

---

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Élément chimique et atome</b>	<b>5</b>
1.1	Entité et espèce chimique . . . . .	5
1.2	Élément chimique . . . . .	5
1.3	Atome . . . . .	5
1.3.1	Composition . . . . .	5
1.3.2	Isotopie . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Description quantique de l'atome</b>	<b>7</b>
2.1	Équation de Schrödinger . . . . .	7
2.2	Résolution de l'équation monoélectronique . . . . .	8
2.3	Orbitales atomiques de l'hydrogène . . . . .	9
2.3.1	Définition . . . . .	9
2.3.2	Normalisation des orbitales . . . . .	10
2.3.3	Représentation des orbitales . . . . .	10
2.4	Atomes polyélectroniques . . . . .	12
2.4.1	Approximation orbitalaire et modèle de Slater . . . . .	12
2.4.2	Constantes d'écran et paramètres de Slater . . . . .	13
2.5	Configuration électronique . . . . .	14
2.5.1	Règles de remplissage . . . . .	14
2.5.2	Electrons de coeur et de valence . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Classification périodique des éléments</b>	<b>17</b>
3.1	Classification périodique actuelle . . . . .	17
3.1.1	Blocs . . . . .	17
3.1.2	Périodes . . . . .	17
3.1.3	Familles . . . . .	18
3.2	Évolution de quelques propriétés à travers la classification périodique . . . . .	18
3.2.1	Charge effective $Z^*$ . . . . .	18
3.2.2	Energie d'ionisation . . . . .	19
3.2.3	Affinité chimique . . . . .	20
3.2.4	Rayon atomique . . . . .	20
3.2.5	Rayon ionique . . . . .	21
3.2.6	Electronégativité . . . . .	22
3.3	Illustration de propriétés de certaines familles . . . . .	23
3.3.1	Propriétés réductrices des alcalins . . . . .	23
3.3.2	Propriétés oxydantes des halogènes . . . . .	24
3.4	Limites du modèle de Slater . . . . .	25
3.4.1	Expérience des flammes colorées . . . . .	25
3.4.2	Rationalisation . . . . .	26



# Partie 1

## Élément chimique et atome

### 1.1 Entité et espèce chimique

<b>Entité chimique</b> : tout atome, molécule, ion, paire d'ions, radical, diradical, ion radical, complexe, conformère, etc... défini chimiquement ou isotopiquement et pouvant être identifié individuellement.
---

<sup>1</sup>

<b>Espèce chimique</b> : ensemble d'entités chimiques structuralement et chimiquement identiques.
---

<sup>2</sup>

⚠ Entité et espèce chimique sont souvent confondus.

*Cas des tests caractéristiques* : ceux-ci permettent de détecter la présence d'une espèce chimique mais pas d'une seule entité chimique.

### 1.2 Élément chimique

<b>Élément chimique</b> : ensemble des entités chimiques monoatomiques possédant le même nombre de protons dans leur noyau atomique. Celui-ci est le numéro atomique de l'élément chimique et se note Z.
--

A ce jour, il y a 118 éléments chimiques, naturels ou artificiels, dans le tableau périodique.

### 1.3 Atome

#### 1.3.1 Composition

Un atome (Figure 1.a) est constitué :

- d'un **noyau** central comportant un nombre A de nucléons. Ce dernier s'appelle le **nombre de masse**<sup>3</sup>. Ces nucléons sont répartis en Z **protons** et N **neutrons** tels que  $A = N + Z$ .
- de Z **électrons** assurant l'électroneutralité de l'atome. Les électrons occupent la quasi-totalité du volume de l'atome.<sup>4</sup> Ce dernier a donc une **structure lacunaire**.

On note ainsi ${}^A_ZX$ un atome de l'élément X.
--

*Exemple* : l'atome de carbone contient 12 nucléons dont 6 protons. On note alors  ${}^{12}_6C$ .

---

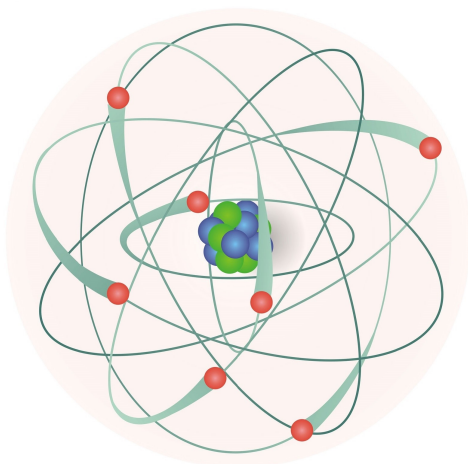
1. Ce terme est utilisé dans le cadre d'une description atomique.

2. Ce terme est utilisé dans le cadre d'une description macroscopique.

3. Cela est lié au fait que le noyau concentre la quasi-totalité de la masse de l'atome.

4. Le rayon du noyau est 100 000 fois plus petit que celui de l'atome.

a)



b)

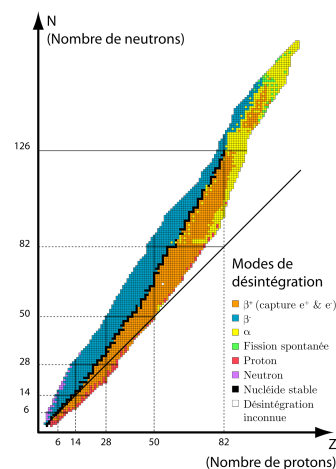


FIGURE 1: **a)** Modélisation d'un atome ( $\varnothing_{\text{noyau}} = 10^{-15}$  m et  $\varnothing_{\text{atome}} = 10^{-10}$  m), **b)** Diagramme de Segré

### 1.3.2 Isotopie

**Isotopes** : atomes ayant le même numéro atomique  $Z$  mais des nombres de masse  $A$  et  $A'$  différents.

*Exemple* : le carbone possède trois isotopes  $^{12}_6\text{C}$ ,  $^{13}_6\text{C}$  et  $^{14}_6\text{C}$ .

Le mot isotope a été introduit par le chimiste britannique Frederick Soddy<sup>5</sup> et vient du grec *iso-topos* signifiant que ces entités sont placées au même (*iso*) endroit (*topos*) dans la classification périodique.

Les différents isotopes d'un même élément sont présents en différentes proportions dans un échantillon donné. On parle alors d'abondance isotopique.

**Abondance isotopique** : pourcentage d'un isotope donné dans un échantillon contenant différents isotopes d'un élément chimique.

Dans le cas d'un échantillon n'ayant pas été enrichi en un isotope particulier, on parle d'**abondance naturelle**.

Certains isotopes d'un même élément ne sont pas stables et évoluent spontanément pour donner des éléments plus stables en libérant de l'énergie. Le **diagramme de Segré** (Figure 1.b) représente la vallée de stabilité et les types de réactions spontanées entrant en jeu selon les différents domaines du diagramme.

5. prix Nobel de chimie 1921 pour ses travaux sur la découverte des isotopes

## Partie 2

# Description quantique de l'atome

### 2.1 Équation de Schrödinger

Au début du XX<sup>e</sup> siècle, de nombreuses théories concernant la structure de l'atome se succèdent : le "plum-pudding" de **Thomson**<sup>6</sup>, le modèle de **Rutherford**<sup>7</sup> puis le modèle de **Bohr**<sup>8</sup> (Figure 2).

