

Université Ibn Tofail Année Universitaire 2012-2013 Faculté des Sciences Kenitra

Cours d'atomistique S1/SMP-SMC

Pr. Omar BENALI



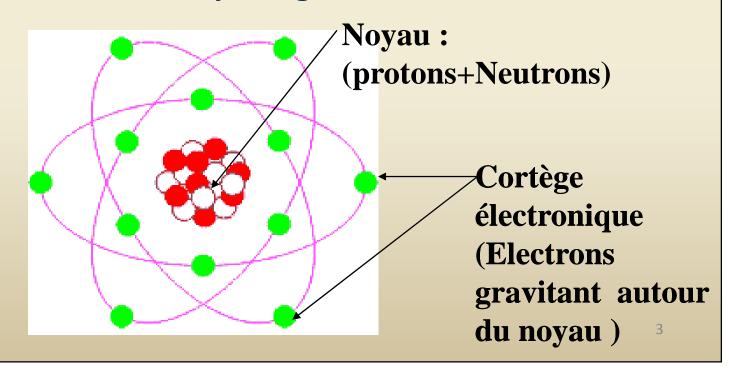
CHAPITRE I

CONSTITUTION DE L'ATOME

I. <u>Définition d'un atome</u>

Un atome (du grec, atomos, " que l'on ne peut diviser") est la plus petite partie d'un corps simple pouvant se combiner chimiquement avec une autre.

Un atome est constitué d'un noyau composé de protons et de neutrons autour desquels gravitent des électrons.



II. Caractéristiques de l'atome

<u>le noyau</u>, composé de deux sortes de particules appelées <u>nucléons</u>:

<u>les neutrons</u>, particules de charge électrique nulle $q_n = 0C$, et de masse égale à , $m_n = 1,575 \times 10^{-27}$ kg

les protons, particules de charge électrique positive égale à : q_p =+e= 1,602 ×10⁻¹⁹ C, et de masse égale à : m_p = 1,673 ×10⁻²⁷ kg.

Le noyau est donc chargé positivement.

La masse du noyau, est égale à la somme des masses des protons et des neutrons, appelée nombre de masse.

Autour du noyau gravitent des électrons suivant des trajectoires bien définies, cela constitue le nuage électronique;

<u>Les électrons</u> possèdent une charge électrique négative égale à : $q_e = -1,602 \times 10^{-19}$ C,

Cette charge est identique à celle du proton en valeur absolue.

La masse de l'électron est bien plus faible que celles des nucléons (1836 fois moindre) : $m_e = 9,109 \times 10^{-31}$ kg.

Représentation de l'atome

L'atome est le constituant de base de la matière. Il correspond à un élément chimique représenté par un symbole qui est généralement la lettre initiale en majuscule du nom de l'élément.

Exemple : Le Carbone symbolisé par C

Le Fluor symbolisé par F

Au cas où deux éléments ont la même lettre initiale, un des deux est symbolisé par la première lettre en majuscule et la deuxième en minuscule :

Exemples : Le Cobalt symbolisé par Co

Le Fer symbolisé par Fe

Un élément chimique de symbole X est caractérisé par son numéro atomique Z et son nombre de masse A :

A : nombre de masse de l'atome. Il désigne le nombre de nucléons, soit la somme du nombre de protons et du nombre de neutrons.

Comme protons = \mathbb{Z} , on pose neutrons = $\mathbb{N} \Rightarrow$

$$A = Z + N$$
 avec $A \in N$

Z : désigne le nombre de protons.

Exemples

```
Le carbone possède:
6 protons,
6 électrons
et (12-6) = 6 neutrons
```

```
Le Scandium possède :
21 protons,
21 électrons,
et (47-21) = 26 neutrons
```

Lorsque, le nombre de proton est égale au nombre d'électron l'atome est dit neutre.

Les atomes sont susceptibles de se charger électriquement en gagnant ou en perdant un ou plusieurs électrons : on parle alors d'ions.

X⁺ L'atome a perdu un électron (Cation)

X⁻ L'atome a gagné un électron (Anion)

La masse des atomes

La masse d'un atome est la somme des masses de ses divers constituants.

$$M_{\text{atome}} = Z(m_{\text{proton}}) + N (m_{\text{neutron}}) + Z (m_{\text{électron}})$$

La masse des électrons est très faible par rapport à celle des neutrons ou des protons, nous pourrons donc la négliger.

L'atome étant très petit on préfère utiliser la masse molaire atomique qui correspond bien sur à la masse d'une mole d'atomes.

