

PROPRIETES PERIODIQUES DES ELEMENTS

I- La charge nucléaire effective :

Définition :

On considère l'attraction entre les Z protons du noyau et un électron E quelconque de l'atome. L'attraction est perturbée par les électrons situés entre le noyau et l'électron E . Ces électrons forment un écran. On définit alors une constante d'écran qui dépendra de la position des électrons de l'atome par rapport à l'électron E . La charge Z du noyau de l'atome devient alors une charge effective Z^* relative à l'électron E :

$$Z^* = Z - \sigma$$

Où σ est appelée la constante d'écran. Attention ! La charge effective Z^* dépend de l'électron pour lequel on fait les calculs.

Règle de Slater :

Les électrons sont placés dans une séquence de groupes en ordre du nombre quantique principal n , et pour chaque n en ordre du nombre quantique azimutal l , sauf que les orbitales s et p sont gardées ensemble. L'ordre est alors (1s, 2s2p, 3s3p, 3d, 4s4p, 4d, 4f, 5s5p, 5d...)

L'effet d'écran σ_j sur l'électron j est la somme des effets d'écran $\sigma_{j \rightarrow i}$ exercés sur l'électron j par tout autre électron i , en tenant compte de la situation de l'électron j .

Selon Slater les effets des autres électrons sont déterminés par les règles suivantes :

1. Chaque autre électron au même groupe que l'électron j exerce un effet écran équivalent à 0,35 (charges électroniques), à l'exception du groupe 1s pour lequel l'écran d'un électron sur l'autre est 0,30.
2. Un électron j d'un groupe $nsnp$ subit un écran de 0,85 par chaque électron de nombre quantique principal $(n - 1)$, ainsi qu'un écran de 1,00 par chaque électron de nombre quantique principal inférieur.
3. Un électron j d'un groupe nd ou nf subit un écran de 1,00 par chaque électron d'un groupe inférieur, soit avec une valeur inférieure de n , soit avec la même valeur de n que l'électron j et une valeur inférieure de l .

électron j/électron i	1s	2s 2p	3s 3p	3d	4s 4p	4d
1s	0,30					
2s 2p	0,85	0,35				
3s 3p	1	0,85	0,35			
3d	1	1	1	0,35		
4s 4p	1	1	0,85	0,85	0,35	
4d	1	1	1	1	1	0,35

Exemples :

1. Charge effective d'un électron externe de l'azote

L'azote ${}^7\text{N}$ a pour configuration électronique : $1s^2 2s^2 2p^3$.

On peut l'écrire sous la forme : $(1s)^2 (2s, 2p)^5$.

Un électron de la couche externe (2s, 2p) a donc comme électrons d'écran :

4 électrons (s, p) de la couche n : $\sigma_i = 0,35$,

2 électrons s de la couche n-1 : $\sigma_i = 0,85$.

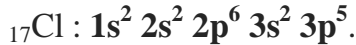
On en déduit :

$$\sigma = (2 \cdot 0,85) + (4 \cdot 0,35) = 3,10$$

Donc la charge effective :

$$Z^* = Z - \sigma = 7 - 3,1 = 3,9$$

2- Charge effective d'un électron de valence du chlore



On étudie dans cet exemple un **électron de valence** (c'est-à-dire appartenant à la dernière couche électronique, ici $3s^2 3p^5$) : ainsi, la charge effective pour chaque électron de la sous-couche 3s ou 3p sera $Z^* = Z - \sigma$ avec une constante d'écran σ due aux 6 autres électrons sur la même couche 3s/3p, 8 électrons sur la couche 2s/2p et aux 2 électrons de la couche 1s, soit :

$$\sigma = 6 \times \sigma_{3s,3p} + 8 \times \sigma_{2s,2p} + 2 \times \sigma_{1s} = 6 \times 0,35 + 8 \times 0,85 + 2 \times 1 = 10,9$$

ce qui donne une charge effective de : $Z^* = 17 - 10,9 = 6,1$

3- Charge effective d'un électron 4s du zinc

La configuration du ${}_{30}\text{Zn}$ est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$ que l'on réécrit comme :

$(1s)^2 (2s, 2p)^8 (3s, 3p)^8 (3d)^{10} (4s)^2$. Pour un électron 4s, l'écran est dû à :

- 1 électron s de la couche n : $\sigma_i = 0,35$,
- 10 électrons d de la couche n-1 : $\sigma_i = 0,85$,
- 8 électrons (s, p) de la couche n-1 : $\sigma_i = 0,85$,
- 8 électrons (s, p) de la couche n-2 : $\sigma_i = 1$,
- 2 électrons s de la couche n-3, $\sigma_i = 1$.