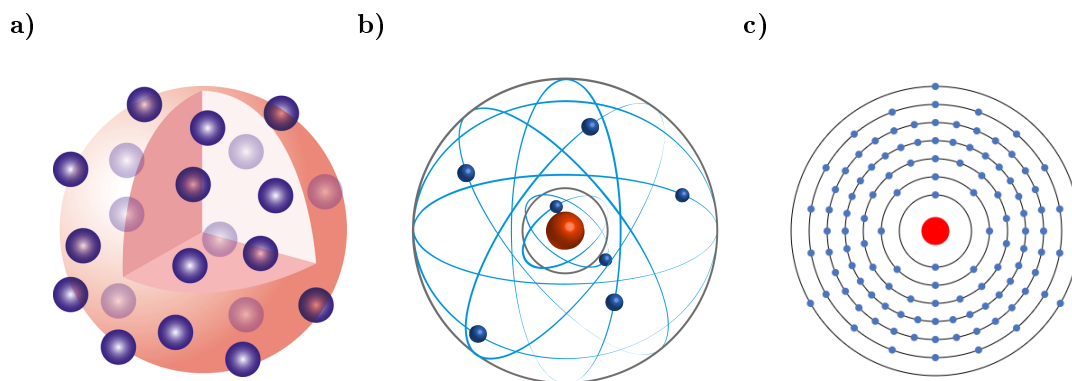


FIGURE 2: **a)** Modèle de Thomson, **b)** modèle de Rutherford et **c)** modèle de Bohr

Finalement, Louis **de Broglie** décrit en 1924 une théorie s'appuyant sur la dualité onde-particule, qui signe alors le début de la mécanique quantique. Cette théorie reprend celle de Rutherford mais insiste sur le fait que les électrons n'ont pas de trajectoires définies mais plutôt des probabilités de présence. L'autrichien Erwin **Schrödinger** formalisera un an plus tard l'équation décrivant l'évolution des électrons dans la matière :

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{d\Psi}{dt} \quad (2.1)$$

avec  $H$  l'**hamiltonien** et  $\Psi$  la **fonction d'onde**. Pour un phénomène stationnaire, l'équation de simplifie telle que :

$$\hat{H}\Psi = \epsilon\Psi \quad (2.2)$$

---

6. Les électrons sont considérés comme des «raisins» négatifs enfoncés dans un «pain» de matière positive.

7. Un atome est constitué d'électrons négatifs qui orbitent sur des trajectoires circulaires autour d'un noyau dense positif.

8. Modèle de Rutherford avec quantification des orbites électroniques

avec  $\epsilon$  l'énergie du système.

△ Cette équation ne peut être exactement résolue que pour les systèmes à un électron (l'atome d'hydrogène par exemple), ce que fit Schrödinger en 1927.

## 2.2 Résolution de l'équation monoélectronique

On ne considère dans cette partie que l'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïdes<sup>9</sup>. L'hamiltonien s'exprime alors tel que :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_N}\Delta_N - \frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.3)$$

avec respectivement un terme cinétique pour le noyau N, un terme cinétique pour l'électron et un terme d'interaction électrostatique entre le noyau et l'électron.

Lorsque l'on se place dans le référentiel du noyau, on a disparition du terme lié à l'énergie cinétique du noyau :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.4)$$

Les fonctions d'onde solutions de cette équation ont alors pour expression et pour énergie :

$$\phi_{nlm_l} = R_{nl}(r)Y_l^{ml}(\theta, \Phi) \quad (2.5)$$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (2.6)$$

avec

- $R_{nl}(r)$  **partie radiale** de la fonction d'onde telle que  $R_{nl}(r) = P_{nl}(r) \cdot e^{-Zr/na_0}$  où P est un polynôme et  $a_0$  le rayon de Bohr  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 52,91 \text{ pm}$ .
- $Y_l^{ml}(\theta, \Phi)$  **partie angulaire** de la fonction d'onde telle que  $Y_l^{ml}(\theta, \Phi) = Q_l^{ml}(\theta) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l\Phi}$  où Q est un polynôme en  $\cos(\theta)$ .

Ce deux sous-parties de la fonction d'onde font apparaître les nombres quantiques suivants :

- n le **nombre quantique principal**, entier non nul
- l le **nombre quantique secondaire (ou azimutal)**, entier tel que  $0 \leq l \leq n-1$ . Il s'agit du nombre quantique associé à l'opérateur du moment cinétique.
- $m_l$  le **nombre quantique tertiaire (ou magnétique)**, entier tel que  $-l \leq m_l \leq l$ .

Les énergies associées aux fonctions d'onde solutions du système ne dépendent que du nombre quantique principal n. On peut introduire la constante de Rydberg ( $R_H = 13,6 \text{ eV}$ ) pour simplifier l'expression et alors obtenir :

$$E_n = -\frac{R_H Z^2}{n^2} = -\frac{13,6 \cdot Z^2}{n^2} \text{ eV} \quad (2.7)$$

9. Ne possédant qu'un électron



## 2.3 Orbitales atomiques de l'hydrogène

### 2.3.1 Définition

Les fonctions d'onde présentées précédemment sont appelées orbitales atomiques.

**Orbitale atomique** : fonction d'onde monoélectronique solution de l'équation de Schrödinger monoélectronique.

*Remarque* : c'est la seule définition valable pour une orbitale atomique ! L'erreur classique consiste à définir l'orbitale atomique comme l'endroit où il est le plus probable de trouver l'électron autour du noyau, ce qui est faux. On verra par la suite que la connaissance de l'orbitale donne bien des informations sur la densité de probabilité de présence de l'électron mais il s'agit bien d'une fonction d'onde solution de l'équation. Dans une considération d'espace vectoriel il est possible de définir l'orbitale comme l'un des vecteurs propres du système associé à la valeur propre énergétique  $E_n$ , chaque orbitale formant alors l'un des vecteurs d'une base orthonormée de fonctions d'onde, mais cette considération ne change rien à la définition.

Afin de simplifier l'écriture des orbitales atomiques, de nouvelles notations sont couramment utilisées. Ainsi, pour une orbitale  $\phi_{nlm_l}$ , on adopte une notation de type **nlm<sub>l</sub>** en remplaçant l par une lettre correspondant à sa valeur :

- s pour  $l = 0$  (sharp)
- p pour  $l = 1$  (principal)
- d pour  $l = 2$  (diffuse)
- f pour  $l = 3$  (fundamental)

*Exemples* :  $\phi_{100}$  devient  $1s_0$  (également noté  $1s$ ) et  $\phi_{322}$  devient  $3d_2$ .

L'énergie associée aux orbitales ne dépendant que de  $n$ , ces dernières sont souvent dégénérées. Une notation pour l'ensemble des orbitales ayant la même énergie a alors été introduite. On parle ainsi de **couche électronique** définie par la valeur de  $n$  :

- couche K pour  $n = 1$
- couche L pour  $n = 2$
- couche M pour  $n = 3$
- couche N pour  $n = 4$

*Remarque* : Ces couches K, L et M sont souvent introduites en première approche au lycée car elles permettent de comprendre les bases de la construction atomique et moléculaire sans faire appel à la mécanique quantique. Par la suite, elles sont oubliées au profit des orbitales. On les retrouve cependant dans les notations des spectroscopistes qui observent les raies atomiques correspondant aux éléments et ont depuis longtemps adoptés ces notations pour décrire les radiations. On parle ainsi de raie K du lithium, des raies L, L<sub>II</sub> et L<sub>III</sub> du sodium.

Dans la même logique, la **sous-couche électronique** est définie par les nombres quantiques  $n$  et  $l$  :  $(2p, 3s, \dots)$ .<sup>10</sup>

On peut représenter les niveaux énergétiques des couches et des sous-couches. Par convention, un électron a une énergie nulle lorsqu'il est libre. Par conséquent, un **électron lié à un noyau** est stabilisé par cette interaction et a une **énergie négative**.

*Exemple* : atome d'hydrogène (Figure 3). Il faut fournir une énergie de 13,6 eV pour libérer l'électron de cet atome. On parle de **potentiel d'ionisation**.

---

10. L'abus de langage courant est d'assimiler la sous-couche à l'orbitale ; on parle alors de l'orbitale 2p alors qu'il s'agit en fait de la sous-couche qui regroupe trois orbitales  $2p_{-1}$ ,  $2p_0$  et  $2p_{+1}$ .

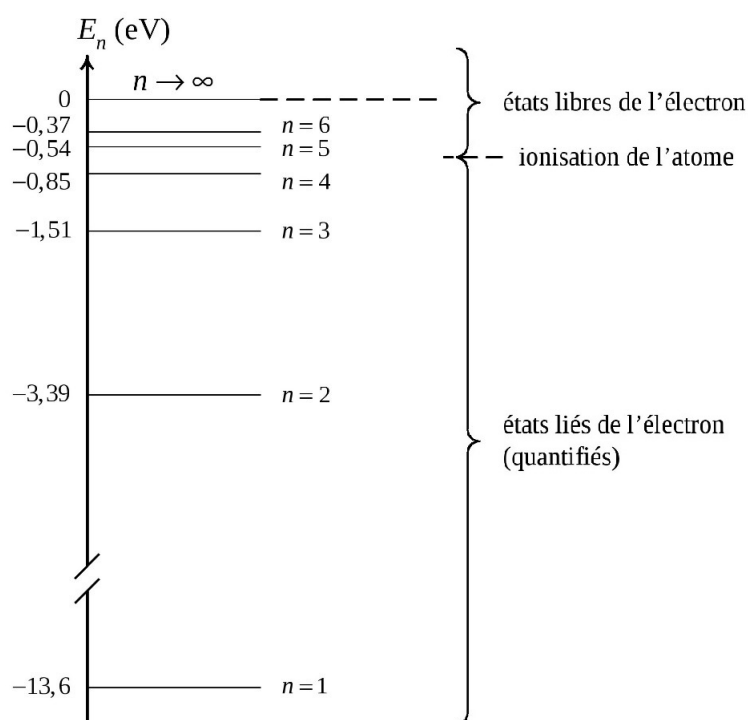


FIGURE 3: Diagramme énergétique de l'atome d'hydrogène

### 2.3.2 Normalisation des orbitales

Les orbitales de l'atome d'hydrogène forment une base orthonormée de fonctions d'onde. L'intégrale sur tout l'espace du module au carré de la fonction d'onde vaut donc 1.

$$\int \int \int |\phi_{nlm}|^2 r^2 dr \sin(\theta) d\theta d\phi = 1 \quad (2.8)$$

La probabilité de présence d'un électron dans un volume  $dV$  de l'espace est donnée par :

$$dP = |\phi_{nlm}|^2 dV = |\phi_{nlm}|^2 r^2 dr \sin(\theta) d\theta d\phi \quad (2.9)$$

On retrouve bien le fait que l'intégration de cette probabilité de présence sur tout l'espace donne 1.

