



Structure des atomes

Représentation et grandeurs de l'atome

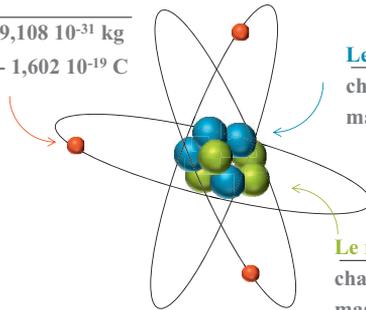
L'atome est constitué d'un noyau et d'un cortège d'électrons, le noyau étant lui-même constitué de protons et de neutrons.

L'électron

masse $m = 9,108 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
 charge $-e = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Le proton

charge $q_{\text{proton}} = +e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 masse $m_{\text{proton}} = 1,6725 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$



Le neutron

charge $q_{\text{neutron}} = 0$
 masse $m_{\text{neutron}} = 1,6748 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Toute la masse de l'atome est concentrée au noyau, dont le diamètre est environ 10 000 fois plus petit que celui de l'atome. Les masses des éléments constituant l'atome sont données en unités de masse atomique (u ou Dalton), définie comme le douzième de la masse d'un atome de carbone 12.

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{\text{proton}} \approx m_{\text{neutron}} \approx 1 \text{ u} \\ m_{\text{électron}} \approx 5,5 \times 10^{-4} \text{ u} \end{array} \right. \text{ avec } \left\{ \begin{array}{l} u = \text{unité de masse atomique} = \frac{1}{12} \cdot m({}^{12}_6\text{C}) \\ u = 1,66056 \times 10^{-24} \text{ g} \end{array} \right.$$

Les atomes sont symbolisés de la façon suivante :

Nombre de masse

Nbre de nucléons (protons + neutrons)
 = masse du noyau (en u)

Nombre de neutrons

$N = A - Z$

Numéro atomique

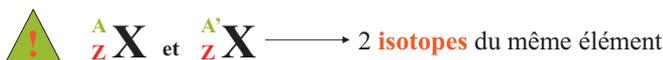
= nb d' e^- = nbre de protons
 = charge du noyau ($Z \cdot q_{\text{proton}}$)



Symbole de l'élément

(H, C, O, N, ...)

Si deux atomes ont le même numéro atomique mais des nombres de masse différents, ce sont des **isotopes**.



A savoir

Un élément est caractérisé par son **numéro atomique** (Z). Ainsi, deux isotopes ont les mêmes propriétés chimiques, car le même numéro atomique, mais des propriétés physiques différentes.

Exemples d'isotopes courants :

élément	${}^1_1\text{H}$	${}^2_1\text{H} = \text{D}$	${}^3_1\text{H} = \text{T}$	${}^{12}_6\text{C}$	${}^{13}_6\text{C}$	${}^{14}_6\text{C}$
Neutrons	0	1	2	6	7	8
Abondance naturelle %	99,985	0,015	ε	98,89	1,11	ε

élément	${}^{14}_7\text{N}$	${}^{15}_7\text{N}$	${}^{16}_8\text{O}$	${}^{17}_8\text{O}$	${}^{18}_8\text{O}$
Neutrons	7	8	8	9	10
Abondance naturelle %	99,635	0,365	99,759	0,037	0,204

Caractérisation de l'atome

Définition de la mole

Le nombre d'Avogadro est défini comme le nombre d'atomes de carbone dans 12 g de carbone 12 : $N = 6,022 \times 10^{23}$.

Par définition, la mole est la quantité de matière d'un système qui contient $6,022 \times 10^{23}$ entités élémentaires (atomes, ions, molécules).

Masse molaire atomique

Masse molaire atomique = masse M d'une mole d'atome (**$\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$**)

Pour ${}^A_Z\text{X}$: masse molaire atomique = $A \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$

La masse molaire atomique est donc donnée directement par le nombre de masse (c'est une approximation car la masse réelle des atomes est un peu différente).

