

Atomes et
molécules

Chapitre 1

Atomes et classification périodique des éléments (suite)

II - Configuration électronique d'un atome dans son état fondamental

II.1 Les orbitales atomiques (OA)

Dans un atome, il existe un certain nombre **d'états** accessibles aux électrons.

Pour décrire ces états, la physique quantique utilise des **orbitales atomiques**, qui sont des fonctions mathématiques, que l'on obtient en résolvant l'équation fondamentale de la physique quantique, qui s'appelle **l'équation de Schrödinger** (équation 1926, prix Nobel de physique 1933).

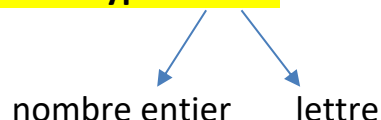
Autrement dit :

Une orbitale atomique (OA) est une fonction mathématique solution de l'équation de Schrödinger, qui décrit **l'état** d'un électron en physique quantique.

L'existence de ces différentes OA est à l'origine de la structuration du nuage électronique des atomes en *couches* et *sous-couches*.

Il faut donc connaître **la nature et le nombre de ces OA**.

Une OA est désignée par une notation de type « $n x$ »



(par exemple : $1s$, $3p$, $4d$...)

- n est un entier ≥ 1 appelé

On dit couramment que n numérote la couche dans laquelle se trouve l'électron.

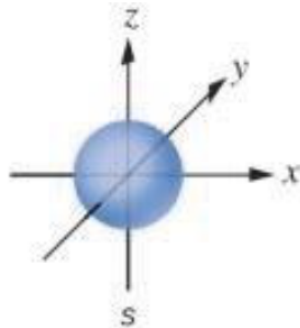
Pourquoi dit-on cela ?

- La lettre désigne l'état de moment cinétique de l'électron

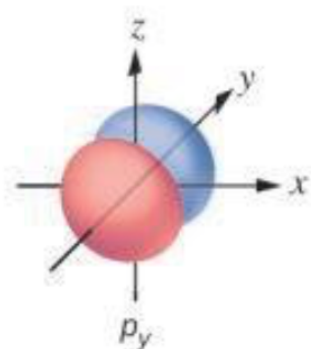
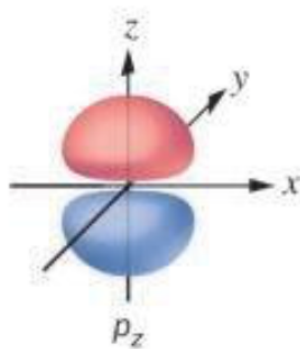
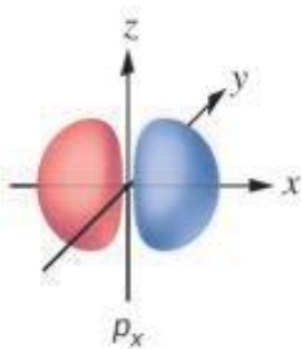
De quoi s'agit-il ?..

Quelles sont les « lettres » désignant ces états ?.. et pour chacune, combien d'OA sont disponibles ? (voir document 4)

