

Chapitre 1 (version complétée)

Atomistique et présentation de la classification périodique

Plan du cours

Introduction	3
I. Description classique de l'atome	3
I.1 Structure de l'atome	3
I.2 Atomes et éléments chimiques	4
I.2.a Les éléments chimiques	4
I.2.b Grandeurs et unités usuelles	5
II. Description quantique de l'atome	7
II.1 Introduction à la physique quantique	7
II.2 Nombres quantiques	7
II.2.a Le nombre quantique principal	7
II.2.b Le nombre quantique secondaire	8
II.2.c Le nombre quantique magnétique	8
II.2.d Le nombre quantique magnétique de spin	9
II.3 Notion de case quantique	10
III. Configuration électronique d'un atome polyélectronique	11
III.1 Règles de remplissage	11
III.1.a Règle de KLECHKOWSKI	11
III.1.b Principe d'exclusion de PAULI	11
III.1.c Règle de HUND	12
III.2 Électrons de valence, électrons de cœur	13
IV. La classification périodique	13
IV.1 Structure de la classification périodique des éléments	13
IV.2 Périodicité des propriétés atomiques	16
IV.2.a Électronégativité	16
IV.2.b Rayon atomique	17
IV.2.c Énergie d'ionisation	17
IV.2.d Affinité électronique	18
Synthèse	19

