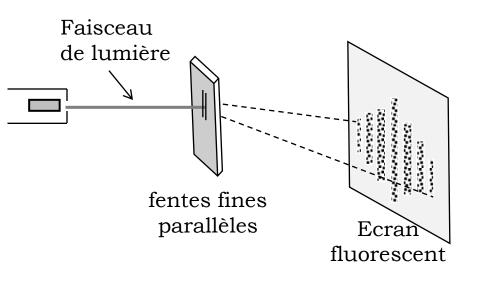
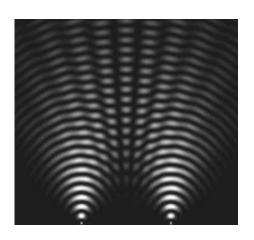
7- Le modèle ondulatoire





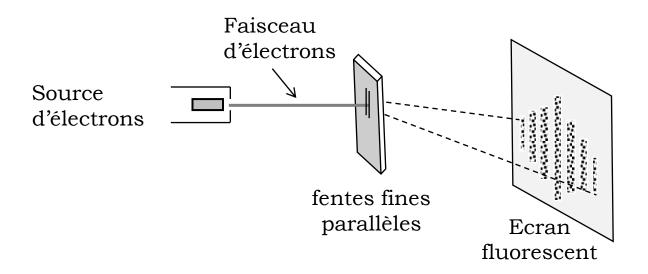
Diffraction de la lumière

- ? On ne sait pas par quel trou un photon passe
- ? On ne sait pas sur quelle frange il va arriver
- On sait seulement la probabilité pour qu'il arrive en un point de l'écran

Probabilité de présence en point



Intensité lumineuse en ce point



Le phénomène de diffraction des électrons

le caractère ondulatoire des électrons qui se comportent comme des ondes

Comme le photon, l'électron est décrit par une fonction d'onde Ψ (x, y, z, t) qui caractérise l'état de l'électron dans l'espace à l'instant t

Schrödinger (1887-1961)

Il proposa en 1927 une formalisme mathématique (équation de Schrödinger) qui établit la connexion entre :

