l'orbitale



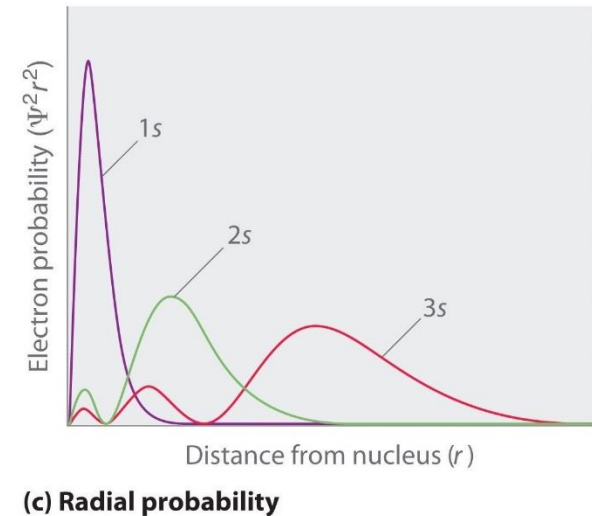
# Les solutions de l'équation de Schrödinger: les orbitales

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



Orbitale =  
expression mathématique

Distribution  
radiale



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 par les orbitales suffit à expliquer la configuration électronique et la réactivité chimique de la plupart des éléments!**



# Les nombres quantiques et les orbitales atomiques

---

- $l$  : nombre quantique angulaire (secondaire):  $0 \leq l \leq n - 1$

→ Détermine la forme de l'orbitale

$$l = 0$$

$$l = 1$$

$$l = 2$$

- 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

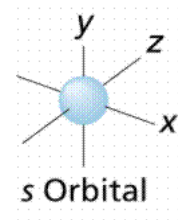
# Les nombres quantiques et les orbitales atomiques

- $m_l$  : nombre quantique magnétique:  $-l \leq m_l \leq +l$

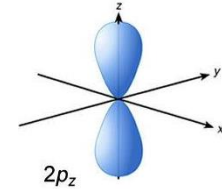
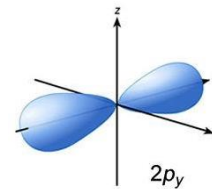
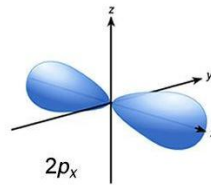
→  $m_l$  représente l'orientation de l'orbitale

$2l + 1$  orientations possibles pour un nombre quantique  $l$  donné

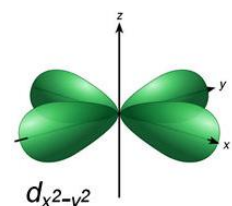
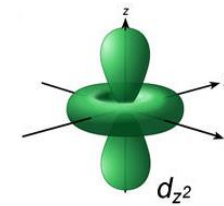
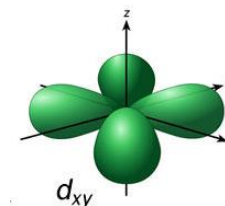
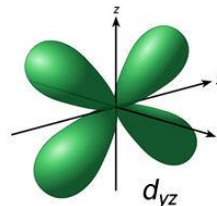
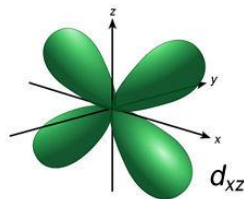
$$l = 0$$
$$m_l = 0$$



