

Atomeistique :

Constitution de l'atome :

Conventionnellement ~~est~~ un atome X est noté : ${}^A_Z X$

- * Z : nombre de charge (protons)
- * A : nombre de masse ($A = Z + N$).
- * Deux atomes dont les noyaux ont le même numéro atomique Z mais un nombre de neutrons N différent sont appelés des isotopes.

exemple : ${}^{12}\text{C}$, ${}^{13}\text{C}$, ${}^{14}\text{C}$

Modèle de Bohr :

1^{er} postulat : Lorsque l'électron passe d'une orbite stationnaire à une autre, l'énergie de l'atome subit une variation brusque $\Delta E = E_{m_2} - E_{m_1} = h\nu$

2^{ème} postulat : * Moment cinétique : $L = r m v = \frac{m h}{2\pi} = n h$

$r_n = \frac{a_0 \cdot n^2}{Z}$ avec $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$: rayon de 1^{ère} orbite de Bohr

$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$ $E_0 = 13,6 \text{ eV}$; $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Atome selon le modèle quantique :

* une particule (photon) : caractérisée par une charge nulle, énergie $E = h\nu$ et quantité de mouvement $p = h/\lambda$

1 quantum = $h\nu$

* La lumière a donc le double aspect :

- Ondulatoire : $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$

- Corpusculaire : $E = mc^2$

* Aspect ondulatoire: Hypothèse de Lewis Broglie :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

D'aspect ondulatoire m'a d'intérêt que lorsque la masse de la particule est très petite et sa vitesse est très faible.

* Théorème d'incertitude d'Heisenberg:

« il est impossible de déterminer simultanément la position et la quantité de mouvement d'une particule avec autant de précision qu'on le désire ».

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} \quad ; \quad \Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{4\pi m} \left(\frac{h}{m} \right).$$

* Si m est grande, le produit est très petit: échelle macroscopique
→ c'est la mécanique classique.

* Si m est petit, le produit Δx et/ou Δv sont grandes ce qui conduit à la conception probabiliste du mouvement des électrons.

* Fonction ψ :

- fonction mathématique qui peut être positive, négative ou complexe.
- N'a pas ~~aucune~~ aucune signification physique.
- $|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$ (si ψ est un complexe) possède une signification physique.
- $\int_{\text{espace}} \psi^2 \cdot dV = 1$: condition de normalisation.
- $\psi \rightarrow 0$; $r \rightarrow \infty$

Modelle der Bohr

orbite : myoglobine
circulaire

Mécanique quantique :

Orbitale : zone dans l'espace dans laquelle on a une très grande ~~est~~ probabilité de trouver l'électron.

Les Nombres quantiques :

- * Nombre quantique principale (n): $n \geq 0$

indique le niveau d'énergie principale occupé par l'électron.
→ la couche.

* Nombre quantique secondaire [azimutal] (l):

indique la forme de l'orbitale : $0 \leq l \leq n-1$.
 → sous couche

$n=1 \rightarrow l=0 \rightarrow \text{orbitale } s \rightarrow \text{forme sphérique}$ 

$n=2 \rightarrow l=0 \rightarrow \text{orbitale } s \rightarrow \text{" "}$ 

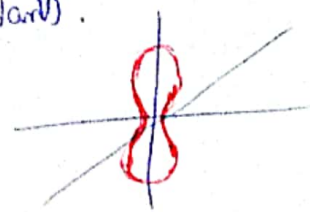
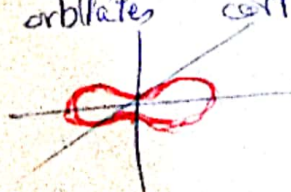
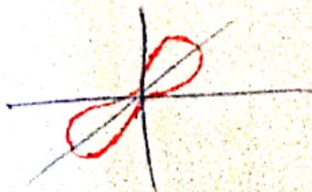
$n=2 \rightarrow l=1 \rightarrow \text{orbitale } p \rightarrow \text{forme d'allen}$  deux lobes.

* **Nombre quantique magnétique (m_l):** [savoir le nombre de cases quantiques]
indique l'orientation de l'orbitale par rapport au moyen

$$-p \leq mp \leq p$$

$l=0 \rightarrow m_l=0 \rightarrow$ orbitals de forme sphérique

$l=1 \longrightarrow m_l = -1, 0, 1$: 3 orientations possibles pour les orbitales correspondantes.



* $dP = \psi^2 \cdot dV$: la probabilité de trouver l'électron dans l'élément de volume dV .

* $|\psi|^2 = dP/dV$

Equation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi$$

avec $H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta + V$: opérateur Hamiltonien.