- les interactions électrons/électrons et électrons/noyau

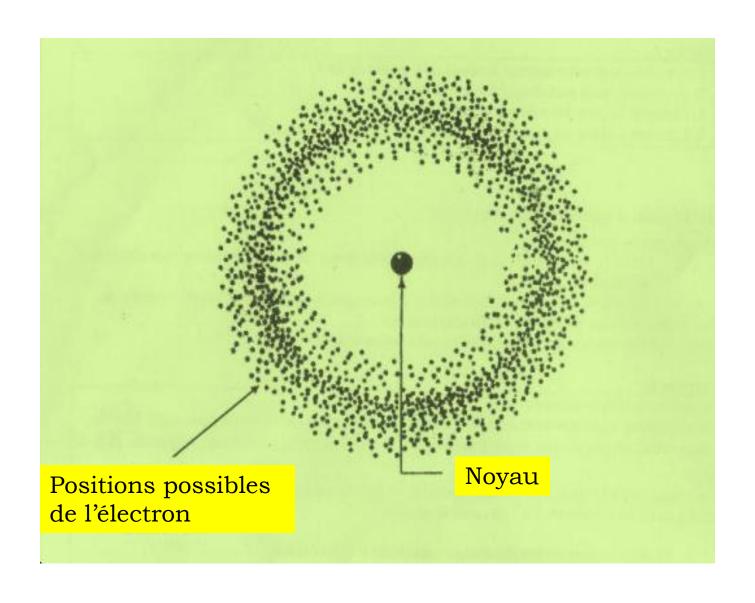
Caractère ondulatoire de l'électron

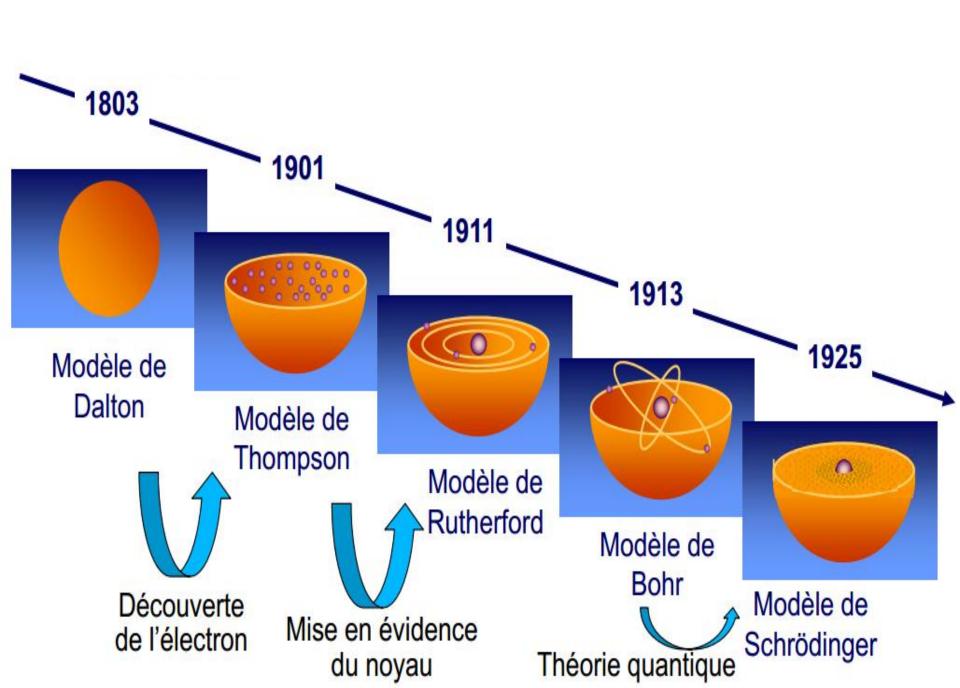
La notion d'orbite n'est plus adéquate

On dit plutôt que l'électron occupe une orbitale

Chaque orbitale est caractérisée par une fonction d'onde Ψ

Probabilité de présence de l'électron





8- Nombres quantiques

Schrödinger a montré qu'une fonction d'onde $\Psi_{n,\ell,m}(x,y,z)$ est caractérisée par 3 nombres quantiques :

n nombre quantique principal

définit l'énergie de l'orbitale atomique

 ℓ nombre quantique secondaire ou azimutal définit la géométrie de l'orbitale atomique

m nombre quantique magnétique

définit l'orientation de l'orbitale atomique

9- Etats de l'atome

Un triplet (n, ℓ, m) définit un état de l'atome :

$$n = 1, 2, 3 ...$$

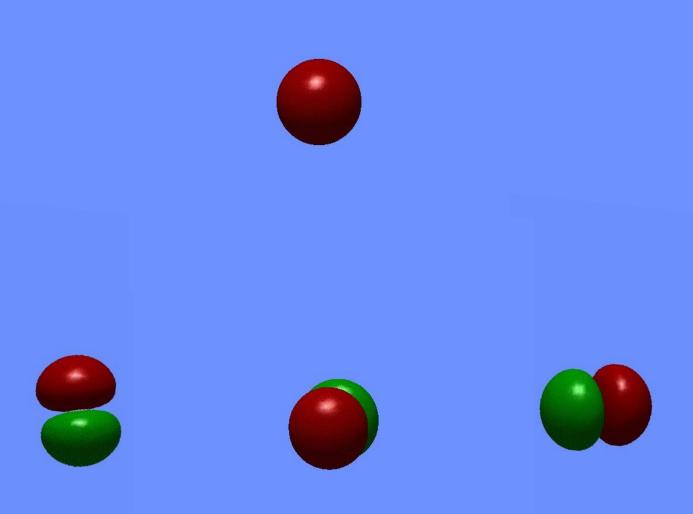
$$0 \le \ell \le n-1$$

$$-\ell \le m \le +\ell$$

- Chaque niveau énergétique de l'atome comprend n sous-niveaux caractérisés par le nombre quantique ℓ .
- Chaque sous-niveau comprend $2\ell+1$ orbitales caractérisées par le nombre quantique m.