A savoir

Certains éléments possèdent des isotopes abondants à l'état naturel. La masse molaire atomique est alors une somme pondérée des masses des différents isotopes.

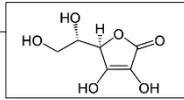
Exemple : le chlore possède deux isotopes ${}^{35}\text{Cl}$ (75%) et ${}^{37}\text{Cl}$ (25%)
 $M_{\text{Cl}} = 0,75 \times 35 + 0,25 \times 37 = 35,5 \text{ g mol}^{-1}$.

Masse molaire moléculaire

La masse molaire moléculaire est calculée en faisant la somme des masses atomiques des atomes constitutifs de la molécule.

$$M_{\text{molécule}} = \sum M_{\text{atomes}}$$

Exemple



Acide ascorbique (vitamine C)



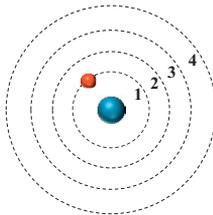
$$M = 6 \times 12 + 8 \times 1 + 6 \times 16 = 176 \text{ g mol}^{-1}$$

Pour des macromolécules biologiques, les masses molaires sont très élevées et on utilise les masses moléculaires (en u ou en Dalton). Par exemple, l' α -chymotrypsine humaine ($\text{C}_{1238}\text{H}_{1844}\text{N}_{344}\text{O}_{371}\text{S}_{13}$) a une masse de 27 868 Da.

Structure électronique de l'atome

Atome d'hydrogène et hydrogénoïdes – Modèle de Bohr

Dans le modèle de Bohr, l'électron a une orbite circulaire autour du noyau de l'atome. Ce modèle atomique est couramment représenté et accepté par le grand public.

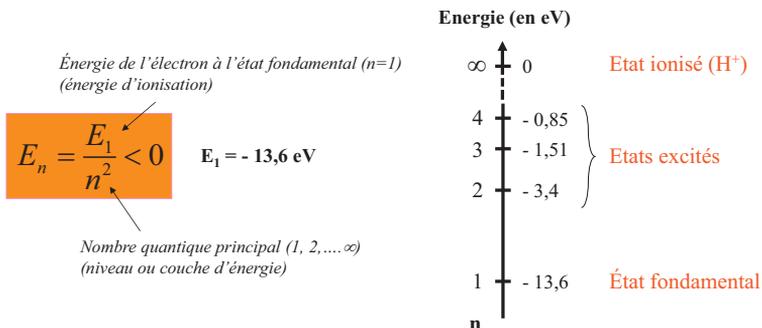


Trajectoire circulaire de l' e^- autour du noyau

Sur des orbites de niveau d'énergie définie

Les rayons des orbites des électrons sont, en Å, de $r_n = 0,53 \times n^2$ où n est un entier naturel (1, 2, 3, 4, ...) appelé nombre quantique principal.

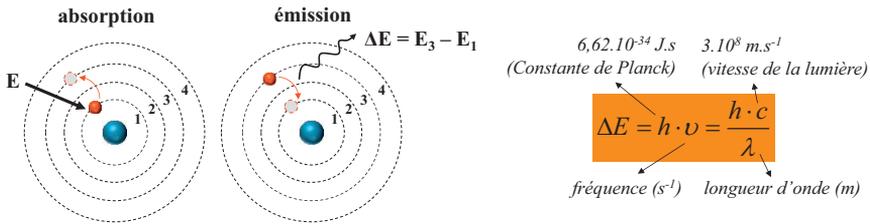
L'énergie de l'électron est définie, elle ne peut prendre que certaines valeurs : on parle de quantum d'énergie.



En l'absence de toute excitation extérieure, l'électron est sur le plus bas niveau d'énergie ($n = 1$) : l'atome est dans son état fondamental.

Si l'on fournit à l'atome une énergie égale à la différence d'énergie entre deux niveaux, il l'absorbe et l'électron passe à un niveau supérieur : l'atome se trouve alors dans un état excité.

