

COURS DE CHIMIE GENERALE

INTRODUCTION

Cours de Chimie Générale

Cours destiné aux étudiants du CMS



COURS

Vendredi : 13h15-15h: CO3

EXERCICES

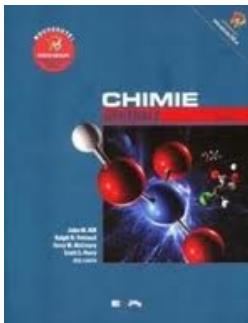
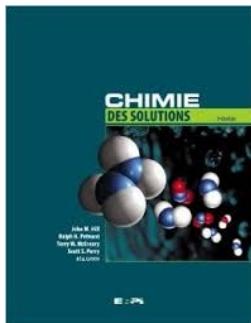
Vendredi : 15h15-16h

Supports de cours

Support de cours

- A télécharger depuis le site <https://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=14906>
enregistrement automatique (identification personnelle EPFL)
enregistrement manuel (si nécessaire) : cours PREPA-12
clé d'accès: **genchem2021**

Ouvrages de référence



Chimie Générale
Chimie des solutions
(Petrucci, Hill) PEARSON, ERPI, 2008



Principes de chimie
(Tro) PEARSON, ERPI, 2015

Programme du cours

1. Atomistique

modèle atomique, classification périodique des éléments.

2. Liaisons chimiques

différents types de liaison, hybridation, géométries de molécules,

3. Stoechiométrie (conservation de la matière)

Quantités chimiques. réaction équilibrée, réaction complète, réactions redox.

3. Equilibres Chimiques (conservation de l'énergie)

énergie chimique, éléments de thermodynamique, équilibres chimiques

4. Acides et bases

modèle de Bronsted, pK_a et pK_b , solutions tampon, titrage.

5. Cinétique chimique

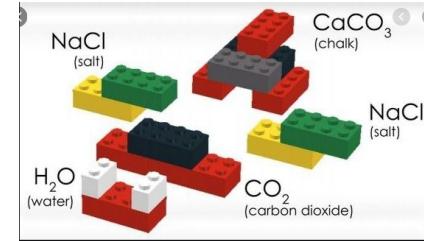
vitesse de réaction, ordre de réaction, énergie d'activation,, catalyse.

COURS DE CHIMIE GENERALE

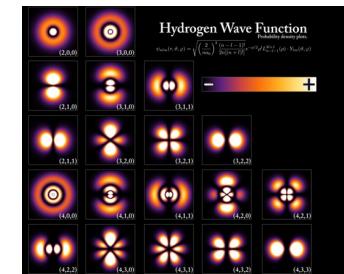
1. ATOMISTIQUE

Atomistique

Les molécules sont constituées d'atomes qui partagent des électrons.



Les liaisons chimiques dépendent des électrons externes (et donc de la configuration électronique) des atomes

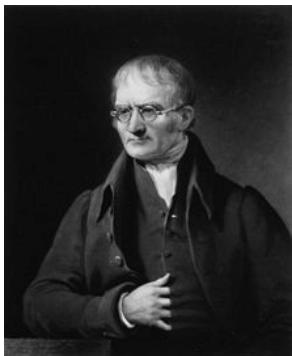


Les propriétés périodiques des atomes sont illustrées dans un tableau

Les pionniers de l'hypothèse atomique



Au 4ème siècle avant notre ère, le philosophe Démocrite pense que la matière est formée de petites particules indivisibles. Il a nommé ces particules atomes (du grec *atomos* : indivisible).

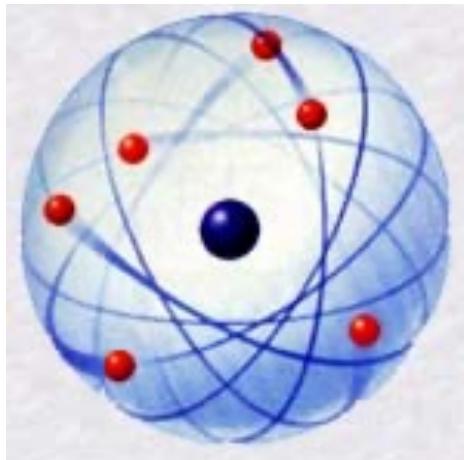


John Dalton
1766-1844

Question de base: pourquoi l'eau a-t-elle toujours la même masse et le même rapport de masse
1g Hydrogène pour 8 g d'Oxygène

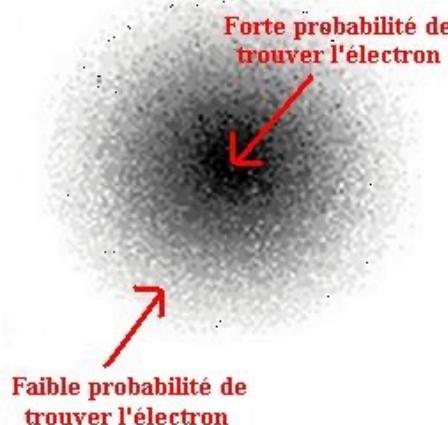
Quel est le modèle actuel de l'atome?

1



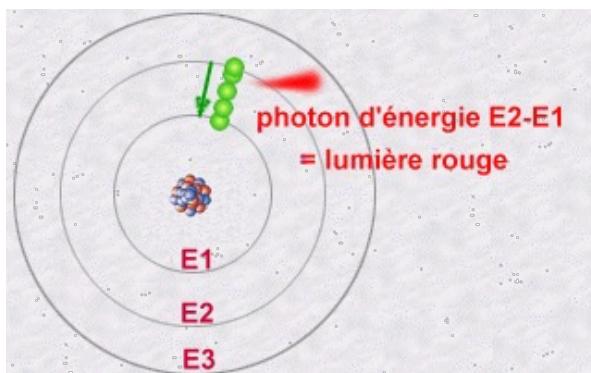
électron tourne autour du noyau
de manière aléatoire

2



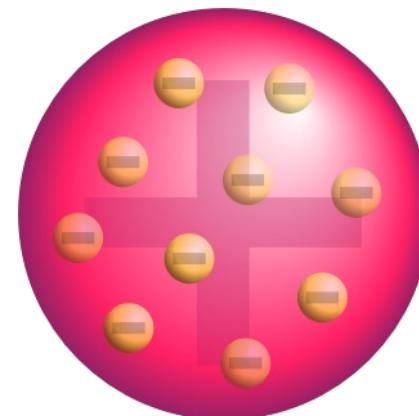
On ne sait pas précisément où est l'électron,
Modèle mathématique

3



Électron tourne autour du noyau
selon des orbites précises correspondant
à des niveaux énergétiques

4

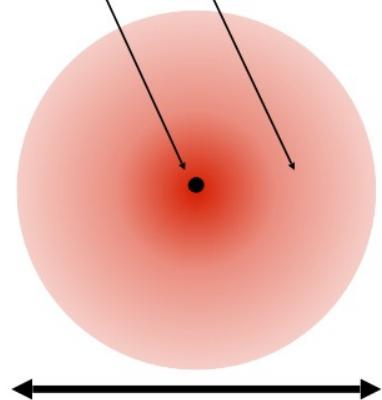


Charge positive distribuée uniformément sur une sphère
Électrons distribués de manière à contrebalancer
cette charge

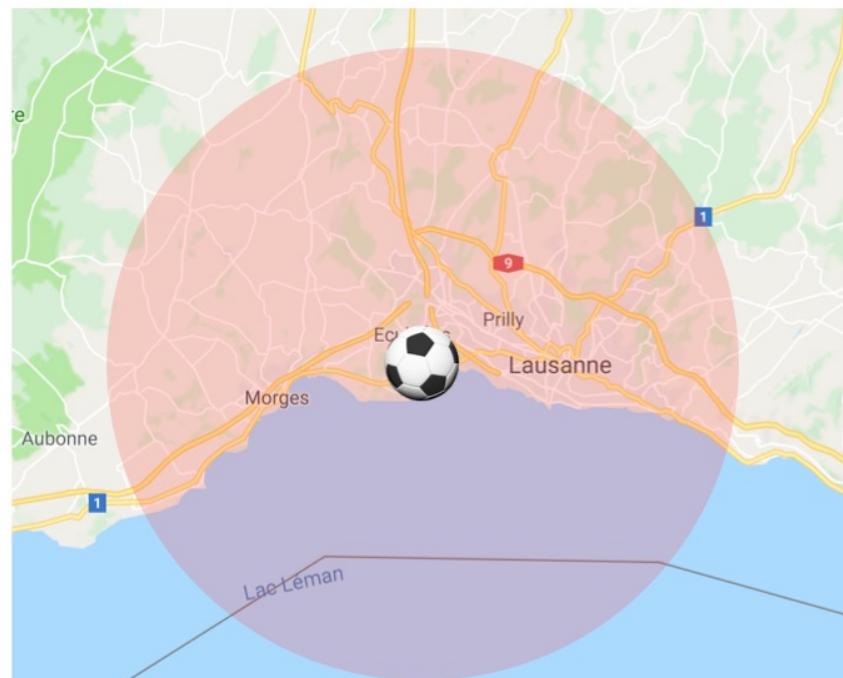
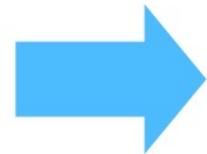
L'atome est constitué d'un noyau et d'un nuage électronique

Noyau: Nuage électronique

ca. 1 fm
 10^{-15} m



Diameter:
ca. 1 Ångstrom
 $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$



L'atome est plus que la somme de ses constituants

TABLE 2.1 Comparison of the Proton, Neutron, and Electron

Particle	Charge	Mass (amu)
Proton	Positive (1+)	1.0073
Neutron	None (neutral)	1.0087
Electron	Negative (1-)	5.486×10^{-4}

unité de masse atomique (u): 1/12 masse d'un atome de ^{12}C

$$1 u = 1.66054 \times 10^{-24} \text{ g}$$

Un atome de carbone ^{12}C est constitué de 6 protons, 6 neutrons, 6 électrons
Sa masse est égale à $12 u$. Elle est inférieure à la somme des masses de ses constituants.