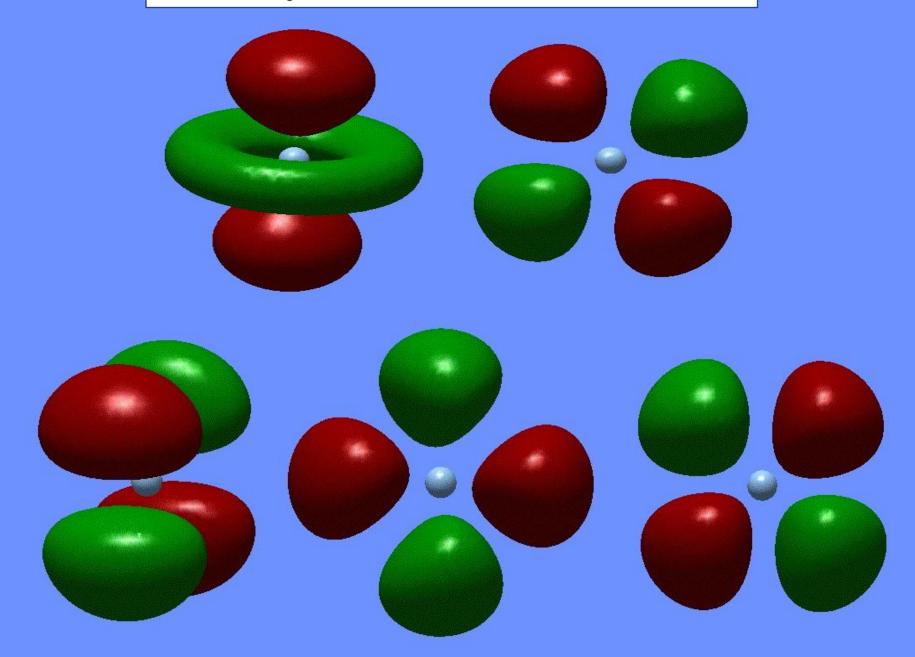
n = 1	$\ell = 0$	m = 0	1s	$\Psi_{1,0,0}$
n = 2	$\ell = 0$	m = 0	2s	$\Psi_{2,0,0}$
	$\ell = 1$	m = -1	$2p_x$	$\Psi_{2,1,-1}$
		m = 0	$2p_{y}$	$\Psi_{2,1,0}$
		m = 1	$2p_z$	$\Psi_{2,1,1}$
n = 3	$\ell = 0$	m = 0	3s	$\Psi_{3,0,0}$
	$\ell = 1$	m = -1	$3p_x$	$\Psi_{3,1,-1}$
		m = 0	$3p_y$	$\Psi_{3,1,0}$
		m = 1	$3p_z$	$\Psi_{3,1,1}$
	$\ell = 2$	m = -2	$d_{x^2-y^2}$	$\Psi_{3,2,-2}$
		m = -1	${\sf d}_{{f z}^2}^{}$	$\Psi_{3,2,-1}$
		m = 0	$3d_{xy}$	$\Psi_{3,2,0}$
		m = 1	$3 ext{d}_{ ext{xz}}$	
		m = 2	$3d_{yz}$	$\Psi_{3,2,1} \ \Psi_{3,2,2}$

La forme des orbitales s



La forme des orbitales p

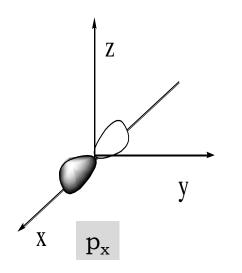
Les formes des orbitales d

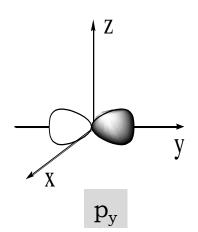


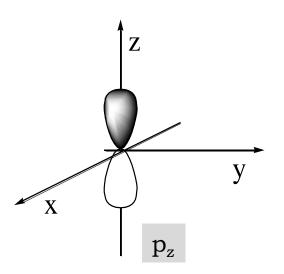
Représentation des orbitales s et p



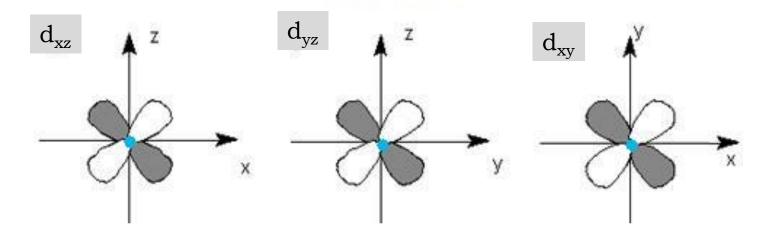
S

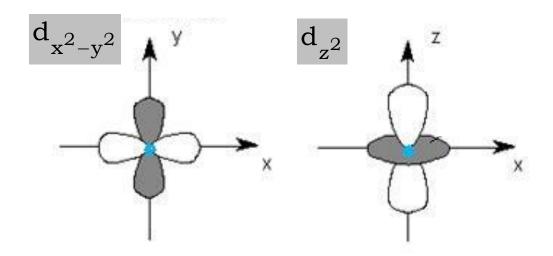






Représentation des orbitales d





10- Atomes à plusieurs électrons

Spin de l'électron

Les trois nombres quantiques n, ℓ et m se sont révélés insuffisants pour décrire totalement l'électron dans un atome polyélectronique.