$$l = 1$$
$$m_l = -1, 0, 1$$



$$l = 2$$
$$m_l = -2, -1, 0, 1, 2$$

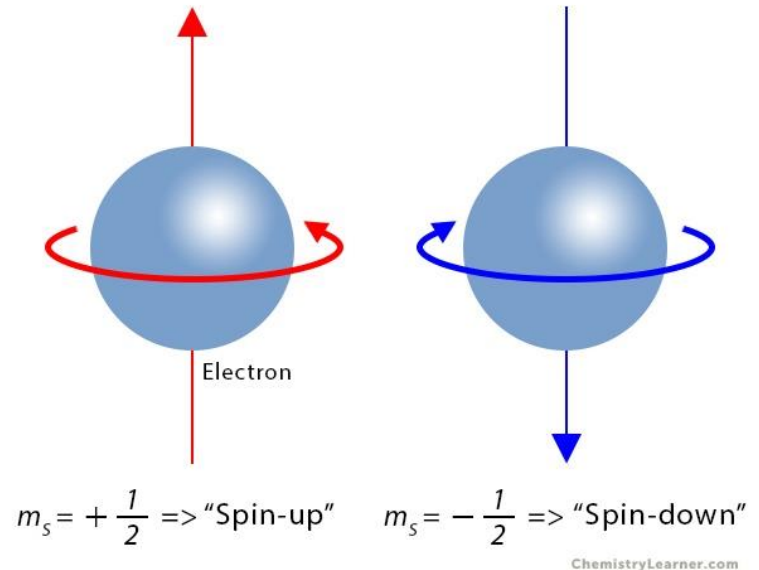


# Les nombres quantiques et les orbitales atomiques

Pour définir un électron dans une orbitale, on a besoin d'un 4<sup>ème</sup> nombre quantique:

- $m_s$  : nombre quantique de spin:  $\pm 1/2$

*N'est pas associé à la "forme" de l'orbitale,  
mais à la rotation sur lui-même de l'électron*



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

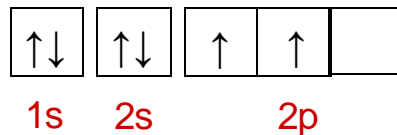
**Carte d'identité de l'électron:  $n, l, m_l, m_s$**

# Arrangement des électrons dans les orbitales

## 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 un seul  $e^-$
- Une orbitale comprend ***au plus deux électrons*** et ces électrons sont nécessairement de spins opposés!

Exemple : configuration électronique du carbone (6 électrons)