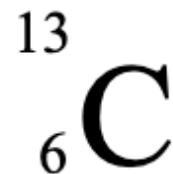
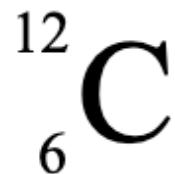
La masse manquante (Δm) correspond aux énergies de liaison (principalement dans le noyau) et peut être calculée via l'équation relativiste: $\Delta m = \Delta E / c^2$

Les atomes d'un élément

- Les protons, neutrons, électrons sont les mêmes pour chaque élément
- Un élément est caractérisé par son nombre de protons (numéro atomique)
- Les isotopes d'un même élément diffèrent par leur nombre de neutrons



A nombre de masse
Z numéro atomique



$$A - Z = \text{nombre de neutrons: } 6$$

$$7$$

La réactivité chimique dépend des électrons
(et en particulier des électrons les moins bien stabilisés par le noyau)

Question



L'uranium 238 contient

? Protons

? Neutrons

? Electrons

Dualité onde/particule de l'électron

Déviation d'un faisceau d'électrons dans un tube cathodique à l'aide d'un champ électromagnétique

→ Comportement d'une particule avec une certaine charge et une certaine masse

Conception classique

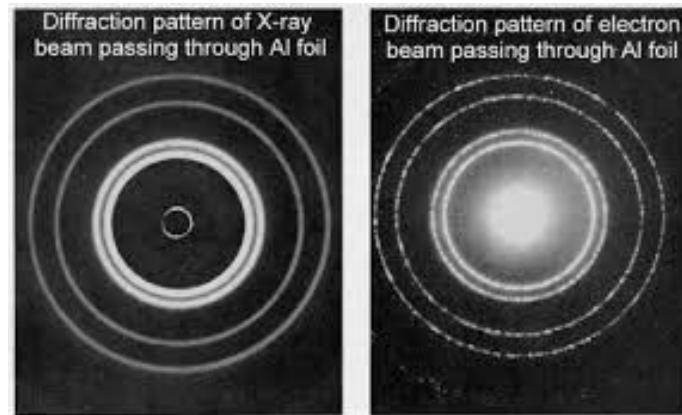
Passage d'un faisceau d'électrons à travers un arrangement régulier d'atomes

→ Comportement d'une onde (interférence)

Nouveauté quantique

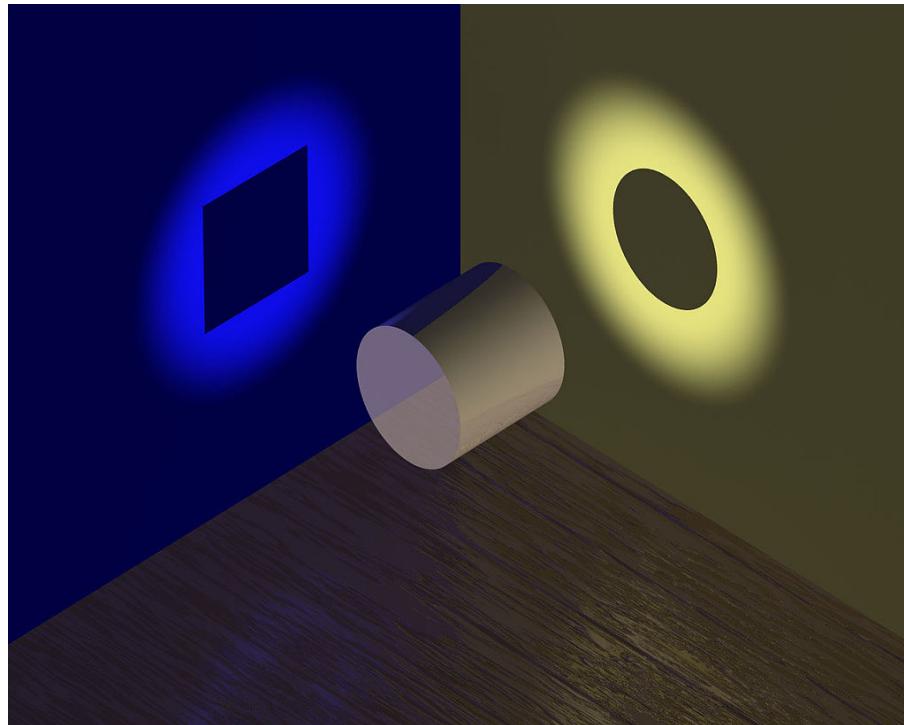


J.J Thomson Nobel prize 1906



G. P Thomson Nobel prize 1937
C. Davisson L. Germer

Dualité onde-particule de l'électron: une analogie



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.

