

L'atome polyélectronique

Nous allons chercher à déterminer les fonctions d'ondes décrivant un système à plusieurs électrons, cas de tous les atomes sauf l'hydrogène

Description très complexe, problème à n-corps. L'électron interagit avec le noyau mais aussi avec tous les autres électrons. Il n'est plus possible de résoudre l'équation de Schrödinger analytiquement (pb d'écriture du potentiel).
==> Approximations, **résolution approchée**

Approximations :

orbitales hydrogénoïdes
niveaux atomiques

Approximations des orbitales hydrogénoïdes

un atome quelconque possède des orbitales du même type que l'atome d'hydrogène
ses électrons sont décrits indépendamment les uns des autres par des orbitales
analogues à celles obtenues pour l'atome d'hydrogène

Les fonctions d'ondes sont déterminées par les valeurs des 3 nombres quantiques
 n , l et m

Les états décrits par ces fonctions sont appelés **orbitales atomiques (OA)**

Approximation des niveaux atomiques

On considère qu'un électron occupe une orbitale donnée et possède une énergie bien déterminée : il est placé sur un niveau atomique

Pour l'hydrogène les valeurs propres de l'énergie ne dépendent que de n

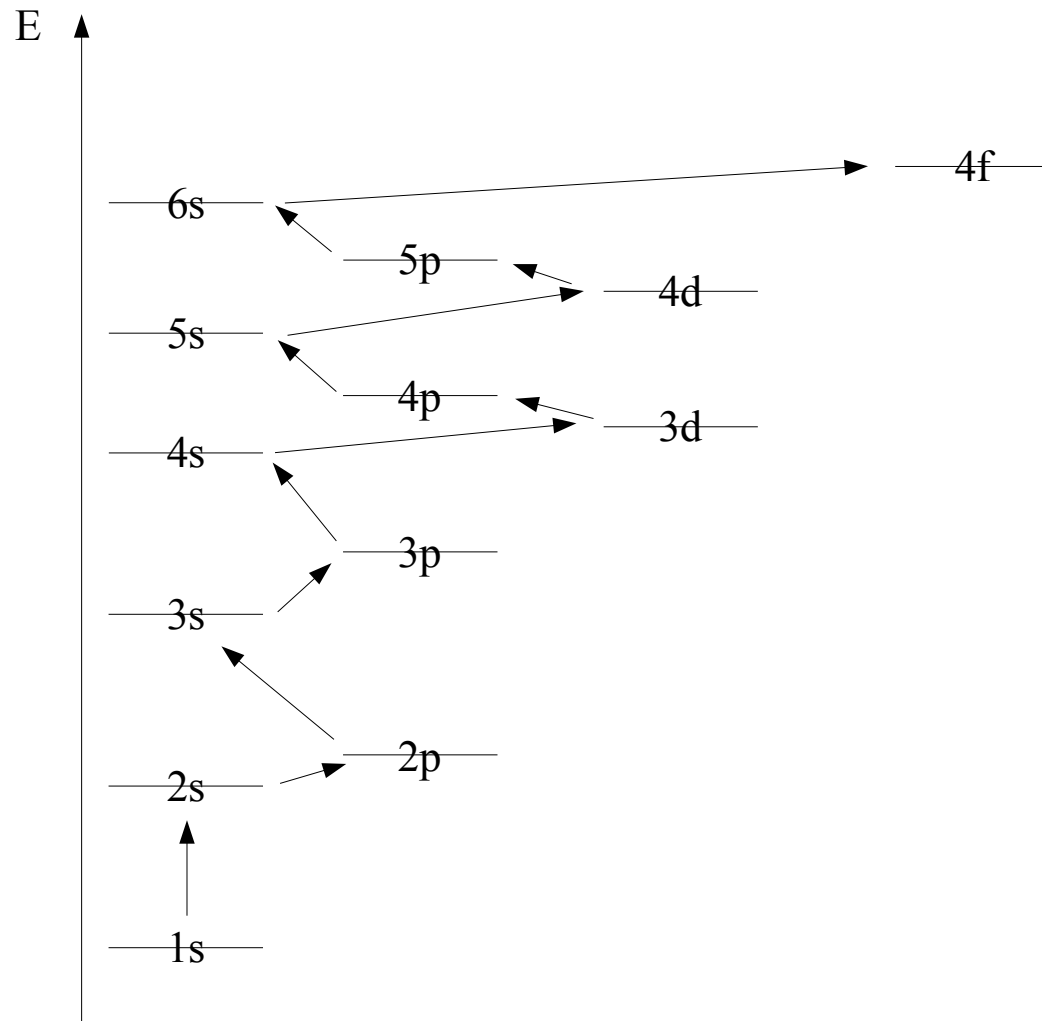
Pour un atome quelconque les valeurs propres dépendent de n et l

les niveaux $2s$ ($n=2, l=0$) et $2p$ ($n=2, l=1$) ne possèdent plus les mêmes valeurs d'énergie.

Pour $n=3$, 3 niveaux d'énergies pour les orbitales $3s, 3p$ et $3d$...
il y a une levée partielle de la dégénérescence

niveaux peuplés par ordre d'énergie croissante ($n+l \nearrow$)

si $n+l$ identique, c'est le niveau avec l'indice n le plus petit qui est rempli en premier



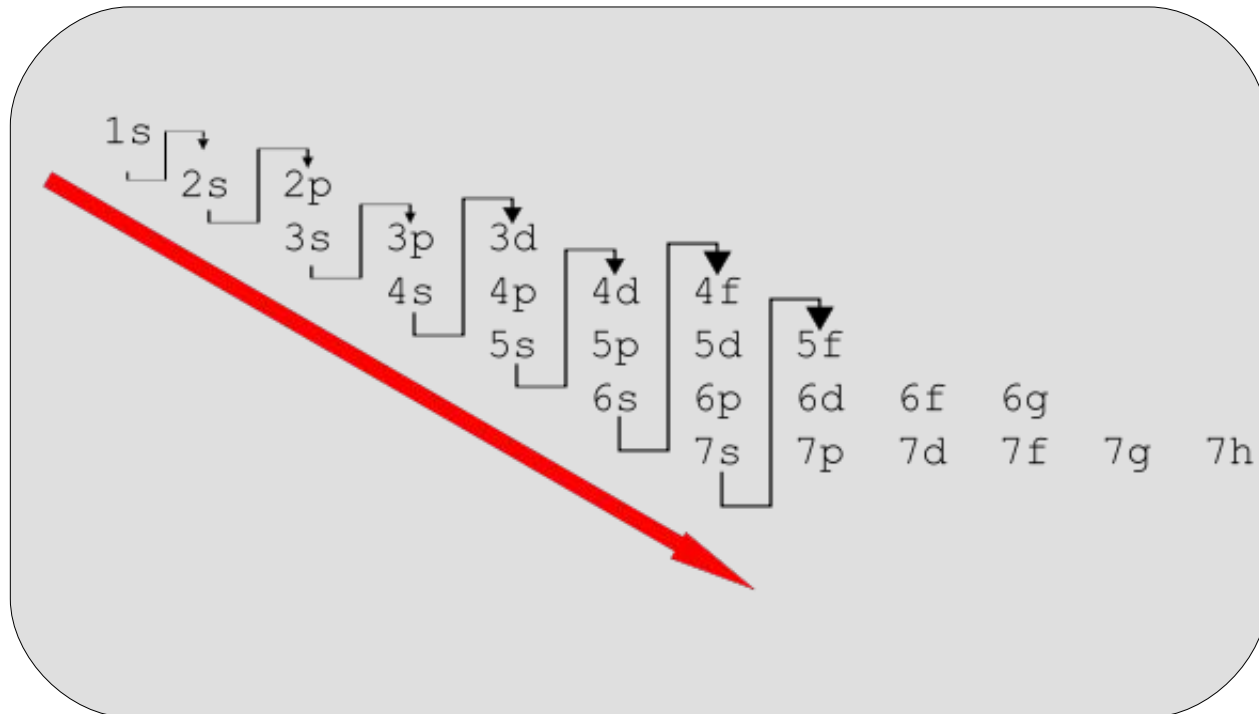
O.A.	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	4d	5p	6s	4f	5d	6p	...
$n+l$	1	2	3	3	4	4	5	5	5	6	6	6	7	7	7	...

