



UNIVERSITÉ DE
SHERBROOKE

CHM010 – Chimie générale



Module 4 : Conception moderne de l'atome et mécanique quantique

Pierre-Alexandre Turgeon
Chargé de cours
Département de chimie

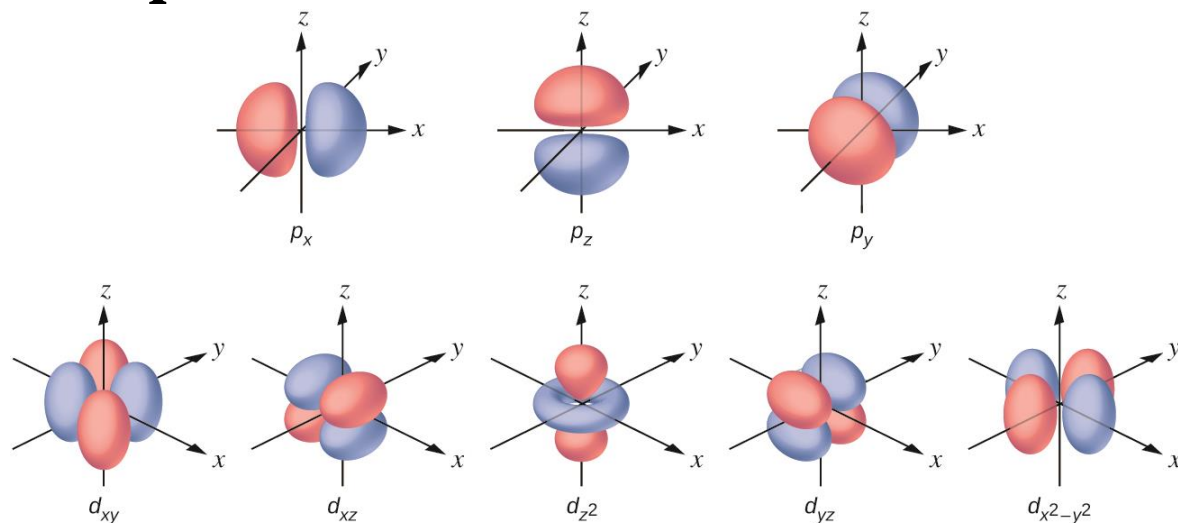


Image : <https://chem.libretexts.org>

Débat de prononciation....

La racine du mot « quantique » provient du mot latin *quantum*

Certains prononcent « kantique », d'autres « kouantique ».

Dans certains dictionnaires, les deux prononciations sont acceptées, dans d'autres dictionnaires, c'est seulement l'une ou l'autre...

Bref! Il n'y a pas de consensus...

“I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics”

Richard Feynman

Prix Nobel de physique, 1965 pour l' électrodynamique quantique

Traduction libre

Je pense pouvoir affirmer que personne ne comprend la mécanique quantique



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La dualité onde-particule

La dualité onde-particule est l'un des grands paradoxes de la mécanique quantique.

La lumière peut à la fois se comporter comme une **onde** :

- Interférence constructive/destructive
- Diffraction/réfraction

La lumière peut aussi se comporter comme une particule qu'on appelle le **photon**.

La lumière est d'une grande importance en chimie, c'est grâce à l'interaction lumière/matière que les scientifiques arrivent à étudier les atomes. On appelle ce champs de recherche la **spectroscopie**.

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La nature ondulatoire de la lumière

La lumière est une onde **électromagnétique**, c'est à-dire qu'elle est composée d'un **champ électrique** et d'un **champ magnétique**.

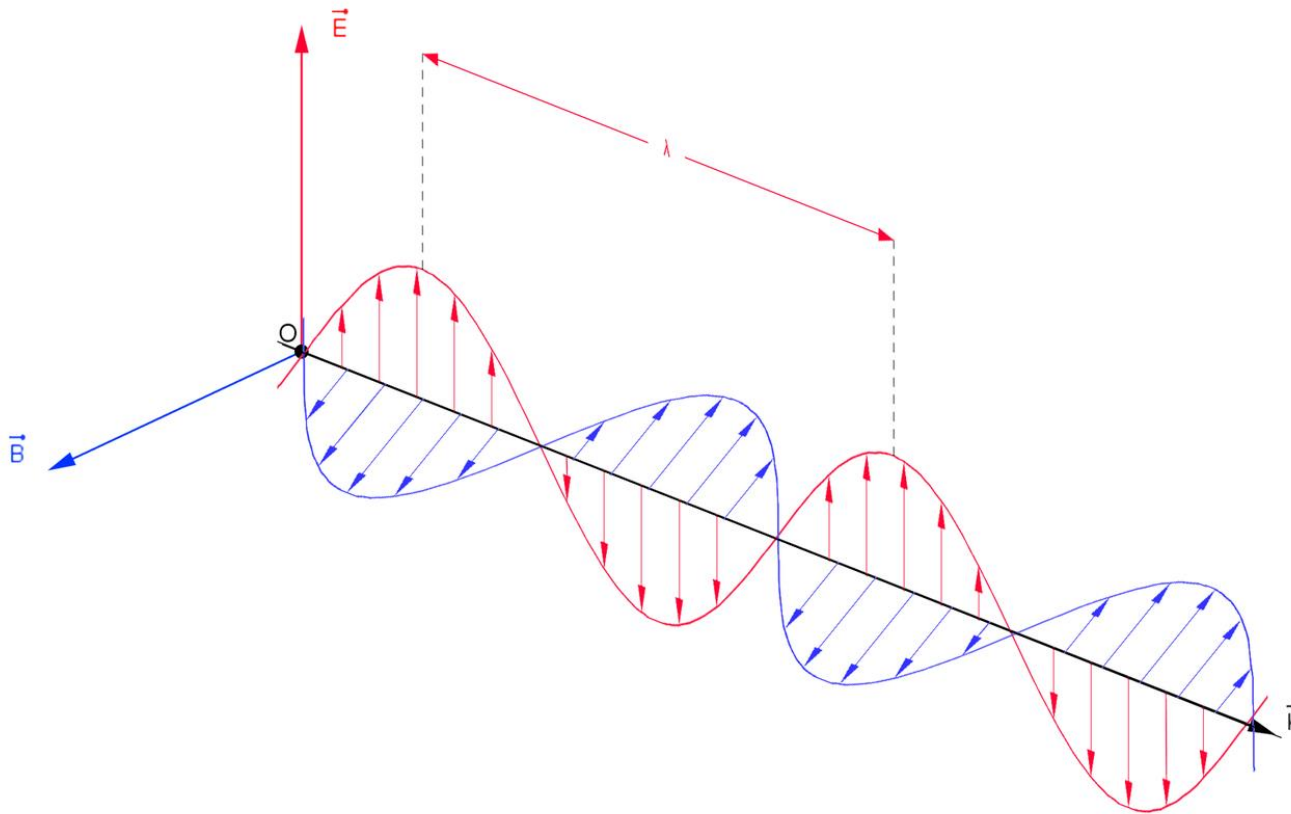


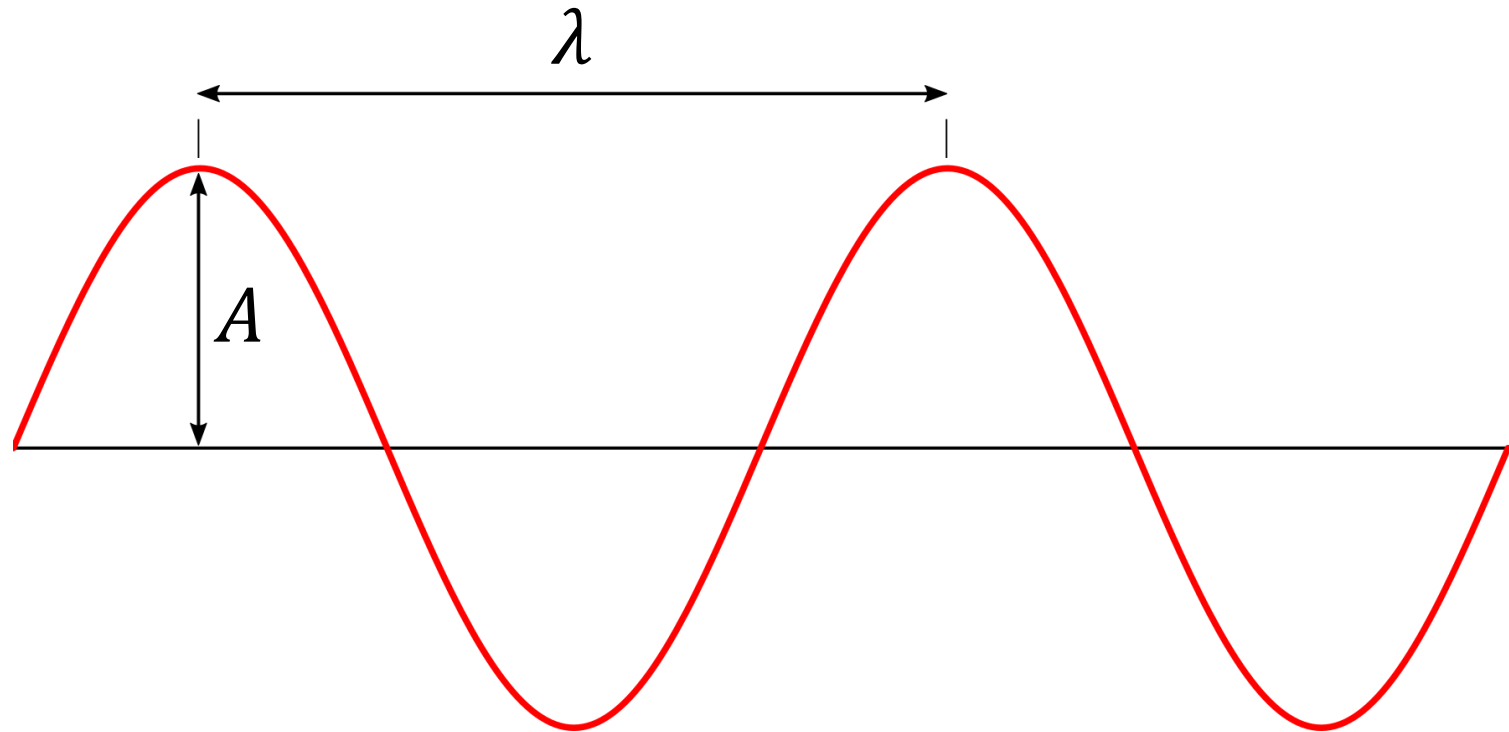
Image : ploufandsplash, wikimedia

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La nature ondulatoire de la lumière

Longueur d'onde (λ) : Correspond à la distance entre 2 maxima
Habituellement donnée en nanomètres

Amplitude (A) : Intensité de l'onde



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La nature ondulatoire de la lumière

La fréquence (ν) est aussi un paramètre important d'une onde. Elle correspond au nombre d'oscillation d'une onde en une seconde. Ses unités sont des hertz (Hz), ou encore des $\frac{1}{s}$ ou s^{-1} . Elle est reliée à la longueur d'onde grâce à la vitesse de la lumière (c).

$$c = \lambda \nu$$

Si on regarde l'analyse dimensionnelle :

$$c \left(\frac{\text{m}}{\text{s}} \right) = \lambda(\text{m}) \nu \left(\frac{1}{\text{s}} \right)$$

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Conversion entre fréquence et longueur d'onde

Quelle est la fréquence associée à une longueur d'onde de 200,0 nm?

Note: La vitesse de la lumière est de $2,998 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$

Puisque

$$c = \lambda \nu$$

On trouve

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{2,998 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{200,0 \times 10^{-9} \text{ m}} = 1,499 \times 10^{15} \text{ Hz (ou s}^{-1}\text{)}$$

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La nature corpusculaire de la matière

La découverte de l'effet photoélectrique a remis en doute la description ondulatoire de la lumière.

Lorsqu'on irradie un métal avec de la lumière, des électrons sont éjectés du métal.