Structure de l'atome – conception (semi)quantique

Travaux de Niels Bohr

- l'énergie d'un électron est quantifiée : niveaux d'énergie de l'atome

Valeurs permises
des niveaux d'énergie

$$E_n = - \frac{R_H}{n^2}$$

$$R_H = me^4/8(\epsilon_0 h)^2$$

$$R_H = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$$

ou 13.6 eV



Niels Bohr

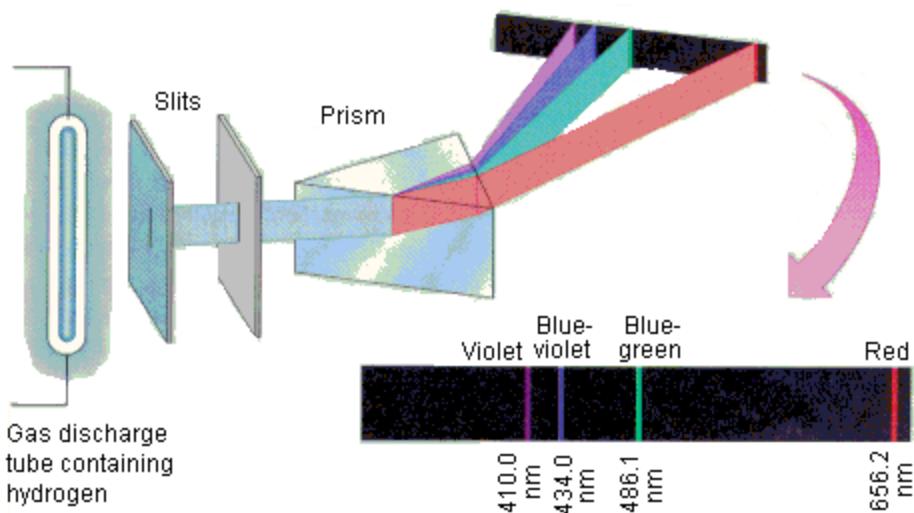
Prix Nobel de Physique, 1922

$n = \text{nombre entier } 1, 2, 3\dots$

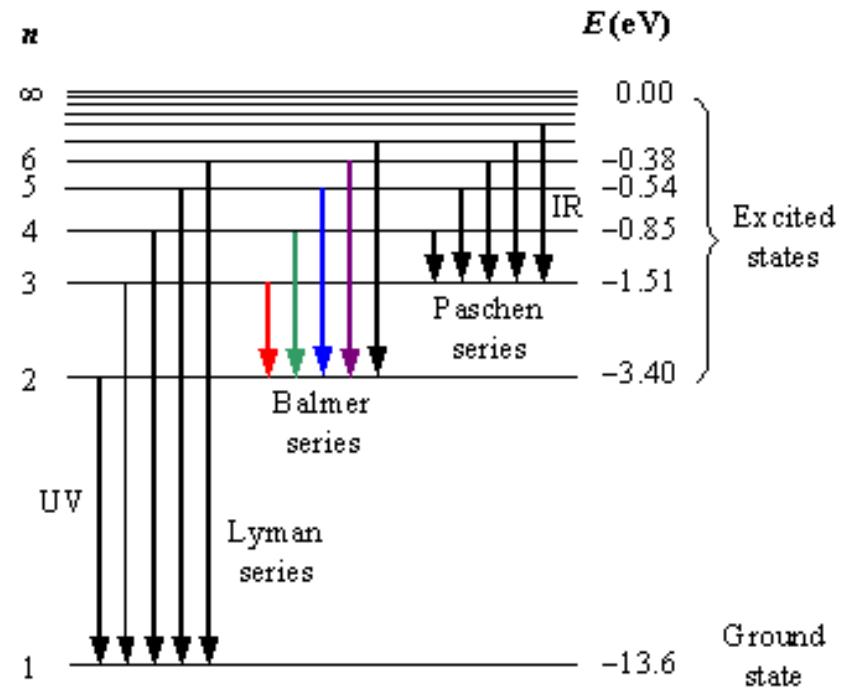
- **Postulat** : tant qu'un électron demeure à un niveau d'énergie donné, il ne peut pas émettre d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique
- Chaque valeur possible pour l'énergie correspond à une trajectoire circulaire et une distance noyau-électron
- **Le plus bas niveau d'énergie correspond à $n = 1$ et à l'orbite la plus proche du noyau**
- Sans excitation, l'électron se trouve au niveau énergétique le plus bas = **état fondamental**
- Changements d'énergie de l'électron : **état excité**, ne se font que par sauts discontinus

Modèle de Bohr (pour l'hydrogène)

Radiations émises par des atomes d'hydrogène excités

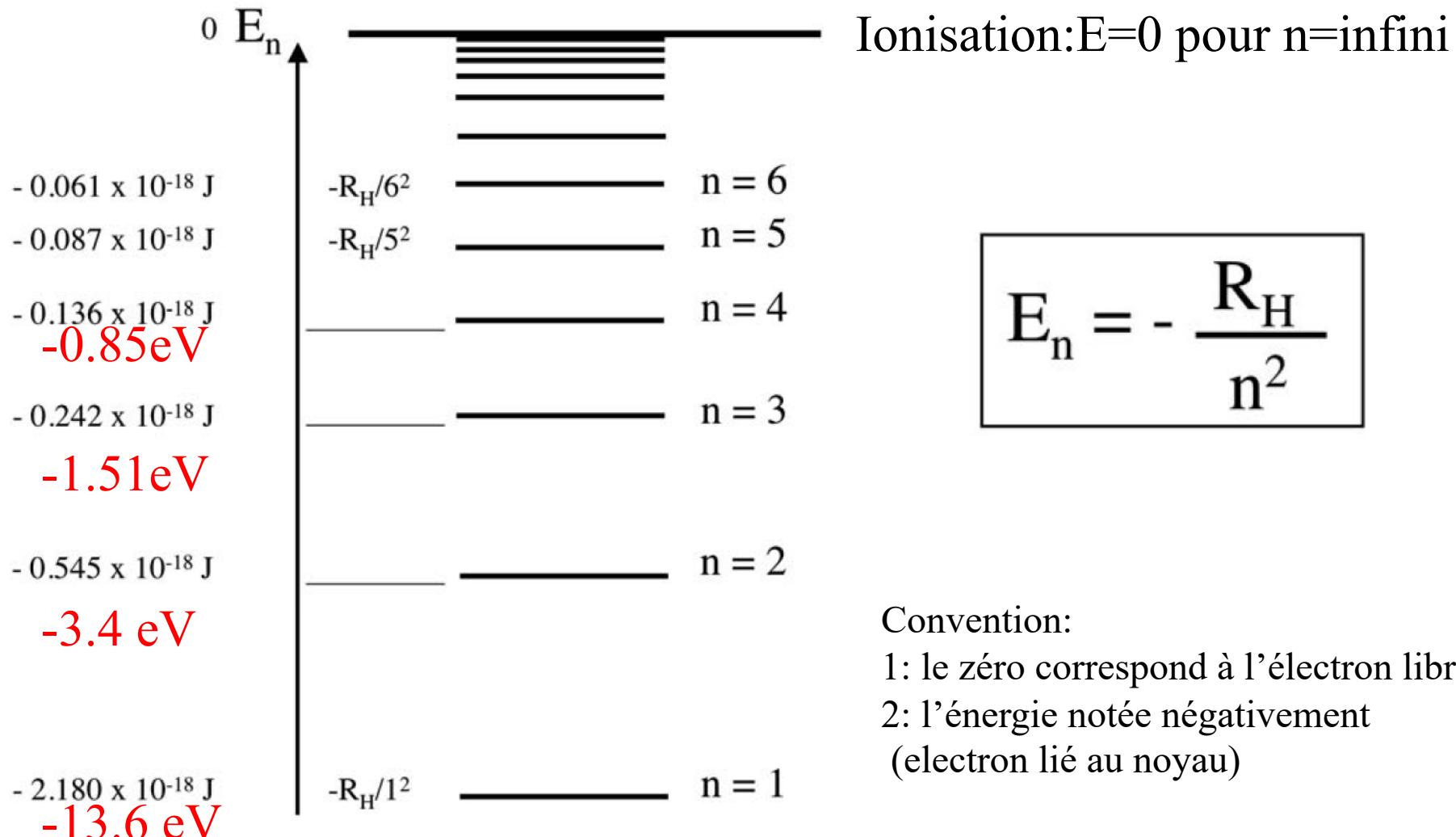


$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$



Spectre de l'hydrogène atomique

Modèle (semi-)quantique de Bohr pour l'atome (1913)



Convention:

- 1: le zéro correspond à l'électron libre
- 2: l'énergie notée négativement
(électron lié au noyau)

Les niveaux les plus stables correspondent aux orbites proches du noyau et ont une faible énergie (grande énergie négative)

QUESTION?

L'énergie de l'état fondamental ($n=1$) d'un atome H est de -13.6 eV.

L'énergie nécessaire pour l'excitation de l'état fondamental à l'état $n=2$ est de:

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

- 1: $1/2 \cdot 13.6 \text{ eV}$
- 2: $3/4 \cdot 13.6 \text{ eV}$
- 3: $1/4 \cdot 13.6 \text{ eV}$
- 4: $-3/4 \cdot 13.6 \text{ eV}$

Modèle de Bohr (résumé)

- 1) on a un atome stable (sans explication physique: postulat)
- 2) L'énergie d'un électron est quantifiée
- 3) Bonne (mais imparfaite) explication du spectre de l'atome d'hydrogène et des atomes avec un seul électron
(correction coulombique pour ions He^+ , Li^{2+} etc. : $E = -Z^2 R_H / n^2$; Z: numéro atomique)

$$E_n = -\frac{Z^2 R_H}{n^2}$$

z: numéro atomique (1 pour H)
n: nombre quantique principal

Limitations:

- 1) N'explique pas la structure fine des spectres d'hydrogène (manque une information: le spin)
- 2) Ne s'applique pas aux atomes avec plusieurs électrons
(les interactions entre électrons décrivées par une valeur effective de Z)

$$E_n = -\frac{Z_{\text{eff}}^2 R_H}{n^2}$$

Différences entre le modèle de Bohr et le modèle de Schrödinger

Bohr

L'électron est décrit comme une particule avec une trajectoire précise.

Lois de la mécanique classique selon Newton.

Case quantique: définit seulement le niveau d'énergie de l'électron (orbite)

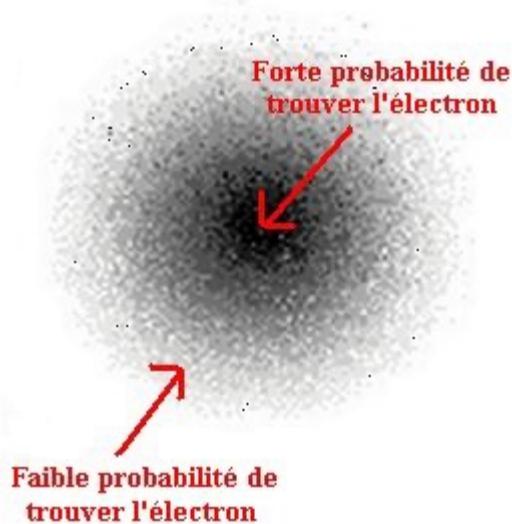
Schrödinger

L'électron est décrit par une fonction d'onde Ψ liée à la probabilité de présence.

Lois de la mécanique quantique selon Schrödinger.

Orbitale: définit à la fois le niveau d'énergie et la probabilité de présence de l'électron.

