

L'atome - Fiche de cours

1. Constitution de l'atome

L'atome est électriquement neutre (rayon de l'ordre de $10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA}$) est constitué par :

- un noyau (rayon de l'ordre de 10^{-15} m ou 1 fermi)
- des électrons

2. Caractéristiques du noyau

Le noyau (nucléide) est défini par : ${}^A_Z X$

- A nombre de nucléons (protons + neutrons)
- Z nombre de protons

- Elément chimique

Chaque valeur de Z définit un élément ; actuellement 118 éléments sont connus (dont 98 naturels)

- Isotopes

Les atomes ayant le même nombre de protons (propriétés chimiques identiques) mais un nombre de neutrons différent (propriétés physique différentes) sont isotopes

3. Masses atomiques

a. Carbone 12

- nucléide de référence ${}^{12}_6 C$
- masse d'un atome $1,993 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$

b. Unité de masse atomique

$1u = 1/12$ de la masse d'un atome de carbone 12
 $1u = 1 \text{ uma} \approx 1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$; $1u = 1 \text{ Da}$ (Dalton)

c. Nombre d'Avogadro et mole

- Le nombre d'Avogadro représente le nombre d'atomes qu'il y a dans 12 grammes de ${}^{12}_6 C$; $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ entités
- La mole est un changement d'échelle vers le macroscopique
- $n = \frac{N_{\text{entités}}}{N_A}$ unité en mol

d. Masse des constituants de l'atome

- électron : $m_e = 9,108 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 5,5 \cdot 10^{-4} u$
- proton : $m_p = 1,6725 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,0073 u$
- neutron : $m_n = 1,6748 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,0087 u$

Si l'on considère la masse des électrons négligeables :
masse noyau \approx masse atome $\approx Au$

e. Masse atomique des éléments naturels

Les éléments naturels sont les mélanges de plusieurs isotopes
Le pourcentage des divers isotopes s'appelle l'abondance isotopique

La masse molaire d'un élément est définie comme la moyenne pondérée des masses molaires des divers isotopes

4. Structure électronique de l'atome

a. Généralités

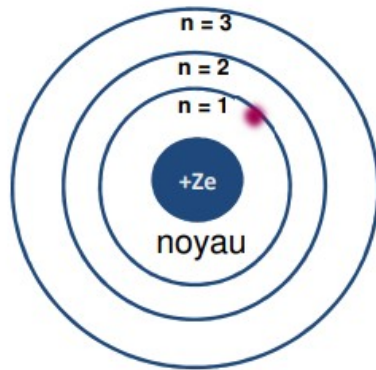
- L'atome peut interagir avec les rayonnements électromagnétiques
- en 1900 Plank émet l'hypothèse que les ondes électromagnétiques transportent l'énergie par paquet ou par quanta
- en 1905 Einstein assimile ces quanta à des particules sans masse et non chargées appelés photon

Tout rayonnement monochromatique est considéré comme un flux de photons transportant un quantum d'énergie :

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

b. Modèle de Bohr (1913)

Les électrons sont placés sur des orbites circulaires stables en couche avec une énergie définie



- rayon des orbites circulaires

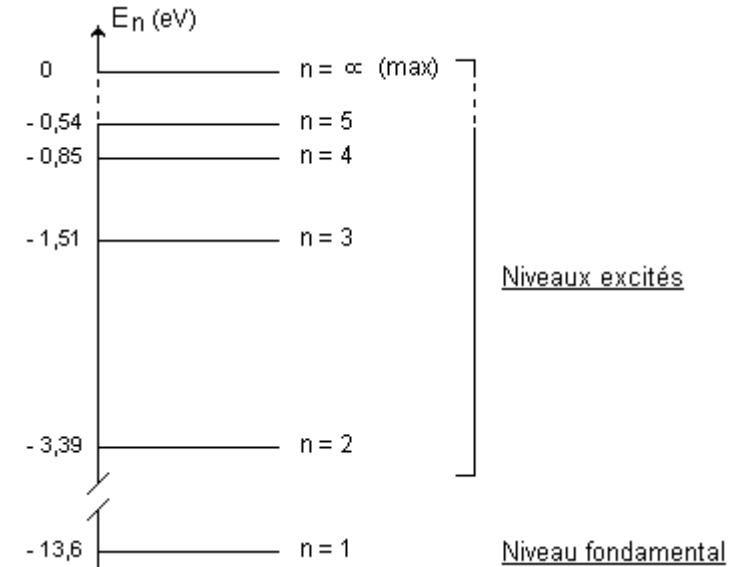
$$r_n = \frac{0,53}{Z} \cdot n^2 \text{ en } \text{Å}$$

