

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE

SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES SIDI BEL ABBES

FACULTE DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT DE CHIMIE

« STRUCTURE DE LA MATIERE »

- Cours – 1^{ère} année SM

Présenté par

Dr. Chérifa Hakima MEMOU

2017-2018

SOMMAIRE

AVANT PROPOS.....	03
INTRODUCTION GENERALE.....	04
CHAPITRE I: CONSTITUTION DE L'ATOME.....	05
I.1 INTRODUCTION.....	05
I.1.1 LES CONSTITUANTS DE 'ATOME.....	05
I.1.2 REPRESENTATION SYMBOLIQUE DE L'ATOME	07
I.2 ISOTOPIE	08
I.3 ECHELLES DES MASSES ATOMIQUES.....	10
CHAPITRE II. : LA RADIOACTIVITE.....	12
II.1 INTRODUCTION	12
II.2 EMISSION DES PARTICULES	13
II.3 LOIS DE DECROISSANCE RADIOACTIVE.....	15
II.3.1 LA DECROISSANCE RADIOACTIVE	15
II.3.2 LA PERIODE RADIOACTIVE.....	15
II.3.3 L'ACTIVITE	16
II.3.4 LA RELATION MASSE ACTIVITE	16
CHAPITRE III: QUANTIFICATION DE L'ENERGIE.....	18
III.1 MODELES CLASSIQUES DE L'ATOME.....	18
III.1.1 LE MODELE DE RUTHERFORD.....	18
III.1.2 LE MODELE DE BOHR.....	18
CHAPITRE IV MODELE QUANTIQUE DE L'ATOME.....	26
IV.1 NOTION DE MECANIQUE QUANTIQUE.....	26
IV.2 EQUATION DE SCHRÖDINGER POUR L'ATOME D'HYDROGENE.....	26
IV.3.1 LES NOMBRES QUANTIQUES.....	27
IV.3.2 REPRESENTATION DES ORBITALES.....	29
IV. 3 STRUCTURE ÉLECTRONIQUE DES ATOMES POLY-ÉLECTRONIQUES.....	30
CHAPITRE V. CLASSIFICATION PERIODIQUE ET PROPRIETES DES ELEMENTS.....	32
CHAPITRE VI LA LIAISON CHIMIQUE.....	34
VI.1 LA LIAISON ATOMIQUE COVALENTE.....	34
V.I.2 DESCRIPTION DES ORBITALES MOLECULAIRES	37
VI.3 REPRESENTATION DES DIAGRAMMES ENERGETIQUES.....	38

Avant propos

Ce polycopié intitulé « structure de la matière » est adressé aux étudiants de première année de licence en Sciences de la Matière (SM).

Il traite la structure de la matière (description de l'atome : constituants, stabilité, propriétés, formation de liaison et molécule.....etc), il est renforcé avec des exemples d'application afin d'aider l'étudiant à mieux assimiler les nouvelles notions pour mener à bien son examen.

Chérifa Hakima MEMOU

cherifa_h1996@yahoo.fr

Maître de Conférences (B) à l'UDL

Introduction générale

La matière est tout ce qui compose un corps, tout ce qui a une masse et un volume, elle est de nature discontinue (qui ne se répète pas d'une façon continue).

Elle est formée à partir de grains élémentaires : atomes ou groupes d'atomes (molécules) (l'atome est la plus petite particule possible d'un élément selon John Dalton 1807). 105 atomes ou éléments ont été découverts et chacun d'eux est désigné par son nom et son symbole.

Exemple : le carbone C ; l'azote N ; l'hydrogène H ; l'oxygène O

Les atomes différents par leurs structures et leurs masses, ils sont eux-mêmes fragmentés en petites particules : les électrons, les protons et les neutrons, ces derniers sont les mêmes quel que soit la substance ou la matière considérée. En effet l'atome n'existe pas souvent à l'état libre, il s'associe avec d'autres éléments pour former des molécules.

On a des molécules diatomiques (H_2 , O_2 , $NaCl$etc) et des molécules polyatomiques (H_2O , H_2SO_4 ,.....etc).

La matière peut exister sous trois états physiques différents :

L'état solide : possède un volume et une forme définis.