* E : Energie totale de la particule.

* $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$: opérateur Laplacien.

* $V(r) = -Ze^2 / 4\pi\epsilon_0 r$

$$\begin{cases} x = r \sin(\theta) \cos(\varphi) & 0 \leq \theta \leq \pi \\ y = r \sin(\theta) \sin(\varphi) & 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ z = r \cos(\theta) & 0 \leq r < +\infty \end{cases}$$

$$dV = r^2 \sin(\theta) \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\varphi$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

* $R(r)$: fonction radiale (dépend que de r).

* $Y(\theta, \varphi)$: fonction angulaire.

* Nombre magnétique de spin (m_s).

Ce nombre ne peut prendre que deux valeurs ($+1/2$ ou $-1/2$)

$$\Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\theta, \varphi).$$

* Configuration électronique d'un atome :

* Principe de Pauli : Deux électrons ne peuvent pas avoir leurs quatre nombres quantiques identiques.

* La couche de numéro n contient au max $2n^2$ électrons.

* Règle de Hund : L'état électronique fondamental correspond à un maximum de spins parallèles. La multiplicité de spins est maximale.

* Règle de Klechkowsky : Les remplissages des sous-couches se fait dans l'ordre $(n+l)$ croissant.

* Ordre de remplissage :



$1s^2$		
$2s^2$	$2p^6$	
$3s^2$	$3p^6$	
$4s^2$	$3d^{10}$	$4p^6$
$5s^2$	$4d^{10}$	$5p^6$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

→ La règle de Klechkowsky est empirique (basée sur l'expérience), elle peut présenter des ~~des~~ exceptions:

Pour $n > 3$: $ns^2(n-1)d^4 \longrightarrow ns^1(n-1)d^5$

$ns^2(n-1)d^5 \longrightarrow ns^1(n-1)d^6$

expte :

* Cr : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \underline{4s^2 3d^4} \rightarrow 4s^1 3d^5$

* Cu : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \underline{4s^2 3d^9} \rightarrow 4s^1 3d^{10}$

Études des orbitales atomique set p :

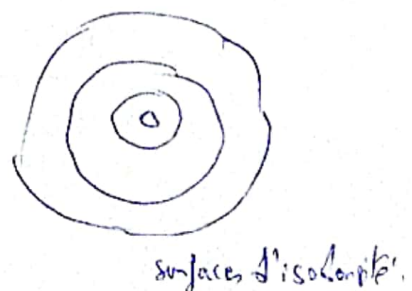
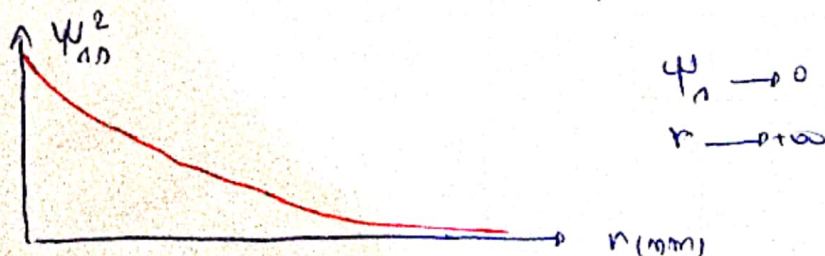
1/ Orbitale s :

* ψ_{ms} indépendantes de θ, φ

* $\psi_{ms} = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$; $Y(\theta, \varphi) = \text{cte}$.

→ Les orbitales atomiques présentent donc une symétrie sphérique.

* la fonction ψ_{10}^2 a la même valeur en tout point d'une sphère de rayon r , ces sphères sont appelées surfaces d'isodensité. (densité électronique égales).

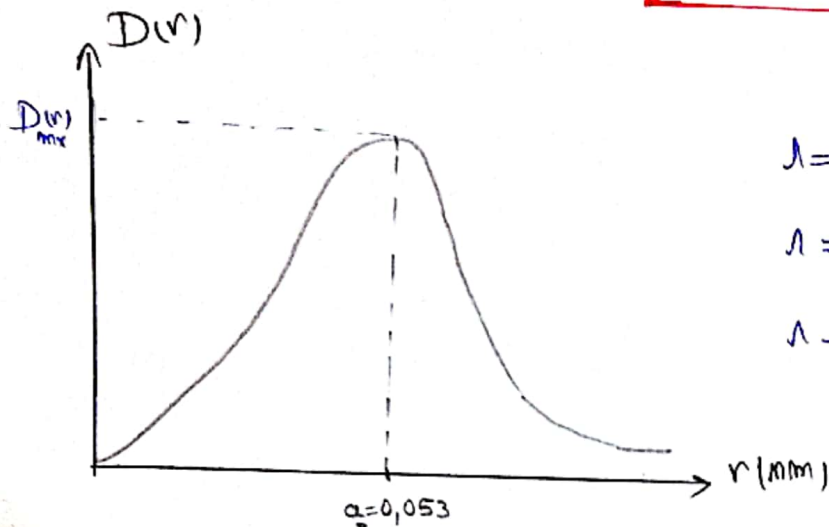


Densité Radiale de probabilité de présence.