Puisque l'énergie d'une onde est proportionnelle à son amplitude, il devrait suffire d'augmenter l'amplitude (l'intensité lumineuse) pour générer plus d'électrons.

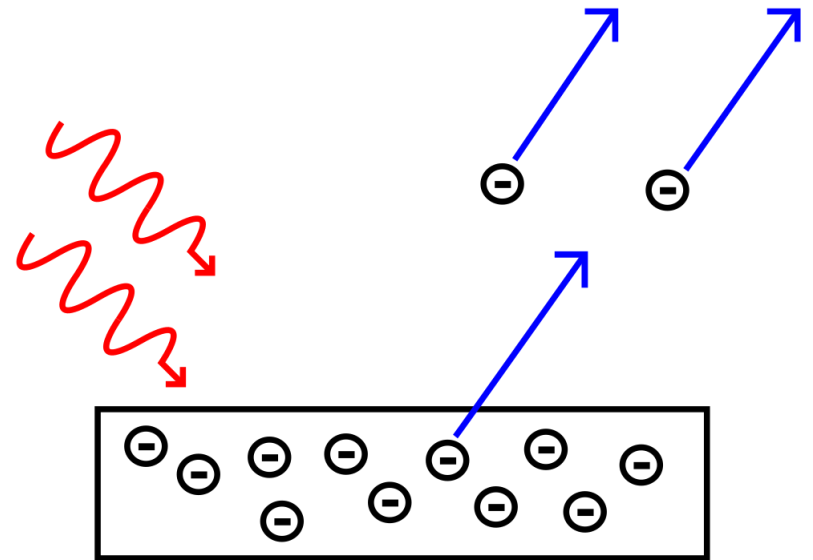


Image : Wolfmankurd, wikimedia

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La nature corpusculaire de la matière

Les scientifiques ont constaté que l'effet photoélectrique ne se produisait qu'à partir d'une certaine fréquence.

En dessous de la fréquence seuil, il est impossible de générer l'effet photoélectrique, peu importe l'intensité lumineuse

Au dessus d'une certaine fréquence seuil, l'effet photoélectrique se produit, même avec des intensités lumineuses très faibles.

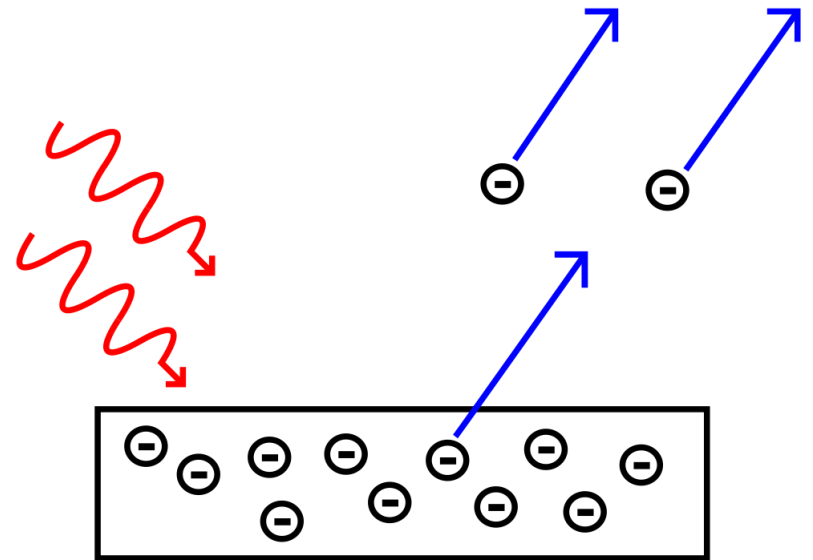


Image : Wolfmankurd, wikimedia

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La nature corpusculaire de la matière

En 1905 Albert Einstein propose une nouvelle théorie pour expliquer cet effet.

Prix Nobel de physique (1921)

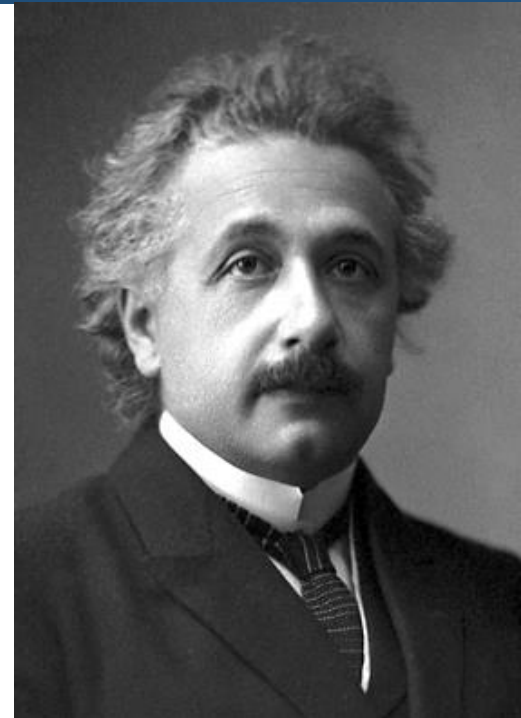
La lumière est composée de particules appelées **photons**.

L'énergie des photons est proportionnelle à leur fréquence selon l'équation suivante :

$$E = h\nu$$

où h est la constante de Planck

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \frac{\text{m}^2 \text{ kg}}{\text{s}}$$



En 1905, Einstein publie 4 de ses plus grandes théories : l'effet photoélectrique, le mouvement Brownien, la relativité restreinte et l'équivalence masse/énergie ($E=mc^2$)

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La dualité onde-particule

La théorie d'Einstein explique certains comportements de la lumière, notamment l'effet photoélectrique.

Elle ne permet cependant pas de relier le photon avec les effets d'optique ondulatoire (interférence, diffraction, réfraction, etc.)

La seule façon d'expliquer tous ces phénomènes est d'accepter que la lumière se comporte **à la fois comme une onde et comme une particule**

Cette dualité onde-particule existe pour d'autres objets (électrons, protons neutrons et certaines molécules)

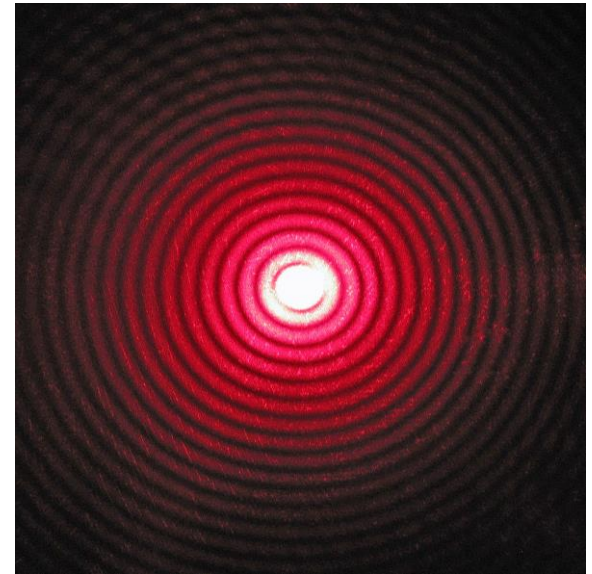
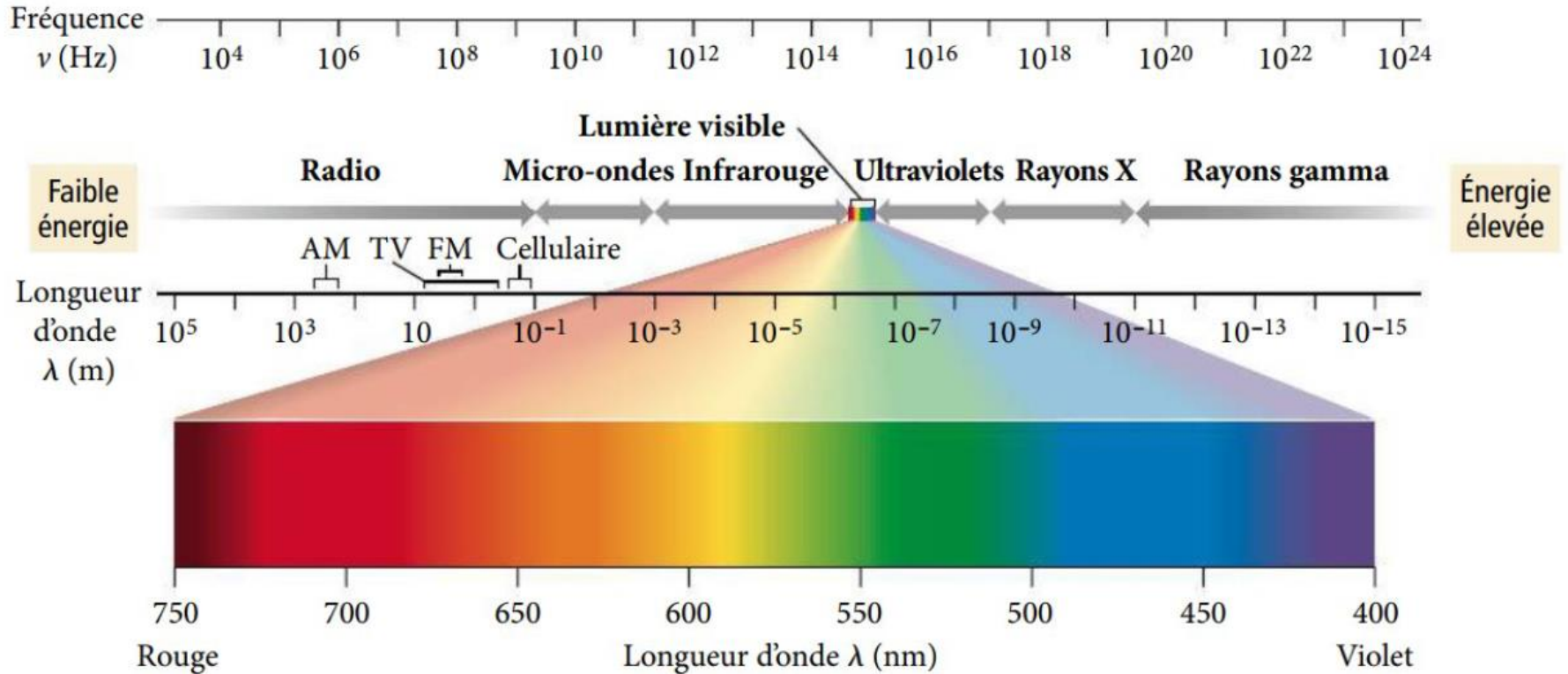


Image : Wisky, Wikimedia

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Le spectre électromagnétique



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Les ondes radios

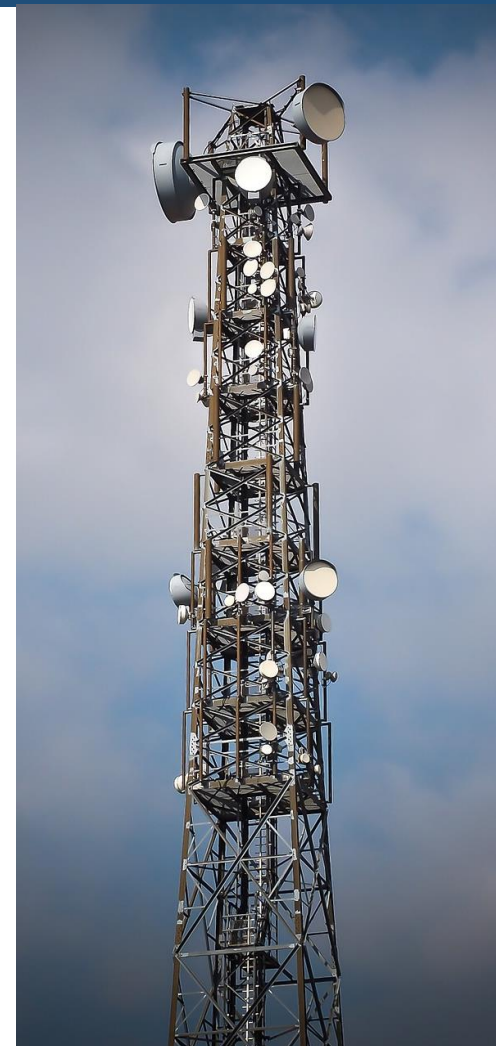
Plage de longueurs d'onde :

Environ de 10 000 km (30 Hz) à 1 mm (300 GHz)

Interaction avec la matière :

Elles peuvent faire osciller les électrons dans les métaux (p. ex. dans une antenne)

Elles ne sont pas très intéressantes en chimie...