La mole est définie comme le nombre d'atome de carbone 12 contenu dans 12 g de carbone 12.

En pratique ce nombre **#**est appelé nombre d'Avogadro et vaut environ 6,022 10²³.

Une mole d'atome correspond à $\mathcal{M} = 6,022 \cdot 10^{23}$ atomes

L'Unité de Masse Atomique

Elle est définie comme 1/12 de la masse d'un atome de Carbone¹²C (carbone),

Une mole de carbone C pesant par convention 12 g et correspondant à **x**atomes de carbone.

Un atome de carbone pèse donc 12/9(g) et

l'unité de masse atomique vaut donc (1/12) $x(12/\Re) = 1/\Re(g)$.

Un atome à une masse de M (uma) signifie que sa masse molaire atomique est de M (g).

1 u.m.a = $1/N()g = 1/6,022 \cdot 10^{23} \approx 1,67 \cdot 10^{-24} \cdot g \approx 1,67.10^{-27} \cdot kg$

Un atome à une masse de M (uma) signifie que sa masse molaire atomique est de M (g).

1 u.m.a =
$$1/\Re()$$
g = $1/6,022 \cdot 10^{23} \approx 1,67 \cdot 10^{-24} \cdot g \approx 1,67.10^{-27} \cdot kg$
1 u.m.a $\approx 1,67.10^{-27} \cdot kg$

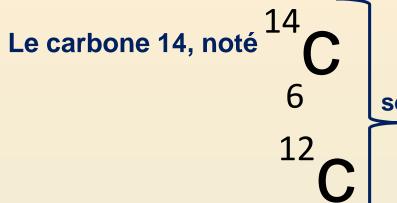
La masse atomique d'un élément est la masse en g de **#** atomes :

$$\mathcal{N}(Z+N)\times 1/\mathcal{N}=Z+N=A$$

La masse de l'atome exprimée en u.m.a ou sa masse molaire exprimée en g sont pratiquement égales à son nombre de masse A = Z + N.

Les isotopes

Deux atomes sont dits isotopes si leur noyau a un nombre de protons identique mais un nombre de neutrons différent.



et le carbone 12, noté, 6

sont ainsi des isotopes de l'élément carbone.

Le carbone 14 a 6 protons, 6 électrons et (14-6)=8 neutrons

Le carbone 12 a 6 protons, 6 électrons et (12-6)=6 neutrons

Les isotopes les plus courants de l'hydrogène 11H sont

²H pour le deutérium (1P, 1e⁻, 1N) et ³H pour le tritium. (1P, 1e⁻, 2N) Pour la majorité des atomes, un seul des isotopes existant est présent en quantité appréciable dans la nature les autres isotopes étant seulement présents à l'état de traces.

On désigne par <u>abondance naturelle</u> le pourcentage en nombre d'atomes de chacun des isotopes présents dans le mélange naturel.

La masse molaire atomique d'un élément est déterminée en tenant compte de l'abondance naturelle des isotopes de cet élément.

C'est une masse molaire moyenne qui tiendra compte de sa composition.

$$M = \sum_{i} x_i M_i / 100$$

x_i désignant l'abondance naturelle de l'isotope i de masse molaire M_i.

16

Exemple :Le Magnésium (Z = 12) existe sous forme de trois isotopes de nombre de masse 24, 25 et 26. Les fractions molaires dans le magnésium naturel sont respectivement :

10,1% pour ²⁵Mg et 11,3% pour ²⁶Mg.

Déterminer une valeur approchée de la masse molaire atomique du Magnésium naturel.

$$M (Mg) = \sum_{i} x_{i} M_{i}/100 =$$

$$([\%(^{24}Mg)xM(^{24}Mg)] + [\%(^{25}Mg)xM(^{25}Mg)] +$$

$$[\%(^{26}Mg)xM(^{26}Mg)])/100$$

Calcul de l'abondance de l'isotope ²⁴Mg ∑ xi = 100 % ²⁴Mg: 100 − 11,3 − 10,1 = 78,6% Calcul de M (Mg)

M = (11,3*26 + 10,1*25 + 78,6*24)/100 = 24,33 g.mol⁻¹.



CHAPITRE II

Les modèles classiques de l'atome

1897- LA DECOUVERTE DE L'ELECTRON

En 1897, Thomson, <u>physicien</u>, anglais, (1856-1940) découvre le premier composant de l'atome: l'électron, particule de charge électrique négative.