$$dV = 4\pi r^2 \cdot dr$$

$$dP = \psi_{1,0}^2 \cdot dV$$

$$* D(r) = \frac{dP}{dr} = \psi_{1,0}^2 4\pi r^2$$

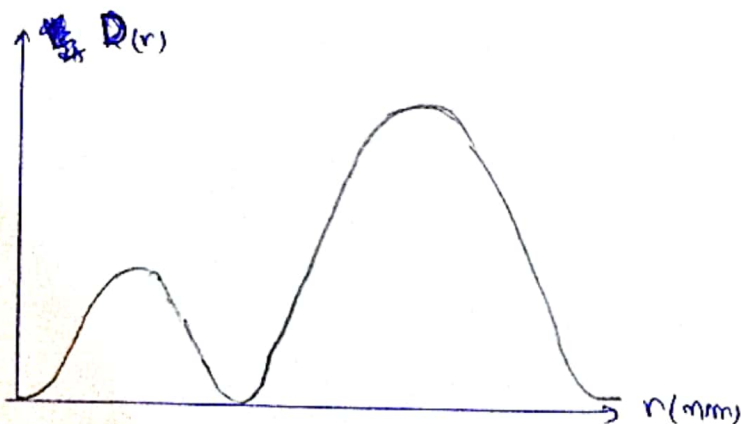


$$l=0 \rightarrow D(r)=0$$

$$l=a_0 \rightarrow D(r) \text{ maximale}$$

$$l \rightarrow +\infty \Rightarrow D(r) \rightarrow 0.$$

* L'orbitale $2s$:

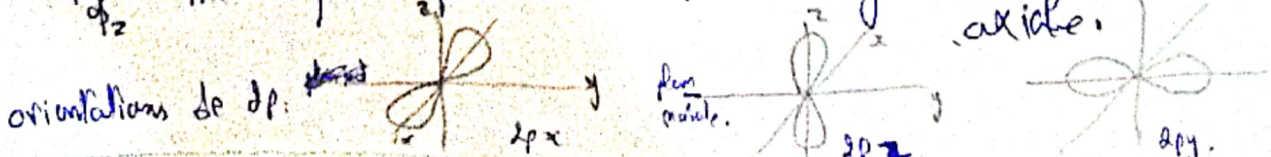


$$r = 2a_0 \text{ (sphère nodale).}$$

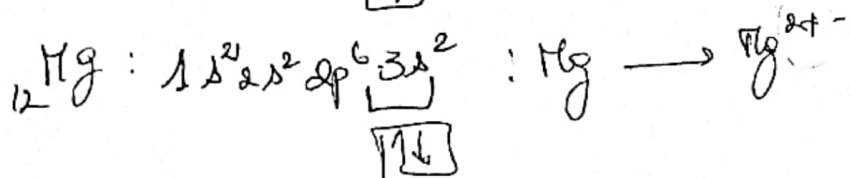
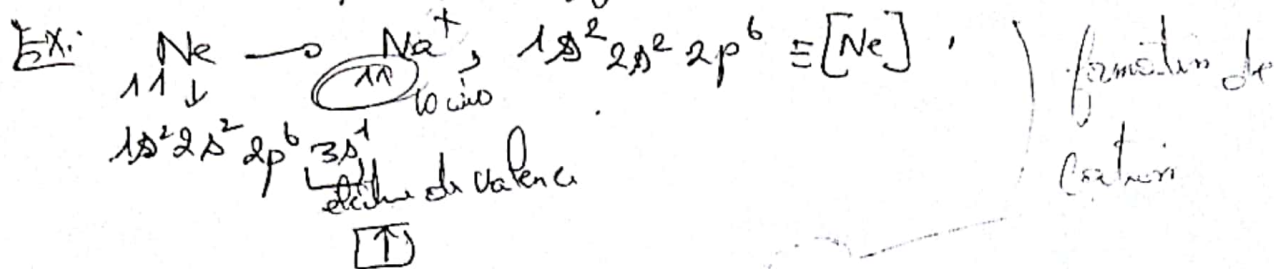
* L'orbitale p :

Dépend de θ : l'orbitale $2p_z$ possède un caractère directionnel c.à.d la probabilité de présence de l'électron n'est pas la même dans tous les directions au sein du noyau.