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Les micro-ondes

On peut considérer les micro-ondes comme un type d'ondes radio. Certains ouvrages font une distinction entre les deux et d'autres non...



Plage de longueurs d'onde :

Environ de 1 m (300 MHz) à 1 mm (300 GHz)

Les micro-ondes englobent les fréquences du WiFi : 2,4 GHz, 5 GHz...

Interaction avec la matière :

Les micro-ondes peuvent faire tourner les molécules sur elles-mêmes et interagir avec les électrons des métaux

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Les infrarouges

Plage de longueurs d'onde :

Environ de 1 mm à 700 nm

Une grande partie de la lumière solaire se trouve dans l'infrarouge.



Interaction avec la matière :

Le rayonnement infrarouge interagit avec beaucoup de molécules. Il fait vibrer les liaisons chimiques qui peuvent ensuite transformer cette énergie en chaleur.

La **spectroscopie infrarouge** est une technique d'analyse très répandue en chimie.

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

La lumière visible

C'est l'infime partie du spectre EM que notre œil peut détecter.

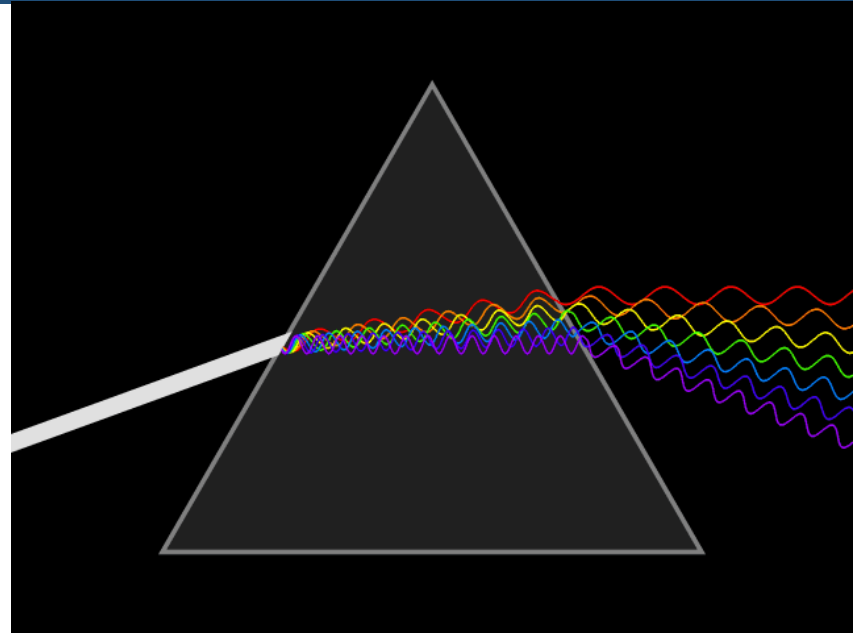
C'est aussi grâce à ce type de lumière que les plantes effectuent la photosynthèse.

Plage de longueurs d'onde :

Environ de 700 nm (rouge) à 400 nm (violet)

Interaction avec la matière :

La lumière visible permet des transitions électroniques dans les molécules. C'est par ce genre de mécanisme que la chlorophylle (pigment des végétaux) absorbe la lumière solaire.



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Les rayons X

Les rayons X sont largement utilisés en imagerie médicale.

Ils peuvent traverser la matière sans être absorbés complètement

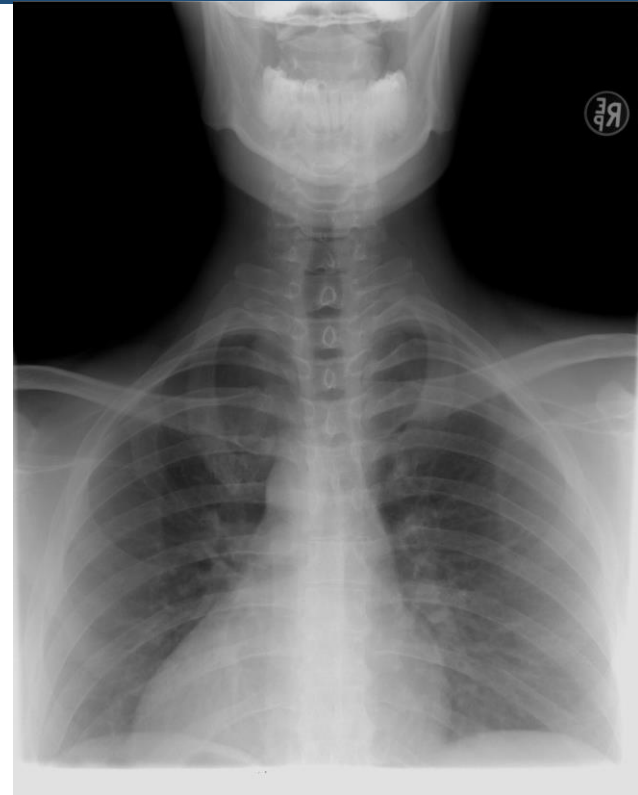
Plage de longueurs d'onde :

Environ de 10 nm à 0,01 nm

Interaction avec la matière :

Les rayons X sont considérés « ionisant ». Ils ont la capacité d'ioniser la plupart des atomes.

La cristallographie par rayons X est très utilisée en chimie.

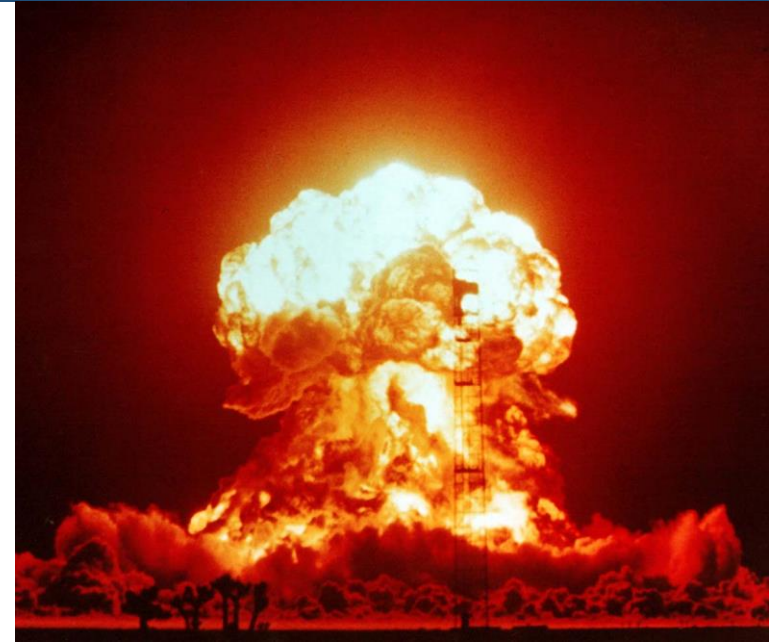


3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Les rayons gamma

Les rayonnement gamma est le plus énergétique de tous les types de rayonnement.

Les rayons gamma sont émis lors de processus radioactifs, par exemple les explosions nucléaires.



Plage de longueurs d'onde :

Environ de 0,01 nm jusqu'aux plus petites longueurs d'onde

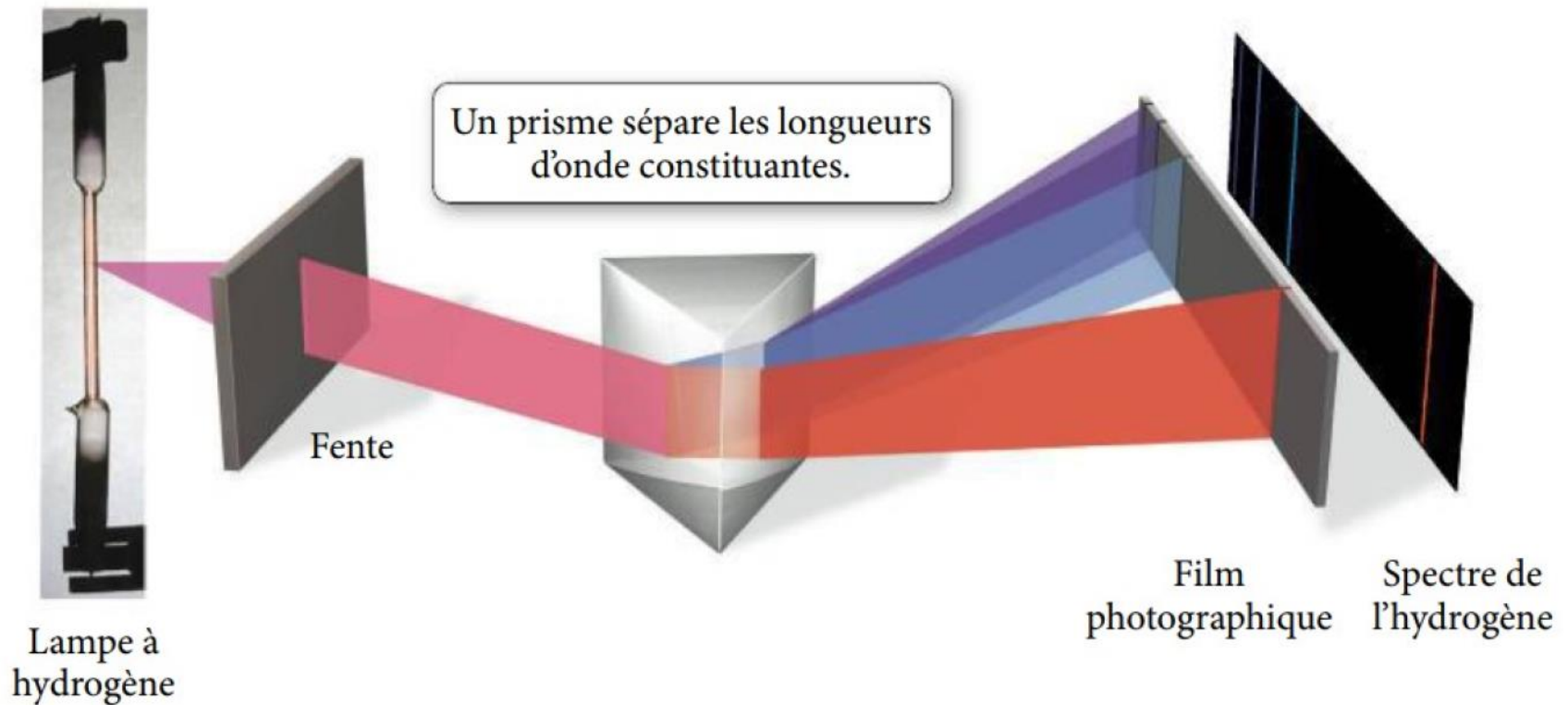
Interaction avec la matière :

Les rayons gamma transportent une très grande quantité d'énergie et ils peuvent causer d'énormes dommages aux tissus biologiques.

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Le modèle de Bohr

Le modèle atomique de Rutherford ne permet pas d'expliquer les spectre d'émission des atomes...



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Le modèle de Bohr

Lorsqu'un atome d'hydrogène est **excité**, celui-ci doit libérer de l'énergie sous forme de radiation électromagnétique.

Le spectre d'émission de l'hydrogène permet de mesurer cette radiation. Seulement certaines longueurs d'onde sont observées :



Images par Dave Shaffer

Aucune connaissance ne permettait d'expliquer ce phénomène. Niels Borh propose que les niveaux d'énergie dans un atome doivent être « **quantifiés** ».

