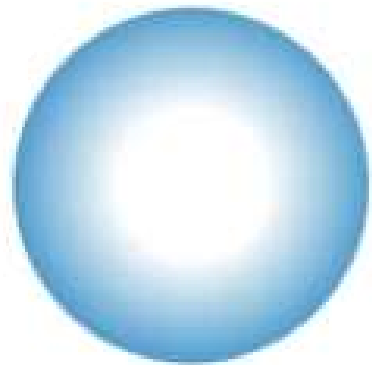
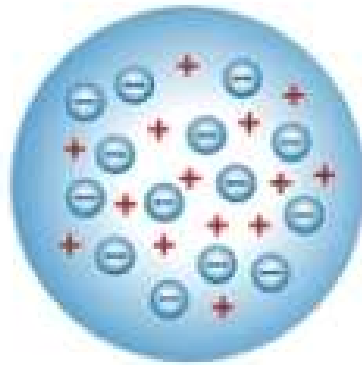


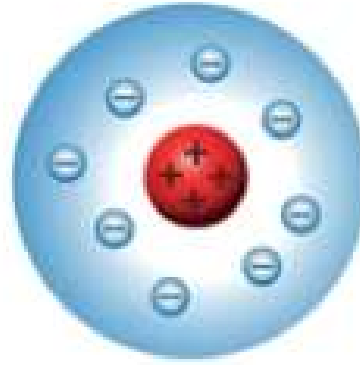
Atomic Models



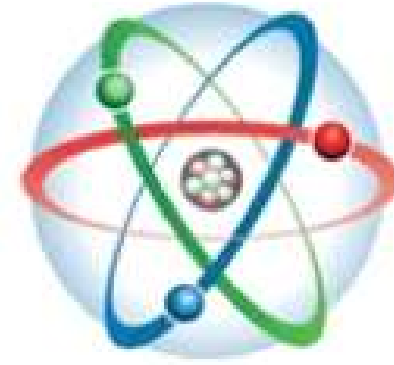
1803



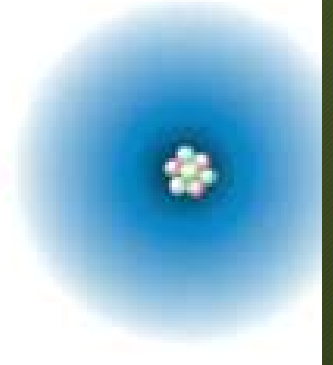
1904



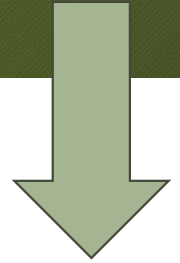
1911



1913



1926



Le modèle quantique de l'atome

Pourquoi étudier un nouveau modèle de l'atome?

Ce modèle est plus proche de la réalité => il permet de mieux comprendre et expliquer le comportement chimique réel

Ce modèle s'attache à la structure des e- dans l'atome
=> il sert de base pour construire de nouveaux apprentissages dans d'autres cours (chimie organique, biochimie, chimie analytique)

De nombreuses techniques d'analyse utilisées en laboratoire médical (spectres UV-visible, IR, RMN, l'absorption atomique) reposent sur des transitions électroniques ou des phénomènes quantiques

Objectifs du chapitre



Expliquer la structure électronique sur base des concepts quantiques



Interpréter des données ou des représentations liées aux orbitales atomiques



Relier la structure électronique aux propriétés chimiques et à la réactivité



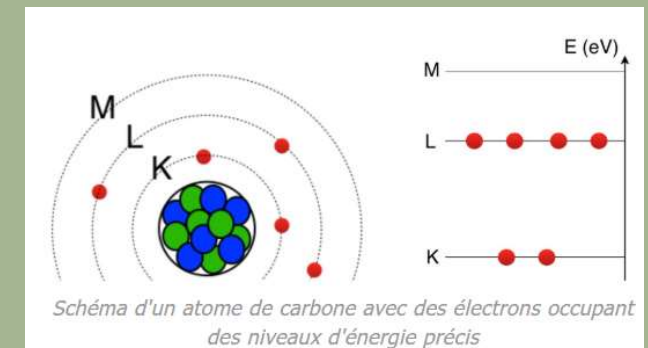
Résoudre des exercices impliquant les règles de remplissage des orbitales atomiques



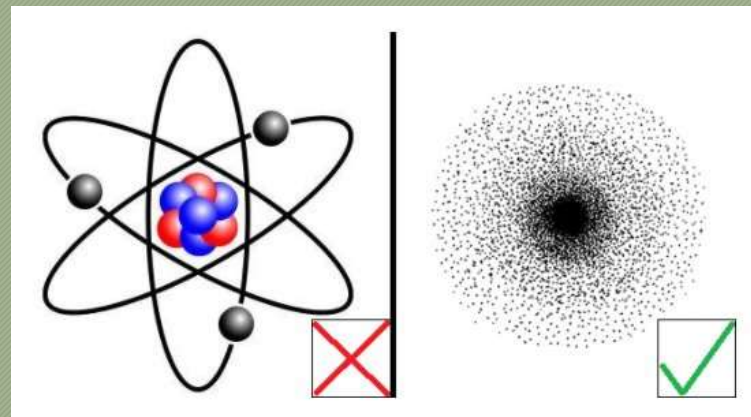
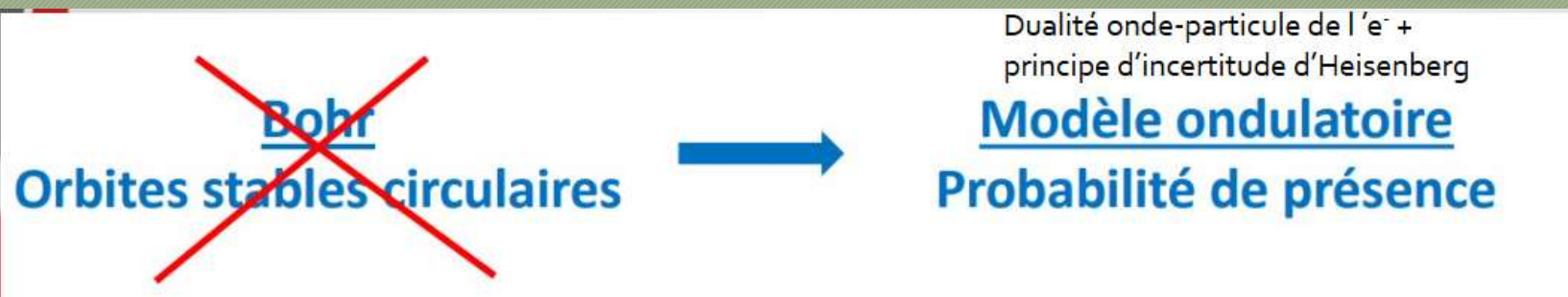
Analyser des phénomènes chimiques simples sur base du modèle quantique

