

Chapitre 1

Atomistique

1. Atomes, particules constitutives

Toute matière est constituée d'atomes, eux-mêmes formés d'un noyau et d'un cortège d'électrons.

Noyau : protons + neutrons
 masse d'un nucléon (proton ou neutron) environ 2000 fois plus grande que celle de l'électron)

Nucléide $\begin{matrix} A \\ Z \\ X \end{matrix}$	X = symbole chimique de l'atome A = nombre de masse = $n + p$ (n = nombre de neutrons, p = nombre de protons) Z = nombre de protons ou numéro atomique $n = A - Z$ = nombre de neutrons
---	--

L'atome en physique quantique :

Disposition des particules constitutives (en particulier e^-)

Equation différentielle de Schrödinger : $H\Psi = E\Psi$

H = opérateur Hamiltonien

E = énergie du système

Fonctions d'ondes Ψ : solutions de cette équation liées à la probabilité de présence de l'électron. Elles permettent de déterminer le domaine de l'espace dans lequel l'électron a 99% de chance de se trouver.

Fonctions d'ondes Ψ = orbitales atomiques (OA) qui dépendent de 3 nombres quantiques : n , l et m_l

n : nombre quantique principal

- entier strictement positif

- correspond au numéro de la couche électronique (K, L, M, ...)

- plus n sera grand, plus la couche sera volumineuse

l : nombre quantique secondaire

- défini par $0 \leq l \leq n-1$

- représente la forme de la sous-couche (géométrie de l'espace où l'électron se déplace ou orbitale)

$l = 0$, orbitale s ; $l = 1$, orbitale p ; $l = 2$, orbitale d ; $l = 3$, orbitale f

m_l : nombre quantique magnétique

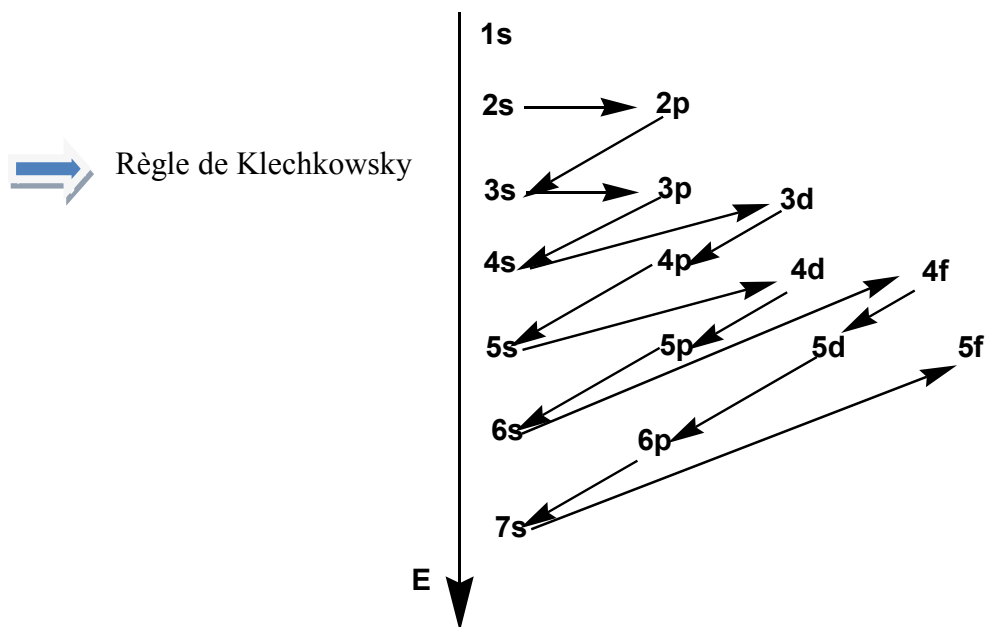
- défini par $-l \leq m_l \leq l$
- représente l'orientation des orbitales dans l'espace. Chaque valeur de m_l définit une case quantique.

s : nombre quantique de spin (d'après to spin : tourner) qui est lié aux deux rotations possibles de l'électron sur lui-même. s n'est pas solution de l'équation de Schrödinger, il admet deux valeurs : $1/2$ ou $-1/2$.

a. Configuration électronique d'un atome

* Configuration ou structure électronique d'un atome ou d'un ion = Répartition des électrons dans les différentes orbitales atomiques

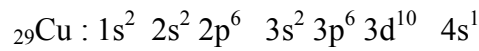
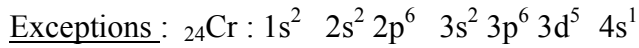
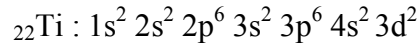
* Remplissage des orbitales : par ordre d'énergie croissante



⇒ Règle de Hund : dans une même sous-couche, les électrons occupent un maximum de cases quantiques avec un spin parallèle ($1/2$) avant de s'apparier.