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Le modèle de Bohr

Chaque atome possède un spectre d'émission qui lui est propre.

Ces spectres sont composés de raies d'émission qui sont dites **discrètes**.

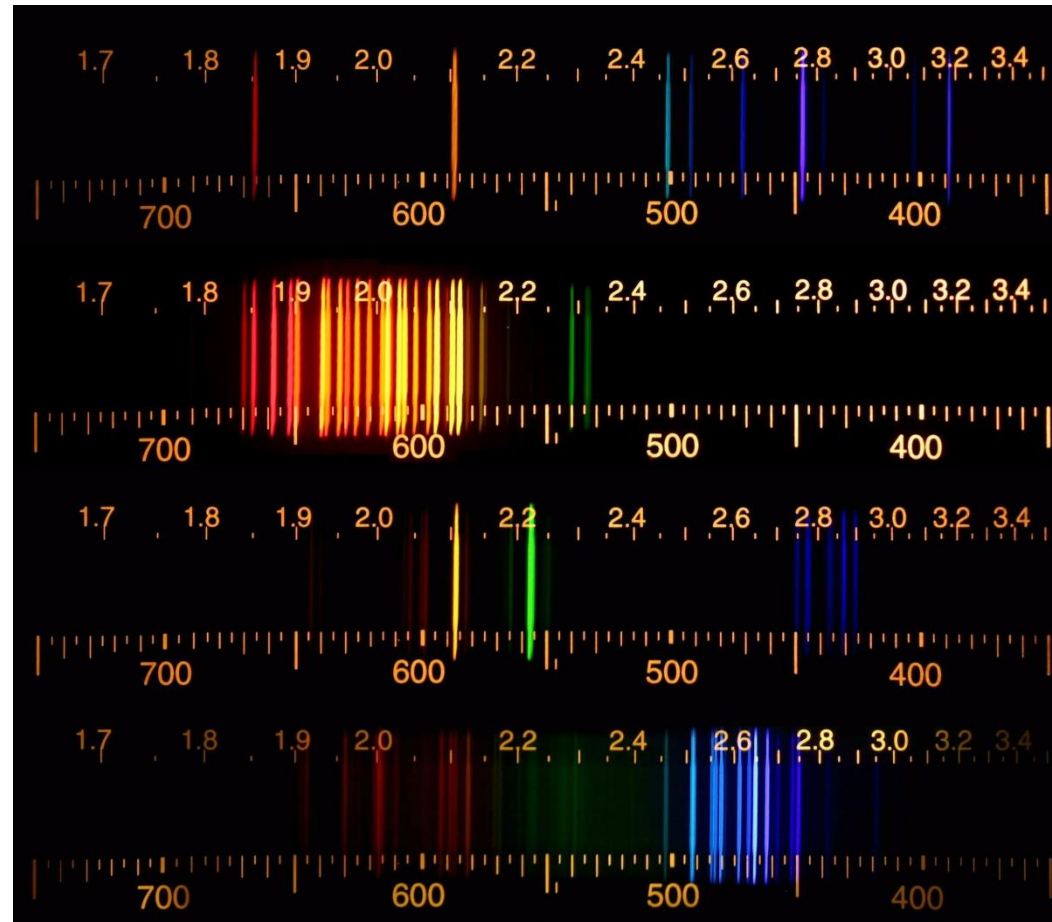
Le terme « discret » est le contraire du terme « continu ».

He

Ne

Kr

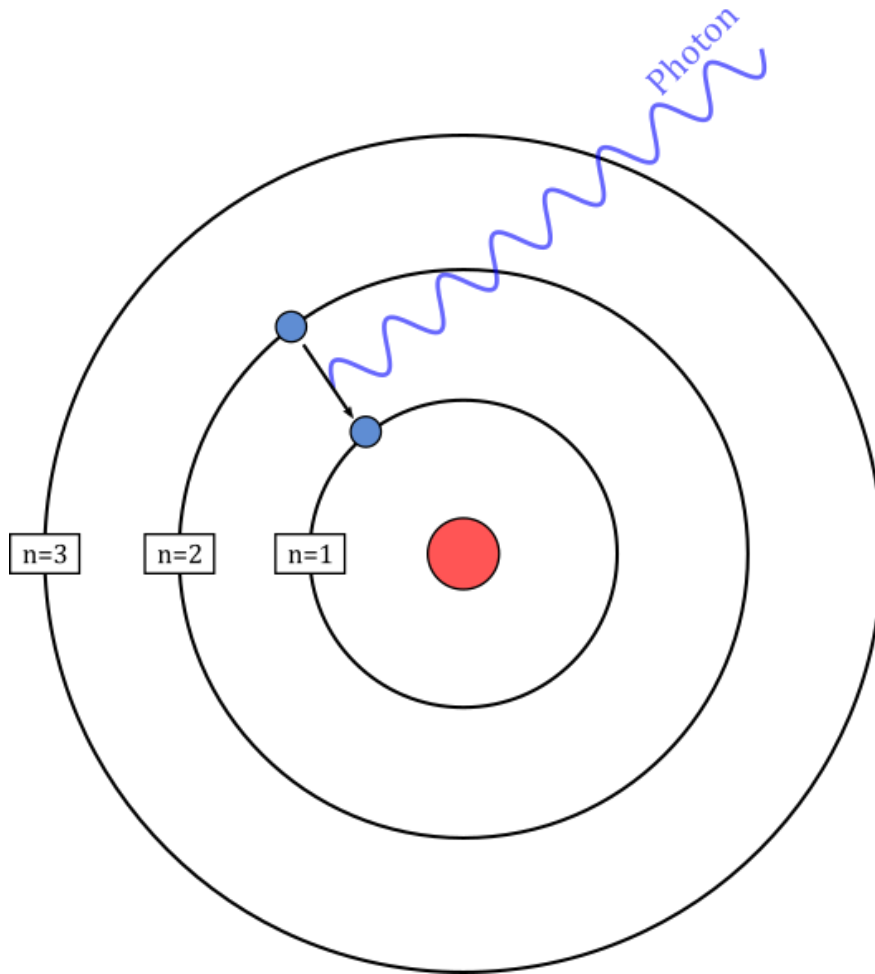
Xe



Images par Dave Shaffer

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Le modèle de Bohr



Les caractéristiques du modèle de Bohr

Les électrons tournent autour du noyau sur des orbites définies et discrets.

La position (énergie) de ces orbites obéit à des règles bien précises. L'énergie est quantifiée.

Les électrons émettent ou absorbent de la lumière lorsqu'ils passent d'une orbite à une autre (transition électronique).

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

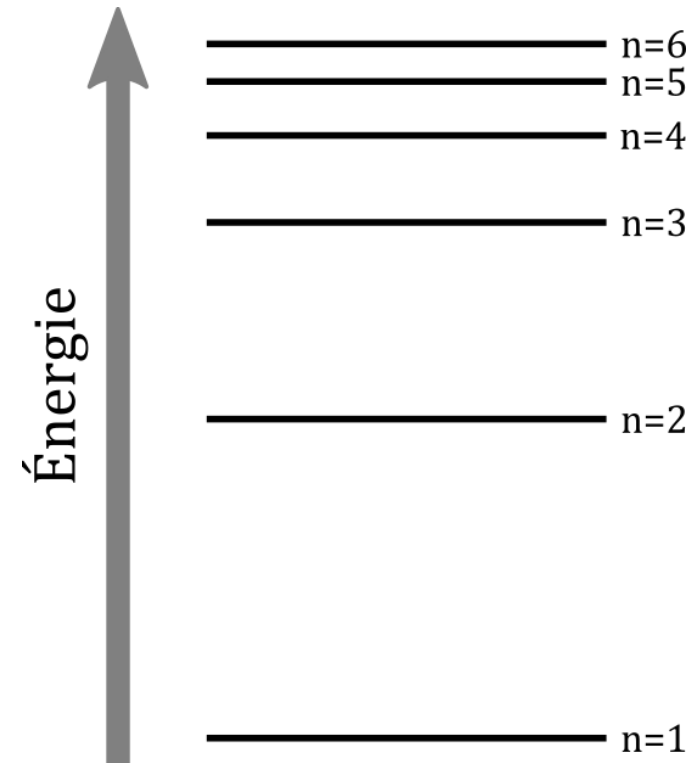
Le modèle et l'atome d'hydrogène

Les niveaux d'énergies (orbites) pour l'atome d'hydrogène sont donnés par l'équation suivante :

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

Où n représente le niveau d'énergie et où R_H est la constante de Rydberg :

$$R_H = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J}$$



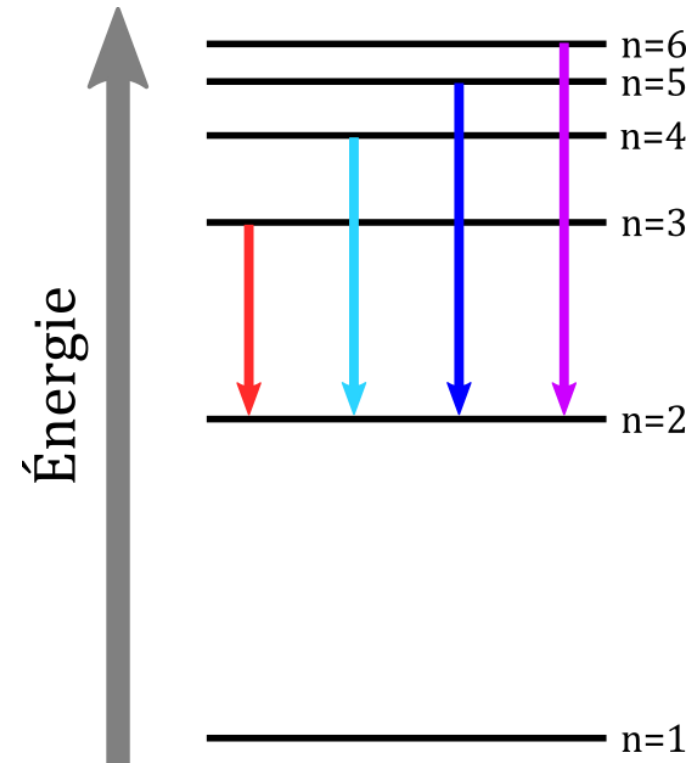
3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Le modèle et l'atome d'hydrogène

De la même manière, on peut définir les différences d'énergie entre les niveaux électroniques de l'atome d'hydrogène :

$$\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

Où n_i et n_f représentent respectivement les niveaux d'énergie initial et final.



3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Exemple sur l'atome d'hydrogène

Déterminer quelle est la différence d'énergie entre les niveaux $n_i=2$ et $n_f=1$. Déterminer ensuite la fréquence et la longueur du photon émis.

On applique d'abord la formule :

$$\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

$$\Delta E = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = -1,64 \times 10^{-18} \text{ J}$$

L'énergie est négative, ce qui veut dire que l'atome émet de l'énergie lors de cette transition.

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Exemple sur l'atome d'hydrogène (suite)

Déterminer quelle est la différence d'énergie entre les niveaux $n_i=2$ et $n_f=1$. Déterminer ensuite la fréquence et la longueur du photon émis.

On transforme ensuite en fréquence. L'énergie du photon (E) est positive et elle correspond à $-\Delta E$ qui vient d'être calculé.

$$E = h\nu$$
$$\nu = E/h$$

$$\nu = \frac{1,64 \times 10^{-18} \text{ J}}{6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}} = 2,48 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \text{ ou Hz}$$

3.2 Nature de la lumière et modèle de Bohr

Exemple sur l'atome d'hydrogène (suite)

Déterminer quelle est la différence d'énergie entre les niveaux $n_i=2$ et $n_f=1$. Déterminer ensuite la fréquence et la longueur du photon émis.

