

1 Chimie atomique

1.1 Nature de la matière

Comme explicité par la ?? page ?? , la matière peut être décomposée en corps purs, qui sont des substances dont les propriétés physiques et chimiques sont déterminées quels que soient l'origine et le procédé à partir desquels elles ont été obtenues. Ces corps purs désignent les atomes – les *corps simples* – et les molécules – les *corps composés* – qui consistent en un assemblage d'atomes.

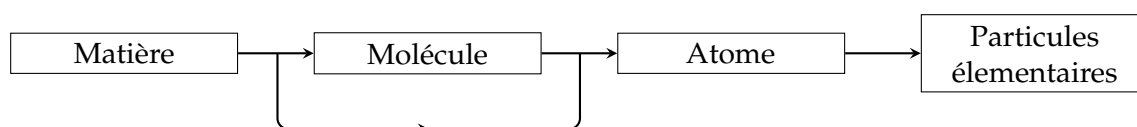


FIG. 1.1: Décomposition de la matière

1.2 Description de la matière

Matière

- Ce qui compose tout corps ayant une réalité tangible ;
- Mélange homogène (propriétés identiques en tout point) ou hétérogène (propriétés non identiques en tout point) de molécules en proportions diverses et variées ;
- Substance matérielle dont les caractéristiques fondamentales sont l'étendue et la masse ;
- La matière peut prendre au moins quatre états (solide, liquide, gazeux, plasma...).

Molécule

- Assemblage chimique (corps composé) d'au moins deux atomes (corps simple) représentant la plus petite quantité de matière conservant les propriétés caractéristiques de celle-ci ;
- Entité électriquement neutre ;
- Siège de liaisons chimiques lui conférant sa structure ;
- Plus grande entité de la matière susceptible de subir des réactions chimiques.

Atome

- Plus petite entité de la matière pouvant se combinant chimiquement avec des corps purs ;
- Constituant élémentaire de toutes les substances sous tous leurs états ;
- Constitué d'un noyau dense de protons et neutrons entouré d'un nuage d'électrons ;
- Présent au nombre de 118 éléments chimiques.

Proton

- Particule élémentaire p^+ constituant une partie du noyau de l'atome ;
- Dénommé *nucléon* car constituant une partie du noyau ;
- Lié aux neutrons par interactions fortes formant un noyau dense ;
- Quantité définissant l'élément chimique nommé *numéro atomique* Z et identique à la quantité d'électron d'un même élément dans le cas d'un atome à l'état électriquement neutre ;



- Particule porteuse d'une charge élémentaire positive $+e$ (ou \oplus) attirée par la charge élémentaire négative $-e$ (ou \ominus) de l'électron ;
- Charge élémentaire positive $+e = 1,6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ d'une masse $m = 1,6726 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Neutron

- Particule élémentaire n^0 constituant une partie du noyau de l'atome ;
- Dénommé *nucléon* car constituant une partie du noyau ;
- Lié aux protons par interactions fortes formant un noyau dense ;
- Quantité définie par l'*isotope* de l'élément chimique ;
- Particule électriquement neutre d'une masse $m = 1,6726 \times 10^{-27} \text{ kg}$.

Électron

- Particule élémentaire e^- gravitant autour du noyau atomique ;
- Gravitation à une très grande distance relative autour du noyau, avec une répartition en *couches électroniques* dont l'agencement est bien spécifique à chaque atome ;
- Vitesse de gravitation variable selon l'orbitale atomique ($v_{e_H} \approx 2100 \text{ km s}^{-1}$) avec une position aléatoire sur la couche électronique ;
- Quantité identique à celle de protons d'un même élément à l'état électriquement neutre ;
- Particule porteuse d'une charge élémentaire négative $-e$ (ou \ominus) attirée par la charge élémentaire positive $+e$ (ou \oplus) du proton ;
- Charge élémentaire négative $-e = -1,6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ d'une masse négligeable ($m = 9,1093897 \times 10^{-31} \text{ kg}$) ;
- Particule régissant la grande majorité des liaisons et interactions chimiques entre atomes et molécules, dont l'électricité.