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

GROUPE		18	
1	2	13	14
1 1.0079 H HYDROGÈNE	2 4.0026 He HÉLIUM	5 10.811 B BORE	6 12.011 C CARBONE
3 6.941 Li LITHIUM	4 9.0122 Be BÉRYLLIUM	7 54.938 V VANADIUM	8 55.845 Cr CHROME
11 22.990 Na SODIUM	12 24.305 Mg MAGNÉSIMUM	13 26.982 Al ALUMINIUM	14 28.086 Si SILICIUM
19 39.098 K POTASSIUM	20 40.078 Ca CALCIUM	15 30.974 P PHOSPHORE	16 32.065 S SOUFRE
37 85.468 Rb RUBIDIUM	38 87.62 Sr STRONTIUM	17 35.453 Cl CHLORE	18 39.948 Ar ARGON
55 132.91 Cs CÉSIMUM	56 137.33 Ba BARYUM	19 63.546 Ga GALLIUM	20 72.64 Ge GERMANIUM
87 (223) Fr FRANCIUM	88 (226) Ra RADIUM	21 65.39 Zn ZINC	22 78.96 Se SÉLÉNIUM
		29 63.546 Cu CUIVRE	30 78.96 Zn ZINC
		31 69.723 Ga GALLIUM	32 72.64 Ge GERMANIUM
		33 74.922 As ARSENIC	34 78.96 Se SÉLÉNIUM
		35 79.904 Br BROME	36 83.80 Kr KRYPTON
		41 92.906 Nb NIOBIUM	42 95.94 Mo MOYBÈNE
		43 (98) Tc TECHNÉTIUM	44 101.07 Ru RUTHÉNIUM
		45 102.91 Rh RHODIUM	46 106.42 Pd PALLADIUM
		47 107.87 Ag ARGENT	48 112.41 Cd CADMIUM
		49 114.82 In INDIUM	50 118.71 Sn ÉTAIN
		51 121.76 Sb ANTIMOINE	52 127.60 Te TELLURE
		53 126.90 I IODE	54 131.29 Xe XÉNON
		57 138.91 La LANTHANE	58 140.12 Ce CÉRIUM
		59 140.91 Pr PRASEODYME	60 144.24 Nd NÉODYME
		61 (145) Pm PROMÉTHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM
		63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM
		65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM
		67 164.93 Ho HOLIUM	68 167.26 Er ERBIUM
		69 168.93 Tm THULIUM	70 173.04 Yb YTTÉRIUM
		71 174.97 Lu LUTÉTIUM	
		72 175.10 Yb YTTÉRIUM	
		73 176.93 Lu LUTÉTIUM	
		74 178.49 Zr ZIRCONIUM	75 183.84 Nb NIOBIUM
		76 186.21 Mo MOYBÈNE	77 192.22 Rh RHODIUM
		78 195.08 Pt PLATINE	79 196.97 Au OR
		80 200.59 Hg MERCURE	81 204.38 Tl THALLIUM
		82 207.2 Pb PLOMB	83 208.98 Bi BISMUTH
		84 (209) Po POLONIUM	85 (210) At ASTATE
		86 (222) Rn RADON	
		87 (223) Fr FRANCIUM	
		88 (226) Ra RADIUM	
		89-103 Ac-Lr Actinides	
		89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM
		91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM
		93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM
		95 (243) Am AMÉRICIUM	96 (247) Cm CURIUM
		97 (251) Bk BERKÉLIUM	98 (259) Cf CALIFORNIUM
		99 (267) Es EINSTEINIUM	100 (271) Fm FERMIUM
		101 (288) Mt MEITNERIUM	102 (289) Ds DUBNIUM
		103 (288) Uu UNUNTRIUM	104 (289) Uub UNUNBIVIUM
		105 (288) Uuq UNUNQUADIUM	106 (289) Uuq UNUNQUADIUM
		107 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	108 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		109 (288) Uuo UNUNOCTIUM	110 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		111 (288) Uuq UNUNQUADIUM	112 (289) Uuq UNUNQUADIUM
		113 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	114 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		115 (288) Uuo UNUNOCTIUM	116 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		117 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	118 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		119 (288) Uuo UNUNOCTIUM	120 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		121 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	122 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		123 (288) Uuo UNUNOCTIUM	124 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		125 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	126 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		127 (288) Uuo UNUNOCTIUM	128 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		129 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	130 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		131 (288) Uuo UNUNOCTIUM	132 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		133 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	134 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		135 (288) Uuo UNUNOCTIUM	136 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		137 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	138 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		139 (288) Uuo UNUNOCTIUM	140 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		141 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	142 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		143 (288) Uuo UNUNOCTIUM	144 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		145 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	146 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		147 (288) Uuo UNUNOCTIUM	148 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		149 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	150 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		151 (288) Uuo UNUNOCTIUM	152 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		153 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	154 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		155 (288) Uuo UNUNOCTIUM	156 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		157 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	158 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		159 (288) Uuo UNUNOCTIUM	160 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		161 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	162 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		163 (288) Uuo UNUNOCTIUM	164 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		165 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	166 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		167 (288) Uuo UNUNOCTIUM	168 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		169 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	170 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		171 (288) Uuo UNUNOCTIUM	172 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		173 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	174 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		175 (288) Uuo UNUNOCTIUM	176 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		177 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	178 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		179 (288) Uuo UNUNOCTIUM	180 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		181 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	182 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		183 (288) Uuo UNUNOCTIUM	184 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		185 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	186 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		187 (288) Uuo UNUNOCTIUM	188 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		189 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	190 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		191 (288) Uuo UNUNOCTIUM	192 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		193 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	194 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		195 (288) Uuo UNUNOCTIUM	196 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		197 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	198 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		199 (288) Uuo UNUNOCTIUM	200 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		201 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	202 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		203 (288) Uuo UNUNOCTIUM	204 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		205 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	206 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		207 (288) Uuo UNUNOCTIUM	208 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		209 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	210 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		211 (288) Uuo UNUNOCTIUM	212 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		213 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	214 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		215 (288) Uuo UNUNOCTIUM	216 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		217 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	218 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		219 (288) Uuo UNUNOCTIUM	220 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		221 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	222 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		223 (288) Uuo UNUNOCTIUM	224 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		225 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	226 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		227 (288) Uuo UNUNOCTIUM	228 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		229 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	230 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		231 (288) Uuo UNUNOCTIUM	232 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		233 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	234 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		235 (288) Uuo UNUNOCTIUM	236 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		237 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	238 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		239 (288) Uuo UNUNOCTIUM	240 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		241 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	242 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		243 (288) Uuo UNUNOCTIUM	244 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		245 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	246 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		247 (288) Uuo UNUNOCTIUM	248 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		249 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	250 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		251 (288) Uuo UNUNOCTIUM	252 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		253 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	254 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		255 (288) Uuo UNUNOCTIUM	256 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		257 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	258 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		259 (288) Uuo UNUNOCTIUM	260 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		261 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	262 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		263 (288) Uuo UNUNOCTIUM	264 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		265 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	266 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		267 (288) Uuo UNUNOCTIUM	268 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		269 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	270 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		271 (288) Uuo UNUNOCTIUM	272 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		273 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	274 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		275 (288) Uuo UNUNOCTIUM	276 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		277 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	278 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		279 (288) Uuo UNUNOCTIUM	280 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		281 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	282 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		283 (288) Uuo UNUNOCTIUM	284 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		285 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	286 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		287 (288) Uuo UNUNOCTIUM	288 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		289 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	290 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		291 (288) Uuo UNUNOCTIUM	292 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		293 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	294 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		295 (288) Uuo UNUNOCTIUM	296 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		297 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	298 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		299 (288) Uuo UNUNOCTIUM	300 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		301 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	302 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		303 (288) Uuo UNUNOCTIUM	304 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		305 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	306 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		307 (288) Uuo UNUNOCTIUM	308 (289) Uuo UNUNOCTIUM
		309 (288) Uuh UNUNHEPTIUM	310 (289) Uuh UNUNHEPTIUM
		311	

Introduction

Apparu durant l'Antiquité, le concept d'atome (du grec *átomos*, « insécable ») comme plus petite unité de la matière, a été décrié jusqu'au XIX^{ème} siècle, avant de s'imposer au début du XX^{ème}.