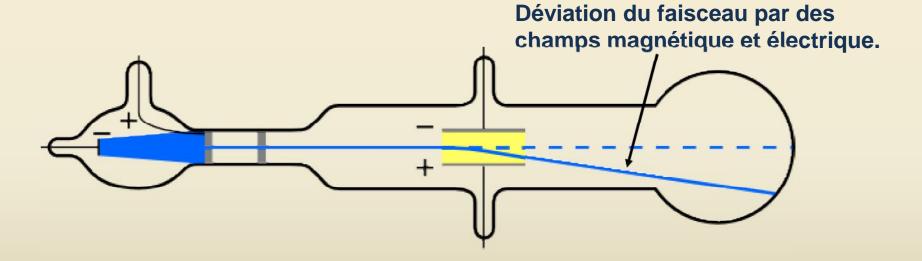
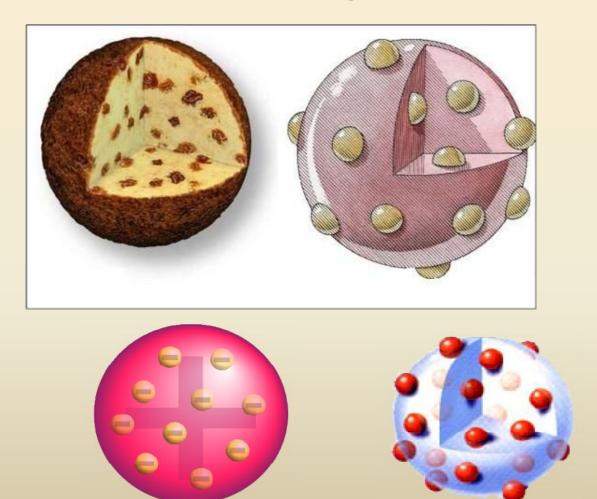


Schéma de l'expérience des rayons cathodiques réalisée par Thomson en 1897

En 1904, il propose un premier modèle d'atome, surnommé depuis "*le pudding de Thomson*«.

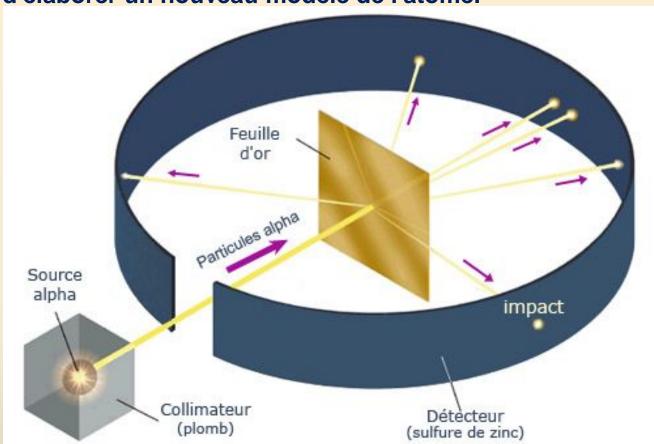
Il imagine l'atome comme une sphère remplie d'une substance électriquement positive et fourrée d'électrons négatifs "comme des raisins dans un cake".

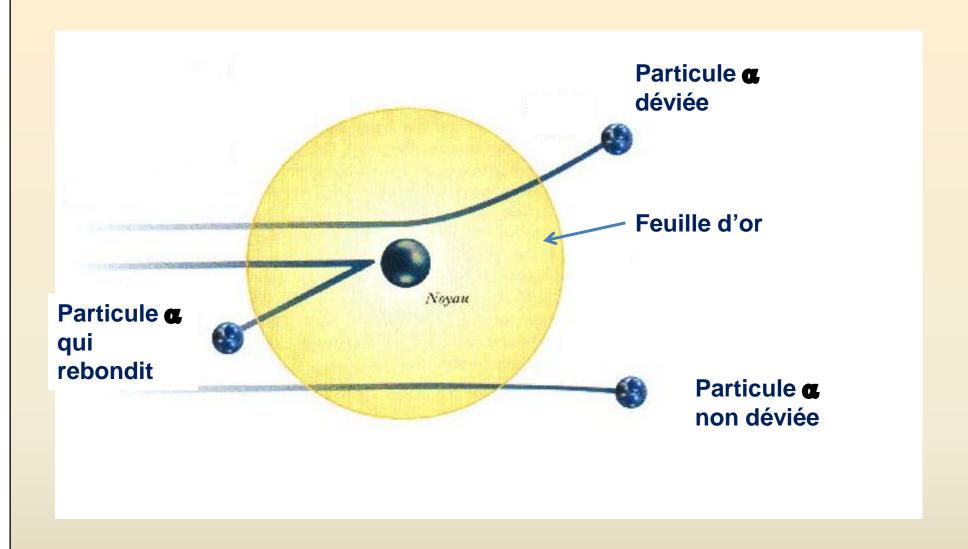


1912 LA DECOUVERTE DU NOYAU

Le modèle de Rutherford

En 1911, Ernest Rutherford (1871-1937) réalisa une expérience qui allait lui permettre d'élaborer un nouveau modèle de l'atome.