### 2.3.3 Représentation des orbitales

Pour représenter les orbitales, on s'intéresse à la **probabilité de présence de l'électron**. On peut pour cela décomposer la probabilité de présence en une partie radiale et une partie angulaire.

La **partie radiale d'une orbitale** dépend uniquement de la sous-couche dans laquelle cette dernière se trouve. Elle est modulée par une exponentielle décroissante en fonction de la distance  $r$  au noyau. Pour donner un peu de sens physique, on peut tracer la densité radiale  $D(r)$ , qui est la probabilité d'avoir un électron entre deux sphères de rayon  $r$  et  $r+dr$  (Figure 4). Cette densité est donnée par  $D(r) = r^2 R(n, l)^2(r)$ . On remarque que le rayon qui correspond au maximum de densité de présence augmente avec le nombre quantique principal.

Les orbitales sont donc de plus en plus diffuses lorsque  $n$  augmente.

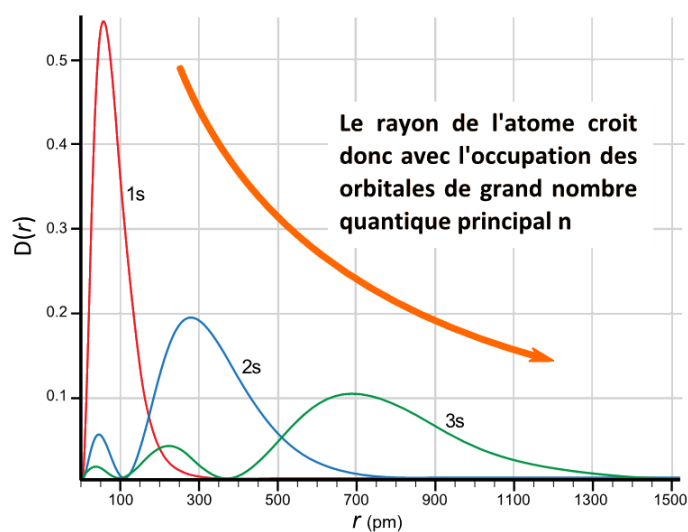


FIGURE 4: Densité radiale de présence d'un électron pour plusieurs sous-couches d'un atome hydrogénoïde

Bien qu'il faille garder en tête la distribution radiale des orbitales, ce sont les **distributions angulaires** qui sont couramment utilisées pour décrire les orbitales car ce sont elles qui permettent de comprendre la géométrie autour des atomes lors de la formation des liaisons. Pour obtenir une représentation, on trace la **surface d'isodensité de probabilité** telle qu'elle définisse un volume dans lequel la probabilité de trouver l'électron est grande<sup>11</sup>.

*Exemple* : représentations classiques des surfaces d'isodensité pour les orbitales s, p et d de l'atome d'hydrogène (Figure 5).

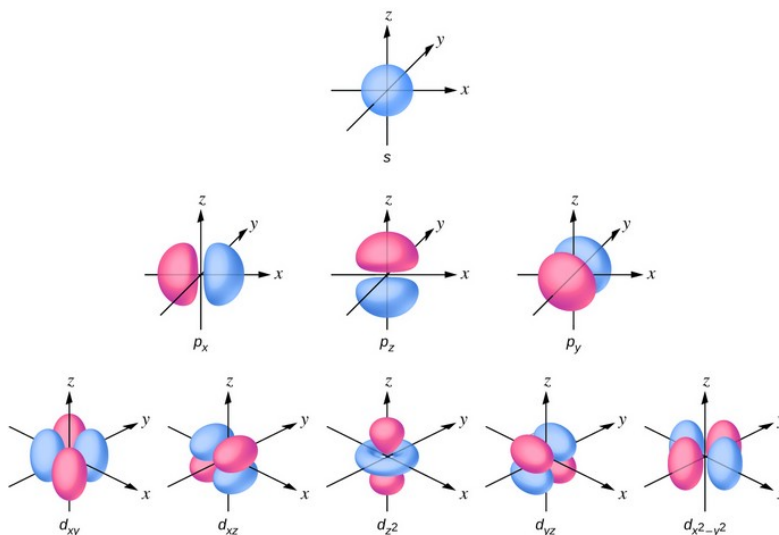


FIGURE 5: Surfaces d'isodensité de probabilité de présence d'un électron pour les orbitales de l'hydrogène

11. Par exemple de 95%

L'étude du cas des hydrogénoïdes constitue la base. Dans le traitement polyélectronique suivant, il est possible de s'y ramener en faisant un ensemble d'hypothèses simplificatrices.

## 2.4 Atomes polyélectroniques

Pour les atomes polyélectroniques, la solution de l'équation de Schrödinger n'est pas connue. L'hamiltonien du système fait intervenir un terme supplémentaire à celui des atomes hydrogénoïdes à un électron : la **corrélacion électronique**.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^N \left( -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right) \quad (2.10)$$

avec en première somme le terme hydrogénoïde et en seconde, le terme de corrélation électronique.

Ce terme de corrélation électronique couple les électrons entre eux, et rend la **résolution exacte impossible**. Il faut dès lors faire des **approximations** pour obtenir une résolution se rapprochant des résultats expérimentaux.

**Modèle des électrons indépendants** : négligence du terme de corrélation électronique afin de traiter les atomes polyélectroniques comme les entités hydrogénoïdes.

⚠ Cela mène à de très mauvais recoupements avec les données expérimentales.

Une approximation moins grossière consiste à traiter les électrons séparément mais en introduisant pour chacun un terme potentiel tenant compte de la présence des autres électrons.

### 2.4.1 Approximation orbitale et modèle de Slater

**Approximation orbitale** : écrire l'hamiltonien électronique comme une somme d'hamiltoniens monoélectroniques. Le terme de corrélation, qui dépend à la fois des coordonnées de l'électron  $i$  et des autres électrons doit être simplifié par un terme de potentiel  $V_i$ .

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N h_i = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + V_i \right) \quad (2.11)$$

Il existe plusieurs expressions pour le potentiel  $V_i$  selon la simplicité d'approximation réalisée.

**Modèle de Slater** : introduire pour chaque électron un potentiel effectif  $V_i^{eff}$  qui tient compte de la répulsion électronique créée par les  $N-1$  autres électrons.