Le modèle de l'atome que vous connaissez: modèle de Bohr

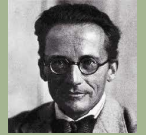
- Les e⁻ gravitent sur des orbites autour du noyau; on dit qu'ils occupent des **couches électroniques** (K -> n=1, L -> n=2, M -> n=3, etc)
- Les couches électroniques correspondent à des niveaux d'énergie; **plus la couche est loin du noyau plus son niveau d'énergie est élevé (n grand)**
- Le nombre de places est limité sur chaque couche:
 $Ne_{max} = 2.n^2$



Les apports de la physique quantique



SCHRÖDINGER : pilier de la théorie quantique

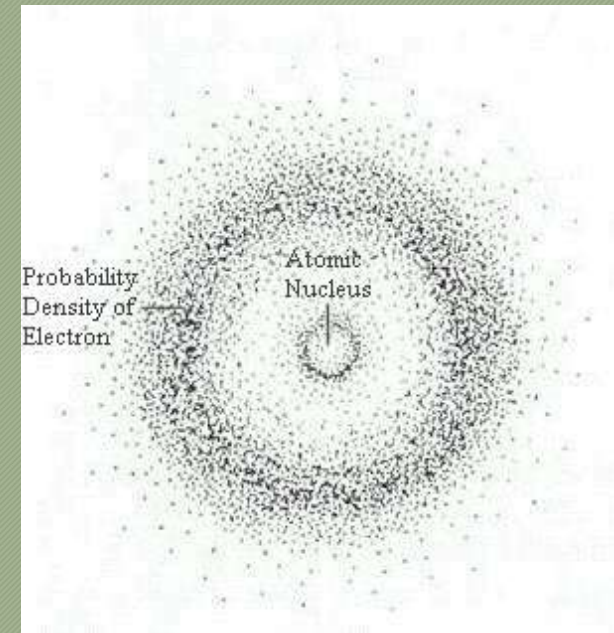


$$H \Psi_n = E_n \Psi_n$$

Ψ_n = fonction de l'onde associée à l'e-

E_n = énergie d'un niveau caractérisé par n

H = Hamiltonien = opérateur mathématique



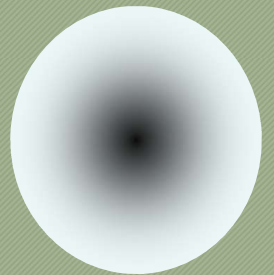
SCHRÖDINGER : pilier de la théorie quantique

- La fonction d'onde (Ψ) associée à l'électron, n'a pas de signification physique.
- Son carré (Ψ^2) est proportionnel à la probabilité de trouver l'électron dans un certain volume autour du noyau
- Plus Ψ^2 est élevé et plus la chance de trouver l'électron dans le volume sélectionné est élevée

Le modèle quantique: définitions

- **Nuages électroniques ou orbitales atomiques:**
 - ce sont les solutions de l'équation de Schrödinger
 - chacun.e représente une région de l'espace autour du noyau où la probabilité de présence de l'e⁻ est maximale
 - ces régions de l'espace ont des niveaux énergétiques bien définis => on dit que l'énergie est quantifiée

Exemple: dans ce nuage électronique ou cette orbitale atomique 1s, il y a 95% de chance de trouver l'électron 1s



Le modèle quantique: définitions

- Les trois premiers nombres quantiques n , l , m caractérisent les orbitales atomiques; ce sont leurs étiquettes
- Le quatrième nombre quantique s décrit l' e^- qui « se trouve » dans une orbitale atomique donnée

Etude des quatre nombres quantiques

1. Nombre quantique principal

$n=1, 2, 3, 4, \dots$ (couche K, L, M, N,...)

- détermine la **distance** du noyau à l'orbitale
- détermine l'**énergie** de l'orbitale
- plus n est grand, plus l'orbitale est loin du noyau et plus son énergie est élevée

2. Nombre quantique secondaire ou azimutal

$l=0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ (sous-couche s, p, d, f,...)

Indique la **forme/géométrie** de l'orbitale

Etude des quatre nombres quantiques

3. Nombre quantique magnétique

Décrit l'**orientation** dans l'espace de l'orbitale

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

4. Nombre quantique de spin

L'électron étant assimilé à un aimant peut avoir deux orientations $\uparrow$ et $\downarrow$ correspondant à $s = +\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$

$$s = -\frac{1}{2} \text{ ou } +\frac{1}{2}$$

Désignation des orbitales atomiques

On indique le numéro de la couche ($n=1, 2, 3, \dots$) suivi de la lettre correspondant à la sous-couche ($l=0 \rightarrow s, l=1 \rightarrow p, \dots$)

Exemples:

- l'orbitale 2s désigne l'orbitale de la couche $n=2$ et de la sous-couche $l=0$
- L'orbitale 3p désigne l'orbitale de la couche $n=3$ et de la sous-couche $l=1$

Tableau des différentes valeurs de m possibles pour des couples n (de 1 à 4) et l donnés

Couche	Sous-couche	n	l	m	Types orbitales	Nombre orbitales
K	1s	1	0	0	1 orbitale 1s	1
L	2s	2	0	0	1 orbitale 2s	4
	2p		1	-1, 0, +1	3 orbitales 2p	
M	3s	3	0	0	1 orbitale 3s	9
	3p		1	-1, 0, +1	3 orbitales 3p	
	3d		2	-2, -1, 0, +1, +2	5 orbitales 3d	
N	4s	4	0	0	1 orbitale 4s	16
	4p		1	-1, 0, +1	3 orbitales 4p	
	4d		2	-2, -1, 0, +1, +2	5 orbitales 4d	
	4f		3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	7 orbitales 4f	

⇒ Nombre total d'orbitales possibles pour un niveau d'énergie n = n^2

Exercice 1 a) à d) des notes

- a) Quelle est la lettre qui désigne la couche $n=3$?
- b) Pour cette couche, quelles sont les valeurs de l permises ?
- c) Combien d'e- chaque sous-couche de $n=3$ peut-elle accueillir ?
- d) Comparez la somme du nombre d'e- maximum de chaque sous-couche de la couche $n = 3$ à celle prévue par la règle $N_{e_{\max}} = 2.n^2$.