Il observa que la majorité des particules traversaient la feuille d'or sans être déviées et sans endommager la feuille d'or. Il observa également que certaines particules étaient légèrement déviées et que d'autres étaient rejetées en arrière.

Pour expliquer les observations expérimentales Rutherford propose un nouveau modèle dans lequel :

<u>l'atome n'est pas plein (structure lacunaire (Vide)) c'est pour cela que la plupart des particules ne sont pas déviées.</u>

Pour Rutherford, Il existe de même des îlots de charge positive qui repoussent les particules .

L'atome est donc constitué d'un noyau chargé positivement et qui contient la majorité de la masse de l'atome

Εt

d'électrons qui tournent autour tels les planètes autour du Soleil. Entre le noyau et les électrons, il y a du vide.

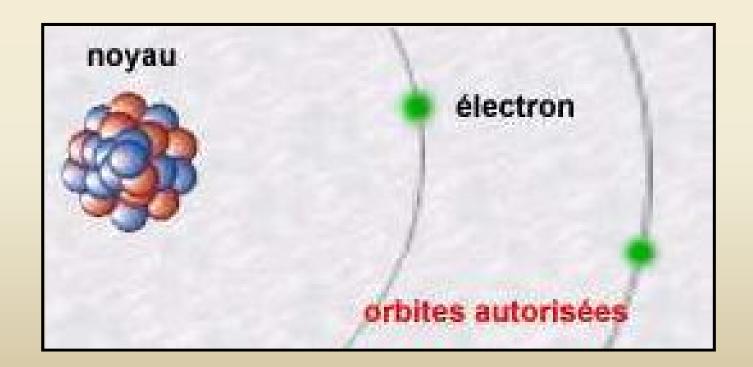
<u>Inconvénients du modèle de Rutherford</u> L'atome selon le modèle de Rutherford est <u>instable</u>. pourquoi?

- 1. Si les électrons sont stationnaires, ils seront attirés vers le noyau.
- 2. Les principes de la théorie électromagnétique connues à l'époque affirmaient que tout mouvement de charge électrique s'accompagne d'une émission de radiations électromagnétiques, laquelle entraîne une diminution de l'énergie. Les électrons devraient donc se rapprocher du noyau.

1913 Modèle de Bohr : Niels Bohr (1885-1962)

Afin de rendre compte de cette stabilité atomique, Niels Bohr crée en 1913 un nouveau modèle d'atome:

Les orbites des électrons ne sont pas quelconques mais "quantifiées"; seules certaines orbites particulières sont permises pour l'électron. Ce n'est que lorsque celui-ci saute d'une orbite à l'autre qu'il peut émettre (ou absorber) de la lumière.



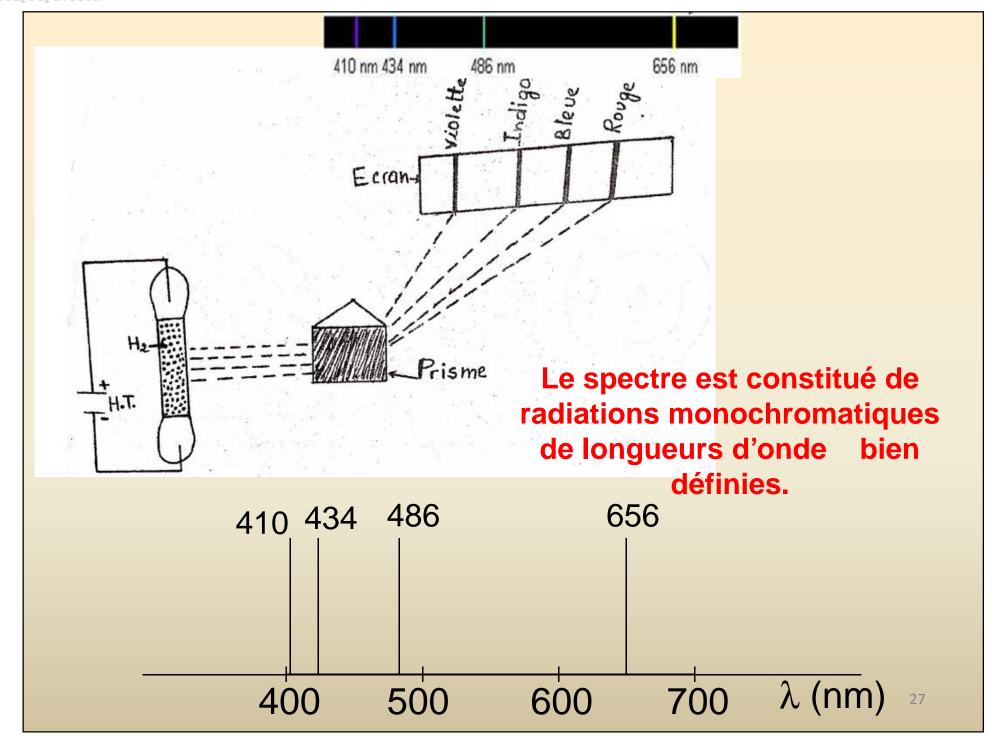
Spectre d'émission de l'atome d'Hydrogène