Bien que menant à certaines incohérences, ce modèle est simple et permet de rationaliser une grande partie des propriétés atomiques. L'hamiltonien polyélectronique devient alors :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + V_i^{eff} \right) \quad (2.12)$$

Dans le modèle de Slater, l'attraction coulombienne exercée sur un électron par le noyau chargé positivement est diminuée par l'effet répulsif des autres électrons. Le potentiel  $V_i^{eff}$  traduit l'**écranage**  $\sigma$  dû aux autres électrons et s'exprime par :

$$V_i^{eff} = \frac{\sigma_i e^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \quad (2.13)$$

Il est ainsi possible d'introduire une **charge effective**  $Z_i^* = Z - \sigma_i$  qui représente la charge positive du noyau effectivement ressentie par un électron  $i$ . Cette notation permet d'écrire l'hamiltonien polyélectronique comme une somme d'hamiltoniens monoélectroniques identiques à ceux des entités hydrogénoïdes :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Z_i^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) \quad (2.14)$$

Il en découle que la fonction d'onde polyélectronique  $\Psi$  peut s'écrire comme un produit des orbitales atomiques<sup>12</sup>  $\Phi_i$ .

$$\Psi = \prod_{i=1}^N \Phi_i \quad (2.15)$$

*Remarque* : Pour obtenir la fonction d'onde totale tenant compte du spin de l'électron, il faut antisymétriser la fonction d'onde afin qu'elle réponde au principe de Pauli<sup>13</sup>. Pour cela, il faut utiliser un déterminant de Slater, ce qui permet d'exprimer la fonction d'onde totale telle que :

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} |\Phi_1 \dots \Phi_N| \quad (2.16)$$

Par les mêmes propriétés, l'énergie globale du système s'exprime comme la somme des énergies de chaque électron  $\epsilon_i^*$  calculées avec les paramètres de Slater :

$$E = \sum_{i=1}^N \epsilon_i^* \quad (2.17)$$

#### 2.4.2 Constantes d'écran et paramètres de Slater

La constante d'écran permet de calculer l'effet sur un électron  $i$  des  $N-1$  autres électrons. Il faut donc sommer les  $N-1$  contributions.

La contribution d'un électron  $j$  dépend de sa position par rapport à l'électron  $i$ , c'est-à-dire des nombres quantiques  $n$  et  $l$  respectifs des deux électrons (Tableau 1).

Electron d'origine i	Contribution des autres électrons j						
	< n-1	n-1	n				> n
			1s	s, p	d	f	
1s	0.3						
s,p	1	0.85		0.35	0	0	0
d	1	1		1	0.35	0	0
f	1	1		1	1	0.35	0

Tableau 1: Contributions des électrons

En utilisant ces paramètres, il est possible de calculer la charge effective pour un électron donné.

*Exemple* : Le sodium ( $Z=11$ ) a pour configuration électronique<sup>14</sup>  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . Pour calculer la charge effective ressentie par un électron de l'orbitale  $3s$ , il faut sommer les contributions des autres électrons.

$$Z_{3s}^* = Z_{\text{Na}} - 6 \cdot \sigma_{2p} - 2 \cdot \sigma_{2s} - 2 \cdot \sigma_{1s} = 11 - 8 \cdot 0.85 - 2 \cdot 1 = 2.2$$

12. Pour rappel, une orbitale atomique est une fonction d'onde monoélectronique.

13. Qui sera vu plus tard

14. La détermination d'une configuration électronique sera vue par la suite.

La résolution des hamiltoniens monoélectroniques du modèle de Slater conduisent à des orbitales atomiques ayant les mêmes expressions que celles de l'atome d'hydrogène mais avec un nombre quantique principal  $n^*$  qui diffère de plus en plus de  $n$  en grandissant (Tableau 2).

$n$	1	2	3	4	5	6
$n^*$	1	2	3	3.7	4	4.2

Tableau 2: Modification du nombre quantique principal dans le modèle de Slater

Les orbitales atomiques ayant la même expression que pour les entités hydrogénoïdes (Equation 2.7), on retrouve une expression analogue pour l'énergie associée à ces orbitales, en utilisant les paramètres de Slater. On note ici  $E_{nl}$  cette énergie pour marquer la dépendance en  $l$  qui est cachée dans  $Z^*$ .

$$E_{nl} = -\frac{13.6 * (Z^*)^2}{(n^*)^2} \text{ eV} \quad (2.18)$$

On peut également définir le rayon de l'orbitale dans ce modèle par :

$$r_{nl} = \frac{(n^*)^2}{Z^*} a_0 \quad (2.19)$$

avec  $a_0 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi m_e e^2} = 52.92 \text{ pm}$  le rayon de Bohr.

*Exemple* : électron de la 3s du sodium.

$$E_{3s} = -\frac{13.6 * (Z_{3s}^*)^2}{(n^*)^2} = -\frac{13.6 * (2.2)^2}{(3^*)^2} = -7.3 \text{ eV} \quad (2.20)$$

$$r_{3s} = \frac{(n^*)^2}{Z_{3s}^*} a_0 = \frac{(3^*)^2}{2.2} * 52.92 = 216.5 \text{ pm} \quad (2.21)$$

## 2.5 Configuration électronique

**Configuration électronique d'une entité** : répartition des électrons dans les orbitales atomiques.

La connaissance de ces configurations est essentielle pour la compréhension des propriétés chimiques des entités chimiques.

### 2.5.1 Règles de remplissage

Pour obtenir la configuration électronique des atomes dans leurs états fondamentaux, il faut suivre les trois règles suivantes :

**1. Principe d'exclusion de Pauli** : dans un atome polyélectronique, deux électrons ne peuvent être dans le même état quantique de spin, c'est à dire ne peuvent pas avoir les mêmes quatre nombres quantiques.

Les trois nombres quantiques  $n$ ,  $l$  et  $m_l$  servant à décrire les orbitales ont été introduits précédemment (voir Partie 2.2). Pour décrire les propriétés de spin de l'électron ( $S=1/2$ ), il faut un quatrième

15. Prix Nobel de Physique en 1945

nombre quantique :

$m_S$  : **nombre quantique de spin électronique**, demi-entier tel que  $m_S = \pm \frac{1}{2}$ .

D'après le principe de Pauli et les valeurs de  $m_S$ , une même orbitale définie par les nombres quantiques  $n$ ,  $l$  et  $m_l$  ne peut au maximum accueillir que deux électrons, pour chacune des valeurs de  $m_S$ .

Dans une orbitale, que l'on représente par une case quantique  $\square$ , on peut mettre au maximum deux électrons.

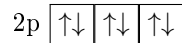
L'électron associé à  $m_S = +\frac{1}{2}$  est représenté par une flèche pointée vers le haut  $\uparrow$ .

L'électron associé à  $m_S = -\frac{1}{2}$  est représenté par une flèche pointée vers le bas  $\downarrow$ .

*Exemple* : orbitale 2s remplie par deux électrons



*Exemple* : sous-couche 2p, contenant les trois orbitales  $2p_{-1}$ ,  $2p_0$  et  $2p_1$ , remplie par six électrons



On trouve ainsi que la population maximale d'une sous-couche est donnée par  $2l+1$ .

**2. Règle empirique de Klechkowski** : le remplissage électronique des orbitales se fait par énergie croissante, c'est à dire par  $(n+l)$  croissant. Pour  $(n+l)$  identiques, le remplissage électronique se fait par  $n$  croissant.

Le diagramme d'ordre de remplissage de la Figure 6 illustre cette règle :

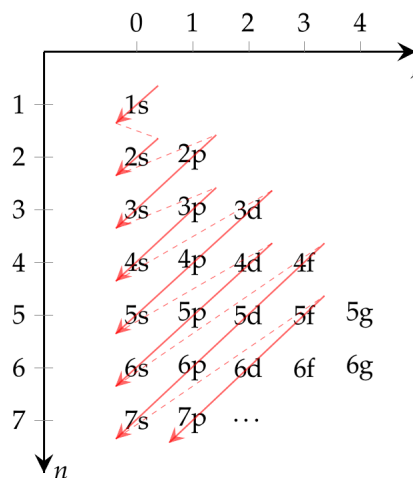


FIGURE 6: Ordre de remplissage des orbitales atomiques selon la règle de Klechkowski

*Exemple* : détermination de la configuration électronique du sodium ( $Z=11$ ). En plaçant les 11 électrons dans l'ordre défini par Klechkowski, on trouve  $[\text{Na}] : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ .

Pour éviter d'écrire des configurations électroniques trop longues, on les **simplifie** en utilisant la configuration du **gaz rare qui précède l'élément dans la classification** et en complétant les orbitales supplémentaires.

*Exemple* : modification de la configuration électronique du sodium. On a  $[\text{Na}] : [\text{Ne}]3s^1$ .

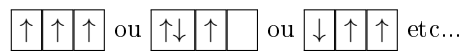
△ Il existe des **exceptions** à la règle de Klechkowski dues à des stabilités particulières qui sont obtenues lorsque les sous-couches sont remplies et/ou à demi-remplies. Deux exemples classiques sont le cuivre et le chrome, mais il en existe de nombreux autres.