Réponse

a) $n=3 \Rightarrow$ couche M

b) $n=3 \Rightarrow l$ peut prendre comme valeur 0, 1 ou 2

c) Sous-couche $l=0 \Rightarrow m=0$

$\Rightarrow$ 1 orbitale pouvant accueillir $2e^-$

Sous-couche $l=1 \Rightarrow m=-1,0,+1$

$\Rightarrow$ 3 orbitales pouvant accueillir chacune $2e^-$ soit un total de $6e^-$

Sous-couche $l=2 \Rightarrow m=-2,-1,0,+1,+2$

$\Rightarrow$ 5 orbitales pouvant accueillir chacune $2e^-$ soit un total de $10e^-$

18 e^-

d) $Ne_{\text{max}} = 18 e^-$ et $2.n^2 = 2.3^2 = 18$

$\Rightarrow$ Donc $Ne_{\text{max}} = 2.n^2$

Exercice 3 des notes

Combien d'e- peut-on mettre au maximum ($N_{e-\max}$):

- dans la couche $n=1$?
- dans la couche $n=2$?
- dans la couche $n=4$?

Réponse

$$Ne_{\max} = 2.n^2$$

- couche $n=1 \Rightarrow Ne_{\max} = 2.1^2 = 2 e^-$
- couche $n=2 \Rightarrow Ne_{\max} = 2.2^2 = 8 e^-$
- couche $n=4 \Rightarrow Ne_{\max} = 2.4^2 = 32 e^-$

Exercice

- Parmi les ensembles suivants de nombres quantiques, indiquer ceux qui sont possibles pour un électron dans un atome.

n	l	m	s
3	1	0	+1/2
2	2	0	-1/2
4	2	-2	+1/2
3	1	2	+1/2
2	0	0	-1/2

- Pour chaque combinaison possible, indiquer quelle orbitale atomique (OA) est désignée.

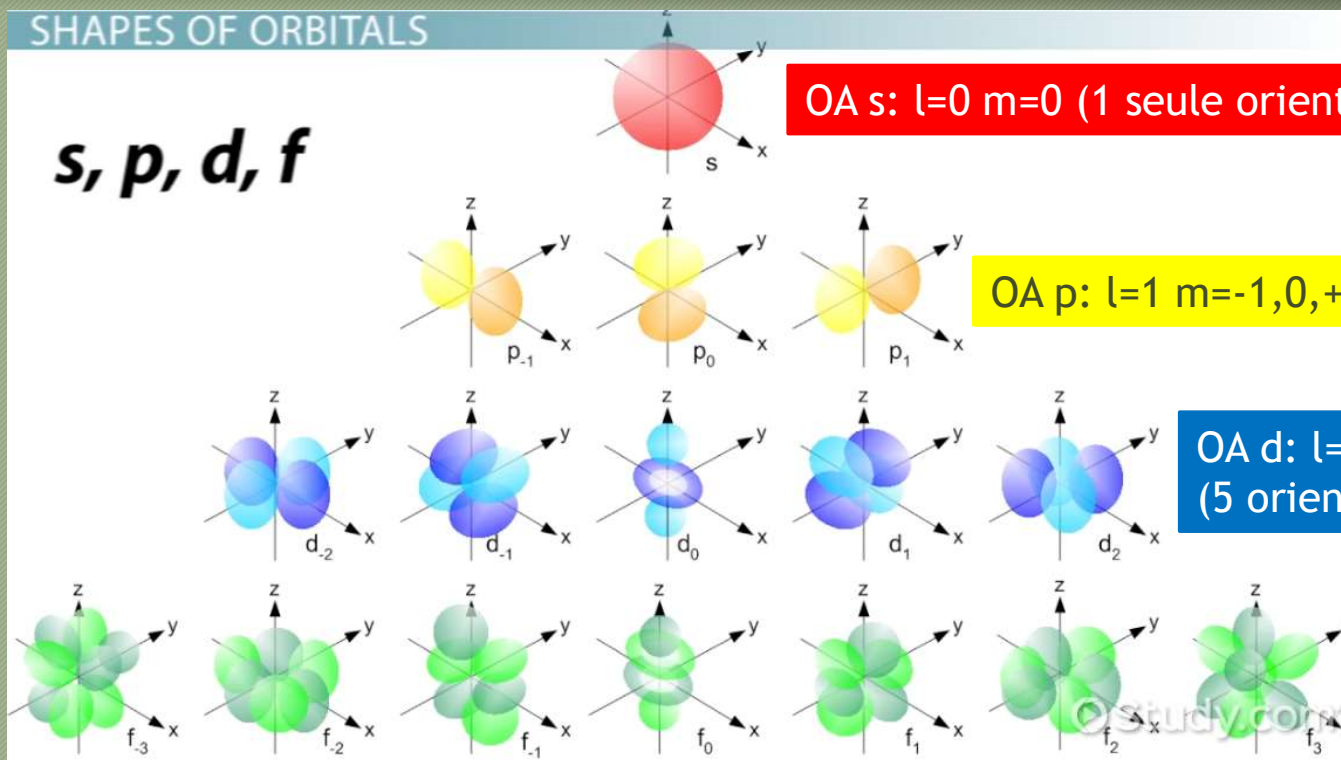
Réponse

n	l	m	s	Statut	OA
3	1	0	+1/2	✓ Possible	3p
2	2	0	-1/2	✗ Impossible (l doit être $\leq n-1 \rightarrow$ ici $2 > 1$)	—
4	2	-2	+1/2	✓ Possible	4d
3	1	2	+1/2	✗ Impossible (m doit être entre -l et +l $\rightarrow$ ici $2 > 1$)	—
2	0	0	-1/2	✓ Possible	2s

