

On s'intéresse exclusivement aux électrons et à leur liaison avec le noyau.

Niveau d'énergie d'un électron dans un atome

Un électron lié à un noyau de charge Z a forcément une énergie négative. Cette énergie est donnée par la relation $E_{n,L} = -13.6 \frac{Z^*_{(n,L)}{}^2}{n^2}$. E est en eV.

n est le nombre quantique principal (entier non nul : 1, 2, ...)

L est le nombre quantique secondaire (entier strictement inférieur à n : 0, 1, 2, ...)

$Z^*_{(n,L)}$ est le numéro atomique effectif pour l'électron décrit par n et L . Il est inférieur ou égal à Z de l'atome.

Nombres quantiques décrivant un électron

Un électron est décrit par n , L , m_L , s et m_s . m_L est le nombre quantique magnétique. Il décrit le segment $-L$ à $+L$ par saut de 1. ($L=2$: $m_L = -2, -1, 0, 1, 2$).

s est le nombre quantique de spin. Il vaut forcément $1/2$.

m_s est le nombre quantique secondaire de spin. Il vaut $+$ ou $-1/2$.

Notation des binômes n,L

n est représenté par sa valeur, L est noté par une lettre. s pour 0, p pour 1, d pour 2, f pour 3.

Ainsi le binôme $n=2, L=1$ est noté $2p$.

On appelle niveau d'énergie ou sous-couche un binôme n,L . On parle par exemple du niveau ou de la sous-couche $3d$.

On réserve le terme couche à l'ensemble des niveaux classés par énergie croissante, commençant à ns et jusqu'au niveau $(n+1)s$ **non inclus**.

Classement des niveaux d'énergie

La règle de Klechkovski dit que E va en croissant en fonction de $(n+L)$ et que pour deux valeurs identiques de $n+L$, l'énergie va en croissant avec n .

Conséquence : l'ordre des niveaux est :

1s (première couche)

2s, 2p (deuxième couche)

3s, 3p (troisième couche)

4s, 3d, 4p (quatrième couche)

5s, 4d, 5p (cinquième couche)....

Occupation des niveaux d'énergie

Le **principe de Pauli** dit que dans un même système (par exemple un atome) deux particules de matière de même nature (par exemple deux électrons) ne peuvent être dans le même état quantique, c'est à dire décrits par le même jeu de nb quantiques.

Conséquence : un niveau n,L donné peut recevoir un maximum de $(2L+1) * 2$ électrons. En effet, une fois L fixé, il y a $2L+1$ valeurs possibles pour m_L et pour chacune, m_s peut prendre la valeur $+$ ou $-1/2$.

$m_s = -1/2$ est représenté par une flèche orienté vers le bas : \downarrow et $+1/2$ orienté vers le haut : \uparrow

Une paire d'électrons (c'est à dire deux électrons décrits par les mêmes n, L et m_L) est représentée par deux flèches tête bêche.

Configuration électronique d'un atome

C'est l'énumération des sous-couches remplies avec en exposant à droite le nombre d'électrons.

L'état fondamental d'un atome est obtenu en remplissant à saturation les sous-couches par énergie croissante.

Exemple : Pour l'azote ($N, Z=7$) on obtient $1s^2 2s^2 2p^3$. Pour l'oxygène ($O, Z=8$) : $1s^2 2s^2 2p^4$

Règle de Hund

Si la dernière sous-couche n'est pas entièrement remplie, la configuration électronique la plus stable d'un atome est celle qui présente le maximum d'électrons célibataires.

Exemple : pour N la sous-couche $2p$ en présente 3, pour O : 2 (une paire et deux célibataires)

Electrons de cœur et de valence

Dans un atome, les électrons qui appartiennent aux sous-couches d'énergie supérieure ou égale à celle du dernier niveau s rempli sont les électrons de valence (ou **périphérique**) de l'atome. Les autres sont ceux de cœur. Les électrons de valence sont peu liés à l'atome et conditionnent sa réactivité, donc sa chimie. Les électrons de cœur sont très liés et influencent très peu la chimie de l'atome.

Stabilité particulière de certaines configurations électroniques

Une sous-couche remplie ou à demi remplie dans la couche de valence est un gage de stabilité. Plus particulièrement pour une sous-couche d. Ainsi le chrome est en $4s^1 3d^5$ au lieu de $4s^2 3d^4$ et le cuivre en $4s^1 3d^{10}$ au lieu de $4s^2 3d^9$.

Pour les cations, on constate que si l'atome dispose d'une sous-couche d en cours de remplissage (c'est à dire que la sous-couche suivante est encore vide), les électrons du cation quittent le niveau s précédent avant le niveau d.

