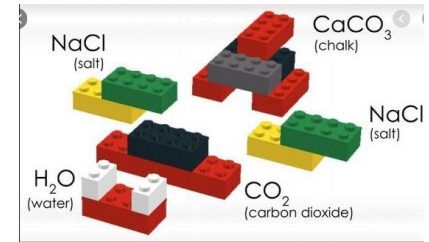


COURS DE CHIMIE GENERALE

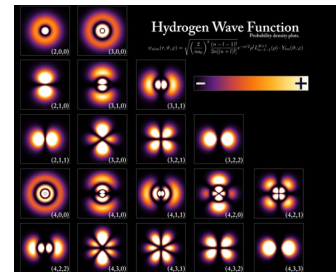
1. ATOMISTIQUE

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

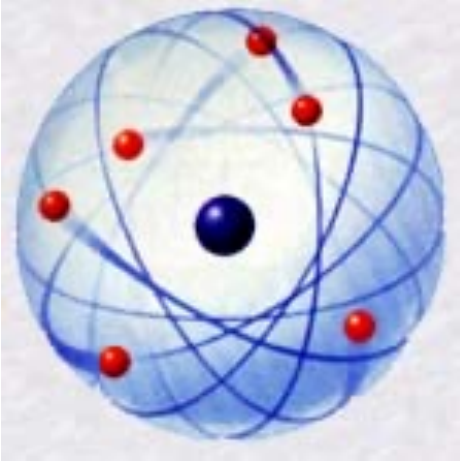


Les propriétés périodiques des atomes sont illustrées dans un tableau

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period	1 H	2 He																
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	72 Hf
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	104 Rf

Quel est le modèle actuel de l'atome?

1



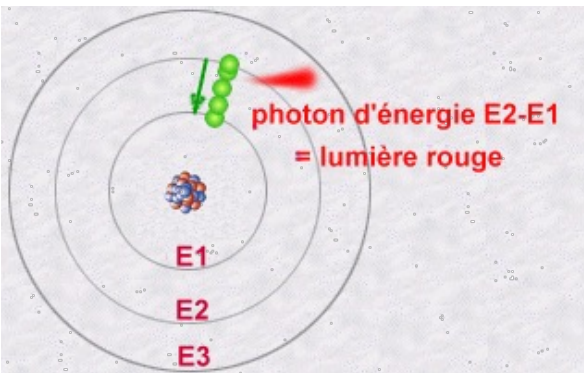
électron tourne autour du noyau de manière aléatoire

2



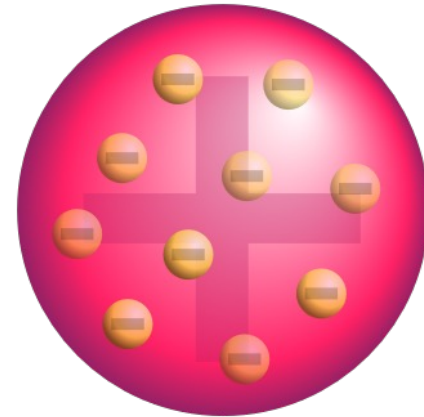
On ne sait pas précisément où est l'électron,
Modèle mathématique

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 contrebalancer³ cette charge

Modèle Rutherford

Source: découverte noyau



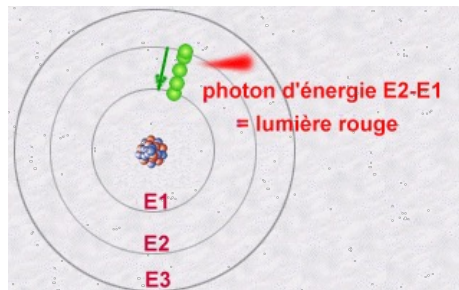
Modèle Schrödinger

Modèle actuel, quantique



Modèle Bohr

Physiquement faux, mais encore utilisable pour décrire certaines propriétés atomiques



Modèle Thomson

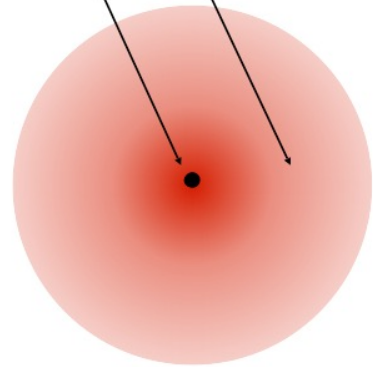
Source: découverte électrons
obsolète



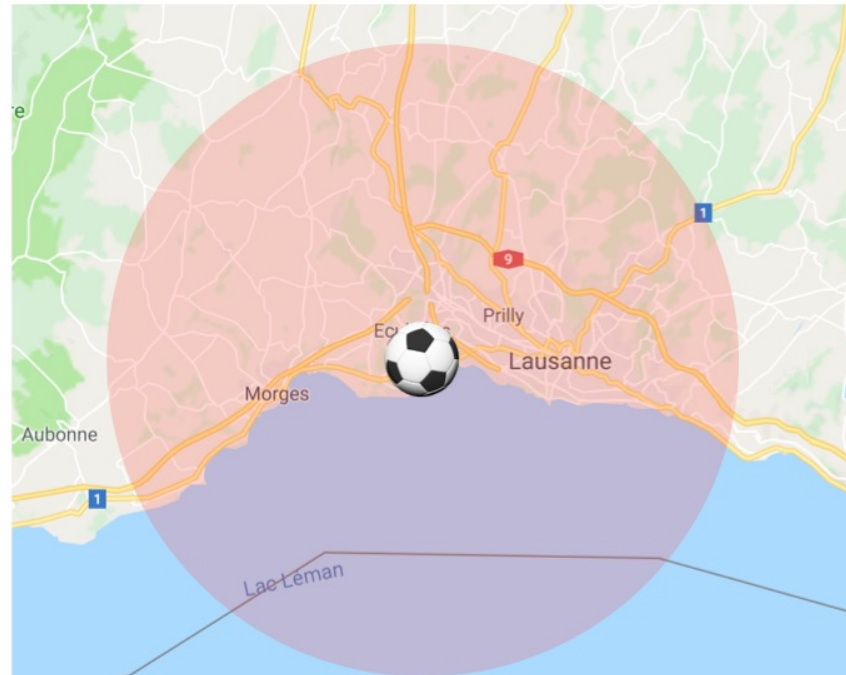
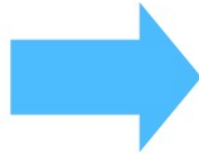
L'atome est constitué d'un noyau et d'un nuage électronique

Noyau: Nuage électronique

ca. 1 fm
 10^{-15} m



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



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 (*uma*): 1/12 masse d'un atome de ^{12}C

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

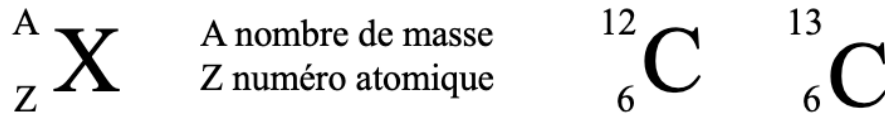
Un atome de carbone ^{12}C est constitué de 6 protons, 6 neutrons, 6 électrons

Sa masse est égale à 12 *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.



$A - Z = \text{nombre de neutrons: } 6 \qquad 7$

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

Les isotopes peuvent être utilisés comme marqueurs

Exemple: ^{14}C

- Concentration de ^{14}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}C selon une loi de vitesse connue (1^{er} ordre, temps de demi-vie: 5730 ans)
- Détection de ^{14}C par mesure de radioactivité ou spectrométrie de masse
- Datation

Question



L'uranium 238 contient

? Protons

? Neutrons

? Electrons

Dualité onde/particule de l'électron

Déviaton 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

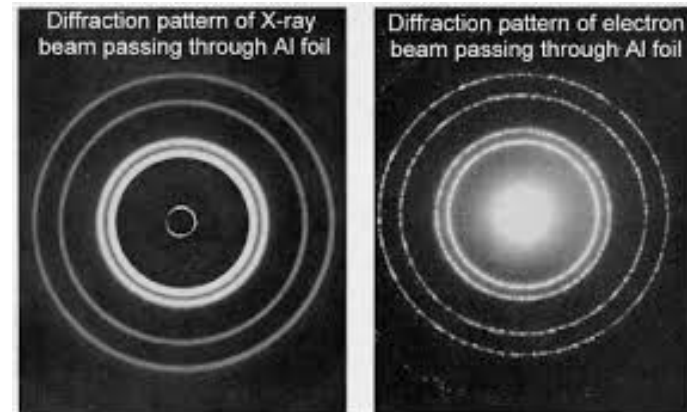


Comportement d'une onde (interférence)