Exercices des notes pages 57-58
7-8-9-10-12



Formes et orientations des OA

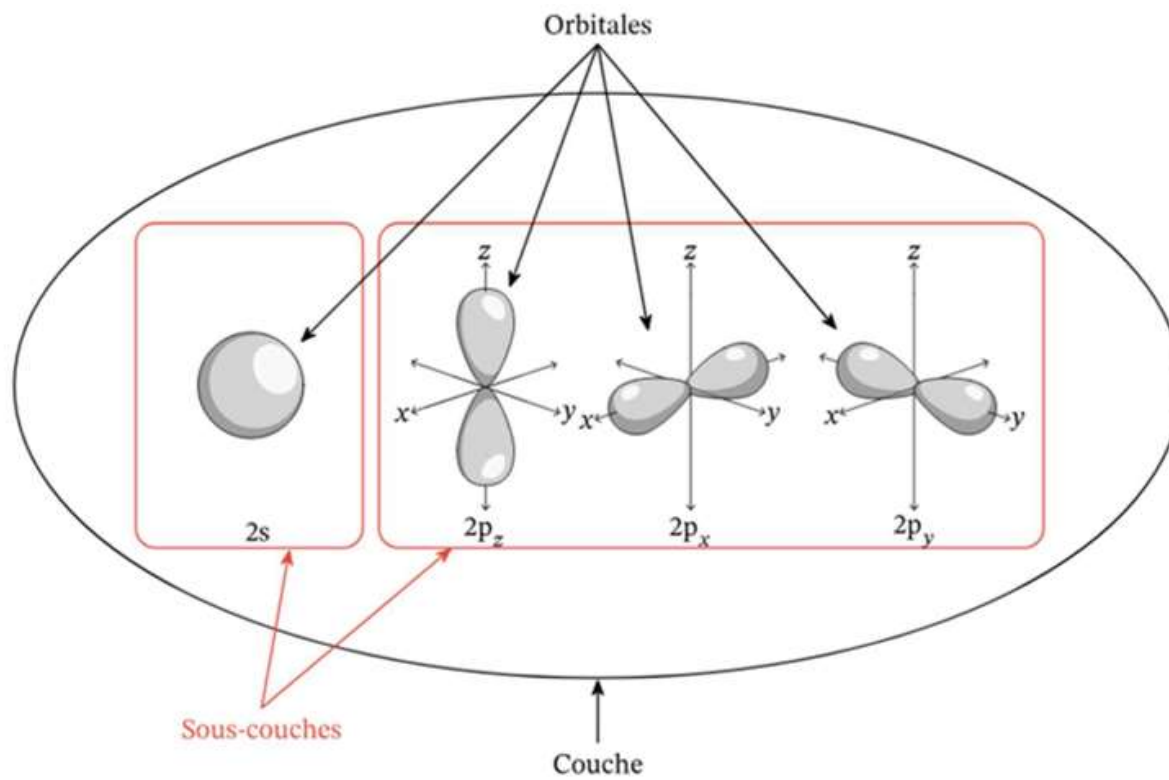


OA s: $l=0$ $m=0$ (1 seule orientation)

OA p: $l=1$ $m=-1,0,+1$ (3 orientations)

OA d: $l=2$ $m=-2,-1,0,+1,+2$ (5 orientations)

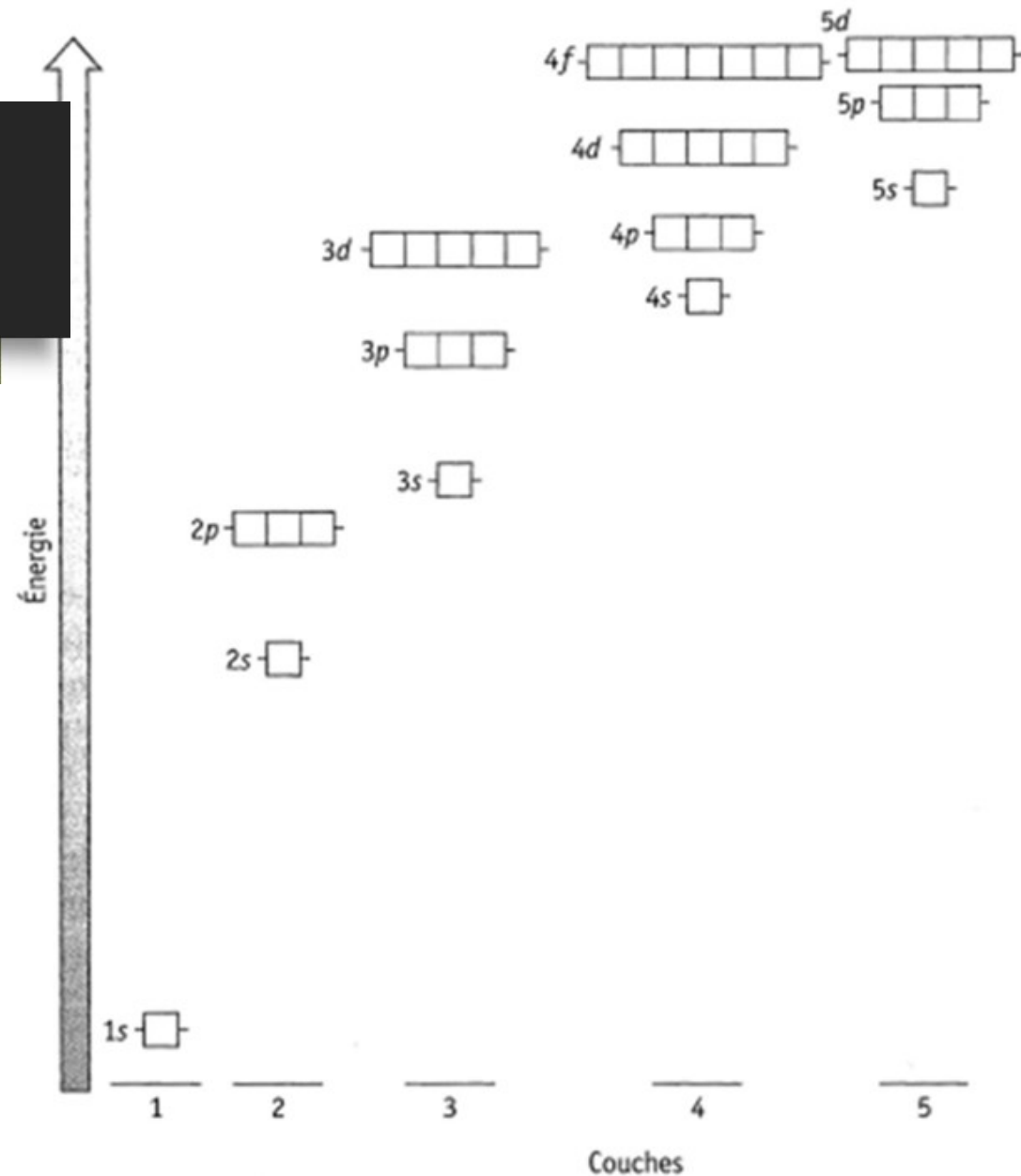
OA f: $l=3$ $m=-3,-2,-1,0,+1,+2,+3$ (7 orientations)



FICHE EXPLICATIVE DE LA LEÇON: ORBITALES ATOMIQUES | NAGWA

Diagramme énergétique

- Il représente les niveaux d'énergie de l'atome
- Chaque orbitale est représentée par une case quantique $\square$
- Les différents e⁻ seront placés dans ces cases (2e⁻ par case au plus) et représentés par des flèches $\uparrow$ ou $\downarrow$



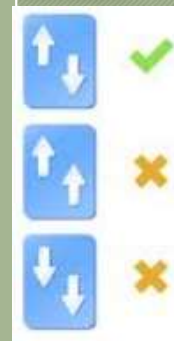
Remplissage des OA pour un atome à l'état fondamental

Règle 1 = principe de stabilité

« Les e- occupent les différentes OA dans l'ordre des énergies croissantes »
-> cf. règle de Klechkowski

Règle 2 = principe d'exclusion de Pauli

« Deux e- d'un même atome ne peuvent avoir leurs quatre nbres quantiques identiques »

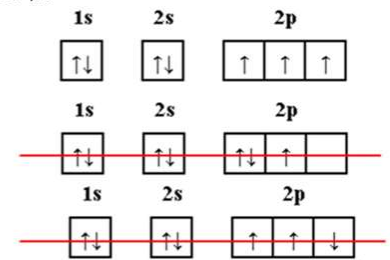


Règle 3 = règle de Hund

« Lorsque plusieurs OA de même énergie sont disponibles, les e- se placent de façon à en occuper le plus grand nombre possible.

