

UE 5
CHIMIE

FICHE DE COURS 1 :
ATOMISTIQUE

Table des matières

I.	Structure de l'atome.....	3
1)	Le noyau.....	3
2)	Les électrons.....	3
3)	L'atome.....	3
II.	Atome et énergie.....	4
1)	Les niveaux énergétiques de l'atome.....	4
2)	Les nombres quantiques.....	5
III.	Configuration électronique d'un atome.....	6
1)	Règles de remplissage des OA – Etat fondamental.....	6
2)	Ecritures.....	7
3)	Les électrons de valence.....	7

I- Structure de l'atome

1) Le noyau

- assimilé à une sphère de diamètre 10^{-14} m
- \simeq masse de l'atome
- constitué de **nucléons** (proton et neutron)
- chargé **positivement**

	proton	neutron
charge	$\simeq +1,6 \cdot 10^{-19}$ C	0
masse	$\simeq 1,7 \cdot 10^{-27}$ kg	$\simeq m_{\text{proton}}$

2) Les électrons

- gravitent **autour du noyau** en décrivant une **orbite circulaire**
- chargés **négativement** ($\simeq -1,6 \cdot 10^{-19}$ C)
- masse = $9,11 \cdot 10^{-31}$ Kg près de 2000 x moins qu'un proton (ou un neutron)

3) L'atome

A = Nombre de masse (nombre de **nucléons** = protons + neutrons)

Z = Numéro atomique (nombre de **protons**)

${}^A_Z X$ L'atome est neutre : autant **d'électrons** que de protons : Z électrons

Pour un ion : Z- charge = Nombre **d'électron**

A - Z = Nombre de **neutrons**

- rayon **1 Å** (10^{-10} m) principalement constitué de **vide** (*petit pois / stade de foot*)
- **nucléides** = atomes ayant le même nombre de protons et le même nombre de neutrons (**même Z et même A**)
- **éléments** = atomes ou ions ayant le même nombre de protons (**même Z**)
- **isotope** = même élément (**même Z**) MAIS nombre de masse (**A**) \neq .

2 isotopes = même nombre d'électrons

même nombre de protons

MAIS nombre de **neutrons** \neq Ex : ${}^1_1\text{H}$; ${}^2_1\text{H}$; ${}^3_1\text{H}$

Stable (naturel) ou radioactif (naturel ou non)

masse molaire moyenne : $\overline{M} = \sum(x_i M_i)$

avec x_i : *abondance isotopique de l'isotope i* et M_i : *Masse molaire de l'isotope i*

- masse d'un atome ${}^A X \simeq$ masse du noyau (*masse électron négligeable*)

en kg : masse de l'atome ${}^A X \simeq$ masse du noyau = **A x $1,7 \cdot 10^{-27}$ kg**

car $m_p \simeq m_n \gg m_e$ (négligeable) et $A > Z$

en g.mol⁻¹ : la masse molaire d'un élément ${}^A X$ est : **A g.mol⁻¹**

II- Atome et énergie

1) Les niveaux énergétiques de l'atome

- Définition du spectre électromagnétique

Les différents niveaux d'énergie de l'atome sont déterminés par spectroscopie atomique : irradiation de l'atome par des ondes électromagnétiques.

Le spectre électromagnétique est un classement de toutes les ondes électromagnétiques en fonction de leur **longueur d'onde λ et de leur fréquence ν** . Il s'étend des **rayons gammas aux ondes radio**, c'est-à-dire des ondes les plus courtes aux ondes les plus longues.

Rayons gamma	Rayons X	Ultra-violets	Visible (du violet au rouge)	Infra-rouge	micro-ondes	Ondes radio
10^{-12} m	1 Å	10^{-8} m	400 – 750nm	10^{-5} m	1cm	1km
Noyau	Atome					

- Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène (inverse du spectre d'absorption)