On convertie finalement la fréquence en longueur d'onde :

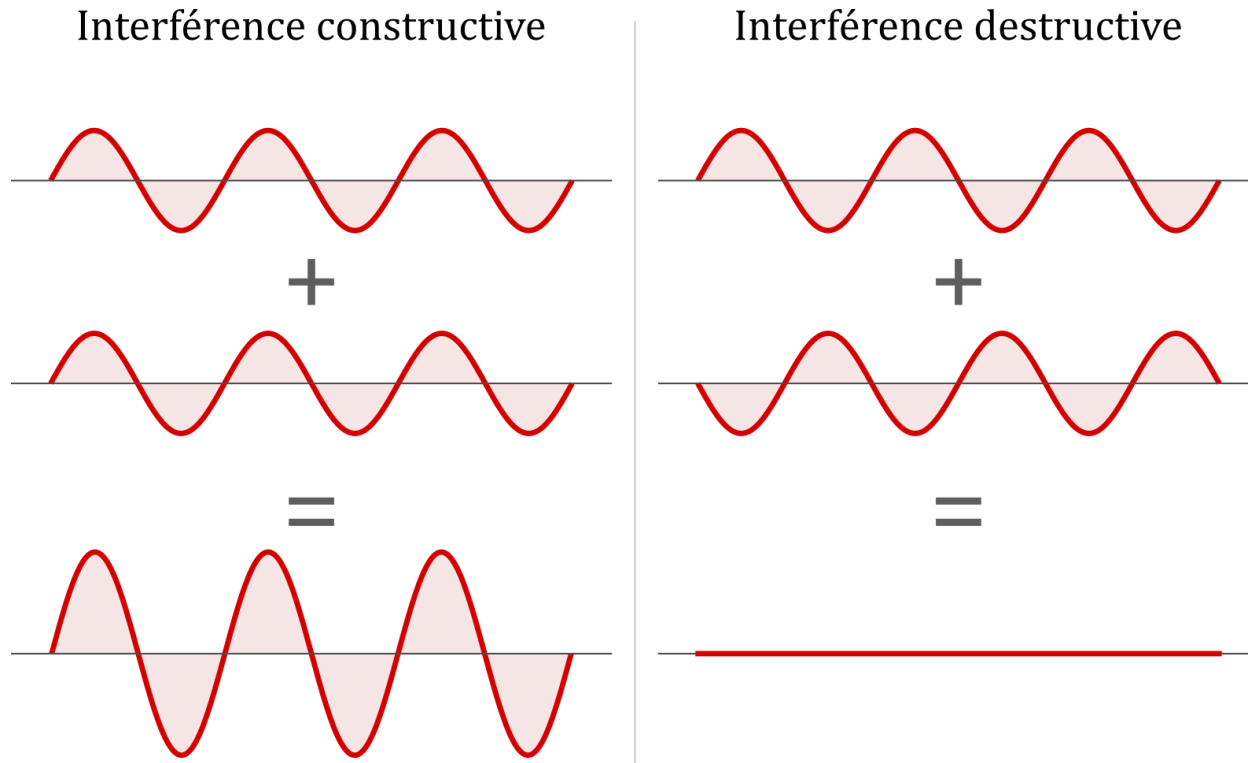
$$c = \lambda \nu$$
$$\lambda = c/\nu$$

$$\lambda = \frac{299\,792\,458 \text{ m/s}}{2,48 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}} = 1,21 \times 10^{-7} \text{ m} = 121 \text{ nm}$$

3.3 Mécanique quantique et atome

Rappels de mécanique ondulatoire

Les ondes peuvent interagir entre-elles pour former des **interférences**. Ces interférences peuvent être **constructives** ou **destructives** :



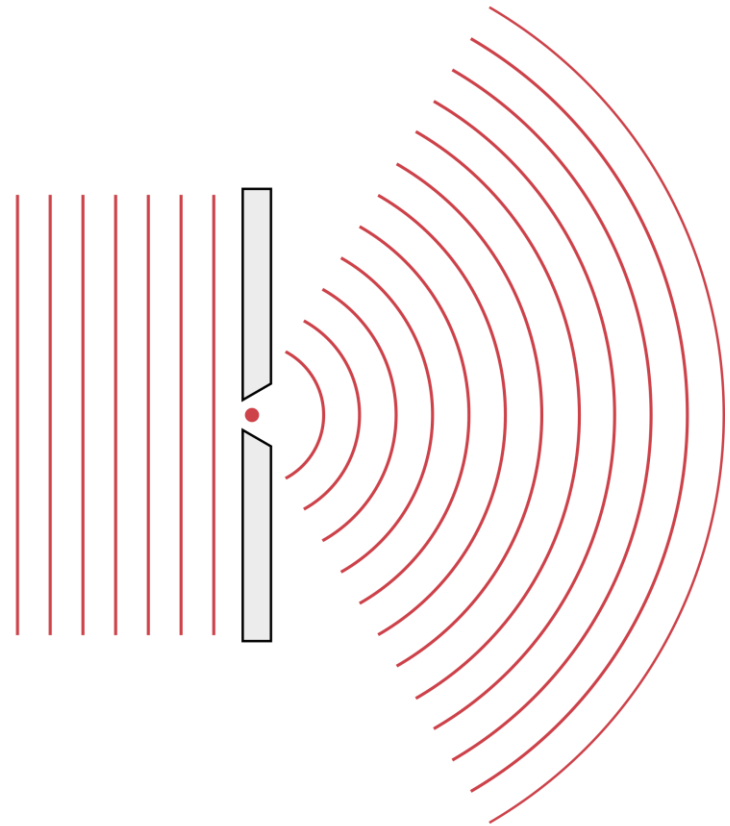
3.3 Mécanique quantique et atome

Rappels de mécanique ondulatoire

Lorsqu'une onde rencontre une fente dont la largeur est comparable à la longueur d'onde, il se produit un phénomène appelé **diffraction**.

Tous les types d'onde démontrent ce phénomène :

- Lumière
- Ondes sonores
- Vagues
- Ondes radio
- Rayons X
- ...



3.3 Mécanique quantique et atome

**Exemple de diffraction
dans la nature**



3.3 Mécanique quantique et atome

Interférence à travers deux fentes

La diffraction à travers deux fentes est une expérience réalisée par Thomas Young en 1801

Le résultat est un patron d'interférence avec des zones d'interférence constructive et des zones d'interférence destructive

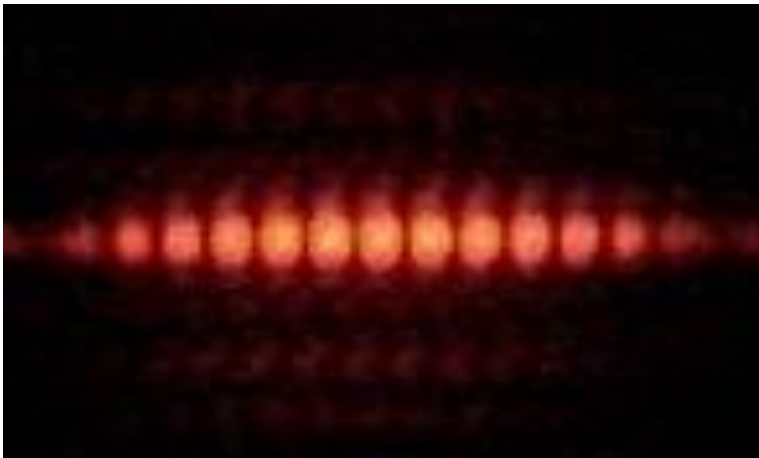
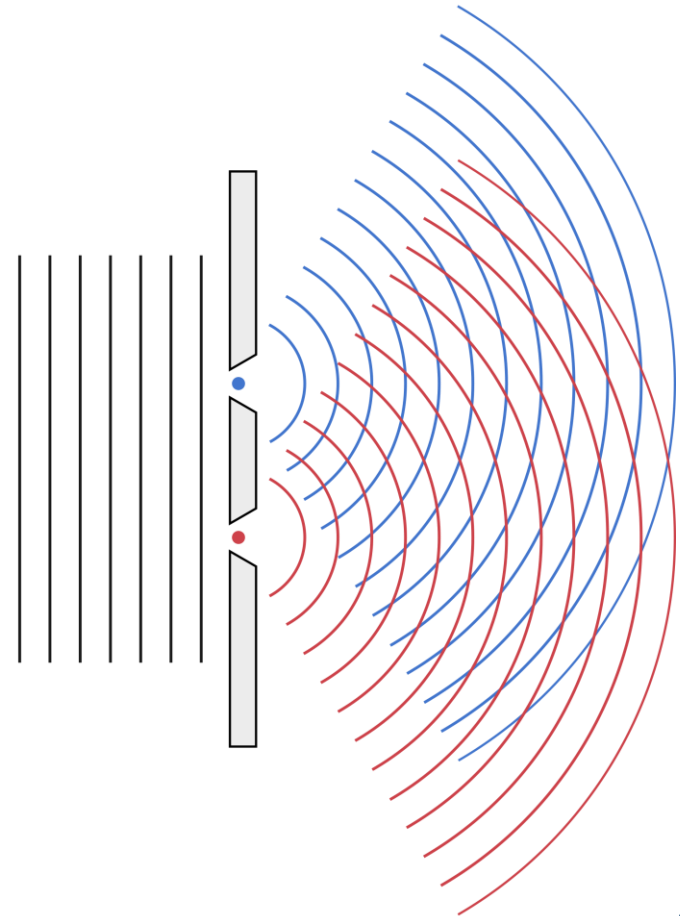


Image: Jordgette, Wikimedia



3.3 Mécanique quantique et atome

Interférence des électrons à travers deux fentes

Si on réalise cette même expérience, mais avec des électrons plutôt qu'avec de la lumière, voici le résultat attendu :

L'électron est une particule, on s'attend à ce que l'électron traverse l'une ou l'autre des fentes et qu'il frappe le détecteur.