Ordre de remplissage des OA

Règle de Klechkowski

niveaux peuplés par ordre
d'énergie croissante ($n+l \nearrow$)

si $n+l$ identique,
c'est le niveau avec l'indice
 n le plus petit qui est rempli
en premier



O.A.	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p	5s	4d	5p	6s	4f	5d	6p	...
$n+l$	1	2	3	3	4	4	5	5	5	6	6	6	7	7	7	...

Construction d'une structure électronique

Considérons un atome de numéro atomique Z . Son noyau possède la charge $+Ze$, et il contient Z électrons à répartir sur les différents niveaux disponibles.

3 principes sont utilisés pour la répartition des électrons:

- principe de Pauli

- principe de l'énergie minimale

- règle de Hund

Principe de Pauli

Dans un atome, il ne peut exister qu'un seul électron dans un état quantique donné
un électron a son état caractérisé par 4 nombres quantiques : n , l , m , s (spin)

$$s = \pm \frac{1}{2}$$

==> **une orbitale** ne peut être occupée que par **2 électrons de spins opposés**

si un seul électron occupe une orbitale son spin est indéterminé
c'est un **électron célibataire**

n=1	1 orbitale s	2 électrons	2 électrons
n=2	1 orbitale s	2 électrons	
	3 orbitales p	6 électrons	8 électrons
n=3	1 orbitale s	2 électrons	
	3 orbitales p	6 électrons	
	5 orbitales d	10 électrons	18 électrons
n=4	1 orbitale s	2 électrons	
	3 orbitales p	6 électrons	
	5 orbitales d	10 électrons	
	7 orbitales f	14 électrons	32 électrons

1 niveau n contient n^2 orbitales sur lesquelles on peut placer $2n^2$ électrons

Principe de l'énergie minimale

L'état fondamental d'un atome est son état de plus basse énergie.
Pour obtenir la structure électronique d'un atome dans son état fondamental on place les électrons sur des niveaux les plus bas possibles en énergie (en respectant le principe de Pauli)
d'abord $2e^-$ sur 1s, puis 2s puis 2p...

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 \dots$

Il existe des états qui ne sont pas conformes à ce principe : ce sont les états excités

le retour à l'état fondamental s'accompagne d'un dégagement d'énergie sous forme de photon

$$E_{\text{photon}} = h\nu = E_{\text{excité}} - E_{\text{fondamental}}$$

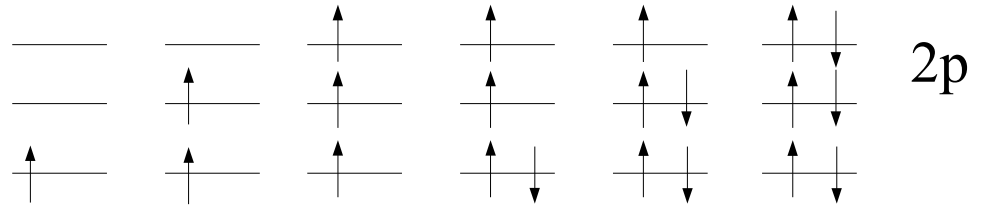
Règle de Hund

Quand plusieurs configurations sont possibles, on privilégie toujours celle qui possède le plus grand nombre d'électrons célibataires.

2 e⁻ célibataires sur un niveau p correspond à une énergie plus faible que 2 électrons appariés sur le même niveau



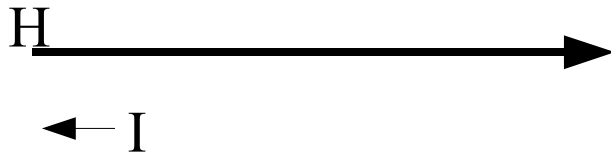
Ce concept a une grande importance quant aux propriétés magnétiques de la matière



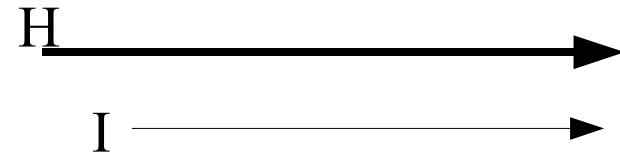
Les propriétés magnétiques d'un atome sont liées au nombre d'électrons célibataires qu'il contient

Propriétés magnétiques

Si on applique un champ magnétique à la matière, elle peut ou non acquérir une aimantation



diamagnétisme : aimantation faible ou nulle



paramagnétisme : aimantation importante dans le sens du champ

Le paramagnétisme est caractéristique des atomes, ions ou molécules possédant des électrons célibataires

Structure électronique des éléments

La structure électronique d'un élément va conditionner ses propriétés chimiques
réactions chimiques = échanges d'électrons entre éléments

Cette structure est **périodique** : remplissage des orbitales s puis p puis d....
les propriétés des éléments vont présenter une périodicité similaire