En 1911, le physicien RUTHERFORD découvre que l'atome est principalement constitué de vide, avec en son centre un noyau, et propose un modèle dit « planétaire » : les électrons graviteraient autour du noyau comme les planètes autour du Soleil. Une adaptation de ce modèle par BOHR, restreignant les électrons à des orbites bien précises, permet d'expliquer le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène, mais pas des atomes polyélectroniques. Il faudra attendre la naissance de la mécanique quantique (avec notamment l'équation de SCHRÖDINGER en 1925) pour obtenir une description de l'atome qui permette d'expliquer tous ces phénomènes, c'est le **modèle quantique de l'atome**.



Erwin SCHRÖDINGER
(1887-1961)

I. Description classique de l'atome

I.1 Structure de l'atome

Définition : atome

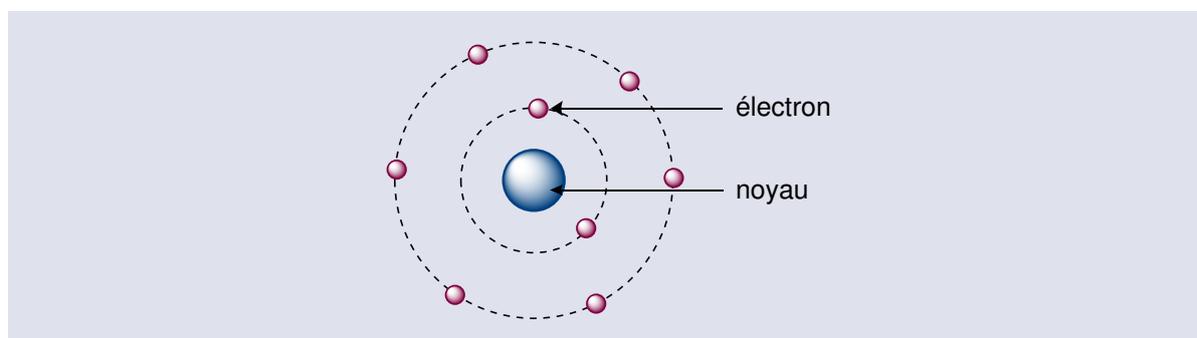
Un **atome** peut être schématisé classiquement par un noyau sphérique **chargé positivement** autour duquel gravitent des **électrons chargés négativement**.

Le diamètre d'un atome est d'environ 0,1 nm.

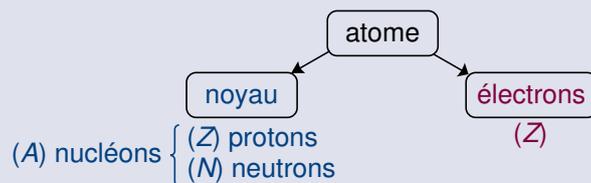
Important

L'atome est un **édifice neutre**.

Représentation schématique d'un atome :



Propriétés des éléments constitutifs d'un atome :



- Z est appelé **numéro atomique**, il correspond au nombre de protons dans l'atome.
- Les **neutrons** et les **protons** constituent les **nucléons**.
- A est appelé **nombre de masses** (ou nombre de nucléons), il est défini par :

$$A = Z + N$$

Symbole de l'atome :



Application 1 : composition de l'uranium

Préciser la composition de l'atome d'uranium ${}^{235}_{92}\text{U}$.

Réponse : $A = Z + N$ donc $N = A - Z = 143$

Cet atome compte donc **92 protons** et **143 neutrons** dans le noyau et **92 électrons** sur le cortège électronique.

La majeure partie (> 99 %) de la masse d'un atome est concentrée dans son noyau.

particule	masse / kg	charge / C
neutron	$1,67 \cdot 10^{-27}$	0
proton	$1,67 \cdot 10^{-27}$	$e = 1,6 \cdot 10^{-19}$
électron	$9,1 \cdot 10^{-31}$	$-e = -1,6 \cdot 10^{-19}$

L'extension spatiale de l'atome est radicalement différente de celle de son noyau.

taille caractéristique d'un atome	taille caractéristique d'un noyau
10^{-10} m	10^{-15} m

Remarque : si le noyau était un grain de sable au milieu d'un terrain de football, l'atome correspondant aurait la dimension du terrain en entier...

1.2 Atomes et éléments chimiques

1.2.a Les éléments chimiques

Un **élément chimique** est caractérisé par son **numéro atomique** Z .

Symbole :



A un élément chimique donné peuvent correspondre plusieurs atomes, appelés **isotopes**.

Définition : isotopes

Des **isotopes** sont deux atomes ayant **même numéro atomique** mais un **nombre de neutrons différent**.

Exemples :

L'hydrogène a plusieurs isotopes : ${}_1^1\text{H}$, ${}_1^2\text{H}$, ${}_1^3\text{H}$ /

Actuellement, plus d'une centaine d'éléments chimiques ont été découverts, dont 92 naturels.

