

Université Saâd Dahlab de Blida

Faculté de Médecine



جامعة سعد دحلب - البليدة

كلية علوم الطب

Support de cours de chimie destiné aux étudiants de première année de médecine et chirurgie dentaire

Prof. D.E. HADJ-BOUSSAAD

*Principes généraux
de la chimie*

Introduction

Nouvelle discipline  questions?

- De quoi s'agit-il ?
- Liens de cette discipline avec les choses que je connais déjà ?
- De quelle utilité me sera-t-elle dans mes études ?
- De quelle utilité me sera-t-elle dans ma futur profession ?

Réponses !

Introduction...

La chimie (générale) est cette discipline qui regroupe:

- La chimie physique et physico-chimie
- La chimie organique ou chimie du Carbone
- La chimie des systèmes vivants qui est essentiellement de la chimie organique

Rapports entre la chimie et certaines autres sciences

Science abstraite

- Mathématiques

- Physique

- Chimie physique et physico-chimie

- Chimie organique (chimie des systèmes vivants)

- Biochimie

- Biologie

- Médecine

Se trouvent au milieu

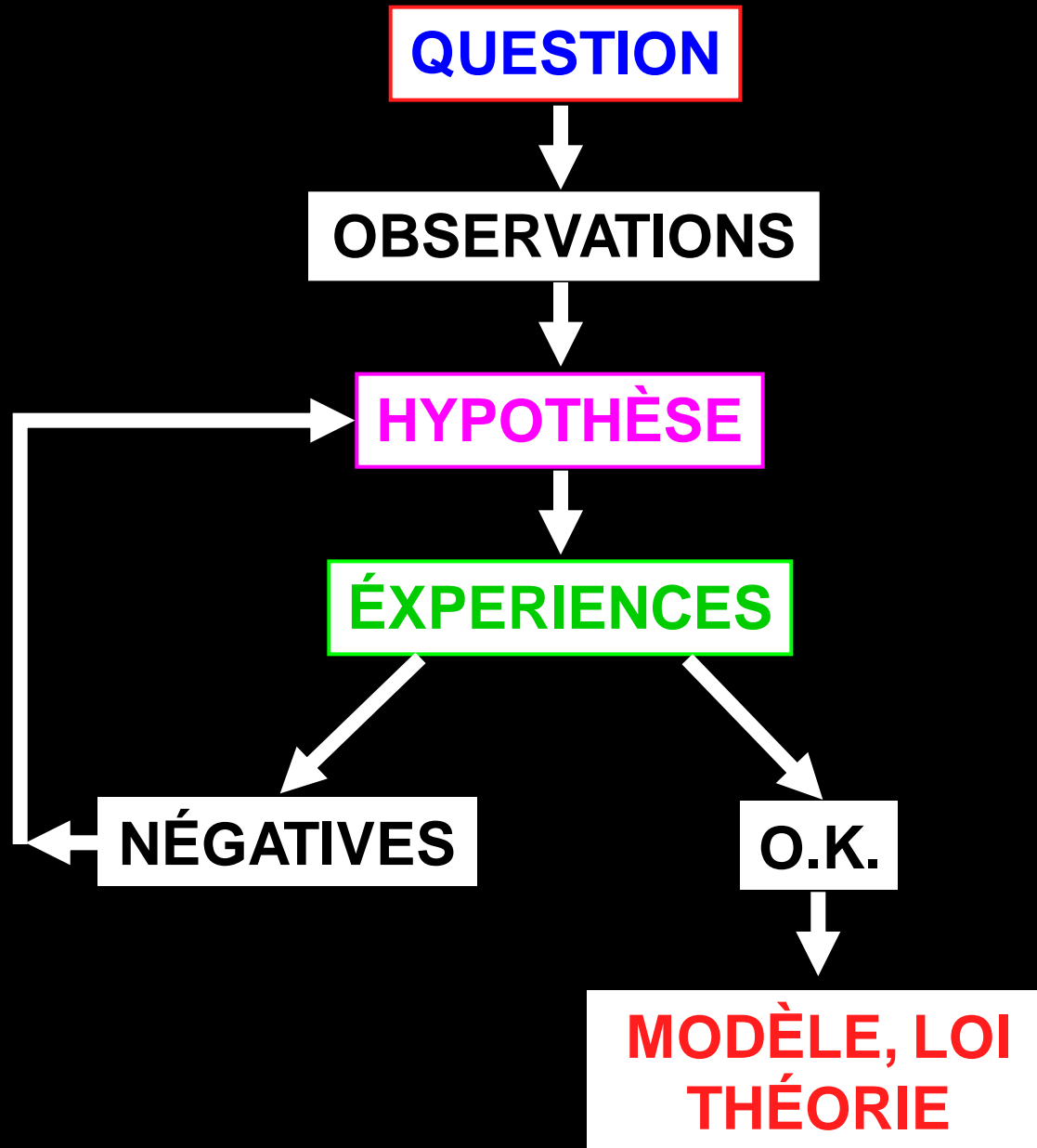
Science pratique et
appliquée

Qu'est-ce que la chimie ?

« La chimie s'occupe de la matière, de ses propriétés et de ses transformations »

« La chimie est l'une des quatre sciences naturelles »

Quelle est la démarche scientifique ?



Pourquoi étudier la chimie ?

Vie humaine :

> 2000 réactions chimiques

thermodynamique, cinétique

strictement contrôlées : $37,0 \pm 0,2$ °C

+ 1-2 °C : maladie !

- 3 °C/3-4 h : mort

Ressources naturelles :

nourriture (agriculture)

matériaux (habitat, loisirs)

textiles (habillement)

médicaments (santé)

Aujourd'hui, la chimie est une science quantitative

→ **18e siècle : descriptive**

Lavoisier énonce en 1793 :

Loi de conservation de la matière :

« Rien ne se perd, rien ne se crée »

Utilisation de la balance analytique



**Antoine Laurent de Lavoisier
(1743-1794)**

- *Généralités*
- *Structure de la matière*
- *Classification périodique*
- *Radioactivité*
- *Liaisons*
- *Thermodynamique chimique*
- *Chimie des solutions*
- *Cinétique*
- *Chimie organique*

MATIÈRE

SUBSTANCES PURES

MÉLANGES

Peinture, lait, air, ...

ÉLÉMENTS

Oxygène, O_2
Hélium, He
Sodium, Na
Chlore, Cl_2

COMPOSÉS

Butane, C_4H_{10}
Dioxyde de carbone, CO_2 ,
Eau, H_2O
Sel de table, NaCl

ÉLÉMENTS ATOMIQUES

Sodium, Na
Hélium, He
Fer, Fe
Argon, Ar

ÉLÉMENTS MOLÉCULAIRES

Oxygène, O_2
Sulfure, S_8
Phosphore, P_4

COMPOSÉS MOLÉCULAIRES

Butane, C_4H_{10}
Dioxyde de carbone, CO_2 ,
Eau, H_2O

COMPOSÉS IONIQUES

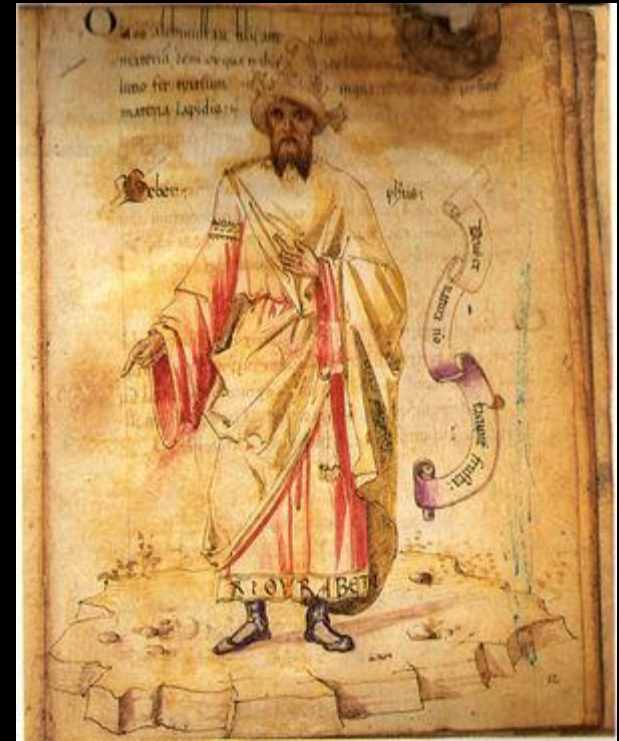
Chlorure de sodium, NaCl
Oxyde de calcium, CaO

origines de la chimie...

Il est considéré comme un des précurseurs de la chimie pour être le premier à l'avoir pratiqué l'alchimie de manière scientifique.

Il reconnut clairement et proclama l'importance de l'expérimentation :

Ses travaux constituèrent des avancées significatives à la fois sur les plans théoriques et expérimentaux.

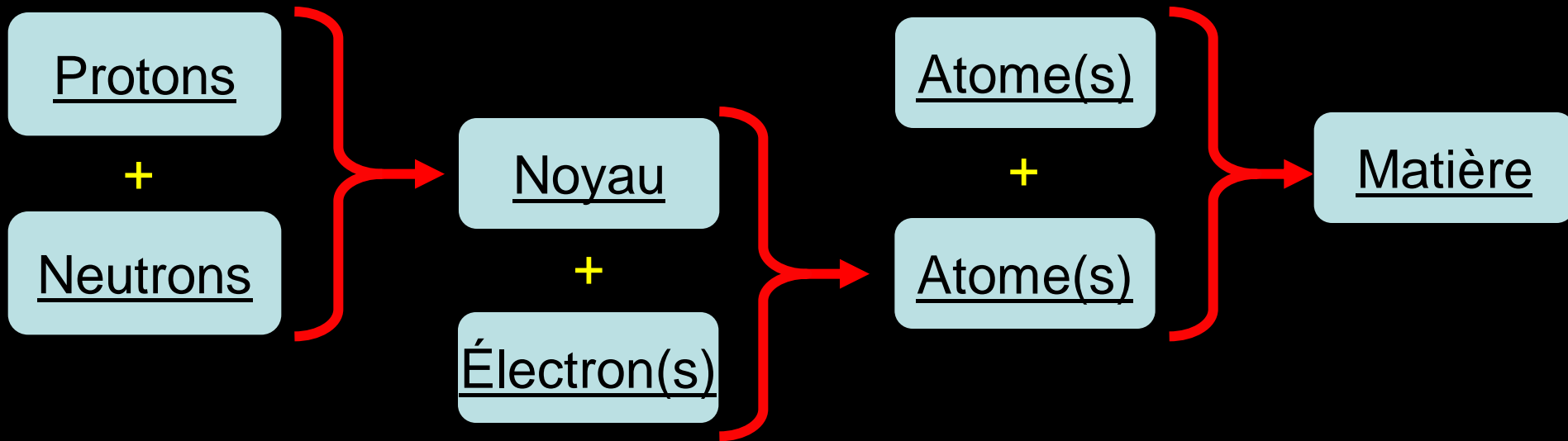


أبو موسى جابر بن حيان الأزدي

Jabir Ibn Hayyan (Geber)

721 - 815

Constitution de la matière.



1.- Constitution de la matière.

1.1.- Atome / Atome-gramme / Masse atomique.

La matière est constituée de particules : **les atomes**

Les atomes étant des particules très petites (Å),
on préfère travailler à notre échelle sur **N** atomes réels,

où **$N = 6,02 \cdot 10^{23}$** = nombre d'Avogadro

Sa valeur a été déterminée expérimentalement par Perrin (pour la 1^{ère} fois en 1908)

même nombre d'atomes que
12 g exactement de ^{12}C pur

N atomes réels = 1 atome-gramme (at.gr) = 1 mole d'atomes

masse atomique d'un élément = masse d'une mole d'atomes de cet élément

Ex.: masse atomique du sodium = $M_{\text{Na}} = 22,99 \text{ g}$

masse d'un atome de Na = $M_{\text{Na}} = 22,99 / 6,02 \cdot 10^{23} = 3,8 \cdot 10^{-23} \text{ g}$

Amadeo Avogadro
(1776-1856)



Jean-Baptiste Perrin
(1870-1942)
Prix Nobel 1926



1.- Constitution de la matière.

1.2.- Molécule / Masse molaire / Volume molaire.

Les atomes peuvent s'unir entre eux et former des molécules.

Les molécules sont également très petites:

On considère plutôt N molécules réelles.

où $N = 6,02 \cdot 10^{23} =$ nombre d'Avogadro

N molécules réelles = 1 molécule-gramme = 1 mole de molécules

masse molaire = masse d'une mole de molécules = Σ masses atomiques
des éléments de
la molécule

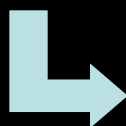
Ex.: masse d'une mole de NaOH = $M_{\text{NaOH}} = M_{\text{Na}} + M_{\text{O}} + M_{\text{H}} =$
 $22,99 \text{ g} + 15,99 \text{ g} + 1 \text{ g} = 39,98$

1.2.- Molécule / Masse molaire / Volume molaire (suite) ...

volume molaire = volume d'une mole de substance

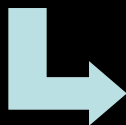
1.3.- Corps purs

Ex.: Ag, H₂O, Cl₂



Corps purs simples

Ex.: H₂, O₂, Cl₂



Corps composés

Ex.: H₂O, NaOH, H₂SO₄, HCl

1.3.- Mélange

composé de molécules différentes

↳ homogène Ex.: café + lait

↳ hétérogène Ex.: huile + eau (non miscible)

Macrocosme et nanocosme

échelle
macroscopique

Mélange

homogène

sép. physique

hétérogène

sép.
physique

éléments

procédés chimiques

composés

échelle
nanoscopique

atomes

procédés chimiques

molécules

noyau

électrons

2.- Notation chimique

Symbole chimique

Ex.: C, Ca, Cd, Ag

**Corps simples
à structure
atomique**

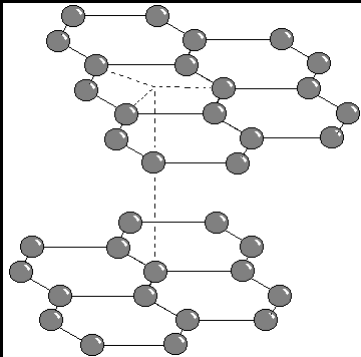
**C, graphite,
diamant**

**Corps à
structure
moléculaire**

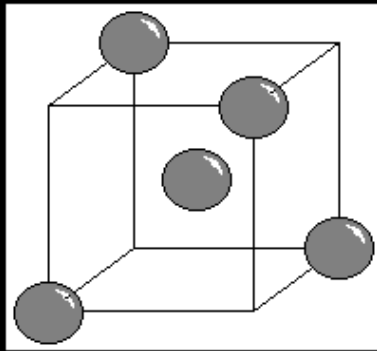
**H_2SO_4 , $AgNO_3$
, H_3PO_4 , ...**

**Composés
ioniques**

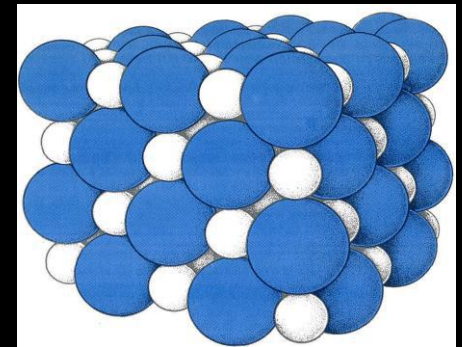
Na^+ , Cl^-



**Le carbone
graphite**

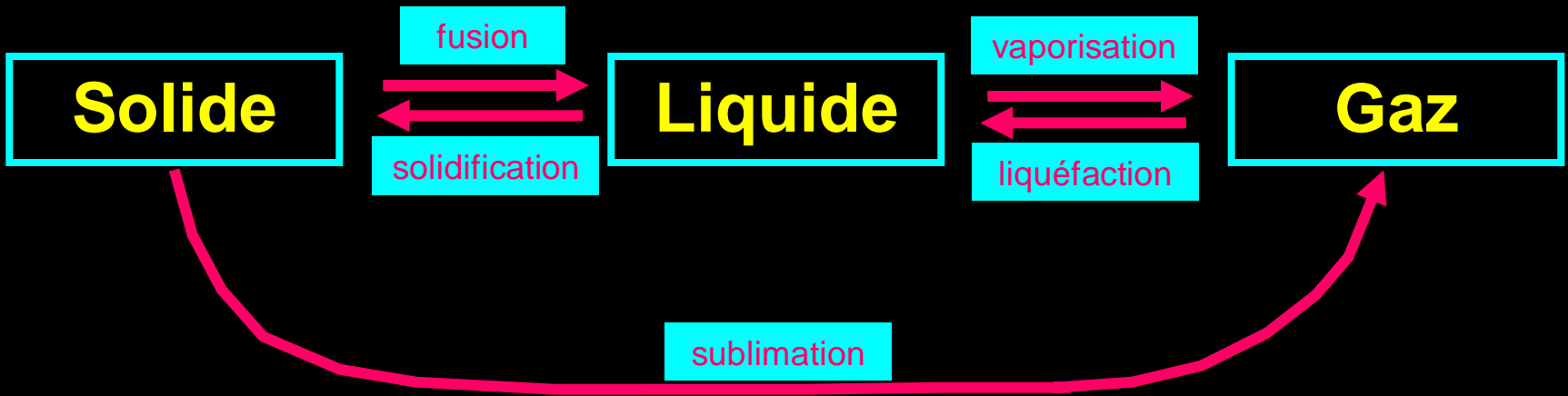


**Le carbone
diamant**



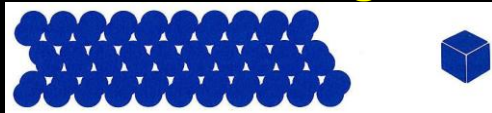
NaCl

3.- Les états de la matière et changement d'état



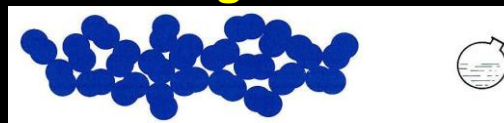
État solide

Densité: 1-20 g/cm³



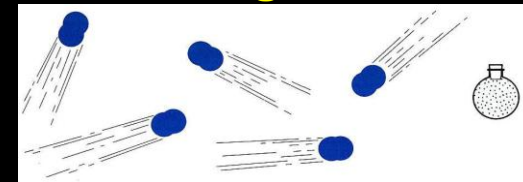
État liquide

1 g/cm³



État gazeux

10⁻³ g/cm³



	Solides	Liquides	Gaz	Plasmas
Forces d'attraction entre atomes ou molécules	Fortes	Moyennes	Moyennes-Faibles	Faibles

4.- Les transformations chimiques

Types	Exemple
La réaction chimique	$aA + bB + \dots \rightarrow cC + dD + \dots$ <p style="text-align: center;">réactifs produits</p>
Les changements d'états	$\text{H}_2\text{O (solide)} \xrightarrow{\text{par chauffage}} \text{H}_2\text{O (liquide)}$
Les transformations allotropiques (par	$\text{Fe}\alpha \rightleftharpoons \text{Fe}\beta$
La décomposition thermique à 900°C et P=1 atm	$\text{CaCO}_3 \rightleftharpoons \text{CaO} + \text{CO}_2$
La dissociation	$\text{I}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{I}(\text{g})$
L'ionisation	$\text{Zn} \rightleftharpoons \text{Zn}^{2+} + 2\text{e}^-$
La solvation (hydratation)	$\text{NaCl}(\text{s}) \xrightleftharpoons{\text{H}_2\text{O}} \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$ $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_2(\text{s}) + 2\text{Cl}^-(\text{aq}) \rightleftharpoons [\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}(\text{aq})$
L'hydrolyse	$\text{SbCl}_6^{3-}, 3\text{H}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{SbOCl} + 5(\text{H}^+\text{Cl}^-)$

4.- Les transformations chimiques...

Types	Exemple
La réaction chimique	$aA + bB + \dots \rightarrow cC + dD + \dots$ réactifs produits
Formation d'un corps	$H_2(g) + 1/2O_2(g) \rightarrow H_2O(l)$
Neutralisation	$HCl + NaOH \rightleftharpoons NaCl + H_2O$
Précipitation (inverse de la dissolution)	$PbCl_2 + H_2O \rightleftharpoons Pb^{2+} + 2Cl^-$
Oxydo-réduction	$Sn^{2+} + Hg^{2+} \rightleftharpoons Sn^{4+} + Hg$
Combustion (cas particulier de l'oxydation)	$3Fe + 2O_2 \rightleftharpoons Fe_3O_4$
Complexation	$Cu^{2+} + 4NH_3 \rightleftharpoons [Cu(NH_3)_4]^{2+}$

5.- Thermochimie

Une réaction chimique est caractérisée par ses effets:

thermique et cinétique

L'effet thermique est mesuré par la chaleur de réaction: ΔH_R

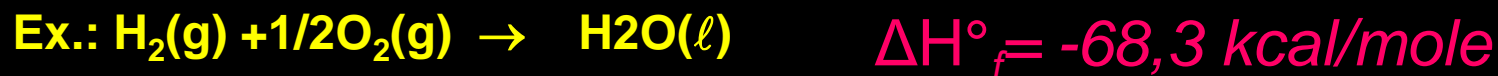
5.1.- Convention

Une réaction endothermique : absorbe la chaleur $\Delta H_R > 0$

Une réaction exothermique : dégage de la chaleur $\Delta H_R < 0$

5.2.- Chaleur de formation d'un corps

Chaleur nécessaire pour former ce corps à partir des éléments pris à l'état standard.



Remarque

Pour un corps simple : $\Delta H^\circ_f = 0$ ainsi, $\Delta H^\circ_{f, \text{H}_2} = 0$

5.3.- Chaleur de réaction ΔH_R

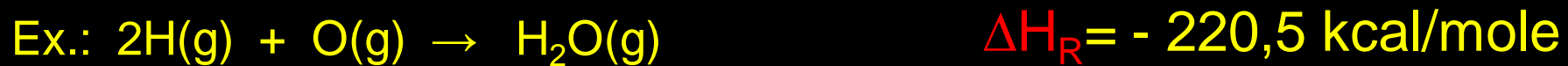
La chaleur d'une réaction ne dépend que de l'état initial et de l'état final. Elle ne dépend pas du chemin suivi (1^{er} principe de la thermodynamique).

* Si on connaît ΔH°_f des réactifs et des produits on a :

$$\Delta H_R = \sum \Delta H^\circ_f (\text{produits}) - \sum \Delta H^\circ_f (\text{réactifs}) : \text{ Loi de Hess}$$

5.4.- Énergie de formation d'une liaison : E_{A-B}

C'est l'énergie mise en jeu au cours de la formation d'une liaison A – B à partir des atomes A et B pris à l'état gazeux



$$E_{\text{O-H}} = 1/2 \Delta H_R = - 110,25 \text{ kcal/mole}$$

Remarque :

- La formation d'une liaison est exothermique : $E_{A-B} < 0$
- La rupture d'une liaison est donc endothermique.

5.5.- Énergie réticulaire : E_r

C'est l'énergie qui accompagne la formation d'un cristal solide à partir de ses ions pris à l'état gazeux.



**** Remarque:**

- Lorsqu'on ne peut atteindre une chaleur de réaction par l'expérience, il est toujours possible de la calculer à partir d'un cycle tenant compte du principe de l'état initial et de l'état final.

C'est le cas de E_R qui se calcule à partir d'un cycle (cycle de Born-Haber) ou de la formule Born-Meyer.

- La formation d'un cristal est toujours exothermique $E_R < 0$

6.- Les solutions

6.1.- Définition

Une solution est un mélange homogène de corps purs ne réagissant pas entre eux.

- * Le corps qui est en plus grande proportion est appelé **SOLVANT**.
- * Le corps que l'on dissout dans le solvant est appelé **SOLUTÉ**.

Solution = Soluté + Solvant

6.2.- Saturation, sursaturation

- La quantité de soluté dans un solvant a une valeur maximum à T et P données : c'est la **SOLUBILITÉ** du soluté dans ce solvant. La solution est alors dite saturée (1 phase).
- Si la quantité de soluté est supérieure à sa solubilité maximum avec toujours une seule phase, la solution est dite sursaturée.

