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!

<u>Exemple</u> : configuration électronique du carbone (6 électrons)

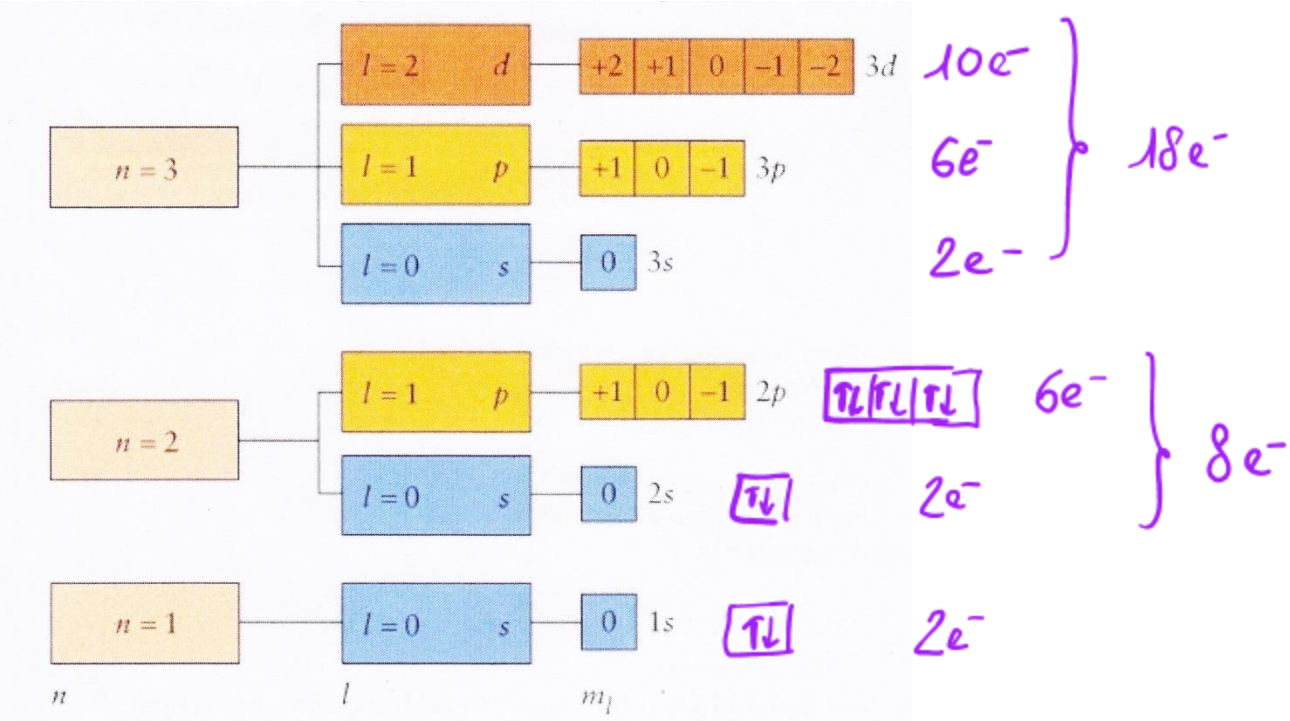
↑↓	↑↓	↑	↑	
1s	2s	2p		

↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

7e⁻ : [↑↓] [↑↓] [↑|↑|↑] → 8e⁻ [↑↓] [↑↓] [↑↓|↑|↑]