⇒ Principe d'exclusion de Pauli : à l'état fondamental, 2 électrons d'un même atome ne peuvent avoir leurs 4 nombres quantiques égaux. Comme il n'y a que 2 valeurs possibles pour s et qu'une case quantique est définie par (n, l, m_l) , il ne peut y avoir que 2 électrons par case.

Exemples : ${}_{17}\text{Cl}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$



b. Classification périodique

Historiquement établie par Mendéléiev et construite selon les règles suivantes :

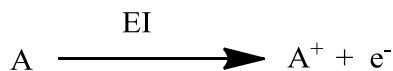
- * classer les éléments par ordre croissant de Z
- * changer de ligne (revenir à la 1^{ère} colonne) chaque fois qu'une nouvelle couche électronique est pleine

**TABLEAU DE CLASSIFICATION PERIODIQUE
DES ELEMENTS CHIMIQUES**

1																	2
H Hydrogène																	He Hélium
3	4											5	6	7	8	9	10
Li Lithium	Be Béryllium											B Bore	C Carbone	N Azote	O Oxygène	F Fluor	Ne Néon
11	12											13	14	15	16	17	18
Na Sodium	Mg Magnésium											Al Aluminium	Si Silicium	P Phosphore	S Soufre	Cl Chlore	Ar Argon
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K Potassium	Ca Calcium	Sc Scandium	Ti Titane	V Vanadium	Cr Chrome	Mn Manganèse	Fe Fer	Co Cobalt	Ni Nickel	Cu Cuivre	Zn Zinc	Ga Gallium	Ge Germanium	As Arsenic	Se Sélénium	Br Brome	Kr Krypton
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb Rubidium	Sr Strontium	Y Yttrium	Zr Zirconium	Nb Niobium	Mo Molybdène	Tc Technétium	Ru Ruthénium	Rh Rhodium	Pd Palladium	Ag Argent	Cd Cadmium	In Indium	Sn Etain	Sb Antimoine	Te Tellure	I Iode	Xe Xénon
55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs Césium	Ba Baryum		Hf Hafnium	Ta Tantale	W Tungstène	Re Rhenium	Os Osmium	Ir Iridium	Pt Platine	Au Or	Hg Mercure	Tl Thallium	Pb Plomb	Bi Bismuth	Po Polonium	At Astate	Rn Radon
87	88	89-103															
Fr Francium	Ra Radium																
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
La Lanthane	Ce Cérium	Pr Prasodyme	Nd Néodyme	Pm Prométhium	Sm Samarium	Eu Europium	Gd Gadolinium	Tb Terbium	Dy Dysprosium	Ho Holmium	Er Erbium	Tm Thulium	Yb Ytterbium	Lu Lutétium			
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
Ac Actinium	Th Thorium	Pa Protactinium	U Uranium	Np Neptunium	Pu Plutonium	Am Américium	Cm Curium	Bk Berkélium	Cf Californium	Es Einsteinium	Fm Fermium	Md Mendélévium	No Nobélium	Lw Lawrencium			

c. Energie de première ionisation

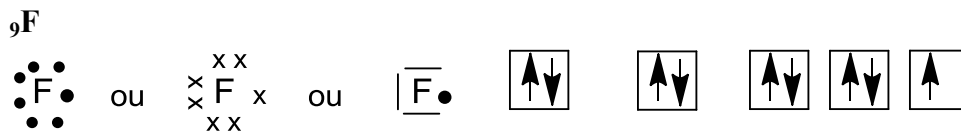
Energie nécessaire pour arracher un électron de la couche externe d'un atome suivant le bilan :



L'électronégativité croît de bas en haut et de gauche à droite sur la classification périodique.

2. Liaisons chimiques

a. Schéma de Lewis (exemples)



b. Liaisons covalentes

D'après Lewis, liaison covalente = mise en commun de 2 électrons entre 2 atomes.

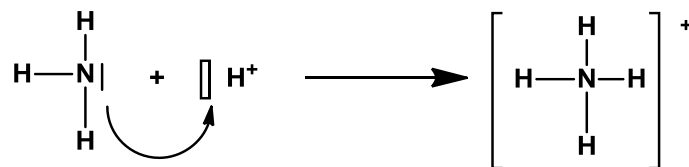
Quand la liaison est formée, les couches périphériques sont saturées (complètes) avec pour exemples 2 électrons pour H et 8 pour Cl : Règle du duet et de l'octet.