- niveaux d'énergie

$$E_n = \frac{-13,6}{n^2} \cdot Z^2 \text{ en eV}$$

c. L'élément hydrogène

- diagramme énergétique atome d'hydrogène



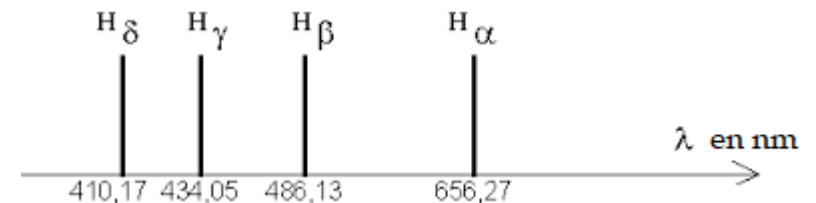
- transitions énergétiques

Le passage d'un niveau d'énergie à un autre s'accompagne d'une onde électromagnétique par :

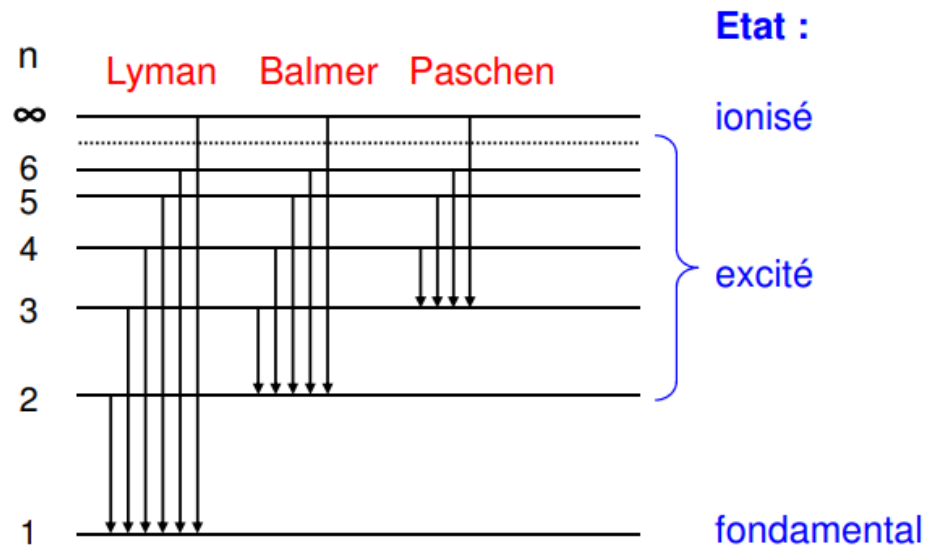
- absorption lorsque $E \nearrow$
- émission lorsque $E \searrow$

- spectre d'émission

Lorsque l'on soumet de l'hydrogène à un apport énergétique, on peut observer le spectre d'émission de l'hydrogène



- séries spectrales



- série de Lyman : ultraviolet
- série de Balmer : visible
- série de Pashen : infrarouge

d. Limites du modèle de Bohr

- en contradiction avec la mécanique classique (l'électron devrait tomber sur le noyau)
- en contradiction avec les incertitudes de Heisenberg (on ne peut pas connaître avec précision la position et la vitesse d'un électron)
- n'explique pas toutes les raies d'émission des atomes polyélectroniques

f. Modèle ondulatoire de Schrödinger

La mécanique ondulatoire définit l'électron avec son énergie et sa probabilité de présence dans l'espace