- Lorsqu'un e^- passe d'un niveau n à un niveau m **supérieur** correspond à une **absorption** (de photon $h\nu$). L'inverse correspond à une **émission**
- Les différents niveaux d'énergie de l'atome sont déterminés par spectroscopie atomique : irradiation de l'atome par des ondes électromagnétiques (UV, visible, IR, RX)
- A partir de la différence d'énergie, ΔE , entre les 2 niveaux m et n (tel que $m > n$), on peut calculer la fréquence et/ou la longueur d'onde de la radiation électromagnétique

$$\Delta E \text{ (en J)} = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

Avec h , constante de Planck $6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s
 ν , fréquence (s^{-1} ou Hz)
 c , vitesse de la lumière $3 \cdot 10^8$ m.s $^{-1}$
 λ , longueur d'onde (m)

- Chaque orbite est associée à un niveau d'énergie E

L'électron, e^- , ne peut se situer que sur certaines orbites bien précises ou *permises*, de telle sorte que son énergie **E reste constante** (pas de rayonnement)

- Pour l'**hydrogène**, l'énergie de chaque orbite se calcule par :

$$E(\text{en eV}) = -\frac{13,6}{n^2}$$

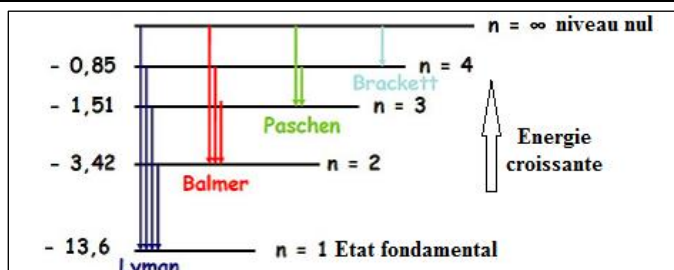
$$1\text{eV} = +1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Avec n , nombre quantique de la couche, entier > 0 ; $n = 1$ correspond au niveau le plus bas en énergie correspondant à l'orbite la plus proche du noyau Il s'agit de l'**état fondamental**
L'**état de référence** correspond à $n = \infty$ (**$E = 0$ eV**)

Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène (d'un état excité à l'état fondamental)

- Chaque ensemble de raies forme une série

Série	n = 1 Lyman	n = 2 Balmer	n = 3 Paschen	n = 4 Brackett	n = 5 Pfund
Domaine	U.V lointain	U.V visible	Infra-rouge		
Evolution selon ΔE décroissant donc selon λ croissant →					



- Pour un **ion hydrogénoïde** (ion qui ne possède qu'1 seul électron mais $Z \neq 1$ ex : He^+ , Li^{2+} , ...), l'énergie de chaque orbite se calcule par :

$$E \text{ (en eV)} = - \frac{13,6 \cdot Z^2}{n^2}$$

- Pour un **atome polyélectronique** : il faut considérer en plus de l'interaction noyau-électron les interactions électron-électron

Calcul de l'énergie selon **Slater** :

$$E \text{ (en eV)} = - 13,6 \cdot \frac{Z^*^2}{n^2}$$

Calcul de la charge nucléaire effective, Z^* :

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

avec σ constante d'écran due aux électrons qui appartiennent à la **même couche** et aux couches **inférieures** (mais **pas supérieures**), valeurs fournies dans un tableau

2) Les nombres quantiques

n	l	m_l
nombre quantique principal	nombre quantique secondaire ou azimutal	nombre quantique magnétique
Couche principale d'énergie	Sous-couche électronique	Orientation spatiale de l'orbitale selon xyz
$1 \leq n \text{ (entier)} \leq \infty$	$0 \leq l \text{ (entier)} \leq n-1$	$-1 \leq m \text{ (entier)} \leq +1$
n = 1 : couche K	l = 0 sous couche s	1 valeur (0)
n = 2 : couche L	l = 1 sous couche p	3 valeurs (-1,0,+1)
n = 3 : couche M	l = 2 sous couche d	5 valeurs (-2,-1,0,+1,+2)

Remarques :

Il y a n sous-couches (ou n valeurs de l) par couche n : pour n = 2 ; 2 sous-couches : s, p
Il y a 2l+1 valeurs de m_l

- Un 4^{ème} nombre quantique existe, m_s , nombre quantique magnétique de **spin**. Il permet de connaître l'orientation de l'électron. 2 valeurs possibles :

$$m_s = +\frac{1}{2}, \text{ noté : } \uparrow$$

$$m_s = -\frac{1}{2}, \text{ noté : } \downarrow$$

- L'énergie de l'électron dans un atome d'**hydrogène** ou d'**un ion hydrogénoïde ne dépend que de n** (on dit qu'il y a **dégénérescence des couches** = même énergie).