Les e- célibataires occupent ces OA avec des spins identiques avant de se placer avec des spins opposés »

Exemple : pour l'atome d'azote ${}_7\text{N}$



Question: remplis
les OA pour
l'atome de soufre
($Z=16$) à l'état
fondamental

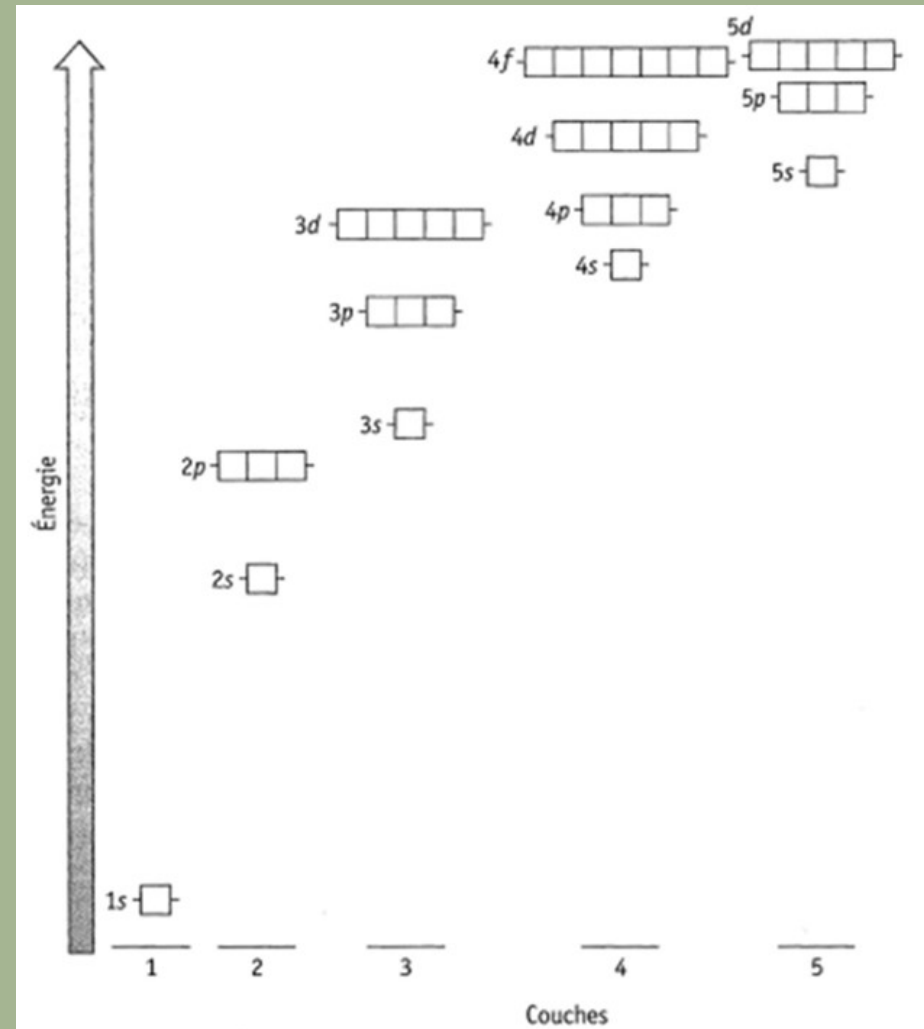
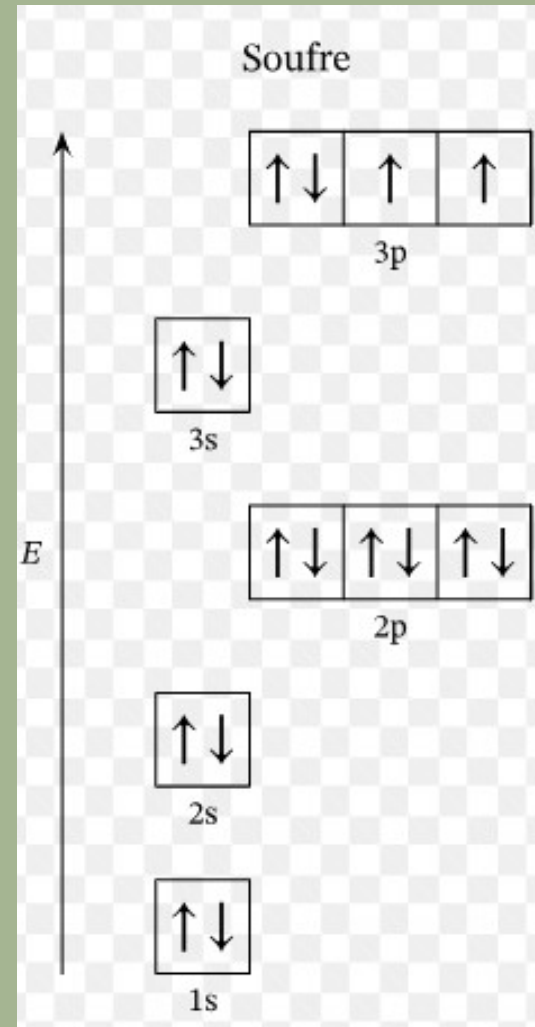
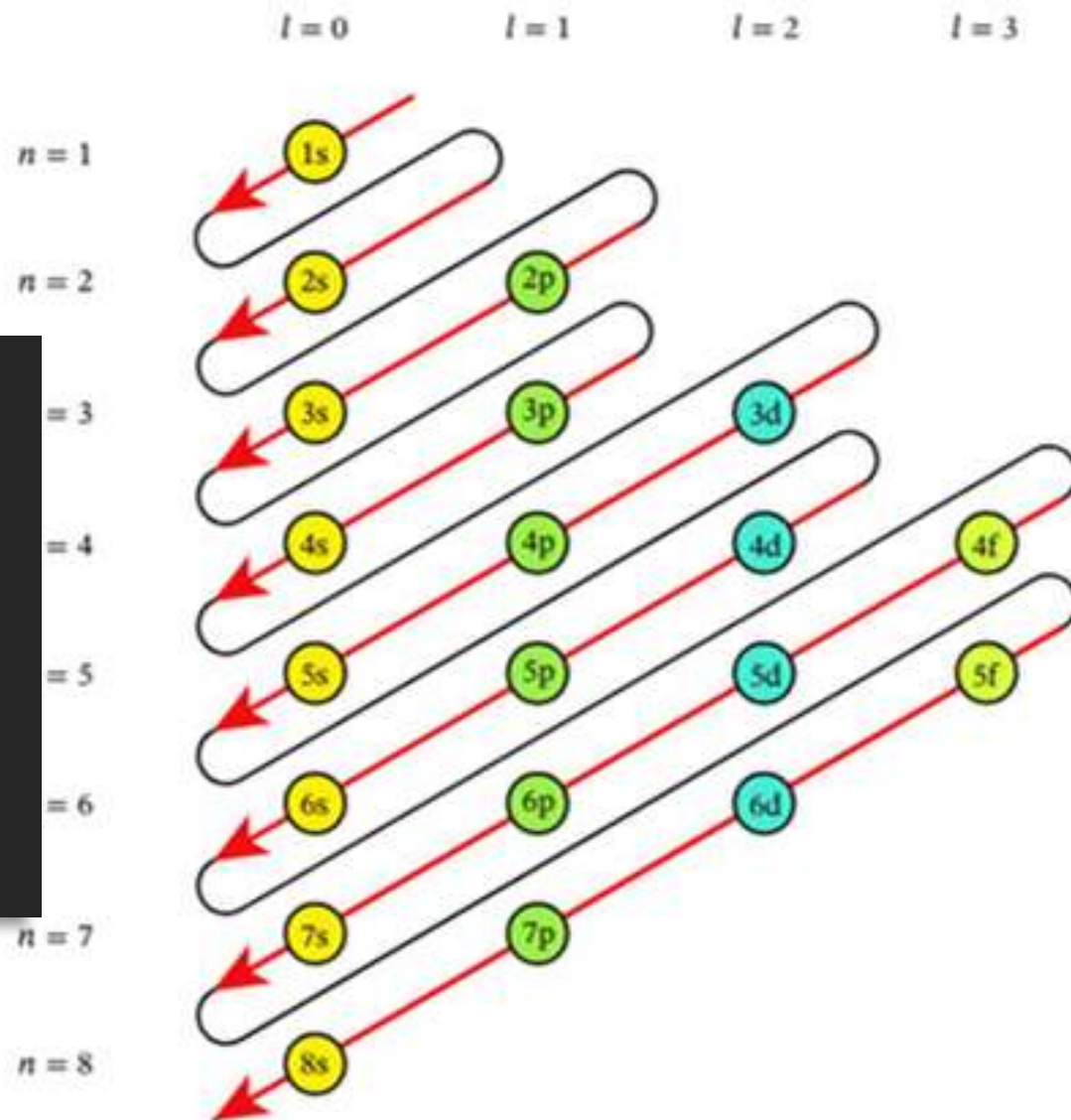