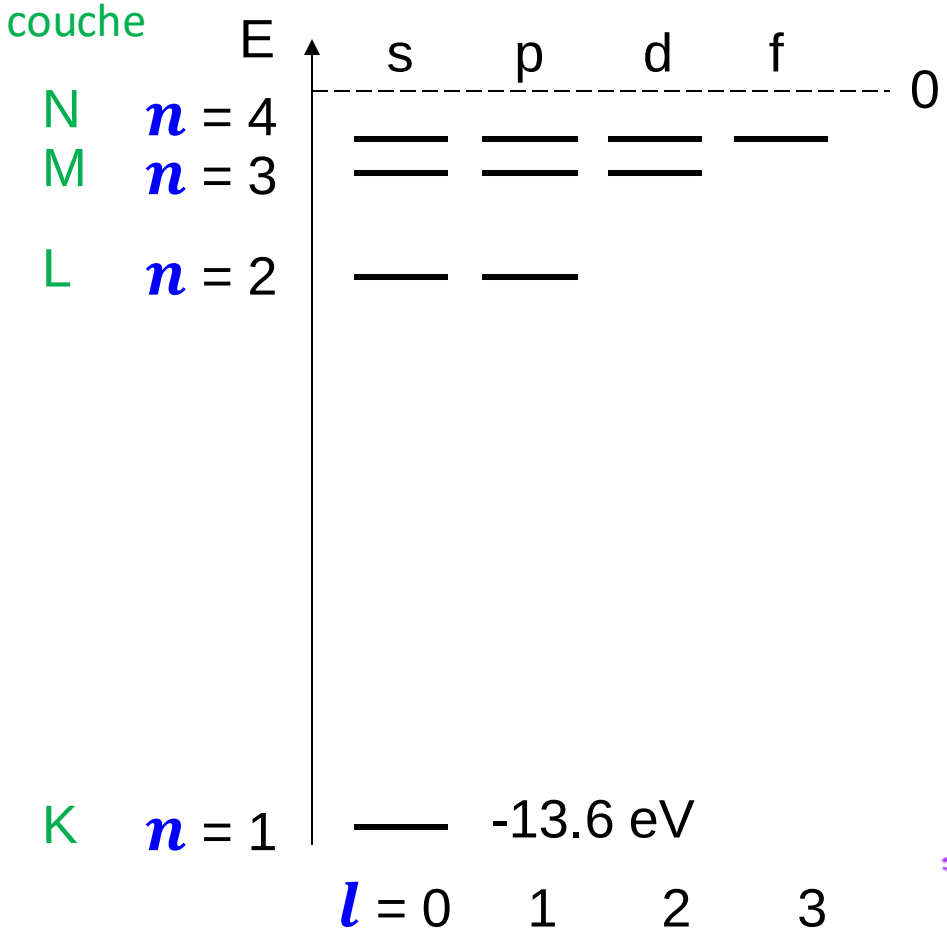
Couches, sous-couches et orbitales

Couche Sous-couche Orbitale **Nombres d'électrons: $2n^2$**

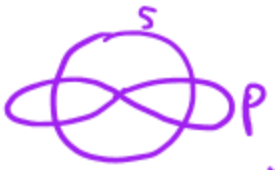


La structure électronique de l'hydrogène

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



Pour un seul e^- :



s, p, d, f ... équivalentes pour un n donné !

Nombre d'états au niveau n :

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

$n = 2 \Rightarrow l = 0,\ l = 1$

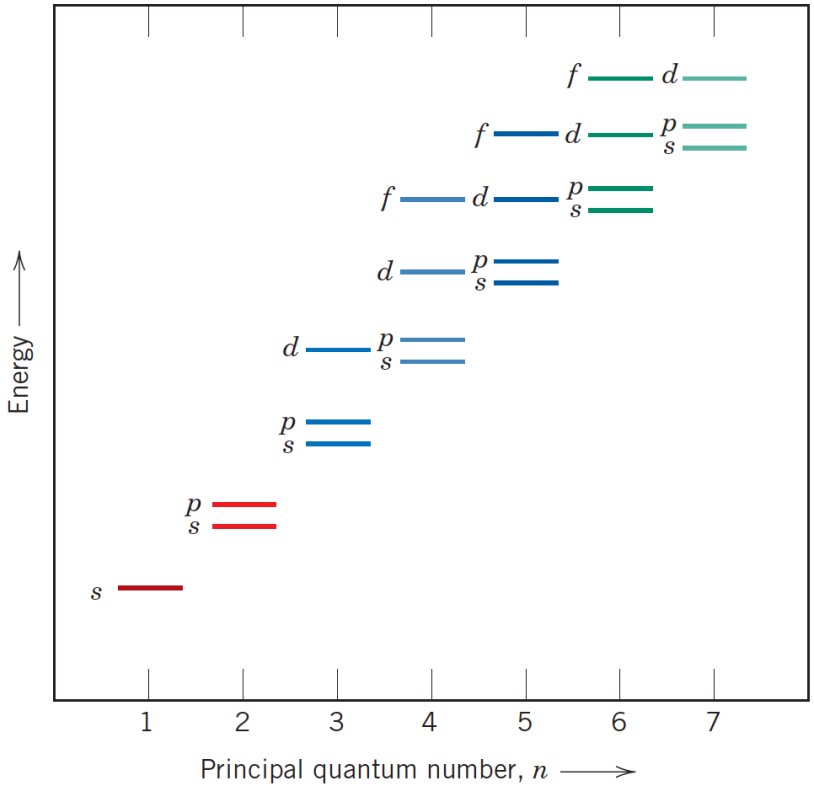
$2\times\left[(2\cdot 0+1)+(2\cdot 1+1)\right] = 8$

$\Rightarrow$ 8 états possibles au niveau $n = 2$

Atomes à plusieurs électrons

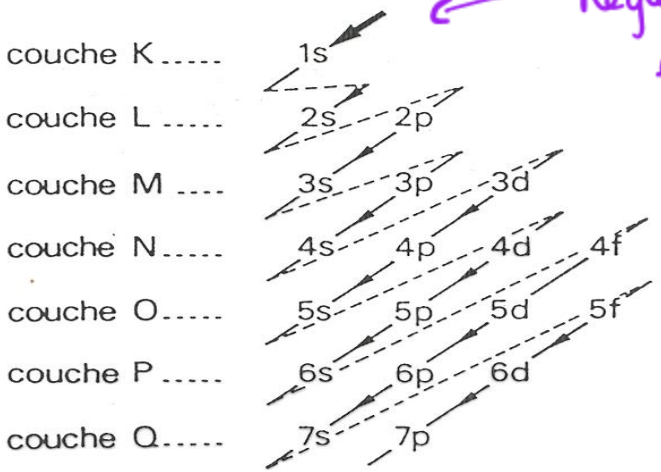
En considérant maintenant les atomes à plus d'un électron, les niveaux énergétiques des différentes orbitales ne sont plus dégénérés et leur ordre est perturbé!

⇒ Les e⁻ voient leur voisins! Effets de répulsions



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

Règle en Z



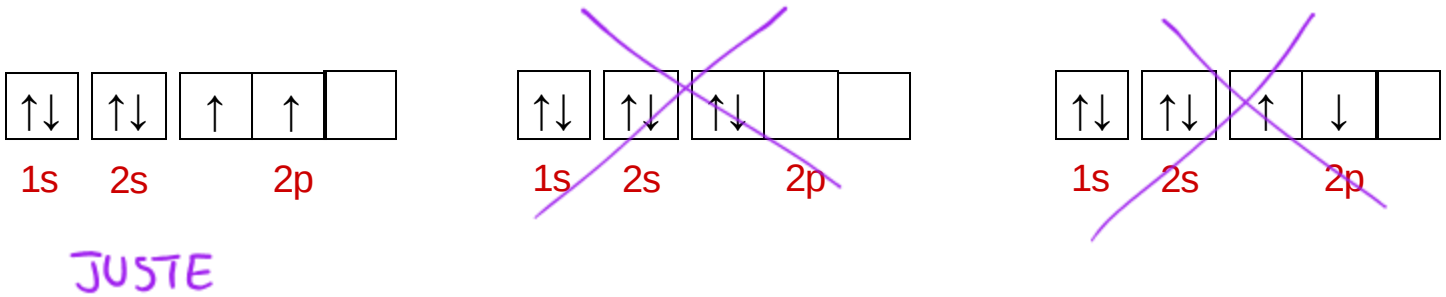
Arrangement des électrons dans les orbitales