- Pour le **cuivre** ( $Z=29$ ), on a en suivant les règles de remplissage  $[\text{Cu}] : [\text{Ar}]4s^23d^9$ . Or, la configuration du cuivre est en réalité  $[\text{Cu}] : [\text{Ar}]4s^13d^{10}$ . Dans cette configuration, l'orbitale 4s est à demi-remplie et la sous-couche 4d est totalement remplie, ce qui est plus stable. Les deux orbitales 4s et 3d étant assez proches en énergies, ce genre d'échange d'électrons est courant.
- Pour le **chrome** ( $Z=24$ ), on a en suivant les règles de remplissage  $[\text{Cr}] : [\text{Ar}]4s^23d^4$ . En réalité, on a  $[\text{Cr}] : [\text{Ar}]4s^13d^5$ , permettant aux deux sous-couches d'être à demi-remplies.

Ces deux exceptions sont à connaître si possible, afin de pouvoir justifier un résultat expérimental s'opposant à la prédiction de Klechkowski.

**3. Règle de Hund** : l'état électronique le plus stable est celui de spin maximal.

*Exemple* : pour une sous-couche 2p contenant trois électrons, il y a plusieurs remplissages possibles :



Le spin total de l'entité est obtenu en sommant le nombre quantique de spin de chacun des électrons. Ainsi pour la première configuration, le spin est  $S = 3/2$ ; pour la seconde,  $S=1/2$ ; et la troisième,  $S=1/2$ . D'après la règle de Hund, la configuration la plus stable est la première.

△ Le principe d'exclusion de Pauli est une règle absolue et doit être respectée, mais les règles de Klechkowski et de Hund ne font que décrire les états les plus stables. Ces règles permettent ainsi de trouver les configurations électroniques fondamentales. D'autres configurations électroniques sont possibles pour les entités considérées, correspondant aux états excités.

### 2.5.2 Electrons de coeur et de valence

**Electrons de valence** : électrons de nombre quantique principal  $n$  le plus élevé et ceux des sous-couches  $(n-1)d$  ou  $(n-2)f$  en cours de remplissage.

**Electrons de coeur** : tout électron n'étant pas un électron de valence.

*Exemple* : sodium ( $Z=11$ )  $[\text{Na}] : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . Les électrons de coeur sont les électrons  $1s^2 2s^2 2p^6$  et il n'y a qu'un électron de valence  $3s^1$ .

Les électrons de coeur, sont les plus stables de l'entité considérée et ils ne sont que rarement étudiés. Les électrons de valence, à l'inverse, sont plus haut en énergie et vont intervenir dans toutes les transformations chimiques de l'entité. Toute la réactivité chimique se trouve donc dans ces électrons de valence.



## Partie 3

# Classification périodique des éléments

A travers les années de nombreuses propositions de systèmes de classement des éléments chimiques ont été faites. Néanmoins, celui qui s'est révélé être le plus pertinent est celui de Dimitri **Mendeleïev** (1869).<sup>16</sup>

### 3.1 Classification périodique actuelle

#### 3.1.1 Blocs

**Bloc** : zone de la classification périodique correspondant à la dernière sous-couche occupée dans la configuration électronique de l'élément considéré.

*Exemple* : Le sodium est dans le bloc s car sa configuration électronique est  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . Le carbone est dans le bloc p car sa configuration électronique est  $1s^2 2s^2 2p^4$ .

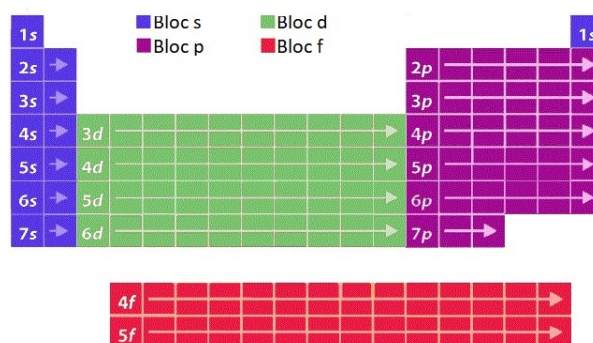


FIGURE 7: Structure en blocs de la classification périodique

#### 3.1.2 Périodes

**Période** : ligne d'éléments chimiques correspondant à un nombre quantique principal  $n$  fixé pour la dernière couche occupée.

16. Document de Culture Science concernant l'histoire sur la classification périodique : <http://culturesciences.chimie.ens.fr/content/la-classification-periodique-de-lavoisier-a-mendeleiev-1229>

### 3.1.3 Familles

**Famille** : colonne rassemblant les éléments chimiques présentant des propriétés chimiques communes.

Le principe de la construction de la classification périodique se retrouve tout particulièrement ici : au sein d'une même famille se trouvent des éléments ayant des propriétés chimiques similaires car possédant le même nombre d'électrons de valence.

Numéro de colonne	1	2	16	17	18
Famille	Alcalins	Alcalino-terreux	Chalcogènes	Halogènes	Gaz rares
Configuration électronique externe	$ns^1$	$ns^2$	$ns^2 np^4$	$ns^2 np^5$	$ns^2 np^6$
Electron(s) de valence	1	2	6	7	8
Electronégativité	Faible	Faible	Forte	Forte	Nulle
Propriétés redox	Réducteurs	Réducteurs	Oxydants	Oxydants	Inertes
Remarque	Réagissent de manière exothermique avec l'eau			Corps simples constitués de molécules diatomiques : $F_2$ et $Cl_2$ gazeux, $Br_2$ liquide, $I_2$ et $At_2$ solides	Grande stabilité (donc découverts très tard ; Mendeleïev n'avait pas prévu leur existence)

Tableau 3: Comparaison de caractéristiques et propriétés de certaines familles de la classification périodique

Lorsqu'un atome cède (respectivement gagne) des électrons afin d'acquérir la configuration électronique du gaz rare qui le précède (respectivement qui le suit), il devient alors **cation** (respectivement **anion**). Ces entités sont alors dits isoélectroniques.

**Entités isoélectroniques** : entités possédant le même nombre d'électrons.

## 3.2 Évolution de quelques propriétés à travers la classification périodique

### 3.2.1 Charge effective $Z^*$

La charge effective définie précédemment (voir Partie 2.4.1) **augmente de gauche à droite dans la classification périodique** puisque la charge positive du noyau augmente de cette manière (Figure 8). Cependant, elle diminue fortement à chaque changement de couche électronique car l'électron qui ressent la charge du noyau occupe des orbitales de plus en plus éloignées du noyau.

*Remarque* : Dans l'approximation de Slater, les paramètres sont les mêmes pour les électrons occupant les sous-couches s et p, il n'y a donc pas de rupture lors du passage du bloc s au bloc p.

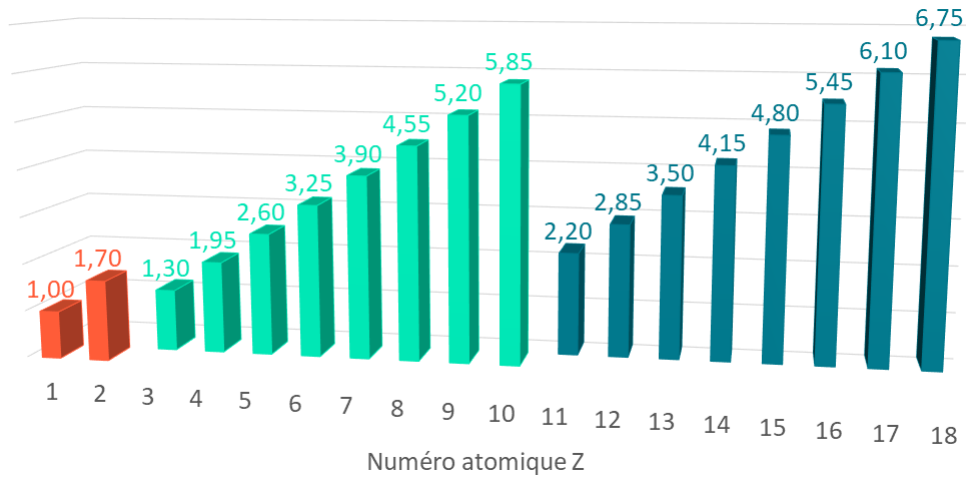


FIGURE 8: Evolution de la charge effective  $Z^*$  en fonction du numéro atomique

### 3.2.2 Énergie d'ionisation

**Énergie d'ionisation EI** : énergie qu'il faut fournir à l'atome isolé et gazeux pour former le cation monochargé et l'électron, eux aussi sous formes gazeuses.



L'ionisation étant un phénomène endothermique, l'énergie d'ionisation est **toujours positive** (Figure 9). De plus, elle **décroit dans une colonne** car les électrons à arracher sont de plus en plus éloignés du noyau.