Application 2 : masse molaire du titane

▮ Déterminer la masse molaire du titane.

${}^{48}\text{Ti}$ (73,7 %), ${}^{46}\text{Ti}$ (8,3 %), ${}^{47}\text{Ti}$ (7,4 %), ${}^{49}\text{Ti}$ (5,4 %), ${}^{50}\text{Ti}$ (5,2 %)

Réponse :

1.2.b Grandeurs et unités usuelles

Définition : mole

Une **mole** représente la quantité de matière d'un système contenant autant d'entités élémentaires qu'il n'y a d'atomes dans 12 g de l'isotope de carbone 12.

Il est donc possible, à la lumière de cette définition, de retrouver la valeur de \mathcal{N}_A , le nombre d'AVOGADRO, défini comme le nombre d'entités contenues dans une mole :

$$\mathcal{N}_a = \frac{\text{masse de 12 g}}{12 \times \text{massed'uneentité}} = \frac{12 \cdot 10^{-3}}{12 \times 1,67 \cdot 10^{-27}} \approx 6,0 \cdot 10^{23} \text{ entités}$$

Définition : unité de masse atomique

L'**unité de masse atomique** est définie comme la fraction de 1/12 de la masse d'un atome de carbone 12.

Équivalence entre kg et unité de masse atomique :

$$1 \text{ u.m.a} \approx m_{\text{proton}} \approx \frac{12 \times m_{\text{neutron}}}{12} = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

II. Description quantique de l'atome

II.1 Introduction à la physique quantique

L'impossibilité d'interpréter les spectres d'émission des atomes à l'aide de la mécanique classique a conduit les physiciens à élaborer un nouveau modèle : la **mécanique quantique**. Le but ici n'est pas de comprendre la mécanique quantique¹ mais d'aborder ses principes.

Après la mise en défaut du modèle planétaire, la mécanique quantique a pris le relais et permet de connaître avec précision la position d'un électron dans une région donnée de l'espace autour du noyau. Il faut pour cela introduire la notion de **probabilité de présence** de l'électron. Cette théorie quantique repose sur la résolution de l'équation de SCHRODINGER : $H\Psi = E\Psi$. Avec H un opérateur appelé Hamiltonien et E l'énergie totale du système. La résolution permet d'obtenir la fonction Ψ appelé **fonction d'onde** décrivant le comportement des électrons dans l'espace et le temps. Cette résolution fait apparaître **quatre nombres quantiques** que nous allons étudier en détails dans la suite.

II.2 Nombres quantiques

II.2.a Le nombre quantique principal

Définition : nombre quantique principal

Le **nombre quantique principal**, noté $n \in \mathbb{N}$, définit la **couche électronique** dans laquelle se trouve l'électron.

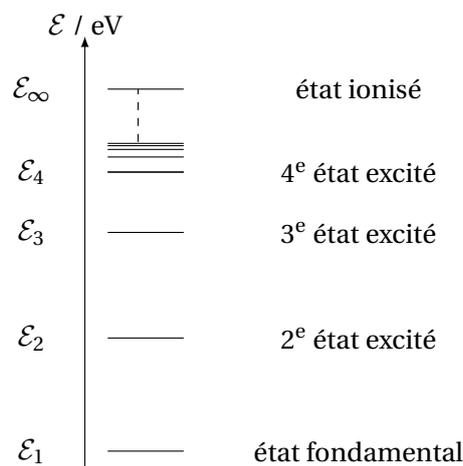
n	1	2	3	4	...
couche	K	L	M	N	...

Le nombre quantique principal n quantifie l'énergie de l'électron. Ainsi, pour l'atome d'hydrogène, pour son unique électron :

$$\mathcal{E}_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ (en eV)}$$

Représentation du diagramme d'énergie de l'atome d'hydrogène :

1. Quelqu'un la comprend-t-il vraiment?



II.2.b Le nombre quantique secondaire

Définition : nombre quantique secondaire

Le **nombre quantique secondaire**, noté ℓ et tel que $0 \leq \ell \leq n-1$, définit la **sous-couche** électronique dans laquelle se trouve l'électron.

ℓ	0	1	2	3	...
sous-couche	s	p	d	f	...

II.2.c Le nombre quantique magnétique

Définition : nombre quantique magnétique

Le **nombre quantique magnétique**, noté m_ℓ et tel que $-\ell \leq m_\ell \leq \ell$, précise l'**orbitale atomique** dans laquelle se trouve l'électron.

Il y a donc $2\ell + 1$ valeurs possibles pour m_ℓ .

📌 Application 3 : triplets de nombres quantiques

Un triplet de nombres quantiques est une donnée des trois premiers nombres quantiques sous la forme (n, ℓ, m_ℓ) .

🔗 Les triplets de nombres quantiques suivants sont-ils possibles pour un électron ? Si oui, identifier la sous-couche associée.