Expérience:

Lorsqu'on soumet du dihydrogène H₂ sous faible pression (de l'ordre de 10⁻³ à 10⁻⁴ bar) à une décharge électrique (de quelques volts à quelques centaines de volts) on observe une émission lumineuse qui constitue le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

Les atomes émettent un rayonnement lorsqu'ils sont soumis à une excitation.

Si on analyse plus précisément la lumière émise on observe un spectre discontinu ou spectre de raies.



Quantification de l'énergie

Afin de résoudre les problèmes du modèle de Rutherford, Bohr s'inspira de la théorie de la quantification de l'énergie mise au point par Max Planck en 1900.

Dans cette théorie l'énergie transportée par un rayonnement est quantifiée. Chaque rayonnement possède un quantum d'énergie E = h♥ avec h = 6,63 10⁻³⁴ j.s = constante de Planck et ♥ =c/♣. On donne le nom de photon au quantum d'énergie rayonnante

1- Quand un <u>atome est excité</u>, il <u>émet un</u> <u>rayonnement</u>, donc <u>une énergie</u>.

2- La matière, en l'occurrence l'Hydrogène, excitée, n'émet pas n'importe quelle lumière (énergie), mais des lumières (énergies) bien définies (du fait de la discontinuité du spectre).

<u>But</u>: détermination d'une relation entre les caractéristiques des différentes raies du spectre

Au lieu de λ , on utilisera σ ($\sigma = 1/\lambda$) : Nombre d'onde.

Dès 1885, le suisse J. Balmer a proposé la relation

$$\sigma = 1 / \lambda = R_H (1/2^2 - 1/p^2)$$

R_H: Constante de Rydberg pour l'Hydrogène, sa valeur expérimentale vaut : 109677 cm⁻¹= 10967700 m⁻¹

En donnant à p les valeurs 3, 4, 5 et 6, on retrouve respectivement les valeurs de λ : 656, 486, 434 et 410 nm des 4 raies du spectre.

Il a été observé que les longueurs d'onde des raies n'étaient pas quelconques et qu'on pouvait les calculer par une formule empirique qui a été généralisé comme suit:

$$\sigma = 1 / \lambda = R_H (1/n^2 - 1/p^2)$$

gest le nombre d'onde

 $R_H = 1,096 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$: la constante de Rydberg pour l'hydrogène.. n et p sont des entiers tels que n < p.

La formule est appelé formule de Rydberg ou Ritz

INTERPRETATION:

Interprétation du spectre de l'hydrogène

Niels Bohr a posé les postulats suivante:

Postulat mécanique :

L'électron de l'atome d'hydrogène ne possède qu'un nombre limité d'états accessibles. Ce sont des états stationnaires.

Chaque état possède une énergie invariante (quantification des niveaux d'énergie de l'hydrogène) (E_1 , E_2 , E_3 ,..... E_n) sur lesquelles l'électron ne rayonne pas.

Le premier niveau d'énergie la plus basse est appelé niveau fondamental, les autres niveaux d'énergies plus élevées sont appelés des niveaux excités.

Postulat optique:

Normalement l'électron occupe l'état fondamental, mais il peut passer à un état excité si on lui fournit de l'énergie

Pour revenir à son état fondamental il doit restituer cette énergie qui sera émise sous forme lumineuse. Cette énergie sera émise sous forme d'énergie lumineuse. L'énergie du photon émis est donnée par la relation de Planck : E = h v.