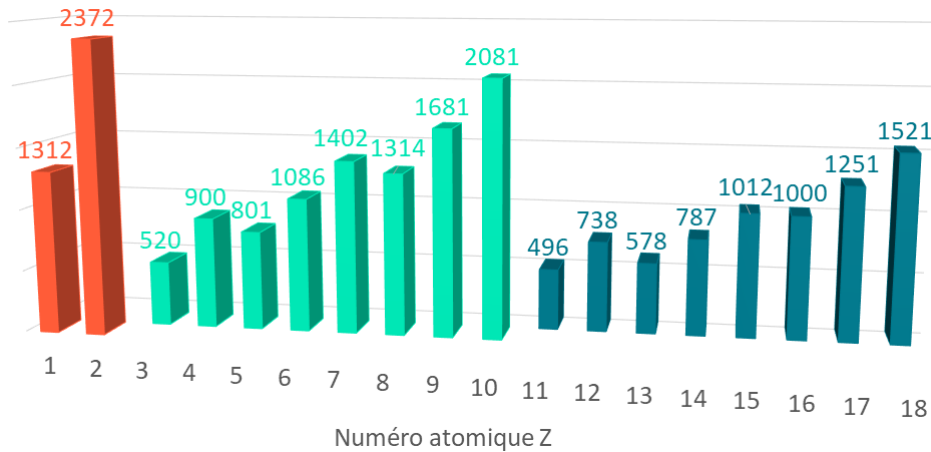


FIGURE 9: Evolution de l'énergie de première ionisation en fonction du numéro atomique

*Remarque* : certaines irrégularités sont visibles :

- passage du bloc s au bloc p. Cela est dû à des problèmes avec les paramètres de Slater. En effet, puisque  $Z^*$  augmente lors du passage des blocs s à p, on s'attend à voir l'énergie d'ionisation

augmenter également<sup>17</sup>. Or expérimentalement il est moins coûteux de retirer le premier électron de la sous-couche p (ex  $Z=5$ ) que le dernier que la sous-couche s (ex  $Z=4$ ).

- éléments pour  $Z=7$  et  $Z=15$ . Cela s'explique par la stabilité particulière des sous-couches p demi-remplies, rendant plus coûteux le retrait d'un électron.

### 3.2.3 Affinité chimique

**Affinité chimique AE** : enthalpie de réaction de capture d'un électron par un atome X dans son état gazeux.



La capture d'un électron peut être soit endothermique soit exothermique. Par conséquent, l'affinité chimique peut être **positive ou négative** (Figure 10).

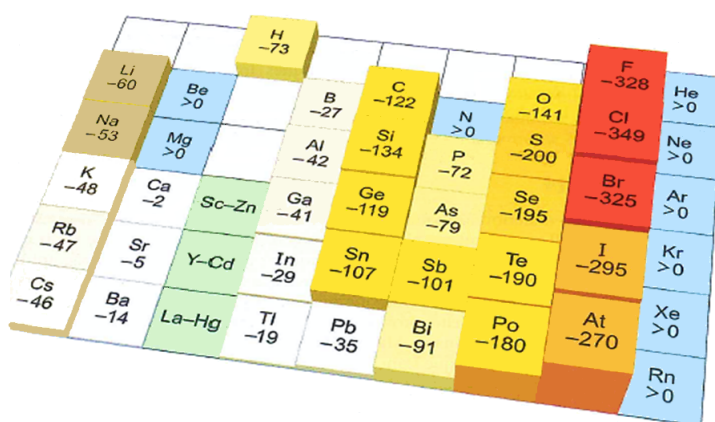


FIGURE 10: Evolution de l'affinité chimique (en  $\text{kJ.mol}^{-1}$ ) à travers la classification périodique

*Remarque* : Le signe de l'affinité chimique dépend à la fois de l'électronégativité de l'élément, mais aussi des coûts énergétiques supplémentaires qui peuvent être amenés par l'ajout d'un électron.

- gain d'un électron pour l'atome de carbone : ajout d'un électron dans la 2p, soit le passage de  $2p_C$   $\uparrow\uparrow\uparrow$  à  $2p_{C-}$   $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$ . On obtient alors une sous-couche demi-remplie, ce qui est favorable. La transformation est par conséquent exothermique.
- gain d'un électron pour l'atome d'azote : ajout d'un électron dans la 2p, soit le passage de  $2p_N$   $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$  à  $2p_{N-}$   $\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$ . On perd alors la stabilité d'une sous-couche demi-remplie, en payant de plus l'énergie d'appariement correspondant au coût énergétique de répulsion résultant de la présence de deux électrons dans une même orbitale. Le phénomène devient donc défavorable et la réaction, endothermique.

### 3.2.4 Rayon atomique

**Rayon atomique** : moitié de la distance séparant les noyaux des atomes dans le corps pur.

Le nom du rayon atomique dépend de l'espèce chimique considérée : rayon métallique pour les métaux, rayon covalent pour les édifices covalents et rayon de Van der Waals pour les gaz.

⚠ Dans cette définition, on ne peut pas mesurer les rayons des gaz rares.

17. Puisque l'attraction du noyau est plus forte, il est plus dur de retirer l'électron

Le rayon atomique **diminue le long d'une période** car la charge nucléaire effective augmente (Figure 11), engendrant une plus grande attraction des électrons par le noyau. Cependant, il **augmente le long d'une colonne** car les électrons occupent des orbitales de plus en plus éloignées du noyau.

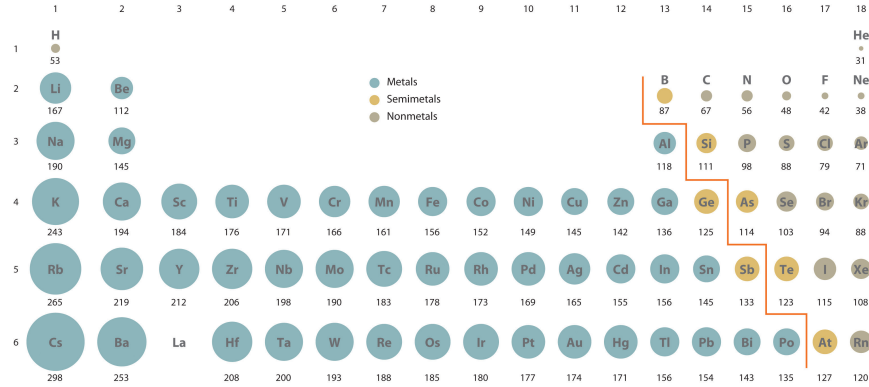


FIGURE 11: Evolution du rayon atomique dans la classification périodique

### 3.2.5 Rayon ionique

**Rayon ionique** : moitié de la distance séparant les noyaux de deux éléments dans un solide ionique.

Tout comme le rayon atomique, le rayon ionique **diminue le long d'une période et augmente le long d'une colonne** (Figure 12).

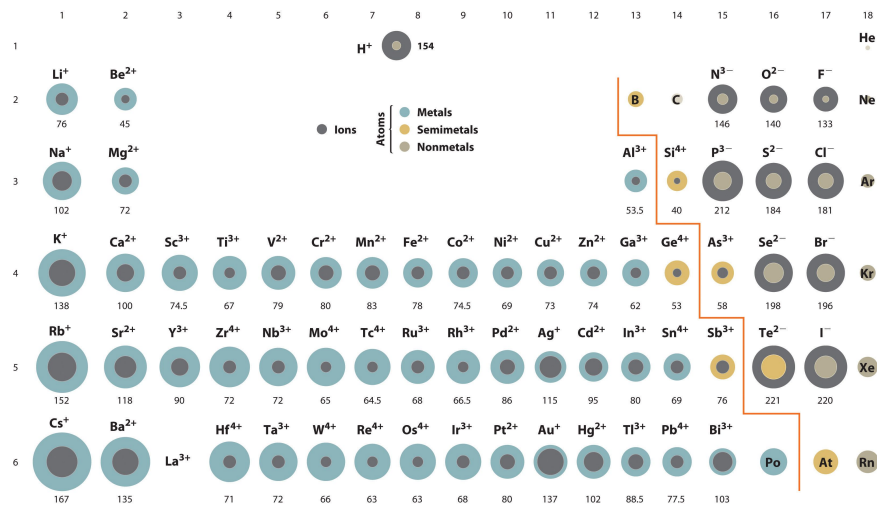


FIGURE 12: Evolution du rayon ionique dans la classification périodique

Il est à noter que les cations sont plus petits que leur atome correspondant<sup>18</sup> alors que les anions sont plus grands<sup>19</sup>.