1. (4, 0, 0)

2. (2, 2, 0)

3. (0, 0, 0)

4. (4, 1, 2)

Réponse :

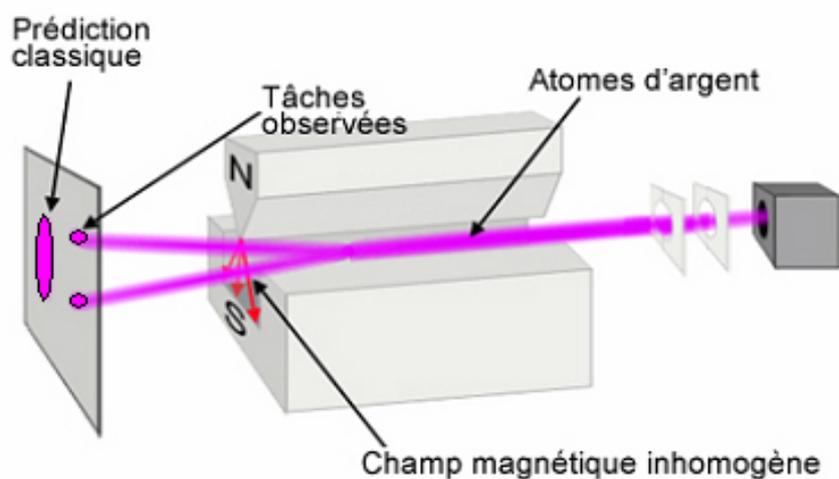
1. (4, 0, 0)
Possible, sous-couche 4s
2. (2, 2, 0)
Impossible car $n = 2$ donc il faut que $\ell = 0$ ou 1
3. (0, 0, 0)
Impossible car n ne peut pas être nul.
4. (4, 1, 2)
Impossible, car $\ell = 1$ donc $m_\ell = -1, 0$ ou 1. Ici $m_\ell = 2$.

II.2.d Le nombre quantique magnétique de spin

En 1922, STERN et GERLACH réalisent une expérience² dans laquelle des atomes d'argent sont projetés sur une plaque tout en étant soumis à un champ magnétique. Selon la théorie quantique, tous les atomes d'argent devraient avoir le même comportement mais l'expérience met en évidence deux groupes d'atomes, certains déviés **vers le haut** et d'autres **vers le bas**.



Otto STERN (1888-1969, à gauche) et Wolfgang Pauli (1900-1958, à droite)



Ainsi, les trois nombre quantiques n , ℓ et m_ℓ ne sont pas suffisants pour avoir une description complète de l'électron. Il faut donc introduire une nouvelle grandeur physique, appelée **spin** et ajouter un quatrième nombre quantique appelé **nombre magnétique de spin** de l'électron.

2. https://www.youtube.com/watch?v=8wS4IOzAhFA&ab_channel=LaPhysiqueAutrement

Définition : nombre quantique magnétique de spin

Le **nombre quantique magnétique de spin**, noté m_s , est lié au **spin** S de la particule étudiée. Pour l'électron, $S = +\frac{1}{2}$ et $m_s = \pm\frac{1}{2}$.

Ce nombre quantique, noté m_s ne peut prendre que deux valeurs : $m_s = +\frac{1}{2}$ ou $m_s = -\frac{1}{2}$.

II.3 Notion de case quantique

Pour simplifier la représentation du diagramme énergétique d'un atome polyélectronique, on peut introduire la notion de **case quantique**.

Une case quantique correspond à un triplet (n, ℓ, m_ℓ) donné, noté ou , elle symbolise une **orbitale atomique**.

À chaque case quantique correspond une **énergie**. On la note usuellement \mathcal{E}_n pour l'hydrogène et $\mathcal{E}_{n,\ell}$ pour les atomes polyélectroniques.

Pour nommer une case quantique, on procède en indiquant d'abord la valeur de n puis la valeur de ℓ .

Quelques exemples : 1s, 2s, 2p.

Propriété : orbitales dégénérées

Il se trouve que $\mathcal{E}_{n,\ell}$ ne dépend que de n et ℓ (d'où sa notation), les orbitales atomiques de même valeur de n et ℓ auront donc la même énergie quelque soit la valeur de m_ℓ . Elles sont dites **dégénérées**.

✍ Application 4 : nombre d'orbitales dégénérées

➤ Déterminer le nombre d'orbitales dégénérées pour $n = 1, 2$ et 3 .

- $n = 1$ donc $\ell = 0$ et donc une seule valeur de m_ℓ possible. Le seul triplet possible est : $(1, 0, 0)$.
- $n = 2$ donc ℓ peut valoir 0 ou 1. Les triplets possibles sont : $(2, 0, 0)$, $(2, 1, -1)$, $(2, 1, 0)$, $(2, 1, 1)$.
- $n = 3$ donc ℓ peut valoir 0, 1 ou 2. Les triplets possibles sont : $(3, 0, 0)$, $(3, 1, -1)$, $(3, 1, 0)$, $(3, 1, 1)$, $(3, 2, -2)$, $(3, 2, -1)$, $(3, 2, 0)$, $(3, 2, 1)$, $(3, 2, 2)$.

