

Rappels d'atomistique

I_ Tableau périodique des éléments

A. Histoire

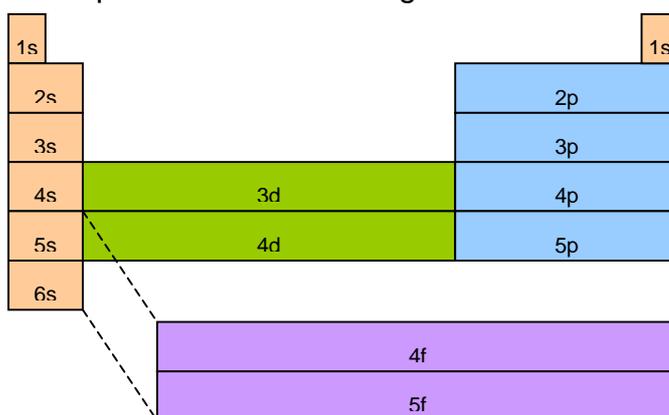
On pensait au début que la matière était constituée de quatre éléments (l'eau, le feu, l'air et la terre), mais cela n'avait pas beaucoup de valeur scientifique ...

Depuis **Lavoisier** en 1750, on sait que différents éléments composent la matière, et qu'ils peuvent être séparés ou se combiner entre eux. On découvre ainsi plusieurs éléments purs tels que l'oxygène ("gaz vital") ou l'azote ("gaz nitreux").

B. Classification actuelle

On eut ensuite l'idée de les classer selon leurs propriétés. On utilise aujourd'hui la classification de **Mendeleïev**, qui range les atomes selon leur **nombre de charge Z**.

Enfin, grâce à nos connaissances récentes sur les atomes, on arrange le tableau en fonction des orbitales occupées par les électrons au sein de ces atomes. Ainsi le tableau périodique des éléments s'organise de cette manière :



II_ Structure électronique

A. Atomes et orbitales

L'atome est formé d'un noyau entouré par des électrons, d'après **Bohr**. Ils sont attirés par la **charge effective** et s'organisent dans des **orbitales atomiques** d'énergie quantifiée.

D'après **De Broglie**, les particules ont toutes des propriétés ondulatoire et particulaire. Il est donc impossible de déterminer la position d'une particule, mais plutôt la probabilité de la trouver dans une portion de l'espace.

On détermine alors des **fonctions d'onde** $\Psi_{n,l,m}$ qui donnent la portion de l'espace où on a 98 % de chances de trouver un électron.

En résolvant l'**équation de Schrödinger**, on détermine la forme, la position et la taille de l'orbitale atomique contenant cet électron.

B. Nombres quantiques

L'orbitale atomique peut alors être décrite selon des nombres quantiques :

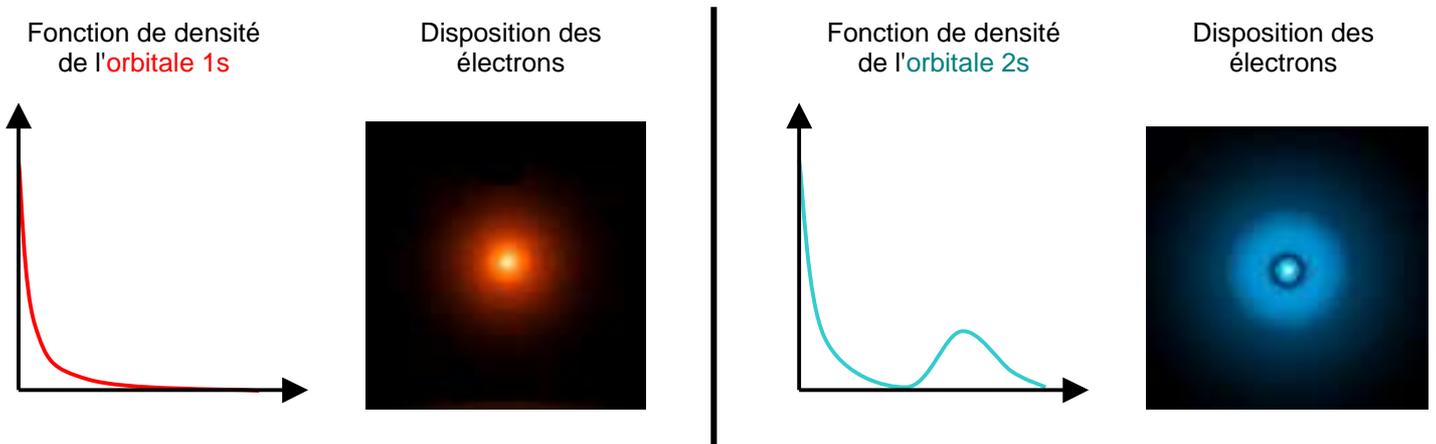
- le nombre **principal n**, qui donne le niveau d'énergie de l'orbitale
- le nombre du **moment angulaire l**, qui donne la forme de l'orbitale
- le nombre **magnétique m**, qui donne l'orientation de l'orbitale

Il existe aussi un quatrième nombre quantique, que l'on appelle le nombre de **spin m_s** , et qui nous donne le sens du spin d'un électron.