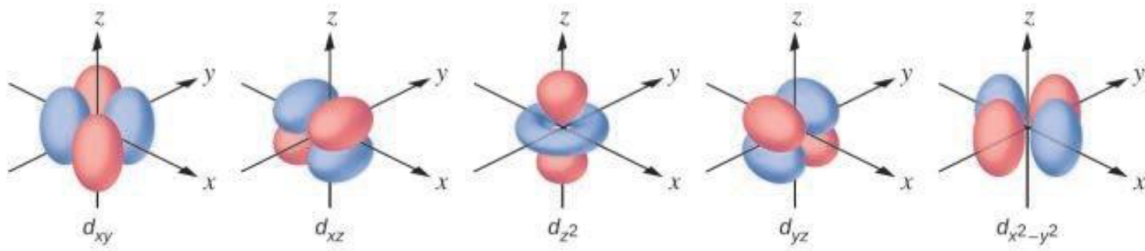
1 orbitale s



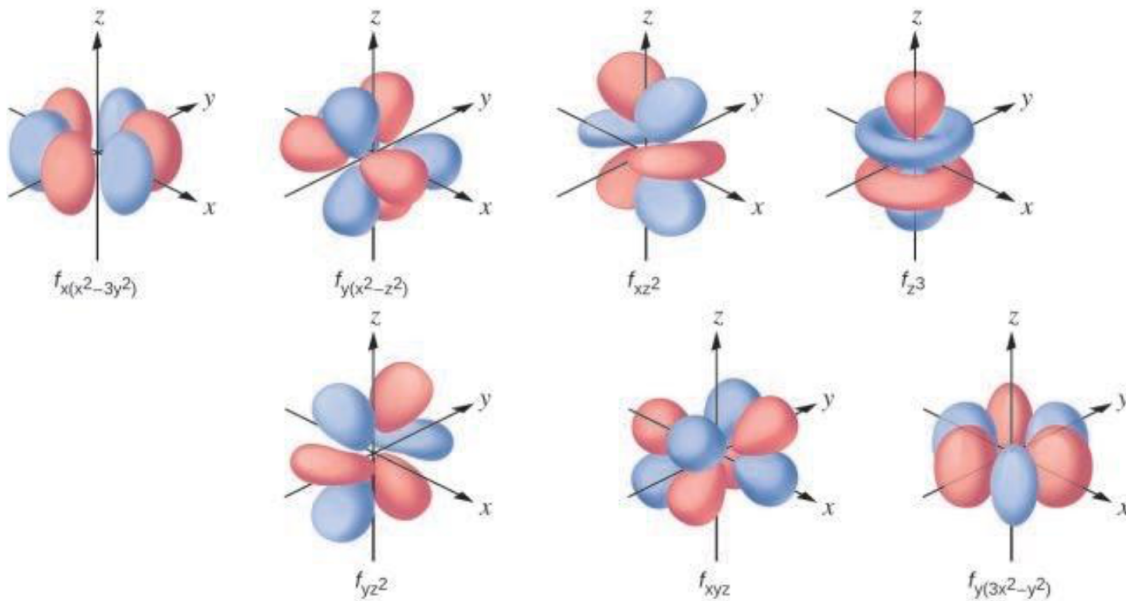
3 orbitales p



5 orbitales *d*



7 orbitales *f*



Pour la « couche » $n = 1$, seul l'état de moment cinétique s est accessible (la seule OA de $n = 1$ est l'OA $1s$). Puis à chaque « couche » suivante, un nouveau type d'OA devient accessible. On résume cela dans le tableau suivant des OA accessibles à un électron, que vous devez absolument retenir et être capable de reconstituer :

Les OA accessibles pour un électron dans un atome :

II.2 Le principe d'exclusion de Pauli

Énoncer ce principe fondateur de la physique quantique :

En appliquant le principe de Pauli, en déduire combien d'électrons peuvent être décrits par chaque type d'orbitales du tableau établi à la question précédente.

II.3 Configuration électronique, règle de Klechkowski

Compte tenu du principe d'exclusion de Pauli, l'OA $1s$ est saturée avec deux électrons. Les électrons supplémentaires doivent donc être décrits par d'autres OA, mais lesquelles ?

On pourrait penser que les électrons cherchent à occuper en priorité les « couches » de n les plus faibles, car cela correspond à une situation plus proche du noyau. Ceci est vrai pour les premiers éléments, mais ce principe ne s'avère pas correct dès qu'il y a trop d'électrons. En effet, les couches sont en réalité fortement interpénétrées, et suivant leur forme, la répulsion inter-électrons peut jouer un rôle très important.

La configuration électronique d'un atome dans son état fondamental correspond à la répartition des électrons dans les différentes OA qui conduit à la situation la plus stable possible.

Déterminer cette configuration par des calculs basés sur la physique quantique est d'une redoutable difficulté. Mais on peut mesurer ces configurations expérimentalement (par spectroscopie).

On s'aperçoit alors qu'elles suivent un ordre de remplissage particulièrement simple, connu sous le nom de « **règle de remplissage de Klechkowski** ».