ψ_{p_z} ne dépend pas de ϕ : une symétrie axiale (orbitales bilobées).



$\text{Na}^+ \rightarrow$ n'est pas un gaz rare
mais il prend la configuration d'un gaz rare.

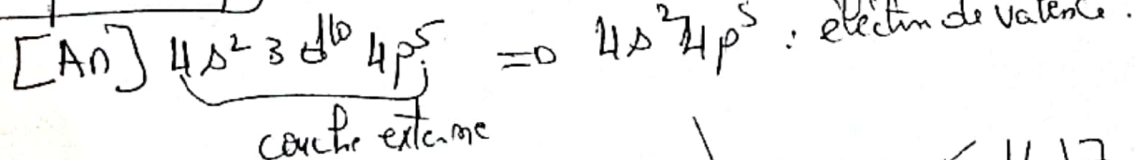
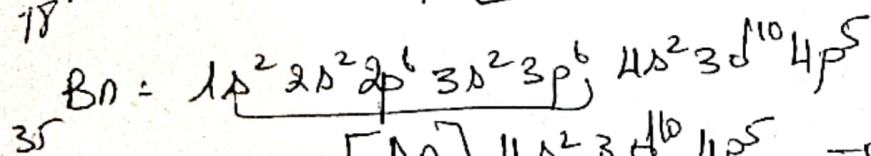
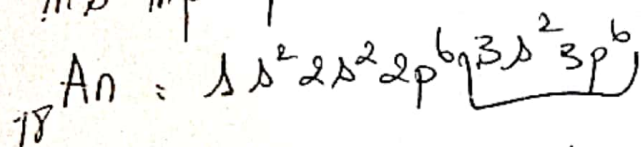


familles
alcalins (s^1)

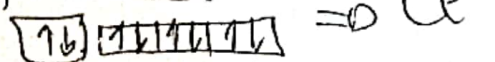
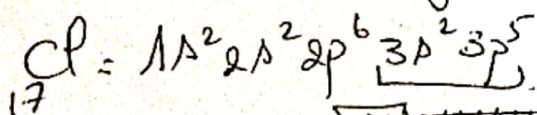
la 1^{re} colonne et la 2^e sont le bloc "s" $\leftarrow$ Alcalino-terreux (s^2)

la 1^{re} colonne les gaz rares

$ms^2 mp^6$ pour $m=2$ et $m=3$

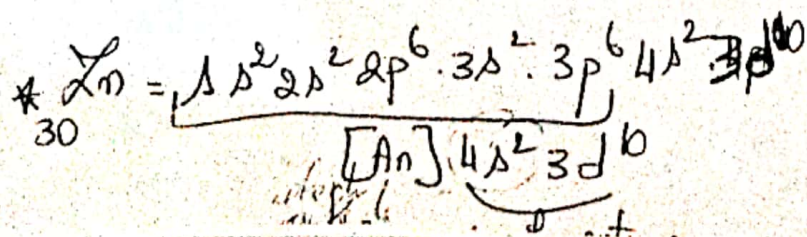


la 17^e colonne : halogène : $ms^2 mp^5$

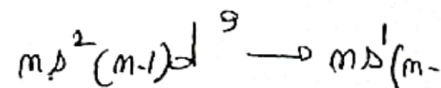


la 16^e colonne : $ms^2 mp^4$: chalcogène.

"bloc d" $(m-1) d^x$ avec $x \geq 1$.

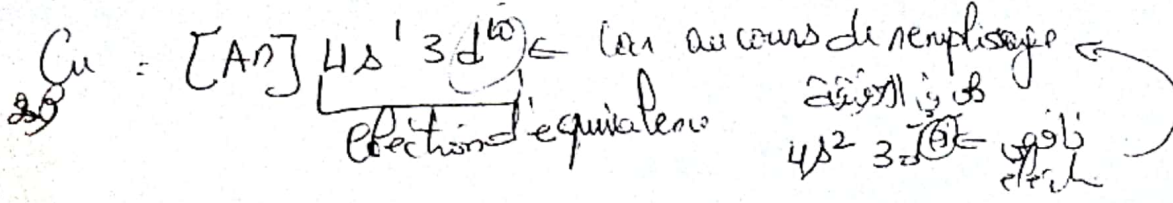


13, 14, 15, 16, 17, 18
 $\Rightarrow$ "bloc p"



