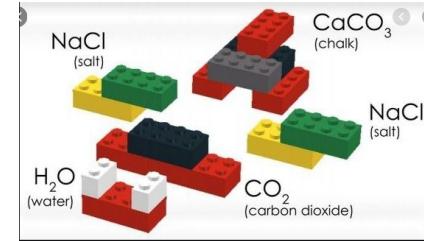


# COURS DE CHIMIE GENERALE

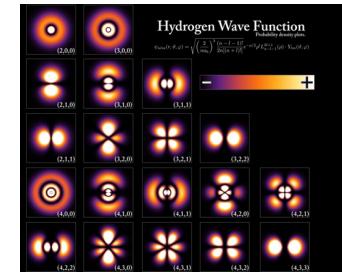
## 1. ATOMISTIQUE

# 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

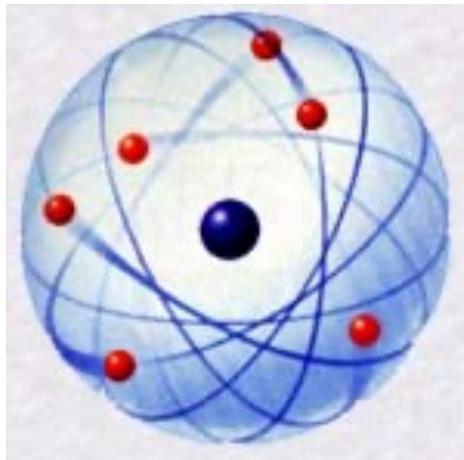


Les propriétés périodiques des atomes sont illustrées dans un tableau

Group → 1 Period ↓	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																He
2	Li	Be															Ne
3	Na	Mg															Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Cu	Ni	Zn	Ga	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Br	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53
6	Cs	Fr	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69
7	Fr	Ra	*	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116
			*	Lr	Rb	Dy	Sg	Bh	Hs	Mt	Rg	Cn	Uut	Ff	Uup	Tm	Uuo
			*	La	Sb	Pr	Nd	61	Sm	62	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Yb
			*	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102

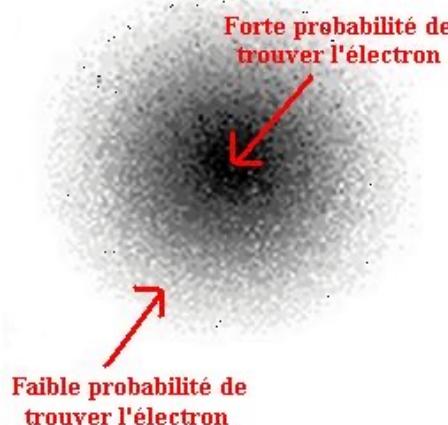
# Quel est le modèle actuel de l'atome?

1



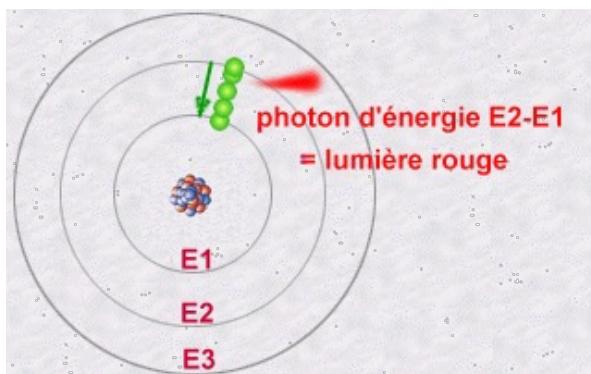
électron tourne autour du noyau  
de manière aléatoire

2



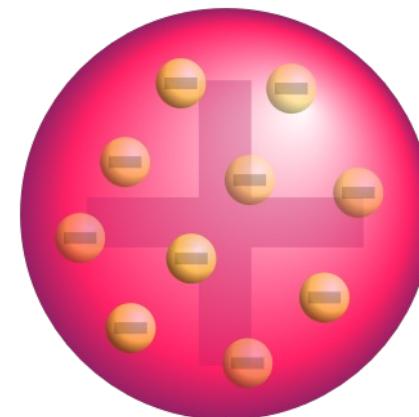
On ne sait pas précisément où est l'électron,  
Modèle mathématique

3



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

4



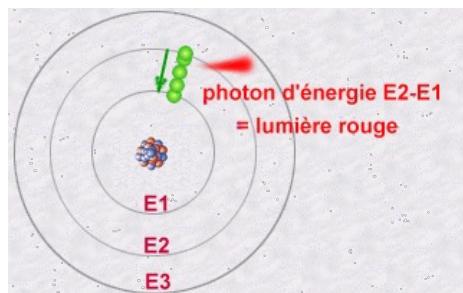
Charge positive distribuée uniformément sur une sphère  
Électrons distribués de manière à contrebalancer  
cette charge

## Modèle Rutherford

Source: découverte noyau



Modèle Bohr  
Physiquement faux, mais encore utilisable pour décrire certaines propriétés atomiques



## Modèle Schrödinger

Modèle actuel, quantique



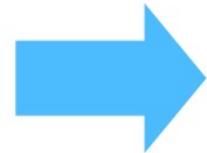
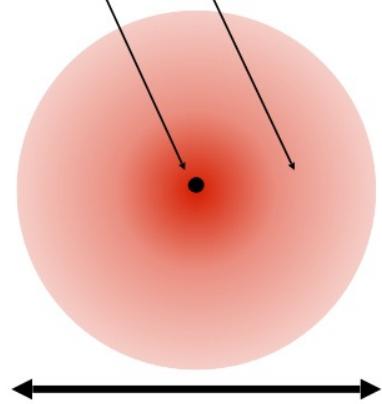
Modèle Thomson  
Source: découverte électrons obsolète



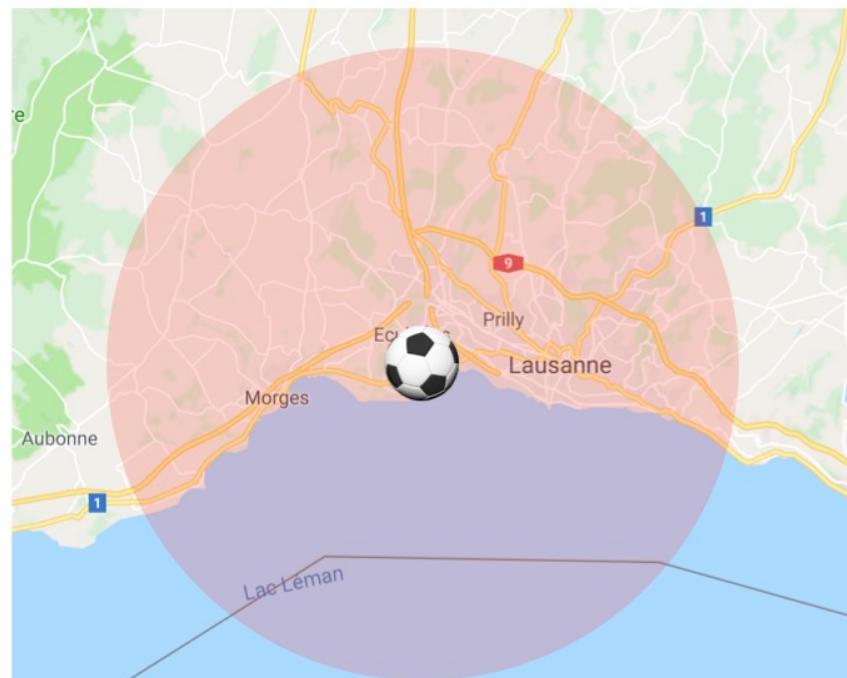
# L'atome est constitué d'un noyau et d'un nuage électronique

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-)	$5.486 \times 10^{-4}$

unité de masse atomique (*uma*): 1/12 masse d'un atome de  $^{12}\text{C}$

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

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

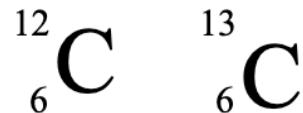
La masse manquante correspond aux énergies de liaison (principalement dans le noyau) et peut être calculée via l'équation relativiste:  $E = mc^2$

## 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)
- Un atome électriquement neutre comporte le même nombre d'électrons que de protons. Un atome contenant un nombre différent d'électrons et de protons est appelé ion (monoatomique). On distingue les cations (chargés positivement) des anions (chargés négativement).
- Les isotopes d'un même élément diffèrent par leur nombre de neutrons. Les isotopes d'un élément ont la même réactivité chimique.



A nombre de masse  
Z numéro atomique



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

$$7$$

- Un échantillon de carbone d'origine naturelle contient environ 99%  $^{12}\text{C}$  et 1%  $^{13}\text{C}$  et des traces de  $^{14}\text{C}$  et d'autres isotopes.