- Modèle de De Broglie

En 1924 De Broglie énonce le modèle ondulatoire des particules

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

- Equation de Schrödinger indépendante du temps

Les particules sont associées à une fonction d'onde $\Psi(x, y, z)$

Le module au carré de cette fonction d'onde a une signification physique ; il représente la probabilité de présence dans un volume donné

$$\int |\Psi|^2 dV = 1$$

L'équation différentielle de Schrödinger indépendante du temps pour un électron s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (V - E) \cdot \Psi$$

E énergie totale de l'électron

V énergie potentielle de l'électron

m masse de l'électron

- Les nombres quantiques

La résolution de l'équation de Schrödinger utilise 3 nombres quantiques :

- nombre quantique principal n

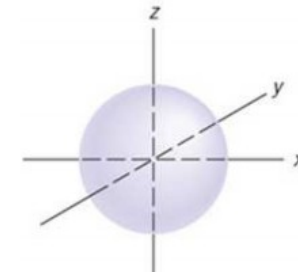
Définit la couche et le niveau d'énergie

- nombre quantique secondaire l

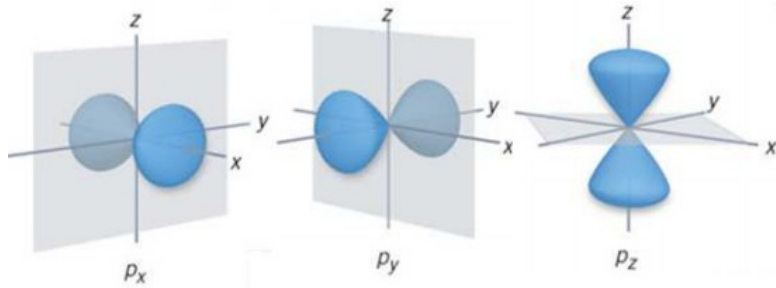
Définit la forme de l'orbitale : $0 \leq l \leq n-1$

Une orbitale est un volume de l'espace où l'électron peut se situer ; les premières orbitales sont :

- orbitale s (sphérique)



- orbitale p (en forme de lobe)



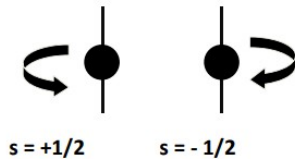
- nombre quantique magnétique m

Définit l'orientation de l'orbitale : $-l \leq m \leq l$

Le principe d'exclusion de Pauli utilise un quatrième nombre quantique :

- nombre quantique de spin s

Définit le sens de rotation de l'électron sur lui-même



5. Les atomes polyélectroniques

a. Règles de remplissage des couches

Le remplissage des couches électroniques pour les atomes est défini par 3 règles :

- principe de stabilité

La stabilité est maximale pour une énergie maximale

- principe d'exclusion de Pauli

Il ne peut y avoir que 2 électrons qui occupent une même case quantique



Spin opposés = spin antiparallèles

Electrons appariés

- règle de Hund

Les électrons se placent en premier en spin parallèle

b. Règle de Klechkowski

En tenant compte des 3 règles précédentes, on obtient la règle de Klechkowski :

- les électrons sont rangés par $n+l$ croissant

- pour un même $n+l$ les électrons sont rangés par n croissant

~~1s~~
~~2s 2p~~
~~3s 3p 3d~~
~~4s 4p 4d 4f~~
~~5s 5p 5d 5f ...~~
~~6s 6p 6d~~

L'ordre de remplissage est donc :