On calcule : $\sigma = (1 \cdot 0,35) + (18 \cdot 0,85) + (10 \cdot 1) = 25,65$

On en déduit : $Z^* = Z - \sigma = 30 - 25,65 = 4,35$

4- Charge effective d'un électron 3d du zinc

La configuration du ${}_{30}\text{Zn}$ est réécrite est : $(1s)^2 (2s, 2p)^8 (3s, 3p)^8 (3d)^{10} (4s)^2$. Pour un électron 3d,

l'écran est dû à :

- 2 électrons s de la couche n+1 : $\sigma_i = 0$,
- 9 électrons d de la couche n : $\sigma_i = 0,35$,
- 8 électrons (s, p) de la couche n : $\sigma_i = 1$,
- 8 électrons (s, p) de la couche n-1 : $\sigma_i = 1$,
- 2 électrons s de la couche n-2 : $\sigma_i = 1$.

On calcule : $\sigma = (9 \cdot 0,35) + (18 \cdot 1) = 21,15$

On en déduit : $Z^* = Z - \sigma = 30 - 21,15 = 8,85$

Application au calcul de l'énergie d'ionisation d'atomes légers non-hydrogénoïdes.

1. Généralités

Pour un atome hydrogénoïde de numéro atomique Z, l'énergie se calcule par $E = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} (ev)$

Pour un atome non-hydrogénoïde, chaque électron contribue à une énergie de : $E = -13,6 \frac{Z_i^2}{n^2} (ev)$

2. Exemple du lithium

Le lithium ${}^3\text{Li}$ a pour configuration électronique $1s^2 2s^1$. L'électron $2s$ a pour charge effective :

$$Z_1^* = 3 - (2 \cdot 0,85) = 1,3$$

$$\text{Son énergie est : } E_1 = -13,6 \cdot 1,3^2 / 2^2 = -5,75 \text{ eV}$$

$$\text{On déduit l'énergie de première ionisation du Li est : } E_{i1} = +5,75 \text{ ev.}$$

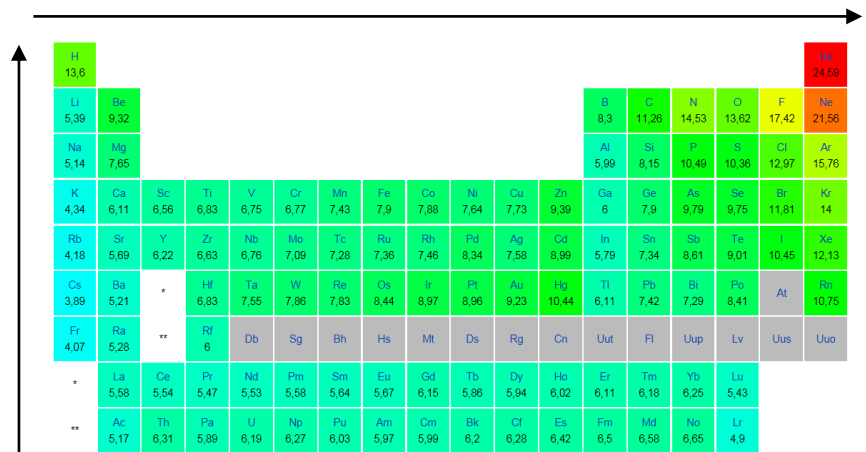
$$\text{Un des électrons } 1s \text{ a pour charge effective : } Z_2^* = 3 - (1 \cdot 0,30) = 2,7$$

$$\text{Son énergie est : } E_2 = -13,6 \cdot 2,7^2 / 1^2 = -99,14 \text{ eV}$$

$$\text{On déduit que l'énergie de deuxième ionisation est : } E_{i2} = +99,14 \text{ ev}$$