# Les isotopes peuvent être utilisés comme marqueurs

## Exemple: $^{14}\text{C}$

- Concentration de  $^{14}\text{C}$  maintenue constante dans la haute atmosphère
- Formation de  $^{14}\text{CO}_2$
- Assimilation du  $^{14}\text{CO}_2$  par les êtres vivants (photosynthèse, respiration, alimentation)
- Assimilation stoppée après la mort
- Désintégration du  $^{14}\text{C}$  selon une loi de vitesse connue (1<sup>er</sup> ordre, temps de demi-vie: 5730 ans)
- Détection de  $^{14}\text{C}$  par mesure de radioactivité ou spectrométrie de masse
- Datation

# 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

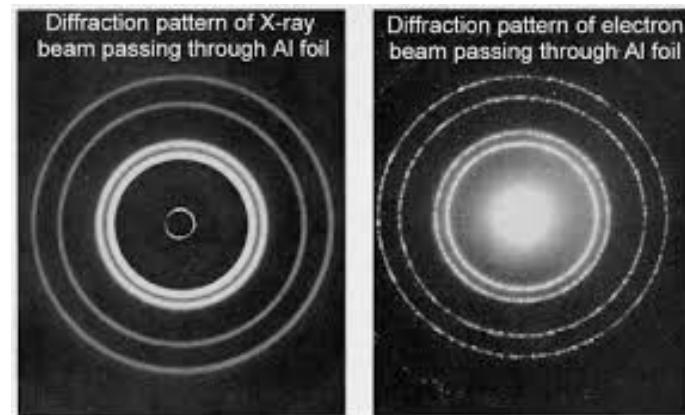
Passage d'un faisceau d'électrons à travers un arrangement régulier d'atomes

→ Comportement d'une onde (interférence)

Nouveauté quantique

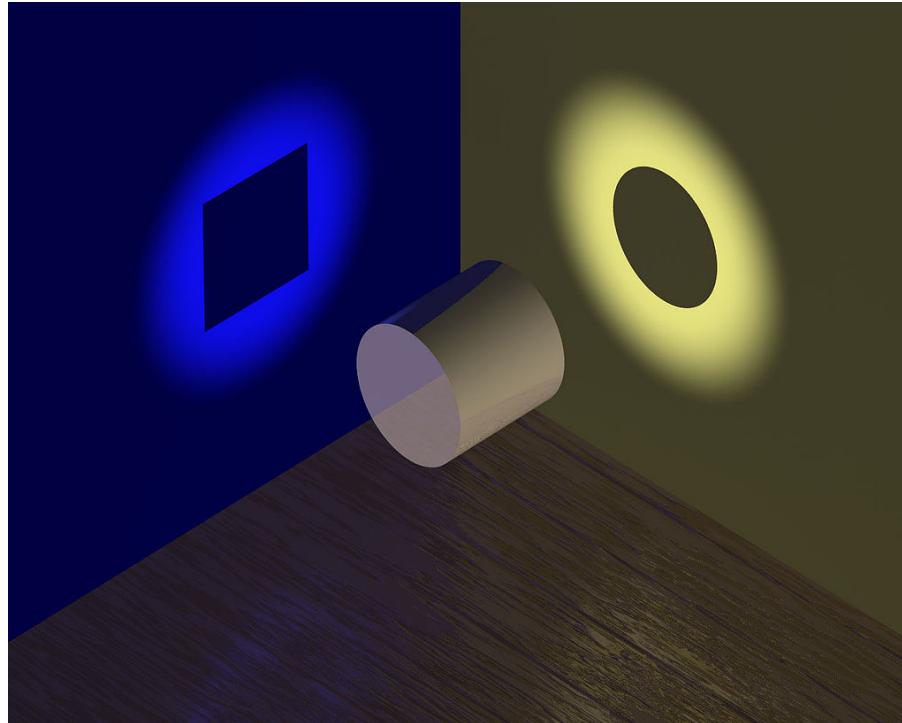


J.J Thomson Nobel prize 1906



G. P Thomson Nobel prize 1937  
C. Davisson L. Germer  
10

# 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

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

n = nombre entier 1, 2, 3...

$R_H = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$   
ou 13.6 eV



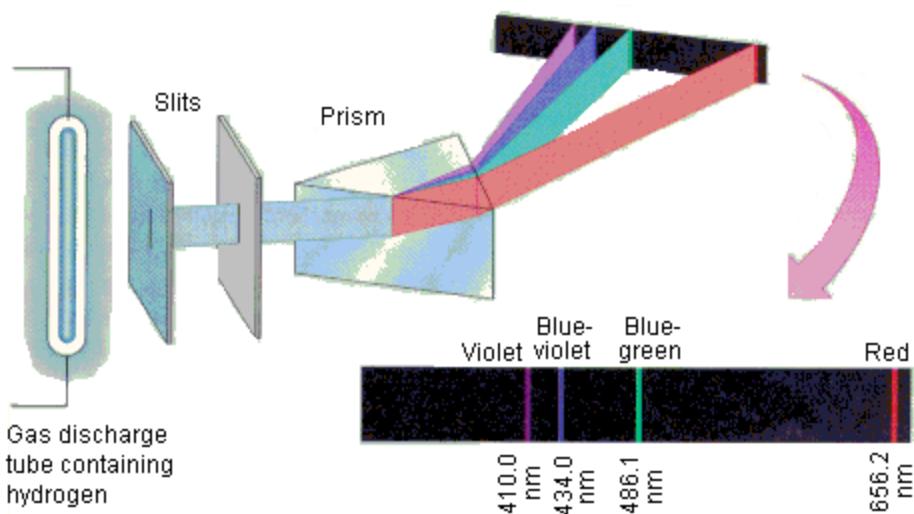
Niels Bohr  
Prix Nobel de Physique, 1922

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \times 1 \text{ V}$$

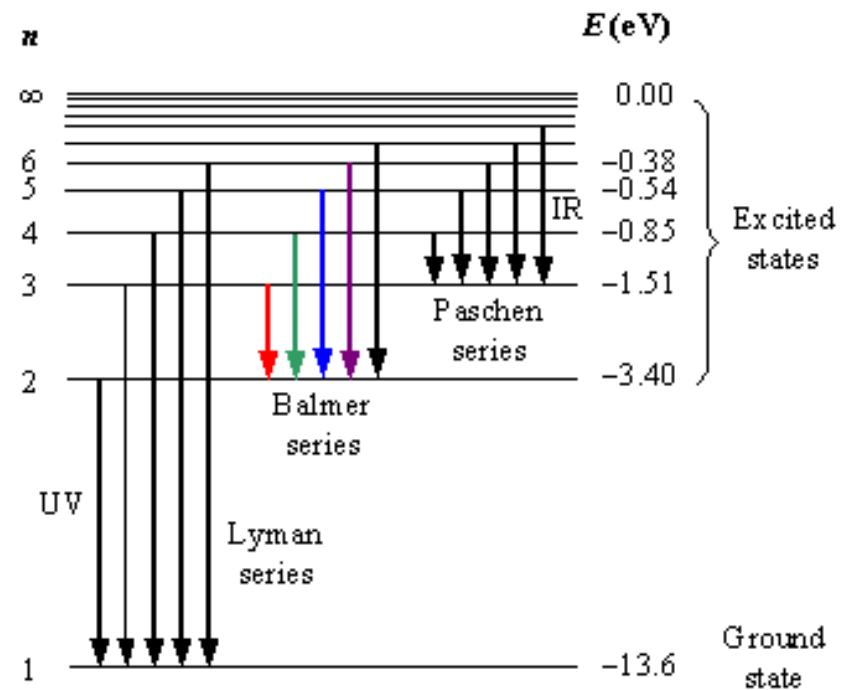
- **Postulat** : tant qu'un électron demeure à un niveau d'énergie donné, il ne peut pas émettre d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique
- Chaque valeur possible pour l'énergie correspond à une trajectoire circulaire et une distance noyau-électron
- **Le plus bas niveau d'énergie correspond 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