Ce n'est plus le cas d'un atome polyélectronique (*levée de dégénérescence des couches*). L'énergie de l'électron dépend ET de **n** ET de **l**

III- Configuration électronique d'un atome

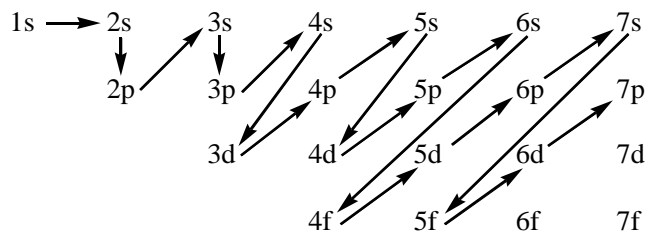
Chaque électron est caractérisé par un quadruplet **UNIQUE** de nombres quantiques (n, l, m, s). Il convient donc de **respecter certaines règles** pour écrire la configuration électronique d'un atome

1) Règles de remplissage des O.A. – Etat fondamental

- Klechkowski** :

toujours respecter l'**ordre croissant en énergie** : n+l la plus faible

valeurs de n + l croissantes



- Pauli** :

2 e⁻ au maximum dans une O.A. et les 2 e⁻ seront obligatoirement de spin **opposé** : $\uparrow \downarrow$

1 orbitale ns peut accueillir au maximum	2 électrons
3 orbitales np	6 électrons
5 orbitales nd	10 électrons

Remarque :

Il y a **2n²** électrons au maximum dans une couche d'énergie **n**,

Couche K (n = 1) : 1 seule OA donc 2 électrons max (de spin opposé)

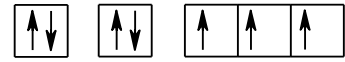
Couche L (n = 2) : 4 OA donc 8 électrons max

- Hund** :

Dans une sous couche l, remplir un maximum d'O.A. par des électrons de spins parallèles et positifs avant de les appairer

2) Ecritures

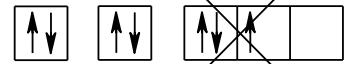
- Prenons l'exemple de l'azote ${}_{7}\text{N}$, 2 écritures possibles : - sous forme de cases quantiques :



-ou bien : $1s^2 2s^2 2p^3$

$1s^2$ → 2 en exposant : Nombre d'électrons dans la sous-couche
 $1s$ → 1s : Nom de la couche 1 et de la sous-couche s

Rq : l'écriture suivante est interdite (règle de Hund) :



- Autre exemple :

le titane, ${}_{22}\text{Ti}$, on a une configuration électronique à l'état fondamental :

${}_{22}\text{Ti} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$ MAIS on écrira : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$

on respecte l'ordre de remplissage (Klechkowski) MAIS on réorganise la configuration électronique en réécrivant **par n croissant**

- Attention (exemples du cours ${}_{24}\text{Cr}$ et ${}_{29}\text{Cu}$ **MAIS PAS SEULEMENT !!**) :

Cas de $ns^2 (n-1)d^4$ et $ns^2 (n-1)d^9$

Il conviendra d'écrire (car + stable) : $ns^1 (n-1)d^5$ et $ns^1 (n-1)d^{10}$

3) Les électrons de valence

- Les électrons qui appartiennent à la **couche la plus éloignée** (donc le **nombre quantique principal n le plus élevé**) du noyau sont appelés les électrons de valence, ils appartiennent à la **couche de valence** de l'atome

exemple : ${}_{7}\text{N} : 1s^2 2s^2 2p^3$ N a 5 **électrons de valence** ($2s^2 2p^3$)

*les 2 électrons qui appartiennent à l'OA 1s sont appelés des **électrons de cœur**, ce sont les plus proches du noyau, ils ne réagissent pas*

- **CAS des métaux de transition :**
- on prend en compte les électrons **n s et (n-1) d**.
- Ainsi pour le ${}_{22}\text{Ti} : 3d^2 4s^2$. Ti a donc 4 électrons de valence
- ATTENTION ceci n'est valable **QUE** pour les **métaux de transition** (bloc d)