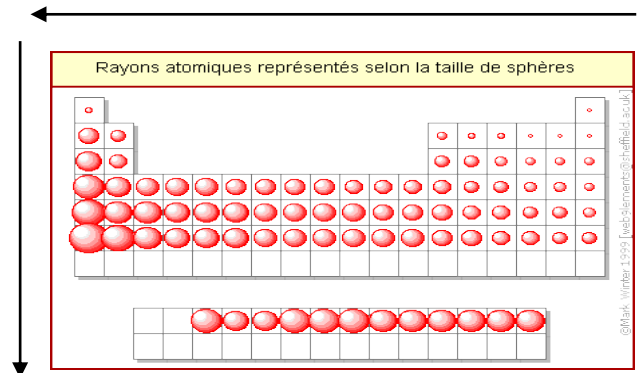
II- Energie d'ionisation :

Les énergies d'ionisation décroissent le long d'une colonne du Tableau périodique des éléments et croissent de gauche à droite le long d'une période de la table.



III- Rayon atomique :

Les rayons atomiques varient de manière prévisible lorsqu'on se déplace dans le tableau périodique. Les rayons diminuent en général le long d'une période (rangée) de la table depuis les alcalins jusqu'aux gaz nobles; et augmentent lorsqu'on descend une colonne.



IV- L'électronégativité :

Na 0,93	Mg 1,31										Al 1,61	Si 1,9	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16	Ar	
K 0,82	Ca 1	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,9	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr
Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 2,1	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,2	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,6
Cs 0,79	Ba 0,89	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2	At 2,2	Rn 2,2
Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,2	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27		

L'électronégativité d'un élément est une grandeur qui caractérise

**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		
	1,1	1,3	1,5	1,7	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3		

sa capacité à attirer les électrons lors de la formation d'une liaison chimique avec un autre élément. La différence d'électronégativité entre ces deux éléments détermine la nature de la liaison covalente : Liaison apolaire lorsque la différence est nulle, liaison polaire quand la différence n'est pas nulle, et ionique quand la différence est tellement forte qu'un des éléments a attiré complètement les électrons: les atomes sont devenus des ions et portent des charges.

Elle croit de gauche à droite dans une période et bas vers le haut dans une colonne.

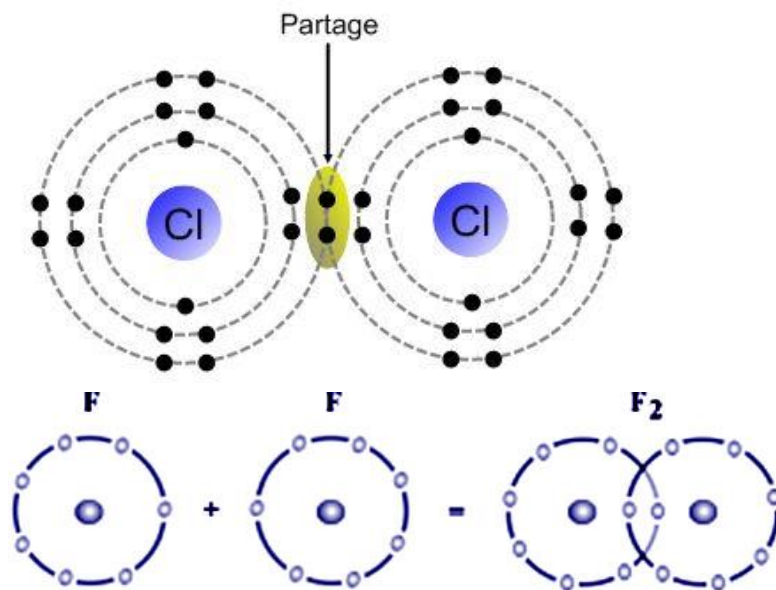
Le fluor est l'élément le plus électro-négatif.

LIASON CHIMIQUE :

On appelle **liaison chimique** toute interaction attractive qui maintient des atomes à courte distance.