III. Configuration électronique d'un atome polyélectronique

III.1 Règles de remplissage

III.1.a Règle de Klechkowski

C'est une règle **empirique**. Elle permet de déterminer l'ordre de remplissage des sous-couches conduisant à la **configuration électronique** d'un atome neutre dans son **état fondamental**.

Propriété : règle de Klechkowski

Les sous-couches sont remplies par **valeurs de $(n + \ell)$ croissantes** et, en cas d'égalité, par **valeur de n croissantes**.

Application 5 : ordre de remplissage

➤ Déterminer l'ordre de remplissage pour un atome polyélectronique.



III.1.b Principe d'exclusion de Pauli

Propriété : principe d'exclusion de Pauli

Deux électrons d'un **même atome** ne peuvent posséder les **quatre mêmes nombres quantiques**.

Par conséquent, pour un triplet (n, ℓ, m_ℓ) correspondant à une case quantique, il existe seulement trois états possibles :

- Si 0 électron : —
- Si 1 électron : \uparrow ou \downarrow
- Si 2 électrons : $\uparrow\downarrow$

III.1.c Règle de Hund

Propriété : règle de Hund

Quand un niveau d'énergie est dégénéré et que le nombre d'électrons n'est pas suffisant pour saturer ce niveau, l'état de plus basse énergie est celui pour lequel les **électrons occupent le plus d'orbitales dégénérées**, les **spins des électrons étant parallèles**.

Exemples :

3 électrons dans une couche $2p$: $\uparrow \uparrow \uparrow$

6 électrons dans une couche $3d$: $\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$

Définition : diamagnétisme, paramagnétisme

On dit qu'un atome est **paramagnétique** s'il possède un ou plusieurs électron(s) célibataire(s).

On dit qu'un atome est **diamagnétique** s'il ne possède aucun électron célibataire.

Exemples :

Configuration n°1 : $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$ *diamagnétique*

Configuration n°2 : $\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$ *paramagnétique*

✍ Application 6 : configurations électroniques

🚩 Donner la configuration électronique à l'état fondamental des atomes suivants :

1. B ($Z = 5$)

3. O ($Z = 8$)

5. Ti ($Z = 22$)

2. C ($Z = 6$)

4. Al ($Z = 13$)

6. Fe ($Z = 26$)

Réponse :

1. B : $(1s)^2(2s)^2(2p)^1$
2. C : $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$
3. O : $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$
4. Al : $(1s)^2(2s)^2(2p)^6|(3s)^2(3p)^1$
5. Ti : $(1s)^2(2s)^2(2p)^6|(3s)^2(3p)^6(4s)^2|(3d)^2$
6. Fe : $(1s)^2(2s)^2(2p)^6|(3s)^2(3p)^6(4s)^2|(3d)^6$

III.2 Électrons de valence, électrons de cœur

Définition : électrons de valence

Les **électrons de valence** sont les électrons de nombre quantique n le plus élevé et les électrons qui appartiennent à des sous-couches **en cours de remplissage** (sous-couches incomplètes de n inférieur).

Application 7 : électrons de valence

➤ Reprendre les exemples précédents et identifier les électrons de cœur et de valence.

Réponse :

1. C : $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$
 $n_{\max} = 2$: 4 électrons de valence
2. Fe : $(1s)^2(2s)^2(2p)^6|(3s)^2(3p)^6(4s)^2|(3d)^6$ $n_{\max} = 4$: 8 électrons de valence

IV. La classification périodique

IV.1 Structure de la classification périodique des éléments

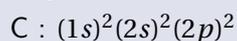
La classification périodique des éléments classe les éléments chimiques par Z croissant en mettant les uns au dessus des autres, les éléments qui ont la même configuration électronique de valence donc des propriétés chimiques proches (éléments isoélectroniques de valence).

colonnes (ou « familles »)	lignes (ou « périodes »)
Regroupent des éléments qui ont la même configuration électronique de valence (même nombre d'électrons et même type de sous-couches remplies) et donc la même réactivité chimique .	Tous les éléments de la ligne n ont (au moins) la couche numéro n peuplée par des électrons de valence.

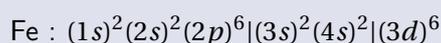
✍ Application 8 : position dans la CPE

➤ Reprendre la configuration électronique du carbone et celle du fer (application 6). Indiquer en justifiant précisément où les éléments carbone et fer sont placés dans la classification périodique des éléments.