Modèle ondulatoire de l'atome



- ▶ **Interprétation de Max Born:** la probabilité de trouver un électron à un point donné de l'espace est proportionnelle à Ψ^2 .
- ▶ Fonction d'onde d'amplitude élevée: **Forte probabilité de présence**
- ▶ Fonction d'onde de faible amplitude: **Faible probabilité de présence**

- ▶ **Orbitale atomique (solution de l'équation de Schrödinger)**

Fonction d'onde Ψ à laquelle correspond un ensemble de **3 nombres quantiques** (n, l, m_l)



Représentation en trois dimensions d'une région d'un atome où il existe une probabilité élevée de trouver des électrons

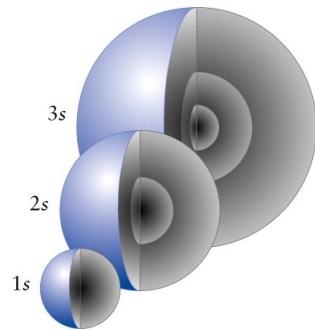
Pour décrire un électron dans une orbitale il faut un 4^{ème} nombre quantique: le spin
Qui peut prendre une valeur de $+1/2$ ou $-1/2$ pour un électron

Les orbitales s,p,d,

→ orbitale atomique s

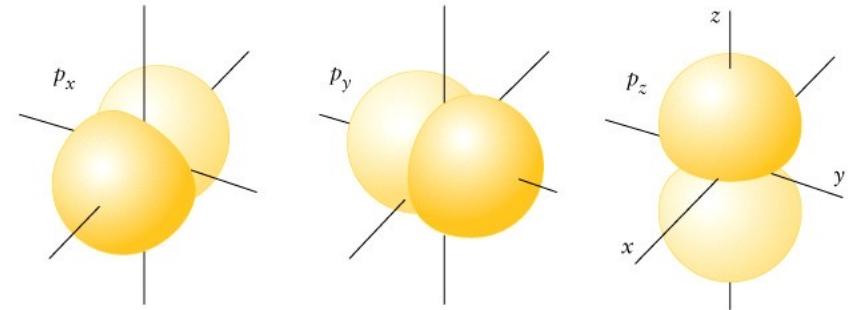
Nuage sphérique dont la densité diminue lorsque la distance au noyau augmente

Nœuds pour 2s , 3s, etc.



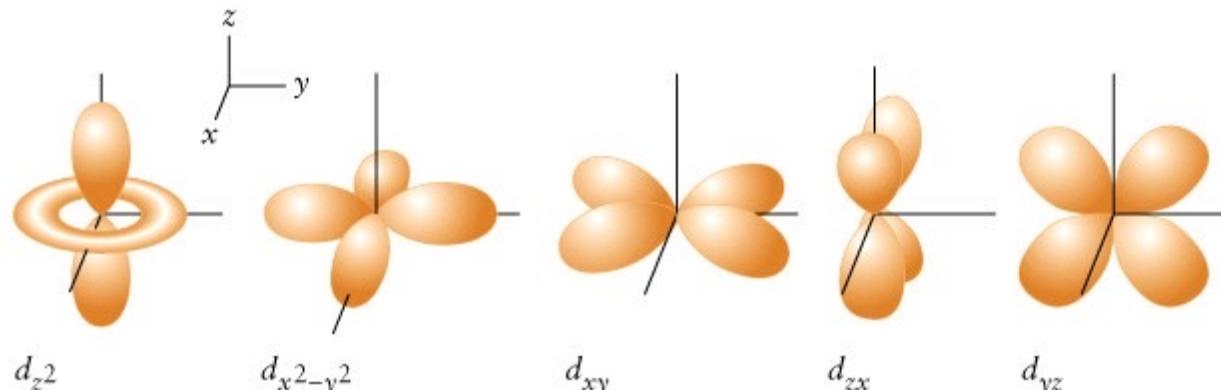
→ orbitales atomiques p

Nuage avec deux lobes de part et d'autre du noyau. Trois orientations perpendiculaires possibles (p_x , p_y , p_z).



Formes plus complexes. Pas de densité électronique au niveau du noyau.

orbitales atomiques d



Configuration électronique des atomes

Configuration électronique d'un atome

- décrit la distribution des électrons dans ses diverses orbitales

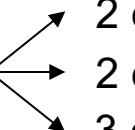
Notation spdf

Niveau d'énergie n ► désigné par un nombre

Type d'orbitale l ► désigné par une lettre

Exposant ► nombre d'électrons se trouvant dans l'orbitale représentée

$1s^2 2s^2 2p^3$



- 2 électrons dans l'orbitale 1s
- 2 électrons dans l'orbitale 2s
- 3 électrons dans les orbitales 2p

Notation spdf étendue

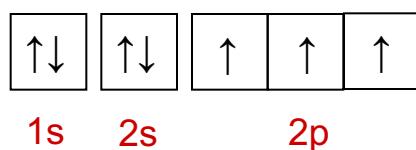
► distribution des électrons dans les orbitales

► Représentation des «**cases quantiques**»

Orbitales d'un même type ► représentées par des carrés

Electrons ► représentées par des flèches

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



Répartition des électrons autour du noyau

- Répartition en couches $n = 1, 2, 3, \dots$ et sous couches (s, p, d, \dots)
- Le remplissage des couches et sous couches se fait selon la séquence d'énergie croissante (principe de construction => Aufbau)

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < \dots$$

- L'état fondamental s'établit à l'aide de:
 - **La règle d'exclusion de Pauli** : Une orbitale peut contenir au maximum deux électrons de spins opposés
 - **La règle de Hund** : L'arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles.

Configuration électronique

Electrons 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

Quelques exemples

C (carbone), $Z = 6$

$1s^2 2s^2 2p^2$

4 électrons de valence

N (azote), $Z = 7$

$1s^2 2s^2 2p^3$

5 électrons de valence

O (oxygène), $Z = 8$

$1s^2 2s^2 2p^4$

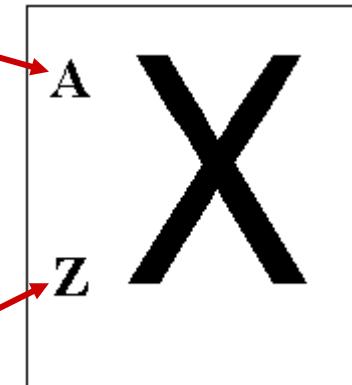
6 électrons de valence

Principe d'exclusion de Pauli

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

Nombre de masse
(nbre nucléons)
neutrons, protons =
= nucléons

Numéro atomique



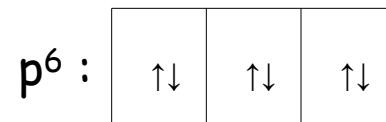
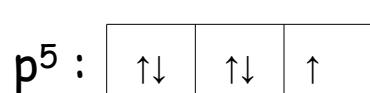
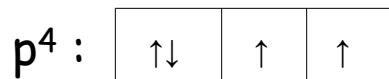
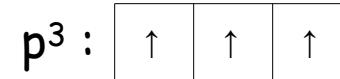
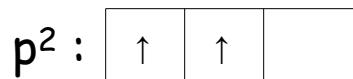
Wolfgang Pauli

Numéro atomique **Z** : nombre de protons du noyau **Z** est également égal au nombre d'électron (atome de charge nulle)

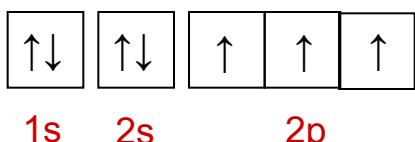
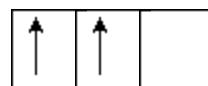
Règle de Hund

L' arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles.