Il a fallu introduire un quatrième nombre quantique, appelé nombre quantique de spin s.

L'électron, chargé électriquement, et animé d'un mouvement de rotation autour de son centre. Il est équivalent à un petit aimant dont l'orientation dépend du sens de rotation.

Deux orientations, donc deux valeurs du spin s = +1/2 ou s = -1/2



Ainsi un électron dans une orbitale est caractérisé par quatre nombres quantiques : n, ℓ , m et s.

A un nombre quantique principal n donné correspondent 2n² états différents

Energie des orbitales atomiques

Le classement des énergies des orbitales atomiques se fait selon les règles de stabilité

 \checkmark L'énergie d'une orbitale atomique est d'autant plus haute que n est grand.

$$E_{1s} < E_{2s} < E_{3s} < E_{4s} < \dots$$

ullet Dans un niveau n, l'énergie croît suivant ℓ croissant

$$E_{2s} < E_{2p}$$
 $E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$

ullet Pour le même n et le même ℓ , les énergies sont les mêmes

$$E_{2px} = E_{2py} = E_{2pz}$$

Remplissage des orbitales atomiques

Les électrons occupent les sous-niveaux énergétiques dans l'ordre croissant de l'énergie

Règle de Klechkovski pour le remplissage des orbitales atomiques.

Principe d'exclusion de Pauli.

Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir les quatre nombres quantiques identiques.

Conséquence:

Une orbitale atomique ne peut représenter au maximum que deux électrons.





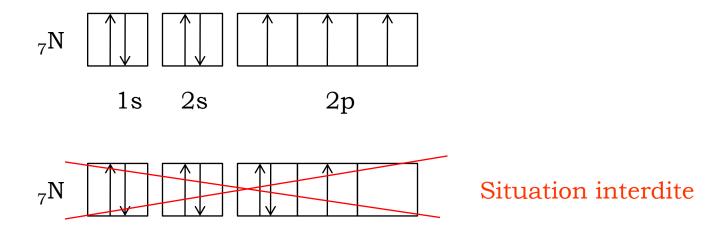
Situations interdites

Le nombre maximal d'électrons que peut contenir la couche n est 2n²

Règle de Hund

La situation la plus stable énergétiquement est celle qui correspond à l'occupation du maximum d'orbitales par des électrons avec des spins parallèles.

Atome d'Azote N (7ē)



Les électrons commencent à occuper les couches de nombre quantique le plus faible

11- Configuration électronique d'un élément chimique

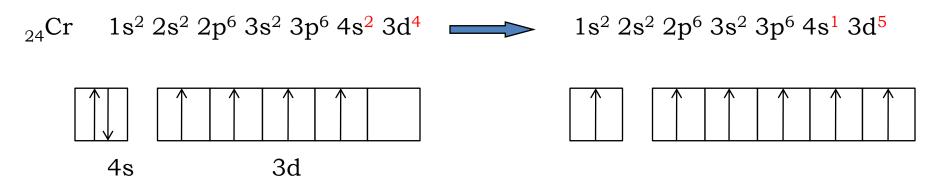
La configuration électronique d'un atome est la répartition de ses électrons dans les différentes orbitales atomiques.

La configuration électronique est établie en respectant les différentes règles (Pauli, Hund, Klechkowsky).

La somme des exposants est égale au nombre total d'électrons.