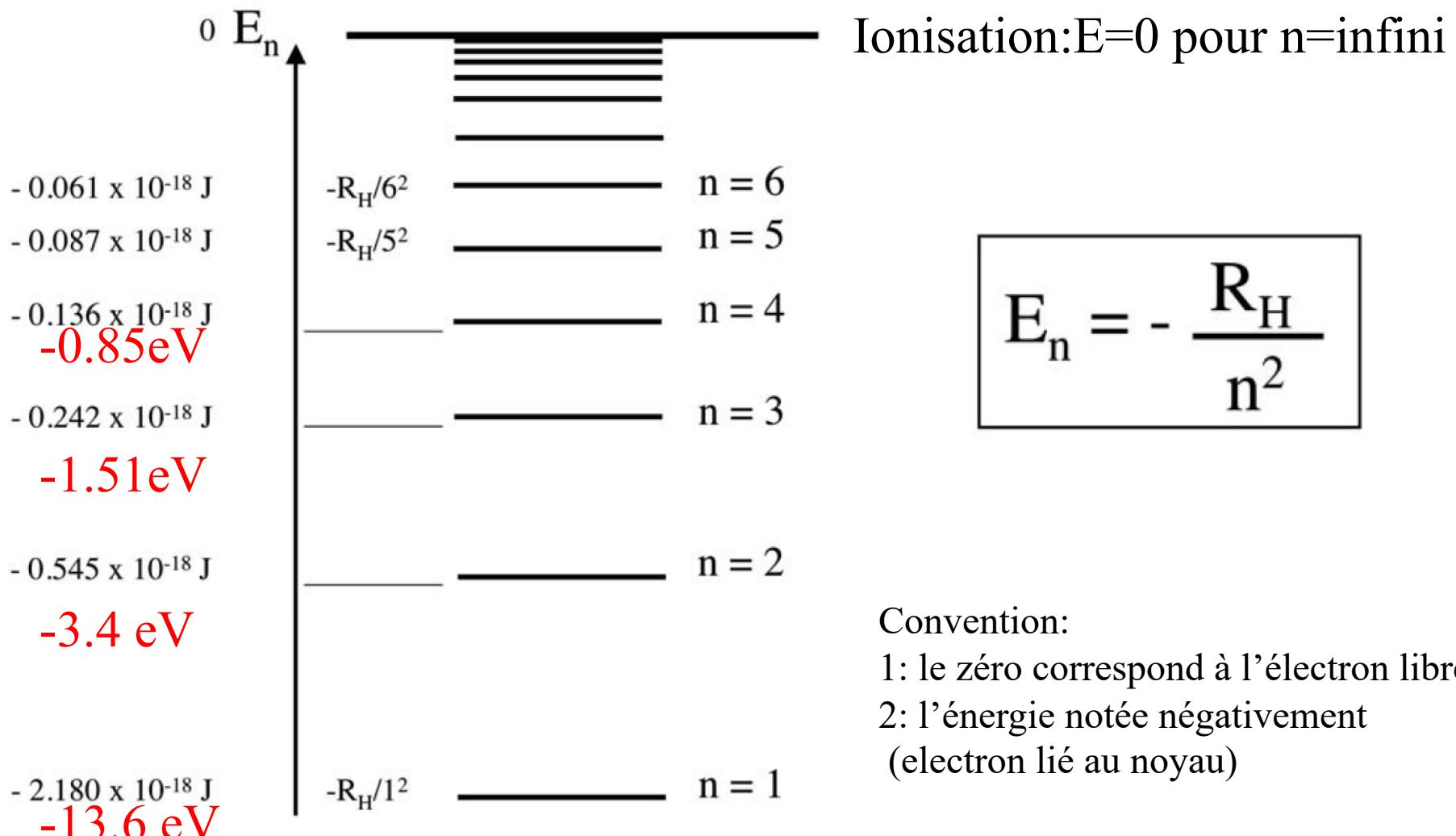


$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$



Spectre de l'hydrogène atomique

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



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

# 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  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$  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 efficace de Z)

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

# 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  $\Psi$  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.

# Les solutions de l'équation de Schrödinger

1. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène ou numérique pour les atomes à plusieurs électrons n'est pas au programme de ce cours
2. Les diverses solutions de l'équation de Schrödinger sont des orbitales  $\Psi_{n,l,m_l}$  définies par 3 nombres entiers (appelés nombres quantiques):  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ .
3. Une orbitale est une expression mathématique.  
La représentation géométrique des orbitales n'est possible que pour un pourcentage défini de probabilité de présence d'un électron (par exemple 90%) car l'expression mathématique de l'orbitale n'est pas finie.
4. Pour définir un électron dans une orbitale,  
nous avons besoin d'un 4<sup>ème</sup> nombre quantique: le spin  $m_s$
5. **La configuration électronique nous permet de déterminer le nombre d'électrons de valence ( les électrons de la couche externe avec le nombre quantique  $n$  le plus grand)**

# Les nombres quantiques

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

$n$ (principal)	$l$ (secondaire)	$m_l$ (magnétique)	$m_s$ (spin)
$n \geq 1$	$0 \leq l \leq n-1$	$-l \leq m_l \leq l$	$\pm 1/2$

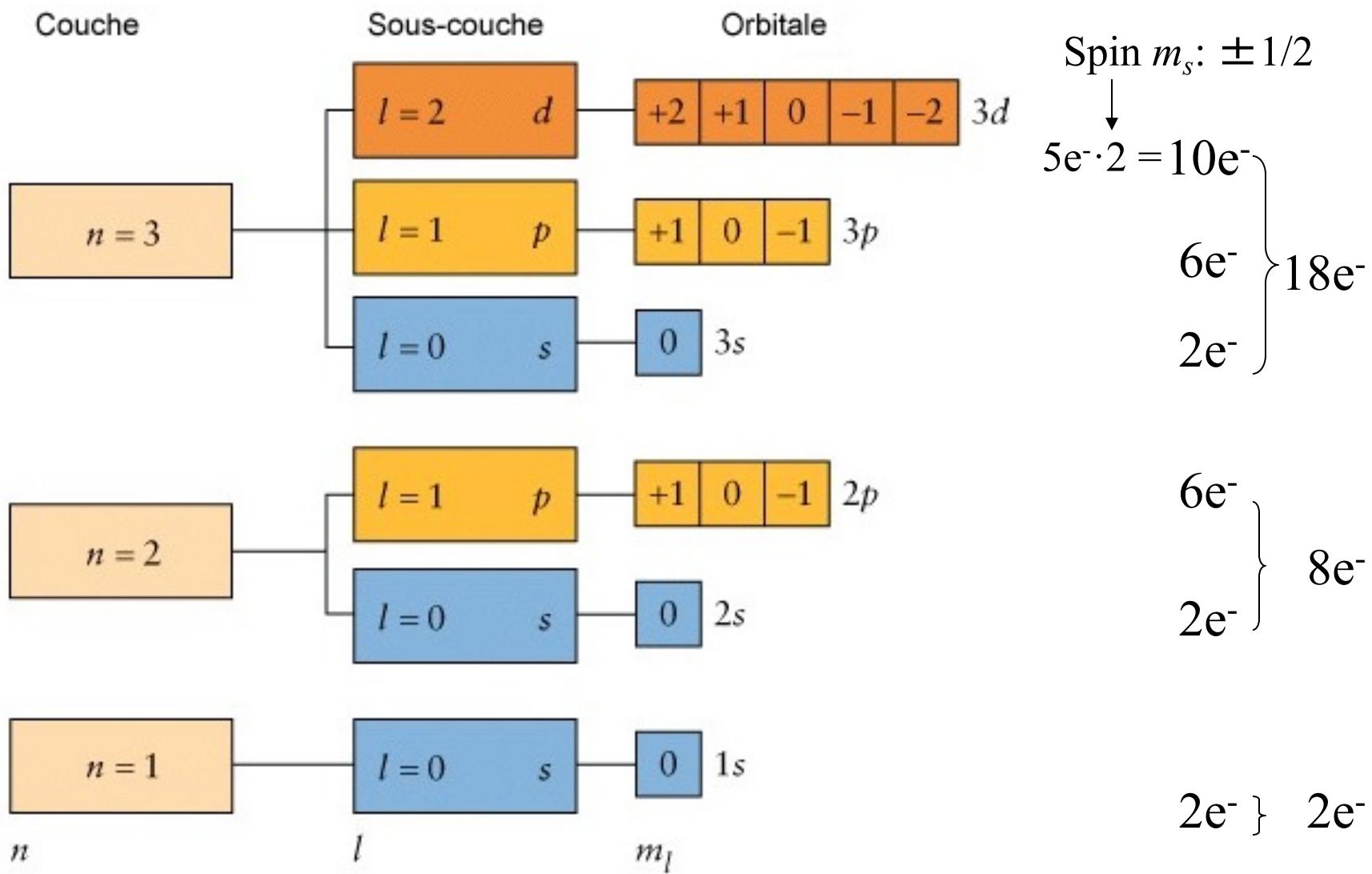
## Principe d'exclusion de Pauli:

Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombres quantiques.

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

# Couches, sous-couches et orbitales

Nombres d'électrons :  $2n^2$

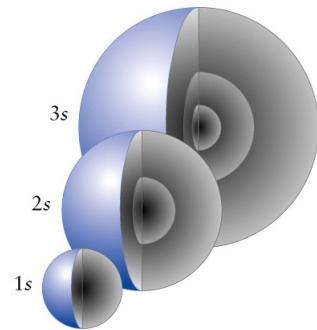


# Les orbitales s,p,d, (les fonctions d'onde $\Psi_{n,l,m}$ )

→  $l = 0$ , orbitale atomique s

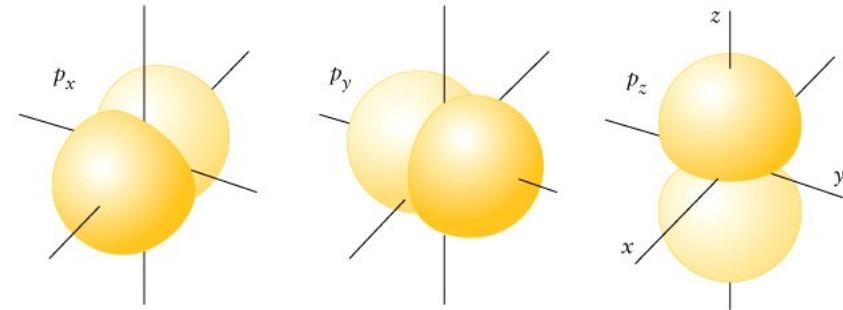
Nuage sphérique dont la densité diminue lorsque la distance au noyau augmente

Nœuds pour 2s , 3s, etc.