Réponse :

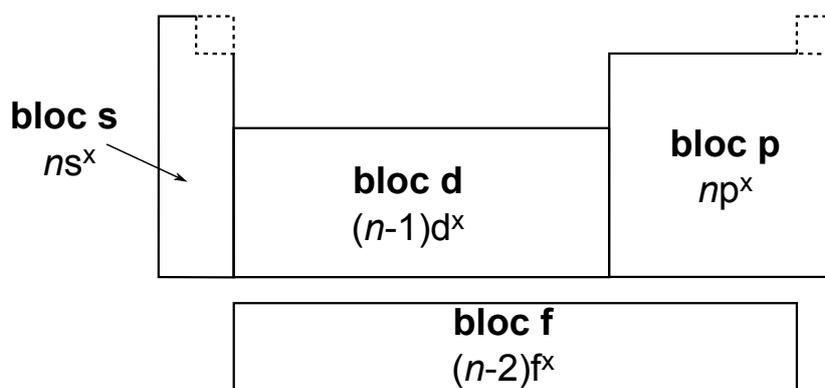


$n_{\max} = 2$: 2e ligne de la CPE. $(2p)^2$: 2e colonne du bloc p , donc 14e colonne de la CPE.



$n_{\max} = 3$: 2e ligne de la CPE. $(3d)^6$: 6e colonne du bloc d , donc 8e colonne de la CPE.

Le **bloc** dans lequel se trouve un élément indique quelle est la **sous-couche en cours de remplissage** (la plus haute en énergie donc).



Certaines familles du tableau périodique ont des propriétés très caractéristiques et ont historiquement été nommées suivant ces propriétés :

colonne I	colonne II	colonne XVII	colonne XVIII
alcalins	alcalino-terreux	halogènes	gaz rares/nobles
$[\text{GR}]ns^1$	$[\text{GR}]ns^2$	$[\text{GR}]ns^2(n-2)f^{14}(n-1)d^{10}np^5$	$[\text{GR}]$
tendance à perdre un électron pour donner le mono-cation qui a la structure du GR qui précède	tendance à perdre deux électrons pour donner le di-cation qui a la structure du GR qui précède	tendance à gagner un électron pour donner le mono-anion qui a la structure du GR qui suit	toutes les sous-couches de valence remplies
métaux très réducteurs	métaux réducteurs	X et X ₂ oxydants puissants	pas ou peu de réactivité chimique

IV.2 Périodicité des propriétés atomiques

IV.2.a Électronégativité

Définition : électronégativité

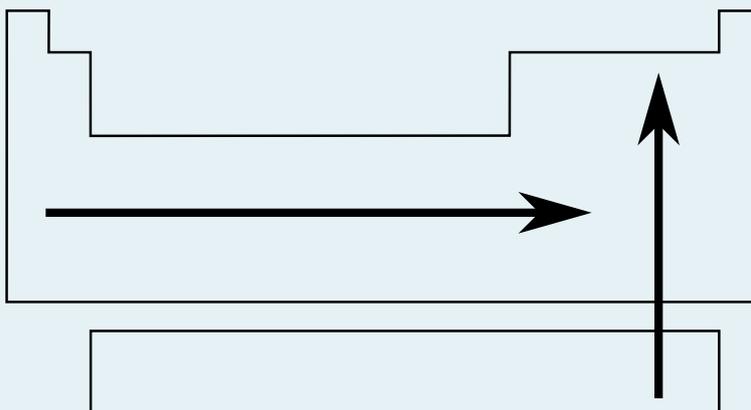
L'**électronégativité**, souvent notée χ , est une grandeur traduisant la capacité d'un atome à **attirer à lui** le doublet d'électron d'une liaison dans laquelle il est engagé.

! **Remarque** : C'est une grandeur non mesurable.

Il existe **plusieurs échelles** pour définir l'électronégativité. Globalement, toutes les échelles ont la même évolution pour les atomes. Le fluor (F) est le plus électronégatif (il attire facilement les électrons d'un doublet à lui) tandis que le francium (Fr) est le moins électronégatif (il cède facilement les électrons d'un doublet).

Propriété : évolution dans la CPE

L'**électronégativité** augmente **de bas en haut** et **de gauche à droite** dans la classification périodique.



L'**échelle de PAULING** est l'échelle la plus couramment utilisée par les chimistes. La différence d'électronégativité entre deux éléments A et B a alors pour expression :

$$\chi_{AB} = 0,102 \times \sqrt{\left(\mathcal{E}_{AB} - \sqrt{\mathcal{E}_{AA} \cdot \mathcal{E}_{BB}}\right)}$$

Où \mathcal{E}_{ij} est l'énergie de liaison dans la molécule diatomique ij exprimée en $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

L'échelle de MULLIKEN donne l'électronégativité à partir du produit de l'affinité électronique A_e d'un élément et de son énergie d'ionisation \mathcal{E}_i :

$$\chi = 0,317 \times \frac{A_e + \mathcal{E}_i}{2}$$

L'intérêt de l'échelle de MULLIKEN par rapport à celle de PAULING est d'utiliser des grandeurs atomiques indépendantes de l'environnement chimique. Elle permet ainsi de déterminer l'électronégativité des gaz nobles, ce que PAULING n'avait pu faire (il ne forme pas de liaison chimique).