1.3 Description de l'atome

3. 1. Caractéristiques des éléments périodiques

Chaque élément périodique présente une série de caractéristiques uniques que l'on retrouve sur le tableau périodique des éléments chimique (?? page ??) et qui vont déterminer leurs propriétés chimiques et physiques :

Nom de l'élément

Symbole de l'élément X

Famille Groupement d'éléments qui présentent le même nombre d'électrons de valence.

Numéro atomique Z Nombre de protons que présente le noyau de l'élément selon l'isotope le plus abondant.

Nombre de neutrons N Nombre de neutrons que présente le noyau de l'élément.

Nombre de masse A nombre de nucléons (neutrons + protons) que présente le noyau de l'élément.

Masse molaire Masse d'une mole de l'élément selon la proportions des isotopes de cet élément.

Configuration électronique Répartition des électrons autour du noyau de l'élément donnant la formule quantique (détaillée dans le ?? page ??).



Les éléments périodiques présentent d'autres caractéristiques qui ne sont pas annotées sur le tableau périodique (?? page ??) :

Électronégativité Capacité de l'élément à attirer les électrons lors de la formation d'une liaison chimique avec un autre élément.

1^{re} énergie d'ionisation en kJ mol^{-1} Énergie qu'il faut fournir à un atome neutre à l'état gazeux pour lui arracher un électron (le moins lié au noyau) et former un ion positif.

Nombre d'oxydation Nombre de charges électriques élémentaires réelles ou fictives que présente un atome au sein de l'élément. Il est utilisé pour le calcul d'*oxydo-réduction* à l'œuvre dans les générateurs électrochimiques.

3. 2. Définitions utiles

Isotope Les isotopes sont des *déclinaisons atomiques* d'un élément donné qui diffèrent par le contenu en neutrons de leur noyaux mais avec un nombre de protons ou d'électrons identiques entre isotopes. La masse atomique de l'élément fait la moyenne des masses de chaque isotope selon leur abondance naturelle.

Masse molaire La masse molaire d'un élément est la masse que feront $6,0221 \times 10^{23}$ atomes de cet élément (nombre d'Avogadro).

Configuration électronique La configuration électronique d'un élément indique la répartition probable des couches d'électrons gravitant autour du noyau.

Couche électronique de valence La couche électronique de valence d'un atome comprend les électrons de valence correspondant aux niveaux d'énergie pour lesquels, dans la formule quantique, n présente la valeur la plus grande.

Valence d'un l'atome La valence d'un atome est égale au nombre d'électrons célibataire situés sur cette couche de valence.

Électron libre Un électron libre est un électron de valence qui a été excité par une énergie suffisante et qui va permettre la conduction électrique par le transfert de sa charge électrique négative \ominus ;

Ion Un ion est un atome ou une molécule dont un – ou plusieurs – électron(s) ont été arrachés ou captés. Il est porteur d'une charge électrique positive – *cation* – ou négative – *anion* – et la manifestation chimique de l'énergie électrique.

3. 3. Nombres quantiques

Les électrons gravitant autour d'un noyau sont répartis en couches électroniques (voir ?? page ??) qui sont elles même divisées en sous-couches.

Ceux-ci peuvent sauter d'une couche à l'autre avec absorption ou émission d'énergie. Chaque électron est défini par un nombre quantique unique pour un état donné, séparé en quatre parties.

- Le nombre quantique d'un électron indique sa position probable dans l'espace électronique autour du noyau atomique¹ dénommé orbitale atomique ;
- L'état quantique est unique à chaque électron. Deux électrons ne peuvent pas se situer dans le même espace probable autour du noyau d'un atome.