Différentes expressions de la concentration

Molarité: (M)

Nombre de moles d'une espèce chimique par litre de solution.
– donne le nombre total de moles d'un soluté par litre de solution.

$$M = \text{mol l}^{-1} = \text{mmol ml}^{-1}$$

Molalité: (m)

Nombre de moles de soluté par 1000g de solvant

Normalité: (N)

Nombre de gramme de soluté/Masse équivalente de soluté x nb de litres de solution
Masse équivalente de soluté = Nb de grammes de soluté / nb d'équivalents

Pourcentage: (%)

Pour-cent masse (w/w)	$= \frac{\text{masse soluté}}{\text{masse solution}} \times 100\%$
------------------------------	--

Pour-cent volume (v/v)	$= \frac{\text{volume soluté}}{\text{volume solution}} \times 100\%$
-------------------------------	--

Pour-cent masse/volume (w/v)	$= \frac{\text{masse soluté/g}}{\text{volume solution/ml}} \times 100\%$
-------------------------------------	--

Fraction molaire: (X_i)

rapport du nombre de moles d'un composant **i** avec le nombre total de moles de tous les composants en solution.

$$X_i = \frac{i}{a + b + \dots + i + \dots}$$

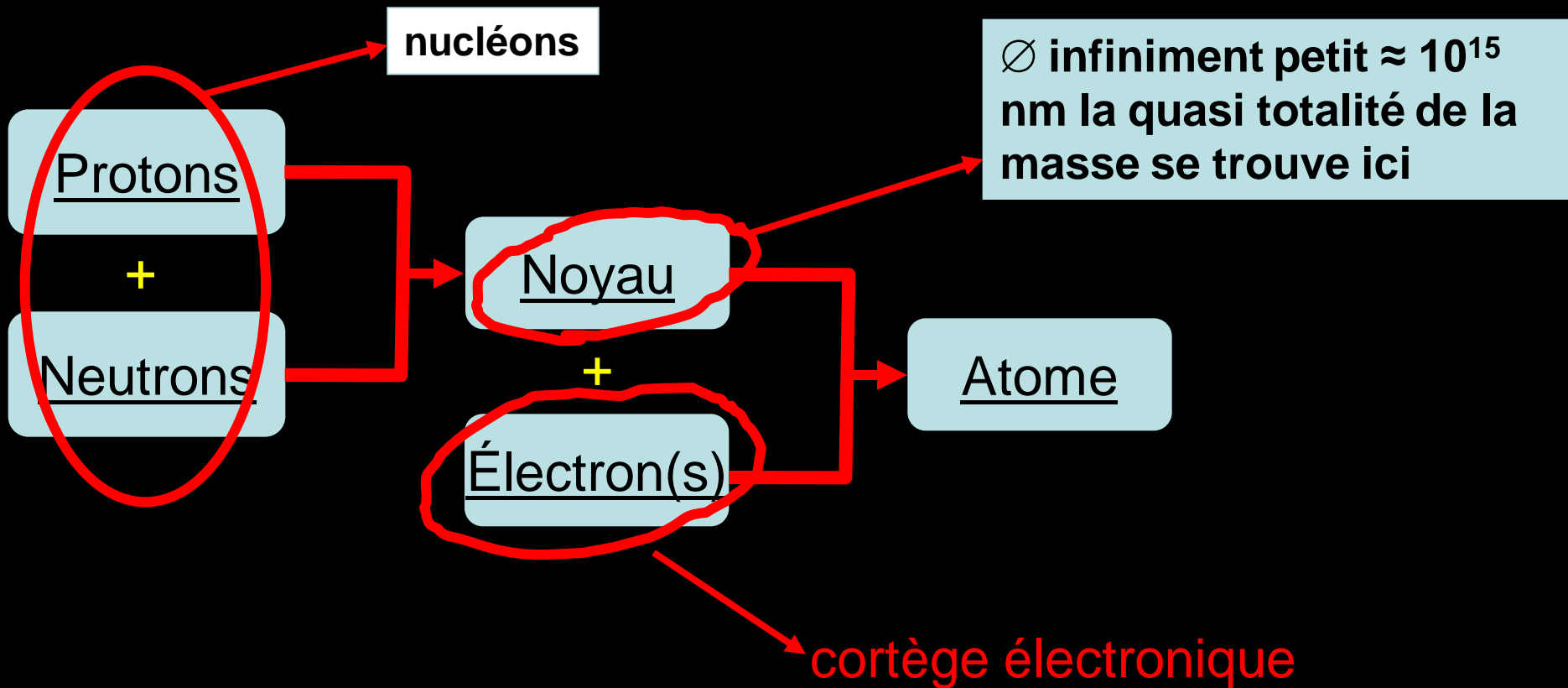
LA CLASSIFICATION PÉRIODIQUE

I.- CONFIGURATION ÉLECTRONIQUE DE L'ATOME

1.- La structure de l'atome.

2.- L'équation de Schrödinger et les 4 nombres quantiques.

1.- La structure de l'atome.



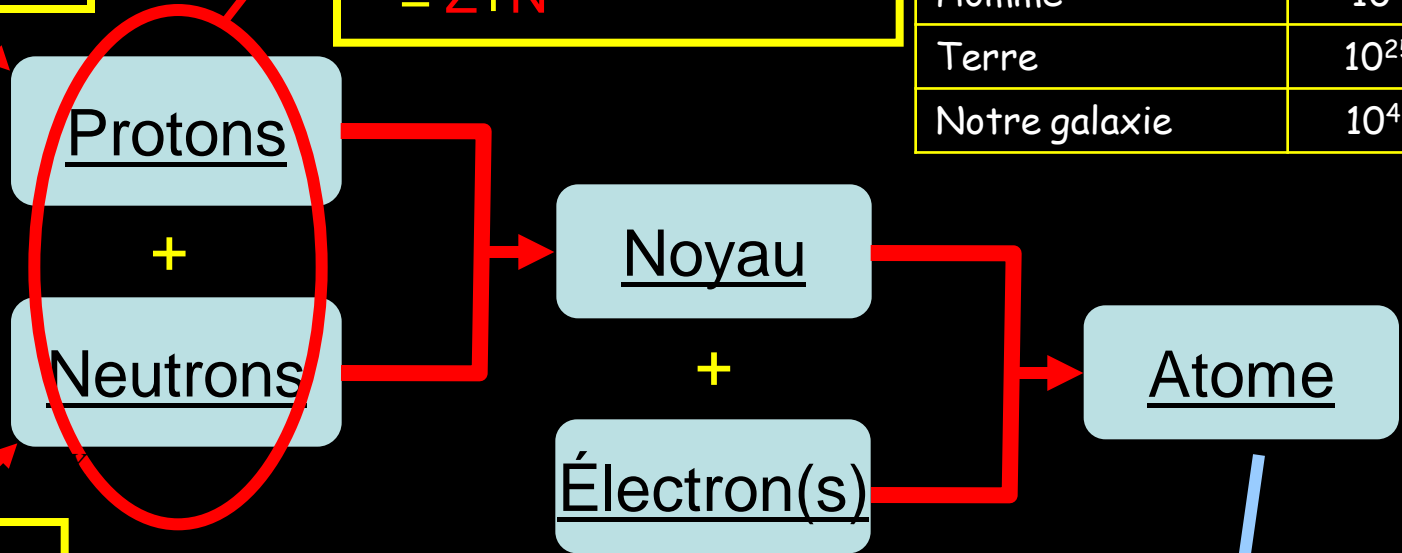
On dit que la matière est **quantifiée**, ou **discontinue** car l'atome est constitué de particules élémentaires : noyau et électron(s)

Représentation du noyau :

Z = nb. de protons
= masse atomique

A = nb. de nucléons
= nombre de masse
= $Z+N$

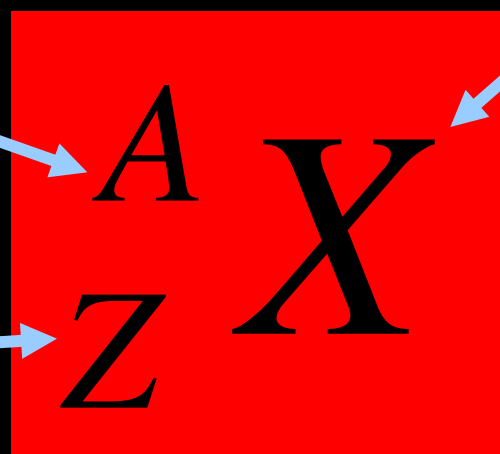
N = nb. de neutrons



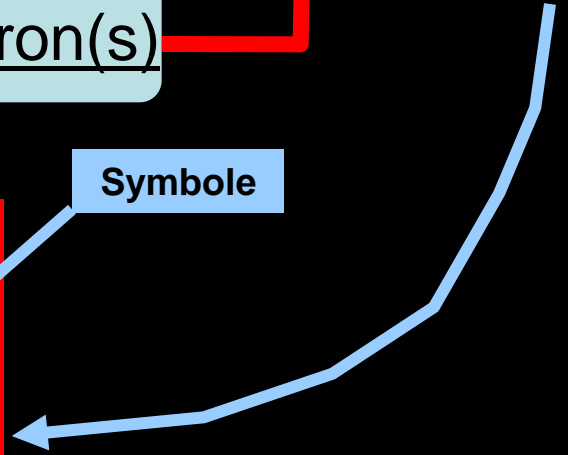
	kg
Électron	10^{-30}
Atome d'hydrogène	10^{-27}
Goutte de pluie	10^{-6}
Homme	10^2
Terre	10^{25}
Notre galaxie	10^{41}

Nb. de nucléons
= "nombre de masse"

Numéro atomique

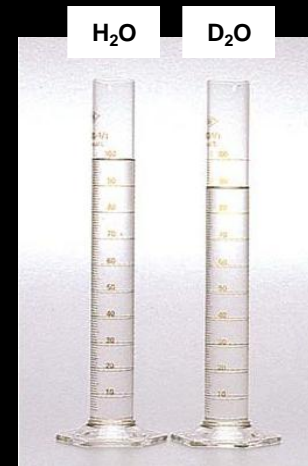


Symbole



Les isotopes ont un « Z » identique
mais un « A » différent.

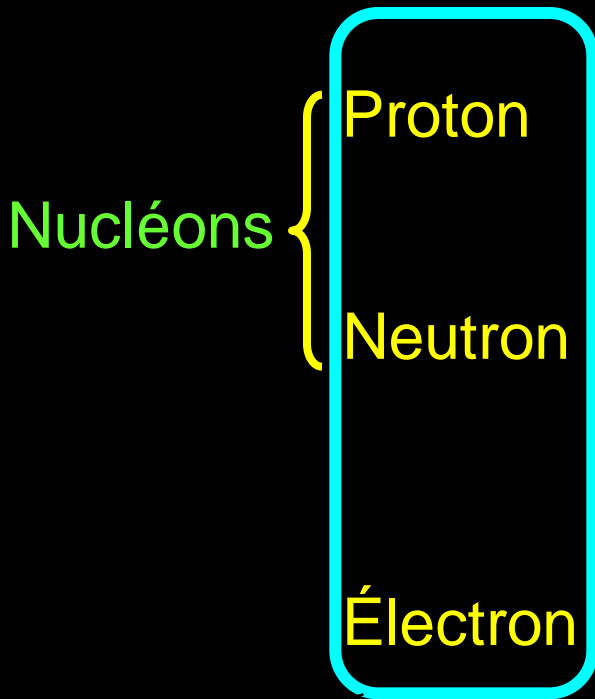
		Z	N	
Hydrogène	${}^1_1\text{H}$	1p	-	1e
Deuterium	${}^2_1\text{H}$	1p	1n	1e
Tritium	${}^3_1\text{H}$	1p	2n	1e
Carbone	${}^{12}_6\text{C}$	6p	6n	6e
	${}^{14}_6\text{C}$	6p	8n	6e



Particules

Charge

Masse



$$\left\{ \begin{array}{l} +1 \\ \text{ou} \\ 1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 1,00728 \text{ u.m.a} \\ \text{ou} \\ 1,6725 \times 10^{-27} \text{ Kg} \end{array} \right.$$

0

$$\left\{ \begin{array}{l} 1,00867 \text{ u.m.a} \\ \text{ou} \\ 1,6750 \times 10^{-27} \text{ Kg} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -1 \\ \text{ou} \\ -1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 0,000549 \text{ u.m.a} \\ \text{ou} \\ 0,91 \times 10^{-30} \text{ Kg} \end{array} \right.$$

Coulomb

(1 u.m.a. = unité de masse atomique = 1/12 de la masse de l'atome de carbone)

Détermination de la charge e de l'électron et sa masse m

Les expériences qui ont permis de déterminer : e/m_e

- le rapport e/m_e de la charge e à la masse m de l'électron
(expérience de J.J. Thomson)



Joseph John Thomson
1856 – 1940
Prix Nobel de physique, 1906

- ainsi que la charge e de l'électron
(expérience de R.A. Millikan)



Robert Andrews Millikan
1868 – 1953
Prix Nobel de physique, 1923

sont bien connues.

Ces expériences utilisent la déviation de la trajectoire d'un électron sous l'effet d'un champ électrique ou magnétique.

Expérience de Thomson :

$$e/m_e$$

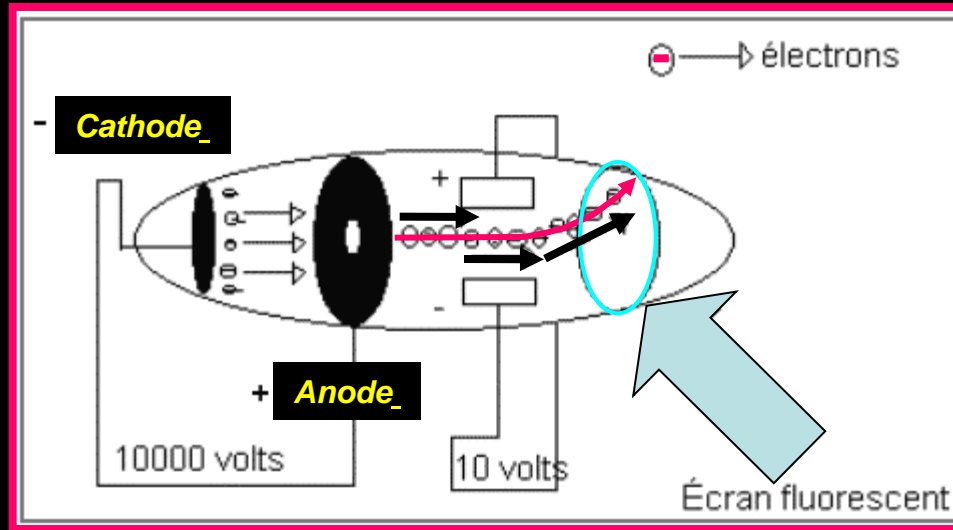


Schéma de l'expérience des rayons cathodiques réalisée par Thomson en 1897.

Thomson a découvert la masse de l'électron en mesurant, dans le tube cathodique, la déviation du faisceau lumineux en direction de l'anode positive, provoquée par le courant électrique.

C'est alors qu'il conclut que la masse de l'électron était de $9,1083 \times 10^{-28}$ g et qu'il avait une charge électrique de $-1,602 \times 10^{-19}$ C.

La charge de l'électron négative est l'unité de base en électricité.

Expérience de Millikan (1909):

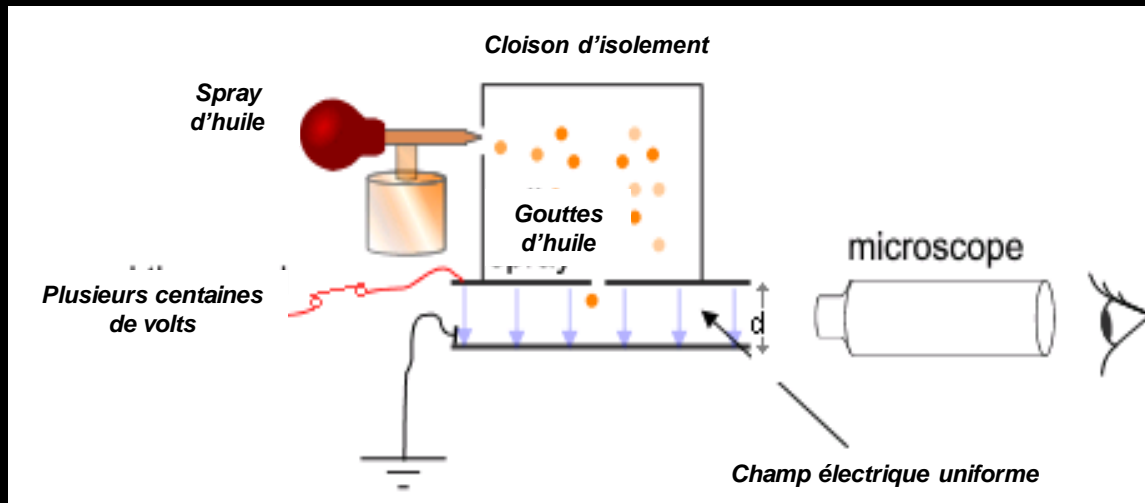


Schéma de l'expérience de la goutte d'huile Millikan (Université de Chicago, début du XX^{ième} siècle)

L'expérience consiste à pulvériser de minuscules gouttes d'huiles électrisées entre les deux électrodes horizontales d'un condensateur plan chargé. Les minuscules gouttes subissent plusieurs forces qui s'équilibrent rapidement et font que chaque goutte se déplace à vitesse constante mesurable avec une lunette de visée et un chronomètre: L'expérience consiste à sélectionner une gouttelette et à analyser son mouvement sous l'action des forces agissant sur elle à différentes valeurs d'ionisation.

Millikan, par simple mesure de vitesse par le rapport de la distance parcourue sur le temps mis pour la parcourir sur une gouttelette d'huile qu'il ionisait en l'irradiant par rayons X, observa **expérimentalement** que les valeurs d'ionisation étaient toutes **multiples entières de $e = 1,592 \times 10^{-19} \text{ C}$** , constante que l'on connaît aujourd'hui sous le nom de charge élémentaire et que l'on note traditionnellement **e** ; cette expérience s'est avérée être la première preuve de la quantification de la charge électrique qui est strictement toujours un multiple **entier** positif ou négatif de cette valeur fondamentale **e** .

Cette expérience et ses conclusions sur la quantification des charges valurent à **Millikan** le **Prix Nobel de physique** en 1923.

LA CLASSIFICATION PÉRIODIQUE

I.- CONFIGURATION ÉLECTRONIQUE DE L'ATOME

1.- La structure de l'atome.

Un peu d'histoire

Les atomes étant constitués d'un noyau chargé positivement, très petit (10^{-14} m) et très dense (10^{17} kg/m³), autour duquel se meuvent des électrons chargés négativement.

Lorsque ceci fut reconnu au 19^e siècle, il a paru naturel que chimistes et physiciens tentent d'appliquer à l'atome les lois de la mécanique classique.

Ils se rendirent cependant rapidement compte que ces lois ne sont pas correctes dans le cas de l'atome et durent les modifier en conséquence, créant ainsi une nouvelle discipline, la mécanique quantique.

La théorie quantique est née en 1900 lorsque Max Planck énonça le calcul théorique de la loi de distribution énergétique pour l'émission du corps noir.

Un peu d'histoire (suite)

Planck admit que les particules n'émettent pas de façon continue, mais au contraire par petits paquets énergétiques proportionnels à la fréquence de la lumière émise, $h\nu$; la constante de Planck est une **constante universelle** dont la dimension est le produit d'une énergie par un temps :

$$h = 6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

En 1905, A. Einstein élaborera la théorie de l'effet photoélectrique et celle des chaleurs spécifiques et suggéra que le **quantum d'énergie** $h\nu$ est émis dans une seule direction, comme une particule ; celle-ci fut appelée **photon**.

Le développement de la théorie quantique prit beaucoup de temps.

Les règles de quantification, nécessaires pour **modifier la mécanique classique**, étant difficiles à trouver.

Un premier modèle vit le jour, celui de l'atome de Bohr et de Sommerfeld.

Le pas décisif fut franchi par Schrödinger et Heisenberg, dont les travaux débouchèrent sur la conception moderne de la structure électronique.

Eckart, puis Dirac avaient trouvé les bases mathématiques nécessaires. L'approximation de Born a permis de réduire la dimensionnalité du problème.

La classification périodique...

2.- L'équation de Schrödinger et les 4 nombres quantiques



Selon la mécanique classique, (Théorie de Bohr - Sommerfeld) les électrons gravitent autour du noyau de l'atome en décrivant des trajectoires planes parfaitement définies (cercle ou ellipse).



Niels Henrik David Bohr
1885 – 1962

Prix Nobel de physique, 1922

Arnold Sommerfeld
1868 – 1951

En mécanique quantique la notion de trajectoire ou orbite de l'électron en mouvement perd toute signification.

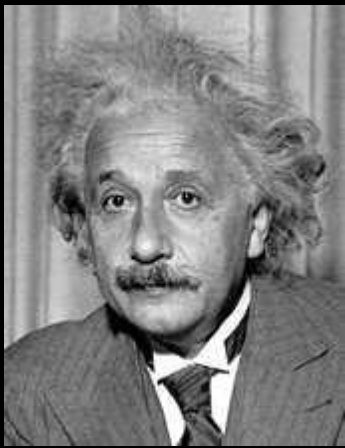
2.1- L'hypothèse de de Broglie (1924)

La mécanique ondulatoire repose sur l'hypothèse émise par Louis de Broglie :

Il se base sur les travaux de Einstein, Planck et Compton qui avaient proposé la **dualité onde/particule de la lumière** et propose que :



Louis de Broglie
1892 – 1987
Prix Nobel de physique en 1929



Albert Einstein
1879 – 1955
Prix Nobel de physique en 1921



Max Planck
1858 – 1947
Prix Nobel de physique en 1919

À tout électron est associé une onde électromagnétique par :

$$\lambda = \frac{h}{mV}$$

Ainsi, une particule en mouvement (électron, atome, personne...) possède des propriétés ondulatoires et donc est caractérisée par une longueur d'onde :

$$\lambda = \frac{h}{mV}$$

longueur d'onde

constante de Planck = $6,63 \times 10^{-34}$ Js

p = quantité de mouvement
= masse x vitesse

2.1- Principe d'incertitude de Heisenberg (1925)

Ce principe concerne la position de l'électron dans un atome.

Comment mesurer avec une précision infinie à la fois la **position** et la **vitesse** d'une particule comme l'électron ?

Impossible car toute technique mesurant la position va modifier la vitesse et vice-versa.



Werner Heisenberg
1901 – 1976

Prix Nobel de physique, 1932



$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h/2\pi$$



$$\Delta(mv_x) \cdot \Delta x \geq h/2\pi$$



$$m\Delta v_x \cdot \Delta x \geq h/2\pi$$

où Δp_x indétermination sur la quantité de mouvement

Δx indétermination sur la position

Une onde ne peut pas être localisée avec précision dans l'espace

Exemple:

Utiliser un rayonnement pour mesurer la position de l'électron:
Il faut utiliser une radiation de courte longueur d'onde, sinon la position ne sera pas bien définie....

mais les photons à haute énergie (courte longueur d'onde) changent le moment d'une particule.

Le principe:

Il est impossible de déterminer simultanément de façon précise la position et la vitesse d'une particule.

- Δx : incertitude maximale sur la position
- $\Delta(mv)_x$: incertitude maximale sur la quantité de m^{vt} (ou moment) dans la direction x

$$\Delta x \times \Delta(mv)_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \times \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}$$

où ici $\hbar = h/\pi$

2.3- Équation d'onde ou de Schrödinger (1926)

La probabilité de présence d'un électron peut s'exprimer à l'aide d'une fonction d'onde Ψ

Ψ représente l'amplitude de l'onde associée à l'électron.



Erwin Schrödinger

1887 – 1961

Prix Nobel de physique, 1933

La fonction d'onde Ψ est solution d'une équation, appelée équation d'onde, établie par Schrödinger et qui s'écrit :

Amplitude de l'onde associée

Masse

Énergie potentielle électrostatique du système noyau-électron

Opérateur Laplacien

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)\Psi = 0$$

Cte. de Planck

Énergie totale du système noyau-électron

Opérateur Hamiltonien
l'opérateur de l'énergie totale du système

Forme générale

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Schrödinger, qui avait accepté l'hypothèse de de Broglie, a essayé de trouver une équation permettant de décrire le mouvement ondulatoire des particules atomiques

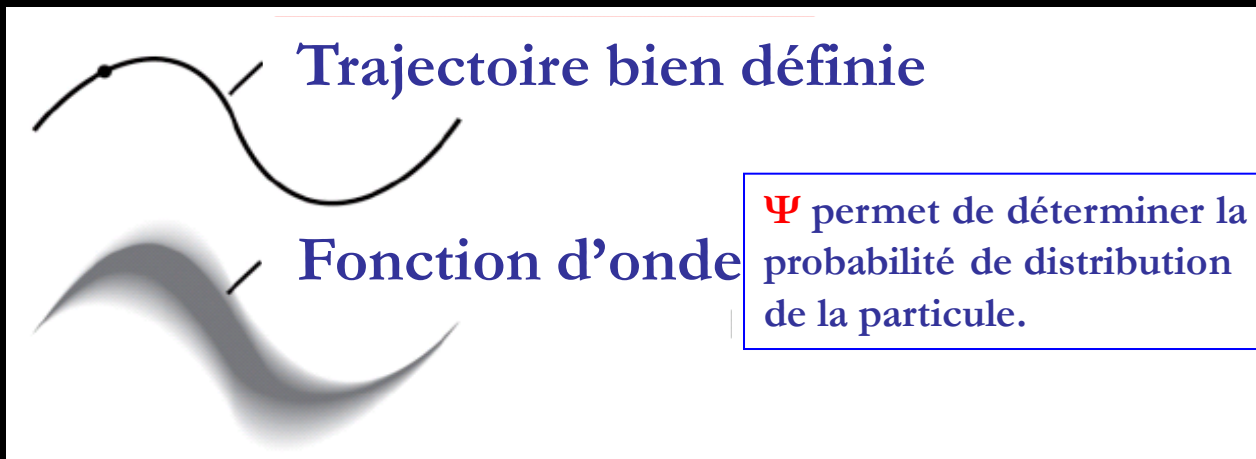
L'équation de Schrödinger permet de retrouver la signification des nombres quantiques.