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

H: $1s^1$

He: $1s^2$

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

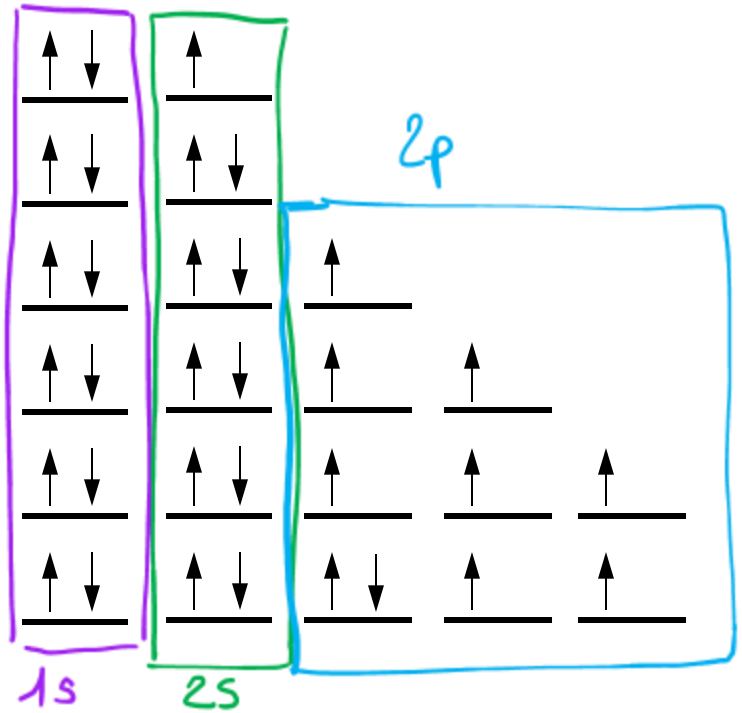
Be: $1s^2\,2s^2$

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

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

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

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



- 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

Le tableau périodique des éléments

Arianna Marchioro

Références: Hill1, chap. 5

Histoire du tableau périodique

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 Z

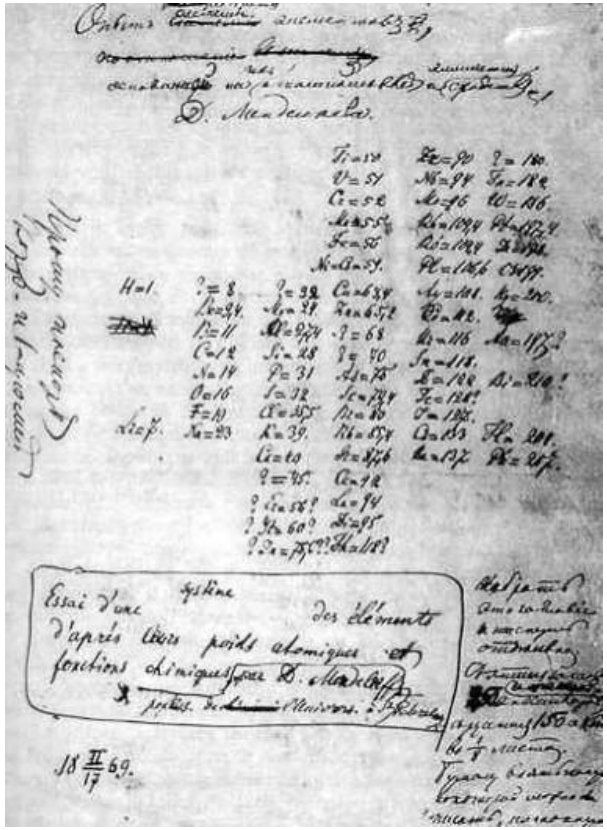


Tableau inversé par rapport au tableau d'aujourd'hui!

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*** dans le noyau
= nombre d'***électrons*** ~~dans le noyau~~ pour un atome neutre

Nombre de masse A = nombre total de ***protons*** et ***neutrons*** du noyau (= les nucléons)