1) Niveau d'énergie de l'orbitale

Plus le nombre quantique principal est élevé, plus l'orbitale a un niveau d'énergie élevée. Grâce à la **fonction de densité Ψ^2** , on peut connaître la probabilité d'avoir un électron dans une portion de l'espace.

Ex :



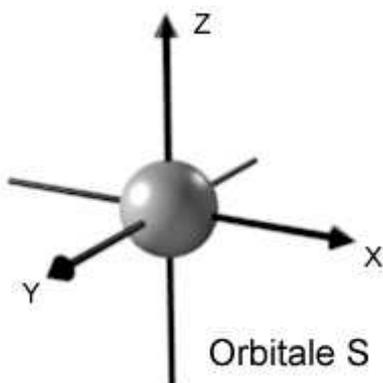
On observe que les orbitales sont de plus en plus diffuses et éloignées du noyau à mesure que n augmente.

2) Forme de l'orbitale

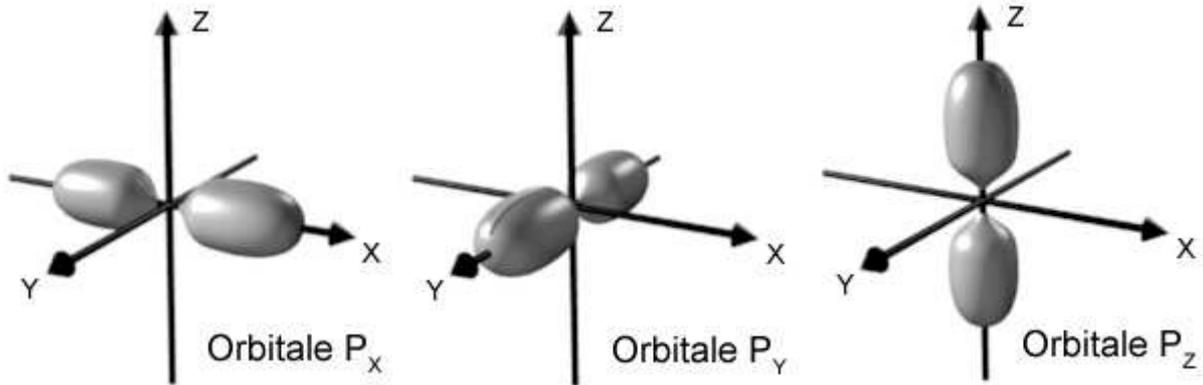
Les orbitales adoptent différentes formes dans l'espace. C'est le nombre quantique du moment angulaire qui indique à quel "famille de formes" l'orbitale appartient. Le nombre quantique magnétique indique l'orientation de l'orbitale.

Ainsi la forme des orbitales :