IV.2.b Rayon atomique

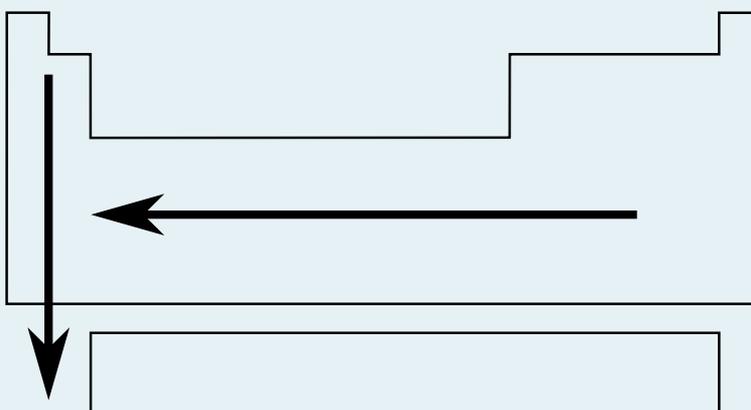
Définition : rayon atomique

Le **rayon atomique** est défini comme la **distance la plus probable** entre les électrons de valence de l'atome et le noyau.

Le rayon atomique est donc d'autant plus grand que la couche de valence est diffuse (n grand).

Propriété : évolution dans la CPE

Le **rayon atomique** augmente de **haut en bas** et de **droite à gauche** dans le tableau périodique.

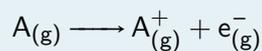


⚙️ Pour aller plus loin...

IV.2.c Énergie d'ionisation

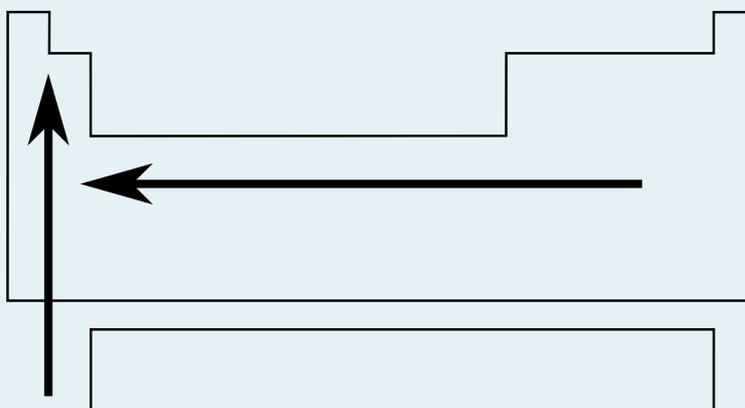
Définition : énergie d'ionisation

L'**énergie d'ionisation** est l'énergie minimale à **fournir** pour **arracher un électron** à un atome à l'état **gazeux** dans son état fondamental.



Propriété : évolution dans la CPE

L'**énergie d'ionisation** augmente **de bas en haut** et **de droite à gauche** dans la classification périodique.



Application 9 : ionisations

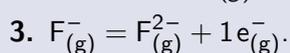
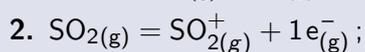
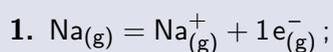
Écrire les réactions chimiques correspondant à l'énergie d'ionisation pour les entités suivantes :

1. Na ;

2. SO₂ ;

3. F⁻.

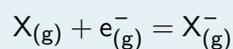
Réponse :



IV.2.d Affinité électronique

Définition : affinité électronique

L'**affinité électronique** est l'énergie libérée lors de la réaction suivante, dans laquelle les constituants sont à l'**état gazeux** :



SYNTHÈSE

Les « savoirs »

- ☞ Donner une représentation schématique d'un atome, ainsi que l'ordre de grandeur de ses dimensions.
- ☞ Donner la constitution d'un atome en terme de particules.
- ☞ Discuter de la charge électrique d'un atome et des entités qui le composent.
- ☞ Définir deux isotopes.
- ☞ Définir la notion de mole.
- ☞ Donner le nom et la définition des quatre nombres quantiques.
- ☞ Énoncer les règles de KLECHKOWSKI, HUND et PAULI.
- ☞ Définir l'électronégativité. Indiquer son évolution dans la classification périodique.
- ☞ Définir le rayon atomique. Donner son évolution dans la classification périodique.

Les « savoir-faire »

- ☞ Établir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion à l'état fondamental.
- ☞ Savoir relier la configuration électronique d'un atome à sa place dans la classification périodique.