Diagramme énergétique du soufre à l'état fondamental



Comment retenir
l'ordre des
énergies
croissantes pour
les OA? Cf. règle 1

Moyen mnémotechnique =
règle de Klechkowski



Du diagramme énergétique à la configuration électronique (CE) d'un atome

- La CE est une autre manière de représenter la façon dont les e- se répartissent dans les OA

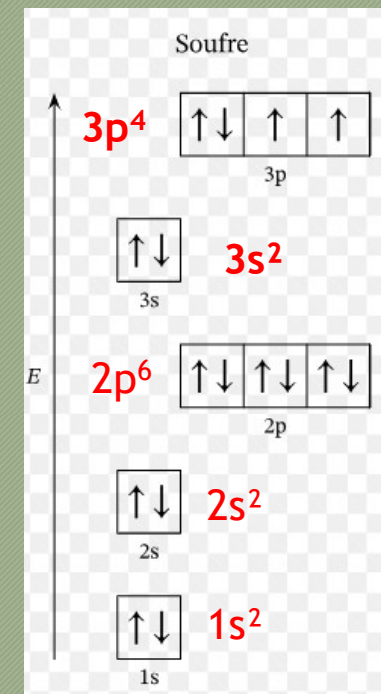
- Exemple:

pour l'atome de soufre

CE: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

- Schéma de Lewis du soufre: $\cdot \overline{\text{S}} \cdot$ 6 e- de valence

⇒ les e- de valence sont ceux de la couche la plus éloignée du noyau (n le plus grand, soit la couche n=3 pour le soufre)



Procédure pour établir la CE d'un atome à l'état fondamental

1. Répartir les e- en suivant les règles de remplissage des orbitales atomiques (stabilité, Pauli, Hund)
2. Écrire la configuration électronique en respectant les points suivants :
 - a) on fait se succéder les couches par n croissant
 - b) dans une couche, on fait se succéder les sous-couches par l croissant
 - c) on affecte à chaque sous-couche un exposant qui indique le nombre d'électrons qu'elle contient

Configuration électronique réduite ou abrégée

- Il s'agit d'une écriture simplifiée de la CE d'un atome à l'état fondamental
- Elle permet de se concentrer sur les e- de valence
- Etapes:
 1. Identifier le gaz rare qui précède directement l'élément concerné dans le TP
 2. Ecrire le symbole de ce gaz rare entre [] pour représenter sa CE complète
 3. Continuer la CE normalement, à partir de la première sous-couche non représentée, pour les électrons restants (électrons de valence).
- Exemple: soufre $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ ou $[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$

Question

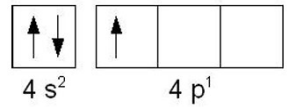
Le Gallium ($Z=31$) est un matériau stratégique dans l'industrie des semi-conducteurs.

- a) Donne sa CE complète et sa CE abrégée.
- b) Combien possède-t-il d'e- de valence ?
- c) Représente les e- de valence du Gallium dans leur case quantique.
- d) Pour chacun des e- de valence du Gallium, donne ses 4 nbres quantiques.

Réponse

a) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$ et $[\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$

b) 3 e- de valence (couche 4)