$$^{A}_{Z}X$$

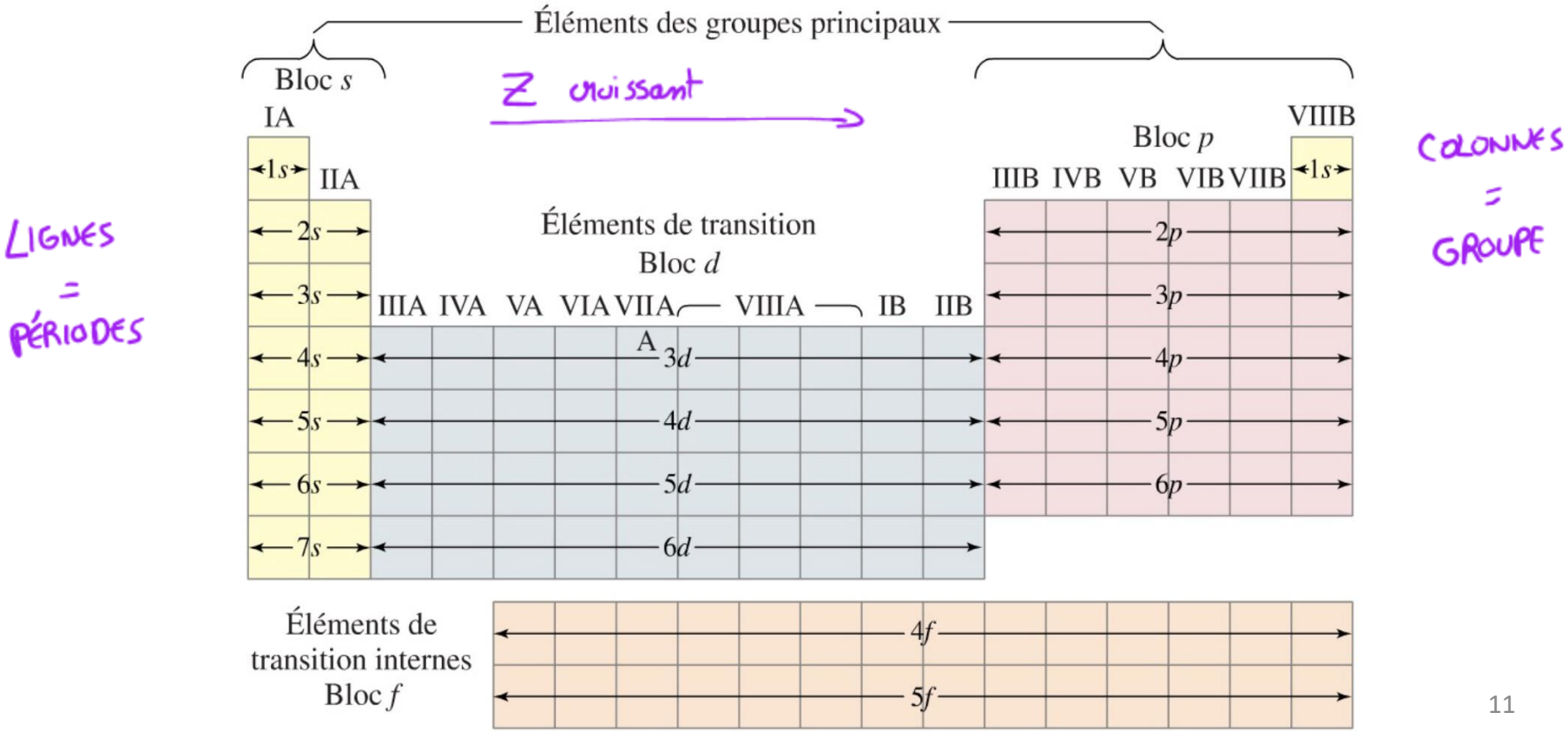
A nombre de masse
Z numéro atomique

A - Z = Nombre de neutrons

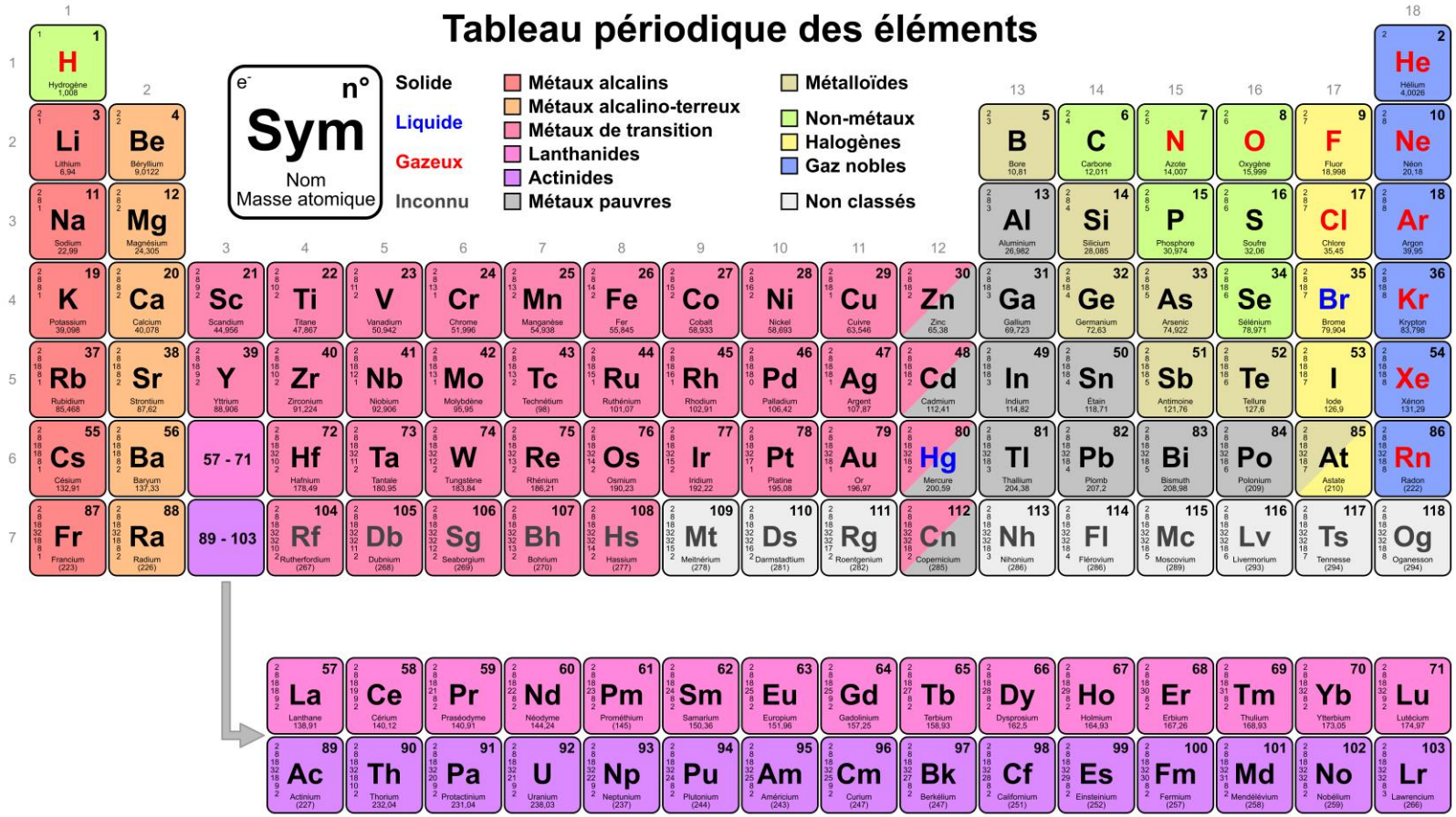
Le tableau périodique des éléments

- 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.

- 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



Le tableau périodique des éléments

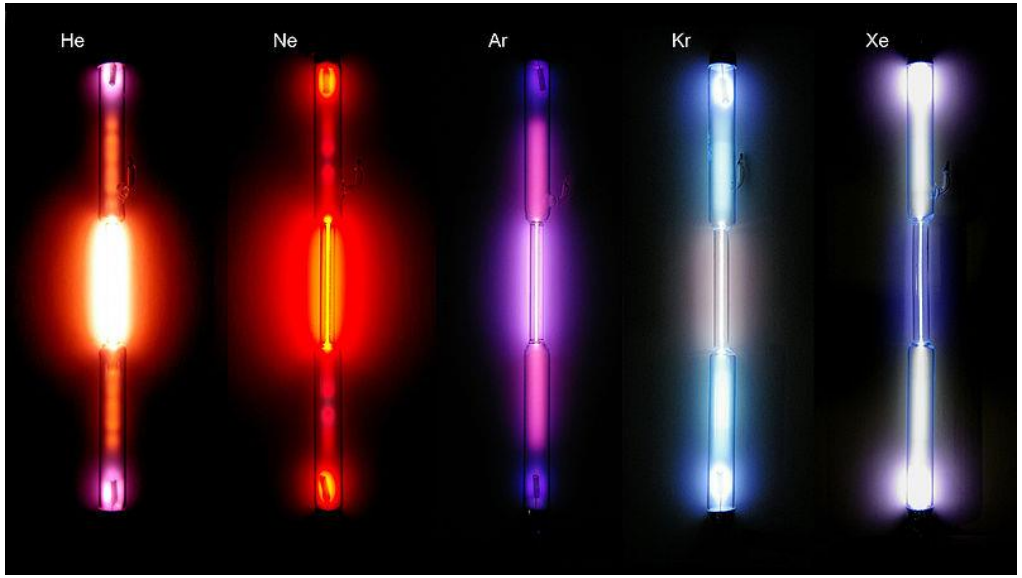


- 94 premiers éléments: existent à l'état naturel - pas d'autre possibilité, pas de case vide!
- Les **colonnes** sont désignées par 1 à 18 ou par des symboles (IA, IIA, IIB…)
- Les lignes sont appelées **périodes**. Elles sont numérotées de 1 à 7
- Bloc f généralement mis en dessous pour des questions de place

Gaz nobles

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)



- **Configuration très stable car couche complète!**
- Les autres éléments vont tendre à ressembler à ces gaz en perdant/gagnant des électrons

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