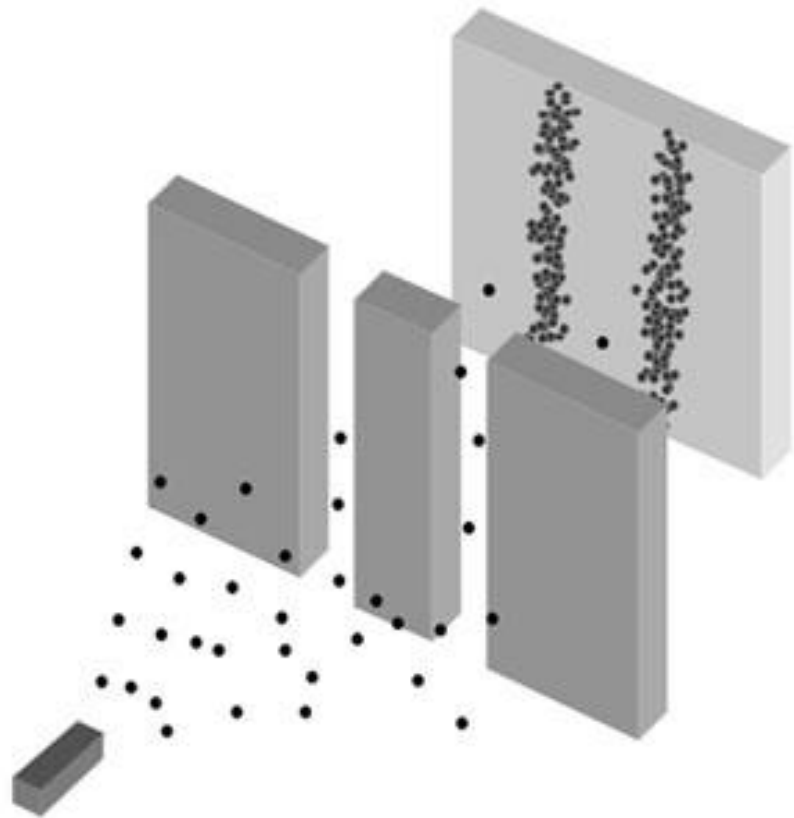
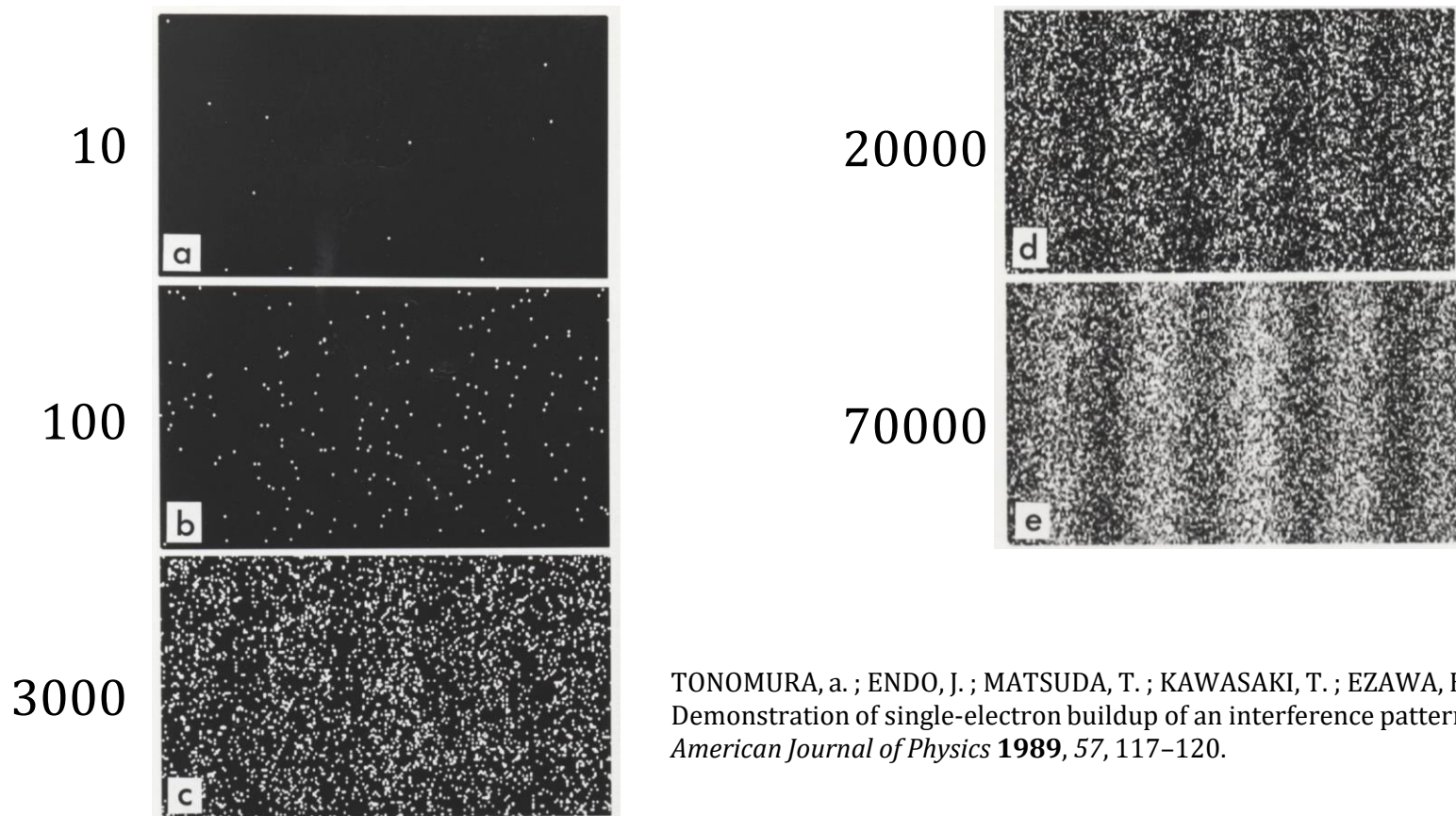


Image : Dr. Randell L. Mills

3.3 Mécanique quantique et atome

Interférence des électrons à travers deux fentes

Voici le résultat réel de cette expérience avec différents nombres d'électrons :



TONOMURA, a. ; ENDO, J. ; MATSUDA, T. ; KAWASAKI, T. ; EZAWA, H.
Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern.
American Journal of Physics **1989**, 57, 117–120.

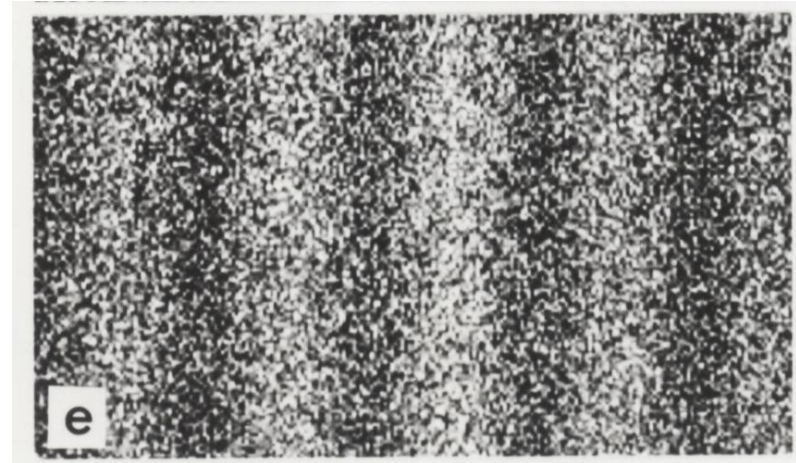
3.3 Mécanique quantique et atome

Interférence des électrons à travers deux fentes

Cette expérience peut sembler « anodine », mais elle est loin de l'être. Elle démontre que :

L'électron se comporte comme une particule : il frappe le détecteur à un point précis

L'électron se comporte comme une onde : les effets d'interférences sont observés dans la distribution des points d'arrivés



Cette expérience est souvent considérée comme l'une des plus marquantes de la mécanique quantique.

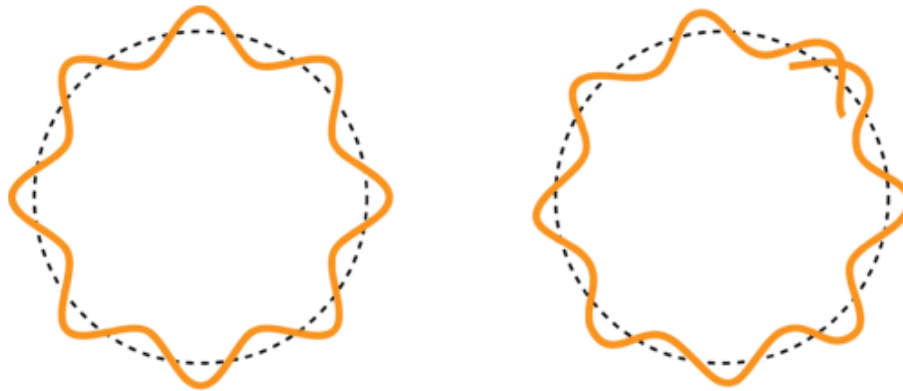
TONOMURA, a. ; ENDO, J. ; MATSUDA, T. ; KAWASAKI, T. ; EZAWA, H. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern. *American Journal of Physics* **1989**, 57, 117–120.

3.3 Mécanique quantique et atome

Longueur d'onde de De Broglie

Prix Nobel de physique, 1927

De Broglie propose que les orbites des électrons sont en réalité des ondes stationnaires (des ondes qui ne se déplacent pas et dont les nœuds demeurent toujours au même endroit).



Ces ondes ne peuvent exister que si le périmètre du cercle est un multiple entier de la longueur d'onde.

Cette hypothèse explique les orbites stationnaires du modèle de Bohr!

3.3 Mécanique quantique et atome

Longueur d'onde de De Broglie

Prix Nobel de physique, 1927

La condition suivante doit être respectée :

$$n\lambda = 2\pi r$$

De Broglie a aussi démontré que la longueur d'onde d'un électron pouvait être reliée à sa vitesse (donc à son énergie) :

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

En réalité, cette relation s'applique à n'importe quel objet!



3.3 Mécanique quantique et atome

Le principe d'incertitude d'Heisenberg

Le principe d'incertitude d'Heisenberg postule qu'il est impossible de mesurer précisément à la fois la vitesse et la position d'un objet quantique.

$$\Delta x \, m \Delta v \geq \frac{h}{4\pi}$$

Conséquence dans l'expérience d'interférence à deux fentes :

Si on trouve un moyen de déterminer par quelle fente l'électron est passé, le patron d'interférence disparaît et l'électron ne se comporte plus comme une onde.

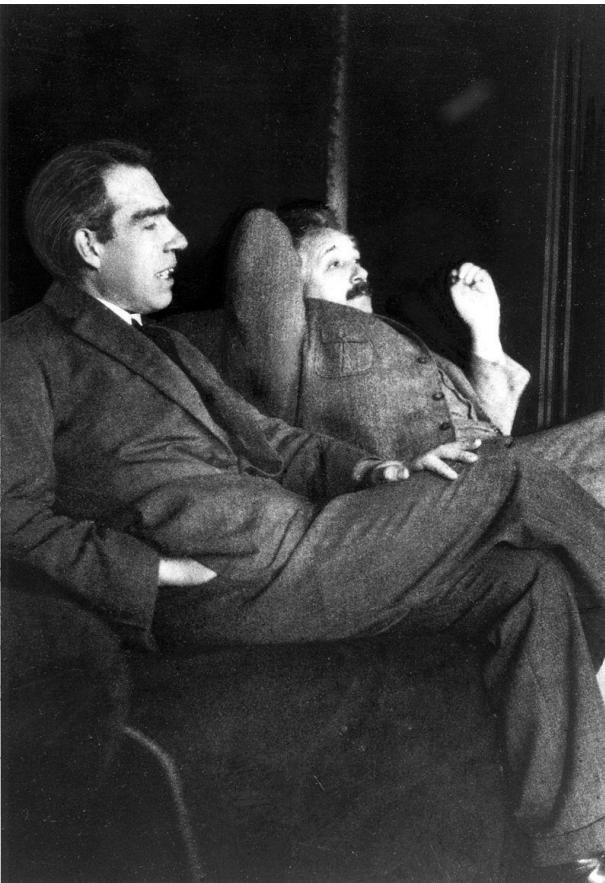


Non, Heisenberg n'est pas le chimiste dans la série américaine *Breaking Bad*...

3.3 Mécanique quantique et atome

Le principe d'incertitude d'Heisenberg

Le principe d'incertitude était si dérangement aux yeux d'Einstein qu'il a passé plus de 10 ans de sa vie à tenter de le réfuter!



La conséquence du principe d'incertitude est qu'on ne peut pas connaître « toute l'information » sur un système quantique.

Il est donc impossible de prédire la trajectoire d'un objet quantique! On peut seulement prédire la probabilité associée à chaque trajectoire.

3.4 Équation de Schrödinger

Dieu joue-t-il aux dés?

I, at any rate, am convinced that He [God] does not throw dice
– Albert Einstein

La physique telle qu'on la connaît est **déterministe**. C'est-à-dire qu'en connaissant toutes les informations sur un système, il est possible de prédire précisément son comportement.

En connaissant, la vitesse et la position d'une balle de baseball, on peut connaître sa position 15 secondes plus tard.

L'interprétation moderne de la mécanique quantique démontre plutôt un comportement **probabiliste**. C'est-à-dire qu'on peut seulement prédire les distributions de probabilités

On peut seulement connaître la probabilité de retrouver un électron à un endroit précis de son orbite.

3.4 Équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Vous n'avez absolument pas besoin de comprendre cette équation pour la suite du cours! La seule chose qu'il faut retenir ici est que tout objet quantique (électron, photon, particule, ...) est décrit par une **fonction d'onde** $|\psi\rangle$.