 $_{1}H$ $1s^1$ Atome d'hydrogène (1 ē) $1s^2$ Atome d'hélium (2 ē) ₂He $1s^2 2s^2 2p^2$ Atome de carbone (6 ē) $_{21}$ Sc $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$ Atome de scandium (21 ē) $_{35}$ Br $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$ Atome de brome (35 ē)

Exceptions



La 3d est à moitié remplie est plus stable

$$29^{\text{Cu}} \quad 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^2 \quad 3p^6 \quad 4s^2 \quad 3d^9$$

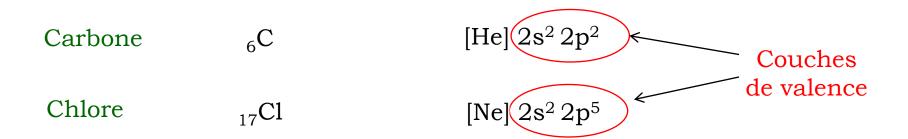
$$1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^2 \quad 3p^6 \quad 4s^1 \quad 3d^{10}$$

La 3d complètement remplie est plus stable

Couche K	Hydrogène Hélium	₁H ₂He	$1\mathrm{s}^1$ $1\mathrm{s}^2$
	Lithium	$_3$ Li	[He] $2s^1$
	Béryllium	$_4$ Be	[He] $2s^2$
	Bore	$_5\mathrm{B}$	[He] $2s^2 2p^1$
	Carbone	$_6$ C	[He] $2s^2 2p^2$
Oorrehe I	Azote	$_{7}\mathrm{N}$	[He] $2s^2 2p^3$
Couche L	Oxygène	O_8	[He] $2s^2 2p^4$
	Fluore	$_9\mathrm{F}$	[He] $2s^2 2p^5$
	Néon	₁₀ Ne	[He] $2s^2 2p^6$
	Sodium	₁₁ Na	[Ne] 3s ¹
	Magnésium	$_{12}{ m Mg}$	[Ne] $3s^2$
	Aluminium	₁₃ A1	[Ne] $3s^2 3p^1$
Couche M	Silicium	₁₄ Si	[Ne] $3s^2 3p^2$
Couche M	Phosphore	₁₅ P	[Ne] $3s^2 3p^3$
	Soufre	₁₆ S	[Ne] $3s^2 3p^4$
	Chlore	₁₇ C1	[Ne] $3s^2 3p^5$
	Argon	₁₈ Ar	[Ne] $3s^2 3p^6$

₂He, ₁₀Ne ₁₈Ar ont des couches complètement pleines (Couches saturées)

Electrons de valence



Les électrons des couches de valence s'appellent électrons de valence.

Carbone ₆C [He] 2s² 2p² Configuration électronique du carbone

Carbone ₆C 2s² 2p² Configuration électronique de valence du carbone

12-Le Tableau périodique

Des atomes peuvent avoir la même structure électronique externe.

Leurs configurations électroniques sont semblables

Exemples:

Lithium
$$_3$$
Li $_3$ Li $_3$ He] $_2$ s $_1$ Configuration externe $_1$ Sodium $_{11}$ Na $_$

Les éléments chimiques qui ont les mêmes couches de valence ont des activités chimiques voisines.

Les atomes peuvent être classés selon :

le numéro atomique Z

Période ou Ligne

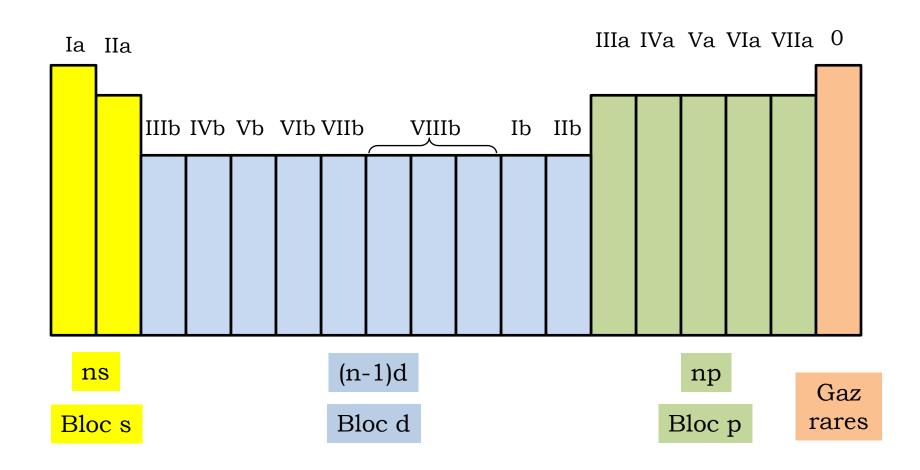
la configuration de valence

Colonne ou famille

Dans une période n, le numéro atomique Z croit par unité.

Dans une colonne, la configuration externe des éléments est la même.