Les 3 orbitales atomiques **p** ($l = 1$) se remplissent donc ainsi :

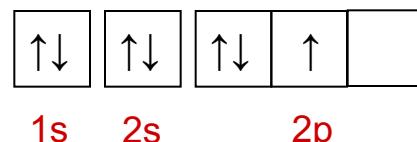


Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



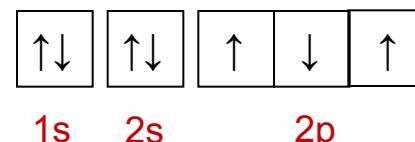
1s 2s 2p

exact



1s 2s 2p

inexact



1s 2s 2p

inexact

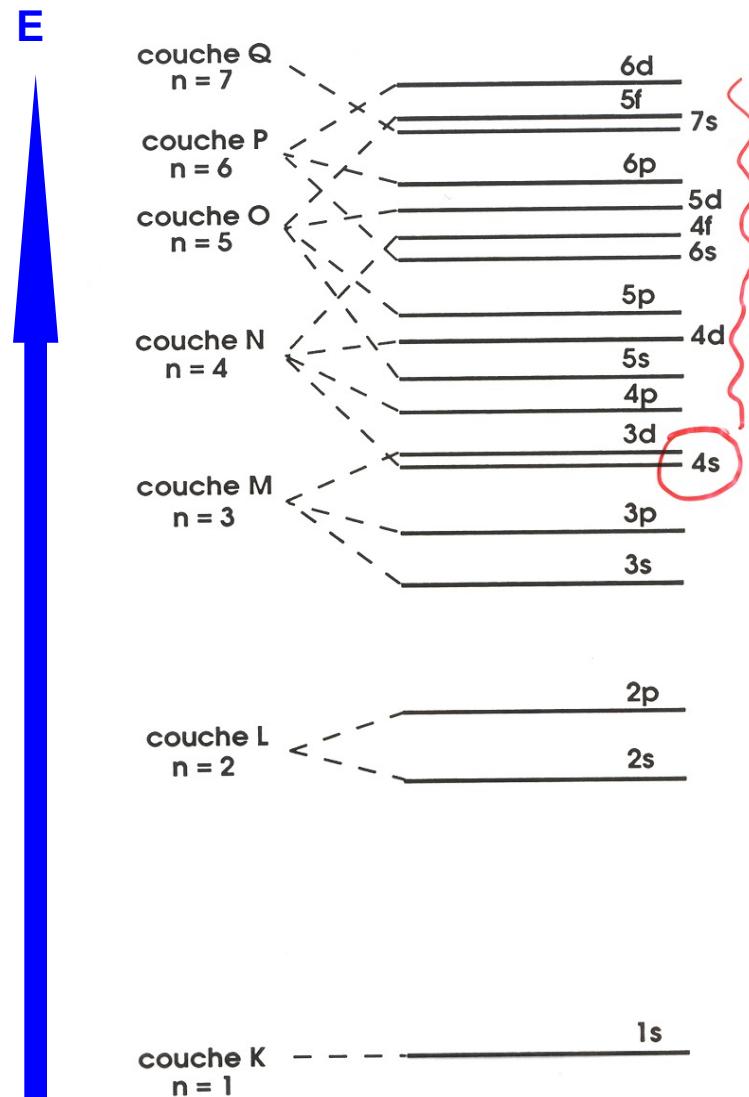
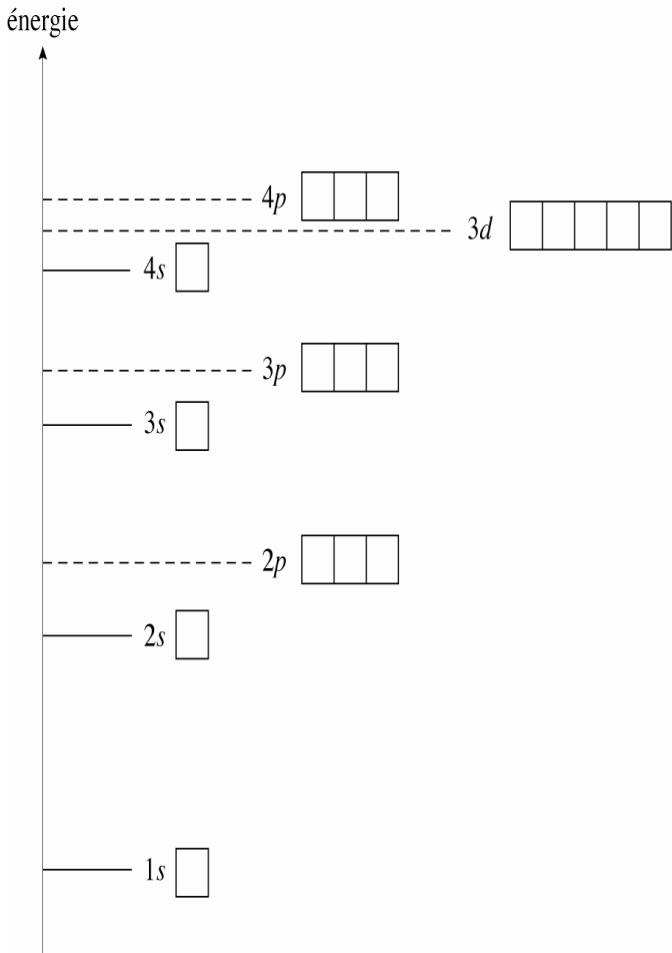
Friedrich Hund
(1896-1997)

$\uparrow\downarrow$ électrons appariés

\uparrow électron célibataire

Configuration électronique des éléments

A l'état fondamental, les électrons occupent les orbitales correspondant aux plus bas niveaux d'énergie possible



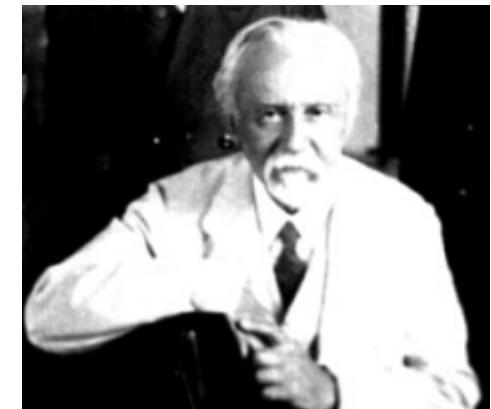
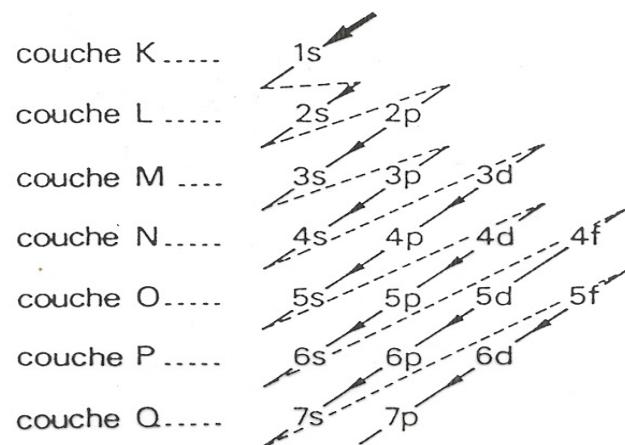
Règle de Klechkowsky ou principe de stabilité:

Les électrons d'un atome (ou d'un ion) occupent dans l'état fondamental les orbitales atomiques de plus basse énergie, c'est-à-dire dans l'ordre :

1s - 2s - 2p - 3s - 3p - 4s - 3d - 4p - 5s - 4d - 5p - 6s - 4f - 5d - 6p - 7s - 5f - 6d - 7p - 8s - ...

Configuration électronique des éléments

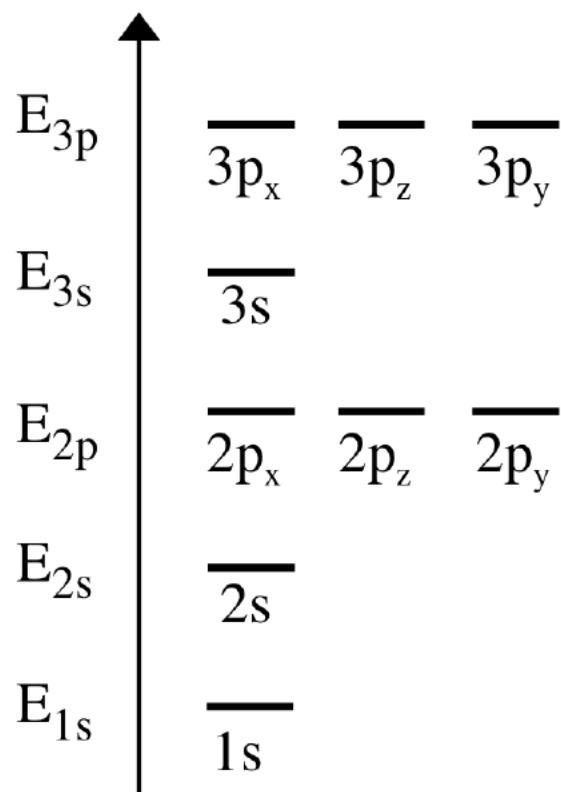
Procédure pour établir la configuration électronique des éléments dans leur état fondamental



Vsevolod Klechkowski
(1900-1972)

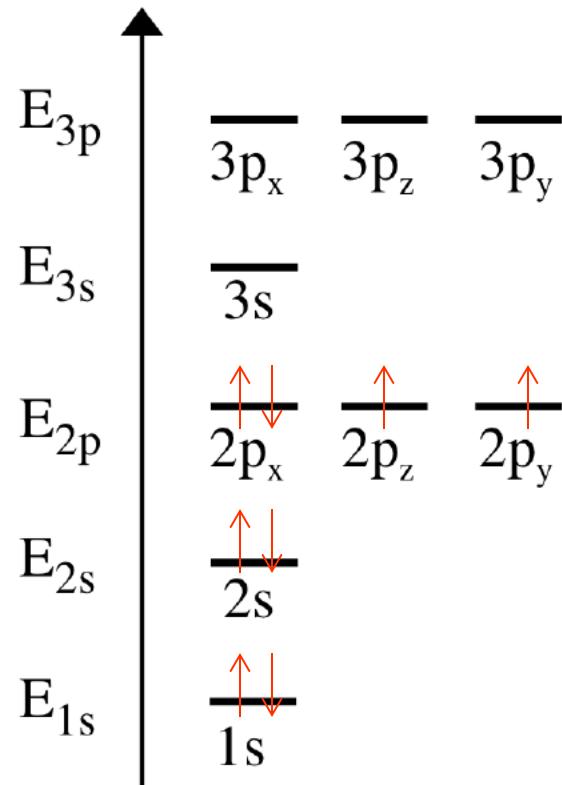
EXERCICE :