* Cette anomalie est due à une stabilité particulière lors de remplissage total de la sous-couche "d"

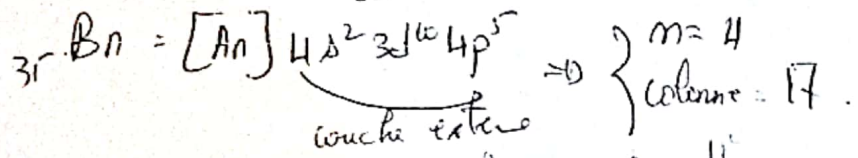
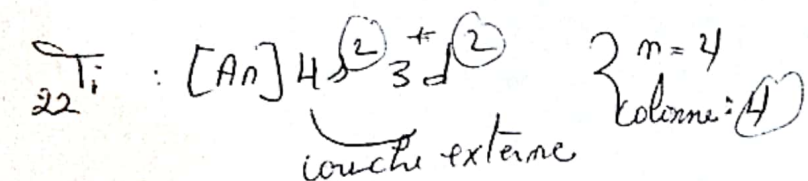
[ou demi-remplissage]



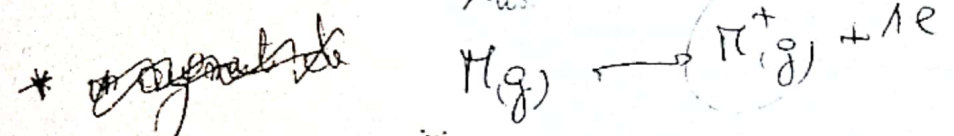
* $n \geq 3$ $n \geq 4$

$ns^2 np^x : N^\circ \text{ de colonne} = 2 + x + 10.$

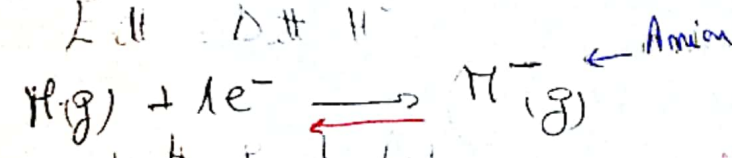
$ns^2 \cdot (n-1)d^x np^y : N^\circ \text{ de colonne} \begin{cases} \text{si } y = 0 : 2 + x \\ \text{si } y \neq 0 : 2 + 10 + y \end{cases}$



$\text{H}_2 = \Delta_{\text{H}} \text{H}^+ \leftarrow \text{cation.}$

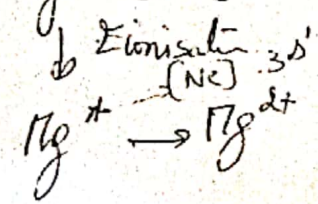
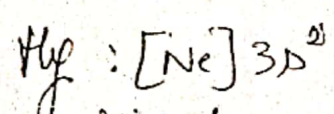


$\text{H}_2 = \Delta_{\text{H}} \text{H}^-$



L'origine et l'attachement électronique

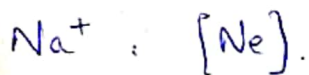
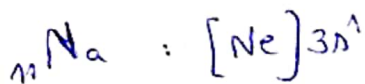
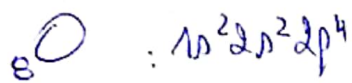
Affinité électronique
 $A.E = -E_{\text{att.}}$



EPdionigative: pouvoir attractif.

1^{ère} Colonne : Alcalins : ns^1
 2^{ème} Colonne : Alcalino-terreux : ns^2 } Bloc "s".

18^{ème} Colonne : Gaz-rare : $ns^2 np^6$
 17^{ème} - ~~18~~ Colonne : Halogènes : $ns^2 np^5$
~~16~~ 16^{ème} Colonne : Chalcogènes : $ns^2 np^4$ } + 15^{ème} 14^{ème} } Bloc "p".



* Les éléments de transition : $M \geq 4$ ou $M > 3$



* $ns^2 - d^x$ si $\begin{cases} x=1 : 1^{ère} \text{ colonne} \\ x=2 : 2^{ème} \text{ colonne} \end{cases}$

* $ns^2 np^y$ avec $y \neq 0$
 colonne : $2+10+y$

* $ns^2 (n-1)d^x . np^y$ $\begin{cases} \text{si } y=0 \\ \text{colonne : } 2+x \end{cases}$ $\begin{cases} \text{si } y \neq 0 \\ \text{colonne : } 2+10+y \end{cases}$