1. Des représentations des géométries orbitales se situent au ?? page ??.



TAB. 1.1: Description des nombres quantiques

Nombre quantique	Valeurs	Description
<i>Nombre quantique principal n</i>		
	$n \geq 1$: Entier positif non nul	Définition de la couche électronique : distance entre le noyau et l'électron.
	Exemple :	Exemple :
	– $n = 1$;	– $n = 1$ pour la couche K ;
	– $n = 2$;	– $n = 2$ pour la couche L ;
	– $n = 3$;	– $n = 3$ pour la couche M ;
	– ...	– ...
<i>Nombre quantique secondaire/azumital ℓ</i>		
	$0 \leq \ell < n - 1$: Entier positif à n valeur(s)	Définition de la sous-couche électronique : forme et symétrie de l'orbitale atomique.
	Exemple :	Valeurs :
	– $\ell = 0$;	– $\ell = 0$ pour la sous-couche s (sharp) ;
	– $\ell = 1$;	– $\ell = 1$ pour la sous-couche p (principal) ;
	– $\ell = 2$;	– $\ell = 2$ pour la sous-couche d (diffuse) ;
	– Jusqu'à $\ell = (n - 1)$.	– $\ell = 3$ pour la sous-couche f (fondamental).
		Forme :
		$\ell = 0$: 1 lobe ;
		$\ell = 1$: 2 lobes ;
		$\ell = 2$: 4 lobes ;
		$\ell = 3$: 8 lobes.
<i>Nombre quantique tertiaire/magnétique m_ℓ</i>		
	$-\ell \leq m_\ell < +\ell$: Entier positif à $(2\ell + 1)$ valeur(s)	Définition de l'orientation : orientation de l'orbitale dans l'espace selon les axes.
	Exemple :	Exemple si $\ell = 2$:
	– $-\ell$;	– Forme d'haltères croisées ;
	– $(-\ell + 1)$;	– $m_\ell = -2 ; -1 ; 0 ; 1 ; 2$.
	– $(-\ell + 2)$;	
	– ...	
	– 0 ;	
	– ...	
	– $(\ell - 2)$;	
	– $(\ell - 1)$;	
	– $+\ell$.	
<i>Nombre quantique du spin S</i>		
	$S = 1/2$	Moment magnétique dû à la rotation de l'électron sur lui-même.
<i>Nombre quantique magnétique du spin m_S</i>		
	$m_S = -1/2 ; 1/2$	Sens de rotation de l'électron sur lui-même.



Période ¹	Sous-couche	Nombres quantiques		Nombre quantique magnétique							Nombre d'électrons	
		Principal	Azimutal	−3	−2	−1	0	+1	+2	+3	Sous-couche	Couche
Couche K												
	1s	$n = 1$	$\ell = 0$				↑↓				2	2
Couche L												
	2s	$n = 2$	$\ell = 0$				↑↓				2	2
	2p	$n = 2$	$\ell = 1$			↑↓	↑↓	↑↓			6	
Couche M												
	3s	$n = 3$	$\ell = 1$				↑↓				2	2
	3p	$n = 3$	$\ell = 1$			↑↓	↑↓	↑↓			6	
Couche N												
	4s	$n = 4$	$\ell = 0$				↑↓				2	18
	3d	$n = 3$	$\ell = 2$		↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓		10	
	4p	$n = 4$	$\ell = 1$			↑↓	↑↓	↑↓			6	
Couche O												
	5s	$n = 5$	$\ell = 0$				↑↓				2	18
	4d	$n = 4$	$\ell = 2$		↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓		10	
	5p	$n = 5$	$\ell = 1$			↑↓	↑↓	↑↓			6	
Couche O												
	6s	$n = 6$	$\ell = 0$				↑↓				2	32
	4f	$n = 4$	$\ell = 3$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	14	
	5d	$n = 5$	$\ell = 2$		↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓		10	
	6p	$n = 6$	$\ell = 1$			↑↓	↑↓	↑↓			6	
Couche P												
	7s	$n = 7$	$\ell = 0$				↑↓				2	32
	5f	$n = 5$	$\ell = 3$	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	14	
	6d	$n = 6$	$\ell = 2$		↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓		10	
	7p	$n = 7$	$\ell = 1$			↑↓	↑↓	↑↓			6	

¹ Une période est une ligne du tableau périodique (même nombre de couches électroniques) tandis qu'une couche électronique désigne l'ensemble des orbitales atomiques partageant un même nombre quantique principal n .