Ces déplacements de l'électron d'un niveau à un autre sont appelés des transitions

La transition entre deux états accessibles s'accompagne de l'absorption ou de l'émission d'un photon d'énergie égale à la différence de l'énergie des deux états.

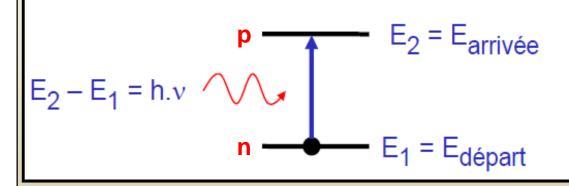
$$|\Delta E| = |E_n - E_p| = hv$$

h : 6,623 10⁻³⁴ j.s (constante de Planck)

: fréquence de rayonnement mis en jeu.

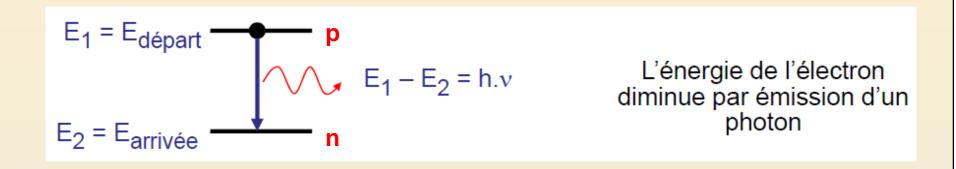
Soit les niveaux n et p avec p>n

Une absorption d'une radiation est obtenue lorsque l'électron passe du niveau n au niveau p



L'énergie de l'électron augmente par absorption d'un photon

Une émission d'une radiation est obtenue lorsque l'électron passe du niveau p au niveau n.



Postulat du moment cinétique

Les états de mouvement <u>permis</u> sont ceux pour lesquels le moment cinétique σ_0 de l'électron est <u>un multiple entier de</u> (h/2 π).

$$\sigma_0 = n (h/2\pi) = m_e v_e r_n$$

m_e: masse de l'électron et v_e sa vitesse

r_n : rayon de l'orbite dans laquelle circule l'électron.

Notions de série de raies :

Si nous prenons la formule

$$\sigma = 1 / \lambda = R_H (1/n^2 - 1/p^2)$$

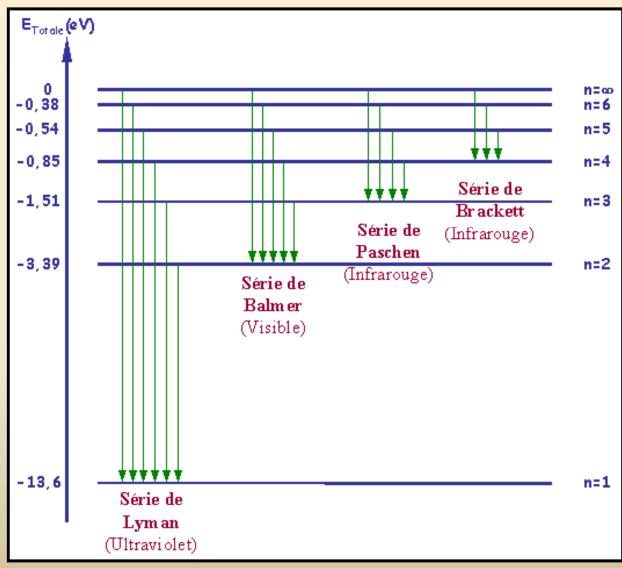
On dit que le spectre d'émission de l'atome d'Hydrogène se décompose en plusieurs séries: les séries de Lyman, Balmer, Paschen, Brackett et Pfund.

Chaque série est définie par le niveau d'énergie final des transitions électroniques..

Selon la valeur de n, nous avons différents spectres de raies :

Série (n)	1	2	3	4	5
Nom	lyman	Balmer	Pashen	Brackett	Pfund
Domaine	UV	Visible	IR	IR	IR

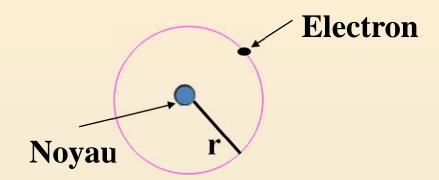
Ex: la série de Balmer correspond à l'ensemble des photons émis lors des transitions électroniques de niveaux d'énergie n>2 vers le niveau d'énergie n=2. Les photons émis sont alors situés dans le domaine du visible comme indiqué sur le spectre d'émission ci-dessous.



