

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

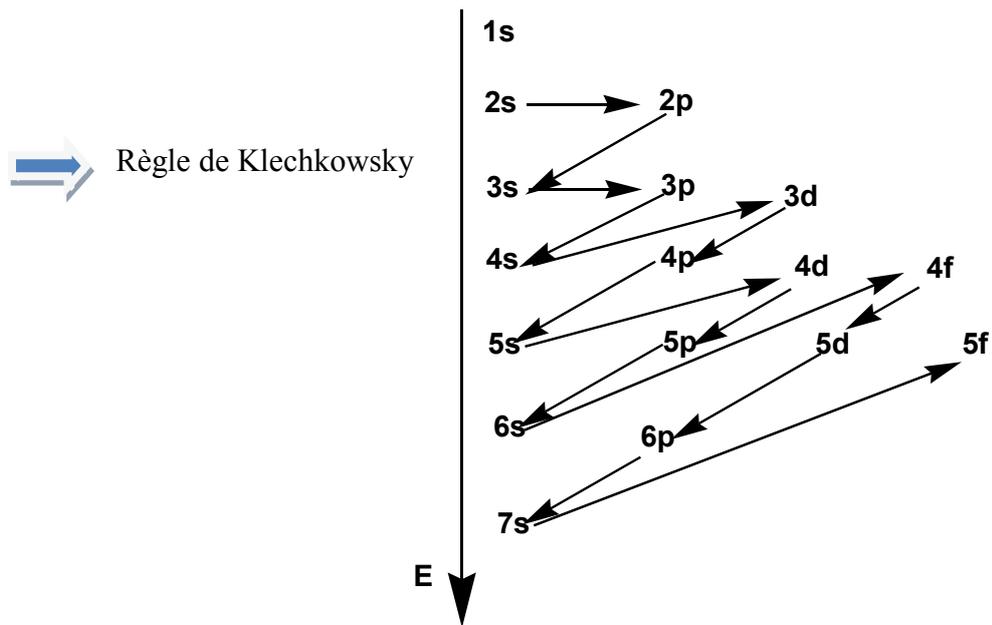
- défini par $-l \leq m_l \leq l$
- représente l'orientation des orbitales dans l'espace. Chaque valeur de m_l définit une case quantique.

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

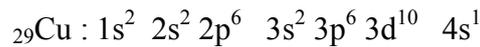
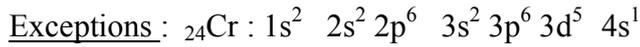
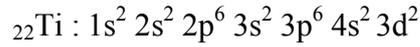
* Remplissage des orbitales : par ordre d'énergie croissante



⇒ 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 :

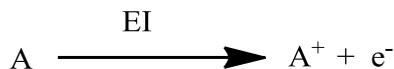
- * classer les éléments par ordre croissant de Z
- * changer de ligne (revenir à la 1^{ère} colonne) chaque fois qu'une nouvelle couche électronique est pleine

**TABLEAU DE CLASSIFICATION PERIODIQUE
DES ELEMENTS CHIMIQUES**

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

c. Energie de première ionisation

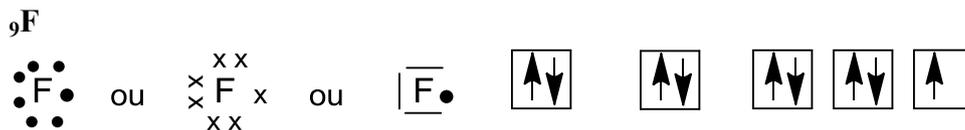
Energie nécessaire pour arracher un électron de la couche externe d'un atome suivant le bilan :



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.

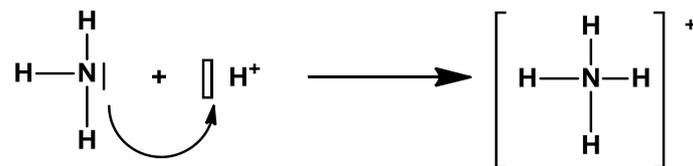
Quand la liaison est formée, les couches périphériques sont saturées (complètes) avec pour exemples 2 électrons pour H et 8 pour Cl : Règle du duet et de l'octet.

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 :