Ψ est fonction des nombres quantiques $n, \ell,$ et m d'où la notation $\Psi_{n,\ell,m}$

Il n'y a pas de **preuve rigoureuse** de la validité de l'équation, cependant elle est à la base de notre connaissance des atomes et des molécules...donc de la chimie

Les fonctions d'onde

La fonction d'onde $\Psi(x,y,z,t)$ associée à une particule unique, ici c'est l'électron, non relativiste (vitesse très inférieure à la vitesse de la lumière) est un modèle mathématique, sans signification physique, non déterminable physiquement, non observable.

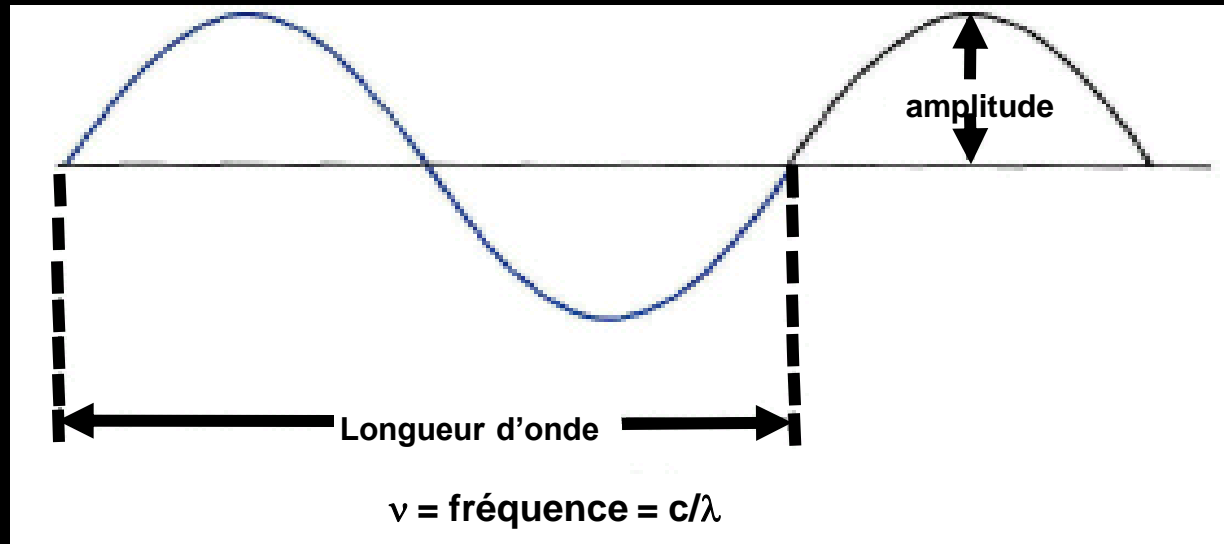
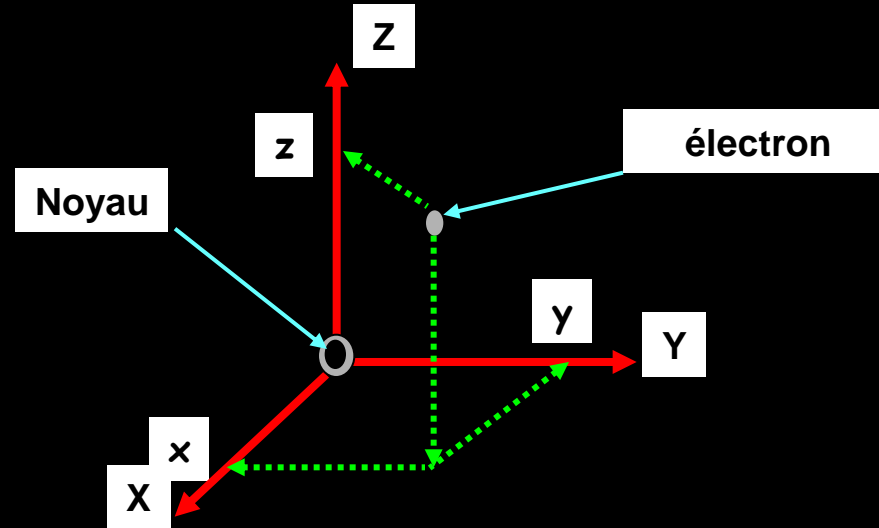


Ψ^2 est mesurable et représente la probabilité de trouver l'électron au point (x, y, z) au temps t . C'est la densité électronique. L'ensemble des $\Psi^2 =$ orbitale

Ψ^2 caractérisées par les 4 nombres quantiques :

Ψ est une fonction purement mathématique :

- elle n'a pas de signification physique,
- elle est fonction des coordonnées de l'électron,
- elle est définie par les 3 nombres quantiques : n , l et m_l : $\Psi_{n,l,m}$

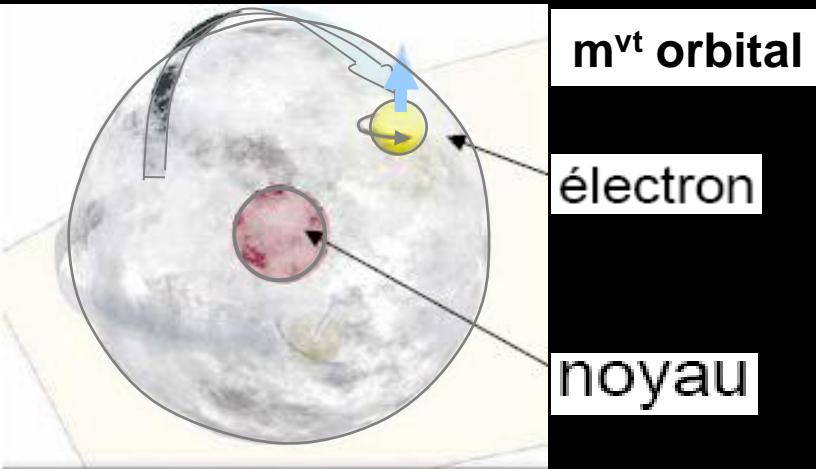


2.4- Notion d'orbitale atomique

Dans la théorie de Bohr-Sommerfeld le triplet de nombres quantiques (n, ℓ, m) définit une orbite.

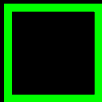
En mécanique ondulatoire, l'orbite est remplacée par une orbitale atomique (O.A).

Une orbitale atomique (O.A) est représentée conventionnellement par une surface fermée limitant le volume dans lequel la probabilité de présence de l'électron est de 95 %.

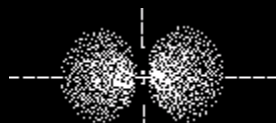


La forme des O.A est fonction du nombre quantique ℓ .

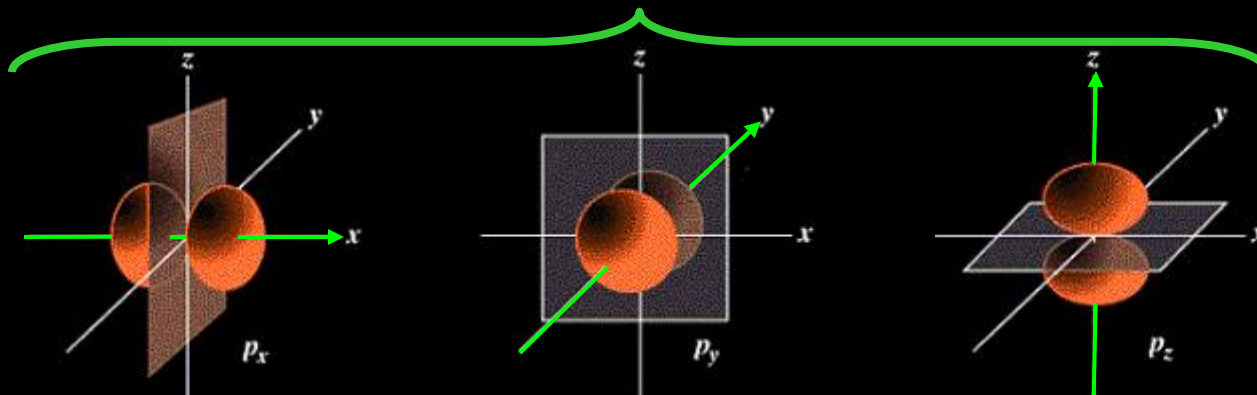
Forme des O.A

Symboliquement les O.A sont représentées par une case 

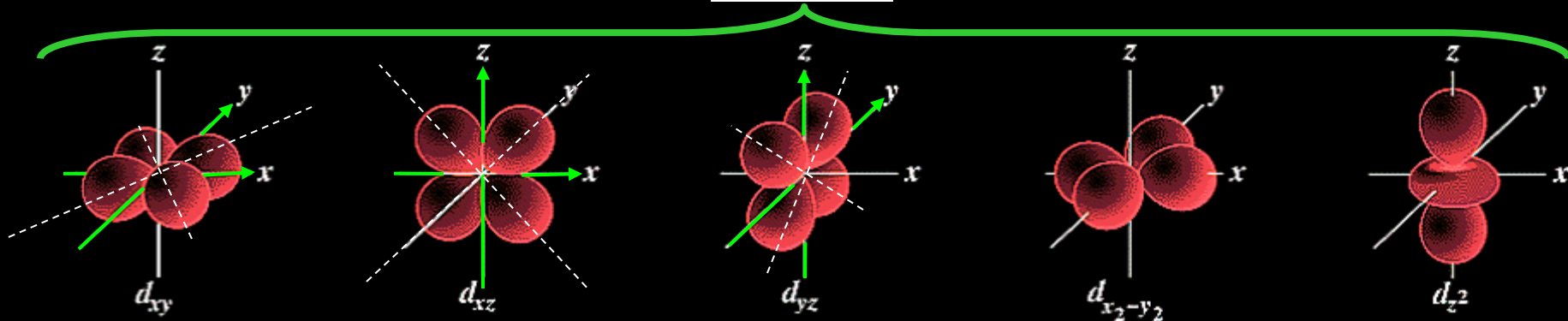
Orbitale s



Orbitale p



Orbitale d



2.5- Les quatre nombres quantiques n , ℓ , m et m_s

En mécanique ondulatoire, tout comme en mécanique classique, les électrons sont décrits à l'aide des quatre nombres quantiques :

$$n, \ell, m, m_s$$

Ils sont répartis dans des orbitales.

Ces dernières sont caractérisées par les 3 nombres quantiques n, ℓ, m

n, ℓ, m ont été introduit empiriquement par la théorie de Bohr - Sommerfeld puis retrouvés par résolution de l'équation de Schrödinger.

Ψ^2 caractérisées par 4 nombres quantiques n, ℓ, m, m_s

1. Le nombre quantique principal n

Quantifie l'énergie de l'électron. _

Définit une couche électronique ou niveau d'énergie.

$n = 1, 2, 3, \dots, \infty$

$n = 1$



couche K

$n = 2$



couche L

$n = 3$



couche M

$n = 4$



couche N

etc...

2. Le nombre quantique secondaire

l

Caractérise la forme de l'orbitale.

Définit une sous-couche électronique ou un sous-niveau d'énergie.

$$0 \leq l \leq n - 1$$

$$l = 0$$



sous-couche *s*

sharp

$$l = 1$$



sous-couche *p*

principal

$$l = 2$$



sous-couche *d*

diffuse

$$l = 3$$



sous-couche *f*

fundamental

3. Le nombre quantique magnétique m_l

Définit l'orientation de l'orbitale.

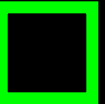
$$-l \leq m_l \leq +l$$

$$l = 0$$

$$\Rightarrow m_l = 0$$

\Rightarrow 1 seule orientation

\Rightarrow 1 orbitale s

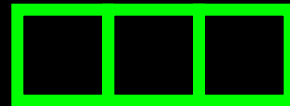


$$l = 1$$

$$\Rightarrow m_l = -1 ; 0 ; +1$$

\Rightarrow 3 orientations

3 orbitales p

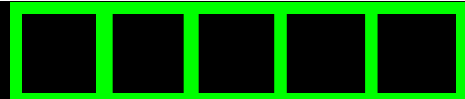


$$l = 2$$

$$\Rightarrow m_l = -2 ; -1 ; 0 ; +1 ; +2$$

\Rightarrow 5 orientations

5 orbitales d



4. Un 4^{ième} nombre quantique : le spin

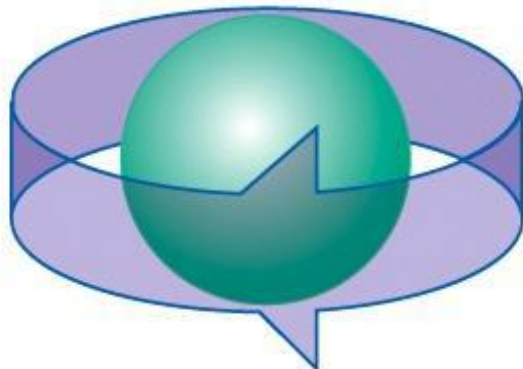
Il se rapporte au sens de rotation de l'électron sur son axe.

Quantifie le moment de rotation de l'électron.

$$m_s = +\frac{1}{2}$$



$$m_s = -\frac{1}{2}$$



s : fonction d'onde du spin

2 états possibles :
 $s = \frac{1}{2} (\uparrow) ; -\frac{1}{2} (\downarrow)$

Principe de Pauli :

2 électrons ne peuvent pas avoir 4 nombres quantiques identiques

Résumé

$$0 \leq l \leq n-1$$

couche	n	l	m	sous couche	Nb orbitales	type	Nb. d'états $2n^2$
	$n \in \mathcal{N}$		$-l \leq m_l \leq +l$				
K	1	0	0	s	1	$1s$	2
L	2	0	0	s	1	$2s$	8 (2+6)
		1	-1 0 +1	p	3	$2p$	
M	3	0	0	s	1	$3s$	18 (2+6+10)
		1	-1 0 +1	p	3	$3p$	
		2	-2 -1 0 +1 +2	d	5	$3d$	

3. Structure électronique des atomes.

Il est possible de déterminer la configuration électronique d'un atome en disposant du noyau de charge $+Ze$, Z électron(s) de façon que l'atome soit électriquement neutre.

Les électrons occupant les orbitales atomiques suivant les règles de :

Pauli,

Klechkowski

et de

Hund



Wolfgang Ernst Pauli
1900 – 1958

Prix Nobel de physique, 1945



Friedrich Hund
1896 – 1997

3.1. Règles de remplissage des orbitales atomiques.

Les règles pour établir la configuration électronique d'un atome à l'état fondamental.

Règle n°1 : Le principe de Pauli

Énoncé :

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques identiques.

Corollaire : Une O.A ne peut décrire que deux électrons au maximum, et dans ce cas leurs spins sont opposés.

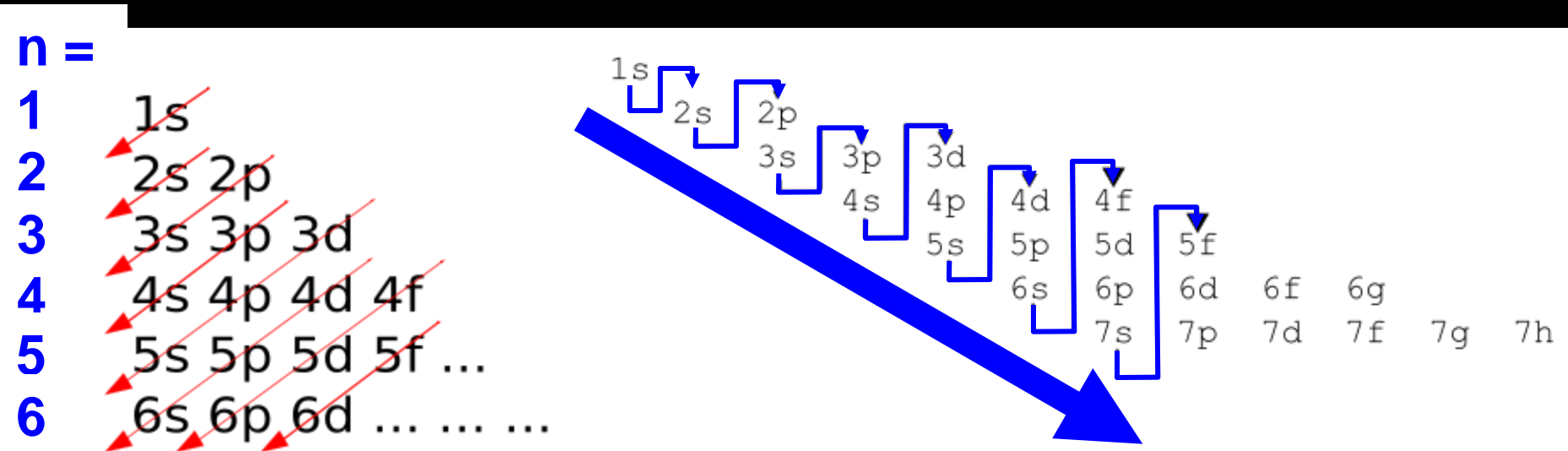
Le principe de Pauli est un principe fondateur de la physique quantique, auquel aucune configuration électronique ne peut déroger.

Règle n°2 : La règle de Klechkowski

3.1. Règles de remplissage des orbitales atomiques....

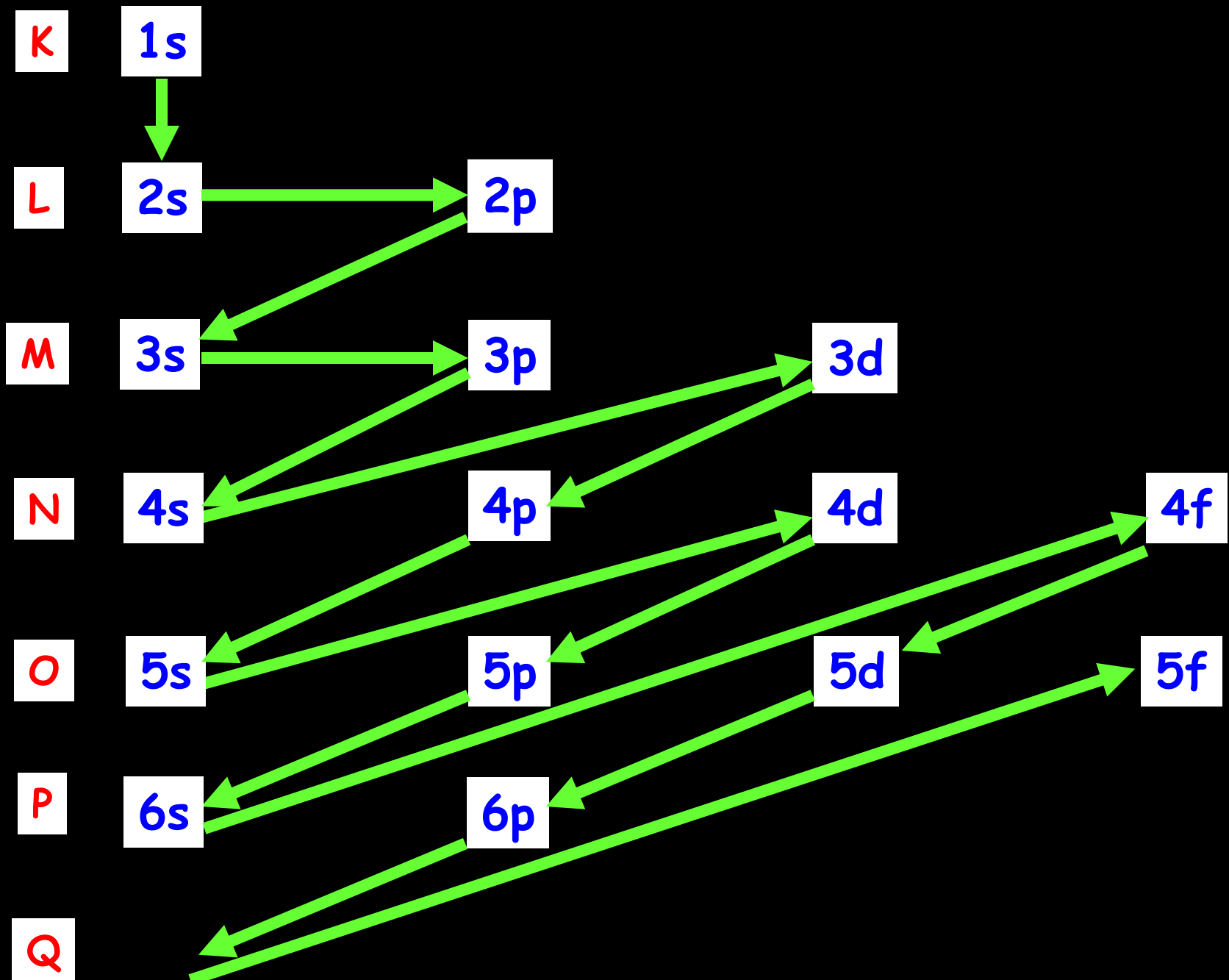
Règle de Klechkowski

Énoncé : « Les orbitales sont remplies de sorte que $n + \ell$ soit croissant »
où n est le nombre quantique principal et ℓ le nombre quantique secondaire. De plus, « En cas d'égalité, la sous-couche ayant le plus petit n est remplie en premier. »



Comme souvent, une règle comporte des exceptions

couche



3.1. Règles de remplissage des orbitales atomiques....

Règle n°3 : La règle de Hund

Énoncé :

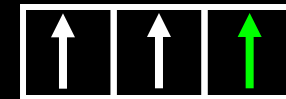
Lorsque plusieurs O.A de même énergie sont disponibles, les électrons occupent d'abord le maximum d'O.A avec leurs **spins parallèles** avant de s'apparier.

même valeur du nombre m_s

Orbitale p^3



Non

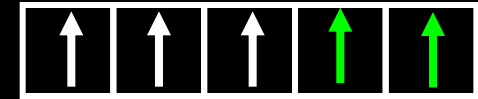


Oui

Orbitale d^5



Non



Oui

État excité

État fondamental:
plus stable

Principe de l'énergie minimale

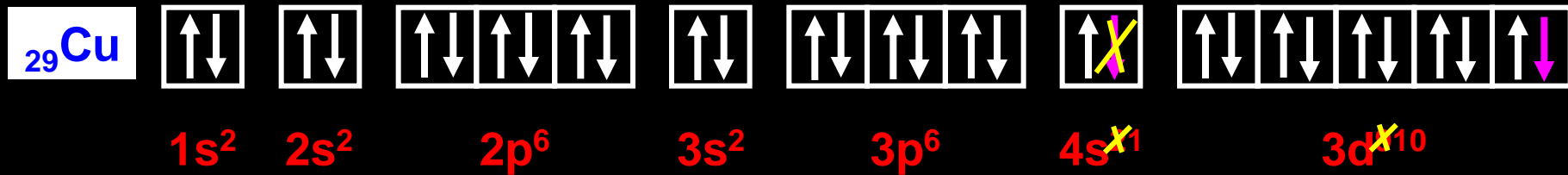
Une s/couche d présente une stabilité max. si elle est soit à moitié remplie soit totalement remplie.