écrire la configuration électronique de l'oxygène (z=8)



EXERCICE :

écrire la configuration électronique de l'oxygène ($z=8$)



Configuration : $1s^2 2s^2 2p^4$

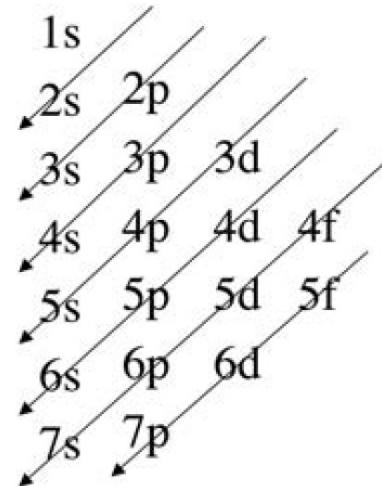
2 électrons célibataires

Configuration électronique et tableau périodique

1s	Découpage du tableau périodique suivant le remplissage des sous-couches		1s
2s		2p	
3s		3p	
*	3d	4p	
4s		5p	
5s		6p	
*	5d		
6s	*		
7s	*		
*	4f		
*	5f		

1s ¹	1s ²
1s ² 2s ²	1s ² 2s ² 2p ⁶
1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

*Les électrons occupent l'orbitale 4s avant l'orbitale 3d (l'atome a une énergie plus basse lorsque l'électron occupe l'orbitale 4s plutôt que 3d).



élément	configuration électronique
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	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
P	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
S	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Cl	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Ar	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Quelques exceptions à la règle de l'Aufbau

Pour décrire l'état fondamental, on ajoute (ou enlève) chaque électron de manière à avoir l'énergie la plus basse (l'atome le plus stable)

Des exceptions proviennent dans les cas où les niveaux d'énergies des orbitales sont très proches et où des effets secondaires peuvent devenir dominants.

1^{er} type d'exception:

Les orbitales d à moitié ou complètement remplies sont plus stables que prévu et peuvent induire des exceptions à la règle de l'Aufbau

Exemples:

Cr: [Ar] 4s¹ 3d⁵ (au lieu de 4s² 3d⁴)

Cu: [Ar] 4s¹ 3d¹⁰ (au lieu de 4s² 3d⁹)

**PAS BESOIN DE CONNAITRE CES EXCEPTIONS,
IL FAUT JUSTE SAVOIR QUE CELA EXISTE**

Exceptions au principe de l'Aufbau

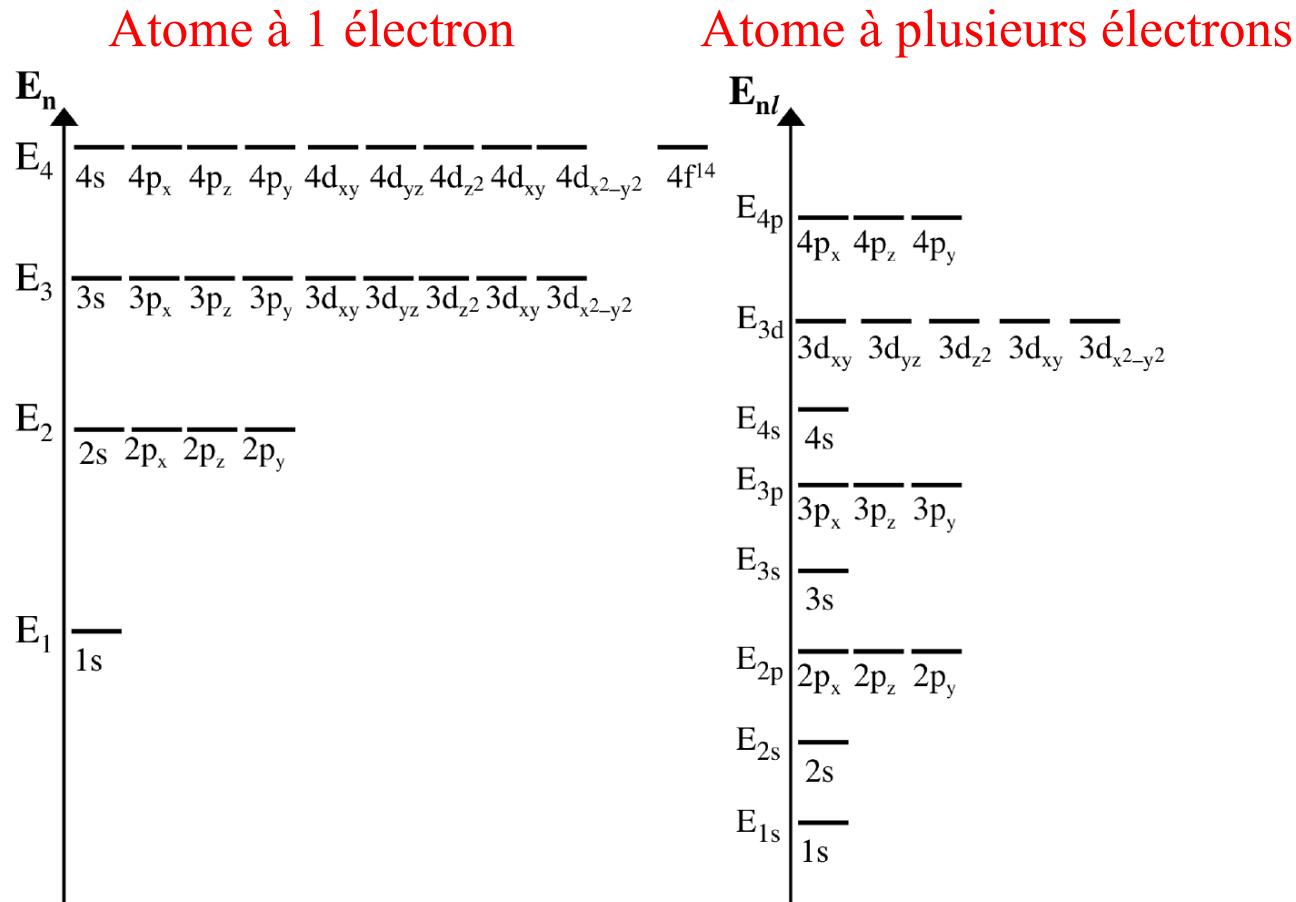
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18			
1	1 H Hydrogène $1s^1$																	2 He Hélium $1s^2$			
2	3 Li Lithium $1s^2 2s^1$	4 Be Béryllium $1s^2 2s^2$			6 C Carbone $1s^2 2s^2 2p^2$	Numéro atomique symbole Nom de l'élément Configuration électronique				5 B Bore $1s^2 2s^1 2p^1$	6 C Carbone $1s^2 2s^2 2p^2$	7 N Azote $1s^2 2s^2 2p^3$	8 O Oxygène $1s^2 2s^2 2p^4$	9 F Fluor $1s^2 2s^2 2p^5$	10 Ne Néon $1s^2 2s^2 2p^6$						
3	11 Na Sodium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	12 Mg Magnésium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$								13 Al Aluminium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	14 Si Silicium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	15 P Phosphore $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	16 S Soufre $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	17 Cl Chlore $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	18 Ar Argon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$						
4	19 K Potassium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$	20 Ca Calcium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$	21 Sc Scandium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$	22 Ti Titane $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 4s^2$	23 V Vénéradium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$	24 Cr Chrome $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$	25 Mn Manganèse $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$	26 Fe Fer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$	27 Co Cobalt $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$	28 Ni Nickel $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$	29 Cu Cuivre $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^1$	30 Zn Zinc $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2$	31 Ga Gallium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^1$	32 Ge Germanium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^2$	33 As Arsenic $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^3$	34 Se Sélénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^4$	35 Br Brome $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^5$	36 Kr Krypton $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6$			
5	37 Rb Rubidium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 4p^1$	38 Sr Strontium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^1$	39 Y Yttrium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^1$	40 Zr Zirconium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$	41 Nb Niobium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2$	42 Mo Molybdène $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$	43 Tc Technétium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^1$	44 Ru Ruthénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$	45 Rh Rhodium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$	46 Pd Palladium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2$	47 Ag Argent $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^1$	48 Cd Cadmium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^2$	49 In Indium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^3$	50 Sn Étain $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^4$	51 Sb Antimoine $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^5$	52 Te Tellure $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6$	53 I Iode $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^7$	54 Xe Xénon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 4f^14$			
6	55 Cs Césium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^1$	56 Ba Baryum $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^2$	57 La Lanthane $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^2$	*	72 Hf Hafnium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2 4p^6$	73 Ta Tantale $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6$	74 W Tungstène $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6$	75 Re Rhénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6$	76 Os Osmium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2 4p^6$	77 Ir Iridium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2 4p^6$	78 Pt Ptatne $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6$	79 Au Or $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^1$	80 Hg Méroue $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2$	81 Tl Thallium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2 5p^1$	82 Pb Plomb $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2 5p^2$	83 Bi Bismuth $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2 5p^3$	84 Po Polonium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2 5p^4$	85 At Astatate $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2 5p^5$	86 Rn Radon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 5s^2 5p^6$		
7	87 Fr Francium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^6$	88 Ra Radium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^6$	89 Ac Actinium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^6$	*	104 Rf Rutherfordium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^1$	105 Db Dubnium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^2$	106 Sg Seaborgium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^3$	107 Bh Bohrium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^4$	108 Hs Hassium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^5$	109 Mt Molterium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^6$	110 Ds Demstadium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^7$	111 Rg Roentgenium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^8$	112 Cn Copernicium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^9$	113 Uut Ununtrium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^10$	114 F Florium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^11$	115 Uup Ununpentium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^12$	116 Lv Livermorium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^13$	117 Uus Ununseptium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^14$	118 Uuo Ununoctium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^6 5f^15$		