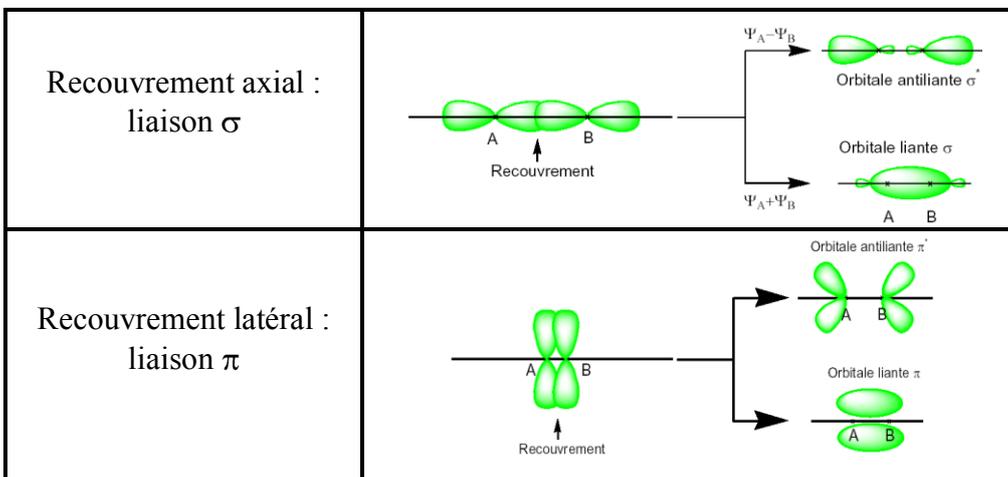
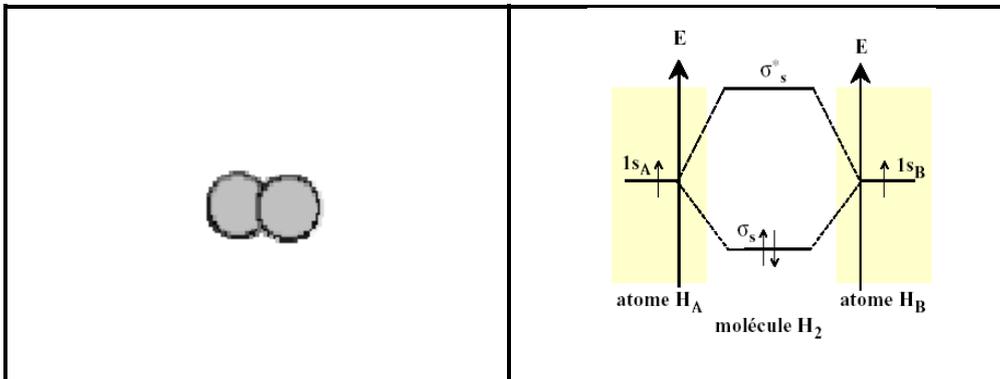
3. Formation des orbitales moléculaires (OM)

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)



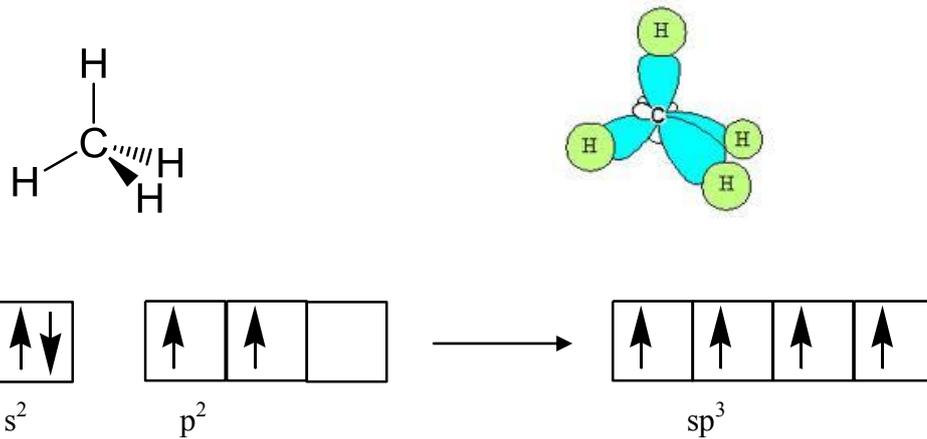
4. Modèle VSEPR

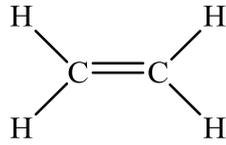
On détermine à partir d'un schéma de Lewis le nombre n de paires liantes entre A (atome central) et X (ions ou atomes voisins) et le nombre m de paires non liantes.

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	$\underline{SF_6}$ $\underline{IF_5}$

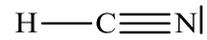
5. Modèle de l'hybridation des OA

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

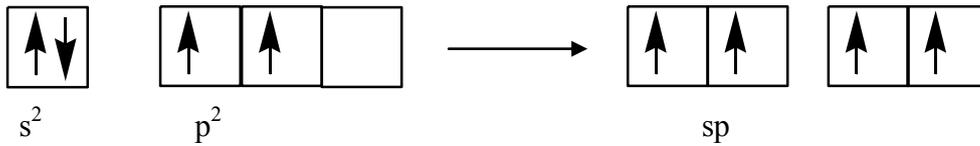




pour chaque C : 3 OA hybrides (3 liaisons σ) et 1 OA p pure (1 liaison π)

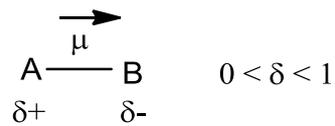


pour chaque C : 2 OA hybrides (2 liaisons σ) et 2 OA p pure (2 liaisons π)



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