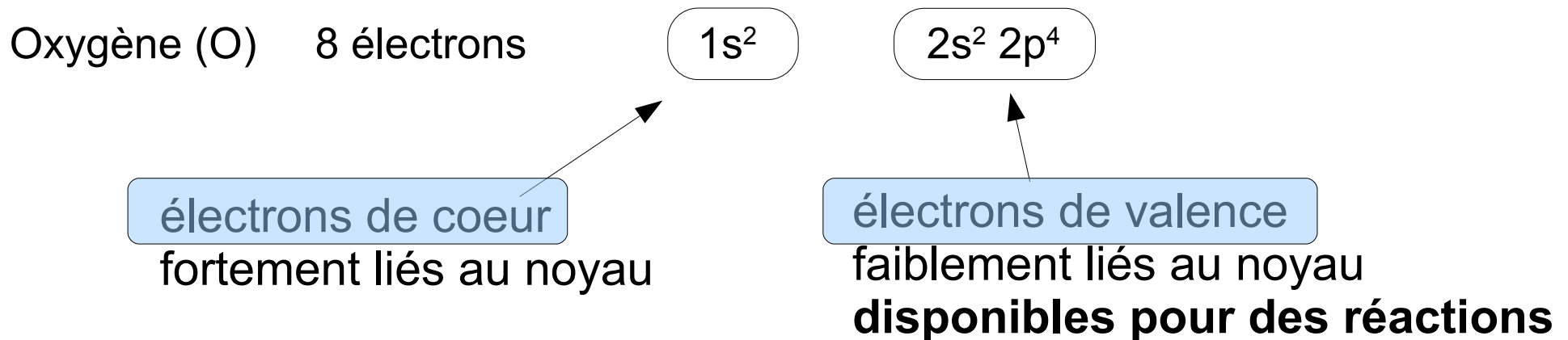
Pour cette raison les différents éléments sont classés dans un tableau que l'on appelle

tableau périodique des éléments

La compréhension de la structure électronique d'un élément permet de faire des analogies avec les propriétés d'autres éléments

Périodicité des structures électroniques

Oxygène (O)	8 électrons	$1s^2 2s^2 2p^4$	couche $n=1$ complète remplissage $n=2$
Fluor (F)	9 électrons	$1s^2 2s^2 2p^5$	couche $n=1$ complète remplissage $n=2$
Néon (Ne)	10 électrons	$1s^2 2s^2 2p^6$	couches $n=1,2$ complètes
Sodium (Na)	11 électrons	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	couches $n=1,2$ complètes remplissage $n=3$



Ces 3 éléments ont une structure électronique similaire, ns^1
ils ont des propriétés similaires (famille des alcalins)

Lithium (Li) Z=3	$1s^2$	$2s^1$
Sodium (Na) Z=11	$1s^2 2s^2 2p^6$	$3s^1$
Potassium (K) Z=19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$4s^1$

Ces 3 éléments ont une structure électronique similaire, np^6
ils ont des propriétés similaires (famille des gaz rares)

Néon (Ne) Z=10	$1s^2 2s^2$	$2p^6$
Argon (Ar) Z=18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$3p^6$
Krypton (Kr) Z=26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Simplification de l'écriture : structure de l'argon = structure du néon + 8 électrons

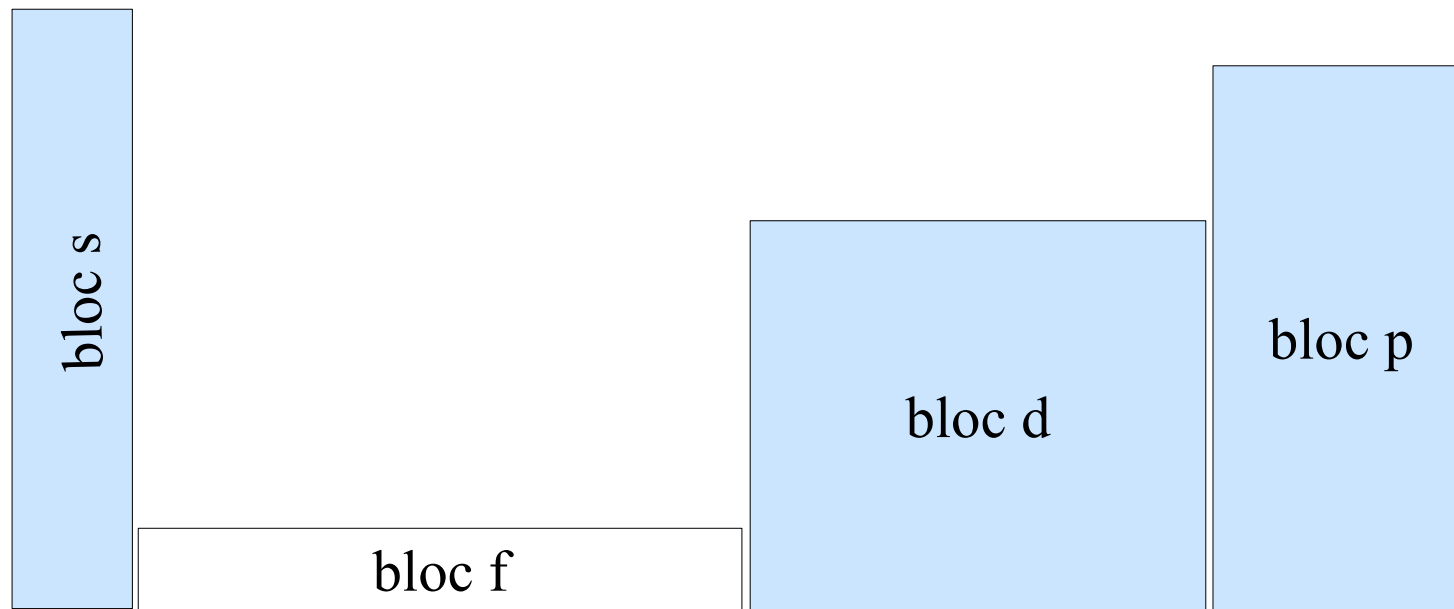
écriture : $[Ar]$: $[Ne] 3s^2 3p^6$

↑
structure électronique
de l'argon

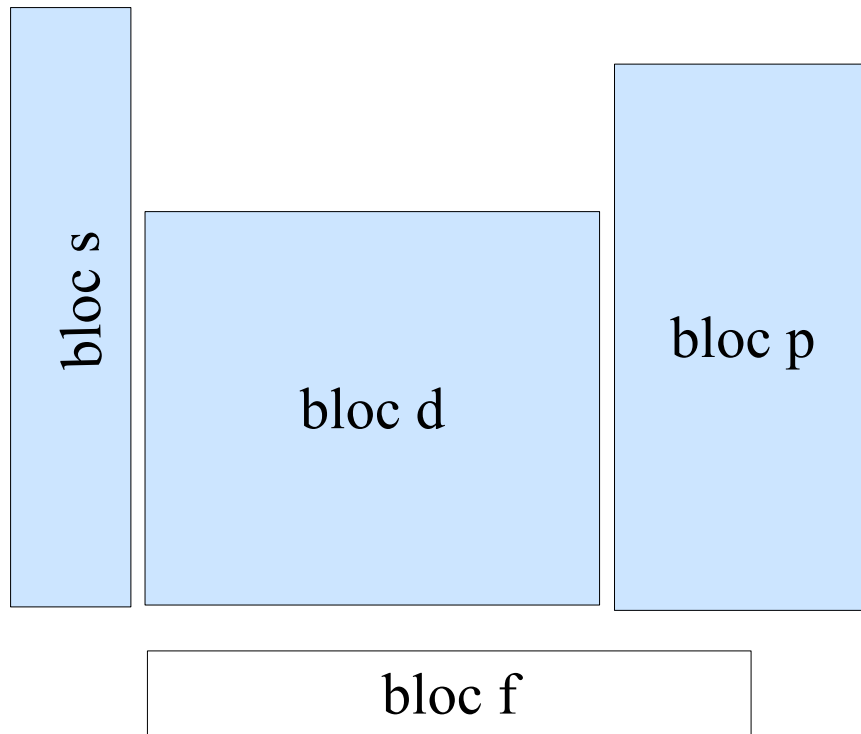
↖
structure électronique
du néon

Structure de la classification périodique

éléments classés par numéro atomique croissant
découpage en blocs correspondant aux remplissage des orbitales s,p,d,f