Ainsi le Fer est en $4s^2 3d^6$ et Fe^{2+} en $4s^0 3d^6$. Zn est en $4s^2 3d^{10}$ et Zn^{2+} en $4s^0 3d^{10}$

Famille

Ensemble d'éléments qui présentent des propriétés similaires ou en évolution progressive d'un membre à l'autre.

Exemple : les alcalins (Li, Na, K, Cs, Rb) ; les halogènes (F, Cl, Br, I) , les chalcogènes (O, S, Se, Te, Po), les gaz rares (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) . Les éléments de la même famille possèdent, à une valeur de n près, le même remplissage des niveaux de valence.

Les alcalins sont tous en ns^1 , les halogènes en np^5 , les gaz rares en np^6

Élément de transition

C'est un élément qui pour lui ou un de ces ions possède une sous-couche d ou f incomplète. Exemple : Fe, Mn , Cu. Le zinc n'est pas un élément de transition car l'ion Zn^{2+} est en $4s^0 3d^{10}$.

Les éléments de transition sont situés au centre du tableau de Mendeleiev.

Classification périodique des éléments (tableau de Mendeleiev)

C'est une présentation en tableau des éléments. Chaque colonne correspond à une famille d'éléments.

On change de ligne quand on utilise un nouveau niveau ns. La première ligne contient donc 2 éléments, la seconde et la troisième 8, La quatrième et la cinquième 18 et les deux suivantes 32.

Energie de première ionisation E_{i1}

C'est l'énergie consommée lors de l'arrachement d'un électron à un atome isolé au repos. L'électron libéré est d'énergie nulle. E_{i1} varie de 4 à 24 eV.

Une valeur faible de E_{i1} traduit une tendance à former facilement un cation, c'est le cas des métaux.

En général (Cf graphe) E_{i1} va en croissant le long d'une ligne du tableau périodique et diminue considérablement au changement de ligne. Cela indique une stabilité particulière pour un système ne possédant que des couches pleines (**règle de l'octet...**)

Attachement électronique

C'est l'énergie libérée lors de la capture d'un électron au repos par un atome isolé au repos. Normalement cette grandeur doit être positive (l'électron étant lié à l'atome). Mais la capture d'un électron peut déstabiliser tous les autres et rendre cette opération endothermique, l'énergie est alors négative. Le graphe donné montre que le signe de AE fluctue souvent d'un élément à un autre.

Note : il n'y a pas de symétrie entre E_i et AE car dans l'atome les charges positives contenues dans le noyau sont rassemblées en une seule entité alors que les charges négatives sont individualisées. Ceci crée une dissymétrie entre charges plus et moins et donc entre arrachement et capture d'électrons.

Electronégativité

C'est un nombre pur (noté x) affecté à un élément qui traduit sa tendance à accaparer les électrons de liaison dans une liaison entre deux atomes différents. Il existe plusieurs échelles (Mulliken, Pauling...) Elles donnent toutes des classements similaires. L'échelle de Pauling est la plus utilisée en chimie organique. Dans la liaison OH par exemple, comme O est plus électronégatif que H, la liaison est polarisée en $+\delta$ sur H et $-\delta$ sur O. δ représente une fraction de la charge élémentaire. La liaison OH engendre donc localement un dipôle électrostatique.

Dans le tableau périodique, mis à part les gaz rares, x va en croissant du bas à gche en haut à dte. Le Cæsium (Cs) est donc l'élément le moins électronégatif et le fluor le plus.

Quelques valeurs en échelle de Pauling : Cs : 0.79 ; Na : 0.93 ; Ca : 1.00 ; Mg : 1.31; Fe : 1.83 ; H : 2.2 ; C : 2.55 ; I : 2.66 ; Br : 2.96 ; N : 3.04 ; Cl : 3.16 ; O : 3.44 ; F : 3.98 .

Métal

Il existe plusieurs définitions pour cette notion. Un métal peut être défini comme :

- ◆ un élément moins électronégatif que H,
- ◆ un élément conducteur électrique à l'état non oxydé,
- ◆ un élément qui donne des oxydes basiques ou amphotères.....

La séparation communément admise entre métaux et non-métaux (alias métalloïdes) passe par Al, Ge (germanium) , Sb (antimoine) Po (Polonium). Il y a donc dans la nature qu'une vingtaine de métalloïdes !

Les Métalloïdes occupent la partie dte du tableau périodique : famille des gaz rares et des halogènes, celle des chalcogène sauf le dernier (Po) , celle de l'azote sauf Sb et Bi, les deux premiers éléments de celle du carbone (C et Si) et le Bore.