3.2. Représentation des structures électroniques.

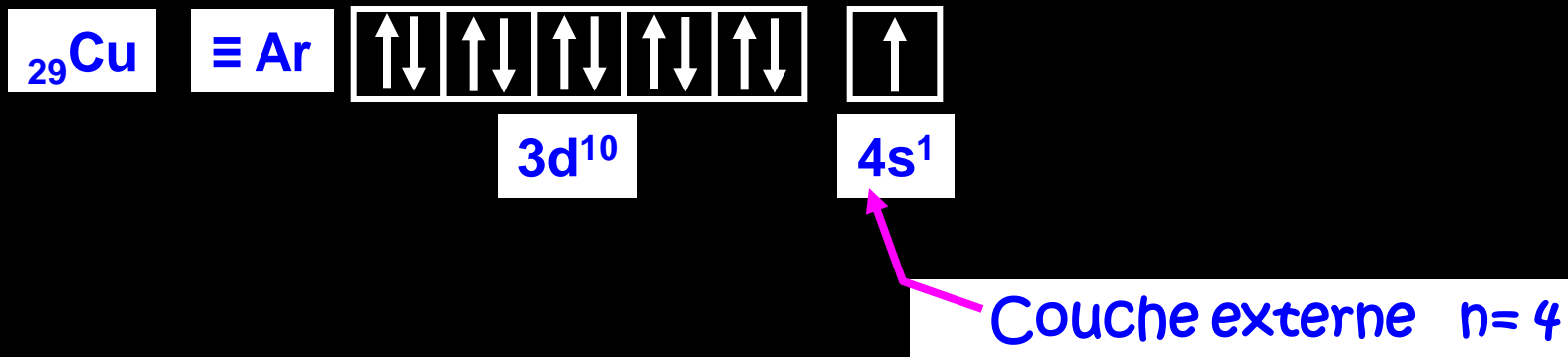
Représentation de la structure électronique de l'atome de cuivre $_{29}\text{Cu}$

On applique les règles énoncées précédemment.

1. Représentation par les cases quantiques.



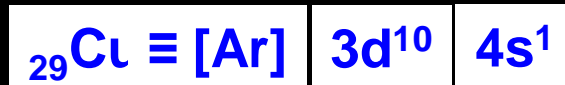
On fait apparaître la couche externe en écrivant :



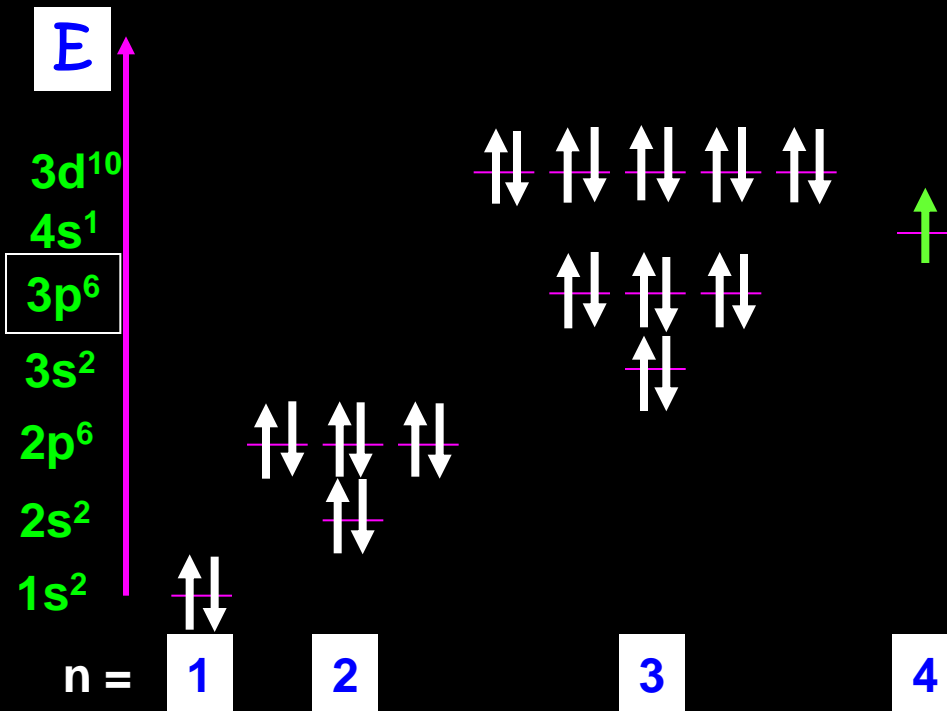
2. Représentation par les symboles.



Pour faire apparaître la couche externe On écrit :



3. Représentation par le diagramme énergétique.



N° atomique	<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	<i>s</i>	Orbitale	Élément
1	1	0	0	+1/2	1s	H
2	1 1	0 0	0 0	+1/2 -1/2	1s	He
3	1	0	0	+1/2	1s	Li
	1	0	0	-1/2		
	2	0	0	+1/2	2s	
4	1	0	0	+1/2	1s	Be
	1	0	0	-1/2		
	2	0	0	+1/2	2s	
	2	0	0	-1/2		
5	1	0	0	+1/2	1s	B
	1	0	0	-1/2		
	2	0	0	+1/2	2s	
	2	0	0	-1/2		
	2	1	-1	+1/2	2p _x	



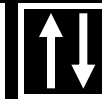
1s¹



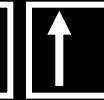
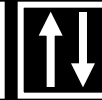
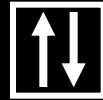
1s²



1s² 2s¹



1s² 2s²



1s² 2s² 2p¹

6	1	0	0	$+\frac{1}{2}$	1s
	1	0	0	$-\frac{1}{2}$	
	2	0	0	$+\frac{1}{2}$	2s
	2	0	0	$-\frac{1}{2}$	
	2	1	-1	$+\frac{1}{2}$	2p _x
	2	1	0	$-\frac{1}{2}$	2p _y

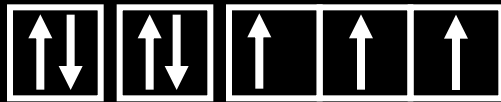
C



$1s^2 2s^1 2p^3$

7	1	0	0	$+\frac{1}{2}$	1s
	1	0	0	$-\frac{1}{2}$	
	2	0	0	$+\frac{1}{2}$	2s
	2	0	0	$-\frac{1}{2}$	
	2	1	-1	$+\frac{1}{2}$	2p _x
	2	1	0	$-\frac{1}{2}$	2p _y
2	1	+1	$+\frac{1}{2}$	2p _z	

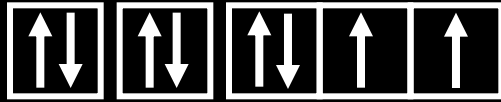
N



$1s^2 2s^2 2p^3$

8	1	0	0	$+\frac{1}{2}$	1s
	1	0	0	$-\frac{1}{2}$	
	2	0	0	$+\frac{1}{2}$	2s
	2	0	0	$-\frac{1}{2}$	
	2	1	-1	$+\frac{1}{2}$	2p _x
	2	1	0	$-\frac{1}{2}$	2p _y
2	1	+1	$+\frac{1}{2}$	2p _z	

O



$1s^2 2s^2 2p^3$

Remarques

structure électronique \equiv configuration électronique \equiv formule électronique

Si dans un atome tous les électrons sont appariés :

L'atome est diamagnétique

Si dans un atome il existe des électrons célibataires :

L'atome est paramagnétique

Exemple



Couche de valence, détermine la réactivité de l'élément

Remplissage : exemple

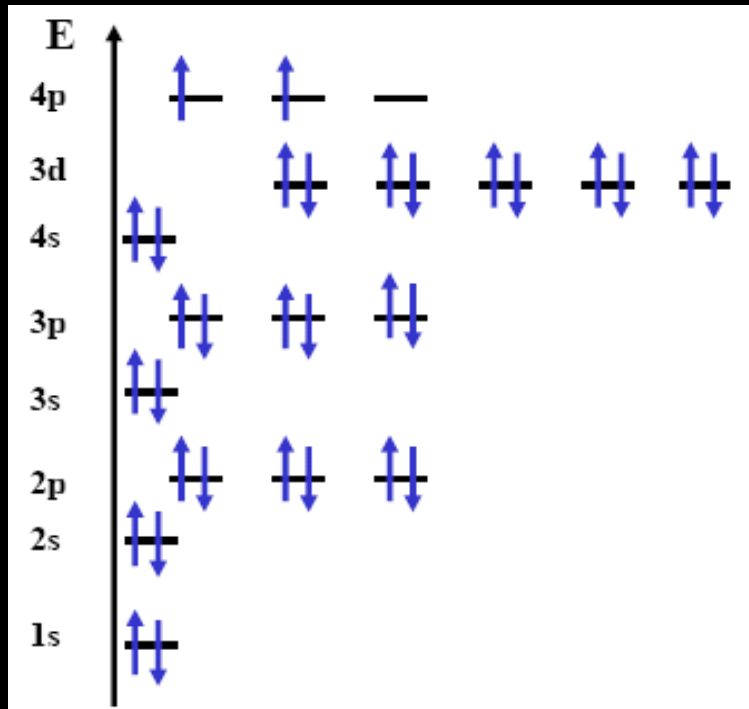
Ordre de remplissage:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s ...

Pour l'atome tel que $Z = 32$, on écrit :



structure électronique de Ge



Électrons de valence

4. Classification périodique.

- Élaborée de façon à faire apparaître les analogies entre les différents éléments.

1776

découvert
en 1766

H

découverts
en
1772 1774

découvert
au 13^e s. Inde

découverts
en
1735 1751

C

N

O

P

S

Fe

Co

Ni

Cu

Zn

As

découvert
en 1669

Ag

Sn

Sb

pré-columbien
Amérique du Sud

Pt

Au

Hg

Pb

Bi

alchimistes
12,13,14^e s.

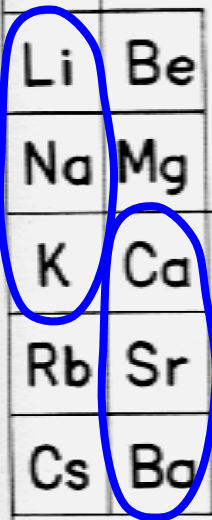
autres classifications...

* "triades" 1829, Döbereiner (Jena)

Johann Wolfgang Döbereiner
(1780 – 1849)



H																	He
Li	Be											B	C	N	O		
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	
K	Ca		Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		As	Se	Br		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo		Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
Cs	Ba			Ta	W		Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi			



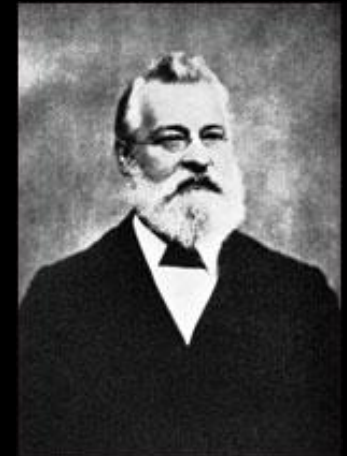
La	Ce											Tb			
	Th		U												

Propriétés similaires

- Molécules diatomiques colorées (Cl_2 , jaune), (Br_2 , brun marron), (I_2 , violet)
- Chaque atome se combine avec O pour former des ions chargés négativement: ClO^- , ClO_3^- , BrO_3^- , IO_3^-

autres classifications

* "triades" 1829, Döbereiner (Jena)



John Newlands (1837 -18 98)

* "octaves" 1864, Newlands (London)

H																	He		
Li	Be											B	C	N	O				
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl			
K	Ca		Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn			As	Se	Br			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo			Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		
Cs	Ba	↓		Ta	W			Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi				
		La	Ce							Tb					Er				
			Th			U													

Il a trouvé que chaque élément était similaire à l'élément placé 8 places plus loin..

autres classifications...

* “triades” 1829, Döbereiner (Jena)

* “octaves” 1864, Newlands (London)

* “tableau périodique”

1869, Mendeleïev (St. Petersburg)

1870, Meyer (Tübingen)



Dmitri Mendeleïev
(1834 - 1907)



Julius Lothar Meyer
(1876 - 1895)

4.1. Tableau périodique de Mendeleïev (1869) ou forme courte de la classification.

Mendeleïev a adopté la masse atomique comme critère de classification.

Il a rangé en cinq (5) colonnes ou familles, 18 éléments :
(son tableau était vertical, aujourd'hui il est horizontal, le nombre de lignes et de colonnes est donc inversé).

Mendeleïev remarqua aussi que certaines propriétés variaient de manière périodique avec la masse atomique.

Pour représenter la périodicité, certains éléments furent inversés et l'ordre croissant des masses atomiques ne fut pas respecté.

Exemple

Co et Ni

Te et I

K et Ar

Contrairement à Meyer, Mendeleïev avait prévu aussi des cases vides et avancé les propriétés pour des éléments qui furent découverts beaucoup plus tard.

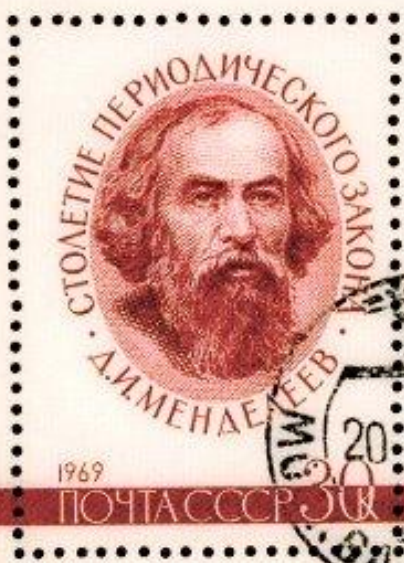
Tableau original proposé en 1869

Объяснение ~~смысла~~ ~~значения~~ ~~таблицы~~,
 основанное на ^{заметках} ~~на~~ ~~заметках~~ ~~в~~ ~~Своде~~ ~~закон~~ ~~Д. Менделеева~~.

$T_1 = 50$ $Z_2 = 90$ $? = 180$
 $V = 51$ $M = 99$ $F_n = 182$
 $C_2 = 52$ $K_0 = 96$ $W = 186$
 $M_2 = 55$ $R_1 = 1044$ $P_1 = 197,4$
 $F_2 = 56$ $R_0 = 1044$ $T_2 = 198$
 $N_1 = 63,5$ $P_2 = 108,6$ $OS = 199$
 $H = 1$ $? = 8$ $? = 22$ $C_n = 63,4$ $M_2 = 108$ $M_2 = 200$
 $B_2 = 9,4$ $M_2 = 24$ $Z_n = 65,2$ $C_n = 112$
 $B = 11$ $M = 224$ $? = 68$ $M = 116$ $M = 195?$

70 $J_n = 118$
 75 $S = 122$ $N_i = 210?$
 $29,4$ $F_2 = 128?$
 80 $F = 128$
 $85,4$ $C_n = 153$ $F_2 = 204$
 $37,6$ $N_n = 132$ $F_2 = 207$

18 $\frac{II}{17}$ 69.



4.2. Forme longue de la classification périodique (classification actuelle).

En 1913, la classification évolue :_

on s'aperçoit que si on tient compte des propriétés chimiques des éléments naturels, les éléments ne doivent pas être classés selon les masses atomiques mais selon les nombres de charge (numéros atomiques, notés Z).

4.2.1. Loi e Moseley (1913)

Moseley a déterminé la relation entre les rayons X et le nombre de charge Z d'un élément.

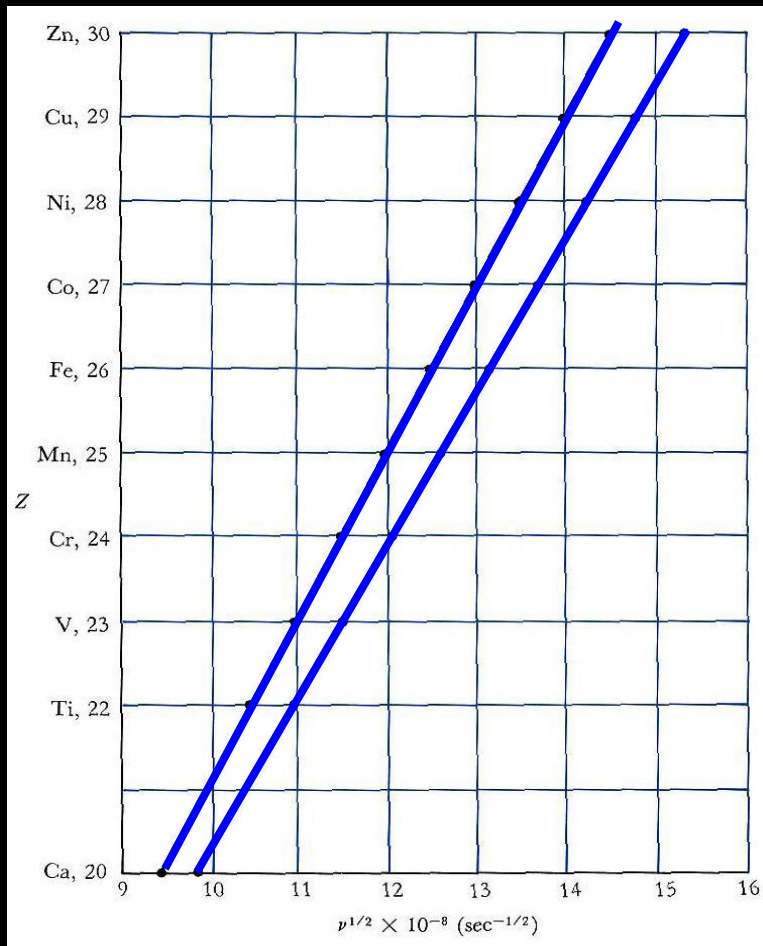
$$\sqrt{\nu} = kZ$$

Fréquence des rayons X

constante

Ft. linéaire de Z

nombre de charge ou N° atomique_



Loi de Moseley: $\nu^{1/2} = kZ$



Henry Gwyn Jeffreys Moseley
(1877-1915)

4.2.2. Description

Tableau périodique des éléments

sous-groupe A

les e⁻ de valence occupent des O.A *s* et *p*

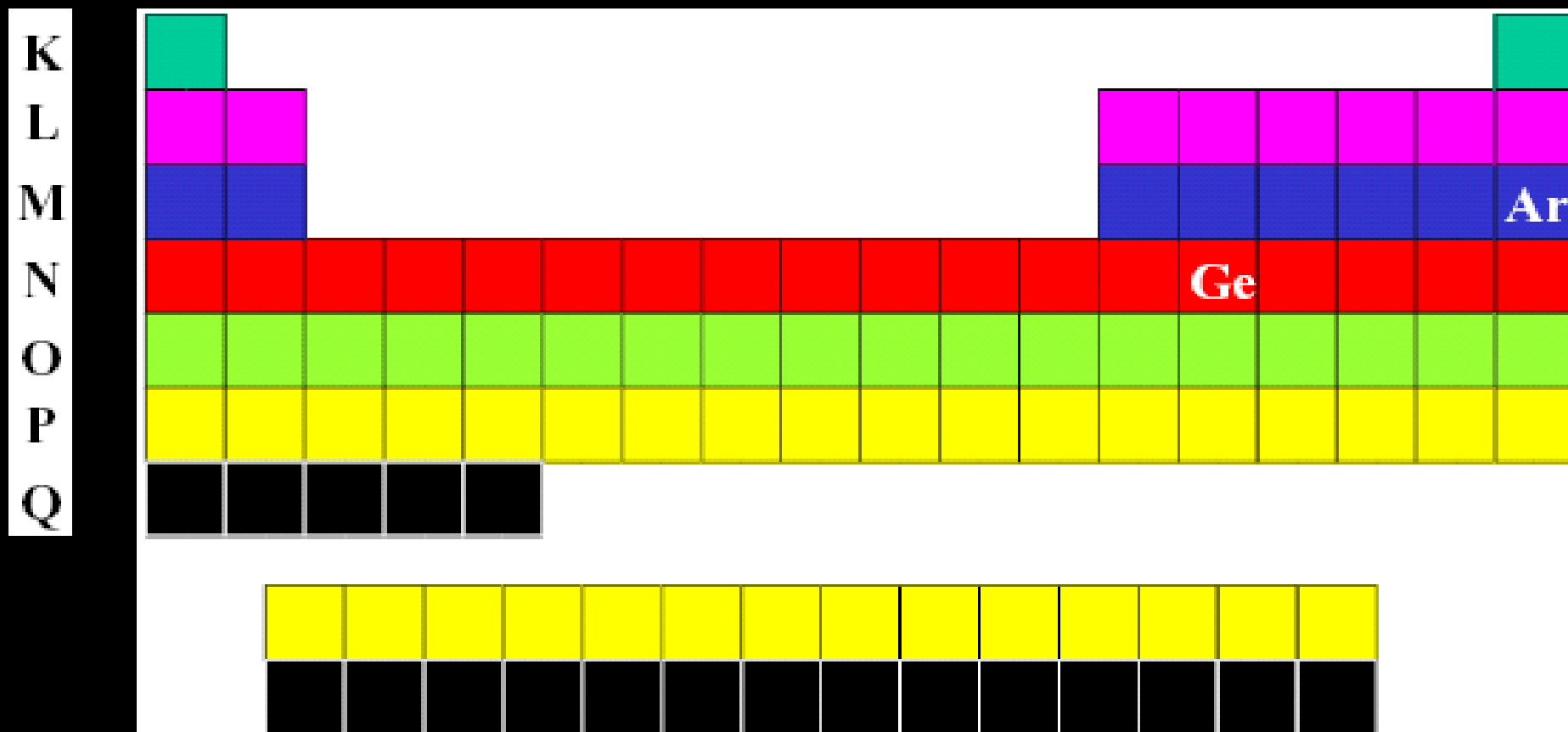
colonnes, groupes ou familles

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VII A	VIII A
1	1 H		sous-groupe B															2 He
2	3 Li	4 Be	les e ⁻ de valence occupent aussi des O.A <i>d</i>										5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rh	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Dh	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo

* Lanthanides	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
** Actinides	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

lignes ou périodes

Tableau périodique : notion de couche



4.2.2. Description

Tableau périodique des éléments

sous-groupe A

les e⁻ de valence occupent des O.A s et p

groupes

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
	IA	IIA											III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII A	
1	1 H																		2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5	37 Rh	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6	55 Cs	56 Ba	* *	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7	87 Fr	88 Ra	** **	104 Rf	105 Dh	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo	

Ex. $(n-1)d^{10} ns^2 np^y$

${}_{31}\text{Ga} : [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^2 4p^1$

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

périodes

4.2.2. Description

Tableau périodique des éléments

groupes



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
			III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IB	IIB						
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rh	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Dh	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo

sous-groupe B

les e⁻ de valence occupent aussi des O.A. *d*

Ex. (n-1)d¹⁻¹⁰

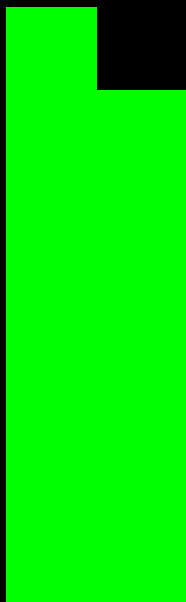
^{3d¹ 4s²}
²¹Sc : [Ar] 3d¹ 4s²

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

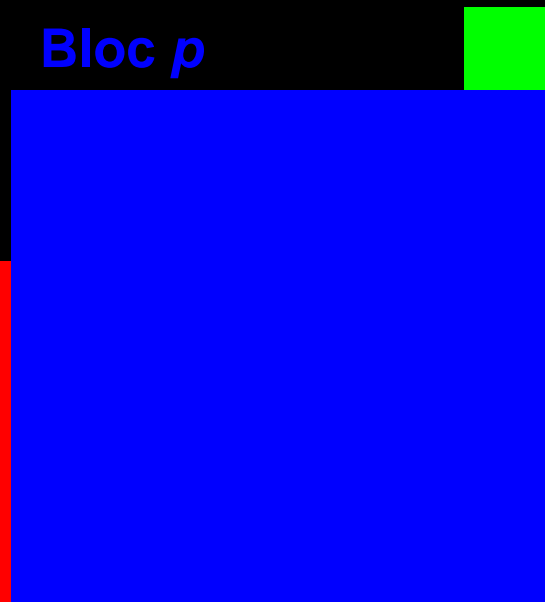
périodes



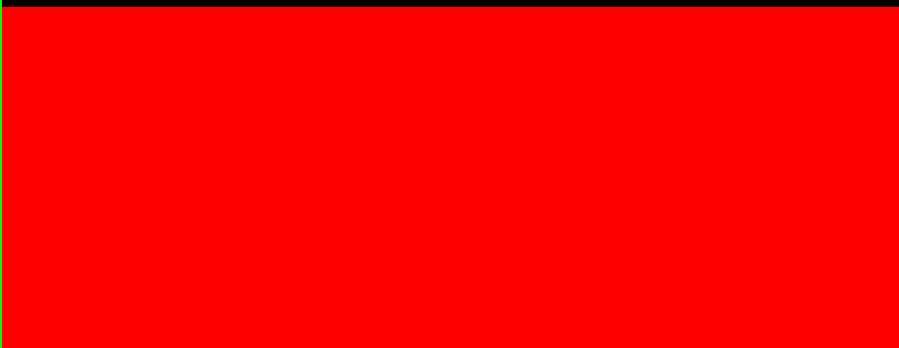
Bloc s



Bloc p



Bloc d



Bloc f



Remarque :

- Les éléments d'un même s/groupe A et ceux du s/groupe B correspondant ont le même nb. d'électrons de valence.
- Les s/groupes B sont intercalés entre II_A et III_A .