Représentation habituelle



18 **colonnes (groupes)** correspondant à $2 e^- s + 6 e^- p + 10 e^- d = 18$

7 **lignes (périodes)** correspondant à $n=1,2,3\dots$

éléments f peu fréquents sont à part

les éléments y sont classés par **numéro atomique croissant**

ligne 1 remplissage des niveaux correspondants à $n=1$: orbitale $1s = 2e^- = 2$ éléments

ligne 2 $n=2$: orbitales $2s$ et $2p = 8 e^- = 8$ éléments

A l'exception de la première, chaque ligne commence par un alcalin (Na, K...)
et se termine par un gaz rare (Ne, Ar...)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
hydrogen 1 H 1.00794(7)																	helium 2 He 4.002602(2)	
lithium 3 Li 6.941(2)	beryllium 4 Be 9.012182(3)	<div>Key:</div> <div><div>element name</div><div>atomic number</div><div>symbol</div><div>2001 atomic weight (mean relative mass)</div></div>											boron 5 B 10.811(7)	carbon 6 C 12.0107(8)	nitrogen 7 N 14.00674(7)	oxygen 8 O 15.9994(3)	fluorine 9 F 18.9984032(5)	neon 10 Ne 20.1797(6)
sodium 11 Na 22.989770(2)	magnesium 12 Mg 24.3050(6)											aluminium 13 Al 26.981538(2)	silicon 14 Si 28.0855(3)	phosphorus 15 P 30.973761(2)	sulfur 16 S 32.065(5)	chlorine 17 Cl 35.453(2)	argon 18 Ar 39.948(1)	
potassium 19 K 39.0983(1)	calcium 20 Ca 40.078(4)	scandium 21 Sc 44.955910(8)	titanium 22 Ti 47.867(1)	vanadium 23 V 50.9415(1)	chromium 24 Cr 51.9961(6)	manganese 25 Mn 54.938049(9)	iron 26 Fe 55.845(2)	cobalt 27 Co 58.933200(9)	nickel 28 Ni 58.6934(2)	copper 29 Cu 63.546(3)	zinc 30 Zn 65.409(4)	gallium 31 Ga 69.723(1)	germanium 32 Ge 72.64(1)	arsenic 33 As 74.92160(2)	selenium 34 Se 78.96(3)	bromine 35 Br 79.904(1)	krypton 36 Kr 83.798(2)	
rubidium 37 Rb 85.4678(3)	strontium 38 Sr 87.62(1)	yttrium 39 Y 88.90585(2)	zirconium 40 Zr 91.224(2)	niobium 41 Nb 92.90638(2)	molybdenum 42 Mo 95.94(1)	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07(2)	rhodium 45 Rh 102.90550(2)	palladium 46 Pd 106.42(1)	silver 47 Ag 107.8682(2)	cadmium 48 Cd 112.411(8)	indium 49 In 114.818(3)	tin 50 Sn 118.710(7)	antimony 51 Sb 121.760(1)	tellurium 52 Te 127.60(3)	iodine 53 I 126.90447(3)	xenon 54 Xe 131.293(6)	
caesium 55 Cs 132.90545(2)	barium 56 Ba 137.327(7)	57-70 *	lutetium 71 Lu 174.967(1)	hafnium 72 Hf 178.49(2)	tantalum 73 Ta 180.9479(1)	tungsten 74 W 183.84(1)	rhenium 75 Re 186.207(1)	osmium 76 Os 190.23(3)	iridium 77 Ir 192.217(3)	platinum 78 Pt 195.078(2)	gold 79 Au 196.96655(2)	mercury 80 Hg 200.59(2)	thallium 81 Tl 204.3833(2)	lead 82 Pb 207.2(1)	bismuth 83 Bi 208.98038(2)	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 **	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	darmstadtium 110 Ds [271]	unununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [285]		ununquadium 114 Uuq [289]				

*lanthanoids

**actinoids

lanthanum 57 La 138.9055(2)	cerium 58 Ce 140.116(1)	praseodymium 59 Pr 140.90765(2)	neodymium 60 Nd 144.24(3)	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36(3)	europium 63 Eu 151.964(1)	gadolinium 64 Gd 157.25(3)	terbium 65 Tb 158.92534(2)	dysprosium 66 Dy 162.500(1)	holmium 67 Ho 164.93032(2)	erbium 68 Er 167.259(3)	thulium 69 Tm 168.93421(2)	ytterbium 70 Yb 173.04(3)
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.0381(1)	protactinium 91 Pa 231.03588(2)	uranium 92 U 238.02891(3)	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]

Quelques grandes familles

1° colonne : famille des alcalins **...ns¹**

un seul électron dans la couche périphérique, oxydation aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation +1

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr

17° colonne : famille des halogènes **...ns²np⁵**

manque un électron sur la couche périphérique, réduction aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation -1

ex : sel avec un alcalin NaCl

F, Cl, Br, I

18° colonne : famille des gaz rares **...ns²np⁶**

couche périphérique saturée, très inerte (pas de réactivité chimique)