Nouveauté quantique

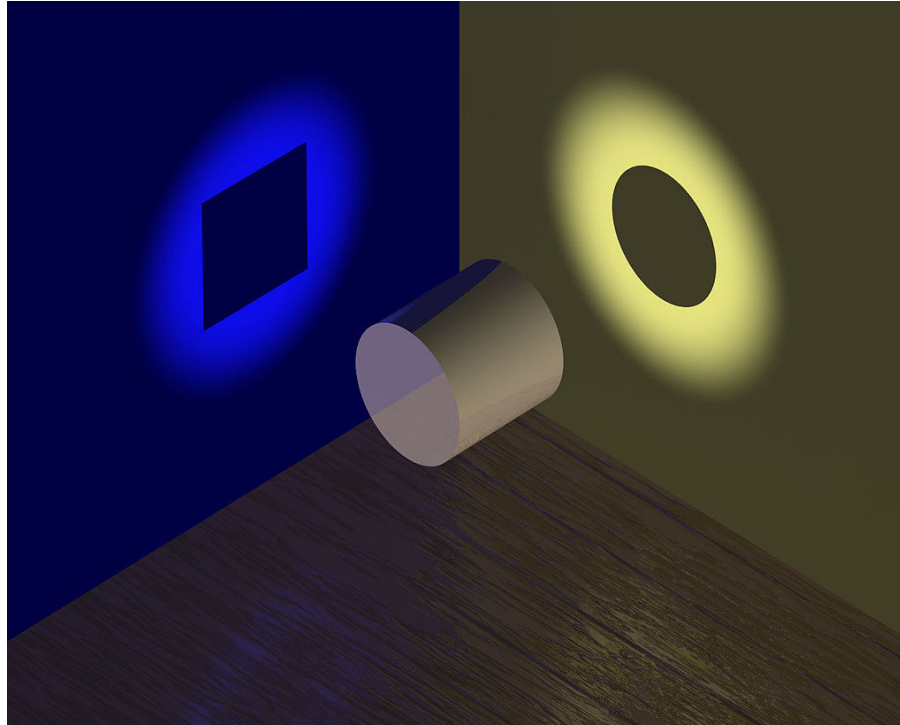


J.J Thomson Nobel prize 1906



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

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

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

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

ou 13.6 eV

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

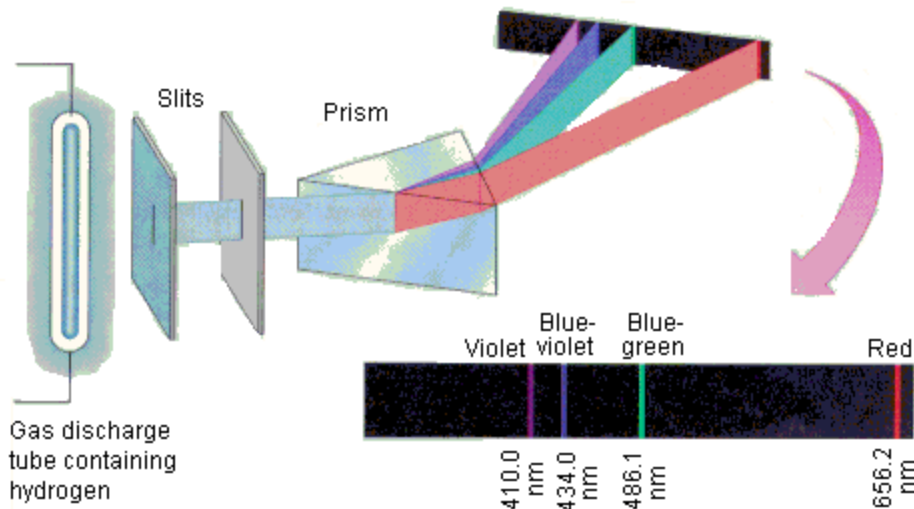


Niels Bohr
Prix Nobel de Physique, 1922

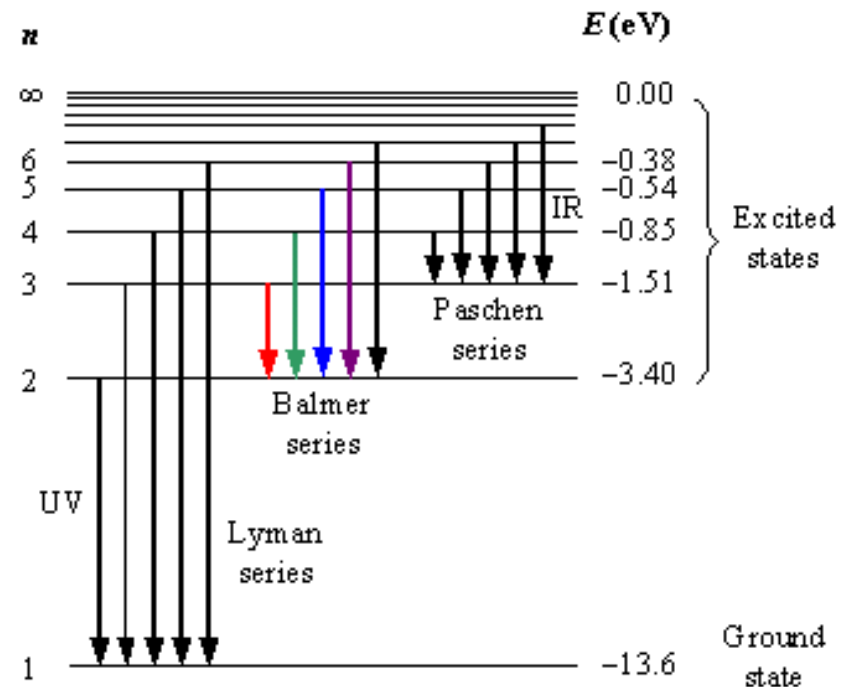
- ▶ **Postulat** : tant qu'un électron demeure à un niveau d'énergie donné, il ne peut pas émettre d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique
- ▶ Chaque valeur possible pour l'énergie correspond à une trajectoire circulaire et une distance noyau-électron
- ▶ **Le plus bas niveau d'énergie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

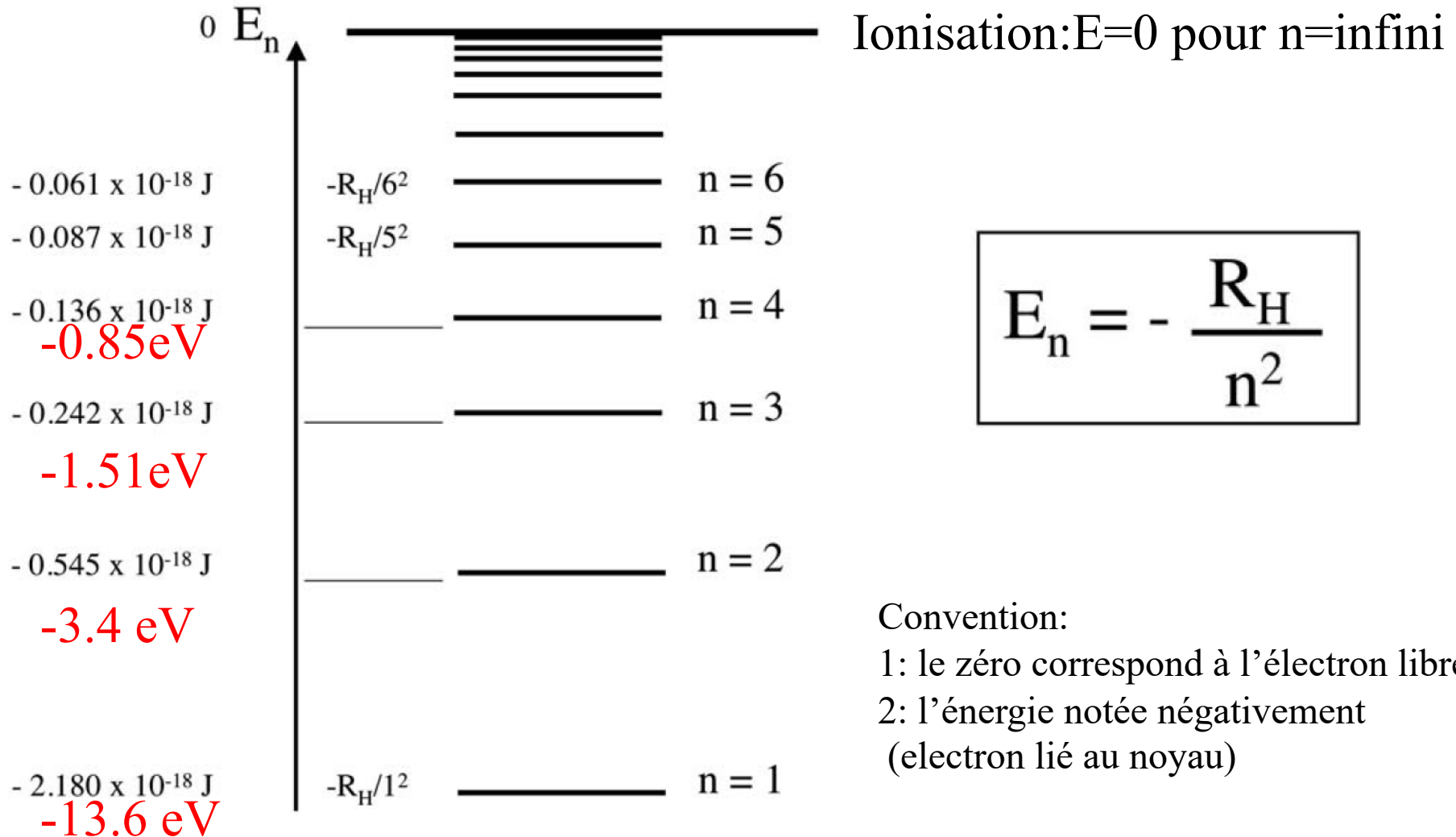


$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$$



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:

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

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

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

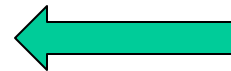
4: $-\frac{3}{4} \cdot 13.6 \text{ eV}$

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

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 décrites par une valeur efficace 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.

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

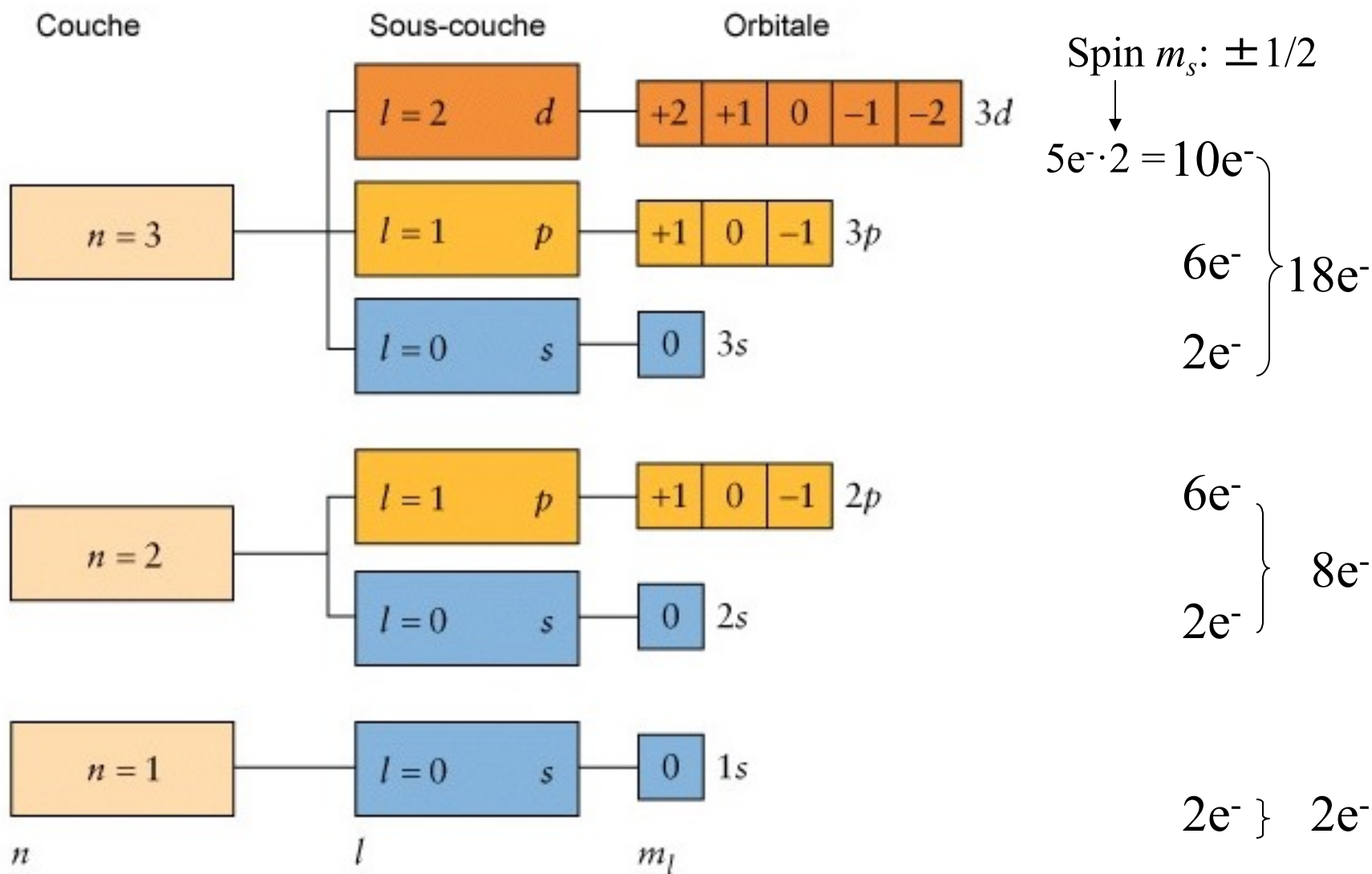
Principe d'exclusion de Pauli:

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 : $2n^2$

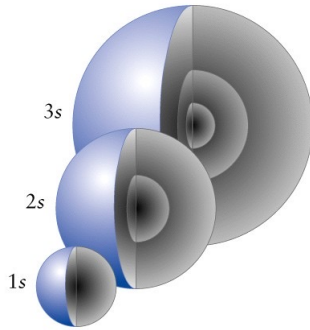


Les orbitales s,p,d, (les fonctions d'onde $\Psi_{n,l,m}$)

➡ $l = 0$, orbitale atomique s

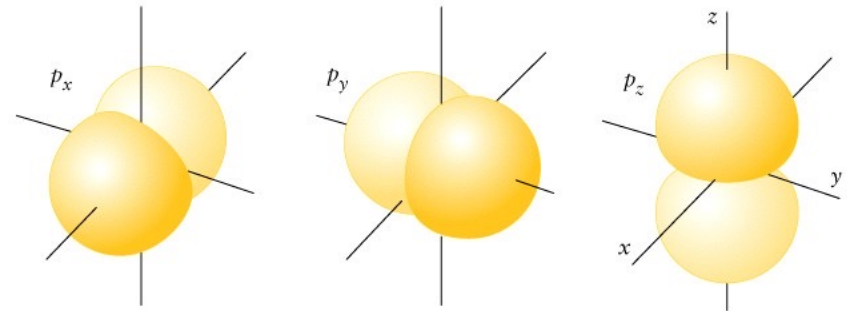
Nuage sphérique dont la densité diminue lorsque la distance au noyau augmente

Noeuds pour 2s, 3s, etc.



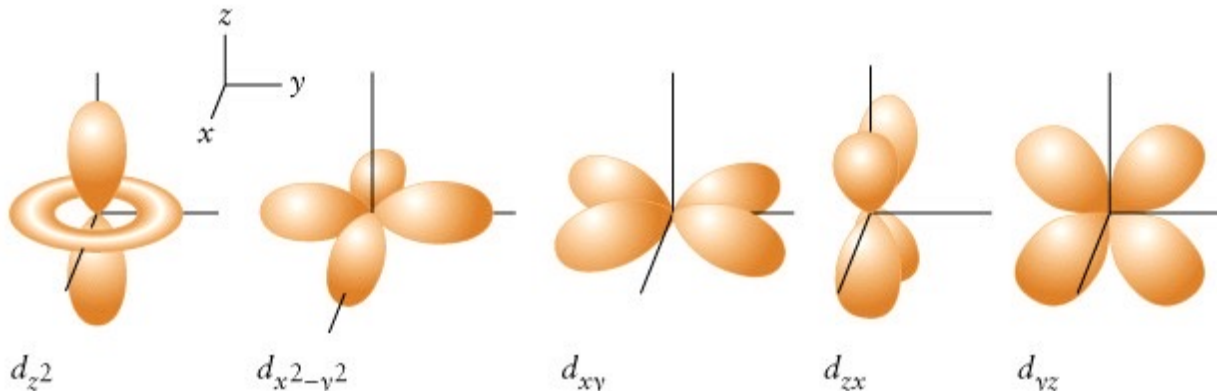
➡ $l = 1$, orbitales atomiques p

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

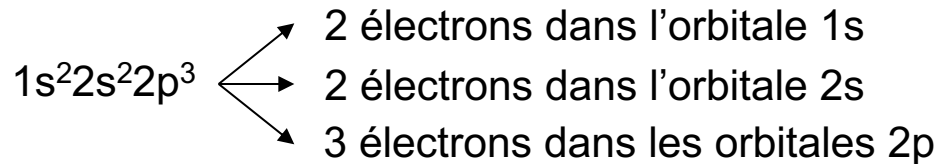
- décrit la distribution des électrons dans ses diverses orbitales