La fonction d'onde au carré $|\psi\rangle^2$ représente la densité de probabilité (probabilité de présence)

3.4 Équation de Schrödinger

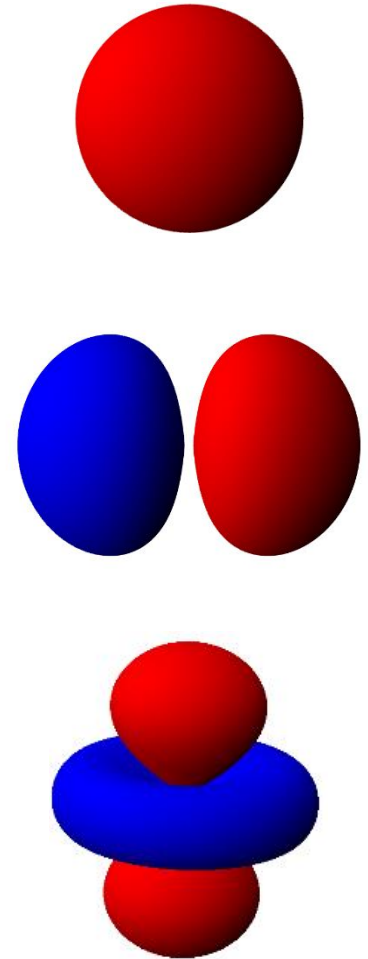
Les orbitales atomiques

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

La solution de l'équation de Schrödinger donne accès aux énergies des électrons ainsi qu'à leurs fonctions d'ondes.

Ces fonctions d'ondes représentent **les orbitales atomiques**. Les orbitales permettent de visualiser la probabilité de retrouver un électron à un endroit précis autour du noyau.

Nous verrons plus tard que **chaque orbitale peut contenir un maximum de 2 électrons**.



3.4 Équation de Schrödinger

Les orbitales atomiques

Voici les 4 premières solutions à l'équation de Schrödinger.

Ce sont des fonctions mathématiques en coordonnées polaires, elles dépendent de r , θ et ϕ .

Les énergies obtenues ont exactement la même forme que le modèle de Bohr.

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}}\left[2 - \frac{r}{a_0}\right]e^{-r/2a_0}$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\cos\theta$$

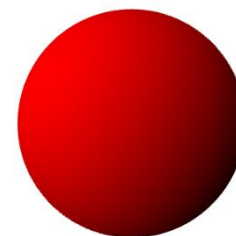
$$\frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{+i\phi}$$

3.4 Équation de Schrödinger

Les orbitales de type « s »

L'orbitale la plus basse en énergie de l'atome d'hydrogène est une orbitale de type « s ».

Les orbitales s sont parfaitement sphériques



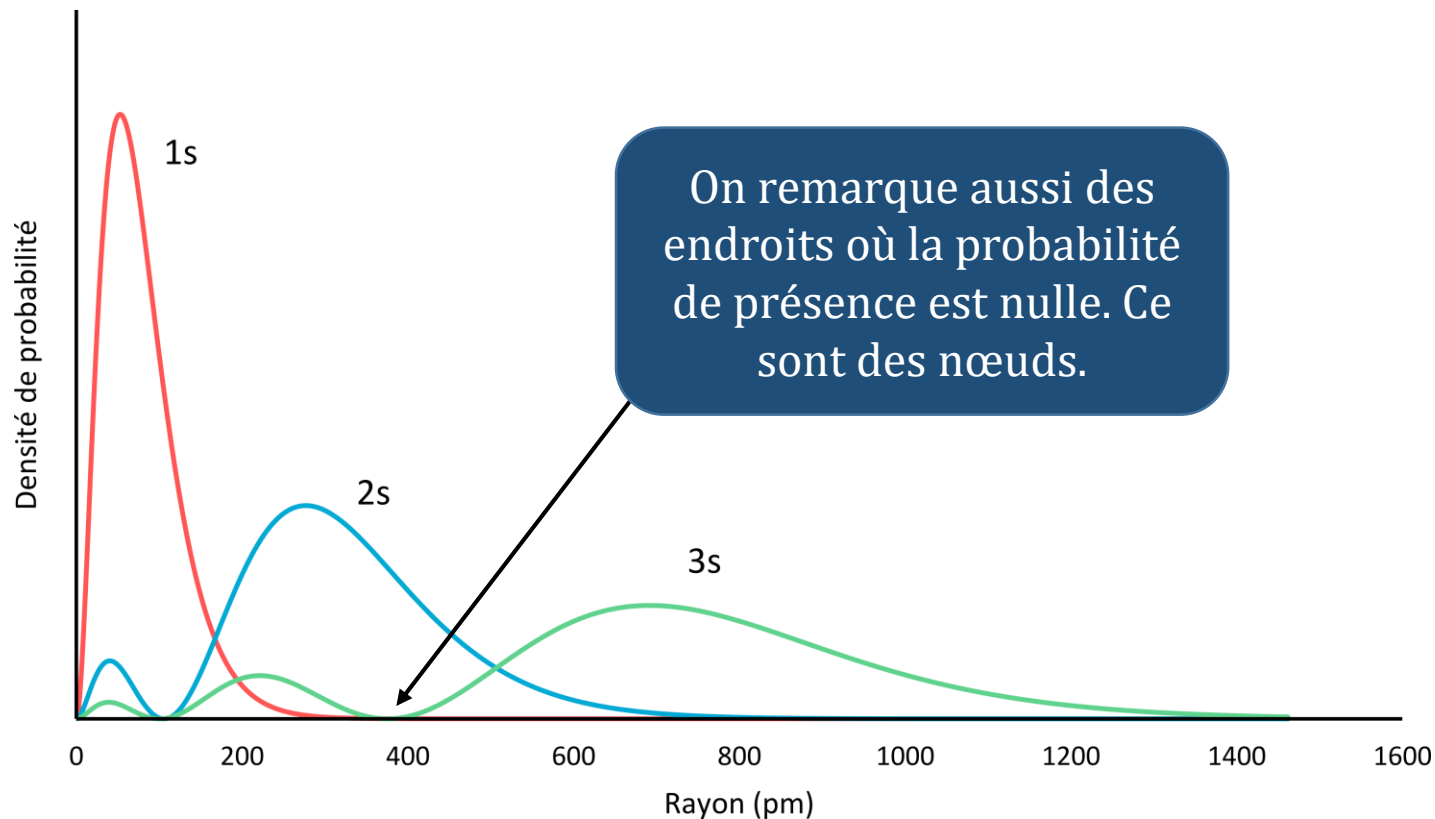
Le premier niveau d'énergie de l'atome d'hydrogène est noté $n = 1$ où « n » représente le **niveau principal**.

Les orbitales 2s, 3s et 4s se trouvent respectivement dans les niveaux principaux $n = 2$, $n = 3$ et $n = 4$.

3.4 Équation de Schrödinger

Les orbitales de type « s »

Voici la densité de probabilité pour les 3 premières orbitales s. On remarque que l'orbitale 3s est plus étendue. que la 2s qui est plus étendue que la 1s.

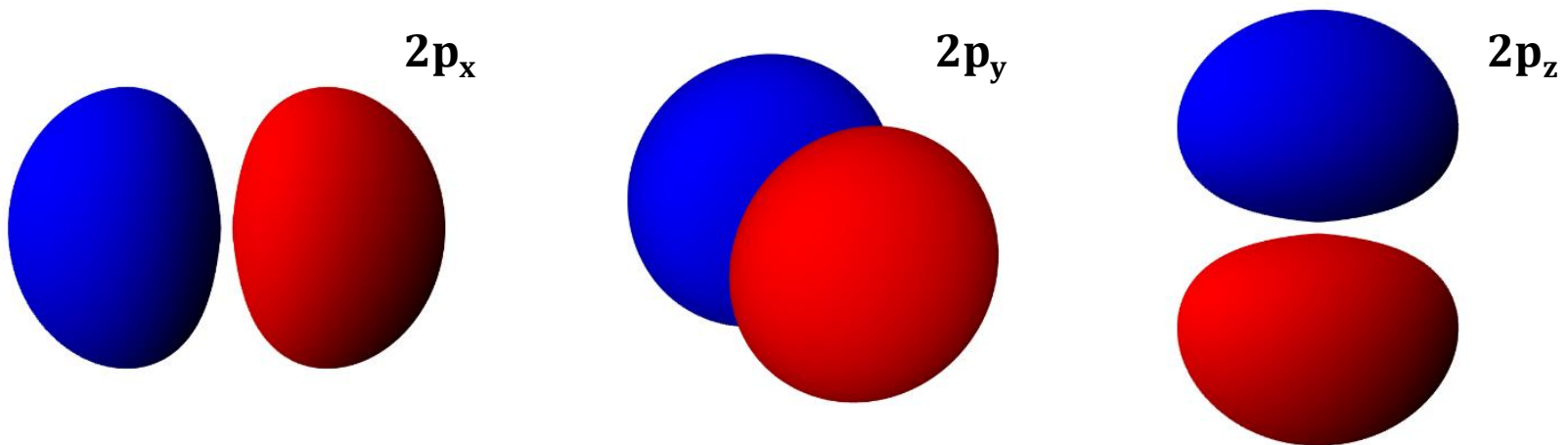


3.4 Équation de Schrödinger

Les orbitales de type « p »

Les orbitales p apparaissent à partir du niveau principal $n = 2$. On parle des orbitales 2p, 3p, 4p, ... (il n'existe pas d'orbitale 1p)

Il y a toujours 3 orbitales p pour un même niveau principale. Elles se nomment p_x , p_y et p_z et elles se trouvent dans les trois axes orthogonaux du plan cartésien.

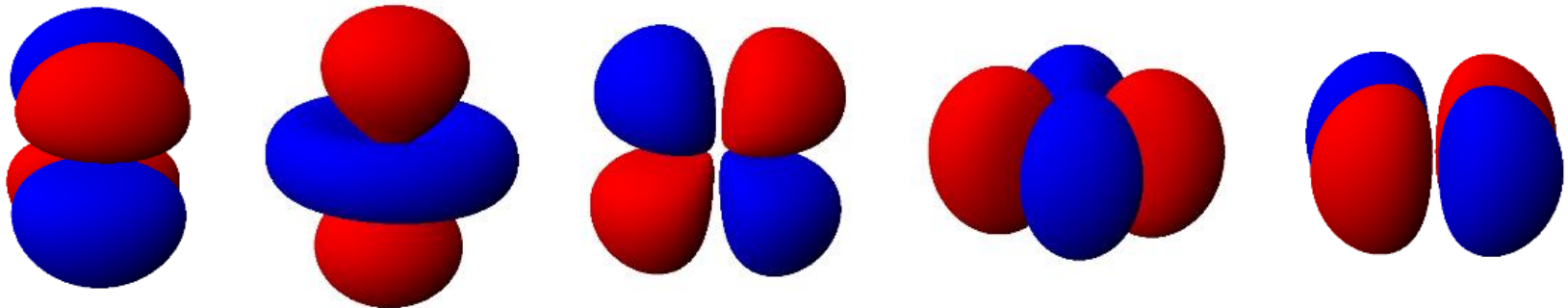


3.4 Équation de Schrödinger

Les orbitales de type « d »

Les orbitales d apparaissent à partir du niveau principal $n = 3$. On parle des orbitales 3d, 4d, 5d, ... (il n'existe pas d'orbitale 1d ou 2d).

Quatre des 5 orbitales ont des lobes qui sont orientés dans un plan. L'orbitale d_{z^2} a une forme particulière. Elle possède deux lobes et un anneau en forme de « beigne ».



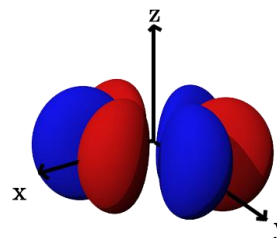
3.4 Équation de Schrödinger

Les orbitales de type « f »

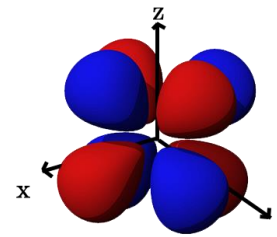
Les orbitales f interviennent à partir du niveau principal $n = 4$. Elles sont au nombre de 7.