L'état liquide : possède un volume définis mais aucune forme précise, il prend la forme de son contenant

L'état gazeux : n'a ni volume ni forme définis, il prend le volume et la forme de son contenant.

CHAPITRE I : CONSTITUTION DE L'ATOME

I.1 INTRODUCTION

L'atome constitue la matière, le plus souvent sous forme de molécules. Mais l'atome lui-même, de quoi est-il constitué ?

I.1.1 LES CONSTITUANTS DE L'ATOME

Étymologiquement¹, le mot atome vient du grec *atomos* qui signifie « indivisible ». Au début du 20^{ème} siècle, plusieurs expériences mettent en évidence l'existence de différentes particules constituant l'atome, réparties dans un noyau central en périphérie duquel se situe un nuage électronique.

Donc : Un Atome est une entité constituée d'un noyau et d'électrons en mouvement dans le vide autour du noyau.

a. Le Noyau atomique (Nucléides)

❖ Description

Le **noyau d'un atome** est constitué de particules appelées NUCLEONS. Il existe deux sortes de nucléons :

- ★ **Les neutrons** (Qui ne sont pas chargés).
- ★ **Les protons** (Chargés positivement).

❖ Caractéristiques des nucléons :

- Les protons ou les neutrons, ont quasiment la même **MASSE**:
- La charge électrique de toute particule, notée **q**, a pour unité le **COULOMB**, de symbole **Cb**

$$m_p \approx m_n = 1,67.10^{-27}$$

$$q_n = 0 \text{ Cb}$$

¹Science qui étudie l'origine d'un mot

→ Le neutron est électriquement Neutre, sa charge est donc nulle :

$$q_p = + 1,6.10^{-19}$$

→Le proton possède une charge positive :

Particule	Charge En Coulomb : Cb	Masse en Kg
Proton	$q_p = + 1,6.10^{-19} \text{ C} = + e$	$m_p = 1,673.10^{-27} \text{ kg}$
Neutron	$q_n = 0 \text{ C}$	$m_n = 1,675.10^{-27} \text{ kg}$

b. Les Électrons

❖ Description

Autour du noyau d'un atome, des **ELECTRONS**, chargés négativement, gravitent et constituent le « nuage électronique » de l'atome.

❖ Caractéristiques des électrons

- Les électrons ont une **masse très faible**. La masse d'un électron est environ **2000 fois** plus faible que la masse d'un proton ou d'un neutron.
- La **charge électrique** de l'électron est **négative** et de **même valeur absolue** que celle du

Proton. Donc : $q_e = - 1,6.10^{-19} \text{ Cb}$

PARTICULE	CHARGE EN COULOMB C	MASSE EN : Kg
Électron	$q_e = - 1,6.10^{-19} \text{ C} = - e$	$m_e = 9,1.10^{-31} \text{ kg}$

Conclusion : dans un atome, il y a **autant** d'**ELECTRONS** que de **PROTONS** donc un **atome** est **électriquement neutre**.

Nombre de **p+** = Nombre d'**e** Donc : $\sum q^+ = \sum q^-$

I.1.2 LA REPRESENTATION SYMBOLIQUE DE L'ATOME

Chaque élément chimique ² est représenté par **un symbole X**, En général, la première lettre du nom écrite en majuscule. On rajoute parfois une deuxième lettre écrite en minuscule pour éviter les confusions.

Exemples

- Une lettre : N, O, H
- Deux Lettres : Cl, He, Na

Remarque : On trouve les symboles de tous les atomes dans le tableau périodique.

Le symbole du noyau s'obtient à partir du symbole de l'atome correspondant.

Exemple :

Symbole de l'atome d'hydrogène : **H** ; Symbole du noyau : ${}^1_1\text{H}$

Nombre de protons : **1** Nombre de neutrons : **1** Nombre d'électrons : **1**

La Formule générale du noyau d'un atome est donnée par : $\frac{A}{Z}\text{X}$

X : Le symbole de l'élément chimique considéré.

A : (représenté en haut à gauche) : désigne le **nombre de nucléons** et est appelé le **nombre de masse**.

Z : (représenté en bas gauche) : est appelé le **numéro atomique** ou **nombre de charge** et représente le nombre de protons dans le noyau de l'atome qui est égal au nombre d'électrons.

$$A - Z = N$$

La différence conduit au nombre de **neutrons** dans le noyau de l'atome.