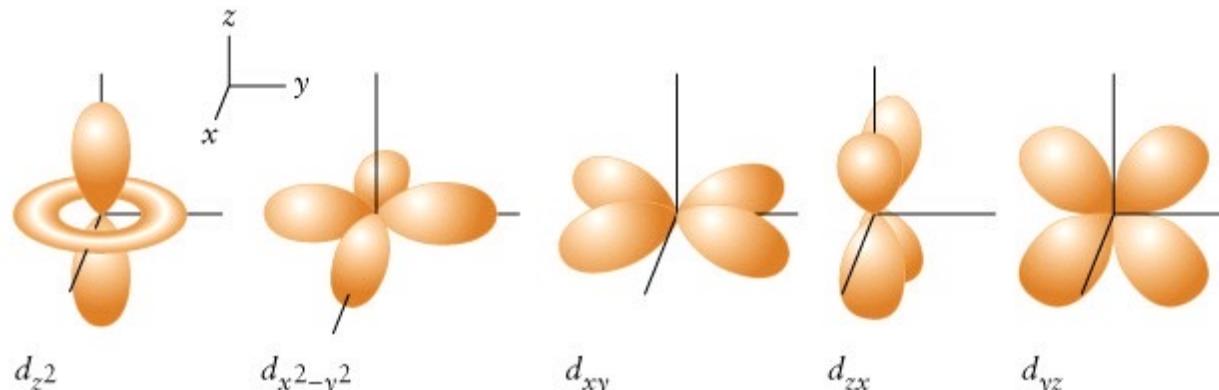
→  $l = 1$ , orbitales atomiques p

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.

$l = 2$ , orbitales atomiques d



# Configuration électronique des atomes

## Configuration électronique d'un atome

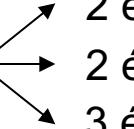
- décrit la distribution des électrons dans ses diverses orbitales

### 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

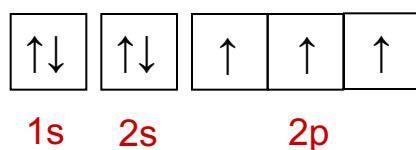
► distribution des électrons dans les orbitales

► 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)

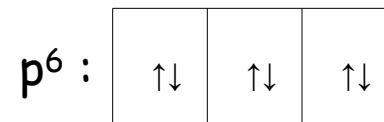
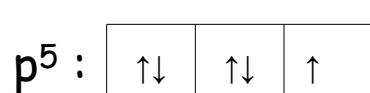
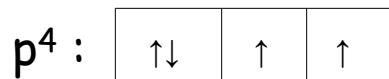
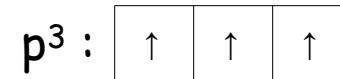
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < \dots$$

- L'état fondamental s'établit à l'aide de:
  - **La règle d'exclusion de Pauli** : Dans un atome, il ne peut exister deux électrons définis par le même groupe de quatre nombres quantiques.
  - **La règle de Hund** : L'arrangement le plus stable est celui correspondant au maximum d'électrons de spins parallèles.

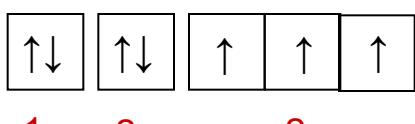
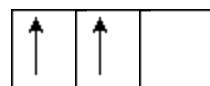
# Règle de Hund

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 :

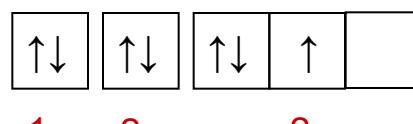


Exemples : configuration électronique du carbone (6 électrons)



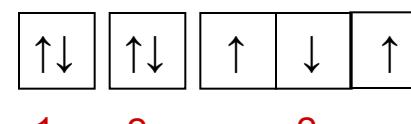
1s    2s    2p

exact



1s    2s    2p

inexact



1s    2s    2p

inexact

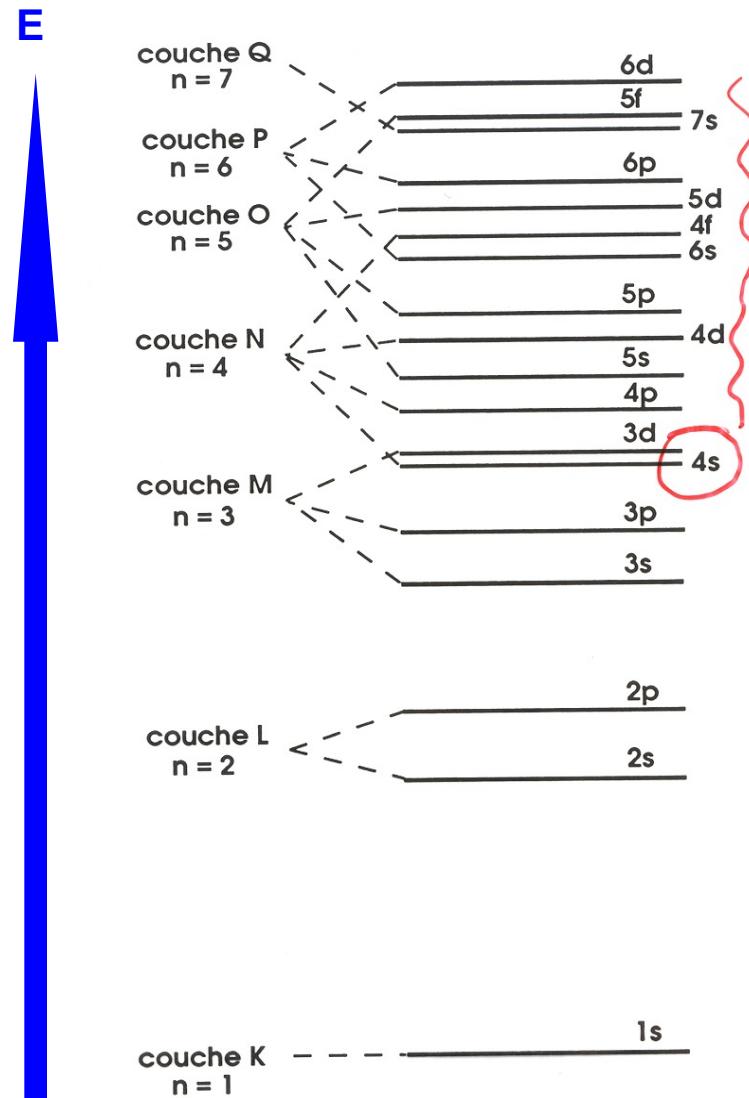
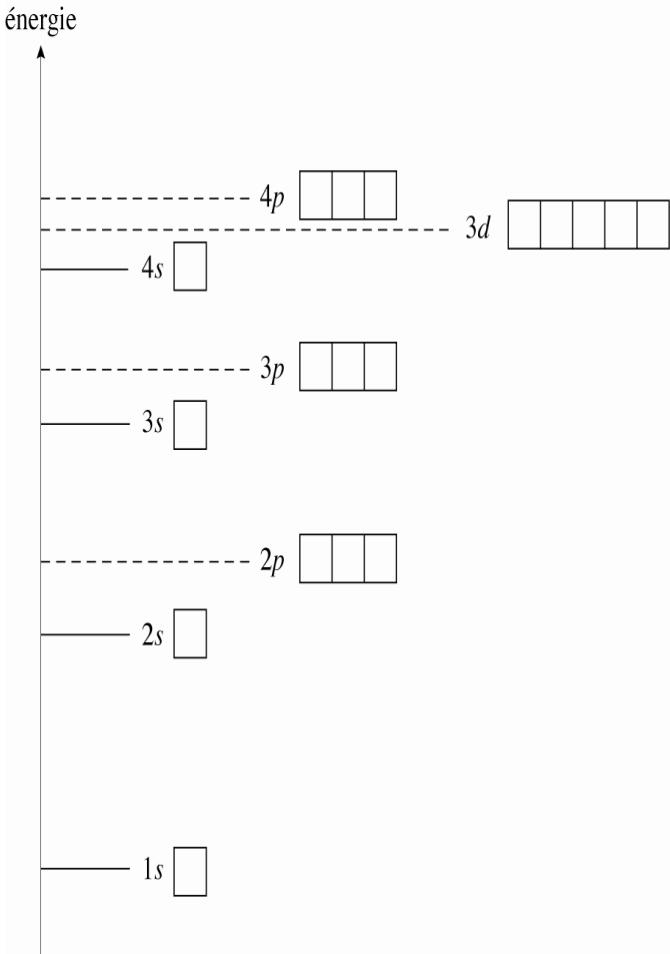
Friedrich Hund  
(1896-1997)

$\uparrow\downarrow$  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



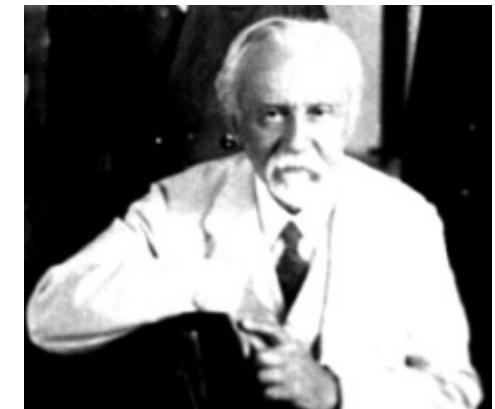
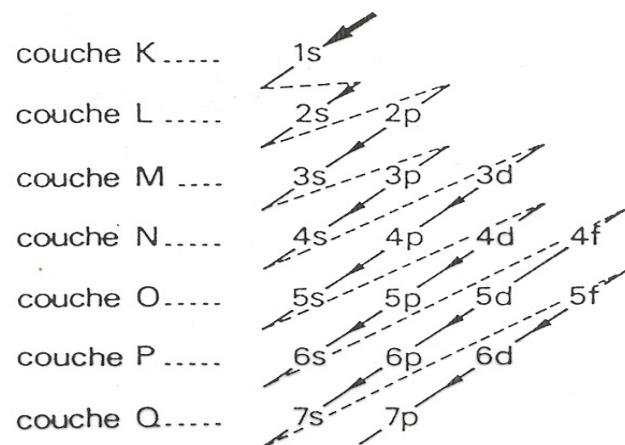
## Règle de Klechkowsky ou principe de stabilité:

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

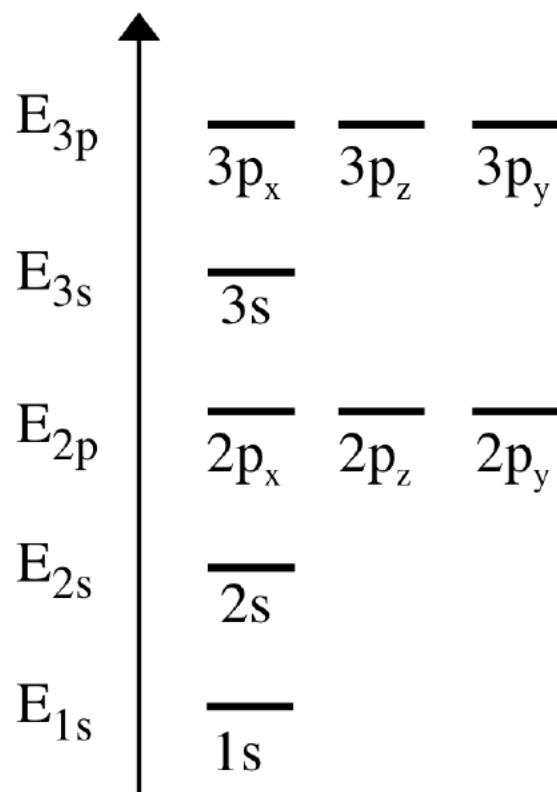
### Procédure pour établir la configuration électronique des éléments dans leur état fondamental



Vsevolod Klechkowski  
(1900-1972)

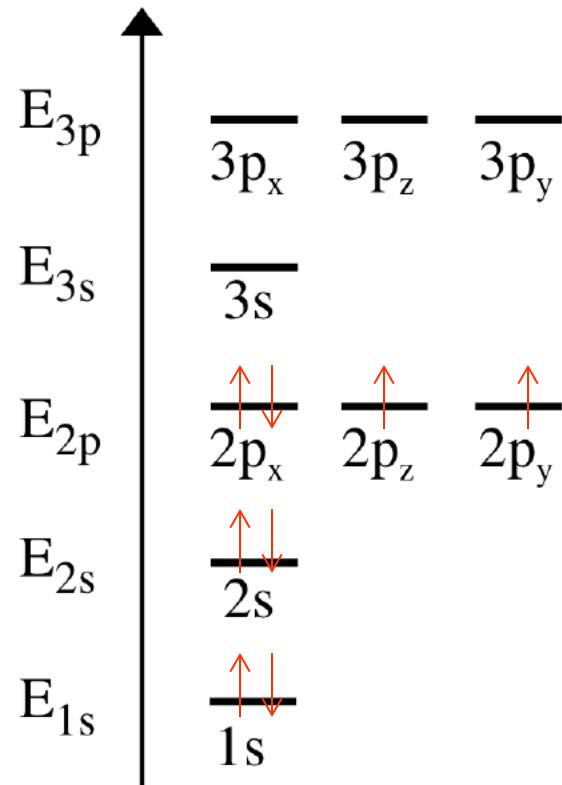
EXERCICE :

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



EXERCICE :

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



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

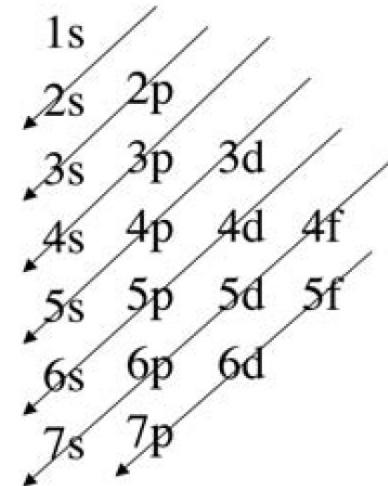
2 électrons célibataires

# Configuration électronique et tableau périodique

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

1s <sup>1</sup>	1s <sup>2</sup>
1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>
1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>
1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup> 3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>

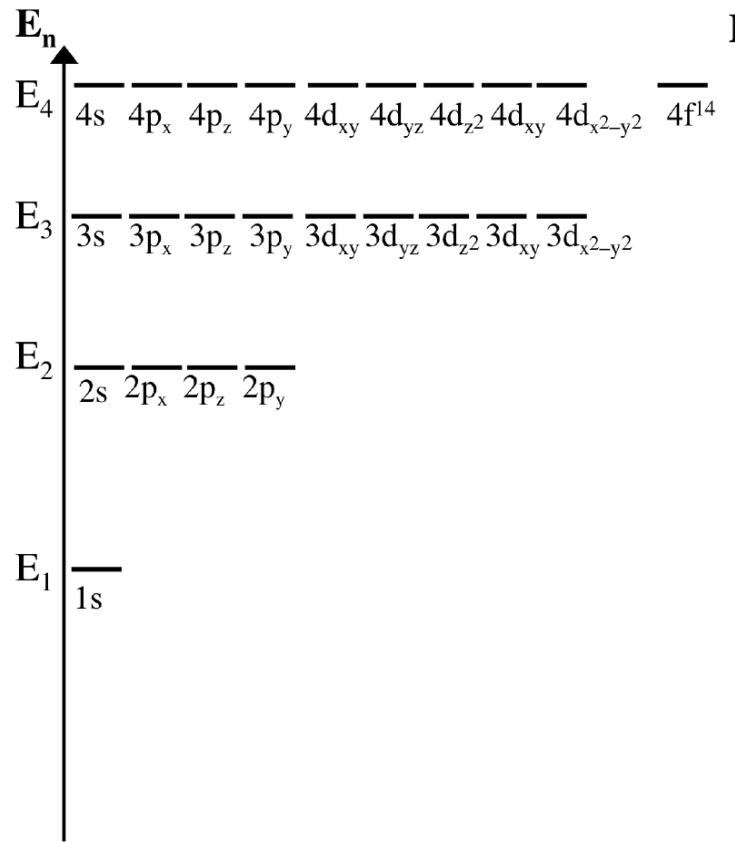
\*Les électrons occupent l'orbitale 4s avant l'orbitale 3d (l'atome a une énergie plus basse lorsque l'électron occupe l'orbitale 4s plutôt que 3d).



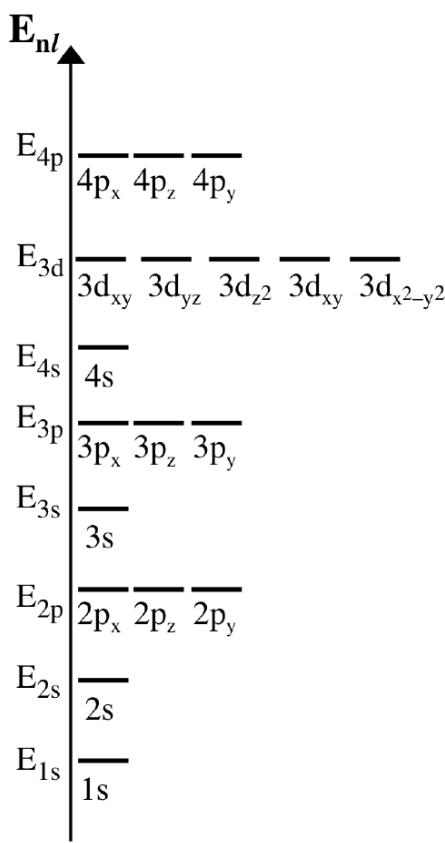
élément	configuration électronique
H	$1s^1$
He	$1s^2$
Li	$1s^2 2s^1$
Be	$1s^2 2s^2$
B	$1s^2 2s^2 2p^1$
C	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Mg	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Al	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
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	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

# Comparaison entre atomes hydrogénoides et atomes à plusieurs électrons

Atome à 1 électron



Atome à plusieurs électrons



## 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<sup>er</sup> 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] 4s<sup>1</sup> 3d<sup>5</sup> (au lieu de 4s<sup>2</sup> 3d<sup>4</sup>)

Cu: [Ar] 4s<sup>1</sup> 3d<sup>10</sup> (au lieu de 4s<sup>2</sup> 3d<sup>9</sup>)