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



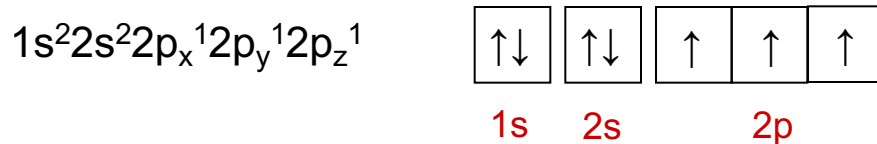
Notation spdf étendue

▸ distribution des électrons dans les orbitales

▸ Représentation des «**cases quantiques**»

Orbitales d'un même type ▸ représentées par des carrés

Electrons ▸ représentées par des flèches



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)

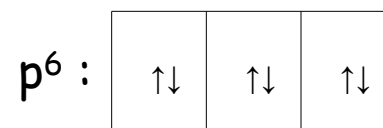
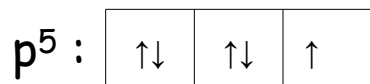
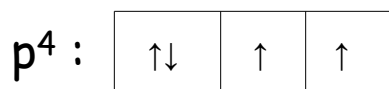
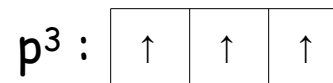
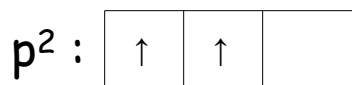
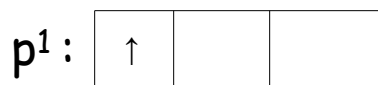
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < \dots$$

- 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 :



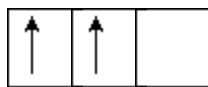
Exemples : configuration électronique du carbone (6 electrons)



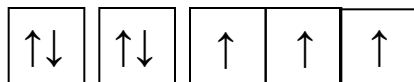
$1s^2$



$2s^2$



$2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$

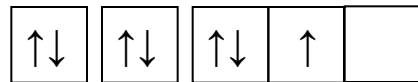


1s

2s

2p

exact

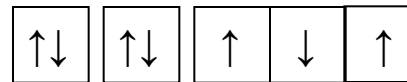


1s

2s

2p

inexact



1s

2s

2p

inexact

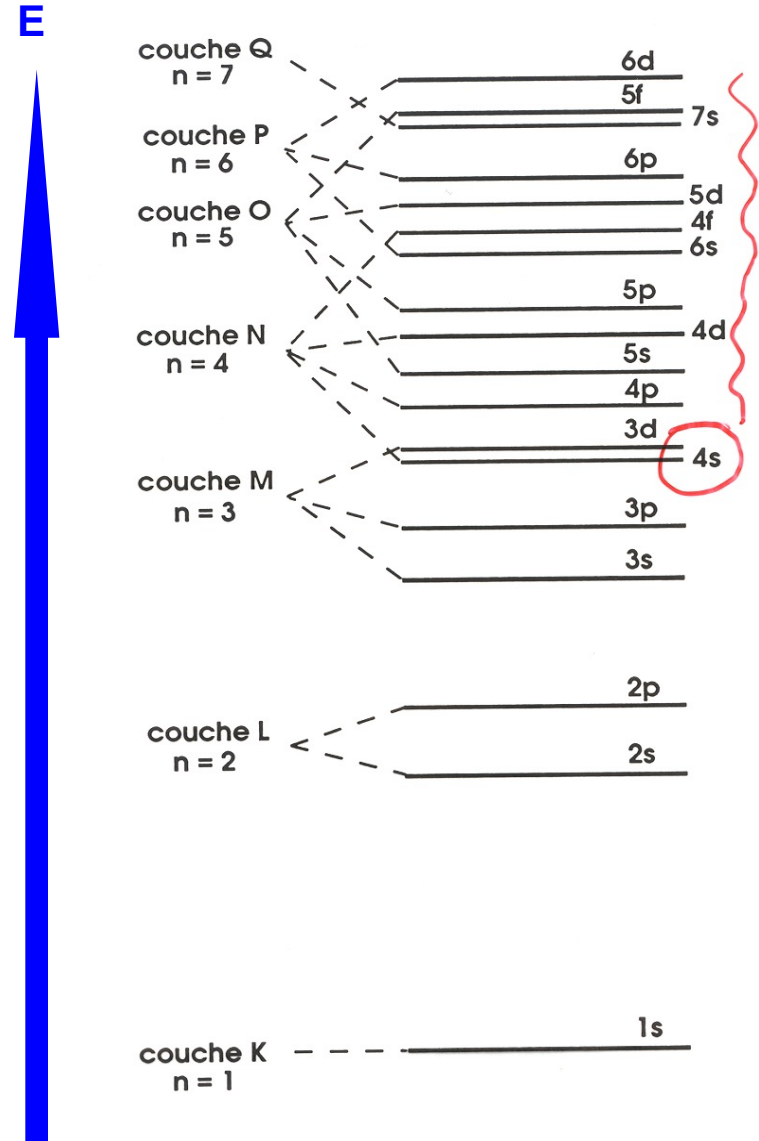
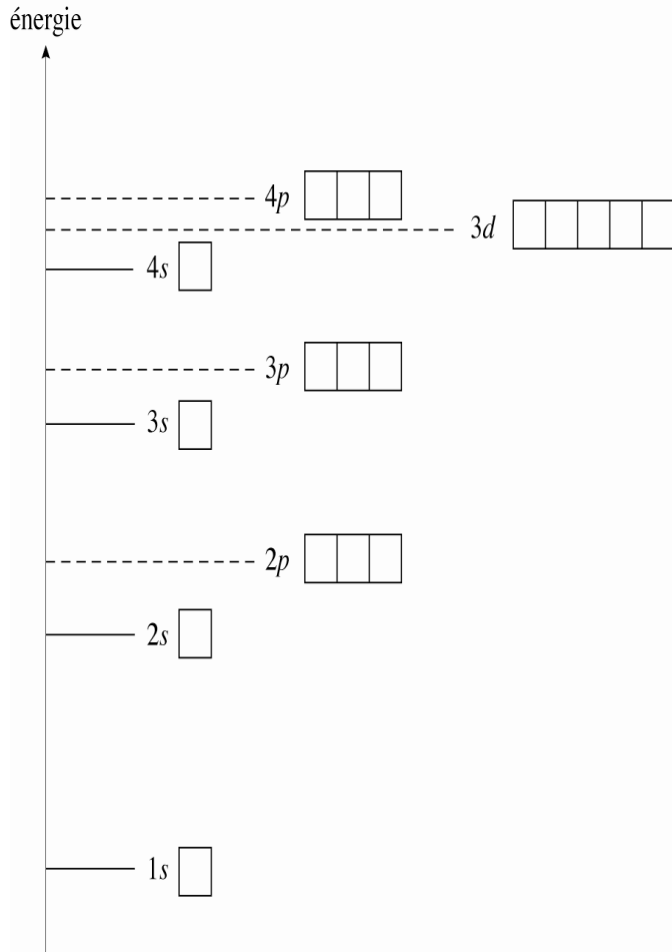


Friedrich Hund
(1896-1997)

↑↓ électrons appariés ↑ électron célibataire

Configuration électronique des éléments

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



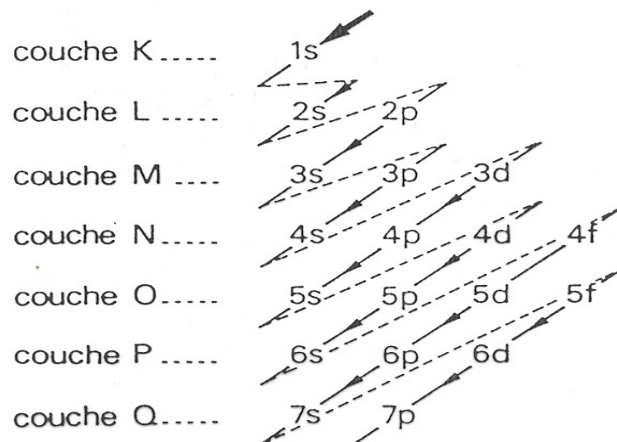
Règle de Klechkowsky ou principe de stabilité:

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 :

$1s - 2s - 2p - 3s - 3p - 4s - 3d - 4p - 5s - 4d - 5p - 6s - 4f - 5d - 6p - 7s - 5f - 6d - 7p - 8s - \dots$