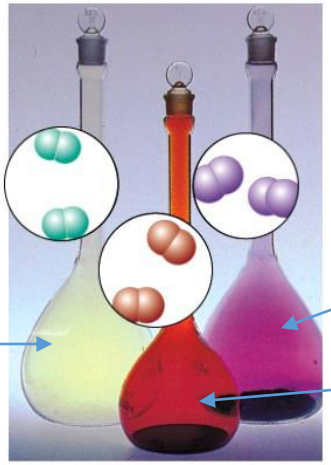
Les NON-MÉTAUX:

groupe du carbone

groupe de l'azote

groupe de l'oxygène

groupe des halogènes :



F - F

Cl - Cl

Iode

solide bleu-noir

Fluor

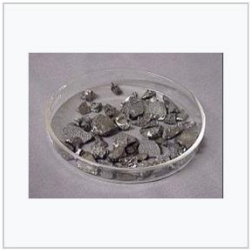
gaz jaune-vert

Brome

liquide rouge-brun

Les semi-métaux

Les SEMI-MÉTAUX (metalloïdes) possèdent certaines propriétés des métaux et des non-métaux.
Les éléments suivants sont considérés comme metalloïdes: B, Si, Ge, As, Sb, Bi, Te, At



Bore $_{5}$B.

Silicium $_{14}$Si.

Germanium $_{32}$Ge.

Arsenic $_{33}$As.

Antimoine $_{51}$Sb.

Tellure $_{52}$Te.

- Présentent un aspect métallique mais sont fragiles et conduisent peu l'électricité
- Ge et Si: Très importants dans l'industrie des semi-conducteurs

Points importants du tableau périodique

- Classification des éléments selon l'ordre croissant du numéro atomique Z

- 94 premiers éléments: existent à l'état naturels - pas d'autre possibilité, pas de case vide!