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

Exceptions  
à l'Aufbau

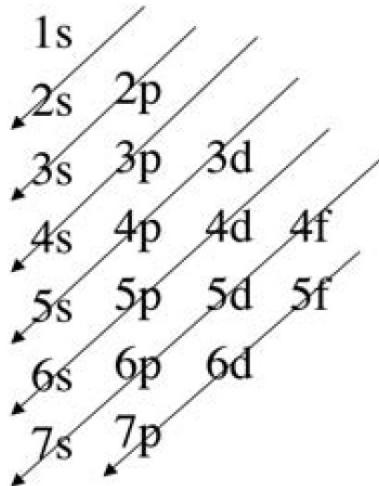
Supposé

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

# Quelques exceptions à la règle de l'Aufbau

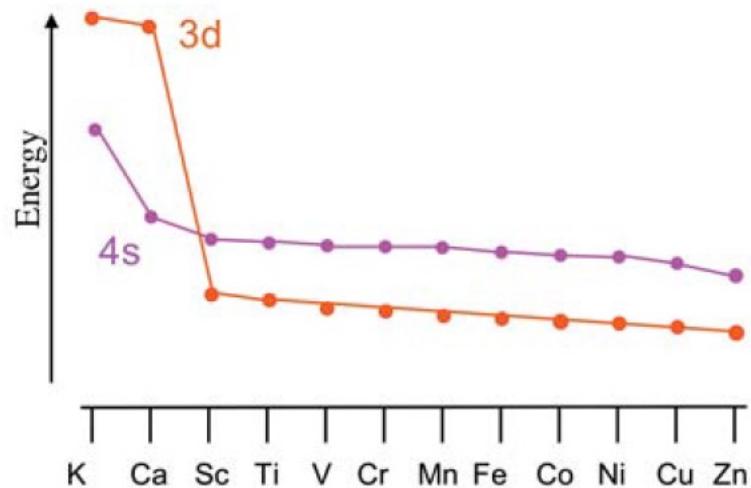
## 2-Les cations (des métaux de transition)

l'énergie de l'orbitale 3d occupée est plus faible  
que 4s (contrairement aux orbitales vides où 4s est plus stable que 3 d)



Pour orbitales vides

$$E_{4s} < E_{3d}$$



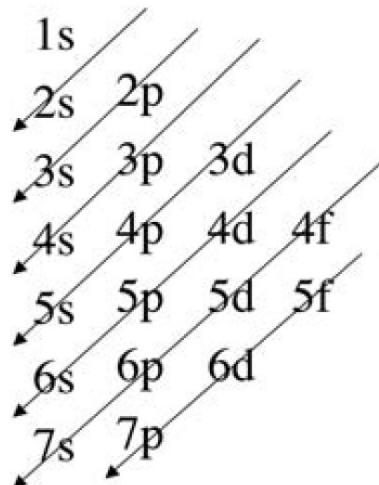
Pour orbitales occupées

$$E_{3d} < E_{4s}$$

## Exercice:

La configuration électronique de l'ion  $\text{Fe}^{2+}$  est  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$  (juste ou faux?)

Info : Fe: 26 électrons



## Exercice:

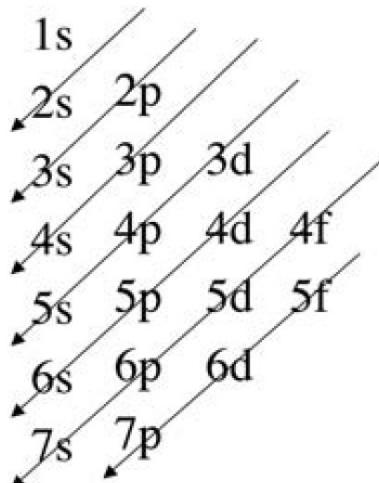
La configuration électronique de l'ion  $\text{Fe}^{2+}$  est  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$  (juste ou faux?,

Info : Fe: 26 électrons

**FAUX!**

La configuration électronique de l'atome Fe est  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$

La configuration électronique de l'ion  $\text{Fe}^{2+}$  est  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$



On enlève les 2 électrons de l'orbitale 4s

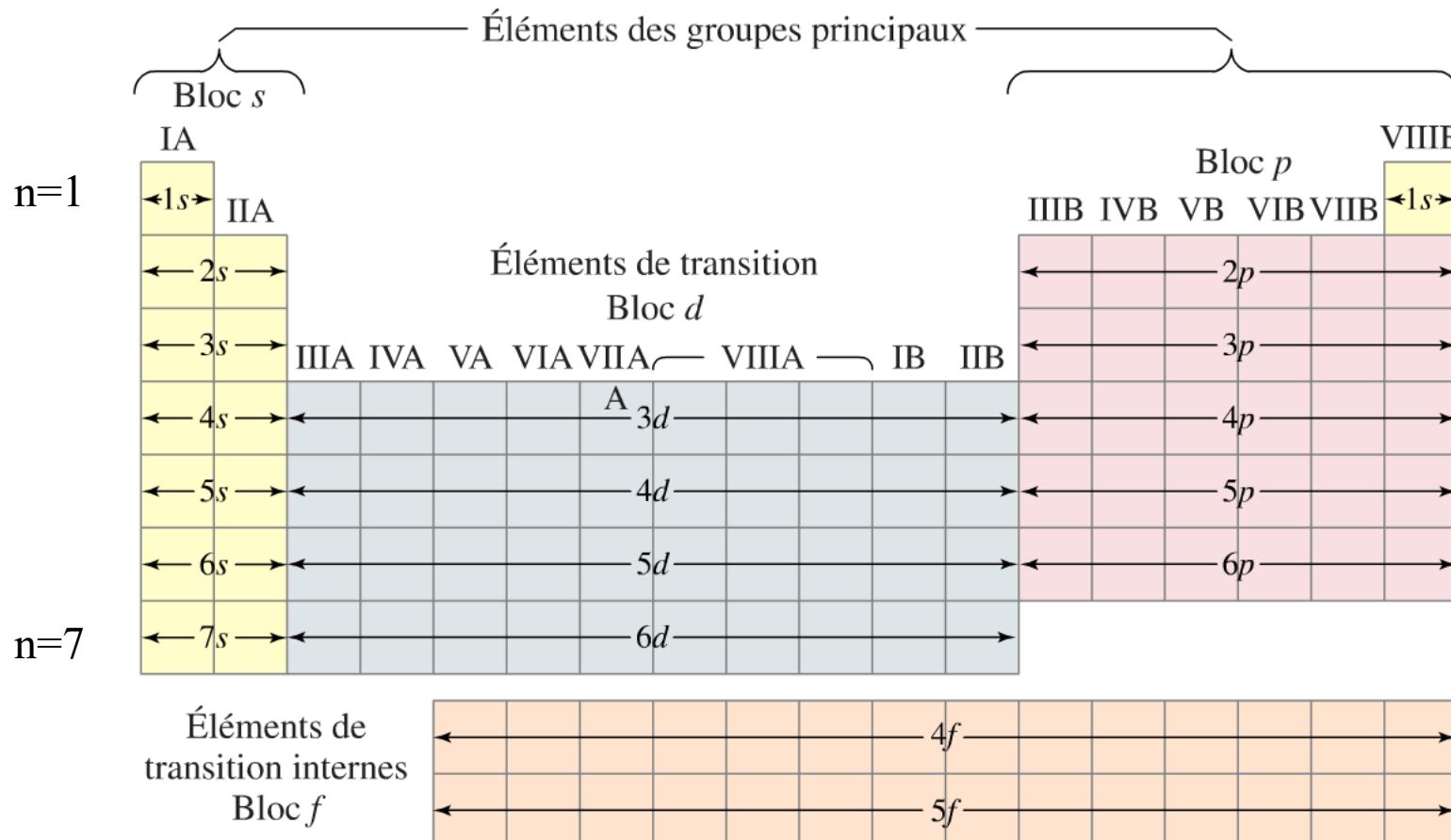
La configuration électronique de  $_{26}\text{Fe}^{2+}$  n'est pas égale à celle de  $_{24}\text{Cr}$  même s'ils ont le même nombre d'électrons

# 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.

# Le tableau périodique et le principe d'Aufbau



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.

# 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

# Rayon atomique

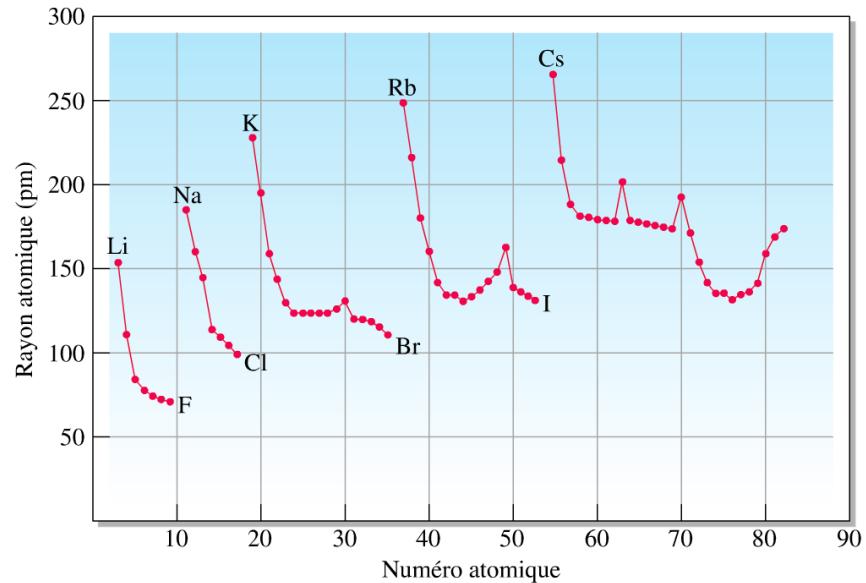
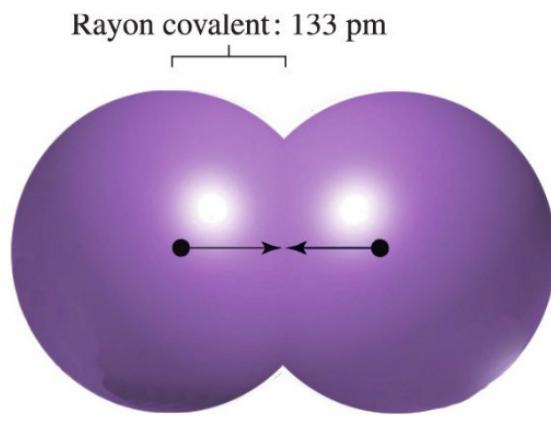
## Définitions:

- 1) Calcul (90 % de probabilité de trouver l'électron)
- 2) Demi-distance entre les centres d'atomes voisins (données expérimentales)
- 3) Rayons covalents (mesurés dans une molécule diatomique) et ioniques
- 4) On distingue aussi entre rayon métallique (mesuré dans un solide) et van der Waals (distance mesurée lors d'un contact entre deux atomes)



Représentation de la molécule de I<sub>2</sub>

$$1.33 \times 10^{-10} \text{ m}$$



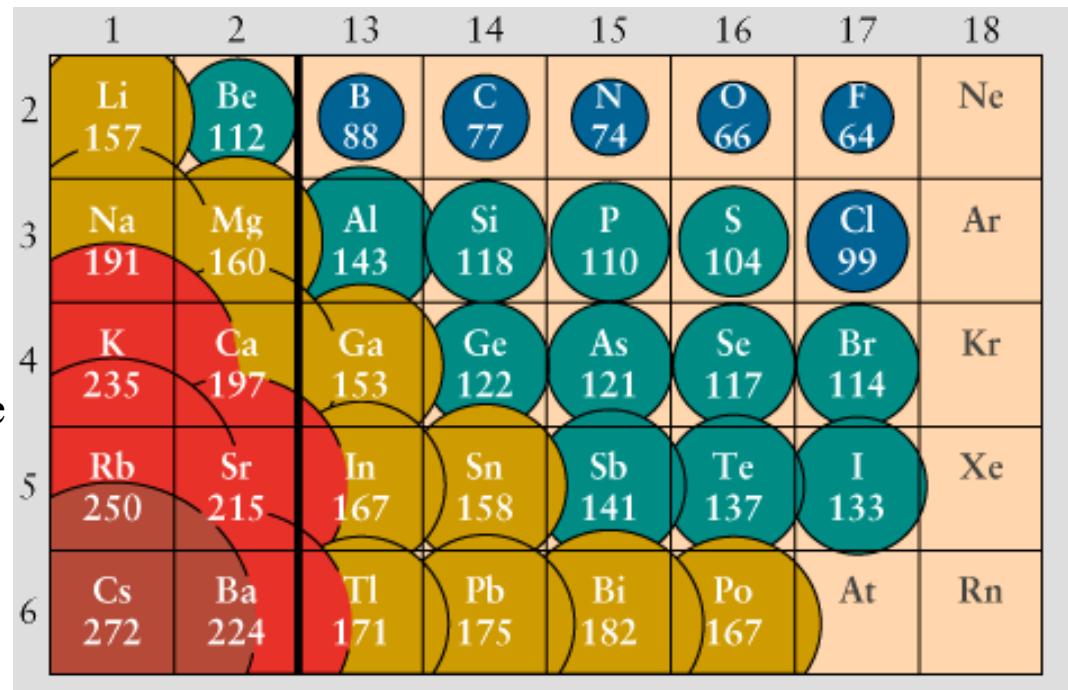
Plusieurs définitions:

- 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

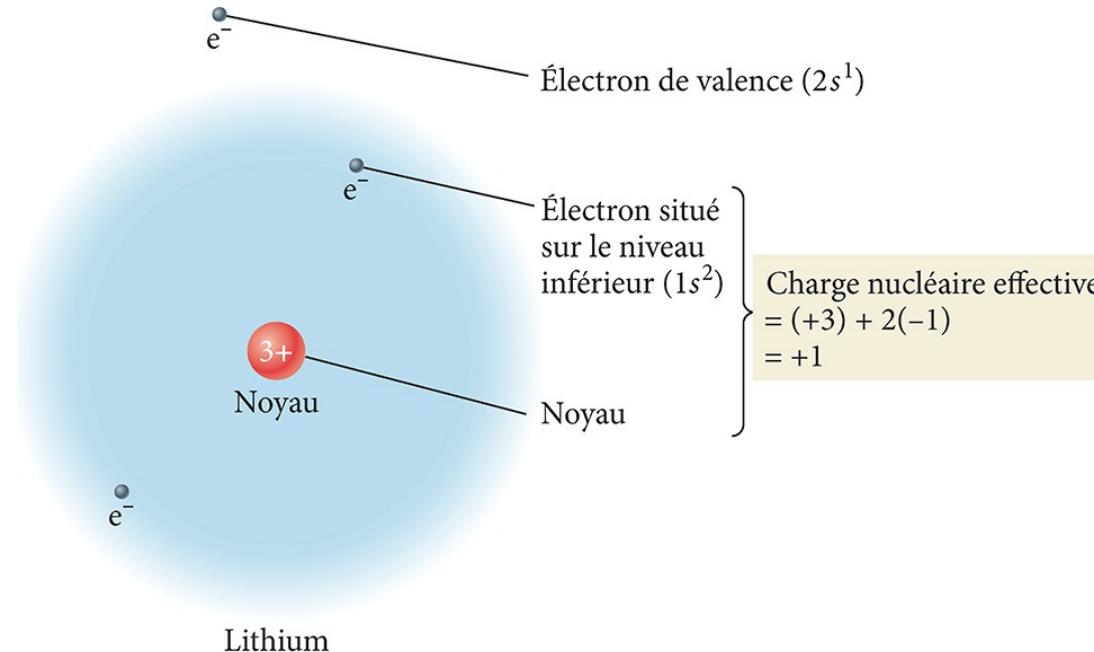


Rayon atomique diminue de gauche à droite le long d'une période. ( $Z_{eff}$  augmente).

$Z_{eff}$  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 $Z_{\text{eff}}$

Charge effective  $Z_{\text{eff}}$  : 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)

1	1 <b>H</b> Hydrogène $1s^1$	2	3	4																			
2	3 <b>Li</b> Lithium $1s^2 2s^1$	4 <b>Be</b> Béryllium $1s^2 2s^2$			6 <b>C</b> Carbone $1s^2 2s^2 2p^2$	<b>Numéro atomique</b> <b>symbole</b> Nom de l'élément Configuration électronique													2 <b>He</b> Hélium $1s^2$				
3	11 <b>Na</b> Sodium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	12 <b>Mg</b> Magnésium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$			22 <b>Ti</b> Titane $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	23 <b>V</b> Vanadium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$	24 <b>Cr</b> Chrome $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$	25 <b>Mn</b> Manganèse $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$	26 <b>Fe</b> Fer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$	27 <b>Co</b> Cobalt $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$	28 <b>Ni</b> Nickel $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$	29 <b>Cu</b> Cuivre $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$	30 <b>Zn</b> Zinc $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$	31 <b>Ga</b> Gallium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$	32 <b>Ge</b> Gérasme $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^2$	33 <b>As</b> Antimoni $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^3$	34 <b>Se</b> Sélénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^4$	35 <b>Br</b> Brome $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^5$	36 <b>Kr</b> Krypton $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2 4p^6$				
4	19 <b>K</b> Potassium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^1$	20 <b>Ca</b> Calcium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	21 <b>Sc</b> Scandium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$																				

# Question

Qui a le plus grand rayon ionique?