Configuration électronique des éléments

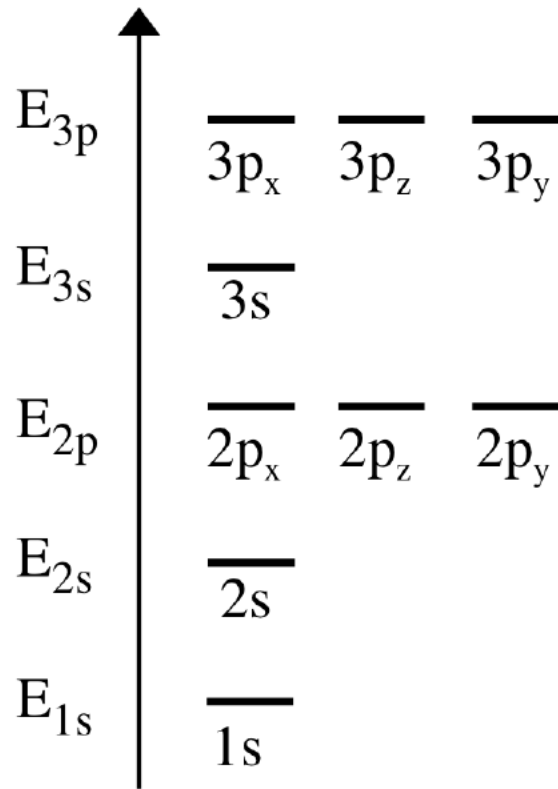
Procédure pour établir la configuration électronique des éléments dans leur état fondamental



Vsevolod Klechkowski
(1900-1972)

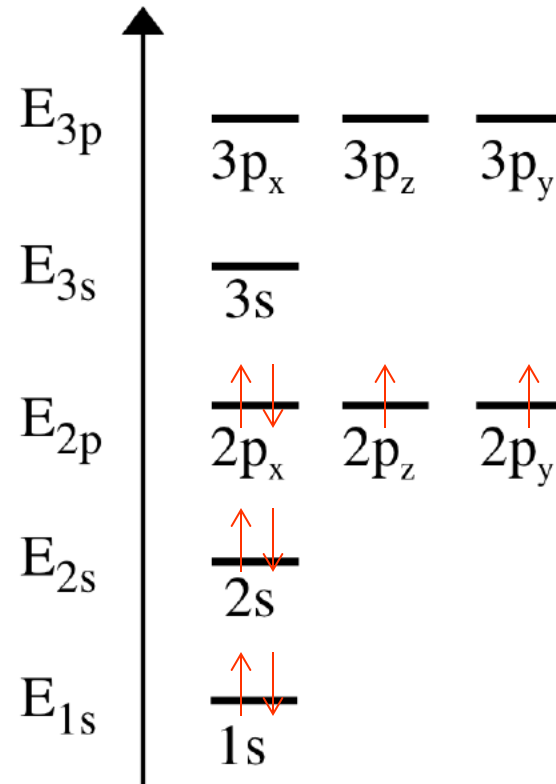
EXERCICE :

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



EXERCICE :

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



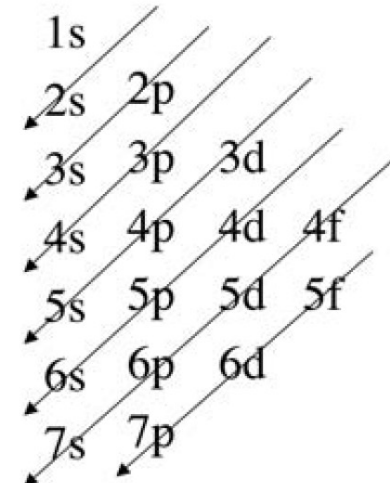
Configuration : $1s^2 2s^2 2p^4$

2 électrons célibataires

Configuration électronique et tableau périodique

Découpage du tableau périodique suivant le remplissage des sous-couches

1s		1s
2s		2p
3s		3p
4s	*	4d
5s		5p
6s	*	6p
7s	**	
		4f
		5f

 $1s^1$ $1s^2 2s^2$
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$$
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$$
 $1s^2$
$$1s^2 2s^2 2p^6$$
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$$
$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$$


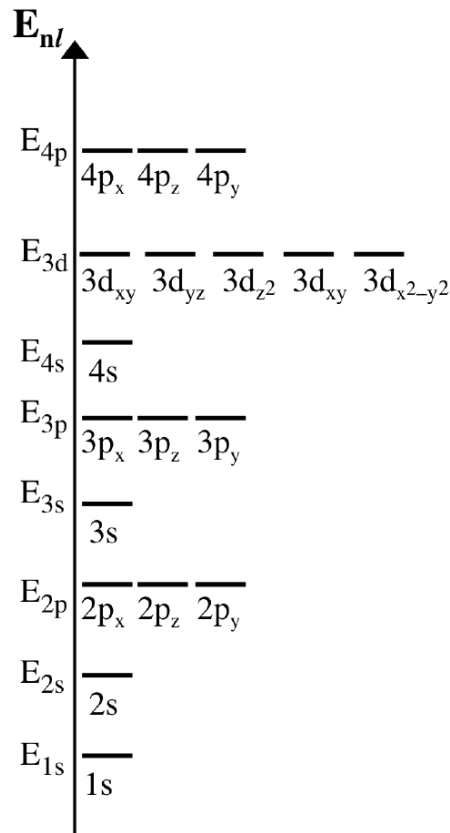
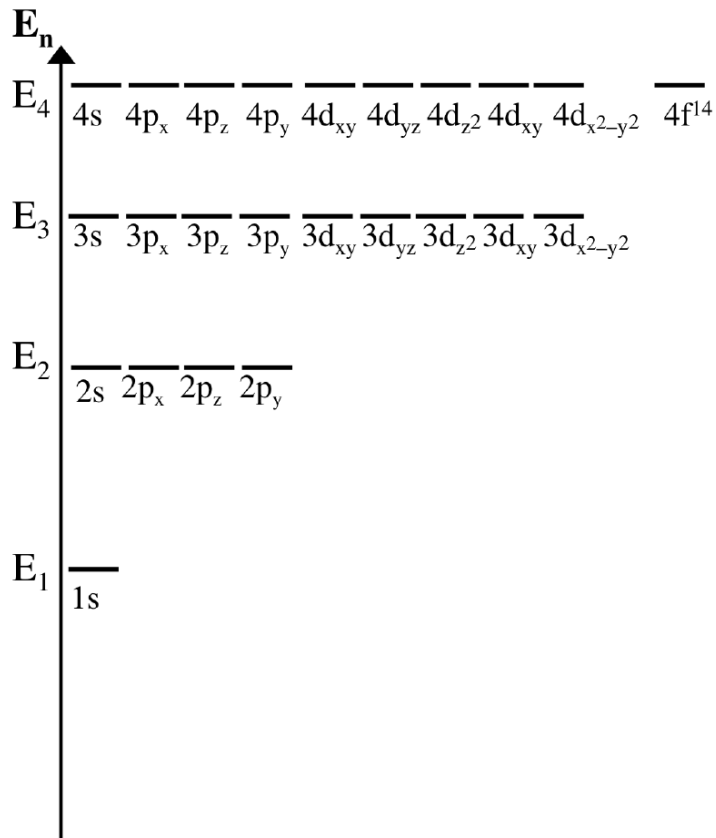
*Les électrons occupent l'orbitale 4s avant l'orbitale 3d (l'atome a une énergie plus basse lorsque l'électron occupe l'orbitale 4s plutôt que 3d).