He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

éléments du bloc d : métaux de transition

bons conducteurs électroniques, souvent existence de multiples états d'oxydation

Alcalins couche de valence ns^1

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
hydrogen 1 H 1.00794(7)																	helium 2 He 4.002602(2)	
<div>lithium 3 Li 6.941(2)</div> <div>sodium 11 Na 22.989770(2)</div> <div>potassium 19 K 39.0983(1)</div> <div>rubidium 37 Rb 85.4678(3)</div> <div>caesium 55 Cs 132.90545(2)</div> <div>francium 87 Fr [223]</div>	beryllium 4 Be 9.012182(3)	<div>Key:</div> <div>element name atomic number symbol</div> <div>2001 atomic weight (mean relative mass)</div>										boron 5 B 10.811(7)	carbon 6 C 12.0107(8)	nitrogen 7 N 14.00674(7)	oxygen 8 O 15.9994(3)	fluorine 9 F 18.9984032(5)	neon 10 Ne 20.1797(6)	
	magnesium 12 Mg 24.3050(6)											aluminium 13 Al 26.981538(2)	silicon 14 Si 28.0855(3)	phosphorus 15 P 30.973761(2)	sulfur 16 S 32.065(5)	chlorine 17 Cl 35.453(2)	argon 18 Ar 39.948(1)	
	calcium 20 Ca 40.078(4)		scandium 21 Sc 44.955910(8)	titanium 22 Ti 47.867(1)	vanadium 23 V 50.9415(1)	chromium 24 Cr 51.9961(6)	manganese 25 Mn 54.938049(9)	iron 26 Fe 55.845(2)	cobalt 27 Co 58.933200(9)	nickel 28 Ni 58.6934(2)	copper 29 Cu 63.546(3)	zinc 30 Zn 65.409(4)	gallium 31 Ga 69.723(1)	germanium 32 Ge 72.64(1)	arsenic 33 As 74.92160(2)	selenium 34 Se 78.96(3)	bromine 35 Br 79.904(1)	krypton 36 Kr 83.798(2)
	strontium 38 Sr 87.62(1)		yttrium 39 Y 88.90585(2)	zirconium 40 Zr 91.224(2)	niobium 41 Nb 92.90638(2)	molybdenum 42 Mo 95.94(1)	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07(2)	rhodium 45 Rh 102.90550(2)	palladium 46 Pd 106.42(1)	silver 47 Ag 107.8682(2)	cadmium 48 Cd 112.411(8)	indium 49 In 114.818(3)	tin 50 Sn 118.710(7)	antimony 51 Sb 121.760(1)	tellurium 52 Te 127.60(3)	iodine 53 I 126.90447(3)	xenon 54 Xe 131.293(6)
	barium 56 Ba 137.327(7)	57-70 *	lutetium 71 Lu 174.967(1)	hafnium 72 Hf 178.49(2)	tantalum 73 Ta 180.9479(1)	tungsten 74 W 183.84(1)	rhenium 75 Re 186.207(1)	osmium 76 Os 190.23(3)	iridium 77 Ir 192.217(3)	platinum 78 Pt 195.078(2)	gold 79 Au 196.96655(2)	mercury 80 Hg 200.59(2)	thallium 81 Tl 204.3833(2)	lead 82 Pb 207.2(1)	bismuth 83 Bi 208.98038(2)	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]
	radium 88 Ra [226]	89-102 **	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	darmstadtium 110 Ds [271]	unununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [285]		ununquadium 114 Uuq [289]				
					</													

Quelques grandes familles

1° colonne : famille des alcalins **...ns¹**

un seul électron dans la couche périphérique, oxydation aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation +1

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr

17° colonne : famille des halogènes **...ns²np⁵**

manque un électron sur la couche périphérique, réduction aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation -1

ex : sel avec un alcalin NaCl

F, Cl, Br, I

18° colonne : famille des gaz rares **...ns²np⁶**

couche périphérique saturée, très inerte (pas de réactivité chimique)

He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

éléments du bloc d : métaux de transition

bons conducteurs électroniques, souvent existence de multiples états d'oxydation

Halogènes couche de valence np^5

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
hydrogen 1 H 1.00794(7)																	helium 2 He 4.002602(2)	
lithium 3 Li 6.941(2)	beryllium 4 Be 9.012182(3)	<div>Key: element name atomic number symbol 2001 atomic weight (mean relative mass)</div>											boron 5 B 10.811(7)	carbon 6 C 12.0107(8)	nitrogen 7 N 14.00644(7)	oxygen 8 O 15.9994(3)	fluorine 9 F 18.9984032(5)	neon 10 Ne 20.1797(6)
sodium 11 Na 22.989770(2)	magnesium 12 Mg 24.3050(6)											aluminium 13 Al 26.981538(2)	silicon 14 Si 28.0855(3)	phosphorus 15 P 30.973761(2)	sulfur 16 S 32.065(5)	chlorine 17 Cl 35.453(2)	argon 18 Ar 39.948(1)	
potassium 19 K 39.0983(1)	calcium 20 Ca 40.078(4)	scandium 21 Sc 44.955910(8)	titanium 22 Ti 47.867(1)	vanadium 23 V 50.9415(1)	chromium 24 Cr 51.9961(6)	manganese 25 Mn 54.938049(9)	iron 26 Fe 55.845(2)	cobalt 27 Co 58.933200(9)	nickel 28 Ni 58.6934(2)	copper 29 Cu 63.546(3)	zinc 30 Zn 65.409(4)	gallium 31 Ga 69.723(1)	germanium 32 Ge 72.64(1)	arsenic 33 As 74.92160(2)	selenium 34 Se 78.96(3)	bromine 35 Br 79.904(1)	krypton 36 Kr 83.798(2)	
rubidium 37 Rb 85.4678(3)	strontium 38 Sr 87.62(1)	yttrium 39 Y 88.90585(2)	zirconium 40 Zr 91.224(2)	niobium 41 Nb 92.90638(2)	molybdenum 42 Mo 95.94(1)	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07(2)	rhodium 45 Rh 102.90550(2)	palladium 46 Pd 106.42(1)	silver 47 Ag 107.8682(2)	cadmium 48 Cd 112.411(8)	indium 49 In 114.818(3)	tin 50 Sn 118.710(7)	antimony 51 Sb 121.760(1)	tellurium 52 Te 127.60(3)	iodine 53 I 126.90447(3)	xenon 54 Xe 131.293(6)	
caesium 55 Cs 132.90545(2)	barium 56 Ba 137.327(7)	57-70 *	lutetium 71 Lu 174.967(1)	hafnium 72 Hf 178.49(2)	tantalum 73 Ta 180.9479(1)	tungsten 74 W 183.84(1)	rhenium 75 Re 186.207(1)	osmium 76 Os 190.23(3)	iridium 77 Ir 192.217(3)	platinum 78 Pt 195.078(2)	gold 79 Au 196.96655(2)	mercury 80 Hg 200.59(2)	thallium 81 Tl 204.3833(2)	lead 82 Pb 207.2(1)	bismuth 83 Bi 208.98038(2)	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 **	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	darmstadtium 110 Ds [271]	ununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [285]		ununquadium 114 Uuq [289]				

*lanthanoids

**actinoids

lanthanum 57 La 138.9055(2)	cerium 58 Ce 140.116(1)	praseodymium 59 Pr 140.90765(2)	neodymium 60 Nd 144.24(3)	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36(3)	europium 63 Eu 151.964(1)	gadolinium 64 Gd 157.25(3)	terbium 65 Tb 158.92534(2)	dysprosium 66 Dy 162.500(1)	holmium 67 Ho 164.93032(2)	erbium 68 Er 167.259(3)	thulium 69 Tm 168.93421(2)	ytterbium 70 Yb 173.04(3)
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.0381(1)	protactinium 91 Pa 231.03588(2)	uranium 92 U 238.02891(3)	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]

Quelques grandes familles

1^o colonne : famille des alcalins **...ns¹**

un seul électron dans la couche périphérique, oxydation aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation +1