Il existe différentes méthodes pour exprimer cette règle, la plus utilisée étant la « méthode diagonale » :

| | |
|----------------------------|---|
| <p>méthode diagonale :</p> | <p>On retrouve ainsi l'ordre de remplissage des OA :</p> |
|----------------------------|---|

Par application de cette règle, vous devez être capable de prévoir la configuration électronique de n'importe quel élément du tableau périodique !

N.B. Vous devez être capable de citer les 18 premiers éléments du tableau périodique : nom, symbole, Z , configuration électronique, nombre d'électrons de valence (voir paragraphe suivant) :

... autrement dit vous devez être capable de remplir le tableau suivant :

| Z | symbole | nom | configuration électronique | nb e^- de valence |
|-----|---------|-----|----------------------------|---------------------|
| 1 | | | | |
| 2 | | | | |
| 3 | | | | |
| 4 | | | | |
| 5 | | | | |
| 6 | | | | |
| 7 | | | | |
| 8 | | | | |
| 9 | | | | |

| | | | | |
|----|--|--|--|--|
| 10 | | | | |
| 11 | | | | |
| 12 | | | | |
| 13 | | | | |
| 14 | | | | |
| 15 | | | | |
| 16 | | | | |
| 17 | | | | |
| 18 | | | | |

Mais au-delà de ces 18 éléments, vous devez pouvoir écrire la configuration électronique de n'importe quel autre élément dont on vous donne le numéro atomique !

Exemples...

| | | | | |
|----|----|----------|--|--|
| 20 | Ca | Calcium | | |
| 26 | Fe | Fer | | |
| 53 | I | Iode | | |
| 63 | Eu | Europium | | |

Remarque : la règle de Klechkowski comporte quelques exceptions, dont la connaissance n'est pas exigible (et qui n'ont pas d'influence sur la détermination du nombre d'électrons de valence)

II.4 Électrons de valence, électrons de cœur

Les électrons de la configuration électronique ont des propriétés bien différentes les uns des autres.

Les électrons les plus externes, ceux qui participent le plus à la réactivité de l'atome et lui confèrent ses propriétés chimiques, sont appelés **les électrons de valence**.

Les **électrons de cœur** sont tous les autres... Ce sont les électrons de couches plus internes, plus proches du noyau et complètes.

Comment reconnaître les électrons de valence dans une configuration électronique (**FONDAMENTAL !**) :

Les électrons de valence sont toujours **ceux de la couche n la plus élevée qui accueille des électrons** ... auxquels on ajoute **les électrons d'éventuelles sous-couches *incomplètes*** de couches inférieures.

Appliquer cette règle pour compléter la quatrième colonne du tableau du paragraphe précédent.

III - Structure de la classification périodique des éléments

Le tableau périodique des éléments, dont la première version a été proposée par le chimiste russe Dmitri Mendeleïev en 1869, est un outil central pour le chimiste.

Un tableau périodique moderne est proposé dans le document 2. Il est constitué de **7 lignes** (appelées **périodes**) et de **18 colonnes** (**document 5**)

Il contient des informations cruciales sur les 118 éléments chimiques, que l'on peut soit lire dans chaque case (symbole, masse molaire), soit déduire de la position de l'élément dans le tableau (nombre d'électrons de valence, valeur plus ou moins grande de l'électronégativité, nature du corps simple – métal ou non-métal...).

Les deux principes fondateurs :

- 1)** Les éléments sont classés par numéro atomique **Z** croissant.
- 2)** On place dans une même colonne les éléments dont la configuration électronique écrite selon la règle de Klechkowski se termine de la même manière (même nombre d'électrons dans le même type d'OA). Exemples : tous les éléments de la colonne n°2 ont leur configuration électronique se terminant par ... s^2 , tous les éléments de la colonne n°17 ont leur configuration électronique se terminant par ... p^5 , etc ...

Cette dernière règle permet de rassembler dans une même colonne des atomes ayant **le même nombre d'électrons de valence** et une **configuration électronique externe identique**. Il en résulte que les éléments d'une même colonne ont des propriétés chimiques voisines ; ils constituent des **familles d'éléments chimiques**.