Exceptions
à l'Aufbau

Supposé

58 Ce Cérium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^1$	59 Pr Praséodyme $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^2$	60 Nd Néodyme $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^3$	61 Pm Prométhium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^4$	62 Sm Samarium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^5$	63 Eu Europium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^6$	64 Gd Gadolinium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^7$	65 Tb Terbium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^8$	66 Dy Dysprosium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^9$	67 Ho Holmium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^10$	68 Er Erbium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^11$	69 Tm Thulium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^12$	70 Yb Ytterbium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^13$	71 Lu Luftépium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 4f^14$	*
90 Th Thorium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^1$	91 Pa Protactinium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^2$	92 U Uranium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^3$	93 Np Neptunium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^4$	94 Pu Plutonium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^5$	95 Am Américium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^6$	96 Cm Curium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^7$	97 Bk Berkélium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^8$	98 Cf Californium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^9$	99 Es Einsteinium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^10$	100 Fm Fermium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^11$	101 Md Mendélévium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^12$	102 No Nobélium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^13$	103 Lr Lawrencium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6 5f^14$	*

Comparaison entre atomes hydrogénoides et atomes à plusieurs électrons



Classification périodique des éléments

- 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 (électrons sur la dernière couche électronique de l'atome). Ils ont des propriétés semblables.

Tendances périodiques

Rayon atomique

Energie d'ionisation
Affinité électronique

Electronégativité
Pouvoir oxydant
Caractère métallique

Structure atomique
données expérimentales
obtenues dans un gaz

Liaison chimique
molécule

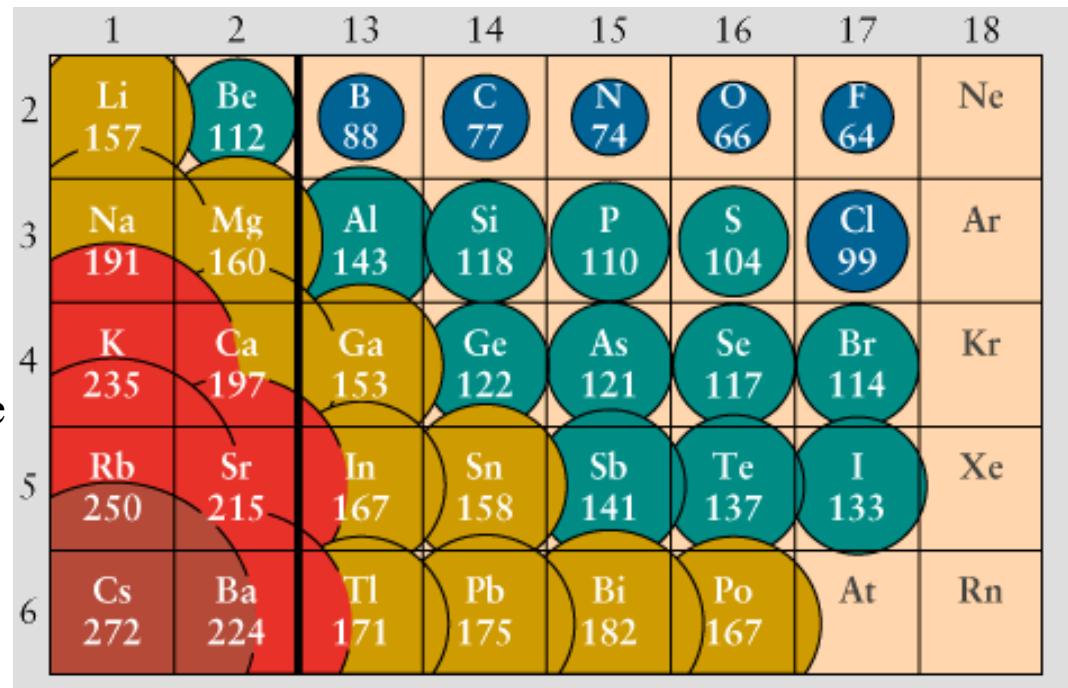
Plusieurs définitions:

- Calcul : 90% probabilité de trouver l'électron)
- Distance expérimentale entre deux atomes

Rayon atomique augmente de haut en bas le long d'un groupe

$$r \propto \frac{n^2}{Z_{eff}}$$

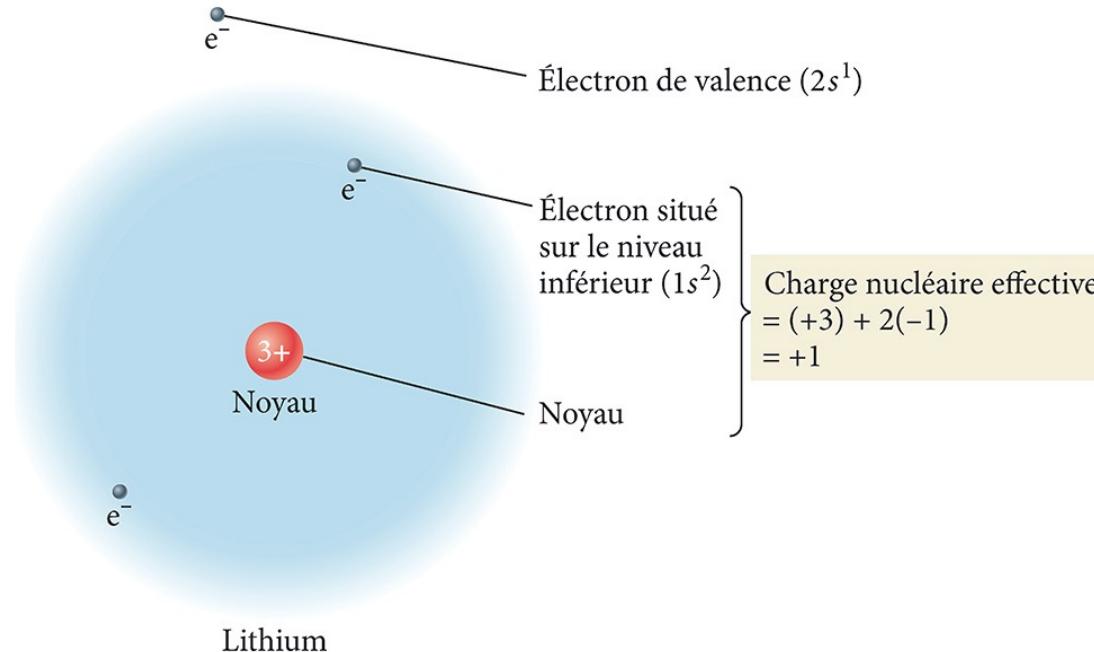
Rayon atomique



Z_{eff} est la charge effective ressentie par l'électron le plus éloigné du noyau. Elle dépend de la charge du noyau et des autres électrons de l'atome.

Charge nucléaire effective Z_{eff}

Charge effective Z_{eff} : charge nucléaire réelle – effet d'écran des autres électrons



Obtenu par calcul avec des méthodes avancées

Approximation avec les règles suivantes, pour un électron périphérique:

Électrons internes

même couche et même sous-couche:

couche inférieure:

même couche et différente sous-couche

écran

négligeable

total

partiel

Question

Qui a le plus grand rayon atomique?