4.2.2. Description

Tableau périodique des éléments

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	VIII B	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VI A	VII A	VIII A
1 H	2 He																
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rh	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Dh	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo

Métaux alcalins ns^1 (points to group 1)
Métaux alcalino-terreux ns^2 (points to group 2)
Métaux de transition $ns^2(n-1)d^x$ (points to groups 3-10)
Métaux pauvres (points to groups 11-12)
Métalloïdes (points to groups 13-16)
Non-métaux (points to groups 17-18)
Halogènes ns^2np^5 (points to group 17)
Gaz rares ns^2np^6 (points to group 18)

Lanthanides $ns^2(n-2)f^x$	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
Actinides $ns^2(n-2)f^x$	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

configuration électronique externe de tous les groupes

groupe	structure électronique	nomenclature
IA	ns^1	Alcalins
IIA	ns^2	Alcalino-terreux
<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>		
IB	$(n-1)d^{10} ns^1$	Éléments de transition
IIB	$(n-1)d^{10} ns^2$	
IIIB	$(n-1)d^1 ns^2$	
IVB	$(n-1)d^2 ns^2$	
VB	$(n-1)d^3 ns^2$	
VIB	$(n-1)d^5 ns^1$	
VIIB	$(n-1)d^5 ns^2$	
VIIIB	$[(n-1)d^6 (n-1)d^8] ns^2$	
<hr style="border-top: 1px dashed black;"/>		
IIIA	$ns^1 np^1$	
IVA	$ns^1 np^2$	
VA	$ns^1 np^3$	
VIA	$ns^1 np^4$	chalcogènes
VIIA	$ns^1 np^5$	Halogènes
VIIIA	$ns^1 np^6$	Gaz rares

Les blocs

Suivant la configuration électronique externe des éléments on distingue 4 blocs

Blocs	Type
<i>s</i>	Éléments métalliques
<i>d</i>	Éléments de transition (s/couche d)
<i>p</i>	Non métalliques
<i>f</i>	Éléments de transition interne

Les éléments d'un même bloc présentent des propriétés physiques et chimiques assez voisines.

Les blocs

bloc s

bloc p

bloc d

Ge

bloc f



Règle de remplissage

Construction du tableau par blocs

bloc s				bloc p	
1s					1s
2s				2p	
3s				3p	
4s		Métaux de transition		4p	
5s		3d		5p	
6s		4d		6p	
7s		5d			
				4f	
				5f	
				bloc f	

Bloc s : ns^1 ou ns^2 , colonnes 1 et 2

Bloc p : $ns^2 np^x$, avec $1 \leq x \leq 6$, colonnes 13 à 18

Bloc d : $ns^x (n-1)d^y$, avec $0 \leq x \leq 2$ et $1 \leq y \leq 10$, colonnes 3 à 12

Bloc f : $ns^2 (n-1)d^x (n-2)f^y$, avec $n=6$ ou 7 , $x=0$ ou 1 et $1 \leq y \leq 14$

5. La périodicité des propriétés

Les propriétés physiques et chimiques sont étroitement liées à la structure électronique.

Période ou ligne

Les éléments ont même nb. quantique principal n

Colonne

Les éléments ont même configuration élect. externe

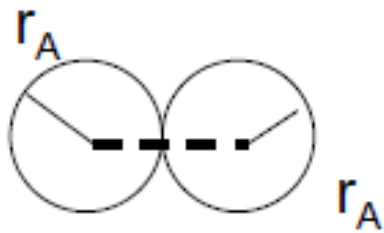
d'où propriétés chimiques ou physiques voisines.

5. La périodicité des propriétés...

Taille atomique

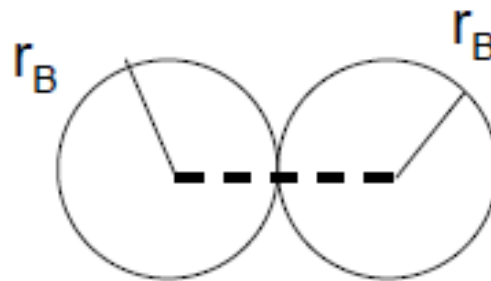
Rayon de covalence r_c ou rayon atomique

Rayon d'un atome engagé dans une liaison de covalence simple



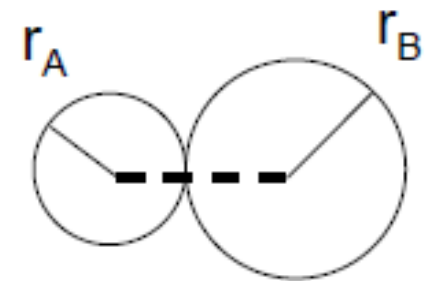
A A

$$d_{AA} = 2 r_A$$



B B

$$d_{BB} = 2 r_B$$



A B

$$d_{AB} = r_A + r_B$$

Périodicité des propriétés

Taille atomique

Rayon de covalence r_c ou rayon atomique

D'après Pauling, le rayon ionique est inversement proportionnel à la charge effective du noyau Z_{eff} et du nb. quantique principal n

$$r_i = \frac{C.n}{Z - \sigma}$$

Diagram illustrating the components of the Pauling equation for ionic radius r_i :

- $C.n$: Facteur lié au niveau d'énergie
- Z : Nb. de charge
- σ : Cte. d'écran
- $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$: Nb. de charge effectif

Cette relation peut s'appliquer au calcul du rayon atomique

Pour expliquer la variation des rayons trois facteurs doivent être pris en considération.

Le nb. de charge Z ,
Le niveau énergétique n ,
L'effet écran.

Qu'est-ce que l'effet écran ?

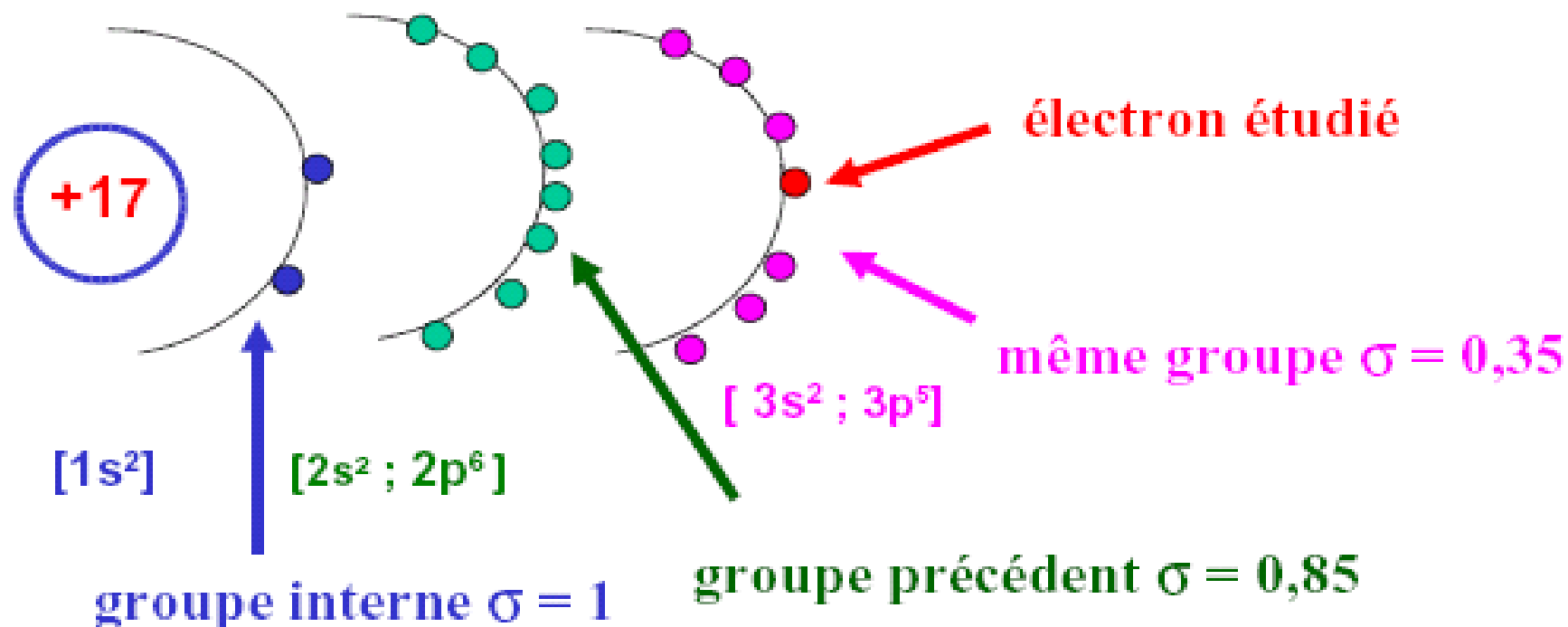
On appelle « effet écran » la répulsion entre les électrons des différentes couches qui diminue l'attraction du noyau sur les électrons de la couche externe.

$\sigma = 0,35$ pour chaque e^- de la couche externe

$\sigma = 0,85$ pour chaque e^- de la couche sous-jacente

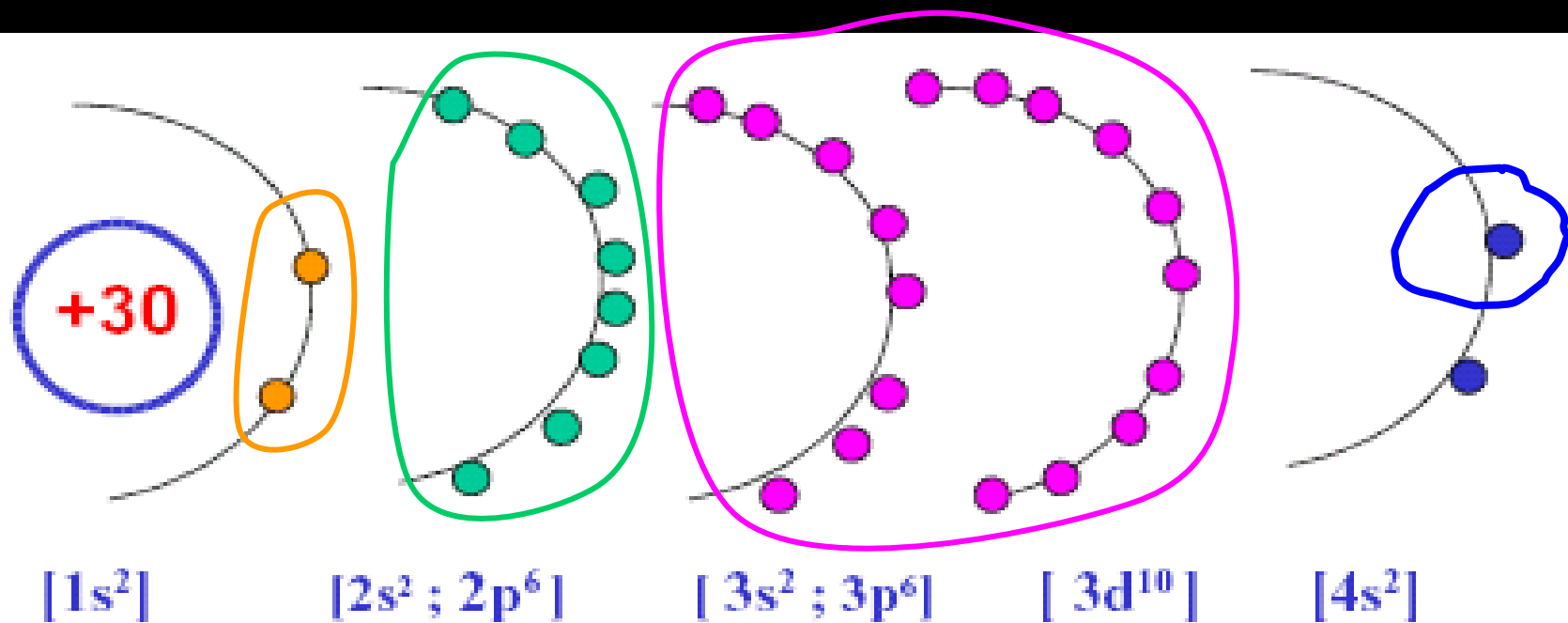
$\sigma = 1$ pour les e^- des couches plus internes et les s/couches d et f

Cl : $Z = 17$: $[1s^2]$; $[2s^2 ; 2p^6]$; $[3s^2 ; 3p^5]$



$$Z^* = 17 - (6 * 0,35) - (8 * 0,85) - (2 * 1) = 6,1$$

Zn : Z = 30 : [1s²] ; [2s² ; 2p⁶] ; [3s² ; 3p⁶] ; [3d¹⁰] ; [4s²]

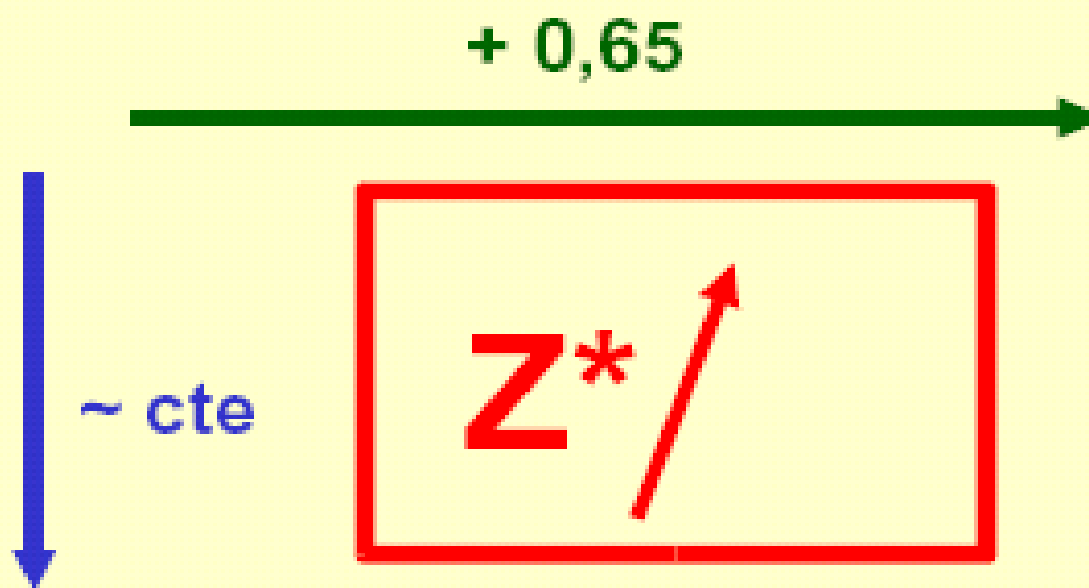


$$Z_{4s}^* = 30 - (1 * 0,35) - (18 * 0,85) - (8 * 1) - (2 * 1) = 4,35$$

Variation de la charge effective

Sur une ligne de la classification, Z^* augmente régulièrement de la gauche vers la droite

Sur une même colonne Z^* augmente légèrement, puis devient constant quand on se déplace de haut en bas.



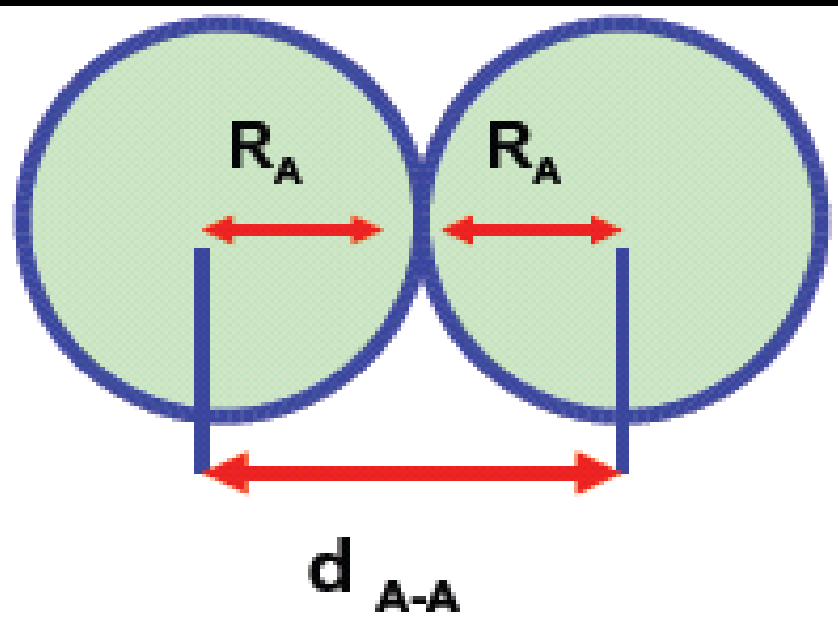
Sens d 'augmentation de Z^* dans la classification

Rayon atomique r_a

Rayon atomique : définition 1

On suppose que les atomes ont une symétrie sphérique. Le rayon de la sphère correspondante sera appelé le rayon atomique.

Par définition, le rayon de covalence de l'atome A sera la moitié de cette distance de liaison.



$$R_{\text{Cov}}(A) = d_{A-A} / 2$$

Rayon atomique r_a

Rayon atomique : définition 2

C'est à peu près le rayon de l'orbitale de valence (rayon le plus probable).

$$r = n^2 / Z^*$$

en unité atomique

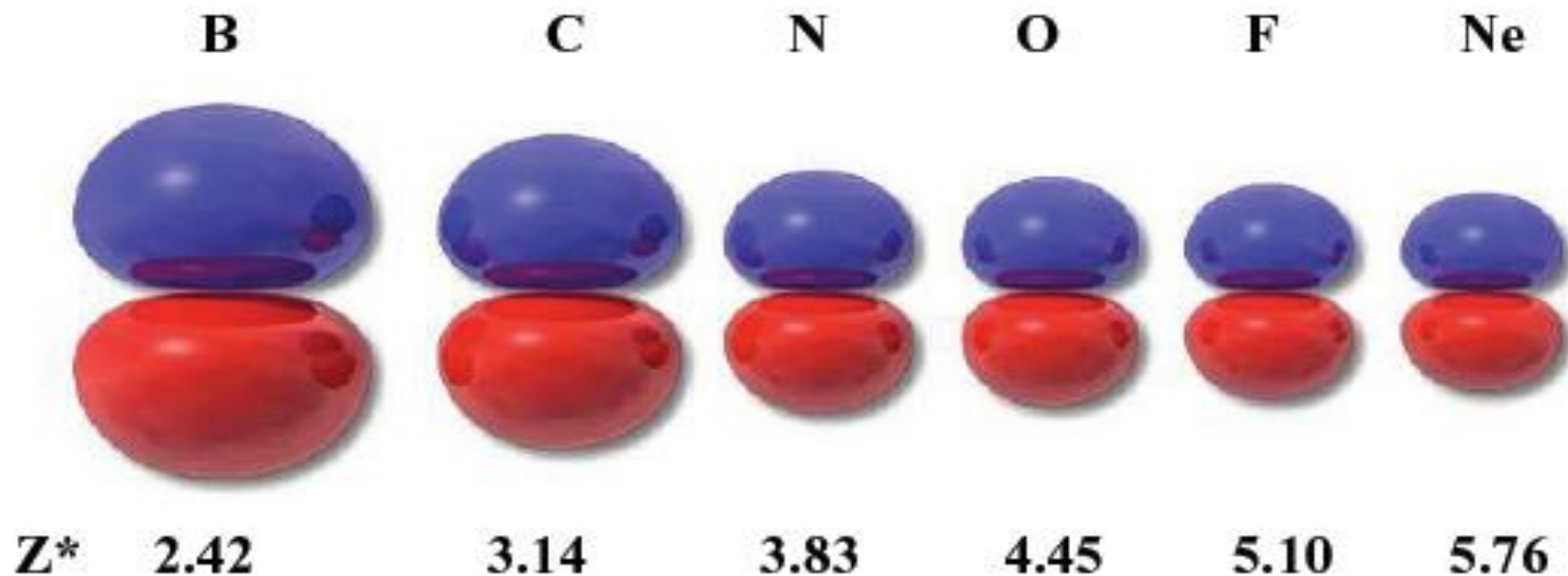
on suppose que le rayon de l'atome est proportionnel à l'orbite de Bohr correspondant à la couche de valence de l'atome considéré.

Rayon atomique r_a

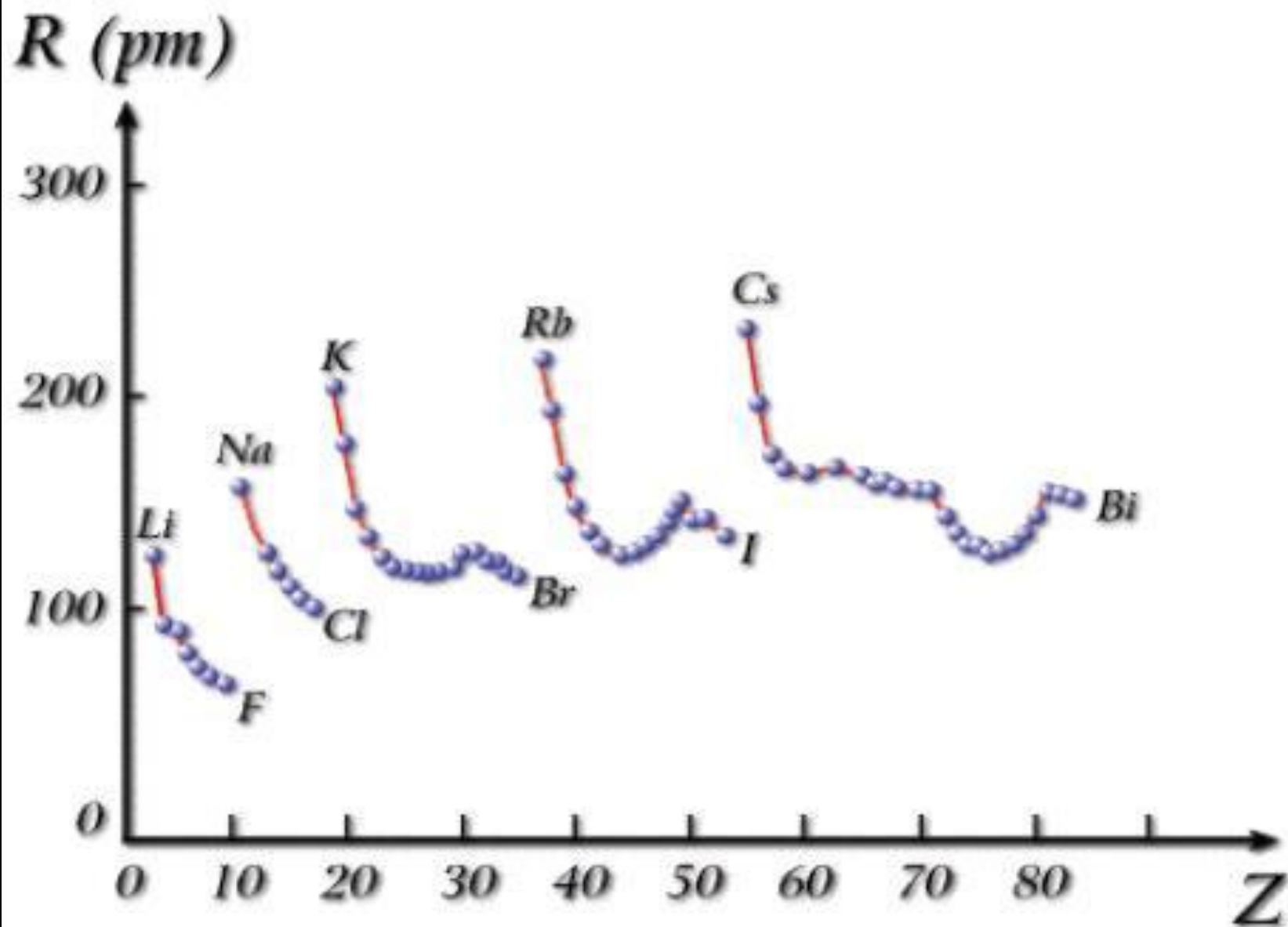
Le long d'une période $\rightarrow n = \text{cte}$ mais $Z_{\text{eff}} \uparrow$

Les e^- sont donc plus attirés par le noyau et donc le rayon \downarrow de gauche à droite.