↑↓ électrons appariés    ↑ électron célibataire

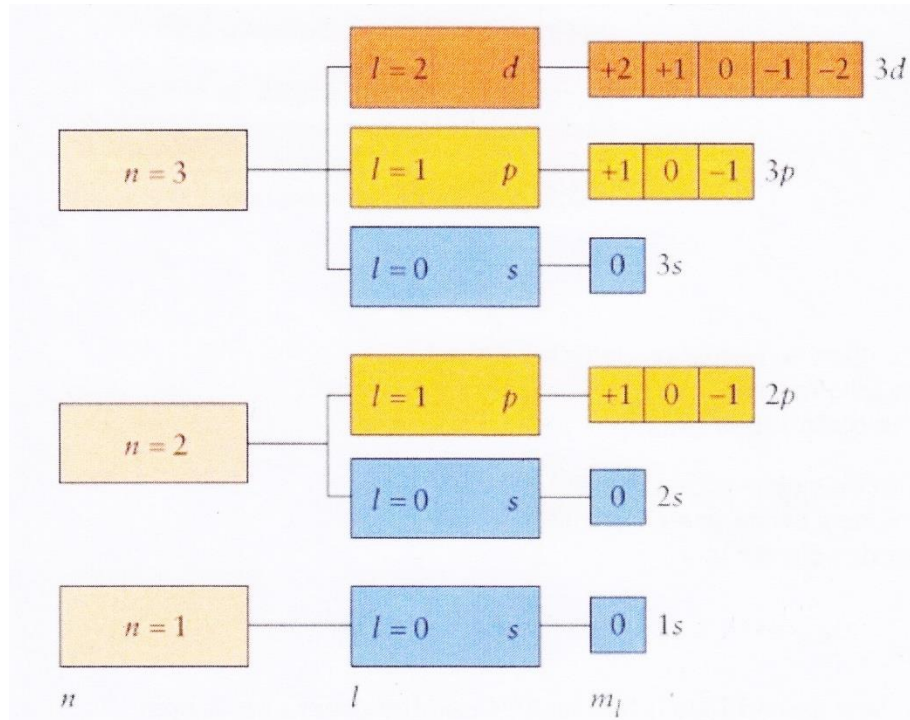
# Couches, sous-couches et orbitales

Couche

Sous-couche

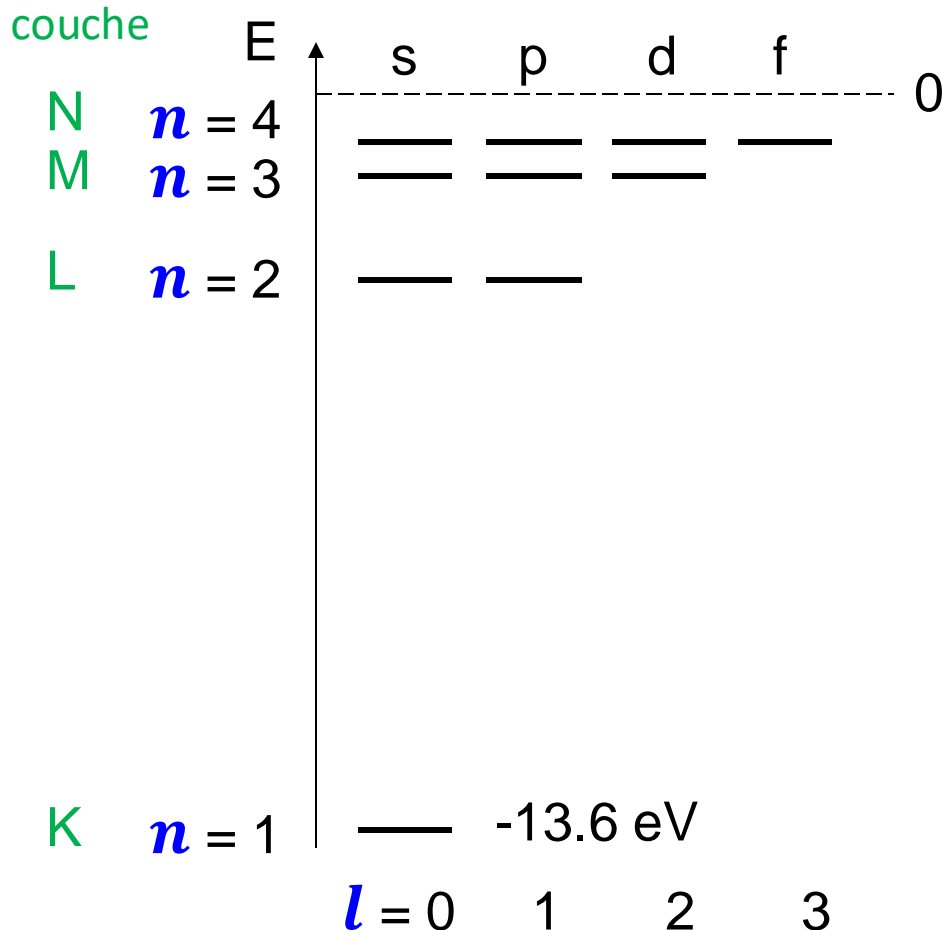
Orbitale

Nombres d'électrons:  $2n^2$



# La structure électronique de l'hydrogène

- Pour l'atome d'hydrogène, tous les états pour un même  $n$  ont la même énergie
- On dit qu'ils sont **dégénérés**

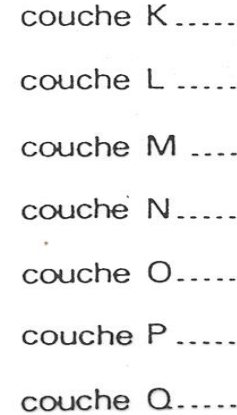


Nombre d'états au niveau  $n$  :

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



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

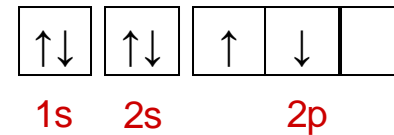
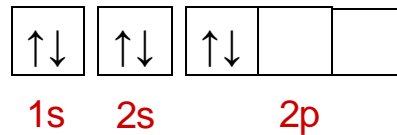
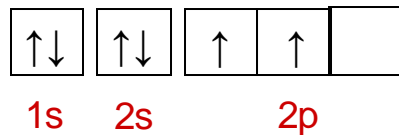