1. K (numéro atomique 19)
2. Cl (numéro atomique 17)

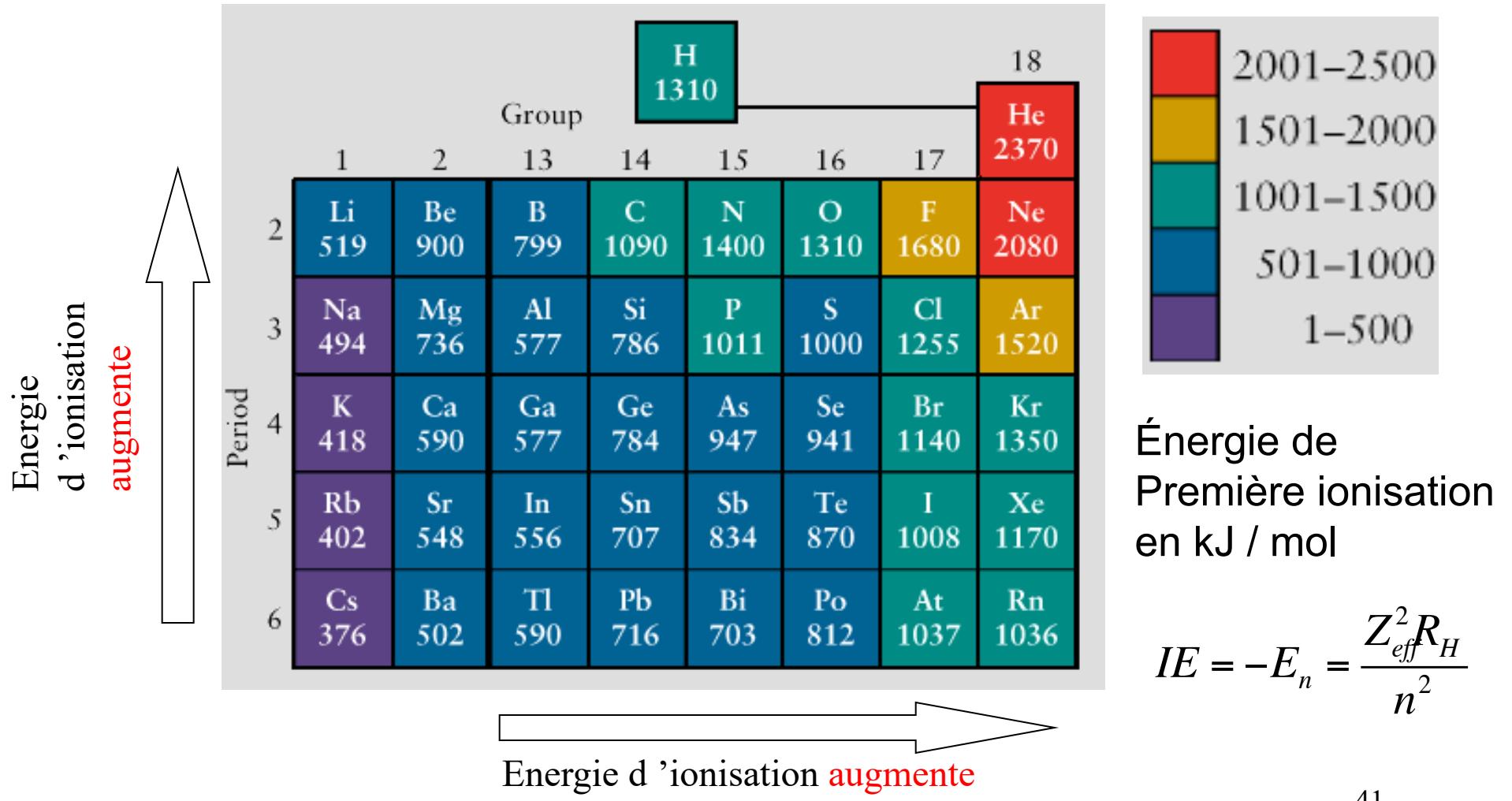
A standard periodic table of elements is shown, organized into four main blocks: the first two groups (alkali and alkali earth metals), the transition metals, and the noble gases. Each element is represented by a yellow square containing its atomic number, symbol, name, and electron configuration. A central box highlights element 6, Carbon (C), with its atomic number (6), symbol (C), name (Carbone), and electron configuration ($1s^2 2s^2 2p^2$). To the right of the table, a legend provides the following information:

Numéro atomique	symbol
Nom de l'élément	
Configuration électronique	

Energie d'ionisation

Energie nécessaire pour arracher un électron et former un ion positif. Ex: $K \longrightarrow K^+ + e^-$

Diminue de haut en bas d'un groupe et augmente le long d'une période



Affinité électronique (AE) *Annexe*

Energie associée à la fixation d'un électron par un atome en phase gazeuse.(stabilité relative de l'anion par rapport à l'atome neutre)



Tendance analogue à celle de l'énergie d'ionisation
Gaz nobles : exceptions (affinité électronique positive)



Il existe deux conventions de signe différentes pour AE

Prédiction des propriétés des éléments

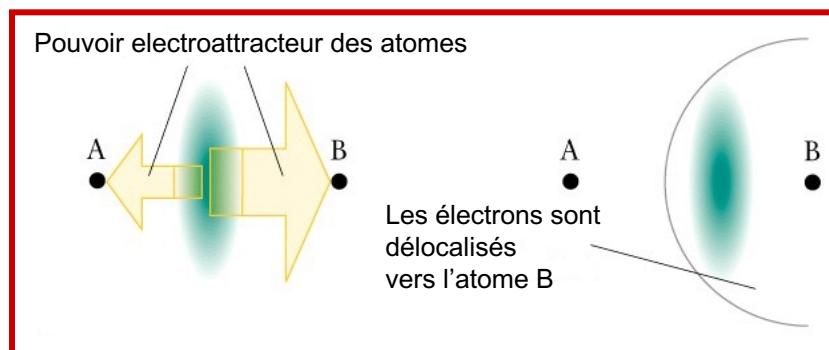
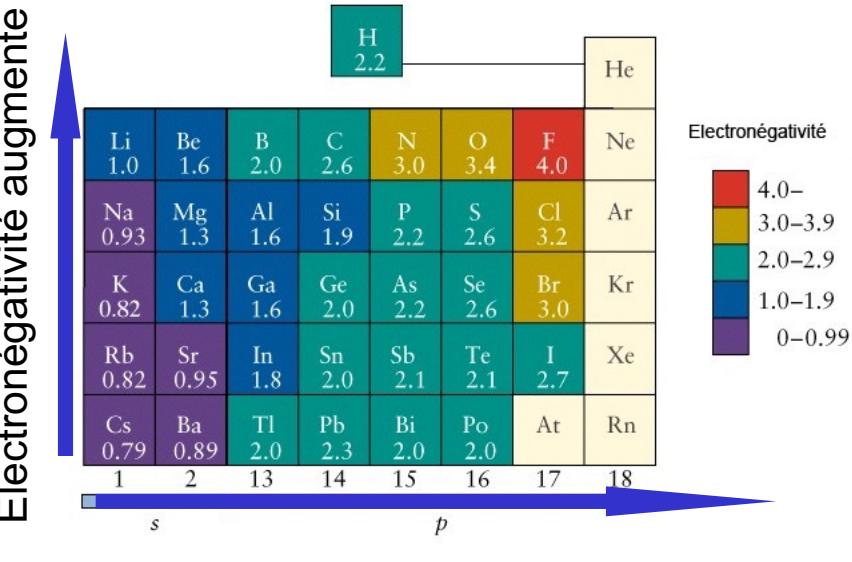
Electronégativité

→ Traduit le pouvoir electro-attracteur d'un atome lorsqu'il est engagé dans une liaison. Echelle arbitraire proposée par Pauling allant de 0 à 4 en utilisant les énergies de liaison des molécules diatomiques.

Echelle de Mulliken: electronégativité proportionnelle à la moyenne de l'énergie d'ionisation et de l'affinité électronique



Linus Pauling



- Deux atomes d'electronégativités semblables partagent les électrons de façon égale dans la liaison.
 - Lorsque les electronégativités sont très différentes les électrons sont délocalisés sur l'atome le plus electronégatif de la liaison.

Résumé

Forte attraction des électrons de valence par le noyau

F

Rayon atomique petit

Energie d'ionisation grande

Affinité électronique grande (valeur absolue)

Électronégativité grande

Faible caractère métallique

Oxydant

Faible attraction des électrons de valence par le noyau

Cs

Rayon atomique grand

Energie d'ionisation faible

Affinité électronique faible (valeur absolue)

Électronégativité faible

Fort caractère métallique

Réducteur

Récapitulatif des tendances périodiques