CHAPITRE III

Calcul de quelques grandeurs de l'atome d'hydrogène

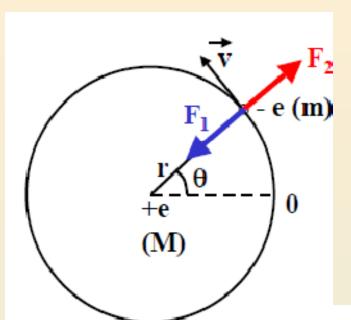
L'hydrogène 1H est constitué d'un noyau de charge (+e) et d'un électron de charge (-e), séparés par une distance r.



Dans le modèle atomique de Bohr, l'électron tourne autour du noyau en suivant un mouvement circulaire uniforme avec une vitesse V, sur une orbite de rayon r.

L'application du principe fondamental de la mécanique permettra alors de déterminer l'énergie de l'électron.

L'électron chargé négativement est soumis à la force d'attraction coulombienne du noyau chargé positivement. (Le poids des électrons est considéré comme négligeable).



$$\left| \frac{1}{F_1} \right| = \left| \frac{-1}{4\pi\varepsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} \right|$$

$$F_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{e^2}{r^2}$$

$$\varepsilon_0 = 8.85 \ 10^{-12} \ \text{C}^2 \ \text{N}^{-1} \ \text{m}^{-2}$$
 (permittivité du vide) ; r = rayon de l'orbite

L'électron est aussi soumis à la force centrifuge due à son mouvement circulaire :

$$F_2 = m a = mv^2 / r$$

$$F_1 = F_2$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$



$$r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mv^2}$$

Energie totale = Energie cinétique + Energie potentielle

Energie potentielle :
$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Energie cinétique :
$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right)$$

Donc:

Energie totale :
$$E = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right]$$

Hypothèse de Bohr

- 1) L'électron ne peut se situer que sur certaines orbites bien précises ou permises, de telle sorte que son énergie reste constante. Ces orbites stables sont différenciées, quantifiées. Ce sont les seules orbites sur lesquelles l'électron peut tourner.
- 2) Lorsque l'électron absorbe ou émet de l'énergie, il change d'orbite ou de niveau d'énergie.

Orbites permises <=> orbites stationnaires

$$\Rightarrow$$
 2 π r = n λ (n = 1, 2, 3...)

Quantification du moment cinetique

$$mvr = nh/2\pi$$

On a alors:
$$2 \pi r = \frac{\text{nh}}{\text{mv}}$$
; soit $v = \frac{\text{nh}}{2 \pi \text{mr}}$

En remplaçant V par sa valeur dans l'équation

$$r = \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{e^2}{mv^2}$$

on détermine le rayon des orbites:

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$$

Pour
$$r_1 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{m} = 0.53 \text{Å}$$
: (n=1)

premier rayon de Bohr pour l'atome d'hydrogène qu'on note a₀.

Avec:
$$\varepsilon_0 = \frac{1}{36\pi \cdot 10^9}$$
; $m = 9,110 \cdot 10^{-31} kg$ et $e = 1,602 \cdot 10^{-19} C$

```
Pour n = 2, 2^{ieme} orbite de Bohr r_2 = 4 \times a_0;
```

Pour n = 3, 3^{ieme} orbite de Bohr $r_3 = 9 \times a_0$;

Pour n = 4, 4^{ieme} orbite de Bohr r_4 = $16 \times a_0$

On constate que l'électron ne peut se trouver que sur une suite discontinue caractérisée par le

nombre quantique n dont le rayon r est : a₀, 4a₀, 9a₀, 16a₀,...

Energie totale:
$$E = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right)$$

$$r_n = n^2 \frac{\epsilon_o h^2}{\pi m e^2}$$

Remplaçons r par sa valeur dans E:

- l'énergie correspondante (2)

$$E_{n} = -\frac{1}{n^{2}} \frac{me^{4}}{8 \epsilon_{0}^{2} h^{2}} = -\frac{1}{n^{2}} . K = -\frac{1}{n^{2}} . 13, 6 \text{ (eV)}$$

$$K = constante$$

$$K = 2,18.10^{-18}J$$
, soit en ev : $K = 13,6eV$ ($1eV = 1,6.10^{-19}J$)

$$E_n - E_1 - \frac{-me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} - -21,76.10^{-19} J - -13,6 \text{ eV}$$