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr

17^o colonne : famille des halogènes **...ns²np⁵**

manque un électron sur la couche périphérique, réduction aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation -1

ex : sel avec un alcalin NaCl

F, Cl, Br, I

18^o colonne : famille des gaz rares **...ns²np⁶**

couche périphérique saturée, très inerte (pas de réactivité chimique)

He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

éléments du bloc d : métaux de transition

bons conducteurs électroniques, souvent existence de multiples états d'oxydation

Gaz rares couche de valence np^6

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
hydrogen 1 H 1.00794(7)																	helium 2 He 4.002602(2)
lithium 3 Li 6.941(2)	beryllium 4 Be 9.012182(3)											boron 5 B 10.811(7)	carbon 6 C 12.0107(8)	nitrogen 7 N 14.00674(7)	oxygen 8 O 15.9994(3)	fluorine 9 F 18.9984032(5)	neon 10 Ne 20.1797(6)
sodium 11 Na 22.989770(2)	magnesium 12 Mg 24.3050(6)											aluminium 13 Al 26.981538(2)	silicon 14 Si 28.0855(3)	phosphorus 15 P 30.973761(2)	sulfur 16 S 32.065(5)	chlorine 17 Cl 35.453(2)	argon 18 Ar 39.948(1)
potassium 19 K 39.0983(1)	calcium 20 Ca 40.078(4)											gallium 31 Ga 69.723(1)	germanium 32 Ge 72.64(1)	arsenic 33 As 74.92160(2)	selenium 34 Se 78.96(3)	bromine 35 Br 79.904(1)	krypton 36 Kr 83.798(2)
rubidium 37 Rb 85.4678(3)	strontium 38 Sr 87.62(1)											indium 49 In 114.818(3)	tin 50 Sn 118.710(7)	antimony 51 Sb 121.760(1)	tellurium 52 Te 127.60(3)	iodine 53 I 126.90447(3)	xenon 54 Xe 131.293(6)
caesium 55 Cs 132.90545(2)	barium 56 Ba 137.327(7)	57-70 *										thallium 81 Tl 204.3833(2)	lead 82 Pb 207.2(1)	bismuth 83 Bi 208.98038(2)	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 **											ununquadium 114 Uuq [289]				

Key:
element name
atomic number
symbol
2001 atomic weight (mean relative mass)

*lanthanoids

**actinoids

lanthanum 57 La 138.9055(2)	cerium 58 Ce 140.116(1)	praseodymium 59 Pr 140.90765(2)	neodymium 60 Nd 144.24(3)	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36(3)	europium 63 Eu 151.964(1)	gadolinium 64 Gd 157.25(3)	terbium 65 Tb 158.92534(2)	dysprosium 66 Dy 162.500(1)	holmium 67 Ho 164.93032(2)	erbium 68 Er 167.259(3)	thulium 69 Tm 168.93421(2)	ytterbium 70 Yb 173.04(3)
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.0381(1)	protactinium 91 Pa 231.03588(2)	uranium 92 U 238.02891(3)	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]

Quelques grandes familles

1° colonne : famille des alcalins **...ns¹**

un seul électron dans la couche périphérique, oxydation aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation +1

Li, Na, K, Rb, Cs, Fr

17° colonne : famille des halogènes **...ns²np⁵**

manque un électron sur la couche périphérique, réduction aisée
se trouvent généralement dans l'état d'oxydation -1

ex : sel avec un alcalin NaCl

F, Cl, Br, I

18° colonne : famille des gaz rares **...ns²np⁶**

couche périphérique saturée, très inerte (pas de réactivité chimique)