Taille des orbitales en fonction de Z^*



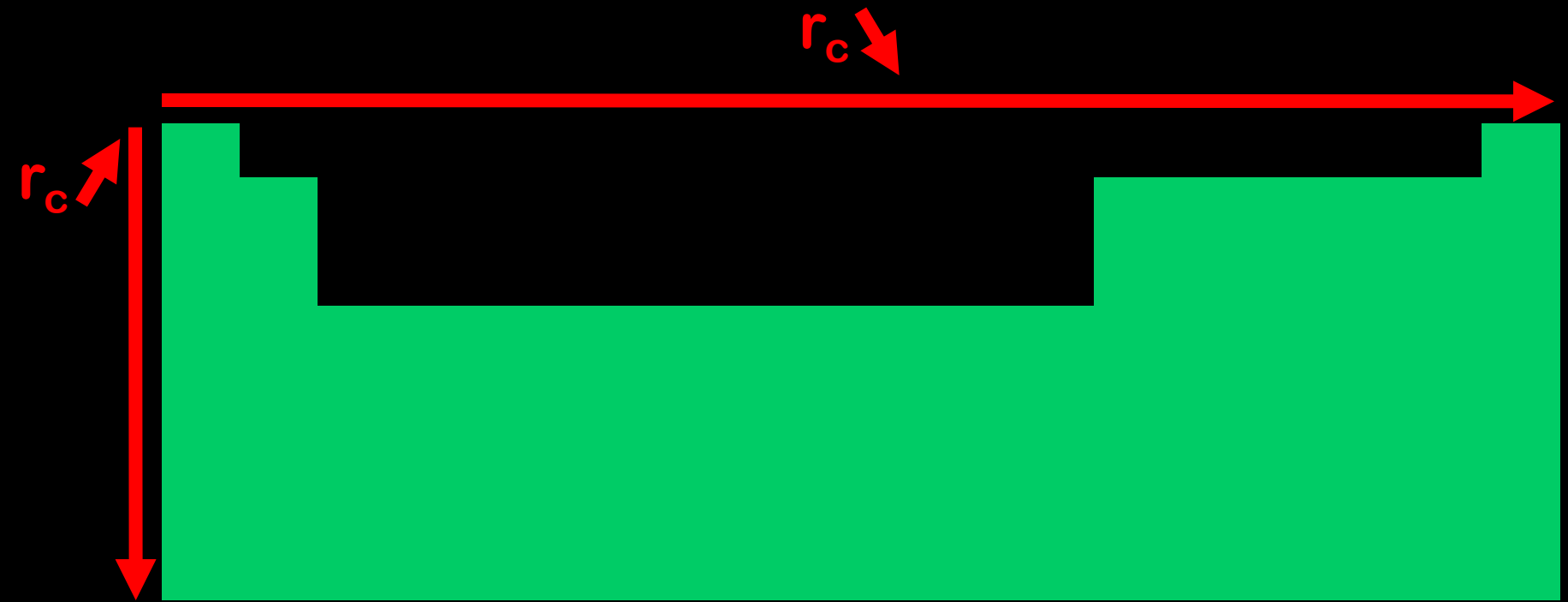
Evolution du rayon atomique



Rayon atomique : évolution

Il y a donc globalement une augmentation de l'attraction exercée sur les électrons externes et une réduction de la taille de l'atome le long de la période de gauche à droite

La taille de l'atome augmente dans une colonne de haut en bas.



Rayon ionique : r_i

Ajouter un ou plusieurs électrons augmente l'effet d'écran (Z^* diminue et donc r augmente) : les anions sont toujours plus gros que leurs atomes neutres d'origine.

Enlever des électrons diminue l'effet d'écran (Z^* augmente et r diminue) : les cations sont toujours plus petits que leurs atomes neutres d'origine.

Exemples

Li $R = 1,23 \text{ \AA}$

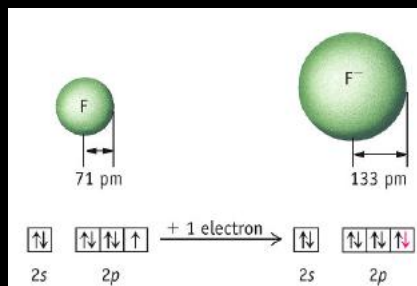
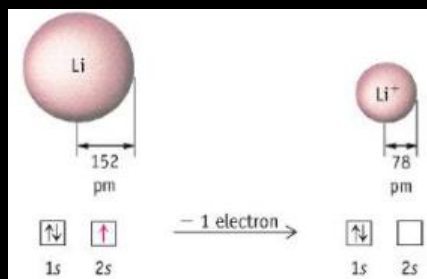
Li⁺ $R = 0,60 \text{ \AA}$

Al $R = 1,25 \text{ \AA}$

Al³⁺ $R = 0,50 \text{ \AA}$

F $R = 0,64 \text{ \AA}$

F⁻ $R = 1,36 \text{ \AA}$



Énergie d'ionisation : E.I

C'est l'énergie minimale qu'il est nécessaire de fournir à un atome isolé $A_{(g)}$ (état gazeux) pour lui arracher un électron.

On aura ainsi les potentiels de première, deuxième, troisième, etc..., ionisation.



.....



L'énergie d'ionisation s'exprimera en électron-volts (eV).

Ces énergies sont toujours positives car il faut fournir de l'énergie pour arracher l'électron à l'attraction, du noyau

Énergie d'ionisation : E.I

Energies d'ionisation : évolution

Au fur et à mesure que l'on arrache les électrons, l'élément se charge de plus en plus positivement.

On constate donc une augmentation des énergies d'ionisation avec le degré d'ionisation :

$$E.I_1 < E.I_2 < E.I_3 \dots$$

Pour le Carbone

1	2	3	4	5	6
11,26	24,38	47,89	64,49	392,07	489,98



Énergie d'ionisation : E.I

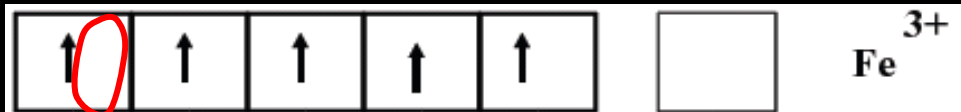
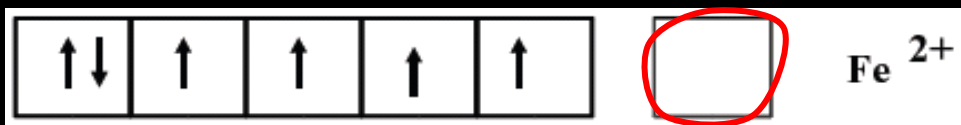
Energies d'ionisation : évolution

Au fur et à mesure que l'on arrache les électrons, l'élément se charge de plus en plus positivement.

On constate donc une augmentation des énergies d'ionisation avec le degré d'ionisation :

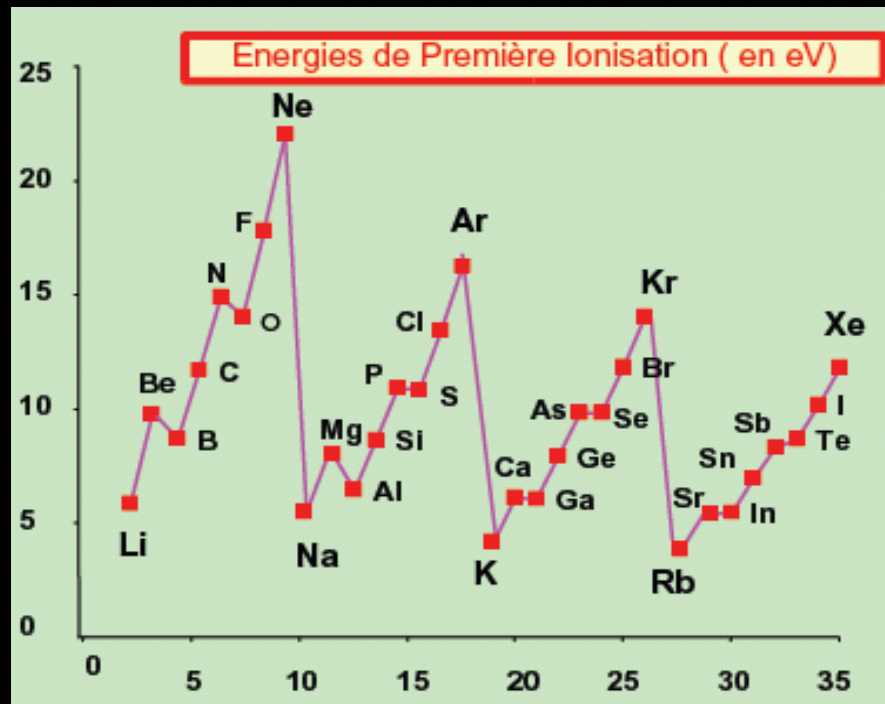
Energies d'ionisation : ordre d'arrachement

Exemple du fer



Couche demi remplie = stabilité

Energies d'ionisation : évolution périodique



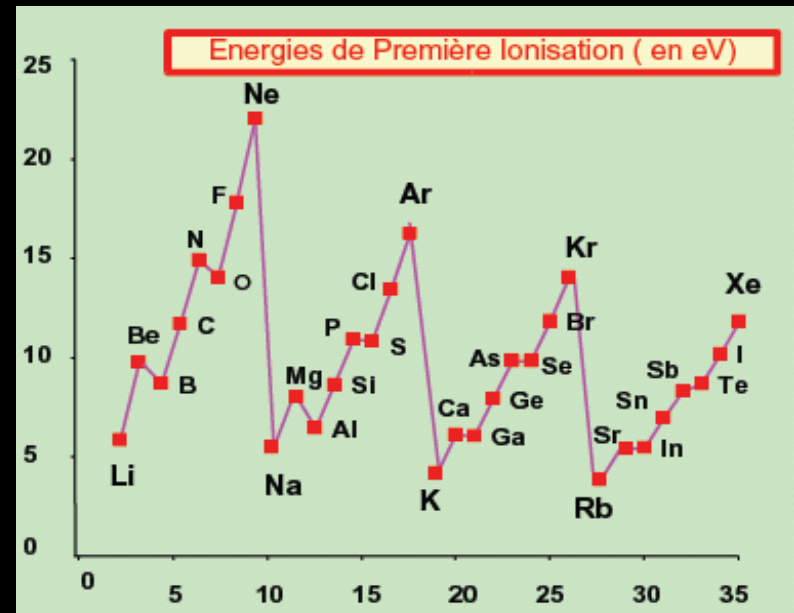
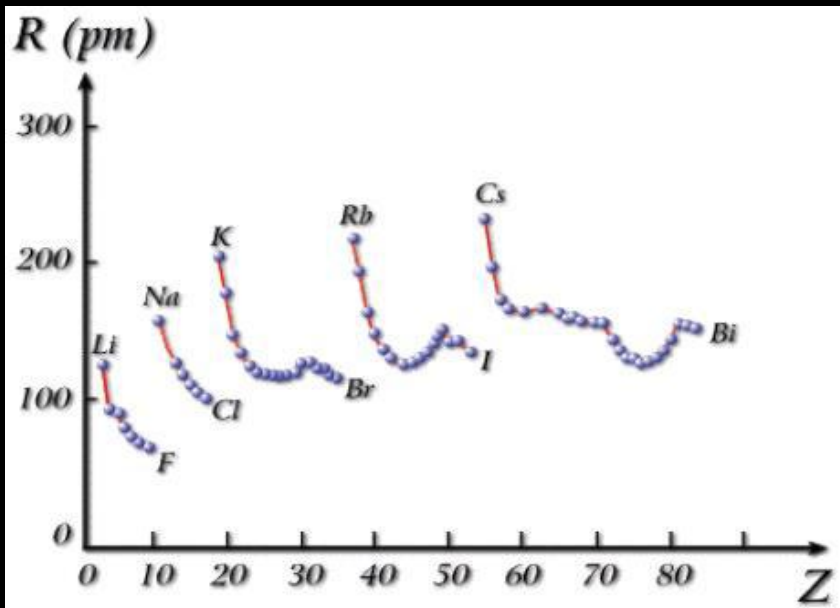
Variation de l'énergie d'ionisation E_I dans le tableau périodique.

a) Dans une colonne, lorsque Z augmente, (en allant de haut en bas) :

→ l'énergie d'ionisation diminue.

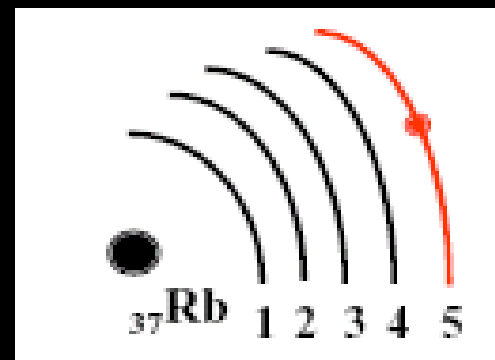
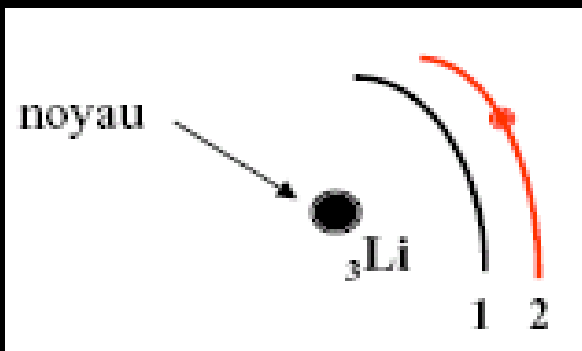
b) Dans une période, lorsque Z augmente (en allant de gauche à droite) :

→ l'énergie d'ionisation augmente.



Énergie d'ionisation : E.I

Exemple (dans un groupe) :

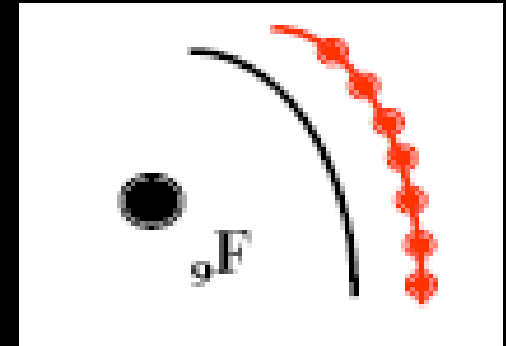
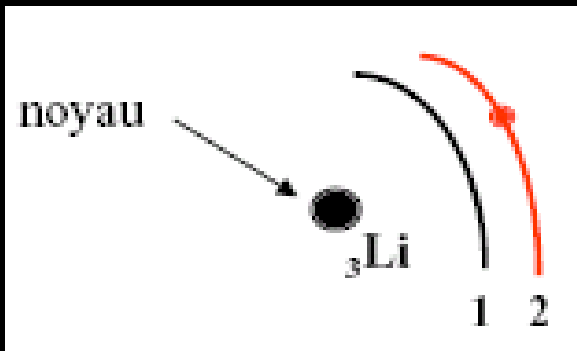


Effet distance : $E_{i,1}(\text{Rb}) < E_{i,1}(\text{Li})$

$$E_{i,1}(\text{Rb}) = 402 \text{ kJ.mol}^{-1} ; E_{i,1}(\text{Li}) = 520 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

Énergie d'ionisation : E.I

Exemple (dans une période) :



Effet de charge : $E_{i,1}(\text{F}) > E_{i,1}(\text{Li})$

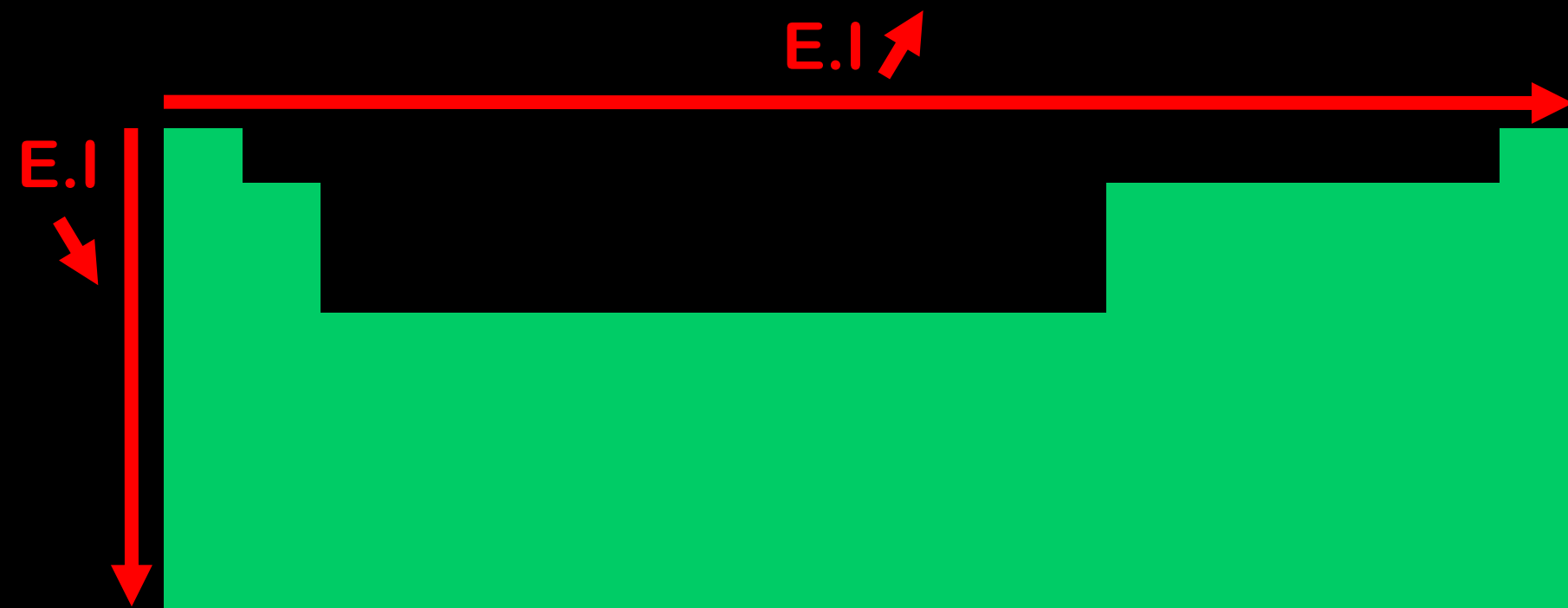
$$E_{i,1}(\text{F}) = 1681 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

$$E_{i,1}(\text{Li}) = 520 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

Variation de $E.I_1$

Le graphique précédant montre que globalement :

- dans une même ligne $E.I_1$ augmente de gauche à droite
- dans une même colonne $E.I_1$ diminue de haut en bas



$E.I_1$ varie en sens inverse du rayon atomique.

Affinité électronique : A.E

C'est l'énergie **mise en jeu** pour retourner de l'ion négatif à l'atome neutre **ou** l'énergie mise en jeu pour qu'un atome, pris à l'état gazeux, capte un électron : $A_{(g)} + e^- \rightarrow A^-_{(g)}$

C'est l'enthalpie libre de la réaction : $A^- \rightarrow A + e^-$

En général, cette enthalpie libre est négative, sauf pour les halogènes, pour lesquels X^- est plus stable que X .

Électronégativité : EN

L'échelle d'électronégativité essaye d'évaluer la capacité des éléments de gagner ou de perdre un ou plusieurs électrons.

Échelle de Mulliken.

L'électronégativité d'un élément dans l'échelle de Mulliken est égale à la moyenne arithmétique de l'énergie de première ionisation, EI_1 , et de l'affinité électronique, AE .

$$EN = \frac{(EI_1 + AE)}{2} \quad (\text{en eV})$$

Échelle de Pauling.

Elle est basée sur les énergies de dissociation des liaisons de molécules diatomiques simples :

E_{A-A} , E_{B-B} et E_{A-B} : énergies en $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ pour rompre les liaisons A-A, B-B et A-B.

$$|EN_{(B)} - EN_{(A)}| = \Delta^{1/2}$$

$$E_d (\text{liaison covalente à 100 \%}) = \sqrt{E_{A-A} \cdot E_{B-B}}$$

L'échelle de Pauling est une échelle relative : « EN » de F = 4,0 (en $\text{eV}^{1/2}$)

$$|EN_{(B)} - EN_{(A)}| = \Delta^{1/2}$$

$$E_{A-B} > \sqrt{E_{A-A} \cdot E_{B-B}}$$

écart

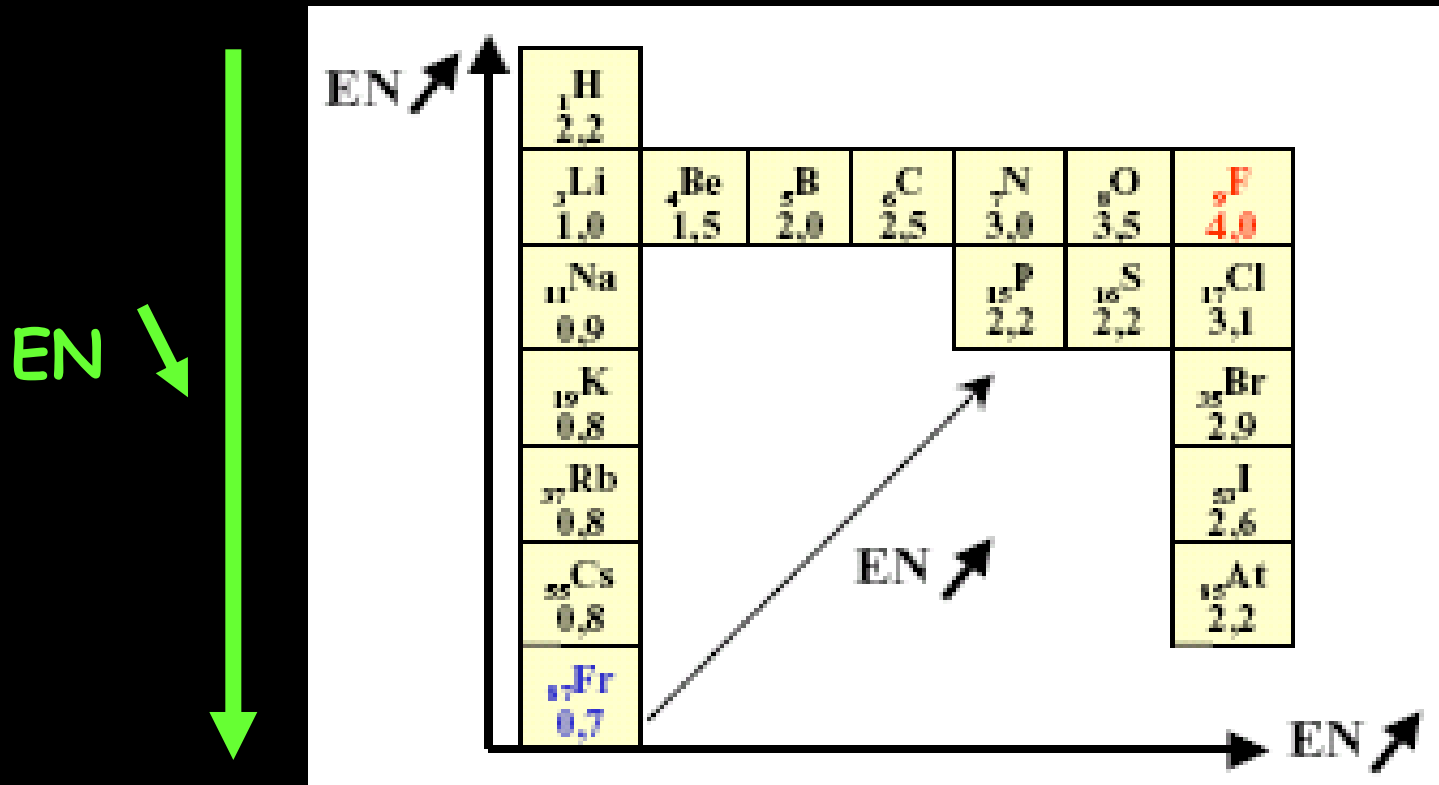
Échelle d'Allred et Rochow.

Allred et Rochow suggèrent une échelle d'électronégativité basée sur la force électrostatique de l'attraction entre le noyau et les électrons de valence.

$$\chi_{AR} = 0.744 + 0.359 Z_{\text{eff}} / r_c^2$$

rayon covalent

Quelle que soit l'échelle utilisée (Pauling, Mulliken, Allred-Rochow), on remarque qu'elle **augmente** de gauche à droite le long d'une ligne de la classification, et **diminue** de haut en bas le long d'une colonne. (F : 4 ; Cs : 0,8).