Les orbitales f sont les moins importantes pour nous puisqu'elles n'interviennent que pour les éléments très lourds

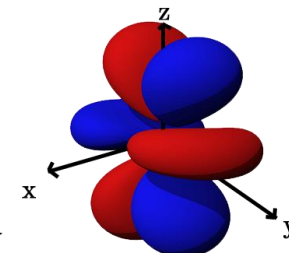
À toutes fins pratiques, nous considérerons que les orbitales f ne participent pas aux réactions chimiques.



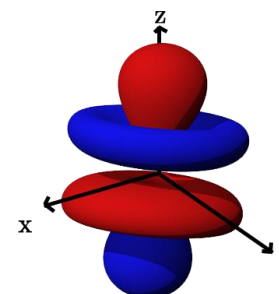
$f_y(3x^2-y^2)$



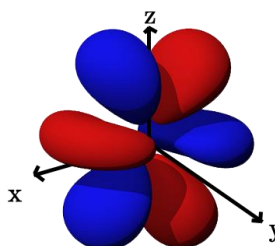
$f_z(x^2-y^2)$



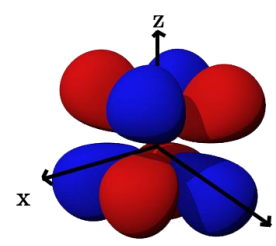
f_{yz^2}



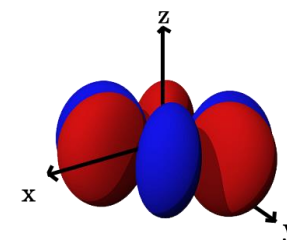
f_z^3



f_{xz^2}



f_{xyz}



$f_x(x^2-3y^2)$

3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

Lien entre le modèle de Bohr et le modèle quantique

Dans l'atome d'hydrogène, toutes les orbitales d'un même niveau principal possèdent la même énergie.

Par exemple, les orbitales 3s, 3p et 3d possèdent la même énergie.

Dans les atomes à plusieurs électrons (Hélium et +), ce n'est plus exactement le cas, il y a de faibles variations d'énergies pour les orbitales d'un même niveau « n ».

Il faut introduire le concept de **sous-niveau** pour expliquer ces variations.

3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

Les niveaux et le tableau périodique

Le niveau principal « n » correspond en réalité à la période dans le tableau périodique.

Par exemple, l'hydrogène a 1 un électron qui se retrouve dans l'orbitale $1s$ de la couche $n = 1$.

Le lithium a 3 électrons, deux dans l'orbitale $1s$ de la couche $n = 1$ et 1 dans l'orbitale $2s$ de la couche $n = 2$.

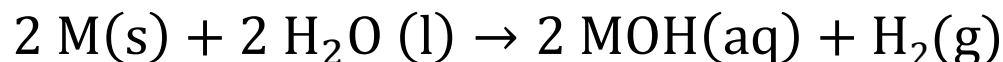
Le sodium a 11 électrons, 2 dans l'orbitale $1s$, 2 dans l'orbitale $2s$, 6 dans les orbitales $2p$ et 1 dans l'orbitale $3s$.

	I A 1	II A 2
1	1 H	
2	3 Li	4 Be
3	11 Na	12 Mg
4	19 K	20 Ca
5	37 Rb	38 Sr
6	55 Cs	56 Ba
7	87 Fr	88 Ra

3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

Les niveaux et le tableau périodique

Prenons les alcalins comme exemple. Autant le lithium, le sodium, le potassium que le rubidium réagissent avec l'eau pour former un hydroxyde :



Ils brûlent dans le chlore pour former un chlorure :



Comme nous avons vu au module 3, les alcalins ont toujours une charge de +1 dans les composés ioniques. Cela veut dire qu'ils ne peuvent perdre qu'un seul électron au cours d'une réaction chimique.

3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

La couche de valence

Il en ressort que seuls les électrons de la dernière couche électronique peuvent réagir. Les alcalins ont tous en commun de n'avoir qu'un seul électron dans leur couche supérieure.

Li : 1 électron dans la couche $n = 2$

Na : 1 électron dans la couche $n = 3$

K : 1 électron dans la couche $n = 4$

Ces électrons sont appelés **électrons de valence**, ce sont eux qui participent aux réactions chimiques.

3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

La couche de valence

La couche de valence correspond donc à la couche n la plus élevée qui est peuplée par des électrons.

Par opposition, les électrons qui se trouvent sous la couche de valence ne peuvent pas réagir au cours d'une réaction chimique. On les appelle les **électrons de cœur**.

Les électrons de cœurs sont enfouis plus profondément à l'intérieur de l'atome et sont donc plus difficiles à atteindre.

3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

Tableau 3.1 Répartition des électrons dans les niveaux électroniques des premiers éléments du tableau périodique

Période	Nombre de protons de l'atome Z	Élément	Nombre d'électrons de l'atome neutre dans chaque niveau			
			n = 1	n = 2	n = 3	n = 4
1	1	H	1			
	2	He	2			
2	3	Li	2	1		
	4	Be	2	2		
	5	B	2	3		
	6	C	2	4		
	7	N	2	5		
	8	O	2	6		
	9	F	2	7		
	10	Ne	2	8		
3	11	Na	2	8	1	
	12	Mg	2	8	2	
	13	Al	2	8	3	
	14	Si	2	8	4	
	15	P	2	8	5	
	16	S	2	8	6	
	17	Cl	2	8	7	
	18	Ar	2	8	8	
4	19	K	2	8	8	1
	20	Ca	2	8	8	2

Ce n'est pas un hasard si le tableau de votre livre s'arrête au calcium. C'est que les orbitales 3d commencent à se remplir à partir du Scandium (Z=21). Nous verrons cela au module 5!



3.5 Niveaux et sous-niveaux d'énergie

Remplissage des sous niveaux

Tableau 3.2 Répartition des électrons dans les niveaux et les sous-niveaux selon le modèle quantique

Valeur de n	Nombre de sous-niveaux possibles	Sous-niveaux	Nombre maximal d'électrons par sous-niveau	
1	1	1s	2	2
2	2	2s, 2p	2, 6	8
3	3	3s, 3p, 3d	2, 6, 10	18
4	4	4s, 4p, 4d, 4f	2, 6, 10, 14	32
5	5	5s, 5p, 5d, 5f, 5g	2, 6, 10, 14, 18	50

Chaque couche peut contenir plus d'électrons que la précédente. L'ordre de remplissage exact des sous-niveaux sera vu en détail au module 5.

3.6 Les nombres quantiques

Des « étiquettes »...

Puisque l'équation de Schrödinger possède une multitude de solution, il a fallu développer une façon de les identifier facilement.

Les orbitales sont définies à l'aide de 3 nombres quantiques :

- Le nombre quantique principal (n)
- Le nombre quantique de moment angulaire (l)
- Le nombre quantique magnétique (m_l)

On peut aussi parler du nombre quantique de spin (m_s)

3.6 Les nombres quantiques

Le nombre quantique principal (n)

Le nombre quantique principal est un nombre entier positif

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Le nombre quantique n donne aussi les niveaux d'énergie de l'hydrogène :

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

Le nombre quantique principal correspond à la période dans le tableau périodique

3.6 Les nombres quantiques

Le nombre quantique de moment angulaire (l)

Le nombre quantique de moment angulaire permet de déterminer le type d'orbital :

Valeur de l	Orbitale
$l = 0$	s
$l = 1$	p
$l = 2$	d
$l = 3$	f

La valeur de l varie entre 0 et $n - 1$. Pour le niveau $n = 1$, il ne peut y avoir que $l = 0$. À $n = 2$, on a $l = 0$ et $l = 1$

3.6 Les nombres quantiques

Le nombre quantique magnétique (m_l)

Le nombre quantique magnétique permet de différencier les orbitales de même n et de même type. Il est relié à l'orientation des orbitales dans l'espace

Il peut prendre des valeurs allant de $-l$ à $+l$:

Valeur de l	Valeurs de m_l
$l = 0$	$m_l = 0$
$l = 1$	$m_l = -1, 0, +1$
$l = 2$	$m_l = -2, -1, 0, +1, +2$
$l = 3$	$m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$

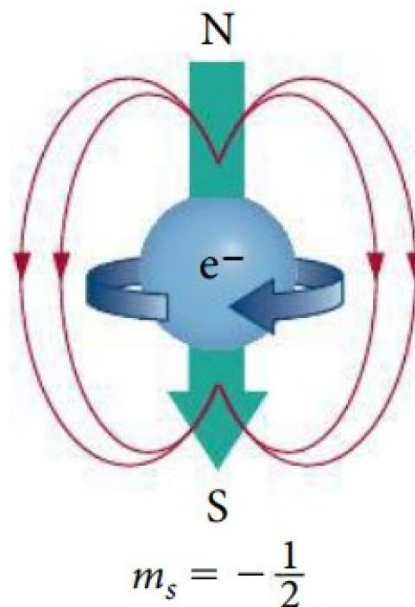
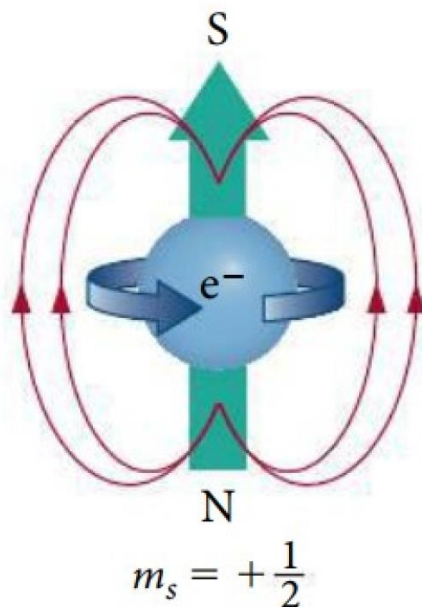
3.6 Les nombres quantiques

Le spin de l'électron

Le spin d'un électron correspond au champ magnétique qu'il possède intrinsèquement.

Il peut prendre les valeurs de $+1/2$ ou $-1/2$.

On peut interpréter le spin de façon « classique » en imaginant l'électron comme une charge qui tourne, générant un champ magnétique par induction.



3.6 Les nombres quantiques

Le nombre quantique de spin (m_s)

Le nombre quantique de spin permet d'identifier les deux électrons qui occupent une même orbitale. Il ne permet pas de dire dans quelle orbitale se trouve l'électron (en comparaison aux nombres quantiques n , l et m_l).

Le spin électronique a été découvert en 1922 par Otto Stern (Nobel de physique, 1943) et Walther Gerlach. Ils ont réussi à séparer des atomes d'argent en fonction du spin électronique.

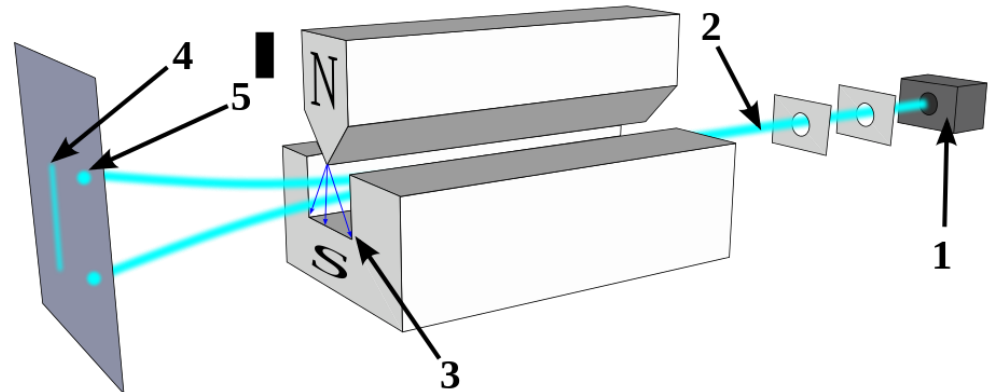


Image : Tatoute, Wikimedia