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	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Comparaison entre atomes hydrogénoïdes 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^{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 1s¹																	2 He Hélium 1s²
2	3 Li Lithium 1s²2s¹	4 Be Béryllium 1s²2s²											5 B Bore 1s²2s²2p¹	6 C Carbone 1s²2s²2p²	7 N Azote 1s²2s²2p³	8 O Oxygène 1s²2s²2p⁴	9 F Fluor 1s²2s²2p⁵	10 Ne Néon 1s²2s²2p⁶
3	11 Na Sodium [Ne]3s¹	12 Mg Magnésium [Ne]3s²											13 Al Aluminium [Ne]3s²3p¹	14 Si Silicium [Ne]3s²3p²	15 P Phosphore [Ne]3s²3p³	16 S Soufre [Ne]3s²3p⁴	17 Cl Chlore [Ne]3s²3p⁵	18 Ar Argon [Ne]3s²3p⁶
4	19 K Potassium [Ar]4s¹	20 Ca Calcium [Ar]4s²	21 Sc Scandium [Ar]3d¹4s²	22 Ti Titane [Ar]3d²4s²	23 V Vanadium [Ar]3d³4s²	24 Cr Chrome [Ar]3d⁵4s¹	25 Mn Manganèse [Ar]3d⁵4s²	26 Fe Fer [Ar]3d⁶4s²	27 Co Cobalt [Ar]3d⁷4s²	28 Ni Nickel [Ar]3d⁸4s²	29 Cu Cuivre [Ar]3d¹⁰4s¹	30 Zn Zinc [Ar]3d¹⁰4s²	31 Ga Gallium [Ar]3d¹⁰4s²4p¹	32 Ge Germanium [Ar]3d¹⁰4s²4p²	33 As Arsenic [Ar]3d¹⁰4s²4p³	34 Se Sélénium [Ar]3d¹⁰4s²4p⁴	35 Br Brome [Ar]3d¹⁰4s²4p⁵	36 Kr Krypton [Ar]3d¹⁰4s²4p⁶
5	37 Rb Rubidium [Kr]5s¹	38 Sr Strontium [Kr]5s²	39 Y Yttrium [Kr]4d¹5s²	40 Zr Zirconium [Kr]4d²5s²	41 Nb Niobium [Kr]4d⁴5s¹	42 Mo Molybdène [Kr]4d⁵5s¹	43 Tc Technétium [Kr]4d⁵5s²	44 Ru Ruthénium [Kr]4d⁷5s¹	45 Rh Rhodium [Kr]4d⁸5s¹	46 Pd Palladium [Kr]4d¹⁰	47 Ag Argent [Kr]4d¹⁰5s¹	48 Cd Cadmium [Kr]4d¹⁰5s²	49 In Indium [Kr]4d¹⁰5s²5p¹	50 Sn Étain [Kr]4d¹⁰5s²5p²	51 Sb Antimoine [Kr]4d¹⁰5s²5p³	52 Te Tellure [Kr]4d¹⁰5s²5p⁴	53 I Iode [Kr]4d¹⁰5s²5p⁵	54 Xe Xénon [Kr]4d¹⁰5s²5p⁶
6	55 Cs Césium [Xe]6s¹	56 Ba Baryum [Xe]6s²	57 La Lanthane [Xe]5d¹6s²	* 72 Hf Hafnium [Xe]4f¹⁴5d²6s²	73 Ta Tantale [Xe]4f¹⁴5d³6s²	74 W Tungstène [Xe]4f¹⁴5d⁴6s²	75 Re Rhenium [Xe]4f¹⁴5d⁵6s²	76 Os Osmium [Xe]4f¹⁴5d⁶6s²	77 Ir Iridium [Xe]4f¹⁴5d⁷6s²	78 Pt Platine [Xe]4f¹⁴5d⁹6s¹	79 Au Or [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s¹	80 Hg Mercure [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²	81 Tl Thallium [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p¹	82 Pb Plomb [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p²	83 Bi Bismuth [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p³	84 Po Polonium [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁴	85 At Astate [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁵	86 Rn Radon [Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁶
7	87 Fr Francium [Rn]7s¹	88 Ra Radium [Rn]7s²	89 Ac Actinium [Rn]6d¹7s²	104 Rf Rutherfordium [Rn]5f¹⁴6d²7s²	105 Db Dubnium [Rn]5f¹⁴6d³7s²	106 Sg Seaborgium [Rn]5f¹⁴6d⁴7s²	107 Bh Bohrium [Rn]5f¹⁴6d⁵7s²	108 Hs Hassium [Rn]5f¹⁴6d⁶7s²	109 Mt Meitnerium [Rn]5f¹⁴6d⁷7s²	110 Ds Darmstadtium [Rn]5f¹⁴6d⁸7s²	111 Rg Roentgenium [Rn]5f¹⁴6d⁹7s²	112 Cn Copernicium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²	113 Uut Ununtrium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p¹	114 Fle Flerovium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p²	115 Uup Ununpentium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p³	116 Lv Livermorium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p⁴	117 Uus Ununseptium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p⁵	118 Uuo Ununoctium [Rn]5f¹⁴6d¹⁰7s²7p⁶

6
C
Carbone
1s²2s²2p²

Numéro atomique
symbole
Nom de l'élément
Configuration électronique

Exceptions
à l'Aufbau

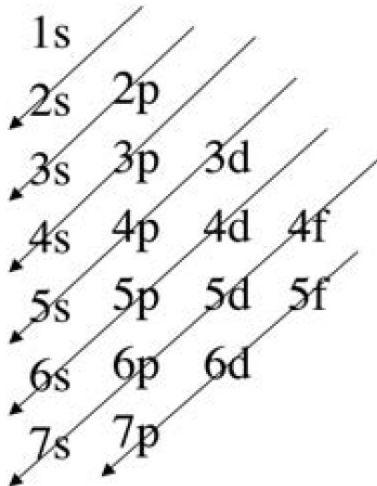
Supposé

58 Ce Cérium [Xe]4f¹5d¹6s²	59 Pr Praseodyme [Xe]4f³6s²	60 Nd Néodyme [Xe]4f⁴6s²	61 Pm Prométhium [Xe]4f⁵6s²	62 Sm Samarium [Xe]4f⁶6s²	63 Eu Europium [Xe]4f⁷6s²	64 Gd Gadolinium [Xe]4f⁷5d¹6s²	65 Tb Terbium [Xe]4f⁹6s²	66 Dy Dysprosium [Xe]4f¹⁰6s²	67 Ho Holmium [Xe]4f¹¹6s²	68 Er Erbium [Xe]4f¹²6s²	69 Tm Thulium [Xe]4f¹³6s²	70 Yb Ytterbium [Xe]4f¹⁴6s²	71 Lu Lutécium [Xe]4f¹⁴5d¹6s²
90 Th Thorium [Rn]6d²7s²	91 Pa Protactinium [Rn]5f²6d¹7s²	92 U Uranium [Rn]5f³6s²	93 Np Neptunium [Rn]5f⁴6s²	94 Pu Plutonium [Rn]5f⁶6s²	95 Am Américium [Rn]5f⁷6s²	96 Cm Curium [Rn]5f⁷6s²	97 Bk Berkélium [Rn]5f⁹6s²	98 Cf Californium [Rn]5f¹⁰6s²	99 Es Einsteinium [Rn]5f¹¹6s²	100 Fm Fermium [Rn]5f¹²6s²	101 Md Mendelevium [Rn]5f¹³6s²	102 No Nobélium [Rn]5f¹⁴6s²	103 Lr Lawrencium [Rn]5f¹⁴5d¹6s²

Quelques exceptions à la règle de l'Aufbau

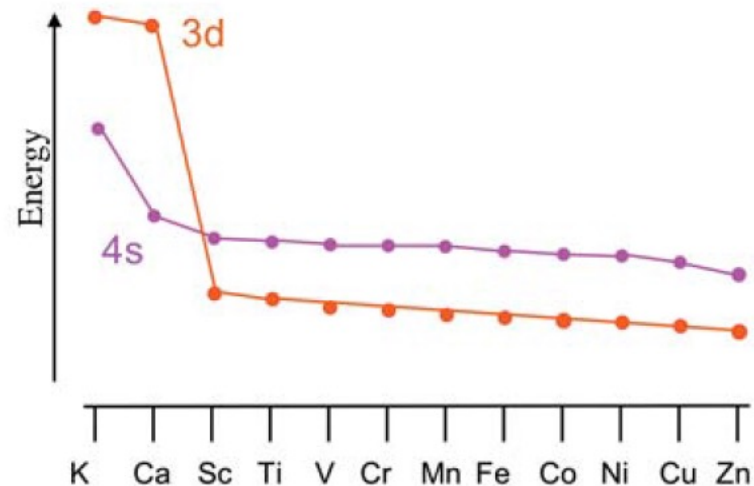
2-Les cations (des métaux de transition)

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



Pour orbitales vides

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



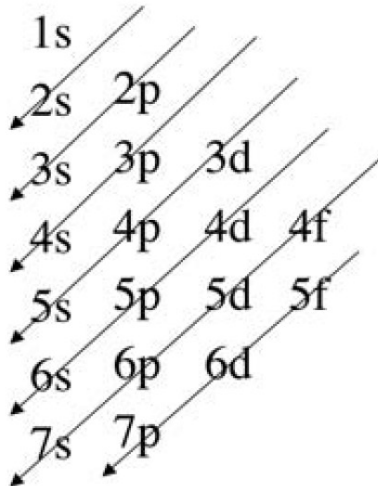
Pour orbitales occupées

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

Exercice:

La configuration électronique de l'ion 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:

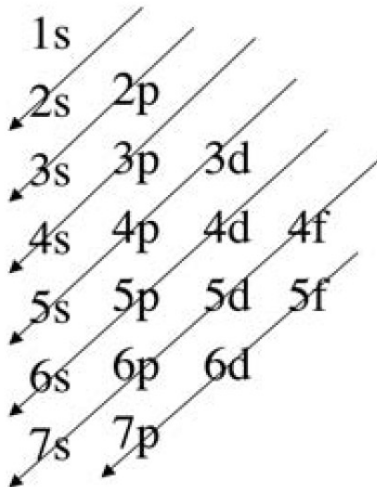
La configuration électronique de l'ion Fe^{2+} est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ (juste ou faux?),

FAUX!