# Arrangement des électrons dans les orbitales

## 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)

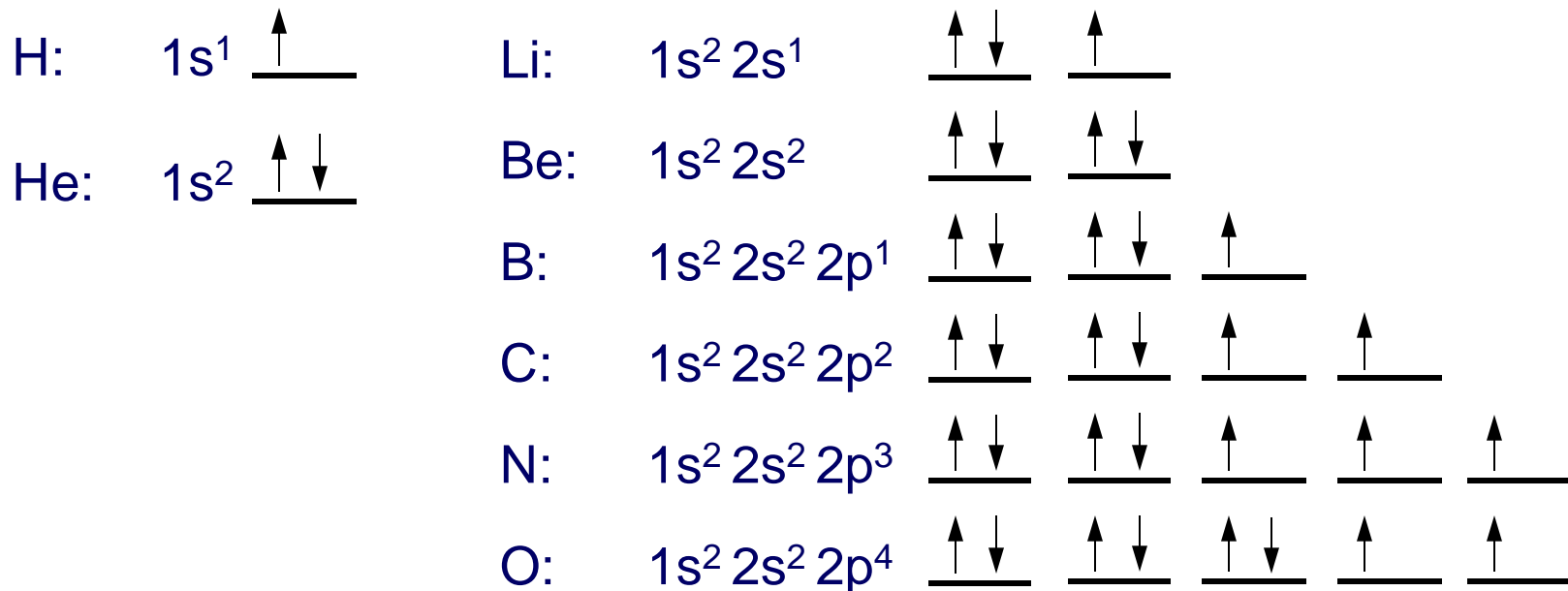


↑↓ électrons appariés    ↑ électron célibataire



# 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  $n$  déterminent en grande partie les propriétés chimiques d'un élément**
- En général, seuls les électrons de valence sont impliqués dans les réactions chimiques; les électrons de «cœur» sont dans des orbitales de plus basse énergie et plus fortement liés!

# À retenir

---

- Connaître la description d'un atome
- Connaître la constante de Planck et la dualité onde – particule du rayonnement électromagnétique
- Savoir faire quelque opération simple avec l'équation de Broglie et le principe d'incertitude de Heisenberg
- Assigner les nombres quantiques aux orbitales atomiques
- Savoir les deux principes (Pauli et Hund) pour la construction du tableau périodique des éléments