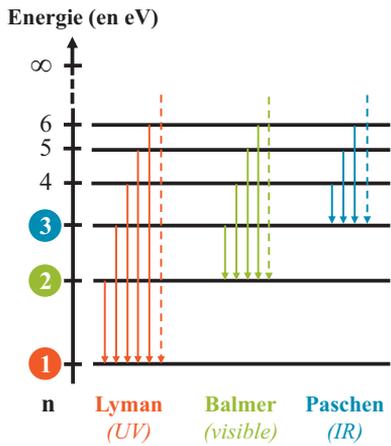
L'état excité n'est pas stable et l'électron revient rapidement sur un niveau inférieur en émettant un rayonnement électromagnétique d'énergie égale à la différence d'énergie entre le niveau de départ et le niveau d'arrivée : un photon est ainsi émis avec une énergie quantifiée.



Remarques :

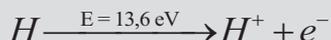
- Si l'on fournit une énergie inférieure ou supérieure à la différence d'énergie entre deux niveaux, elle n'est pas absorbée par l'atome. L'atome ne passe pas à l'état excité (il ne se passe rien).
- Si l'on fournit une énergie $\geq 13,6$ eV, l'hydrogène est ionisé.

Si l'on soumet un atome d'hydrogène à un apport d'énergie, on observe alors un spectre d'émission de rayonnement électromagnétique sous forme de raies (dus à l'émission d'énergie) ayant des longueurs d'ondes bien spécifiques. Ces dernières sont liées aux transitions des électrons entre les différents niveaux énergétiques. Trois séries de raies sont observées, selon que l'électron redescend vers le niveau fondamental (série de Lyman), le niveau $n = 2$ (série de Balmer) ou le niveau $n = 3$ (série de Paschen), à des longueurs d'onde dans les domaines de l'ultra-violet (UV), du visible et de l'infra-rouge (IR), respectivement.



A savoir

Si l'on fournit à l'atome d'hydrogène une énergie de 13,6 eV, il s'ionise.



Le modèle de Bohr propose donc une orbite circulaire pour l'électron de l'hydrogène et une énergie quantifiée.

Modèle ondulatoire et quantique

En 1905, Albert Einstein associe le photon à l'onde lumineuse, et met ainsi en avant la nature corpusculaire et ondulatoire de la lumière. En 1924, Louis de Broglie étend ce principe et énonce qu'à toute particule en mouvement est associée une onde.

$$p = m \cdot v = \frac{h}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

Quantité de mouvement *Longueur d'onde associée au mouvement de la particule*

Mais la dualité onde-corpuscule n'est pas conciliable avec la mécanique classique et une interprétation physique de l'onde associée aux particules. Pour des objets de masse élevée, la longueur d'onde n'est pas décelable, et à l'échelle atomique, la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que les dimensions du système (quelques angströms).

En 1927, Werner Heisenberg établit un principe d'incertitude qui stipule que l'on ne peut pas connaître simultanément et avec précision la vitesse et la position d'un électron dans un atome.

$$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v_x) \geq \frac{h}{2\pi}$$

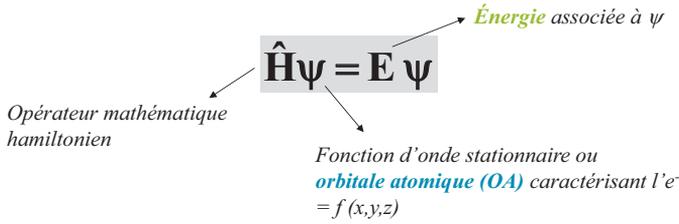
Incertitude sur la position *Incertitude sur la vitesse*

$$\begin{aligned} \text{Si } \Delta x = 0,1 \text{ nm} &\Rightarrow \Delta v_x \geq 1,1 \cdot 10^6 \text{ m.s}^{-1} (\approx v_{x \text{ Bohr}}) \\ \text{Si } \Delta v = 1 \text{ m s}^{-1} &\Rightarrow \Delta x = 10^{-4} \text{ m (taille atome } 10^{-10} \text{ m)} \end{aligned}$$

La mécanique quantique propose alors une interprétation probabiliste de la dualité onde-corpuscule.