Info : Fe: 26 électrons

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 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

[illegible]

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

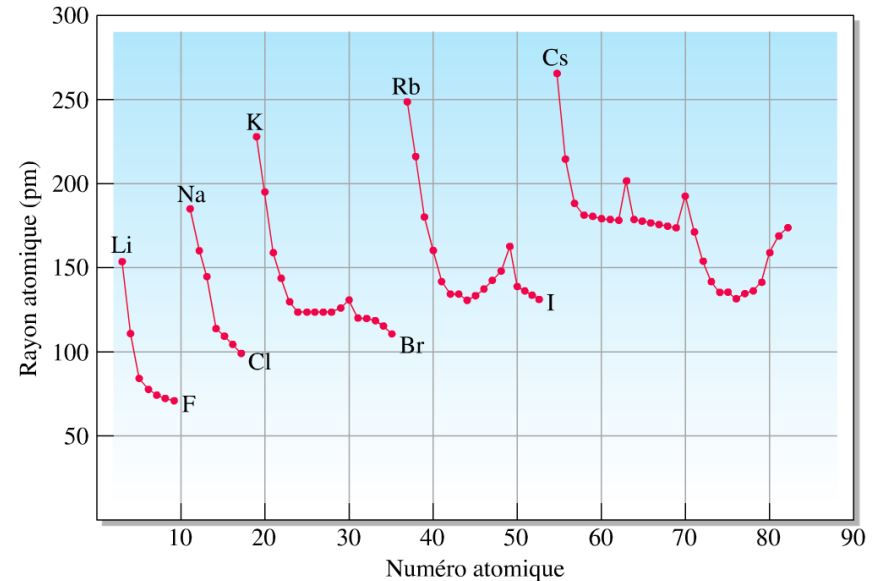
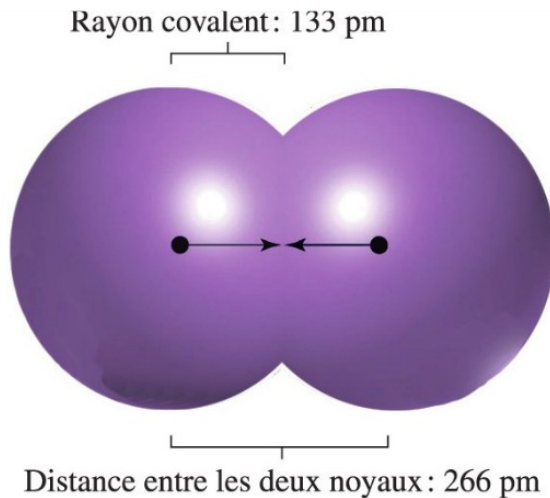
Définitions:

- 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_2

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



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

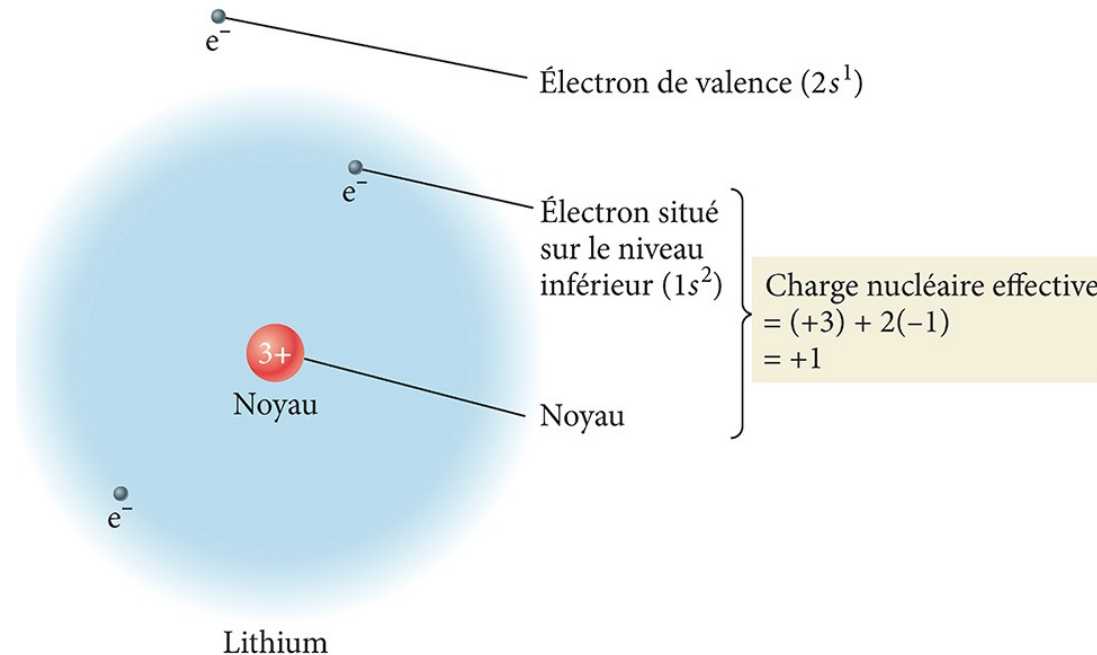
	1	2	13	14	15	16	17	18
2	Li 157	Be 112	B 88	C 77	N 74	O 66	F 64	Ne
3	Na 191	Mg 160	Al 143	Si 118	P 110	S 104	Cl 99	Ar
4	K 235	Ca 197	Ga 153	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114	Kr
5	Rb 250	Sr 215	In 167	Sn 158	Sb 141	Te 137	I 133	Xe
6	Cs 272	Ba 224	Tl 171	Pb 175	Bi 182	Po 167	At	Rn

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_{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)

	1	2	3	4		14	15	16	17	18								
1	1 H Hydrogène 1s¹									2 He Hélium 1s²								
2	3 Li Lithium 1s² 2s¹	4 Be Béryllium 1s² 2s²			6 C Carbone 1s² 2s² 2p²		5 B Bore 1s² 2s² 2p¹	6 C Carbone 1s² 2s² 2p²	7 N Azote 1s² 2s² 2p³	8 O Oxygène 1s² 2s² 2p⁴	9 F Fluor 1s² 2s² 2p⁵	10 Ne Neon 1s² 2s² 2p⁶						
3	11 Na Sodium 1s² 2s² 2p⁶ 3s¹	12 Mg Magnésium 1s² 2s² 2p⁶ 3s²					13 Al Aluminium 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p¹	14 Si Silicium 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p²	15 P Phosphore 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p³	16 S Soufre 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁴	17 Cl Chlore 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁵	18 Ar Argon 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶						
4	19 K Potassium [Ar] 4s¹	20 Ca Calcium [Ar] 4s²	21 Sc Scandium [Ar] 3d¹ 4s²	22 Ti Titane [Ar] 3d² 4s²	23 V Vanadium [Ar] 3d³ 4s²	24 Cr Chrome [Ar] 3d⁵ 4s¹	25 Mn Manganèse [Ar] 3d⁵ 4s²	26 Fe Fer [Ar] 3d⁶ 4s²	27 Co Cobalt [Ar] 3d⁷ 4s²	28 Ni Nickel [Ar] 3d⁸ 4s²	29 Cu Cuivre [Ar] 3d¹⁰ 4s¹	30 Zn Zinc [Ar] 3d¹⁰ 4s²	31 Ga Gallium [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p¹	32 Ge Germanium [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p²	33 As Arsenic [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p³	34 Se Sélénium [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p⁴	35 Br Brome [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p⁵	36 Kr Krypton [Ar] 3d¹⁰ 4s² 4p⁶

Question

Qui a le plus grand rayon ionique?