Règle de l'octet :

Lors de la formation de liaisons, les atomes, s'ils gagnent des électrons, tendent à acquérir un environnement à 8 électrons comme la configuration du gaz rare qui le suit dans la classification périodique.

c. Liaisons datives

Un atome peut aussi apporter un doublet d'électrons et le donner à l'autre atome, qui nécessairement, doit posséder une case vide :



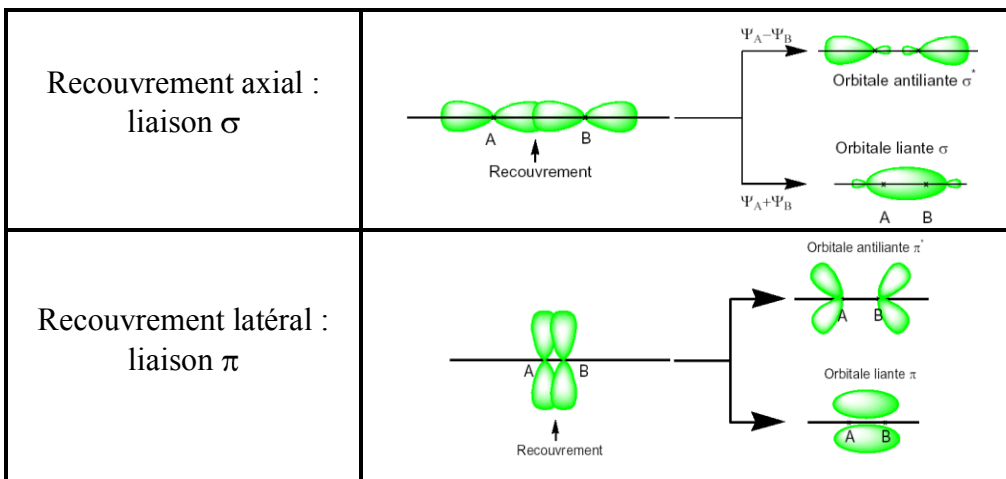
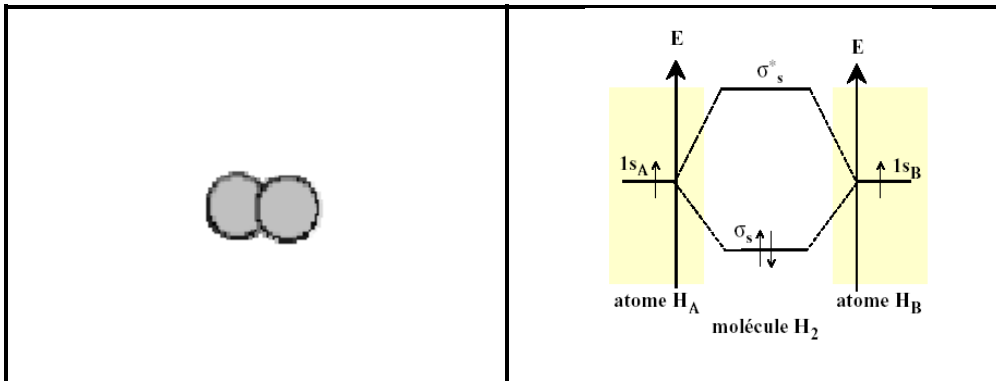
3. Formation des orbitales moléculaires (OM)

Utilisation de la méthode de combinaison linéaire des orbitales atomiques OA (méthode LCAO).

Combiner 2 fonctions d'ondes atomiques pour former une orbitale moléculaire qui va décrire les 2 électrons de la liaison covalente.

Exemple : molécule H_2

2 OA s \longrightarrow 2 OM σ et σ^* (liante et anti-liante)



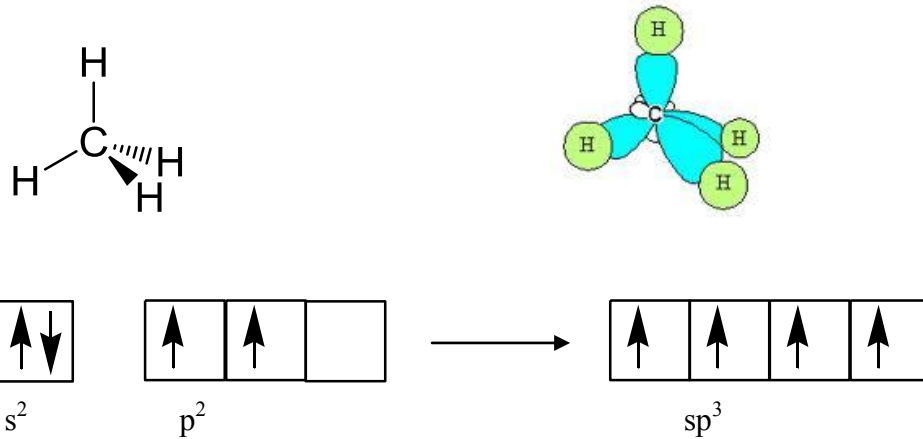
4. Modèle VSEPR

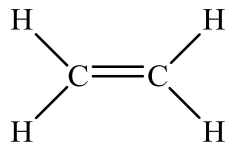
On détermine à partir d'un schéma de Lewis le nombre n de paires liantes entre A (atome central) et X (ions ou atomes voisins) et le nombre m de paires non liantes.