~~Localisation de l'e⁻~~ ⇒ Probabilité de présence de l'e⁻
Mécanique classique *Mécanique quantique*

La théorie de Louis de Broglie est généralisée par Erwin Schrödinger qui associe à toute particule en mouvement une fonction d'onde, et permet de relier l'énergie d'un système à ses propriétés ondulatoires.



Ψ n'a pas de signification physique, c'est une fonction qui décrit l'onde. On travaille plutôt avec Ψ^2 qui représente la densité de probabilité de présence de l'électron dans un volume donné et a un sens physique.

Les orbitales atomiques (OA)

Par définition, l'orbitale atomique est la représentation du volume à l'intérieur duquel il y a 95% de chances de trouver l' e^- , à laquelle est associé le signe de la fonction d'onde correspondante Ψ .

La résolution de l'équation de Schrödinger implique l'introduction de trois nombres quantiques : **n**, **ℓ** et **m**.

n nombre quantique PRINCIPAL

- définit la **COUCHE** et le volume de l'OA

A chaque couche n est associée une énergie E_n quand $n \nearrow, E_n \nearrow$

- entiers non nuls : 1, 2, 3, ... \longrightarrow n° de la couche
(K, L, M, ...)

ℓ nombre quantique SECONDAIRE

- définit la **SOUS-COUCHE** et la forme de l'OA dans une couche donnée

A chaque sous-couche est associée une énergie $E_{n,\ell}$ (pour les atomes polyélectroniques) $E_{n,\ell} \nearrow$ quand $\ell \nearrow$

- type d'orbitale en fonction de ℓ avec $0 \leq \ell \leq n-1$
 $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$
- | | | | |
|---|---------------------|----------|-------------------------|
| { | 0 \longrightarrow | s | forme de la sous-couche |
| | 1 \longrightarrow | p | |
| | 2 \longrightarrow | d | |
| | 3 \longrightarrow | f | |

m nombre quantique MAGNETIQUE

- la valeur de m détermine l'**orientation de l'OA** dans cette sous-couche
- le nombre de valeurs de m détermine le nombre d'OA dans une sous-couche donnée

- entiers relatifs pour chaque valeur de ℓ : $-\ell \leq m \leq \ell$ 2ℓ + 1 valeurs de m

$$m = -\ell, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +\ell$$

On peut donc définir les orbitales atomiques pour chaque couche électronique. Par exemple, pour la couche $n = 3$ et la sous-couche $\ell = 0$, c'est une orbitale 3s.

Couche n $n \geq 1$	Sous-couche ℓ $0 \leq \ell \leq n-1$	Orientation m $-\ell \leq m \leq +\ell$	Orbitale	Formalisme des cases quantiques
1 (K)	0 → s	0	1 OA 1s	<input type="checkbox"/>
2 (L)	0 → s	0	1 OA 2s	<input type="checkbox"/>
	1 → p	-1,0,1	3 OA 2p	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
3 (M)	0 → s	0	1 OA 3s	<input type="checkbox"/>
	1 → p	-1,0,1	3 OA 3p	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
	2 → d	-2,-1,0,1,2	5 OA 3d	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
4 (N)	0 → s	0	1 OA 4s	<input type="checkbox"/>
	1 → p	-1,0,1	3 OA 4p	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
	2 → d	-2,-1,0,1,2	5 OA 4d	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>
	3 → f	-3,-2,-1,0,1,2,3	7 OA 4f	<input type="checkbox"/>

A noter :

