

Les atomes polyélectroniques

C1 – Chapitre 2

I. Le modèle quantique des atomes polyélectroniques

1. Orbitales atomiques

On décrit chaque atome électron par une fonction d'onde indépendante des autres électrons nommée orbitale atomique. $\Psi_{atome} = \prod_{i=1}^Z \Psi_i$

On a $[Z^* = Z - \sigma]$, Z^* charge nucléaire effective (attraction des électrons) et σ constante d'écran (dépend du nombre d'électrons). Pour deux atomes qui se suivent, Z augmente de 1 et σ augmente de $0 < a < 1$.

2. Energie des orbitales atomiques

- Dépend de n et l
- Pour n fixé, $E \nearrow$ pour $l \nearrow$ ($2s < 2p$) Pour l fixé, $E \nearrow$ pour $n \nearrow$ ($1s < 2s$)

II. Configuration électronique

1. Définition

La configuration électronique d'un atome est la répartition des électrons sur les différentes orbitales atomiques.

2. Règles de construction

a. Principe d'exclusion de Pauli

Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir les mêmes (n, l, m_l, m_s) .

b. Règle de remplissage de Klechkowski

L'occupation des niveaux d'énergie se fait par $(n + l)$ croissants, et pour $(n + l)$ fixé, par n croissant.

On obtient $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p \rightarrow 4s \rightarrow \dots$

c. Règle de Hund

Lorsque plusieurs électrons se placent sur un même niveau d'énergie dégénérée, la configuration électronique la plus stable est obtenue quand le nombre d'électrons de même spin est maximum. Les électrons se placent par m_l décroissant (par convention).

		l				
		0	1	2	3	4
n	1	1s				
	2	2s	2p			
	3	3s	3p	3d		
	4	4s	4p	4d	4f	
	5	5s	5p	5d	5f	5g
	6	6s	6p	6d	6f	6g
	7	7s	7p	7d	7f	7g
	8	8s	8p	8d	8f	8g

d. Représentation symbolique des O.A.

<u>Orbitale atomique :</u> —	<u>Electron :</u> ↑ ou ↓	<u>Règle de Pauli :</u> pas ↑↑ mais ↑↓	<u>Règle de Hund :</u> Pas ↑↓↑↑ — ou ↑↓ ↓ ↑ mais ↑↓ ↑ ↑
---------------------------------	-----------------------------	--	--

Exceptions : Cr ($[Ar] 4s^1 3d^5$) et Cu ($[Ar] 4s^1 3d^{10}$)

3. Electrons de valence

n_{val} est le plus grand nombre quantique utilisé par les électrons d'un atome.
 N est le nombre d'électrons avec $n = n_{val}$
 N_v est le nombre d'électrons de valence, càd $N +$ électrons sur les sous-couches incomplètes.

4. Atomes particuliers

Propriété	Diamagnétique	Paramagnétique	Métal	Métal de transition
Condition	$\sum m_s = 0$	$\sum m_s \neq 0$	$N \leq n_{val}$	Termine par nd^{1-9} ou nf^{1-13}

Les atomes polyélectroniques

C1 – Chapitre 2

5. Anions et cations

	Anion (X^{-q})	Cation (X^{+q})
q_{\max}	Saturation de la sous-couche de valence	N_v
Répartition	Comme pour les atomes	On retire les e_{val}^- par $n \searrow$ et pour n fixé, par $l \searrow$.
Atome	Non-métal	Métal

- Stabilité : Les ions les plus stables sont ceux qui se terminent en $ns^2 np^6 (nd^{10})$.

III. Le tableau périodique

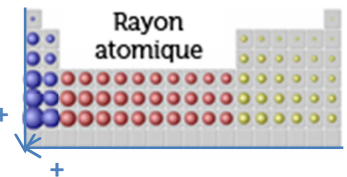
- Ligne (période) = n_{val}
- Colonne \rightarrow configuration électronique depuis le dernier gaz rare

$$n_{\text{val}}s \rightarrow \underbrace{(n_{\text{val}} - 2)f}_{n_{\text{val}} \geq 6} \rightarrow \underbrace{(n_{\text{val}} - 1)d}_{n_{\text{val}} \geq 4} \rightarrow n_{\text{val}}p$$

IV. Propriétés des atomes

1. Rayon atomique

Rayon de Van der Waals	Rayon de covalence	Rayon métallique
Rayon dans le gaz monoatomique	Rayon des atomes identiques liés par une liaison de covalence	Rayon dans un réseau métallique



$$n_{\text{val}} \nearrow \Rightarrow r \nearrow \quad \text{et} \quad Z^* \nearrow \Rightarrow r \searrow$$

2. Rayon ionique

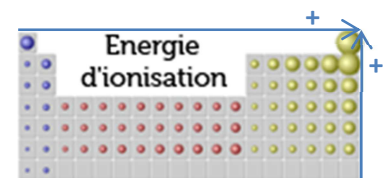
$$r_{X^{+q}} < r_X < r_{X^{-q}} \quad (\text{plus il y a d'électron, plus le rayon augmente})$$

$$r_{W^{2+}} < r_{X^+} < r_{Y^-} < r_{Z^{2-}} \quad W^{2+}, X^+, Y^-, Z^{2-} \text{ ont même config.}$$

3. Energie d'ionisation

Energie minimale qu'il faut fournir à un atome dans son état fondamental pour lui arracher un électron de plus haute énergie.

$$n_{\text{val}} \nearrow \Rightarrow EI \searrow \quad \text{et} \quad Z^* \nearrow \Rightarrow EI \nearrow$$



4. Energie de fixation électronique

Energie reçue par l'atome lors de la fixation d'un électron

5. Electronégativité χ

$\chi(X)$ représente l'aptitude d'un atome à attirer des électrons de liaison lorsqu'il est dans une liaison covalente.

$$n_{\text{val}} \nearrow \Rightarrow \chi \searrow \quad \text{et} \quad Z^* \nearrow \Rightarrow \chi \nearrow$$