- Les **colonnes** sont désignées par 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 membres d'une même colonne ont tous le même nombre d'électrons de valence: Ils ont des propriétés semblables

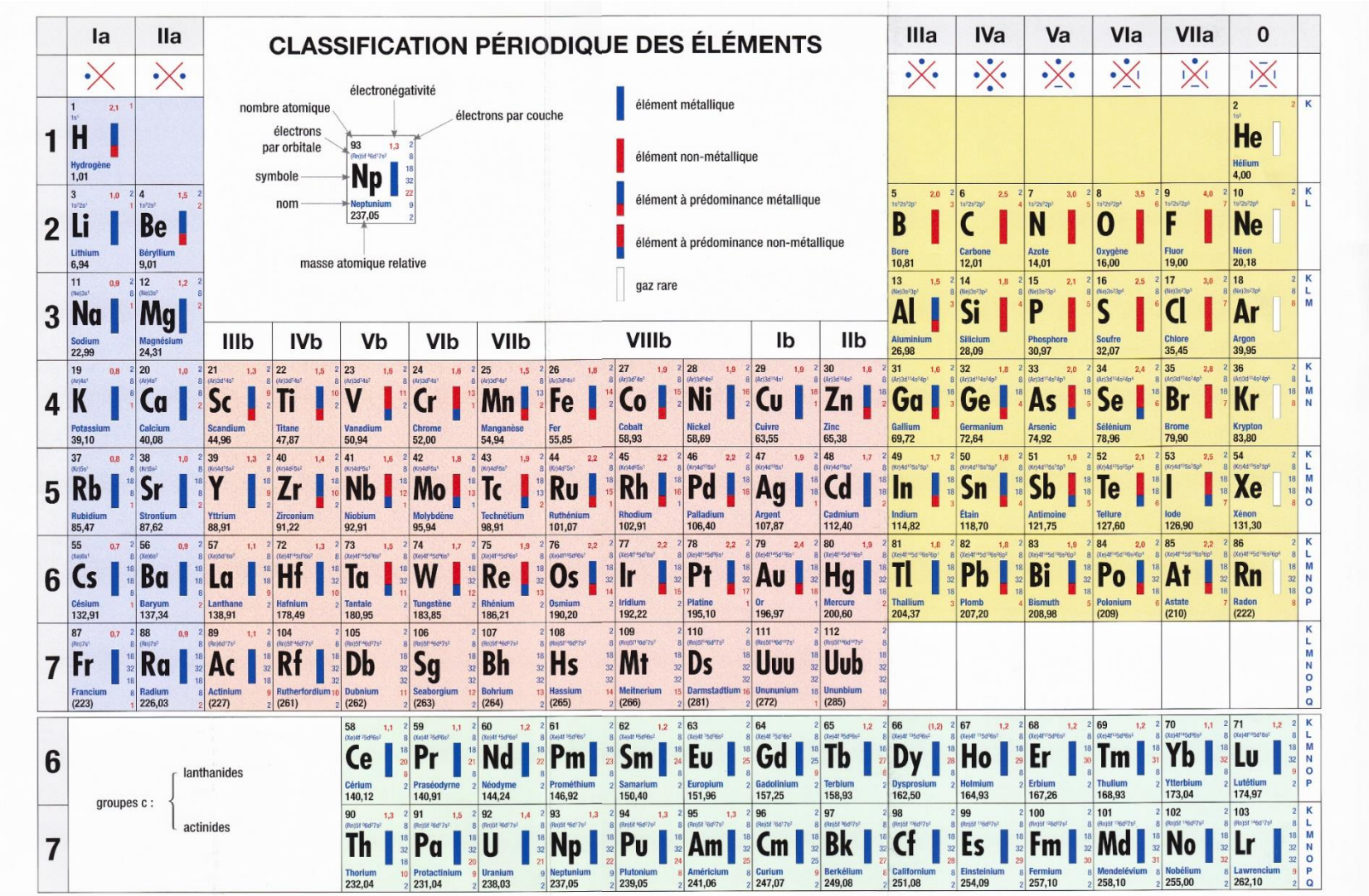
- Les lignes sont appelées **périodes**. Elles sont numérotées de 1 à 7

- Quatre blocs d'éléments (s, p, d, f) en fonction de la nature du niveau en cours de remplissage.

- Les éléments Z = 95 à 118 sont préparés **artificiellement!**

Le tableau périodique des éléments

Tableau un peu plus complet (plus d'informations)



Les isotopes

- La presence de nombres différents de neutrons dans un noyau donne des atomes de différentes masses, même si les atomes appartiennent à un même élément.

- Les isoptopes: atomes ayant le même nombre de protons mais pas le même nombre de neutrons

- Nombre de neutrons = A - Z

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

Nb Neutrons 6 7 8

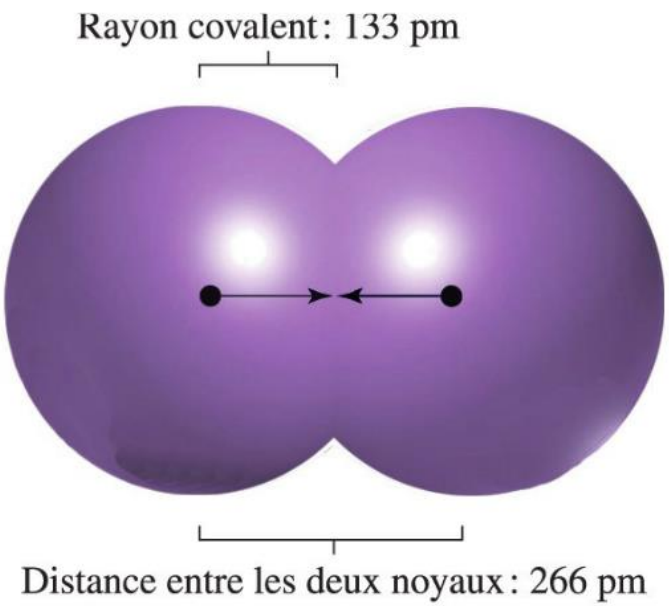
Isotope	Abondance	Gamme de variations
^{12}C	98,93 %	98,853 – 99,037
^{13}C	1,07 %	0,963 – 1,147
^{14}C	Traces	10^{-12}