18. Ils possèdent moins d'électrons donc les électrons restants sont plus attirés par le noyau.

19. Ils possèdent plus d'électrons donc l'attraction des électrons par le noyau est plus faible.

### 3.2.6 Électronégativité

**Électronégativité** : notée  $\chi$ , elle traduit la capacité que possède l'atome d'un élément à attirer à lui les électrons des liaisons auxquelles il participe dans une molécule.

Il existe plusieurs échelles d'électronégativité qui varient par leur définition.

#### Échelle de Linus Pauling<sup>20</sup>

Cette échelle relie la différence d'électronégativité entre deux atomes à la différence d'énergie entre l'énergie de la liaison hétéroatomique ( $D_{A-B}$ ) et la moyenne des deux liaisons homoatomiques ( $D_{A-A}$  et  $D_{B-B}$ ) correspondantes :

$$|\chi^P(A) - \chi^P(B)| = (1\text{eV})^{-1/2} \sqrt{D_{A-B} - \frac{D_{A-A} + D_{B-B}}{2}} \quad (3.3)$$

avec D en eV.

$$|\chi^P(A) - \chi^P(B)| = 0,102 \sqrt{D_{A-B} - \frac{D_{A-A} + D_{B-B}}{2}} \quad (3.4)$$

avec D en kJ.mol<sup>-1</sup>.

Puisque seule la différence d'électronégativité est définie, il faut définir une première électronégativité de référence comme origine de l'échelle. Initialement, la valeur d'électronégativité a été fixée pour le fluor et était alors de 4. Elle a depuis été modifiée à 3,98 pour plus de cohérence avec les propriétés expérimentales. L'électronégativité **augmente de gauche à droite dans une période et de bas en haut dans une colonne** (Figure 13.a).

#### Échelle de Mulliken<sup>21</sup>

Il définit l'électronégativité comme la moyenne de l'affinité électronique et de l'énergie de première ionisation de chaque élément :

$$\chi^M = \frac{EI + AE}{2} \quad (3.5)$$

avec EI et AE en eV.

L'évolution de l'électronégativité est avec cette échelle très logiquement similaire à celle de l'échelle de Pauling (Figure 13.b).

20. Prix Nobel de chimie en 1954 et de la paix en 1962

21. Prix Nobel de Chimie en 1966

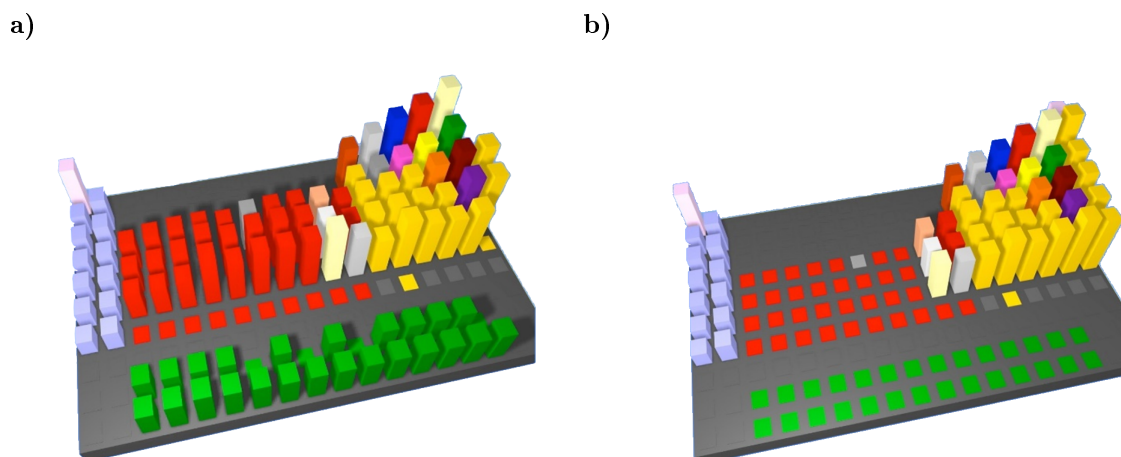
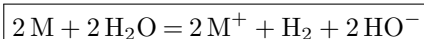


FIGURE 13: a) Échelle de Pauling, b) Échelle de Mulliken

### 3.3 Illustration de propriétés de certaines familles

#### 3.3.1 Propriétés réductrices des alcalins

Tous les alcalins réagissent avec l'eau par la réaction d'oxydo-réduction suivante <sup>22</sup> :



Plus on descend dans la colonne des alcalins, moins l'élément est électronégatif. Il retient donc moins ses électrons et s'oxyde alors plus facilement. Ainsi **plus on descend dans la colonne, plus la réaction entre le métal alcalin et l'eau est violente**. La présence de **flammes** ou encore les **déflagrations** sont dues au **dihydrogène formé** qui s'enflamme à haute température. Ainsi, plus la réaction est exothermique, plus le phénomène est violent.

*Expérience* : Le **lithium** réagit de manière modérée et forme rapidement la lithine ( $\text{LiOH}$ ), solide blanc qui protège un peu le métal restant.

*Expérience* : Le **sodium** réagit plus violemment et peut former des flammes à la surface de l'eau, voire une déflagration si l'on introduit un gros bout de métal. L'expérience « classique » consiste à placer un petit morceau de sodium dans de l'eau contenant un indicateur coloré tel que la **phénolphthaléine**. Au contact de l'eau, il y a formation de bulles de  $\text{H}_2$  qui font légèrement léviter le métal à la surface <sup>23</sup>. Il y a également formation d'ions  $\text{HO}^-$  qui abaissent localement le pH de l'eau et provoquent l'apparition de la couleur rose de la phénolphthaléine. Le métal se déplace donc à la surface en laissant une trainée rose dans l'eau.

⚠ Cette expérience est très démonstrative mais nécessite de contrôler la taille du bout de métal, sans quoi il y a formation d'une flamme importante voire l'éclatement du cristalliseur.

*Explication plus poussée* : Si on mène ce raisonnement sur le pouvoir oxydant, on s'attend à trouver que le potentiel d'oxydation du lithium (élément le moins réducteur) soit le plus élevé, et que le potentiel des alcalins diminue en descendant le long de la colonne. Or c'est l'inverse (Tableau 4). Le couple du lithium a le potentiel le plus faible, ce qui en fait l'élément le plus réducteur de la colonne. Pourtant, si on regarde les énergies de première ionisation pour cette colonne, elles évoluent bien dans le sens que

22. <https://www.youtube.com/watch?v=zmmu607BZDI> et <https://www.youtube.com/watch?v=xMWXoOyhr8Y>

23. Celui-ci paraît « danser » à la surface.

l'on peut prédire à partir des électronégativités. Pour expliquer ce qui semble être une contradiction, il faut tenir compte du fait que le potentiel du couple est défini en solution aqueuse, et donc que les paramètres d'hydratation des ions rentrent en jeu. Ces explications seront détaillées par la suite en cours ; cette explication plus poussée sert ici à mettre en lumière le fait qu'une explication trop simpliste peut amener à la mauvaise conclusion.

Métal	Potentiel du couple $M^+/M$ (V)	Énergie de première ionisation ( $\text{kJ.mol}^{-1}$ )
Li	-3.045	513.3
Na	-2.714	495.8
K	-2.924	418.8
Rb	-2.924	403.0
Cs	-2.923	375.7

Tableau 4: Potentiels des couples  $M^+/M$  et énergie de première ionisation pour les alcalins

### 3.3.2 Propriétés oxydantes des halogènes

Un raisonnement analogue sur l'électronégativité mène à un classement du pouvoir oxydant des couples  $M_2/M^-$  des halogènes (Figure 5.a). **Leur pouvoir oxydant diminue le long de la colonne.**

Halogène	Potentiel du couple $M_2/M^-$ (V)
F	2.866
Cl	1.358
Br	1.0652
I	0.535
At	0.2

Tableau 5: Potentiels des couples  $M_2/M^-$

*Expérience* : cette propriété peut être mise en évidence en observant la couleur des dihalogènes dans l'eau et dans le cyclohexane. Les mélanges entre les dihalogènes (degré 0) et les halogénures (degré -1), en solution aqueuse sont réalisés, avec un ajout de quelques mL de cyclohexane pour bien visualiser les couleurs (Figure 14.b).