c) e- de valence 

d) $n=4$ $l=0$ $m=0$ $s=+1/2$

$n=4$ $l=0$ $m=0$ $s=-1/2$

$n=4$ $l=1$ $m=-1, 0 \text{ ou } +1$ $s=+1/2 \text{ ou } -1/2$

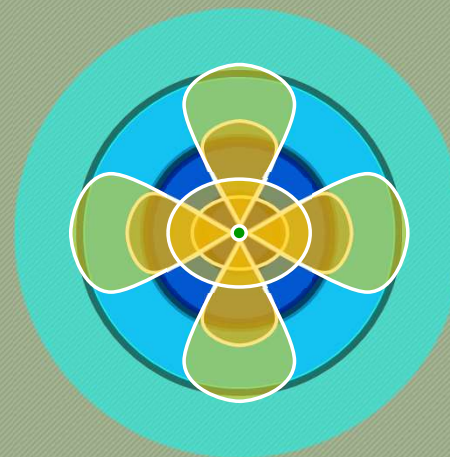
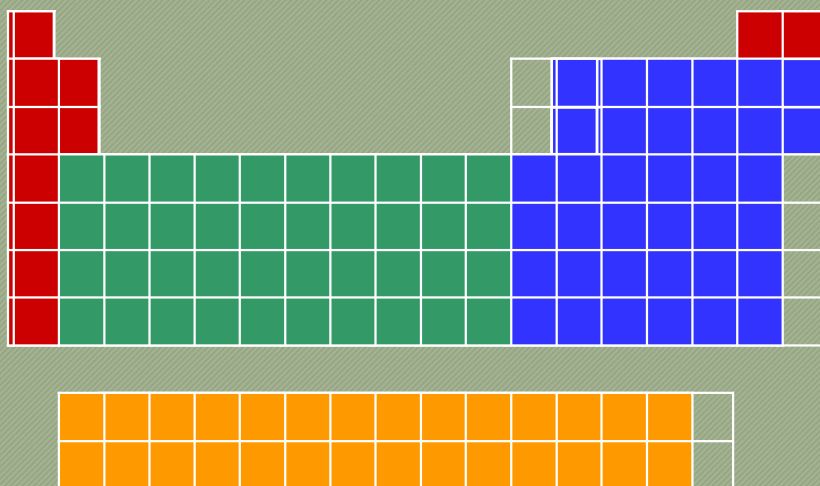
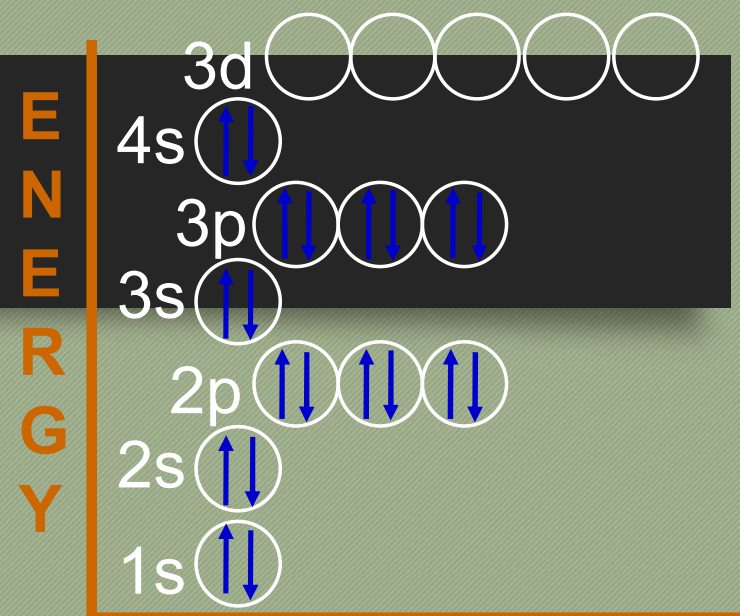
Exercices des notes pages 57 à 59
1e - 2 - 4 - 5 - 6 - 11 - 14



Etude du tableau périodique

à la lumière de la configuration électronique des atomes

n	l	m_l	m_s
1	0(s)	0	
2	0(s)	0	
	1(p)	-1, 0, 1	
3	0(s)	0	
	1(p)	-1, 0, 1	
	2(d)	-2, -1, 0, 1, 2	
4	0(s)	0	



Movie: periodic table of the elements: t10-20

Familles et périodes du TP

https://www.youtube.com/watch?v=Vnz0n_MlClQ

Périodes

Numéro de la période	Nombre de couches occupées
1	1 -> couche K
2	2 -> couches K, L
3	3 -> couches K, L, M
4	4 -> couches K, L, M, N
...	

7 périodes

https://www.unamur.be/sciences/enligne/transition/chimie/fichesderevision/revision2/periode_s.htm

Blocs et Familles

1s 2s 3s 4s 5s 6s 7s

3d 4d 5d 6d

4f 5f

s-block p-block d-block f-block

<https://dr282zn36sxxg.cloudfront.net/datastreams/f-d:8c32572d015a1ad78889d949261298b43e44acc227c48ee89c136ede+IMAGE+IMAGE.1>

élément W 74

numéro atomique

alcalins alcalino-terreux bloc d bloc p gaz nobles

Bloc s

bloc f

<http://scientific.wifeo.com/tableau-periodique-des-elements.php>

Atomes des familles principales des 3 premières lignes (périodes) du TP

FAMILLE →

Ia

IIa

IIIa

IVa

Va

VIa

VIIa

VIIIa

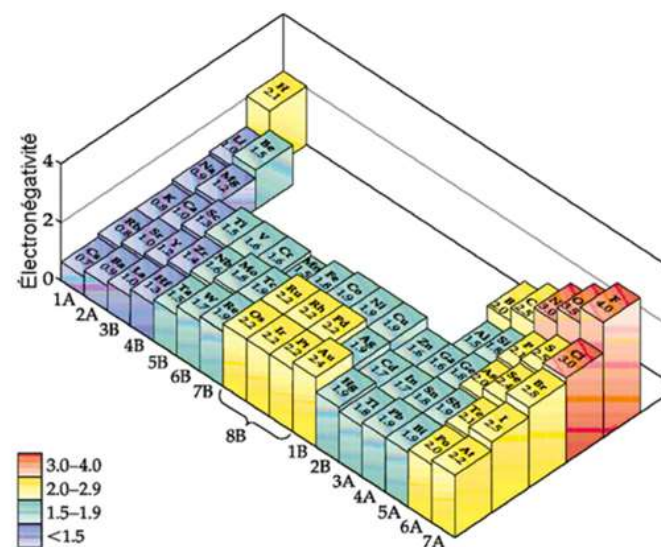
PERIODE ↓

<i>n</i>	ns^1	ns^2	$ns^2 np^1$	$ns^2 np^2$	$ns^2 np^3$	$ns^2 np^4$	$ns^2 np^5$	$ns^2 np^6$
1	H•							He:
2	Li•	•Be•	•B•	•C•	•N•	:O•	:F•	:Ne:
3	Na•	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	:S•	:Cl•	:Ar:

Exemple: le lithium Li possède 1 e⁻ de valence (famille Ia) qui appartient à la couche 2 (période 2)