He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

éléments du bloc d : métaux de transition

bons conducteurs électroniques, souvent existence de multiples états d'oxydation

Métaux de transition couche de valence nd^{1-10}

2		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																																																		
hydrogen 1 H 1.00794(7)																	helium 2 He 4.002602(2)																																																		
lithium 3 Li 6.941(2)	beryllium 4 Be 9.012182(3)	<div>Key:</div> <div>element name atomic number symbol 2001 atomic weight (mean relative mass)</div>										boron 5 B 10.811(7)	carbon 6 C 12.0107(8)	nitrogen 7 N 14.00674(7)	oxygen 8 O 15.9994(3)	fluorine 9 F 18.9984032(5)	neon 10 Ne 20.1797(6)																																																		
sodium 11 Na 22.989770(2)	magnesium 12 Mg 24.3050(6)											aluminium 13 Al 26.981538(2)	silicon 14 Si 28.0855(3)	phosphorus 15 P 30.973761(2)	sulfur 16 S 32.065(5)	chlorine 17 Cl 35.453(2)	argon 18 Ar 39.948(1)																																																		
potassium 19 K 39.0983(1)	calcium 20 Ca 40.078(4)	<table><tr><td>scandium 21 Sc 44.955910(8)</td><td>titanium 22 Ti 47.867(1)</td><td>vanadium 23 V 50.9415(1)</td><td>chromium 24 Cr 51.9961(6)</td><td>manganese 25 Mn 54.938049(9)</td><td>iron 26 Fe 55.845(2)</td><td>cobalt 27 Co 58.933200(9)</td><td>nickel 28 Ni 58.6934(2)</td><td>copper 29 Cu 63.546(3)</td><td>zinc 30 Zn 65.409(4)</td></tr><tr><td>yttrium 39 Y 88.90585(2)</td><td>zirconium 40 Zr 91.224(2)</td><td>niobium 41 Nb 92.90638(2)</td><td>molybdenum 42 Mo 95.94(1)</td><td>technetium 43 Tc [98]</td><td>ruthenium 44 Ru 101.07(2)</td><td>rhodium 45 Rh 102.90550(2)</td><td>palladium 46 Pd 106.42(1)</td><td>silver 47 Ag 107.8682(2)</td><td>cadmium 48 Cd 112.411(8)</td></tr><tr><td>lutetium 71 Lu 174.967(1)</td><td>hafnium 72 Hf 178.49(2)</td><td>tantalum 73 Ta 180.9479(1)</td><td>tungsten 74 W 183.84(1)</td><td>rhenium 75 Re 186.207(1)</td><td>osmium 76 Os 190.23(3)</td><td>iridium 77 Ir 192.217(3)</td><td>platinum 78 Pt 195.078(2)</td><td>gold 79 Au 196.96655(2)</td><td>mercury 80 Hg 200.59(2)</td></tr><tr><td>lawrencium 103 Lr [262]</td><td>rutherfordium 104 Rf [261]</td><td>dubnium 105 Db [262]</td><td>seaborgium 106 Sg [266]</td><td>bohrium 107 Bh [264]</td><td>hassium 108 Hs [269]</td><td>meitnerium 109 Mt [268]</td><td>darmstadtium 110 Ds [271]</td><td>ununium 111 Uuu [272]</td><td>ununbium 112 Uub [285]</td></tr><tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table>										scandium 21 Sc 44.955910(8)	titanium 22 Ti 47.867(1)	vanadium 23 V 50.9415(1)	chromium 24 Cr 51.9961(6)	manganese 25 Mn 54.938049(9)	iron 26 Fe 55.845(2)	cobalt 27 Co 58.933200(9)	nickel 28 Ni 58.6934(2)	copper 29 Cu 63.546(3)	zinc 30 Zn 65.409(4)	yttrium 39 Y 88.90585(2)	zirconium 40 Zr 91.224(2)	niobium 41 Nb 92.90638(2)	molybdenum 42 Mo 95.94(1)	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07(2)	rhodium 45 Rh 102.90550(2)	palladium 46 Pd 106.42(1)	silver 47 Ag 107.8682(2)	cadmium 48 Cd 112.411(8)	lutetium 71 Lu 174.967(1)	hafnium 72 Hf 178.49(2)	tantalum 73 Ta 180.9479(1)	tungsten 74 W 183.84(1)	rhenium 75 Re 186.207(1)	osmium 76 Os 190.23(3)	iridium 77 Ir 192.217(3)	platinum 78 Pt 195.078(2)	gold 79 Au 196.96655(2)	mercury 80 Hg 200.59(2)	lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	darmstadtium 110 Ds [271]	ununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [285]											gallium 31 Ga 69.723(1)	germanium 32 Ge 72.64(1)	arsenic 33 As 74.92160(2)	selenium 34 Se 78.96(3)	bromine 35 Br 79.904(1)	krypton 36 Kr 83.798(2)
scandium 21 Sc 44.955910(8)	titanium 22 Ti 47.867(1)	vanadium 23 V 50.9415(1)	chromium 24 Cr 51.9961(6)	manganese 25 Mn 54.938049(9)	iron 26 Fe 55.845(2)	cobalt 27 Co 58.933200(9)	nickel 28 Ni 58.6934(2)	copper 29 Cu 63.546(3)	zinc 30 Zn 65.409(4)																																																										
yttrium 39 Y 88.90585(2)	zirconium 40 Zr 91.224(2)	niobium 41 Nb 92.90638(2)	molybdenum 42 Mo 95.94(1)	technetium 43 Tc [98]	ruthenium 44 Ru 101.07(2)	rhodium 45 Rh 102.90550(2)	palladium 46 Pd 106.42(1)	silver 47 Ag 107.8682(2)	cadmium 48 Cd 112.411(8)																																																										
lutetium 71 Lu 174.967(1)	hafnium 72 Hf 178.49(2)	tantalum 73 Ta 180.9479(1)	tungsten 74 W 183.84(1)	rhenium 75 Re 186.207(1)	osmium 76 Os 190.23(3)	iridium 77 Ir 192.217(3)	platinum 78 Pt 195.078(2)	gold 79 Au 196.96655(2)	mercury 80 Hg 200.59(2)																																																										
lawrencium 103 Lr [262]	rutherfordium 104 Rf [261]	dubnium 105 Db [262]	seaborgium 106 Sg [266]	bohrium 107 Bh [264]	hassium 108 Hs [269]	meitnerium 109 Mt [268]	darmstadtium 110 Ds [271]	ununium 111 Uuu [272]	ununbium 112 Uub [285]																																																										
rubidium 37 Rb 85.4678(3)	strontium 38 Sr 87.62(1)											indium 49 In 114.818(3)	tin 50 Sn 118.710(7)	antimony 51 Sb 121.760(1)	tellurium 52 Te 127.60(3)	iodine 53 I 126.90447(3)	xenon 54 Xe 131.293(6)																																																		
caesium 55 Cs 132.90545(2)	barium 56 Ba 137.327(7)	57-70 *										thallium 81 Tl 204.3833(2)	lead 82 Pb 207.2(1)	bismuth 83 Bi 208.98038(2)	polonium 84 Po [209]	astatine 85 At [210]	radon 86 Rn [222]																																																		
francium 87 Fr [223]	radium 88 Ra [226]	89-102 **											ununquadium 114 Uuq [289]																																																						

*lanthanoids

**actinoids

lanthanum 57 La 138.9055(2)	cerium 58 Ce 140.116(1)	praseodymium 59 Pr 140.90765(2)	neodymium 60 Nd 144.24(3)	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36(3)	europium 63 Eu 151.964(1)	gadolinium 64 Gd 157.25(3)	terbium 65 Tb 158.92534(2)	dysprosium 66 Dy 162.500(1)	holmium 67 Ho 164.93032(2)	erbium 68 Er 167.259(3)	thulium 69 Tm 168.93421(2)	ytterbium 70 Yb 173.04(3)
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.0381(1)	protactinium 91 Pa 231.03588(2)	uranium 92 U 238.02891(3)	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]

ligne 4 : $n=4$

remplissage de **4s** PUIS **3d** PUIS **4p**

Le remplissage des orbitales 3d conduit à la première série des métaux de transition
Scandium (Sc, $Z=21$) --> Zinc (Zn, $z=30$) 10 éléments en tout

ces éléments possèdent des électrons sur une couche 3d incomplète
niveaux 4s et 3d sont très proches en énergie.

Le niveau 3d voit son énergie décroître au fur et à mesure qu'il se remplit, et il se rapproche du niveau 4s

=> irrégularité de remplissage

Sc : $[\text{Ar}]4s^23d^1$

Ti : $[\text{Ar}]4s^23d^2$

V : $[\text{Ar}]4s^23d^3$

Cr : $[\text{Ar}]4s^13d^5$ au lieu de $4s^23d^4$ car 3d et 4s très proches + application règle de Hund

Mn : $[\text{Ar}]4s^23d^5$

Fe : $[\text{Ar}]4s^23d^6$

Co : $[\text{Ar}]4s^23d^7$

Ni : $[\text{Ar}]4s^23d^8$

Cu : $[\text{Ar}]4s^13d^{10}$ au lieu de $4s^23d^9$ comme dans le cas de Cr

Zn : $[\text{Ar}]4s^23d^{10}$

Périodicité des propriétés physico-chimiques

Nous venons de voir que la structure électronique des éléments est périodique.
Les propriétés chimiques des éléments sont reliées à la structure électronique
==> elles sont aussi (relativement) périodiques

ex : tous les éléments de la première colonne sont des métaux
facilement oxydables, les gaz rares sont tous inertes...

Un certain nombre d'autres propriétés ont le même comportement
rayon atomique
énergie d'ionisation
affinité électronique
électronégativité
...