Afin d'interpréter cette expérience, on regarde la couleur de la phase cyclohexane :

- Mélange  $I^-$  et  $Cl_2$  : le cyclohexane indique la présence de  $I_2$  donc il y a eu  $I^- + Cl_2 = Cl^- + I_2$ , ce dont on déduit  $E_{Cl_2/Cl^-}^\circ > E_{I_2/I^-}^\circ$ .
- Mélange  $Br^-$  et  $Cl_2$  : le cyclohexane indique la présence de  $Br_2$  donc il y a eu  $Br^- + Cl_2 = Cl^- + Br_2$ , ce dont on déduit  $E_{Cl_2/Cl^-}^\circ > E_{Br_2/Br^-}^\circ$ .
- Mélange  $Cl^-$  et  $Br_2$  : le cyclohexane indique la présence de  $Br_2$  donc il n'y a pas eu d'évolution, ce dont on déduit  $E_{Cl_2/Cl^-}^\circ > E_{Br_2/Br^-}^\circ$ .
- Mélange  $I^-$  et  $Br_2$  : le cyclohexane indique la présence de  $I_2$  donc il y a eu  $I^- + Br_2 = Br^- + I_2$ , ce dont on déduit  $E_{Br_2/Br^-}^\circ > E_{I_2/I^-}^\circ$ .
- Mélange  $Cl^-$  et  $I_2$  : le cyclohexane indique la présence de  $I_2$  donc il n'y a pas eu d'évolution, ce dont on déduit  $E_{Cl_2/Cl^-}^\circ > E_{I_2/I^-}^\circ$ .
- Mélange  $Br^-$  et  $I_2$  : le cyclohexane indique la présence de  $I_2$  donc il n'y a pas eu d'évolution, ce dont on déduit  $E_{Br_2/Br^-}^\circ > E_{I_2/I^-}^\circ$ .



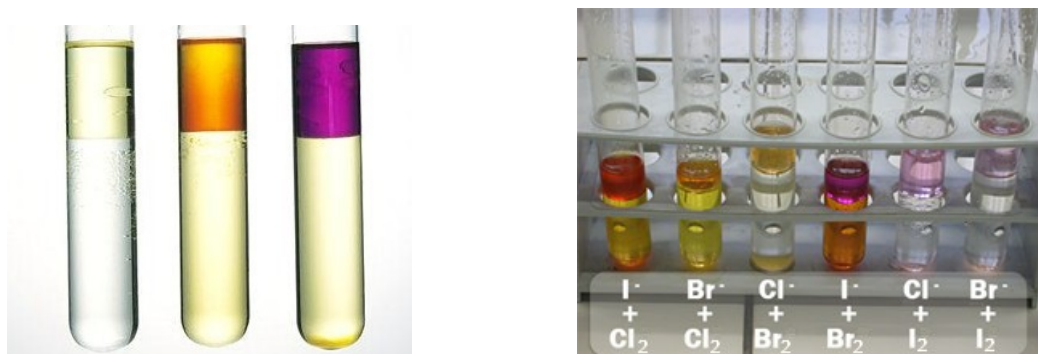


FIGURE 14: **a)** Dihalogènes dissous dans un mélange eau (phase inférieure) et cyclohexane (phase supérieure) :  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{Br}_2$  et  $\text{I}_2$ , **b)** Expérience de comparaison des pouvoirs oxydants des halogènes

### 3.4 Limites du modèle de Slater

Plusieurs incohérences liées au modèle de Slater ont déjà été rencontrées. Ce modèle présente l'avantage d'être simple mais ces incohérences mettent en lumière les approximations de ce modèle. Le principal problème est que le modèle ne fait pas la différence entre les électrons d'une sous-couche s et d'une sous-couche p, sous-entendant à tort que les orbitales s et p ont la même énergie. Or, on peut faire une expérience très simple pour montrer l'écart énergétique entre ces deux niveaux.

#### 3.4.1 Expérience des flammes colorées

L'expérience des flammes colorées consiste à imbiber des cotons d'une solution de sels métalliques comme  $\text{NaCl}$  ou  $\text{LiCl}$  dans l'éthanol. Ces bouts de cotons sont alors enflammés (Figure 15).



FIGURE 15: Flammes de différents éléments chimiques

Les flammes sont colorées car les atomes sont excités par la chaleur de la flamme et reviennent à leur état fondamental en émettant une lumière colorée.

Les niveaux d'énergie expérimentaux du lithium et du sodium (Figure 16) permettent d'expliquer les couleurs observées via le calcul de la longueur d'onde de la lumière émise lors de la désexcitation de ces deux atomes.

— Pour le **lithium** :

$$\Delta E_{Li} = 1,85 \text{ eV} = 2,96 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (3.6)$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E_{Li}} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3,00 \cdot 10^8}{2,96 \cdot 10^{-19}} = 672 \text{ nm} \quad (3.7)$$

On retrouve bien une émission dans le **rouge**.

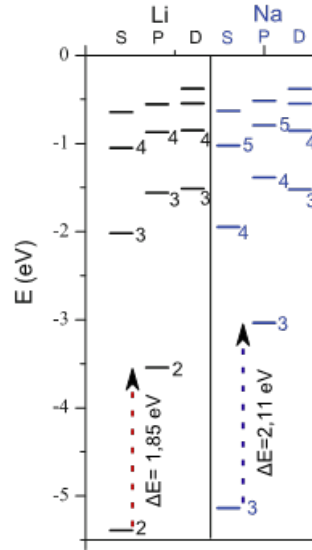


FIGURE 16: Niveaux énergétiques du lithium et du sodium. Les flèches représentent les écarts énergétiques entre les niveaux impliqués dans le processus étudié.

— Pour le **sodium** :

$$\Delta E_{Na} = 2,11 \text{ eV} = 3,38 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad (3.8)$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E_{Na}} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3,00 \cdot 10^8}{3,38 \cdot 10^{-19}} = 589 \text{ nm} \quad (3.9)$$

On retrouve bien une émission dans le **jaune**.

### 3.4.2 Rationalisation

Le problème vient du fait que le modèle de Slater applique la même constante d'écran pour les électrons dans les orbitales s et p. Pour corriger cela, il faut tenir compte du fait que la charge effective ressentie par un électron dépend également de la distance qui le sépare du noyau (Figure 17).

Ce diagramme met en évidence le fait que **l'électron de l'orbitale 2s a une probabilité de présence plus grande que celui de la 2p pour des distances faibles**. Or, c'est à ces faibles distances que la charge effective est la plus grande. L'électron de la 2s est donc plus soumis à la force du noyau que celui de la 2p, donc plus bas en énergie.

Il existe des modèles moins approximatifs qui permettent de corriger les paramètres de Slater pour les rendre plus précis. Ici, il convient de retenir que **le modèle de Slater est simple mais présente des limites**.

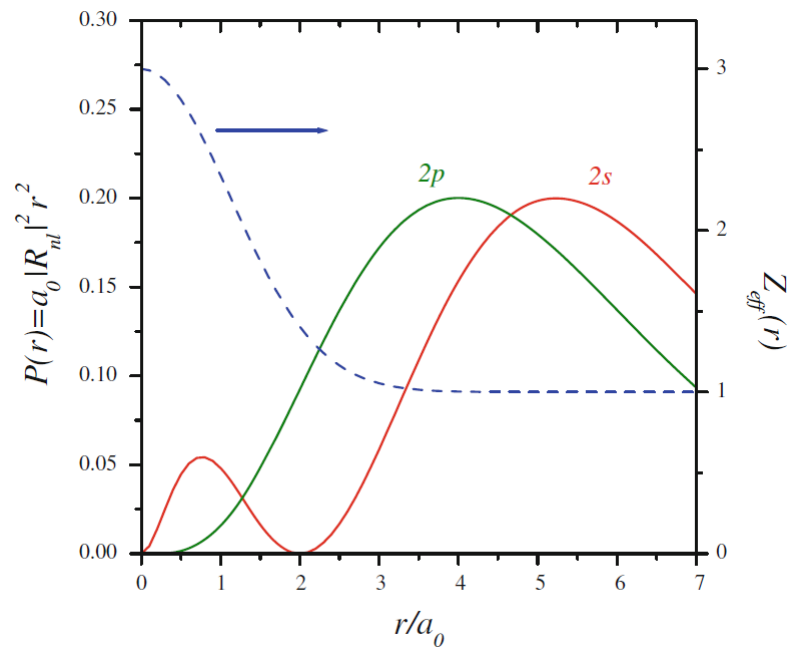


FIGURE 17: **En vert et en rouge :** Probabilités radiales de présence de l'électron pour les orbitales 2s et 2p du lithium, **En bleu :** Courbe représentant la charge effective en fonction de la distance séparant l'électron du noyau