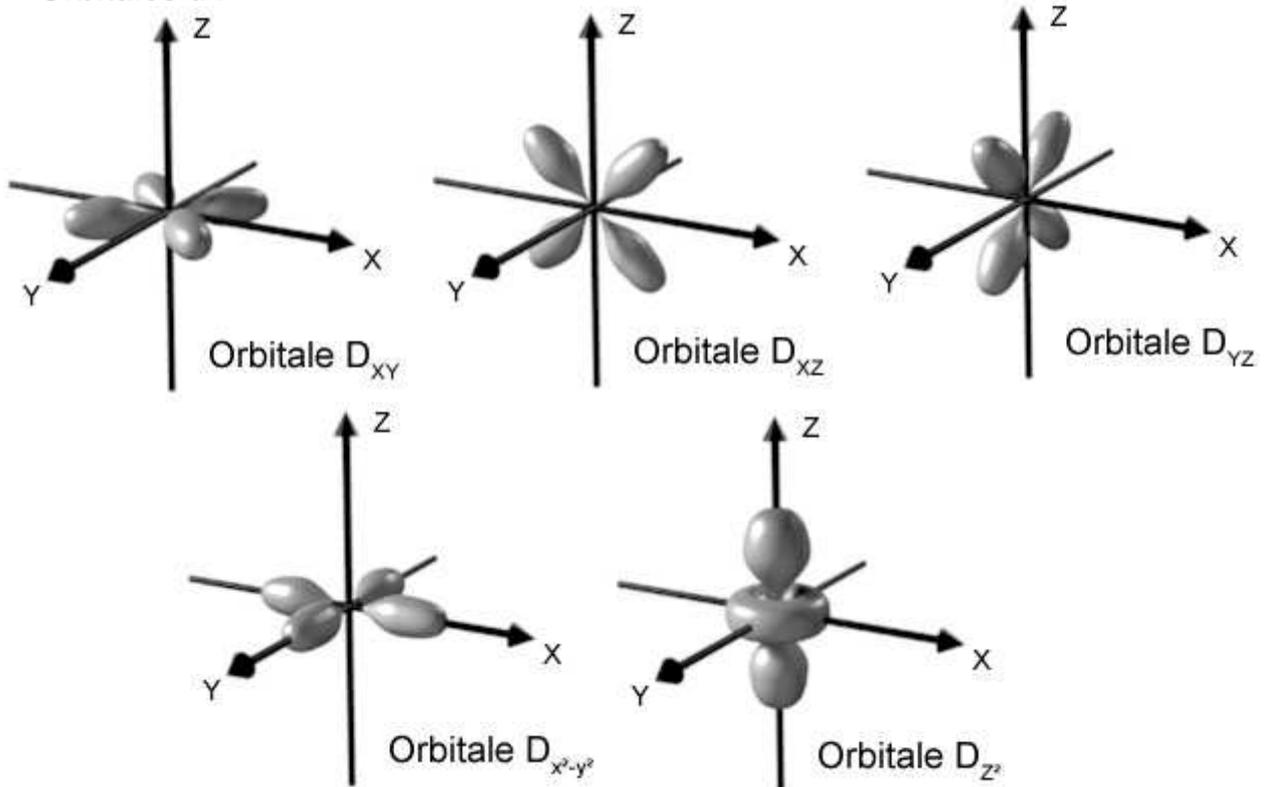
► **Orbitale s :**



► Orbitales p :



► Orbitales d :



C. Règles de remplissage des orbitales

Les électrons essaient d'occuper les orbitales de plus faible énergie. Une orbitale peut contenir deux électrons. C'est le **principe d'Aufbau**. L'ordre de remplissage des orbitales est donnée par le **diagramme de Klechkowsky**.

Quand plusieurs orbitales ont la même énergie, les occupent le maximum d'orbitales avant de remplir chacune d'elles. C'est la **règle de Hund**. Lorsque deux électrons sont dans une orbitale, il doivent avoir un spin opposé, d'après le **principe d'exclusion de Pauli**.

~~1s~~
~~2s 2p~~
~~3s 3p 3d~~
~~4s 4p 4d 4f~~
~~5s 5p 5d 5f ...~~
~~6s 6p 6d~~

Diagramme de Klechkowski

D. Écrantage des électrons

Les électrons sont attirés par la charge positive du noyau, mais la charge effectivement ressentie est plus faible. En fonction de la distance et des **effets d'écran**, la charge effective est différente.

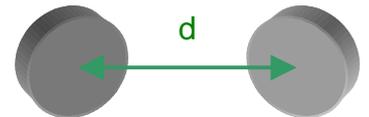
Les électrons des couches inférieures masquent la charge du noyau, on appelle cela l'**écranage**. Le **modèle de Slater** permet de faire une approximation très précise des effet d'écran que ressent un électron d'une certaine couche.

III Les différents rayons

A. Rayon covalent

C'est la moitié de la distance entre les centres de deux atomes liés de manière covalente.

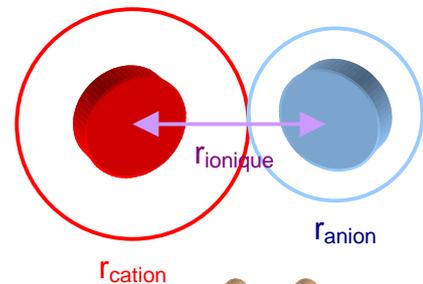
$$r_{\text{covalent}} = d / 2$$



B. Rayon ionique

La longueur de la liaison ionique vaut le rayon ionique du cation plus le rayon ionique de l'anion. Cette valeur est difficile à déterminer précisément.

$$r_{\text{ionique}} = r_{\text{cation}} + r_{\text{anion}}$$



C. Rayon métallique

Le calcul du rayon métallique dépend de l'arrangement des atomes au sein du métal.



D. Rayon atomique

Le rayon d'un atome dépend de son nombre de charge et des électrons sur la dernière orbitale occupée d'un atome non lié.