Comment est structuré le tableau ?

Pour comprendre la structuration de ce tableau, il est nécessaire de commencer par rappeler l'ordre de remplissage des OA selon la règle de Klechkowski :

Parcourir ensuite les différents éléments du tableau périodique dans l'ordre croissant et les positionner dans le tableau périodique sur le *document 6* :

- quand revient-on « à la ligne » ?

- à quoi correspond un bloc de colonnes ?

Donner le nom des quatre blocs et le nombre de colonnes qu'il contient :

- d'après la règle de Klechkowski, quels sont nécessairement le premier et le dernier bloc du tableau ? En déduire les numéros de colonnes de ces blocs dans la numérotation officielle en 18 colonnes :

Les blocs *s* et *p* sont appelés les blocs principaux.

- que peut-on dire du bloc d ? Quels numéros de colonnes occupe-t-il ? à partir de quelle période apparaît-il ?

- que peut-on dire du bloc f ? Où est-il situé ? à partir de quelle période apparaît-il ?

Les blocs s et p sont appelés les blocs de transition.

Donner le nom des principales familles :

Colonne n°1 (sauf H) :

Colonne n°2 :

Colonne n°17 :

Colonne n°18 :

Remarque sur le cas particulier de l'hélium :

On désigne sous le nom de « terres rares » les trois premiers éléments de la colonne n°3 ainsi que les éléments de la première ligne du bloc f (scandium (Sc), Yttrium (Y), et tous les éléments du lanthane (La) au lutécium (Lu)).

Application

Ce que vous devez impérativement savoir faire et savoir justifier :

- Trouver les coordonnées d'un élément dans le tableau périodique (numéro de période, numéro de colonne) à partir de la donnée de son numéro atomique Z ;
- Faire l'inverse... Trouver le numéro atomique d'un élément connaissant sa position dans le tableau périodique.

Pour faire cela, il faut passer dans tous les cas par l'écriture de la configuration électronique de l'atome, en appliquant la règle de Klechkowski :

$Z \rightleftharpoons \text{cfg } e \rightleftharpoons \text{position tableau}$

Exemples :

- Le sélénium (Se) est l'élément $Z = 34$. En déduire ses coordonnées dans le tableau périodique et justifier la réponse.

- Déterminer le numéro atomique du nickel (Ni), sachant qu'il est situé dans la 4^{ème} période, colonne n°10. Justifier la réponse.

IV - Conséquences : que déduire de la position d'un élément dans le tableau périodique ?

IV.1 Nombre d'électrons de valence

Il est fondamental de pouvoir déduire rapidement de la position d'un atome dans la classification périodique son nombre d'électrons de valence.

Le nombre d'électrons de valence est directement lié à la configuration électronique externe, qui est la même dans une colonne du tableau périodique. Autrement dit :

Tous les éléments d'une même colonne du tableau périodique ont le même nombre d'électrons de valence.

Inscrire le nombre d'électrons de valence que comporte les atomes dans chaque colonne du tableau périodique en complétant le document 6.

Attention : des éléments au même nombre d'électrons de valence peuvent être situés dans des colonnes différentes (colonne 7 et 17 par exemple : 7 électrons de valence). La nature des OA contenant ces électrons de valence est donc importante également quant aux propriétés des éléments.

IV.2 L'électronégativité

a) Définition, échelles d'électronégativité

- Donner la définition du concept d'électronégativité

- Donner le nom du chimiste qui a donné son nom à la première échelle numérique d'électronégativité en 1932 (prix Nobel de chimie 1954 et prix Nobel de la paix 1962 !) :

*Consulter le bas du **document 7** pour quelques informations sur la façon dont cette échelle est définie.*

b) Évolution dans la classification périodique

Dans le **document 7**, on indique sous forme d'un disque la valeur d'électronégativité de chaque élément.