TAB. 1.2: Distribution des électrons dans les orbitales atomiques par sous-couche électronique

3. 4. Énergie électronique

3. 4. 1. Règle de Klechkowski et de stabilité

- L'énergie contenue dans les sous-couches électroniques augmente lorsque la somme des nombres quantiques principal et azimutal $n + \ell$ augmente. Si celle-ci est identique pour deux sous-couches, celle de plus basse énergie sera celle pour laquelle n sera le plus petit.
- Les électrons se répartissent de façon à obtenir la configuration présentant un minimum d'énergie. La répartition s'effectue par ordre croissant d'énergie en commençant par la sous-couche de plus basse énergie (valeurs de $n + \ell$ puis n croissantes).

Comme cité dans le ?? page ??, toutes les sous-couches d'une période n'appartiennent pas nécessairement à la même couche électronique : à partir de la troisième période, des sous-couches appartenant à des couches différentes se remplissent à la même période.

L'ordre précis des sous-couches électroniques est donné la la règle de Klechkowski, en ?? page ??. Cela donne l'ordre de répartition suivant, applicable à plus de 80% du tableau périodique :

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



Une vingtaine d'éléments ne respectent pas cette répartition électronique. Si l'on l'on respecte la *règle de Hunt* – plus le spin S résultant des électrons d'une orbitale atomique est élevé, plus la configuration électronique sur cette orbitale est stable – pour les éléments des blocs d et f , il est moins énergétiquement moins favorable de respecter la règle de Klechkowski que de favoriser l'occupation impaire des sous-couches les plus externes lorsque la couche d ou f est vide, à moitié remplie ou entièrement remplie. Effectivement, l'écart d'énergie entre ces sous-couches est inférieur au gain d'énergie induit par la redistribution des électrons de telle sorte que leur nombre quantique magnétique de spin m_S résultant soit le plus élevé. Ces « exceptions » sont listées dans le ?? page ??.

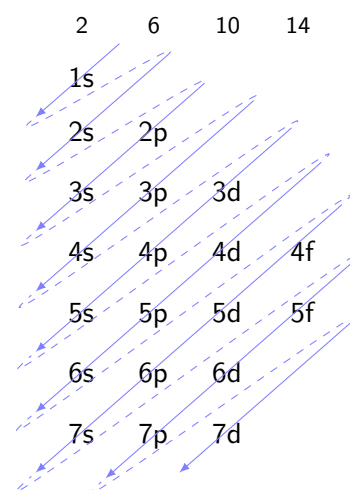


FIG. 1.2: Ordre de répartition des sous-couches électroniques

3. 4. 2. Principe d'exclusion de Pauli

Dans le même atome, il ne peut y avoir deux électrons dont les quatre nombres quantiques sont identiques :

Triplet Un triplet n, l, m donné décrit deux électrons dont le sens de rotation est précisé par le signe de m_S et définit l'orbitale atomique de ceux-ci ;

Quadruplet Un quadruplet vaut donc soit $n, l, m, m_S = +\frac{1}{2}$, soit $n, l, m, m_S = -\frac{1}{2}$ et est unique pour chaque électron.

- $2 e^-$ maximum sur une sous-couche s ;
- $6 e^-$ maximum sur une sous-couche p ;
- $10 e^-$ maximum sur une sous-couche d ;
- $14 e^-$ maximum sur une sous-couche f .

1.4 Description détaillée d'un atome d'aluminium

Dans cette section est détaillée la description complète du 13^{ème} élément du tableau périodique situé en ?? page ??, l'aluminium.

13	26.982
Al	
Aluminium	
$3s^2 3p^1$	

Symbole : Al

Famille : métaux de transitions

Numéro atomique Z : 13 protons

Nombre d'électrons : 13 protons

Nombre de neutrons N : 14 neutrons pour l'isotope le plus abondant

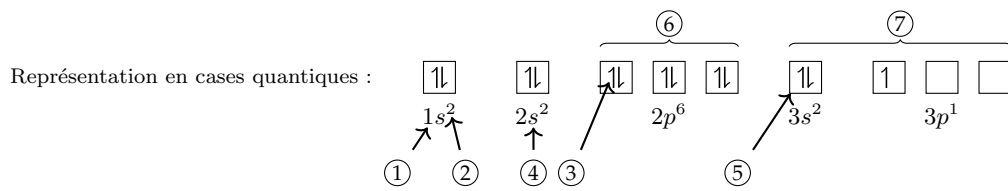
Nombre de masse A : 27 nucléons

Masse molaire M : $M = 26,981386 \text{ g mol}^{-1}$

Formule électronique/quantique : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$