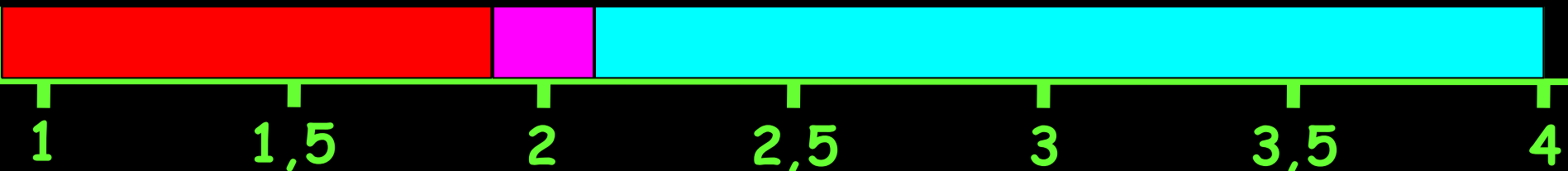


Quelques valeurs des électronégativités dans l'échelle de Pauling (valeurs indiquées en $\text{eV}^{1/2}$)

éléments intermédiaires

métaux

non-métaux



Caractère métallique : Γ_m

Les métaux tendent à perdre des électrons pour donner des cations.

Les non-métaux tendent à capter des électrons pour donner des anions.

Le caractère métallique est donc relié à E.I.

Le caractère non-métallique à celui de l'A.E.

Plus E.I est faible, plus le caractère métallique est accentué.

Idem pour le caractère non-métallique. Il varie en sens inverse de A.E.

Et inversement.

Γ_m varie en sens inverse de E.I.

Pouvoir oxydant - Pouvoir réducteur

Oxydation

Réduction

Perte d'électron(s)

Gain d'électron(s)

Pouvoir oxydant

Varie en sens inverse de A.E.

Pouvoir réducteur

Varie en sens inverse de E.I



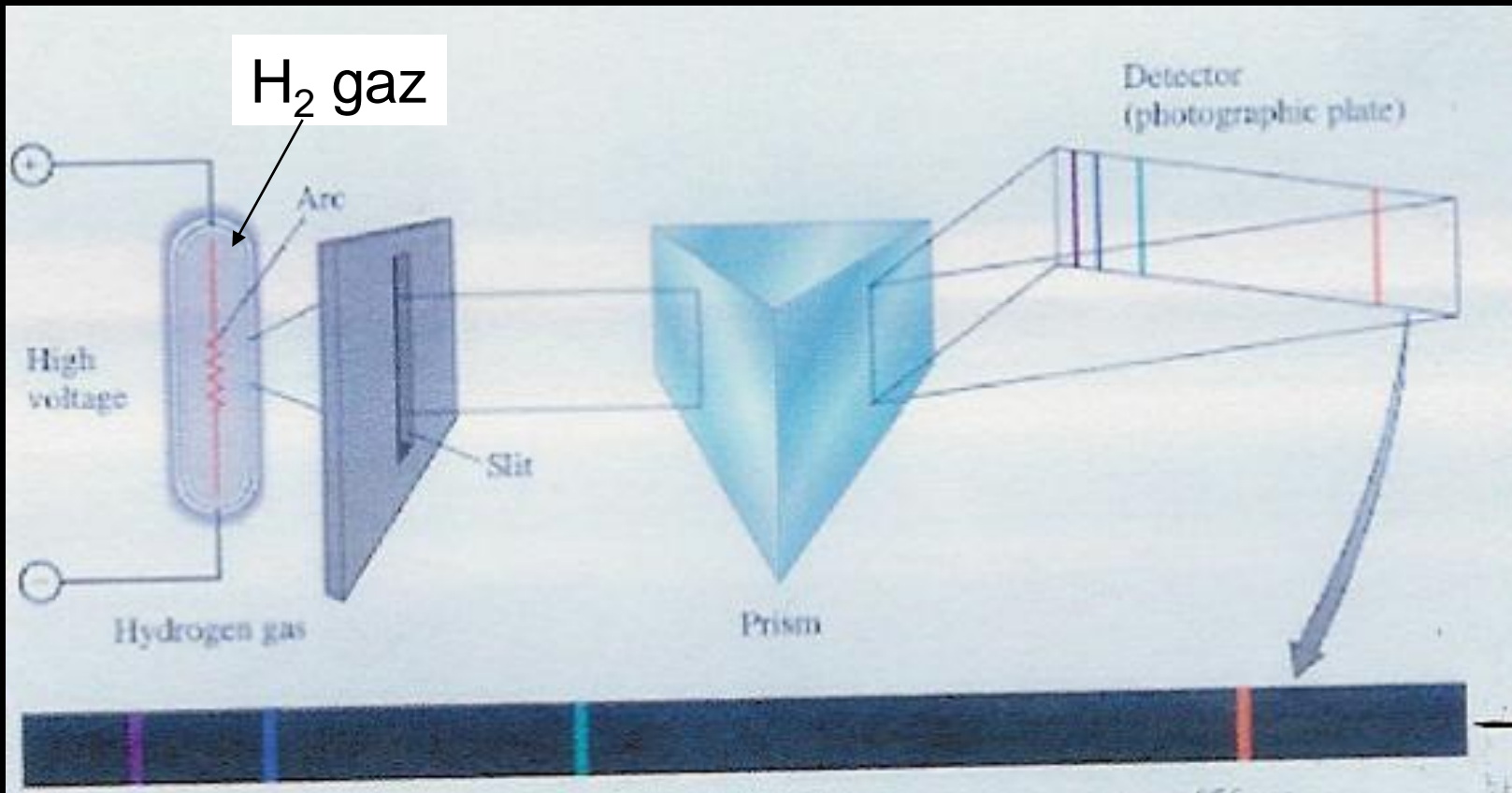
Le spectre de l'hydrogène atomique

Modèle atomique de Bohr

Les théories sur la structure de la matière ont eu pour base expérimentale essentielle l'étude du spectre d'émission atomique de l'hydrogène.

Le spectre de l'hydrogène atomique

Une expérience bien connue au XIX^{ème} siècle :



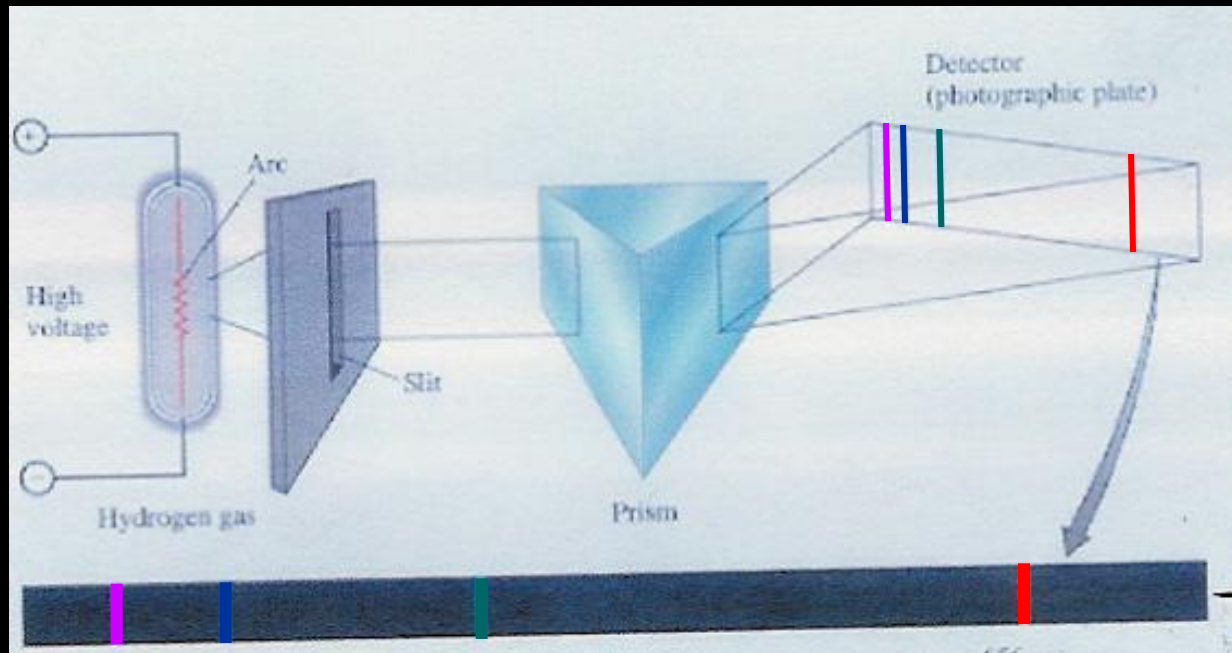
Un prisme disperse la lumière émise par de l'hydrogène soumis à une décharge électrique.

Ainsi, un prisme disperse la lumière émise par de l'hydrogène soumis à une décharge électrique.

On observe :

- Un fond continu dû à la présence de molécules de H_2 non dissociées
- la présence de raies intenses dont la longueur d'onde λ peut être déterminée avec précision.

- les longueurs d'onde λ des raies **visibles** sont :



410,2 434 486,1 656,3 nm

violet

indigo

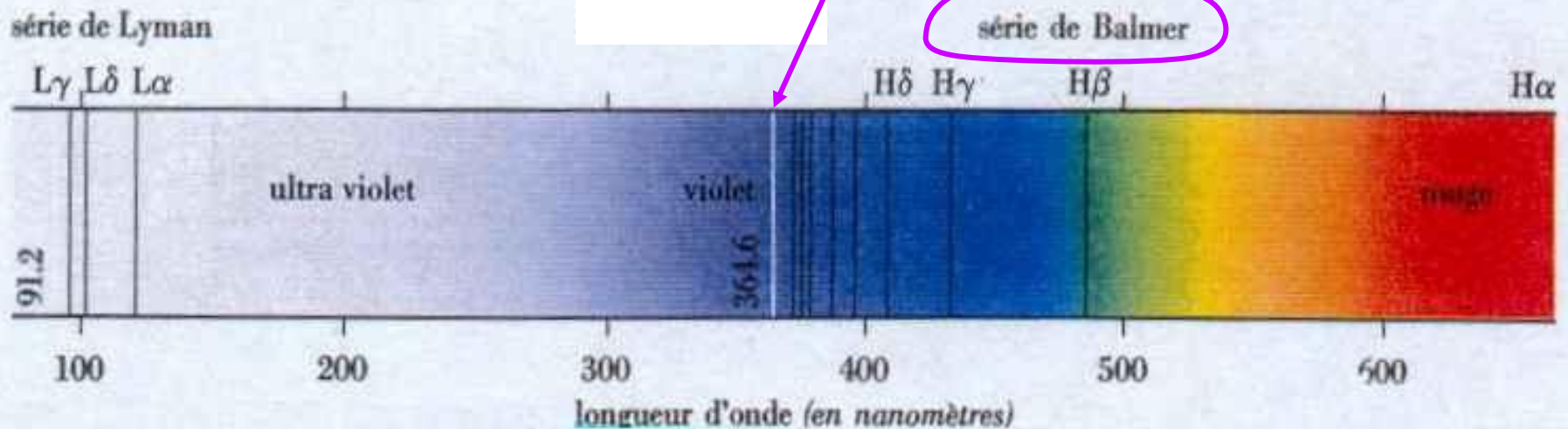
Bleu
vert

rouge

La série se prolonge dans l'UV avec des raies de + en + rapprochées dont la limite est $\lambda = 364,6$ nm

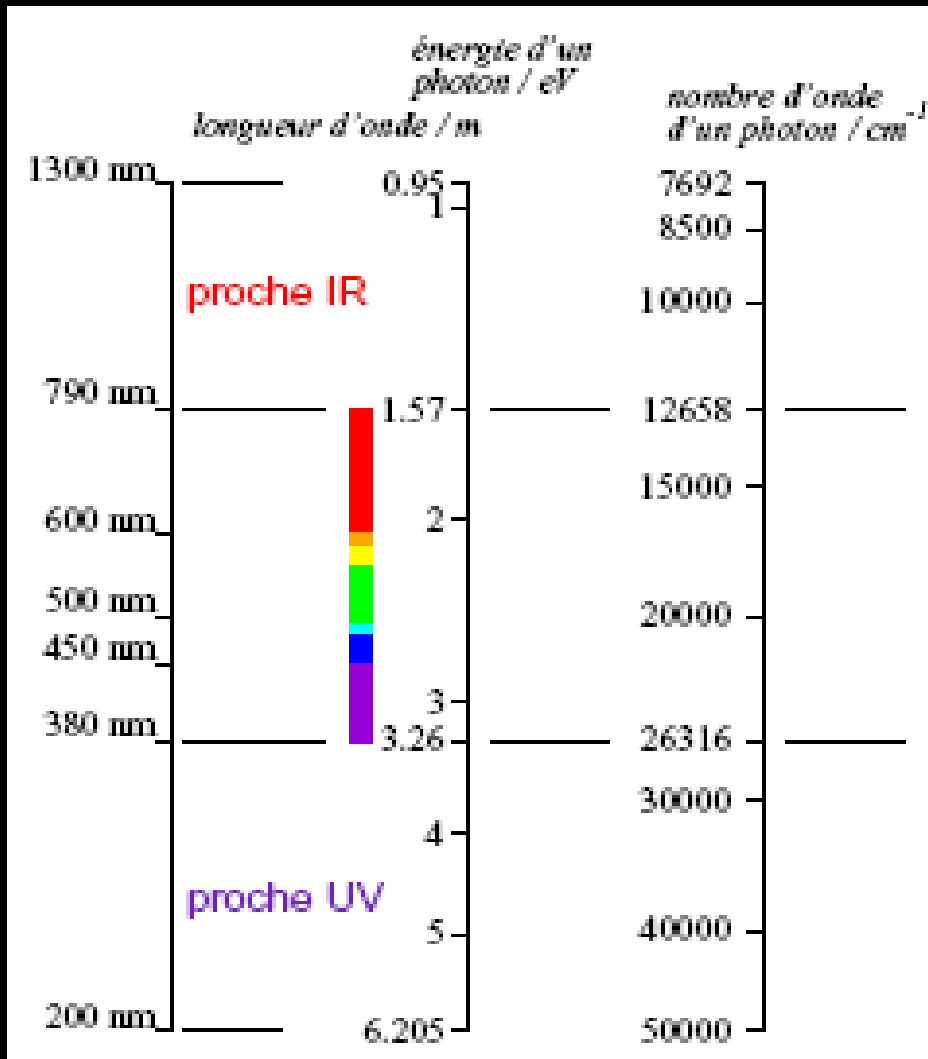
Spectre de l'atome d'hydrogène

La série se prolonge dans l'UV avec des raies de + en + rapprochées dont la limite est $\lambda = 364,6 \text{ nm}$

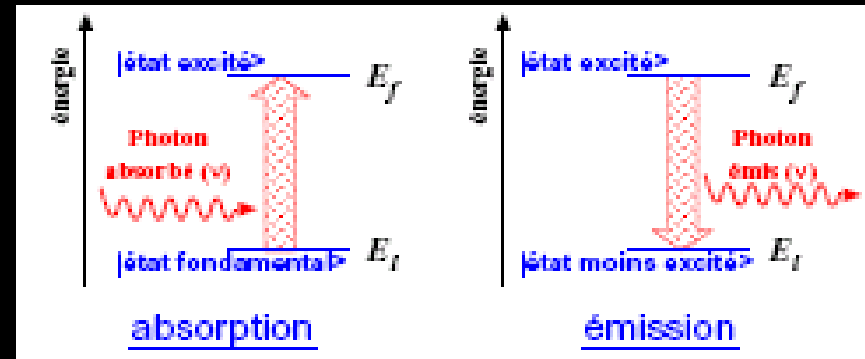


Les domaines du champ électromagnétique

Définition des domaines



Absorption et émission



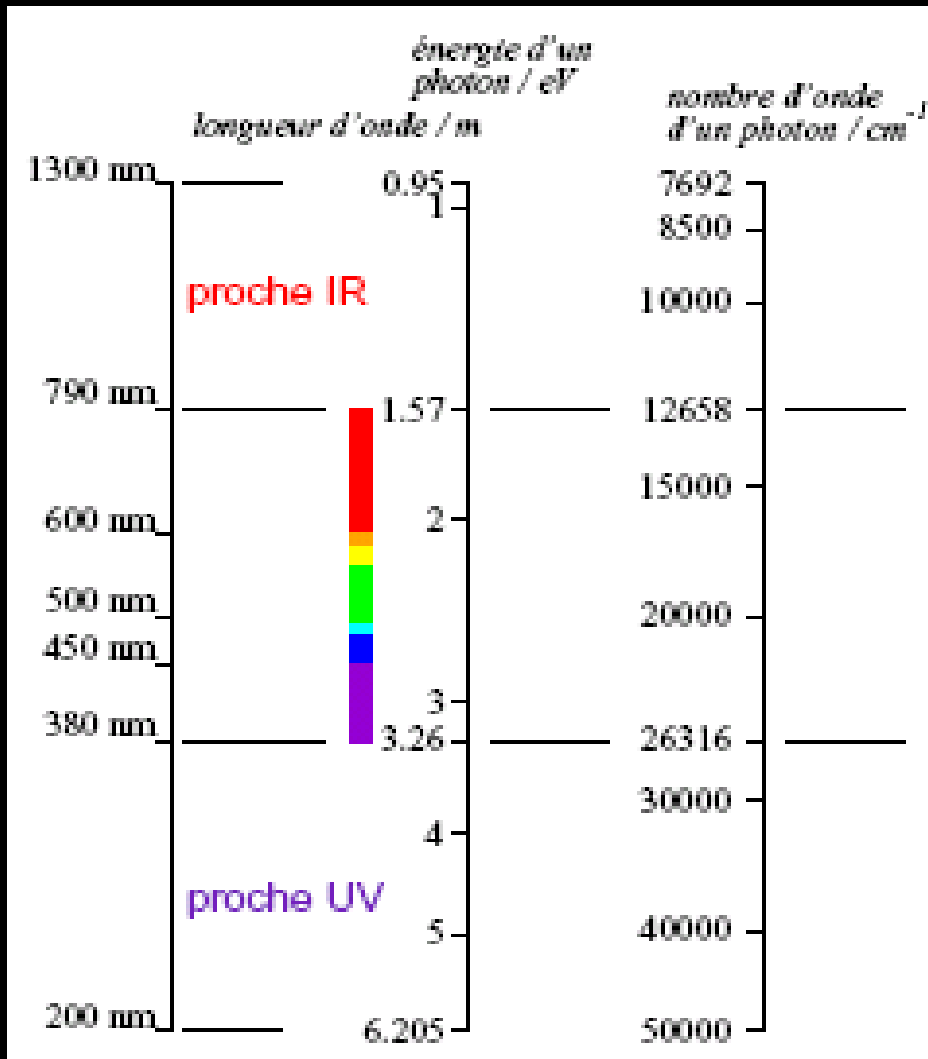
Les spectroscopies d'absorption et d'émission sont sous-tendues par la notion de quantification de l'énergie :

domaine	excitation
UV/visible	électrons de valence
IR	vibration molécules
microondes	rotation molécules
ondes radio	précession spin noyaux

Les domaines du champ électromagnétique

Définition des domaines

Domaine spectral

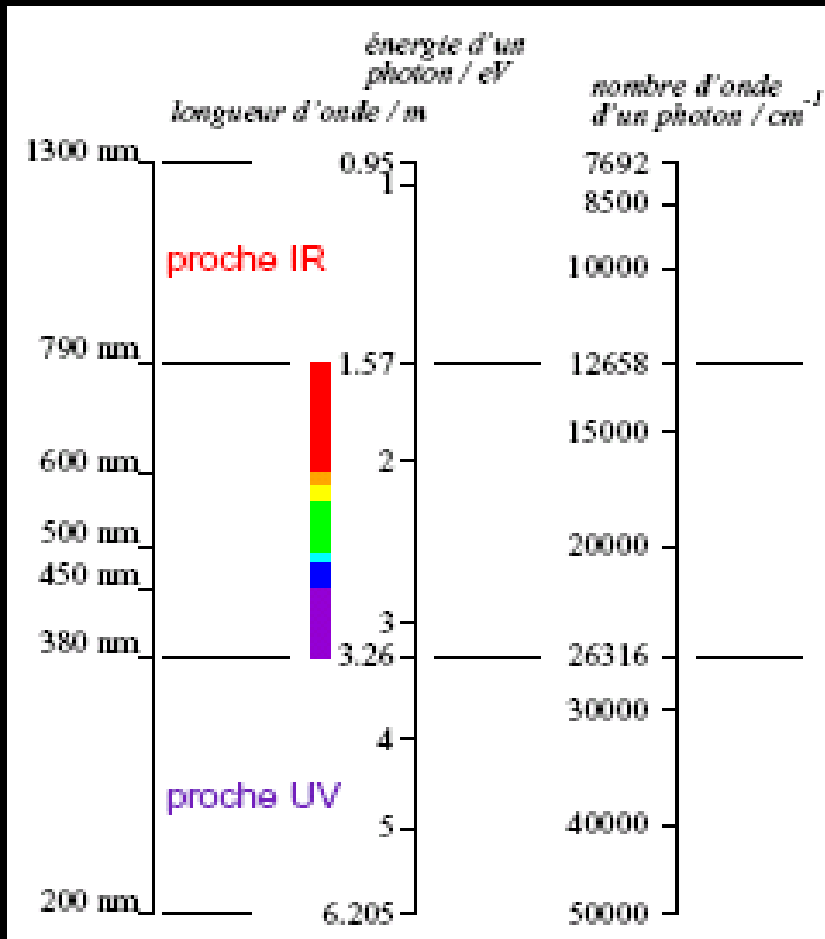


Domaine spectral divisé en trois plages :

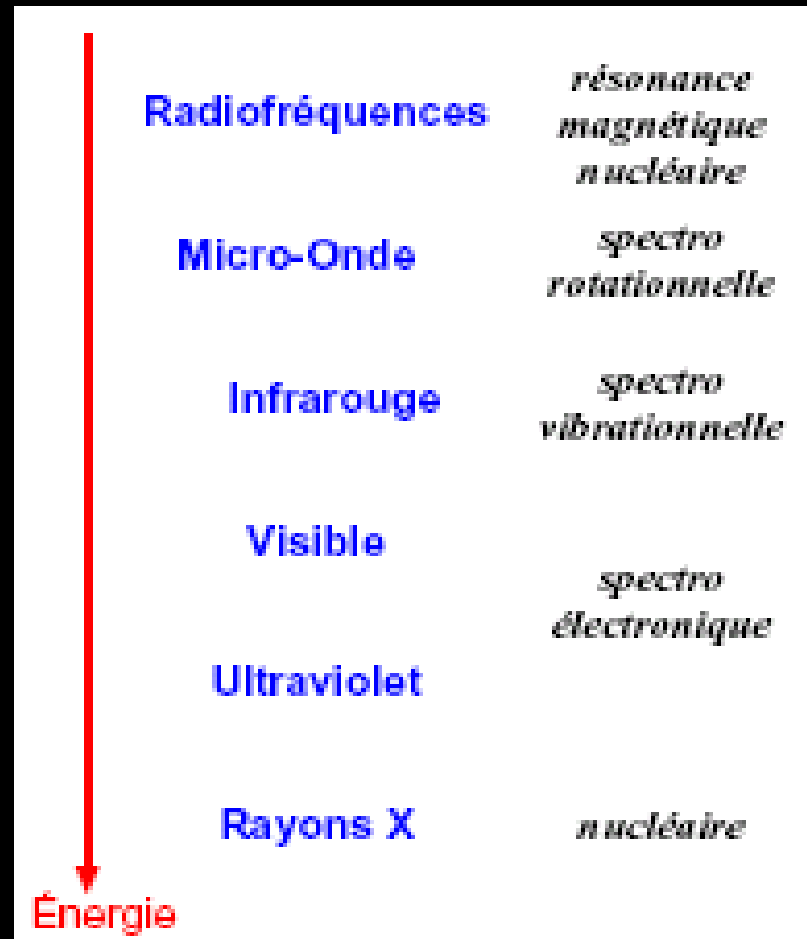
- proche UV 200-380 nm
- visible 380-790 nm
- proche IR 790-1300 nm

Les domaines du champ électromagnétique

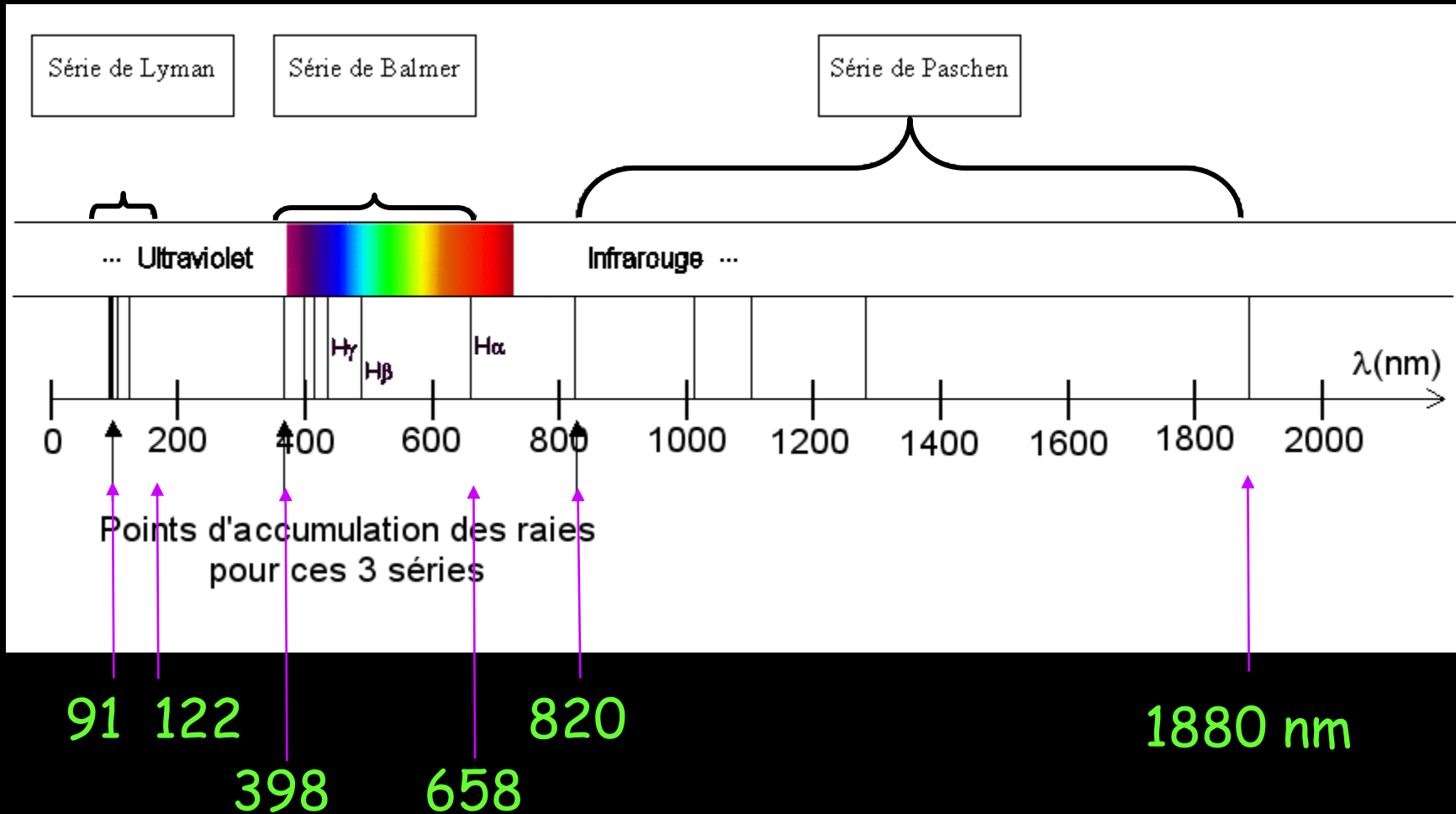
Définition des domaines



Domaine spectral



L'analyse des spectres d'émission dans l'IR et dans l'UV lointain montre l'existence d'autres séries :



... on ne retrouve que quelques longueurs d'onde
Pourquoi ??