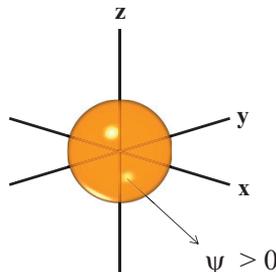
- Le nombre de cases quantiques est égal au nombre de valeurs de m , c'est-à-dire au nombre d'orbitales dans la sous-couche.
- Une OA existe même sans électrons. Ainsi, par exemple, l'orbitale 3p du sodium (Na) existe même si elle ne contient aucun électron.
- On utilise couramment le formalisme des cases quantiques pour représenter les OA : 1 case pour l'OA « s », 3 cases pour les OA « p », etc.

Représentation des OA

La forme des OA dépend de la valeur de ℓ , le nombre d'orbitales de même forme est fonction du nombre de valeurs que peut prendre le nombre quantique magnétique m . Les OA sont représentées dans un repère orthonormé (x, y, z), le noyau de l'atome est placé au centre du repère.

$\ell = 0$ Orbitale atomique s $n \geq 1$
 $m = 0$ (1 valeur)

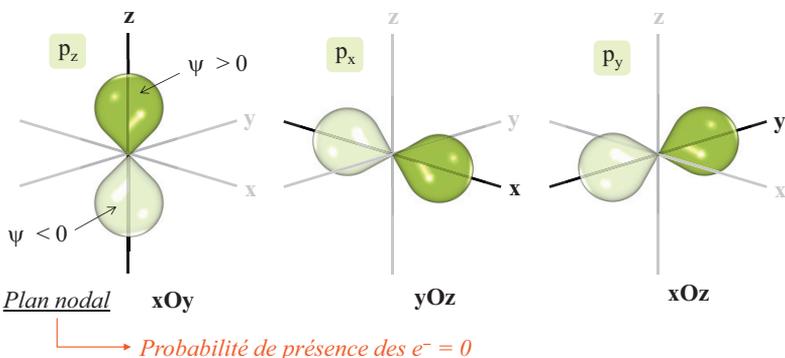
symétrie sphérique



$\ell = 1$ Orbitale atomique p

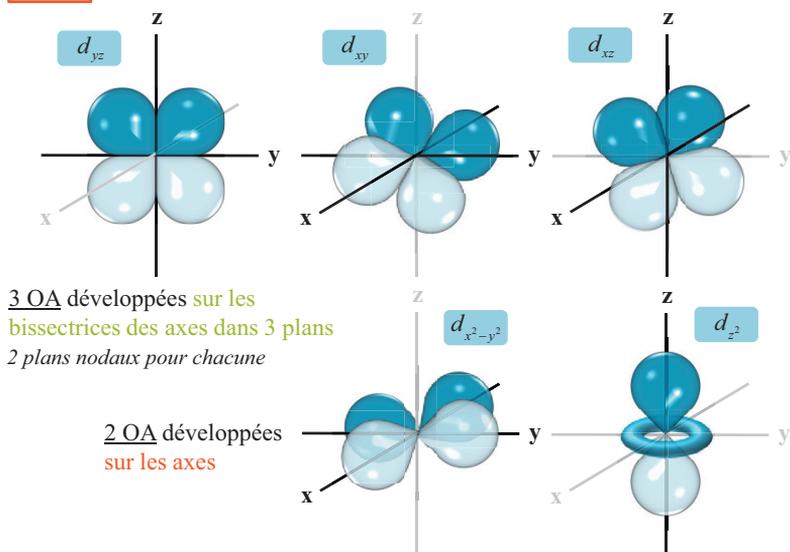
$n \geq 2$
 $m = -1, 0, 1$ (3 valeurs)

symétrie de révolution



$\ell = 2$ Orbitale atomique d

$n \geq 3$
 $m = -2, -1, 0, 1, 2$ (5 valeurs)



Il faut noter que pour une même orbitale, plus la couche électronique est grande et plus le volume de l'orbitale est grand. Cela est valable quelle que soit l'orbitale (s, p, d, f).