Rayon atomique

Définitions:

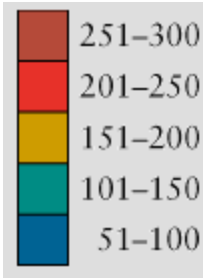
1) Demi-distance entre les centres d'atomes voisins (données expérimentales)

2) Calcul: Mathématiquement l'atome n'est pas fini, on définit une zone où on a 90% de probabilité de trouver les électrons

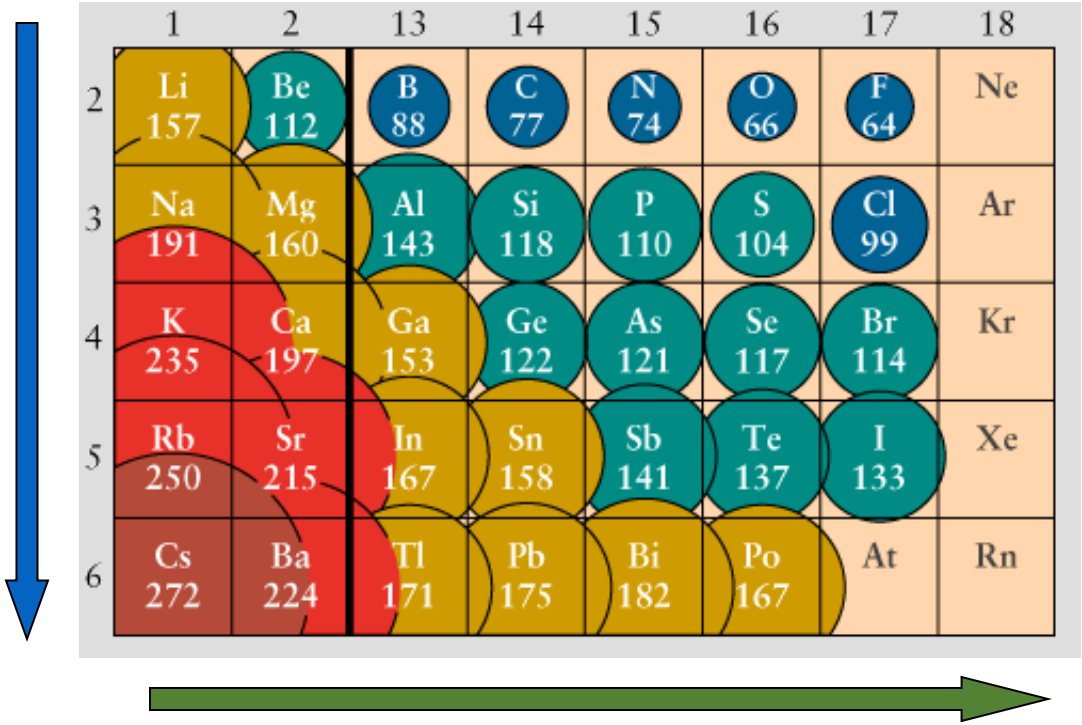


Rayon atomique

Le rayon atomique augmente lorsque l'on passe d'une période à l'autre du fait de l'addition de couches électroniques supplémentaires



Rayon atomique en *pm*



Le rayon atomique diminue du fait que la charge du noyau augmente

→ Les forces d'attraction sur la couche électronique augmentent.

Énergie d'ionisation

Définition:

- Énergie nécessaire pour arracher un électron et former **un ion positif** à l'état gazeux
- Les atomes isolés n'émettent pas d'électrons spontanément! Il faut fournir de l'énergie pour extraire un électron d'un atome, et cette énergie dépend de la taille de l'atome

Énergie d'ionisation

Énergie d'ionisation augmente

Period	1	2	13	14	15	16	17	18
				H 1310				He 2370
2	Li 519	Be 900	B 799	C 1090	N 1400	O 1310	F 1680	Ne 2080
3	Na 494	Mg 736	Al 577	Si 786	P 1011	S 1000	Cl 1255	Ar 1520
4	K 418	Ca 590	Ga 577	Ge 784	As 947	Se 941	Br 1140	Kr 1350
5	Rb 402	Sr 548	In 556	Sn 707	Sb 834	Te 870	I 1008	Xe 1170
6	Cs 376	Ba 502	Tl 590	Pb 716	Bi 703	Po 812	At 1037	Rn 1036

Group

Period

2001–2500
1501–2000
1001–1500
501–1000
1–500

Énergie de *première* ionisation en kJ / mol

Énergie d'ionisation augmente

Affinité électronique

Définition:

- Énergie associée à la fixation d'un électron par un atome en phase gazeuse
- Stabilité relative **de l'anion** par rapport à l'atome neutre
- Lorsqu'un électron s'approche d'un atome neutre: Attraction par le noyau, répulsion par les autres électrons
- Les atomes peuvent libérer de l'énergie en acquérant un électron, ou au contraire il faudra donner de l'énergie pour fixer l'électron
- **Convention: l'affinité électronique est une grandeur négative**