Balmer, Rayleigh, Rydberg et d'autres, ont réussi à écrire des équations empiriques qui permettent de trouver les fréquences de lumière observées expérimentalement.

$$\bar{\nu} = R_H \left[\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(n_2)^2} \right]$$

n_1, n_2 : des nombres entiers positifs et $n_2 > n_1$

$$R_H = 109677,57 \text{ cm}^{-1} \text{ (constante)}$$

$$n_1 = 1, n_2 = 2, 3 \dots$$

$$n_1 = 2, n_2 = 3, 4 \dots$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

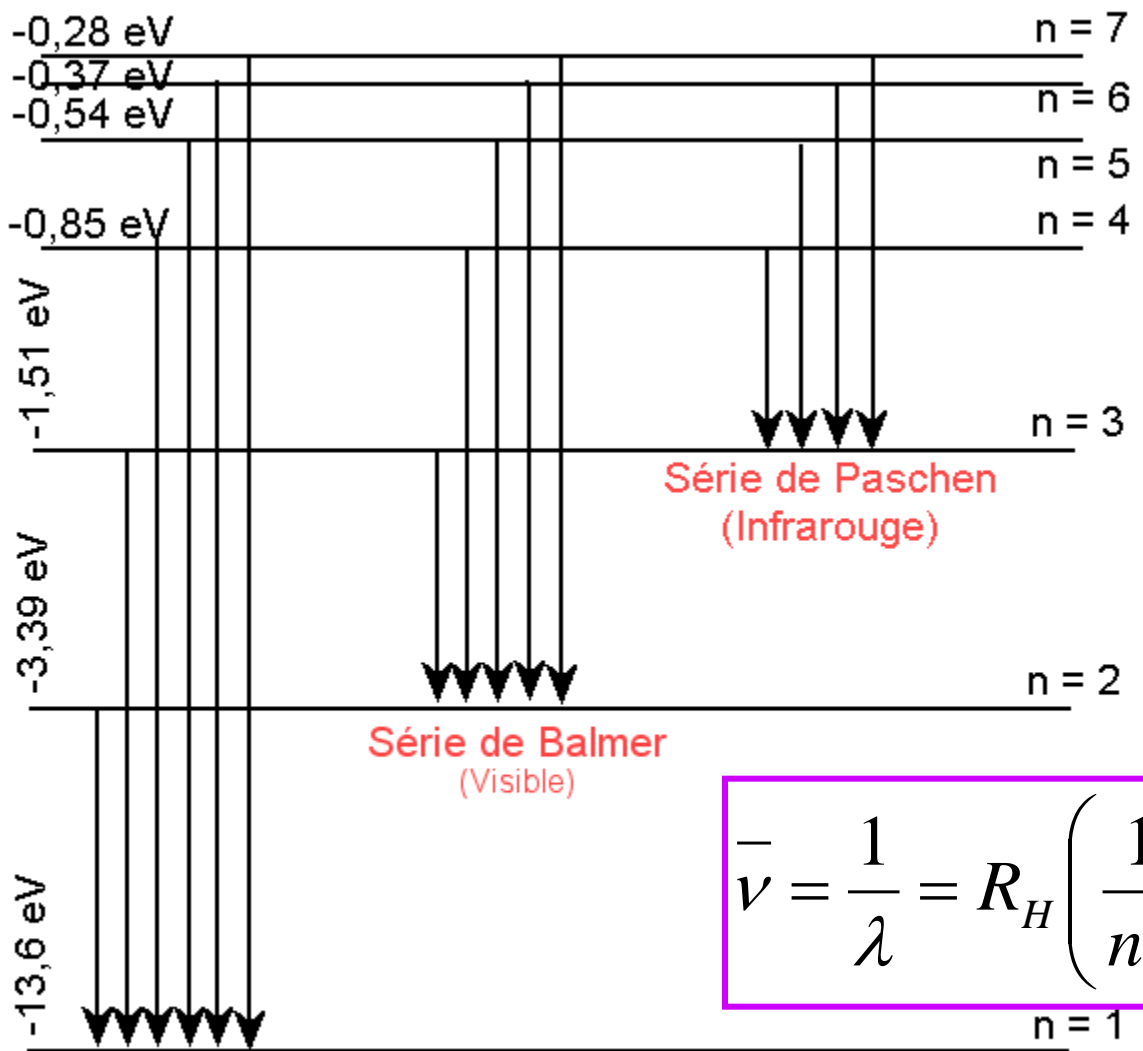
Nombre d'onde

Les séries spectrales de l'atome d'hydrogène

E

0

$n = \infty$



$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Série de Lyman
(Ultraviolette)

Série de Balmer
(Visible)

Série de Paschen
(Infrarouge)

Echelle d'énergie non respectée

n_1	Nom de la série	région
1	Lyman	UV lointain
2	Balmer	Visible
3	Paschen	Proche IR
4	Brackett	IR
5	Pfund	IR lointain

D'après la formule de Ritz pour une certaine valeur de n_1 , si n_2 augmente, les lignes spectrales se rapprochent de plus en plus pour atteindre une valeur limite :

$$\bar{\nu} = R_H \left[\frac{1}{(n_1)^2} - \frac{1}{(\infty)^2} \right]$$

$$\bar{\nu}_\infty(H_2) = \frac{R_H}{(n_1)^2}$$

différence de 2 termes spectraux

Postulats de Bohr - Interprétation du spectre d'hydrogène

Faite par Bohr qui a donné en 1913 un modèle basé sur la mécanique classique.

Pour interpréter les spectres d'émission des atomes, Bohr a introduit quelques notions de mécanique quantique.

Il s'est aidé des théories de Planck et Einstein. Ces notions sont les suivantes :



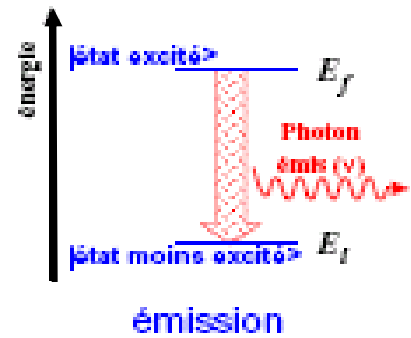
Niels Henrik David Bohr
1885 - 1962
Prix Nobel de physique, 1922

- L'énergie de l'atome ne peut pas prendre une suite continue de valeurs mais des valeurs précises qu'on appelle NIVEAUX D'ÉNERGIE.
- Chaque niveau d'énergie constitue un état stationnaire de l'atome dans lequel il n'émet aucun rayonnement.
- Les transitions entre les niveaux d'énergie se font par absorption ou émission d'énergie.

Ainsi, dans le cas du spectre de l'atome d'hydrogène, les atomes reçoivent de l'énergie électrique et émettent un rayonnement comportant des radiations de fréquences précises.

Chaque radiation émise (de fréquence ν) correspond à la désexcitation de l'atome et à une transition vers un niveau inférieur d'énergie :

la variation d'énergie est
alors $\Delta E = h\nu$.



On peut donc, à l'aide de l'ensemble du spectre d'émission, reconstituer le diagramme énergétique de l'atome d'hydrogène.

Origine des énergies : point le + haut

E

0

n = ∞

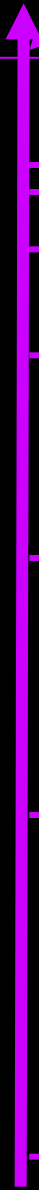
n = 4

n = 3

n = 2

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

n = 1



Calcul de λ ?

formule de Ritz

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$R_H = 109677,57 \text{ cm}^{-1}$$

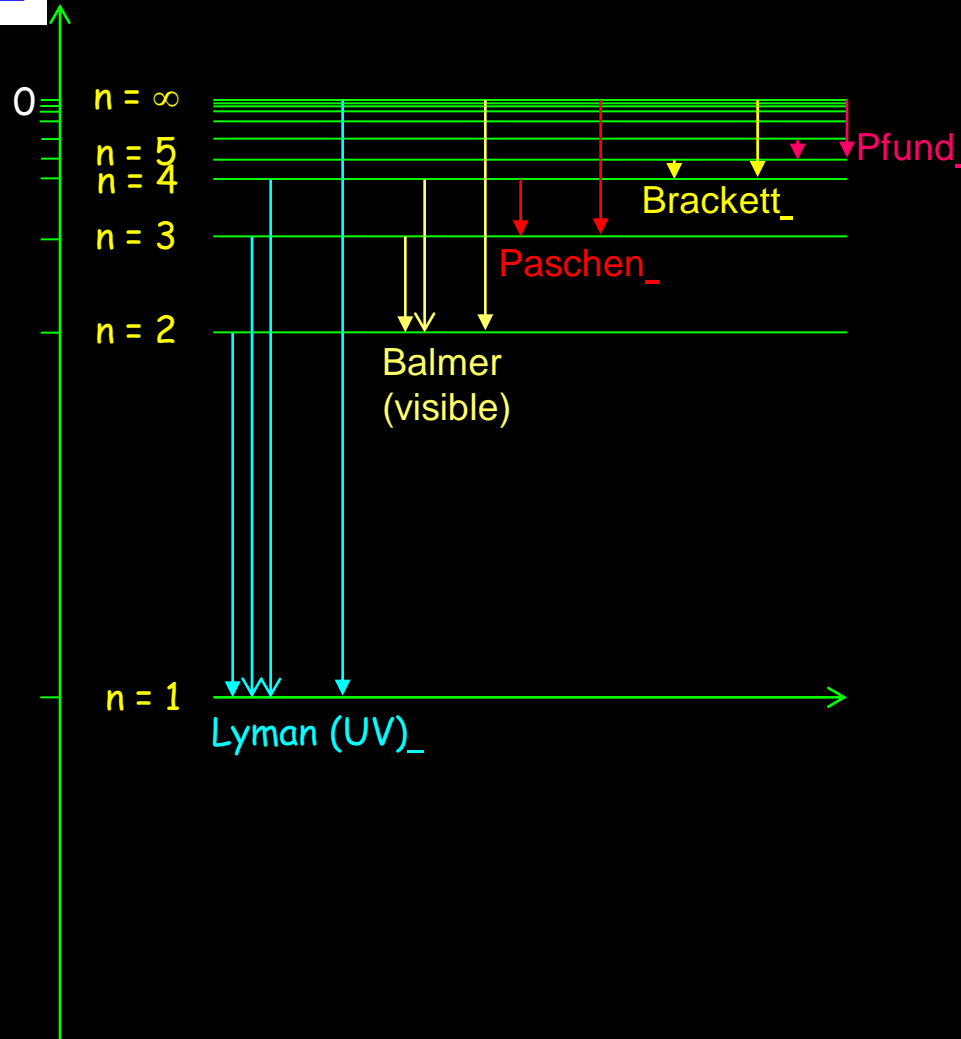
ou

$$R_H = 1,09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

n_1 et $n_2 \in \mathbb{N}$

cte de Rydberg_

E



$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = R_H \left(\frac{4-1}{1 \times 4} \right) = R_H \frac{3}{4}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) = R_H \left(\frac{9-1}{1 \times 9} \right) = R_H \frac{8}{9}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{4^2} \right) = R_H \left(\frac{16-1}{1 \times 16} \right) = R_H \frac{15}{16}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{1^2} - 0 \right) = R_H$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) = R_H \left(\frac{9-4}{4 \times 9} \right) = R_H \frac{5}{36}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right) = R_H \left(\frac{16-4}{4 \times 16} \right) = R_H \frac{12}{64}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{2^2} - 0 \right) = R_H \frac{1}{4}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} \right) = R_H \left(\frac{16-9}{9 \times 16} \right) = R_H \frac{7}{144}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{3^2} - 0 \right) = R_H \frac{1}{9}$$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{5^2} \right) = R_H \left(\frac{25-16}{16 \times 25} \right) = R_H \frac{9}{400}$$

Les postulats de Bohr permettent l'interprétation du spectre d'émission de H atomique. Chaque radiation émise (de fréquence ν) correspond:

- à la désexcitation de l'atome,
- et à une transition vers un niveau inférieur d'énergie

La variation d'énergie est alors $\Delta E = h\nu$

Exemple de calcul: 1^{ère} raie de la série de Lyman $\Delta E = h\nu$

$$1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = R_H \left(\frac{4-1}{1 \times 4} \right) = R_H \frac{3}{4} = 1,09 \times 10^7 \frac{3}{4}$$

$$\lambda = \frac{4}{3 \times 1,09} 10^{-7} = 122,32 \text{ nm}$$

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 3 \cdot 10^8}{122,32 \times 10^{-9}} = 0,163 \cdot 10^{-17} \text{ J}$$

$$E - E_0 = \Delta E = \frac{0,163 \cdot 10^{-17}}{1,6 \times 10^{-19}} = 10,18 \text{ eV}$$

La limite du spectre de la série de Lyman

$$E_0 = -h\nu = -\frac{hc}{\lambda} = -\frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 3 \cdot 10^8}{91 \cdot 10^9} = -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_0 = \Delta E = -\frac{2,18 \cdot 10^{-18}}{1,6 \times 10^{-19}} = -13,62 \text{ eV}$$

- L'énergie de l'atome ne peut pas prendre une suite continue de valeurs mais des valeurs précises qu'on appelle NIVEAUX D'ÉNERGIE.
- Chaque niveau d'énergie constitue un état stationnaire de l'atome dans lequel il n'émet aucun rayonnement.
- Les transitions entre les niveaux d'énergie se font par absorption ou émission d'énergie.

Ainsi, dans le cas du spectre de l'atome d'hydrogène, les atomes reçoivent de l'énergie électrique et émettent un rayonnement comportant des radiations de fréquences précises.

Spectre d'émission d'atomes autres que l'hydrogène

Les hydrogénoïdes : atomes ayant 1 seul e^-

Exemples: H , He^+ , Li^{2+}

d'où

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

n_1 et $n_2 \in \mathbb{N}$
 $n_2 > n_1$

Spectre d'émission d'atomes autres que l'hydrogène....

Les autres atomes ayant plusieurs e^-

d'où

$$\frac{1}{\lambda} = R_H (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\begin{aligned} n_1 \text{ et } n_2 &\in \mathbb{N} \\ n_2 &> n_1 \end{aligned}$$

Postulats de Bohr - Interprétation du spectre d'hydrogène_



Faite par Bohr qui a donné en 1913 un modèle basé sur la mécanique classique.

Pour interpréter les spectres d'émission des atomes, Bohr a introduit quelques notions de mécanique quantique.

Il s'est aidé des théories de Planck et Einstein.



Niels Henrik David Bohr
1885 – 1962
Prix Nobel de physique, 1922

Modèle classique de l'atome l'hydrogène

En 1913, Niels Bohr publia un article dans lequel il tentait de concilier un modèle atomique planétaire pour l'atome d'hydrogène et la quantification observée sur son spectre d'émission.



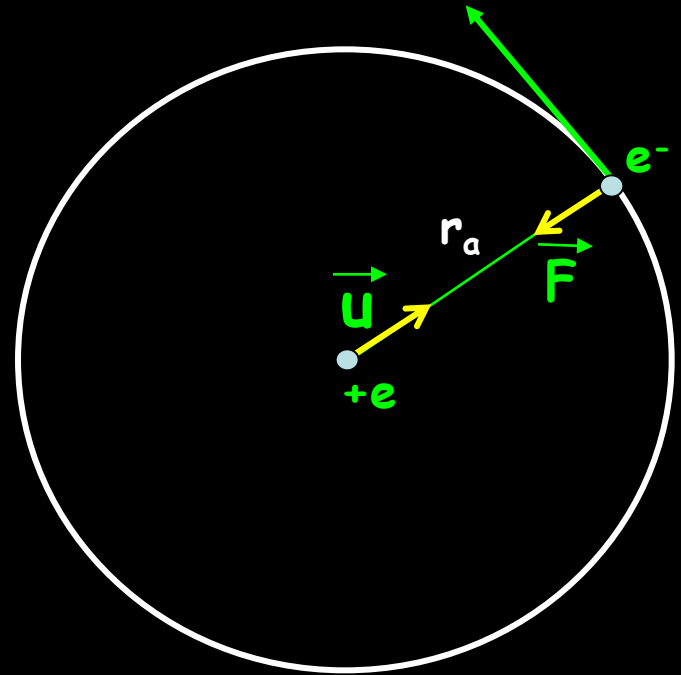
Son hypothèse de base reposait sur les postulats suivants :

Son hypothèse de base reposait sur les postulats suivants :

L'électron circule à vitesse et énergie constante sur des orbites circulaires particulières sur lesquelles il y a exacte compensation entre l'attraction coulombienne du noyau et la force centrifuge.

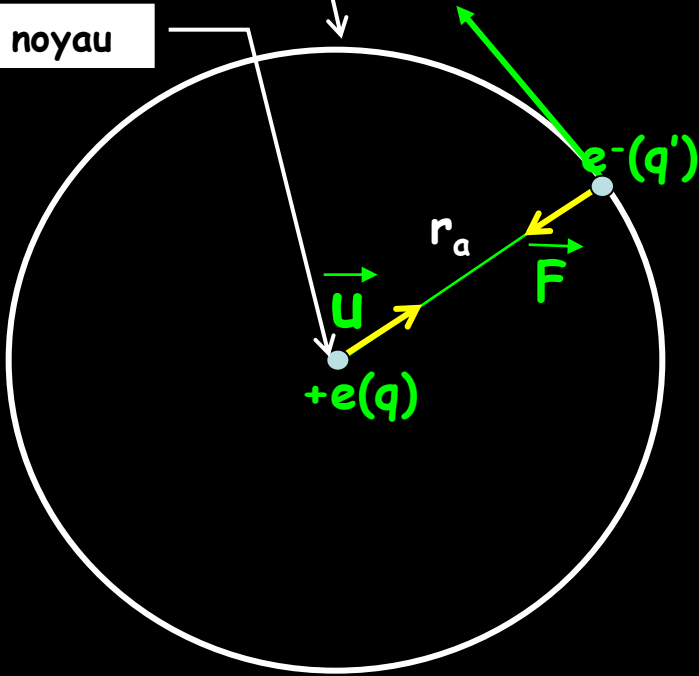
Ces orbites particulières se limitent à celles pour lesquelles l'action, produit de la quantité de mouvement et de la longueur de l'orbite, est un multiple de la constante de Planck.

Le changement d'orbite se produit par absorption ou émission d'un photon. L'énergie du photon absorbé ou émis correspond à la différence d'énergie des deux orbites.



Orbite
de Bohr

noyau



\vec{F} = Force de Coulomb = Force centrale attractive

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qq'}{r^2} \vec{u}$$

$$\vec{F} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \vec{u}$$

Permittivité du vide

Il existe une relation entre:

L'accélération centripète
et
La force de l'e-

$$-\frac{mv^2}{r} \vec{u} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \vec{u}$$

d'où

$$v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m r}$$

Ces orbites particulières se limitent à celles pour lesquelles l'action, produit de la quantité de mouvement et de la longueur de l'orbite, est un multiple de la cte. de Planck.

Le moment cinétique de e^- est égal à un nb entier de fois

$$\frac{h}{2\pi}$$

On obtient:

$$|\vec{r} \cdot m\vec{v}| = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

d'où

$$r = n \frac{h}{2\pi} \frac{1}{mv}$$

On tire

$$r = n \frac{h}{2\pi} \frac{1}{mv} = n \frac{h}{2\pi} \frac{1}{mv}$$

On sait que

$$v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mr}$$

$$v^2 = \frac{2\pi m v e^2}{2\pi \epsilon_0 m n h}$$

d'où

$$v = \frac{1}{2\epsilon_0} \frac{e^2}{n h}$$

soit

$$r = n \frac{h}{2\pi} \frac{2\epsilon_0 n h}{m e^2}$$

enfin

$$r = n^2 \frac{h^2}{\pi} \frac{\epsilon_0}{m e^2}$$

La plus petite valeur de n ($n=1$) donne le rayon r_0

$$r_0 = \frac{h^2}{\pi} \frac{\epsilon_0}{me^2} = 52,9 \text{ pm}$$

c'est le rayon de la 1^{ère} orbite

Calcul de l'énergie de l'e⁻ sur une orbite

Energie mécanique = énergie cinétique + énergie potentielle

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2}mv^2 + \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right)$$

$$E_{\text{tot}} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

or

$$r = n^2 \frac{h^2}{\pi} \frac{\epsilon_0}{me^2} = n^2 r_0$$

On obtient:

$$E_{\text{tot}} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} e^2 \frac{1}{n^2} \frac{\pi me^2}{\epsilon_0 h^2} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad \text{ou} \quad E_{\text{tot}} = -13,6 \frac{1}{n^2}$$

en eV

Conclusion

- On retrouve bien que l'énergie de e^- ne peut prendre qu'une **suite discontinue** de valeurs.
- Chaque valeur correspond à une orbite
- Les nb d'ondes des raies émises dans le spectre de H sont égaux aux variations d'énergie entre 2 orbites dont les n sont \neq

$$\Delta E = h\nu = hc\bar{\nu} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{d'où} \quad \bar{\nu} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$R_H = 1,097 \cdot 10^{-7} \text{ m}^{-1} \quad \text{cte de Rydberg}$$