Ce qu'il faut impérativement retenir :

- Donner l'évolution générale de l'électronégativité lorsqu'on parcourt de gauche à droite une ligne du tableau périodique :

- Donner l'évolution générale de l'électronégativité lorsqu'on parcourt de bas en haut une colonne du tableau périodique :

- Schématiser sommairement un tableau périodique et indiquer par des flèches ces évolutions de l'électronégativité :

- Citer l'élément qui (gaz nobles exceptés) a l'électronégativité la plus élevée et donner la valeur de son électronégativité de Pauling :

- Que peut-on dire de l'électronégativité de l'hydrogène ?

Pour la chimie organique...

On retiendra en particulier que **H et C ont des électronégativités très voisines ($\chi(\text{C}) > \chi(\text{H})$, mais très légèrement).**

Ceci implique que la liaison covalente C-H est très peu polarisée.

IV.3 Les corps simples : métaux, non-métaux et métalloïdes

Donner la définition d'un corps simple :

a) Propriétés macroscopiques des métaux, non-métaux et métalloïdes

Lire le document 8

- Citer les propriétés macroscopiques principales des corps simples qui sont des **métaux**.

- Citer les propriétés macroscopiques principales des corps simples qui sont des **non-métaux**.

- Comment nomme-t-on quelques éléments, dont le silicium, qui ont des propriétés intermédiaires entre métaux et non-métaux ? En citer quelques caractéristiques.

b) Localisation dans le tableau périodique

- Schématiser sommairement un tableau périodique et y placer approximativement la frontière entre métaux et non-métaux.

- Où se situent les métaux et les non-métaux par rapport à cette frontière ?

Où sont situés les métalloïdes ?

- Quel lien peut-on faire entre la nature métal/non-métal d'un corps simple et l'électronégativité de l'élément correspondant ?

c) Nature des liaisons dans les corps simples

- La **liaison métallique** est l'une des trois liaisons chimiques dites *fortes* pouvant lier les atomes les uns aux autres dans la matière.

C'est cette liaison qui est responsable de la cohésion des atomes dans un métal, et des propriétés macroscopiques de ceux-ci.

Donner une description qualitative de la liaison métallique (modèle de la mer d'électrons libres).

On rappelle que l'entité pertinente pour décrire un corps simple métallique est l'atome, et que l'espèce chimique est notée par le symbole correspondant : Fe pour l'espèce chimique « fer ».

- Pour les non-métaux et les métalloïdes, la liaison n'est pas métallique. La plupart du temps, la liaison la plus forte qui unit les atomes est la **liaison covalente**, qui est une des trois liaisons chimiques fortes (voir chapitre 2).

Notons qu'il peut aussi intervenir des liaisons plus faibles, comme les forces de Van der Waals.

Dans certains cas, les atomes sont associés dans des molécules « infinies » comme le diamant ; l'entité pertinente est alors l'atome et l'espèce chimique est notée par le symbole correspondant : C pour l'espèce chimique « diamant » par exemple, Si pour le silicium...

Dans d'autres cas, les atomes sont associés dans des petites molécules individualisées ; l'entité pertinente est alors cette molécule et l'espèce chimique est notée par le symbole de cette molécule : O_2 , N_2 ...

Les gaz nobles sont un cas particulier : ils restent sous forme atomique. La seule force qui attire ces atomes est la force très faible de Van der Waals. L'espèce chimique est donc naturellement notée par le symbole de l'atome : He, Ne, Ar...

- Note : la troisième liaison chimique forte est la **liaison ionique**. Elle ne peut pas intervenir dans les corps simples. On la rencontre dans les corps composés, voir paragraphe suivant.

IV.4 Conclusion : modélisation de la liaison chimique

Dans un corps **composé** A_nB_m , les liaisons chimiques sont souvent *intermédiaires* entre les trois types de liaisons chimiques fortes rappelées au paragraphe précédent (métallique, covalente, ionique).

Dans la plupart des cas, on peut choisir **l'une de ces trois liaisons pour modéliser au mieux la liaison chimique.**

- si A et B sont d'électronégativité faible et voisine, la liaison est

- si A et B sont d'électronégativité forte et voisine, la liaison est

- si A et B sont d'électronégativité très différente, la liaison est