Molécule AX_nE_m	Nombre de doublets (n+m)	Forme	Exemples
AX_2	2	Linéaire	$\underline{BeCl_2}$ $\underline{CO_2}$ \underline{HCN}
AX_3 AX_2E	3 3	Triangle équilatéral	$\underline{BF_3}$ $\underline{AlCl_3}$
AX_4 AX_3E AX_2E_2	4 4 4	Tétraèdre	$\underline{CH_4}$ $\underline{SiCl_4}$ $\underline{H_2O}$
AX_5 AX_4E AX_3E_2 AX_2E_3	5 5 5 5	Bipyramide trigonale	$\underline{PCl_5}$ $\underline{ICl_3}$
AX_6 AX_5E AX_4E_2 AX_3E_3	6 6 6 6	Octaèdre	$\underline{SF_6}$ $\underline{IF_5}$

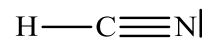
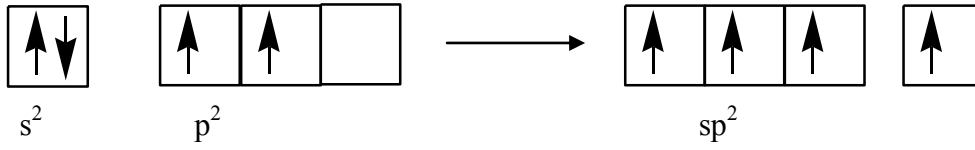
5. Modèle de l'hybridation des OA

CH_4 : 4 OA de 1H et 4 OA hybrides de $^6C = 4 OM$

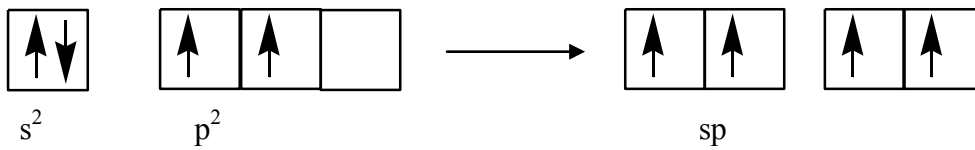




pour chaque C : 3 OA hybrides (3 liaisons σ) et 1 OA p pure (1 liaison π)

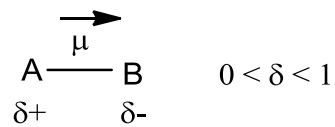


pour chaque C : 2 OA hybrides (2 liaisons σ) et 2 OA p pure (2 liaisons π)



6. Moment dipolaire

Lié à la différence d'électronégativité entre deux éléments :



$\mu = 4,8 \delta d$ avec μ en Debye et d (distance entre les deux atomes) en Å.

QCM

1 - Cochez la (ou les) proposition(s) exacte(s) :

- a - Le noyau d'un atome est constitué de protons et de neutrons
- b - Le noyau d'un atome est constitué de protons et d'électrons
- c - Un nucléon est un électron
- d - La masse d'un nucléon est environ 2000 fois plus grande que celle de l'électron.

2 - Cochez la (ou les) proposition(s) exacte(s) :

- a - $A = \text{nombre de masse} = n + p$
- b - $A = \text{nombre de masse} = n + e$
- c - $Z = \text{numéro atomique} = p$
- d - $Z = \text{numéro atomique} = e$

3 - Cochez la (ou les) proposition(s) exacte(s) :

- a - n est le nombre quantique secondaire
- b - n est le nombre quantique principal
- c - n est un entier strictement positif
- d - n correspond au numéro de la couche électronique (K, L, M, ...)

4 - Cochez la (ou les) proposition(s) exacte(s) :

- a - l est le nombre quantique secondaire
- b - l est le nombre quantique principal
- c - l est un entier strictement positif
- d - l correspond à la sous-couche

5 - Cochez la (ou les) proposition(s) exacte(s) :

- a - $0 < l < n-1$
- b - $l = 0$ correspond à l'orbitale s
- c - $l = 1$ correspond à l'orbitale p
- d - $l = 2$ correspond à l'orbitale f

6 - Cochez la (ou les) proposition(s) exacte(s) :

- a - $0 \leq m_l \leq n-1$
- b - m_l représente l'orientation des orbitales dans l'espace
- c - $-l \leq m_l \leq l$
- d - m_l est un entier strictement positif