Selon la nature de l'orbitale en cours de remplissage, le tableau est divisé en blocs



Analyse par colonnes : les familles

Colonne IA: ns¹ Métaux alcalins

<u>Colonne IIA</u>: ns^2 <u>Alcalino-terreux</u>

<u>Colonne IVA</u>: ns^2np^2 <u>Cristallogènes</u>

<u>Colonne VA</u>: ns^2np^3 <u>Pnictogènes</u>

<u>Colonne VIA</u>: ns^2np^4 <u>Chalcogènes</u>

<u>Colonne VIIIA</u>: ns^2np^6 Gaz rares ou gaz nobles

<u>Colonne VIIA</u>: ns^2np^5 *Halogènes*

<u>Colonnes IB \rightarrow VIIIB</u>: $(n-1)d^x$ *Métaux de transition*

De la configuration électronique d'un élément chimique, on peut déterminer :

- Période
- Bloc
- Groupe
- Couche de valence
- Nombre d'électrons de valence

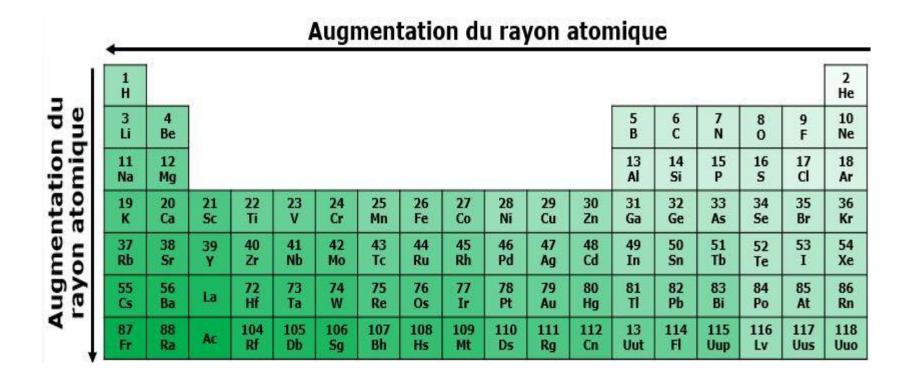
Mg:	Période 3	Bloc s	Alcalino-terreux	3s	2é
K:	Période 4	Bloc s	Alcalins	2s	1é
Br:	Période 4	Bloc p	Halogènes	4s4p	7é
Ni:	Période 4	Bloc d	Métaux de transition	3d4s	10é

13- Propriétés des éléments chimiques

Le rayon atomique

Le rayon atomique:

- diminue dans une période de gauche à droite Z
- 🕶 augmente avec Z dans une colonne du haut en bas.



Energie d'ionisation

C'est l'énergie nécessaire pour arracher un électron d'un élément chimique.

$$X \xrightarrow{E_I} X^+ + \bar{e} \qquad E_I = E(A^+) - E(A)$$

Accroissement de l'énergie d'ionisation H He d'ionisatio 10 6 Li 0 Ne Be Accroissement 11 12 13 14 15 16 17 18 C Na Mg Ar 19 21 22 25 27 28 31 32 33 34 35 36 20 23 24 26 30 Sc Ti V Cr Fe Co Ni Se Ca Mn Cu Zn Ge Kr Ga As énergie 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 Rb Sr Nb Tc Rh Pd Cd Sn Th 1 Mo Ru In Xe Y Zr Ag 55 56 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86 La TI Cs Pt Pb Ba Ta W Re Ir Au Hq Po At Rn 05 87 88 104 105 106 107 108 109 110 111 112 13 114 115 116 117 118 Ac Rf Ra Db Sq Bh Hs Mt Ds Rq Uut Cn Uup Lv Uus Uuo

Affinité Electronique

L'affinité électronique, A_E est la capacité d'un atome à accepter en plus un électron excédentaire.

$$X + \bar{e} \xrightarrow{A_E} X^-$$

L'Affinité Electronique a tendance à croître de gauche à droite avec Z dans une période et décroît du haut en bas dans une colonne.

	1 H]			Augr									•	\rightarrow			
	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8	9 F	10 Ne
iqu	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 5	17 Cl	18 Ar
tron	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
Electrol	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 Tb	52 Te	53 I	54 Xe
	55 Cs	56 Ba	La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 0s	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
	87 Fr	88 Ra	Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	13 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uud