$1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow 3d \rightarrow 4p \rightarrow 5s \rightarrow 4d \rightarrow 5p \rightarrow 6s \rightarrow \dots$

c. Configuration électronique des atomes

Pour un atome, on écrit les électrons présents sur chaque couche / sous-couche

exemple : $[C] = 1s^2 2s^2 2p^2$

d. Anomalies de remplissage

$[{}_{24}Cr] = [Ar] 3d^5 4s^1$

$[{}_{29}Cu] = [Ar] 3d^{10} 4s^1$

$[{}_{42}Mo] = [Kr] 4d^5 5s^1$

$[{}_{45}Rh] = [Kr] 4d^8 5s^1$

$[{}_{47}Ag] = [Kr] 4d^{10} 5s^1$

$[{}_{28}Ni] = [Ar] 3d^9 4s^1$

$[{}_{41}Nb] = [Kr] 4d^4 5s^1$

$[{}_{44}Ru] = [Kr] 4d^7 5s^1$

$[{}_{46}Pd] = [Kr] 4d^9 5s^1$

e. Configuration électronique des ions

On recherche la configuration électronique de l'atome associé puis on retire/ajoute les électrons sur les couches les plus externes

6. Classification périodique

a. Description

- en 1869 Mendeleïev établit une classification des éléments selon l'ordre croissant de leur nombre de masse
- la classification moderne est établie selon :
 - l'ordre croissant des numéros atomiques
 - en plaçant dans une même colonne des éléments qui ont les mêmes propriétés chimiques

b. Familles chimiques

- Les alcalins

Colonne 1 $[X]=...ns^1$

- Les alcalino-terreux

Colonne 2 $[X]=...ns^2$

- Les éléments de transition

Colonne 3 à 12 $[X]=...ns^2(n-1)d^x$ avec $1 \leq x \leq 10$

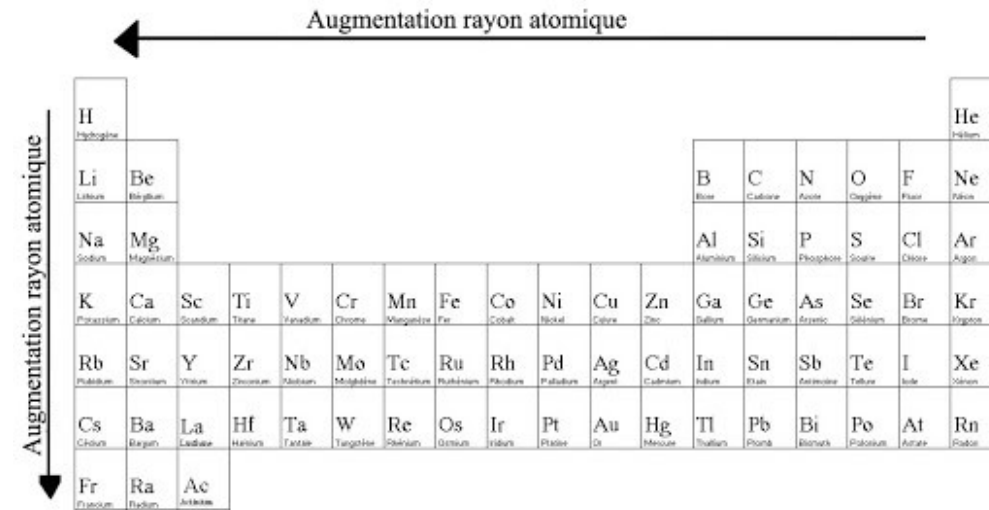
- Halogènes

Colonne 17 $[X]=...ns^2 np^5$

- Gaz rares

Colonne 18 $[X]=...ns^2 np^6$

c. Rayon atomique



d. Les ions

L'énergie de première ionisation varie en sens opposé du rayon atomique

e. L'affinité électronique

L'énergie mise en jeu par un atome pour capturer des électrons s'appelle affinité électronique

f. Le rayon ionique

$$R_{cation} < R_{atome}$$

$$R_{anion} > R_{atome}$$

g. L'électronégativité

L'électronégativité est la tendance à attirer des électrons dans une liaison covalente ; l'électronégativité varie en sens opposé du rayon atomique