C'est l'énergie fondamentale de l'atome d'hydrogène. Donc l'énergie sera exprimée de la façon suivante

$$E_n = E_1 \times \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} eV$$

Les différents états quantifiés de l'énergie sont :

$$E_n = E_1, \frac{E_1}{4}, \frac{E_1}{9}, \frac{E_1}{16}, \frac{E_1}{25}, \dots \frac{E_1}{n^2}$$

Le système le plus stable correspond à la plus petite valeur algébrique de l'énergie: $E_1 = -13,6$ eV

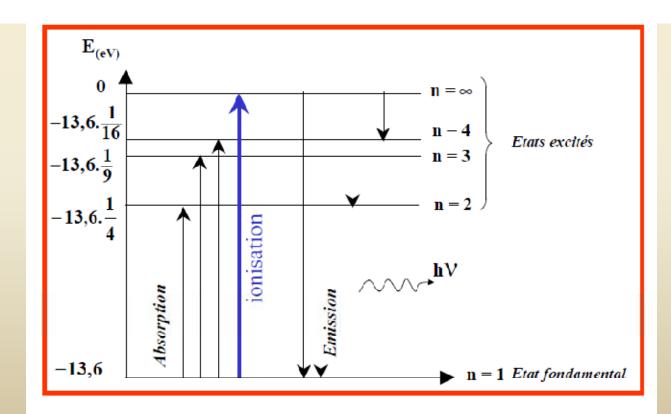
Dans son état fondamental, l'électron de l'atome d'Hydrogène selon le modèle de Bohr est situé sur une orbite de 0.53 de rayon et possédant une énergie de -13.6 eV.

Transitions entre niveaux électroniques.

D'après la seconde hypothèse de Bohr, le passage d'un e^- d'une orbite définie par n_i à une orbite définie par n_f , se fait par un échange d'un quantum d'énergie :

$$\Delta E = hV = h\frac{c}{\lambda}$$

V : fréquence de la radiation; λ : longueur d'onde; c : vitesse de la lumière : c = 3.10^8 m.s⁻¹; h : constante de Planck : h = $6,626.10^{-34}$ J.s



L'énergie d'excitation

L'énergie d'excitation de l'atome d'hydrogène est l'énergie nécessaire pour faire passer l'électron de l'orbite n_1 à une orbite n_2 (n1 n2).

L'énergie d'ionisation

L'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène est l'énergie nécessaire pour faire passer l'électron de l'orbite n = 1 à n = Ce phénomène correspond à l'arrachement de l'électron de l'atome :

$$H_g \rightarrow H_g^+ + 1 e^-$$

L'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène est :

$$E.I = E_{\infty} - E_{1} = -E_{1} = +13,6$$
 ev

Les Hydrogénoïdes

Un hydrogénoïde ou atome hydrogénoïde est un ion monoatomique ne possédant qu'un seul électron.

Il a alors une structure semblable à celle de l'atome d'hydrogène, hormis la charge de son noyau Ze où Z est le numéro atomique de l'élément chimique et e la charge élémentaire.

C'est donc un atome auquel on a arraché tous les électrons sauf un.

Exemple: ₂He+, ₃Li²⁺, ₄Be^{3+......}

Pour les hydrogenoïdes, toutes les formules vues pour l'atome d'hydrogène concernant le calcul du rayon, de l'énergie et de la vitesse de l'électron sur une orbite n peuvent être retrouvées en remplaçant dans celles de l'atome d'hydrogène, la charge du noyau (+ e) par (+Ze).

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2 Z} \times n^2 \qquad \text{ou} \qquad r_n = a_0 \frac{n^2}{Z} = 0,529 \times \frac{n^2}{Z} \qquad {\binom{\circ}{A}}$$

$$E_n = \frac{-mZ^2e^4}{8\varepsilon_0^2h^2} \times \frac{1}{n^2}$$
 ou $E_n = E_1 \frac{Z^2}{n^2} = -13.6 \frac{Z^2}{n^2}$ (eV)

$$1/\lambda = \sigma = (1/n^2 - 1/p^2) Z^2 \cdot me^4 / 8\epsilon_0^2 h^3 c$$

 $1/\lambda = Z^2 \cdot R_H (1/n^2 - 1/p^2)$

www.goodprepa.tech

$$V_n = \frac{Ze^2}{2h\varepsilon_0} \times \frac{1}{n} \qquad \text{ou} \qquad V_n = V_0 \frac{Z}{n} = 2,19.10^6 \times \frac{Z}{n} \quad (\text{m/s})$$

Conclusion

Nous allons passer maintenant au modèle ondulatoire qui va apporter une nouvelle conception de l'organisation électronique.