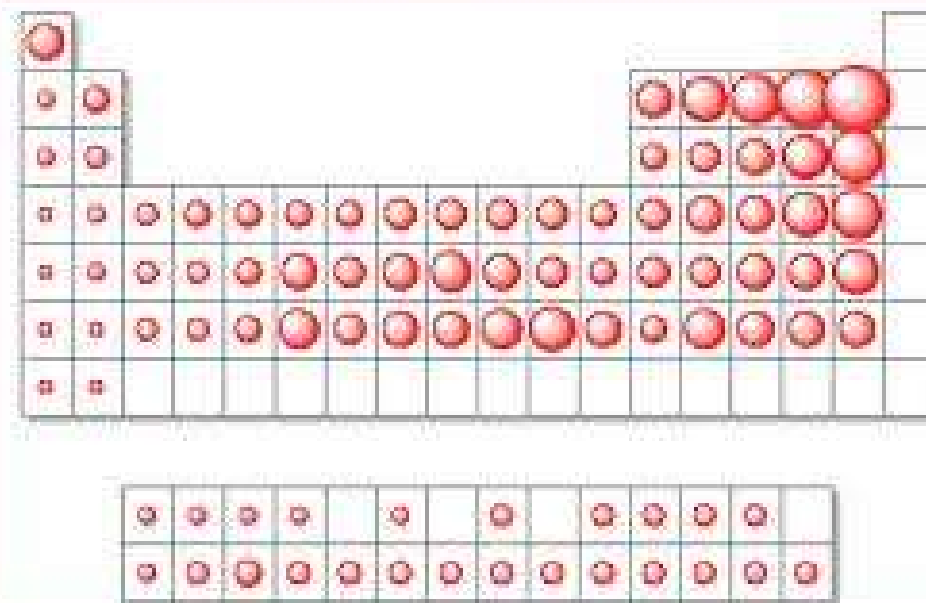
L'électronégativité: propriété périodique clé

- L'électronégativité ϵ traduit la capacité d'un atome à attirer vers lui les e^- impliqués dans une liaison avec un autre atome. Plus l'électronégativité d'un atome est grande, plus les e^- sont proches de cet atome.
- Dans le TP:
 - ϵ augmente de gauche à droite au sein d'une période (car Z augmente)
 - ϵ diminue de haut en bas au sein d'une famille (car n augmente)
- Deux tendances dans le TP:
 - Éléments M faiblement électronégatifs perdent facilement un ou plusieurs e^-
 - Éléments M' fortement électronégatifs gagnent facilement un ou plusieurs e^-

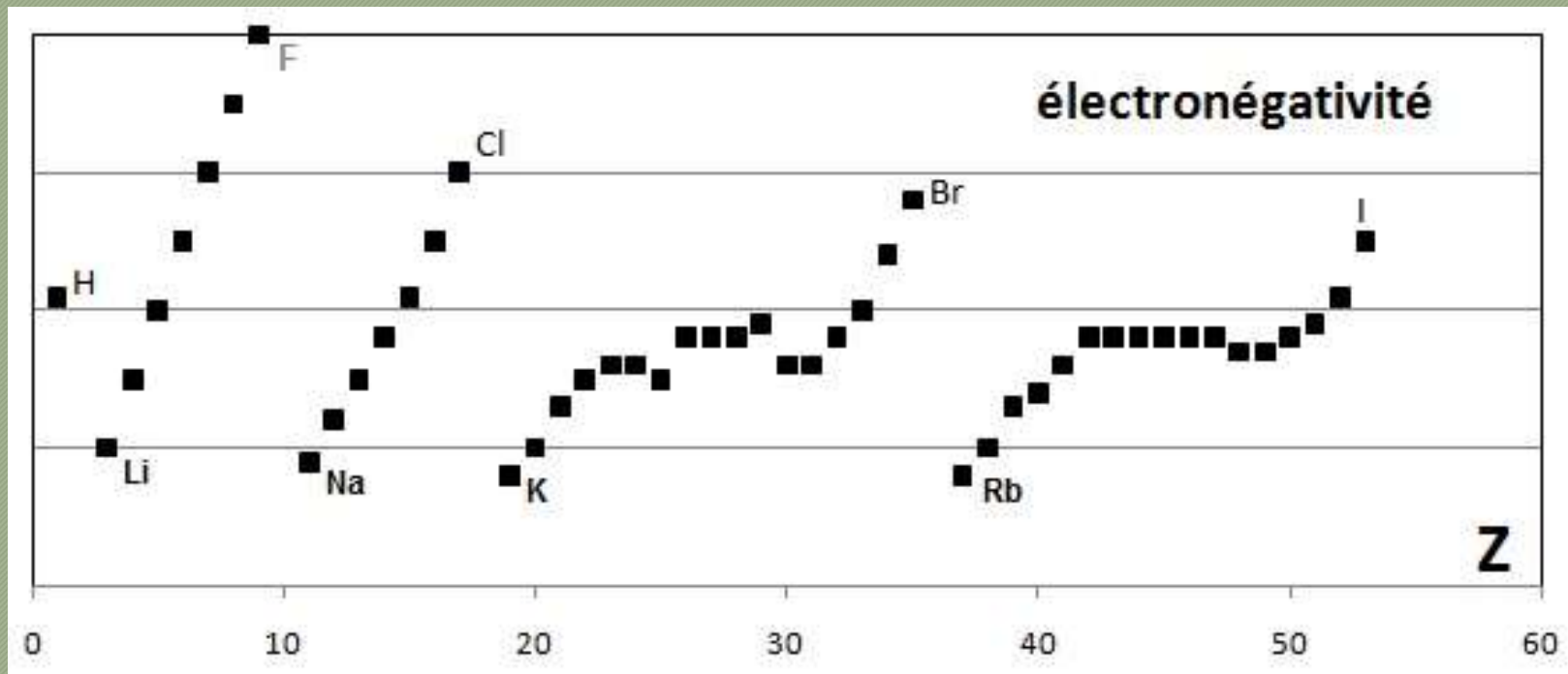


<http://www.chim.lu/ch0410.php>

Electronégativités (Pauling) représentées selon la taille de sphères



© 2004, Walter J. O'Neil, The McGraw-Hill Companies, Inc.



Exercice 13 des notes

Associer à chacun des cas A, B, C une ou plusieurs des caractéristiques a, b, c, ..., g.

- A. Deux éléments qui ont le même nombre d'électrons dans leur couche externe...
- B. Deux éléments dont les électrons externes appartiennent à la même couche...
- C. Deux nucléides ne différant que par le nombre de neutrons de leurs noyaux...
- a. ont des propriétés identiques.
- b. ont des propriétés analogues.
- c. ont des propriétés différentes.
- d. sont dans le même bloc (s, p, d, f).
- e. sont dans la même période.
- f. sont dans la même colonne
- g. sont dans la même case.

Réponse

- A. Deux éléments qui ont le même nombre d'e- dans leur couche externe...
 - b. ont des propriétés analogues.
 - d. sont dans le même bloc (s, p, d, f).
 - f. sont dans la même colonne
- B. Deux éléments dont les e- externes appartiennent à la même couche...
 - c. ont des propriétés différentes.
 - e. sont dans la même période.
- C. Deux nucléides ne différant que par le nombre de neutrons de leurs noyaux...
 - a. ont des propriétés identiques.
 - g. sont dans la même case.