Liaison covalente :

Une liaison covalente est une liaison chimique dans laquelle chacun des atomes liés met en commun un électron d'une de ses couches externes afin de former un doublet d'électrons liant les deux atomes.



Liaison dative :

Une liaison covalente de coordination est une description de la liaison covalente entre deux atomes pour lesquels les deux électrons partagés dans la liaison proviennent du même atome.



Type de liaisons.



CONSTRUCTION DES MOLECULES SIMPLES

La liaison covalente se fait entre deux atomes où chaque atome participe par un électron, donc il y a un recouvrement entre les orbitales : s, p, d.

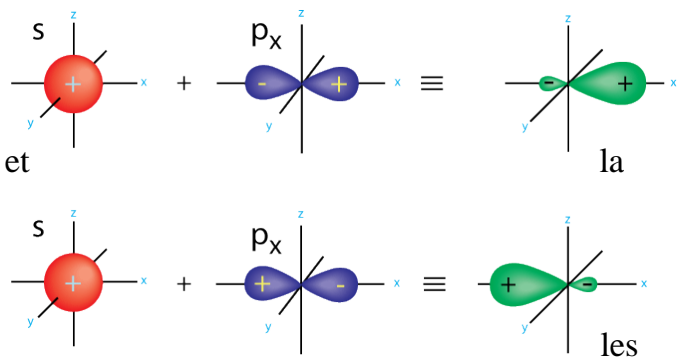
La distribution spatiale des orbitales définissent la forme de la molécule et les nombres des doublets électroniques (se repoussent entre eux) et s'orientent dans l'espace pour diminuer au maximum leur répulsion définissent aussi la forme de la molécule.

BeF₂ $4\text{Be} : 1s^2 2s^2$ état fondamental

Faire les cases quantiques $2s^2 2p^0 \rightarrow 2s^1 2p^1$ et reste deux cases p vides.

On obtient deux orbitales sp qui ont la même forme et même énergie, cette opération est appelée hybridation sp.

Le Béryllium possède 2 orbitales sp elles seront linéaires et l'angle 180° puis recouvrement avec orbitales p du fluor.



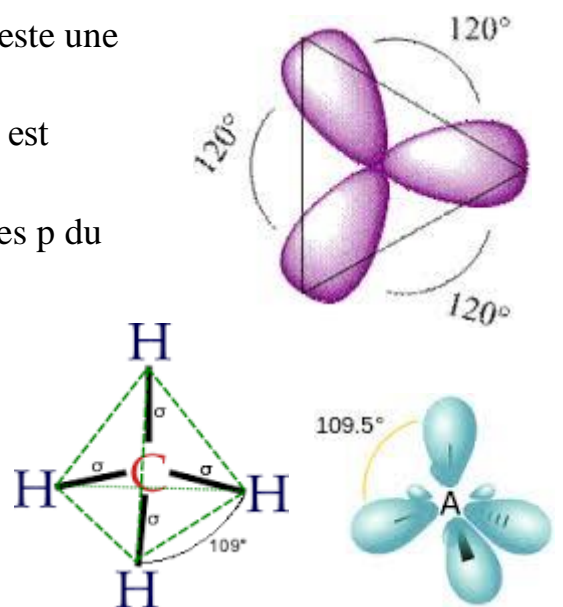
BF₃ $5\text{B} : 1s^2 2s^2 2p^1$ on obtient 3 orbitales sp^2 et reste une orbitale p pure.

Les trois orbitales sont loin de 120°. Et l'orbitale p pure est perpendiculaire sur le plan des 3 orbitales.

Puis le recouvrement des 3 orbitales sp^2 avec les orbitales p du fluor.

La géométrie est plane.

CH₄



${}_6\text{C} : 1s^2 2s^2 2p^2$ on obtient 4 orbitales sp^3 l'angle H-C-H est $109^\circ 28'$ la forme est tétraèdre

Liaison sigma et liaison pi :

La **liaison σ** (prononcer *sigma*) est une liaison chimique covalente créée entre deux atomes par recouvrement axial d'orbitales. La **liaison π** est

La liaison π est une liaison chimique covalente qui est créée entre deux atomes par recouvrement latéral.