4. 1. Configuration électronique



⑦ : couche électronique $n = K$

⑥ : nombre d'électrons présents dans la sous-couche électronique $\ell = s$ de la couche électronique $n = K$

⑤ : électron dans le sens de rotation du spin $m_s = -\frac{1}{2}$

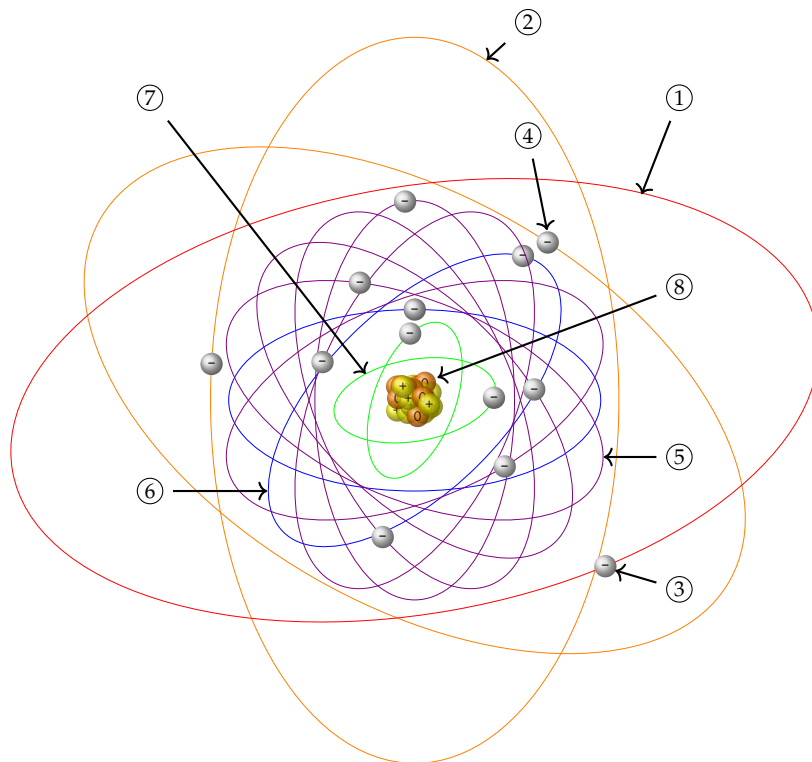
④ : sous-couche électronique $\ell = s$ de la couche électronique $n = L$

③ : paire d'électrons de la sous-couche $\ell = s$ de la couche électronique $n = M$ différenciés par le signe du nombre quantique du spin S

② : cases quantiques désignant les nombres quantiques magnétiques du spin M_s des électrons de la sous-couche $\ell = p$ de la couche électronique $n = L$

① : dernière couche électronique $n = M$ (couche de valence)

4. 2. Représentations graphiques



⑦ : couche électronique M sous-couche p (bande de conduction)

⑥ : couche électronique M sous-couche s (valence)

⑤ : électron libre

④ : électron de valence

③ : couche électronique K sous-couche p

② : couche électronique K sous-couche s

① : couche électronique L sous-couche s

⑧ : noyau atomique

FIG. 1.3: Modélisation détaillée (animation à la ?? page ??)



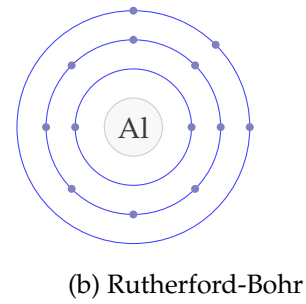
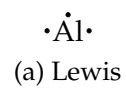


FIG. 1.4: Représentation atomique de Lewis et de Bohr

L'atome d'aluminium possède trois électrons de valence sur sa dernière couche électronique $3s^{(2)}+3p^{(1)}$.