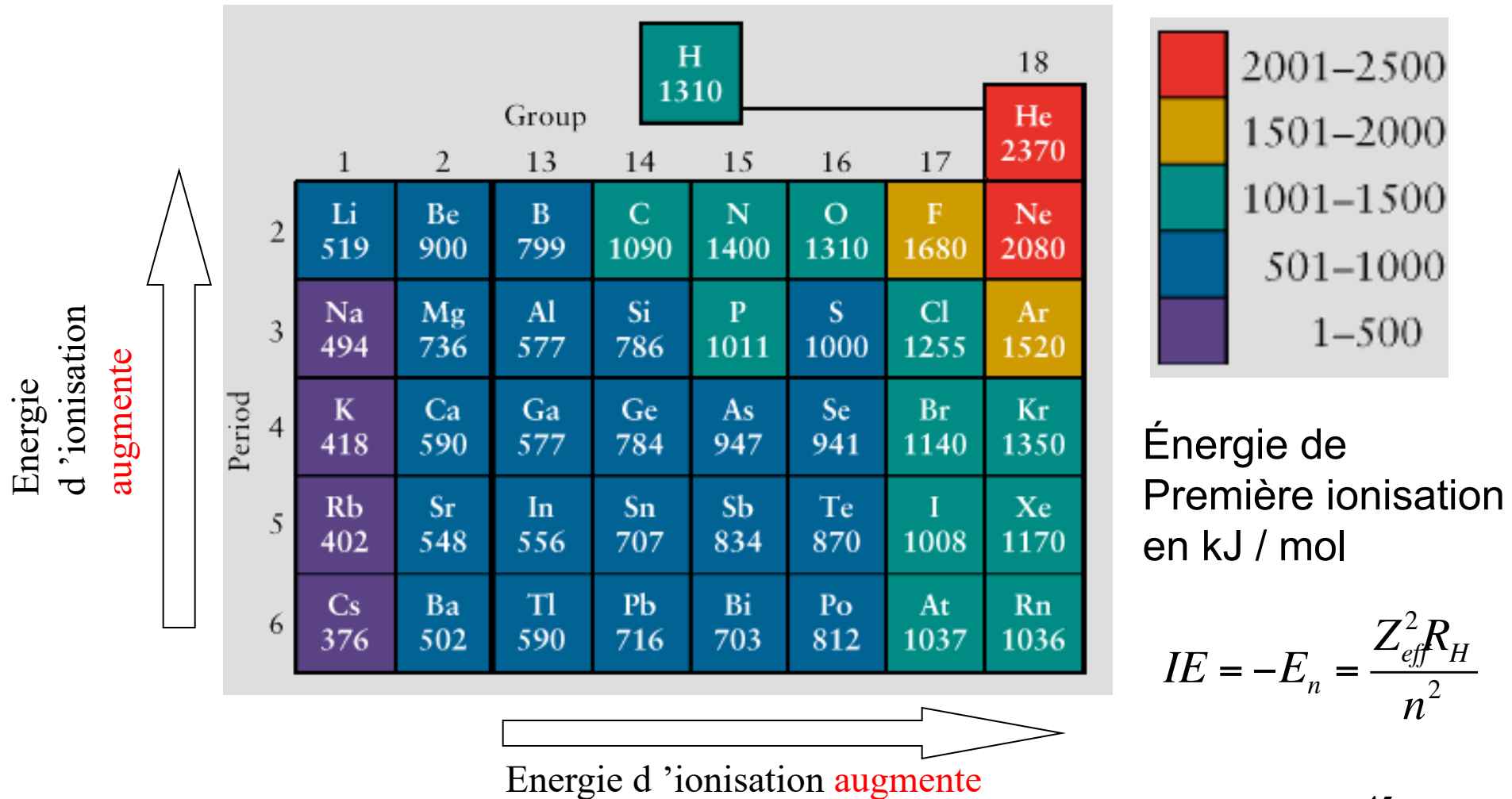
1. K^+
2. Cl^-

	1	2	3	4						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 ² 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 [Ne]3s ¹	12 Mg Magnésium [Ne]3s ²								13 Al Aluminium [Ne]3s ² 3p ¹	14 Si Silicium [Ne]3s ² 3p ²	15 P Phosphore [Ne]3s ² 3p ³	16 S Soufre [Ne]3s ² 3p ⁴	17 Cl Chlore [Ne]3s ² 3p ⁵	18 Ar Argon [Ne]3s ² 3p ⁶			
4	19 K Potassium [Ar]4s ¹	20 Ca Calcium [Ar]4s ²	21 Sc Scandium [Ar]3d ¹ 4s ²	22 Ti Titane [Ar]3d ² 4s ²	23 V Vanadium [Ar]3d ³ 4s ²	24 Cr Chrome [Ar]3d ⁵ 4s ¹	25 Mn Manganèse [Ar]3d ⁵ 4s ²	26 Fe Fer [Ar]3d ⁶ 4s ²	27 Co Cobalt [Ar]3d ⁷ 4s ²	28 Ni Nickel [Ar]3d ⁸ 4s ²	29 Cu Cuivre [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn Zinc [Ar]3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga Gallium [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ 4p ¹	32 Ge Germanium [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	33 As Arsenic [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	34 Se Sélénium [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	35 Br Brome [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	36 Kr Krypton [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

Energie d'ionisation

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

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

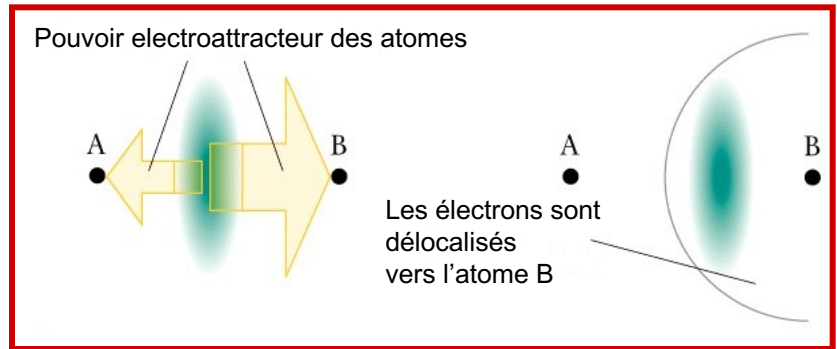
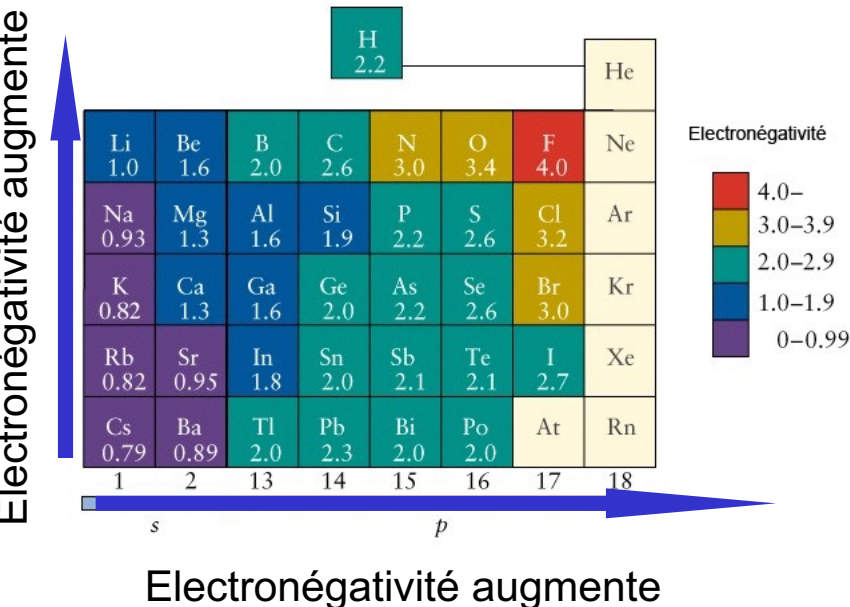
Electronégativité

➡ 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: électronégativité proportionnelle à la moyenne de l'énergie d'ionisation et de l'affinité électronique



Linus Pauling



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

Electronégativité et énergie d'ionisation

atome

Energie d'ionisation
faible



molécule

Electronégativité
faible



molécule

Fort caractère
métallique



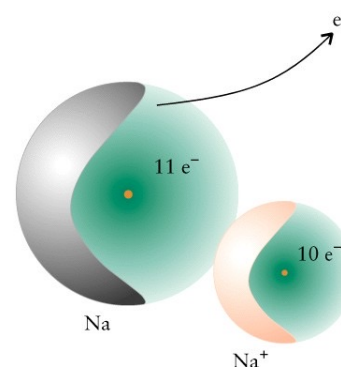
molécule

Fort pouvoir
réducteur



Electronégativité: 0.93

Energie d'ionisation: 494 kJ/mol



Tendance à
donner
des électrons

Energie d'ionisation
élevée



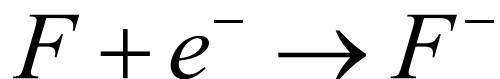
Electronégativité
élevée



Caractère
Non métallique

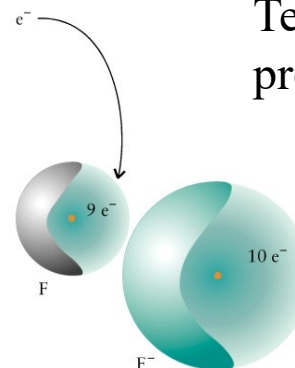


Fort pouvoir
oxydant



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