Cela permet de prévoir certaines propriétés, ou de comparer des éléments si l'on connaît leur structure électronique

variation du rayon atomique

les électrons d'un même niveau électronique n sont tous à des distances semblables du noyau (énergies de liaisons assez proches)

les électrons situés sur des niveaux croissants sont de plus en plus éloignés du noyau, de plus en plus d'électrons écrantent l'attraction nucléaire
ils sont donc plus faiblement liés au noyau.

sur une ligne ou période, de gauche à droite:

la charge nucléaire augmente, **le rayon atomique diminue**

élément	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
rayon covalent(Å)	1,23	0,9	0,82	0,77	0,75	0,73	0,72	0,71

sur une colonne (groupe) de haut en bas:

la charge nucléaire augmente, l'interaction noyau / électrons diminue

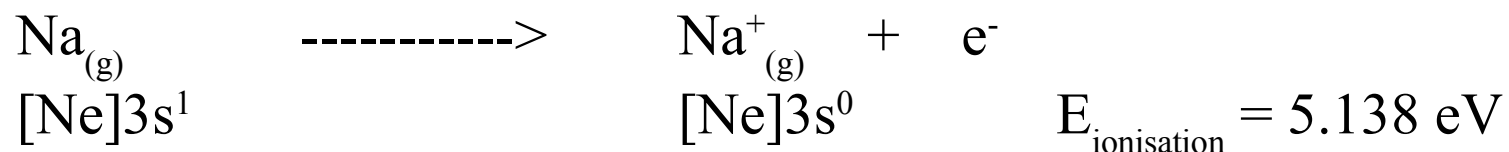
le rayon atomique augmente

élément	H	Li	Na	K	Rb	Cs
rayon covalent(Å)	0,32	1,23	1,54	2,03	2,16	2,35

Energie d'ionisation

Energie nécessaire pour arracher un électron à un atome d'un élément gazeux dans son état fondamental

Plus un électron est lié à un noyau, plus cette énergie augmente.



Dans une période, $E_{\text{ionisation}}$ augmente quand z augmente

élément	Li	Be	...	F
$E_{\text{ionisation}}$ (eV)	5,3	9,3	...	17,45

Dans un groupe, $E_{\text{ionisation}}$ diminue quand z augmente

élément	Li	Na	...	Cs
$E_{\text{ionisation}}$ (eV)	5,3	5,1	...	3,9

Affinité électronique

Energie libérée par la réaction de fixation d'un électron par un atome gazeux



convention de signe différente de la convention thermodynamique:

réaction exothermique (dégagement de chaleur) $\text{AE} > 0$

réaction endothermique $\text{AE} < 0$

Quand AE augmente, cela signifie qu'il est plus facile de capturer un électron

dans une période AE augmente lorsque z augmente

élément	Li	F
AE (kJ.mol⁻¹)	59,2	322

dans un groupe AE diminue quand z augmente

élément	Li	Rb
AE (kJ.mol⁻¹)	59,2	46,9

L'électronégativité

tendance d'un élément à gagner des électrons (comportement oxydant)
l'électronégativité n'est pas une propriété physique, c'est une moyenne algébrique entre l'énergie d'ionisation et l'affinité électronique
 $\chi = \frac{1}{2} (EI + AE)$ (définition de Mulliken)

Dans une période χ augmente quand z augmente

élément	Li	Be	B	C	N	O	F
χ	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0

Dans un groupe χ augmente quand z diminue

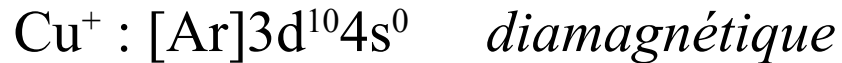
élément	H	Li	Na	K	Rb	Cs	Fr
χ	2,1	1,0	0,9	0,8	0,8	0,7	0,7



le niveau “d plein a une énergie inférieure au niveau 4s

le cuivre est paramagnétique (1 électron célibataire)

électron $4s^1$ faiblement lié au noyau, l'oxydation donne naissance à l'ion cuivreux

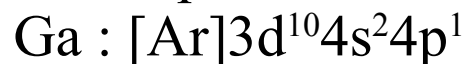


mais comme les niveaux sont très proches, il est presque aussi facile d'arracher un autre électron , formation de l'ion doublement chargé

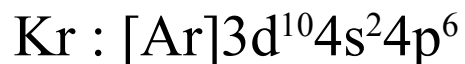


les autres électrons sont plus fortement liés, pas d'ion Cu^{3+}

on remplit ensuite le niveau 4p



...



ligne 6 $n=6$ remplissage des niveaux 6s,5d,4f et 6p

alcalin : Cs : $[\text{Xe}]6s^1$

premier élément du bloc d : La : $[\text{Xe}]6s^25d^1$

à partir de l'élément suivant, le cérium ($Z=58$) on remplit la couche 4f

Ce : $[\text{Xe}]6s^24f^2$ au lieu de $6s^25d^14f^1$

la couche f contient 14 électrons, on décrit 14 éléments jusqu'au Lutetium ($Z=71$)
ces éléments ont des propriétés proches de celles du Lanthane, ce sont les lanthanides ou terres rares

Le remplissage de la couche 5d décrit ensuite la 3^e série de métaux de transition
de Hf ($Z=72$) : $[\text{Xe}]4f^{14}5d^26s^2$ à mercure Hg : $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^2$

anomalies de remplissage

Pt : $[\text{Xe}]4f^{14}5d^96s^1$ au lieu de $[\text{Xe}]4f^{14}5d^86s^2$

Au : $[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^1$ au lieu de $[\text{Xe}]4f^{14}5d^96s^2$

les orbitales 6p sont ensuite remplies jusqu'au gaz rare

Rn : $[\text{Xe}][\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$

ligne 7 remplissage 7s, 5f, 6d, 7p

la couche 5d commence à se remplir avec l'Actinium ($z=89$) : $[\text{Rn}]6d^1 7s^2$
puis le thorium (différent du Ce) : $[\text{Rn}]6d^2 7s^2$

le remplissage de la couche 5f commence avec le Proactinium

Pa : $[\text{Rn}]5f^2 6d^1 7s^2$ ($z=90$)

jusqu'au Lawrencium Lr : $[\text{Rn}]5f^{14} 6d^1 7s^2$

tous les éléments situés après l'uranium ($z=92$) sont **artificiels et instables**
l'élément le plus lourd de la classification est l'ununquadium $z=114$

ligne 1: $n=1$, 2 éléments

remplissage de la couche 1s. H : $1s^1$, He : $1s^2$ (gaz rare)

ligne 2: $n=2$, 8 éléments

remplissage de la couche 2s. Li : $1s^2 2s^1$ (alcalin), Be : $1s^2 2s^2$

remplissage de la couche 2p. B : $1s^2 2s^2 2p^1$

C : $1s^2 2s^2 2p^2$

N : $1s^2 2s^2 2p^3$

O : $1s^2 2s^2 2p^4$

F : $1s^2 2s^2 2p^5$

Ne : $1s^2 2s^2 2p^6$ (gaz rare)

beaucoup d'éléments courants de la chimie organique

ligne 3: $n=3$ on ne décrit que 8 éléments, 3s et 3p car la couche 3d est remplie après la 4s

remplissage 3s. Na : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 = [\text{Ne}]3s^1$

remplissage 3p. Al : $[\text{Ne}]3s^2 3p^1$... Ar : $[\text{Ne}]3s^2 3p^6$