Affinité électronique

$Na + e^- \longrightarrow Na^-$ $\Delta E = -53$ kJ/mol

$Cl + e^- \longrightarrow Cl^-$ $\Delta E = -349$ kJ/mol

$Ne + e^- \longrightarrow Ne^-$ $\Delta E > 0$ **Gaz nobles : Affinité électronique positive**

Affinité électronique augmente (en valeur absolue)

Affinité électronique augmente (valeur absolue)

H −74,5									*He* +21,2
Li −59,8	*Be* −36,7		*B* −17,3	*C* −122,3	*N* +20,1	*O* −141,3	*F* −337,5		*Ne* +28,9
Na −52,2	*Mg* +21,2		*Al* −19,3	*Si* −131	*P* −68,5	*S* −196,8	*Cl* −349,2		*Ar* +35,7
K −45,4	*Ca* +186		*Ga* −35,3	*Ge* −139	*As* −103	*Se* −203	*Br* −324,1		*Kr* +40,5
Rb −37,6	*Sr* +145		*In* −19,3	*Sn* −99,5	*Sb* −90,5	*Te* −189	*I* −295,2		*Xe* +43,5
Sc +70,5	*Ti* +1,93	*V* −60,8	*Cr* −93,5	*Mn* +93,5	*Fe* −44.5	*Co* −102	*Ni* −156	*Cu* −173	*Zn* −8.7
Y +38,6	*Zr* −43,5	*Nb* −109	*Mo* −114	*Tc* −95,5	*Ru* −145	*Rh* −162	*Pd* −98,5	*Ag* −193	*Cd* +26,1

…Mais plus d'irrégularités que pour l'énergie d'ionisation!

Résumé des tendances du tableau périodique

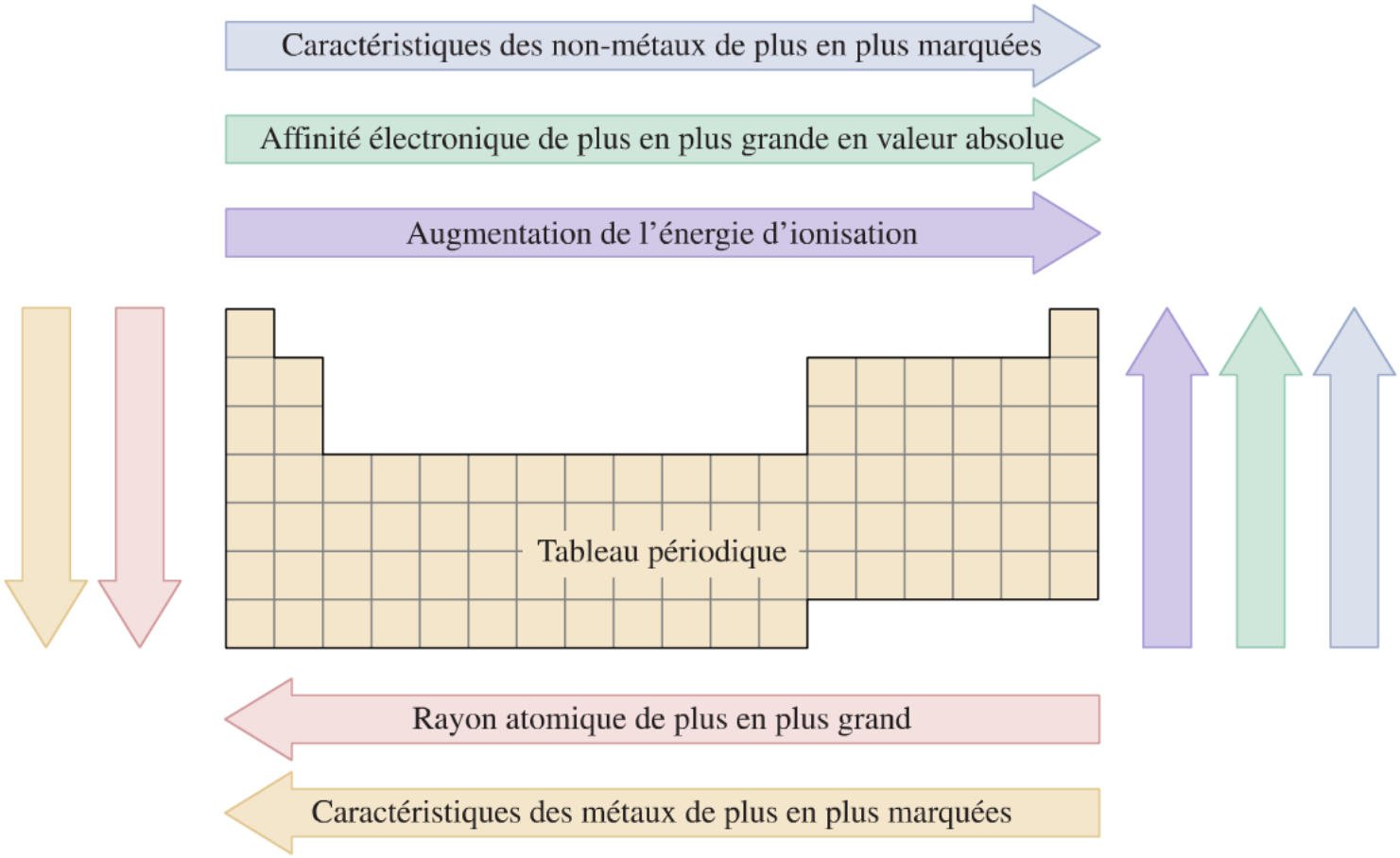


Tableau périodique interactif: https://periodic-table.rsc.org/