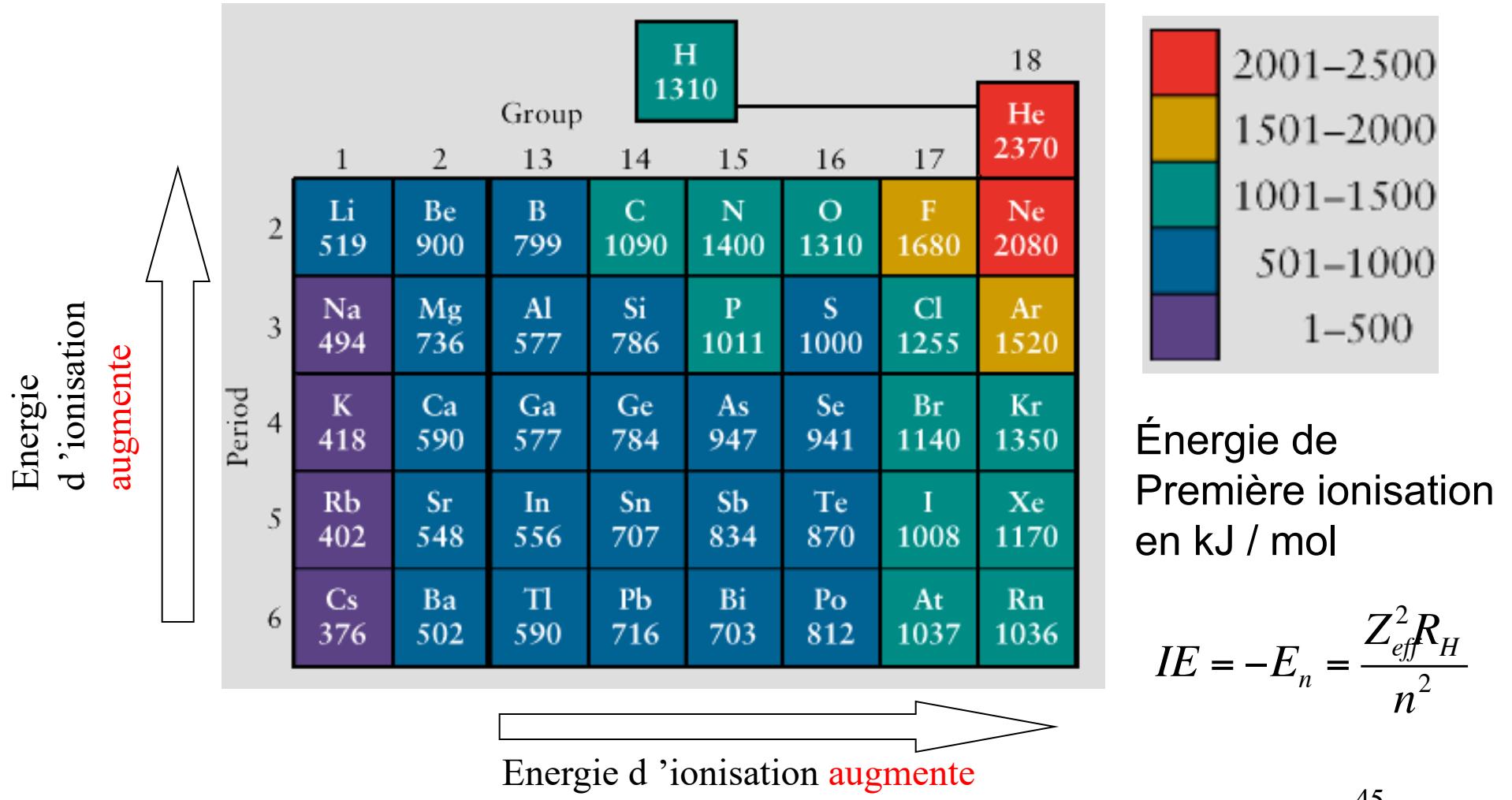
1.  $\text{K}^+$
2.  $\text{Cl}^-$

1	2	3	4				14	15	16	17	18									
1 <b>H</b> Hydrogène $1s^1$				6 <b>C</b> Carbone $1s^2 2s^2$	Numéro atomique symbole Nom de l'élément Configuration électronique		5 <b>B</b> Bore $1s^2 2s^2$	6 <b>C</b> Carbone $1s^2 2s^2$	7 <b>N</b> Azote $1s^2 2s^2 2p^3$	8 <b>O</b> Oxygène $1s^2 2s^2 2p^4$	9 <b>F</b> Fluor $1s^2 2s^2 2p^5$	10 <b>Ne</b> Néon $1s^2 2s^2$								
2 <b>Li</b> Lithium $1s^2$	4 <b>Be</b> Béryllium $1s^2 2s^2$					13 <b>Al</b> Aluminium $1s^2 2s^2 2p^1$	14 <b>Si</b> Silicium $1s^2 2s^2 2p^2$	15 <b>P</b> Phosphore $1s^2 2s^2 2p^3$	16 <b>S</b> Soufre $1s^2 2s^2 2p^4$	17 <b>Cl</b> Chlore $1s^2 2s^2 2p^5$	18 <b>Ar</b> Argon $1s^2 2s^2 2p^6$									
3 <b>Na</b> Sodium $1s^2 2s^2$	12 <b>Mg</b> Magnésium $1s^2 2s^2$					22 <b>Ti</b> Titane $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	23 <b>V</b> Véranium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	24 <b>Cr</b> Chrome $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$	25 <b>Mn</b> Manganèse $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$	26 <b>Fe</b> Fer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$	27 <b>Co</b> Cobalt $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7$	28 <b>Ni</b> Nickel $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8$	29 <b>Cu</b> Cuivre $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10$	30 <b>Zn</b> Zinc $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2$	31 <b>Ga</b> Gallium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^1$	32 <b>Ge</b> Germanium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^2$	33 <b>As</b> Antimoni $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^3$	34 <b>Se</b> Sélénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^4$	35 <b>Br</b> Brome $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^5$	36 <b>Kr</b> Krypton $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6$
4 <b>K</b> Potassium $1s^2 2s^2 2p^6$	20 <b>Ca</b> Calcium $1s^2 2s^2 2p^6$	21 <b>Sc</b> Scandium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$				26 <b>Ru</b> Ruthénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$	27 <b>Rb</b> Rubidium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$	28 <b>Os</b> Osmium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$	29 <b>Fr</b> Francium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^1$	30 <b>La</b> Lanthanum $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 4f^1$	31 <b>Hf</b> Hafnium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 4f^1 5s^2$	32 <b>Ru</b> Ruthénium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2 4p^6 4f^1 5s^2$	33 <b>Fr</b> Francium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 4f^1 5s^2 5p^1$	34 <b>Lu</b> Lutécium $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^10 4s^2 4p^6 4f^1 5s^2 5p^6$						

# 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)

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

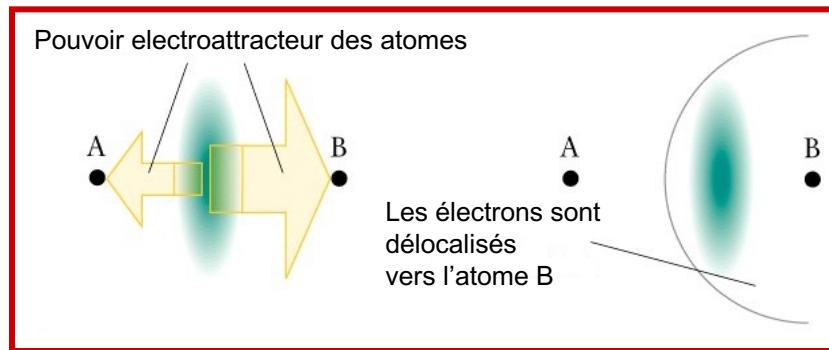
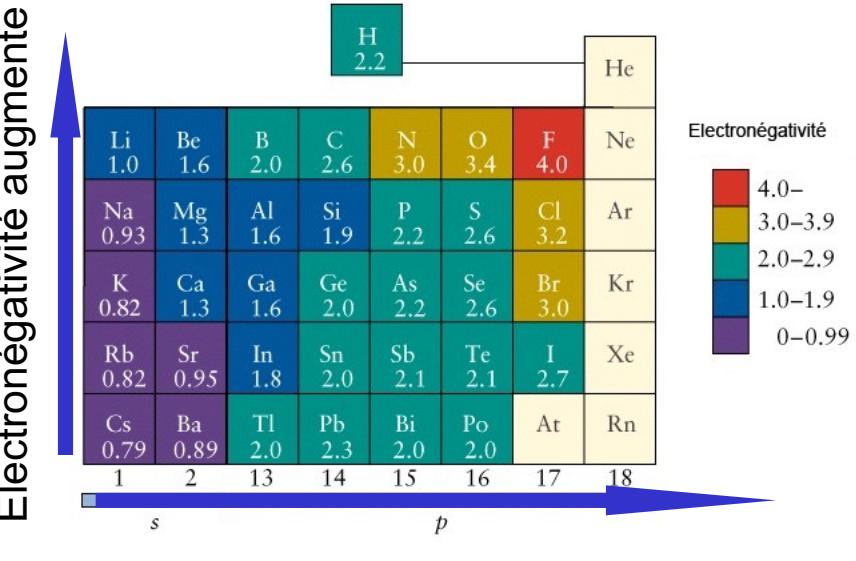
# Electronégativité

→ 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.

# Electronégativité et énergie d'ionisation

atome

Energie d'ionisation  
faible

molécule

Electronégativité  
faible

molécule

Fort caractère  
métallique

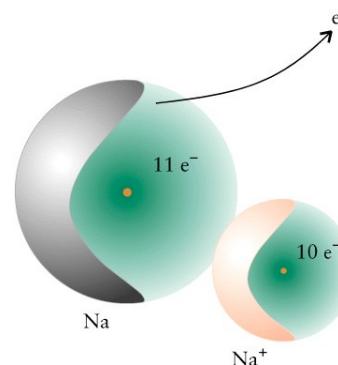
molécule

Fort pouvoir  
réducteur



Electronégativité: 0.93

Energie d'ionisation: 494 kJ/mol



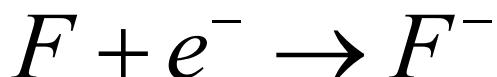
Tendance à  
donner  
des électrons

Energie d'ionisation  
élevée

Electronégativité  
élevée

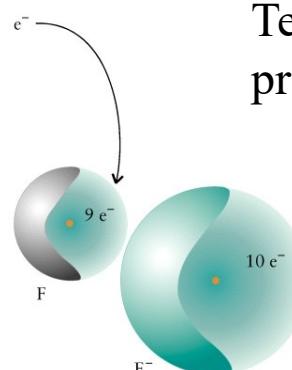
Caractère  
Non métallique

Fort pouvoir  
oxydant



Electronégativité: 4.0

Energie d'ionisation: 1680 kJ/mol



Tendance à  
prendre des électrons

# 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, Fr

Rayon atomique grand

Energie d'ionisation faible

Affinité électronique faible (valeur absolue)

Électronégativité faible

Fort caractère métallique

Réducteur

# Récapitulatif des tendances périodiques