Conclusion :

UN ATOME comprend : **Z protons**, **Z électrons** et **A – Z neutrons**.
Les deux grandeurs **A** et **Z** permettent de caractériser un noyau ou un atome.

²On donne le nom d'élément chimique à l'ensemble des particules, qu'il s'agisse d'atomes ou d'ions, caractérisées par le même nombre Z de protons présents dans leur noyau.

Remarque : Les nucléons sont les particules du noyaux, cela implique que le nombre de nucléons présents dans le noyau est la somme des protons et des neutrons.

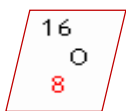
$$A = Z + N = \sum p^+ + \sum n$$

Exemple

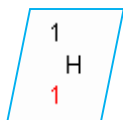
L'atome de **carbone** est représenté par : ${}^{12}_6\text{C}$

- **Z = 6** l'atome de carbone comporte **6 protons** dans le noyau et **6 électrons** autour du noyau.
- **A = 12** ceci signifie que le noyau de l'atome de carbone comporte **12 nucléons** c'est-à-dire **6 protons** et **6 neutrons**.

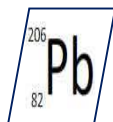
Autres exemples



$$A = 16 \quad Z=8 \quad N=16-8=8 \quad \text{Donc } Z=N$$



$$A=1 \quad Z=1 \quad N=0 \quad \text{pas de neutrons}$$



$$A=206 \quad Z=82 \quad N=124 \quad \text{Donc } Z \neq N \quad (\text{nombre de neutrons } N > \text{nombre d'électron } Z)$$

I.2 ISOTOPIE

I.2.1 Définition

LES ISOTOPES sont des atomes d'un même élément chimique possédant le même numéro atomique (*nombre de protons ou d'électrons*) mais de nombre de masse différente (*nombre de neutrons différent*).

■ En d'autres termes, si on prend deux nucléides dont les nombres de protons sont **Z** et **Z'**, et les nombres de neutrons **N** et **N'**, ces nucléides sont dits isotopes si **Z=Z'** et **N≠N'**.

■ Le plus abondant (majoritaire) c'est celui dont **Z=N**

■ Si Z est différent de N (**Z≠N**) se sont les isotopes (minoritaire)

Exemple :1

L'oxygène de l'air : $^{16}_8\text{O}$ + des traces (petite quantité) de $^{17}_8\text{O}$ et $^{18}_8\text{O}$

■ En plus grande quantité : $^{16}_8\text{O}$: 99.76 %

■ En plus petite quantité : $^{17}_8\text{O}$ et $^{18}_8\text{O}$: 0.04% et 0.2% respectivement

$^{16}_8\text{O}$	$^{17}_8\text{O}$	$^{18}_8\text{O}$
A=16	A=17	A=18
Z=8	Z=8	Z=8
N=8	N=9	N=10
Donc Z=N	Donc Z≠N	Donc Z≠N

On dira que $^{17}_8\text{O}$ et $^{18}_8\text{O}$ sont des isotopes de $^{16}_8\text{O}$.

Exemple 2

Le ^2_1H (Deuterium) ^2_1D et le ^3_1H (Tritium) ^3_1T sont des isotopes de l'hydrogène ^1_1H

La plupart des éléments se présentent naturellement sous forme d'un mélange d'isotopes. Les différents isotopes forment **la composition isotopique**.

La composition isotopique est responsable des masses atomiques non entière.

I.2.2 : LA MASSE ATOMIQUE MOYENNE

LA **MASSE ATOMIQUE MOYENNE** est la masse atomique apparaissant sur le tableau périodique et qui tient compte des isotopes et de leur abondance³.

Autrement dit **la masse atomique** est la moyenne des nombres de masse d'après l'abondance relative des isotopes d'un élément donné.

Donc dans le cas général d'un atome X qui présente n isotope, la masse atomique moyenne s'exprime mathématiquement comme suit :

$$M_X = (\%_{A_1X} \cdot M_{A_1X}) + (\%_{A_2X} \cdot M_{A_2X}) + \dots + (\%_{A_nX} \cdot M_{A_nX})$$

Où :

- M_X :masse atomique de l'atome X.
- $M_{A_1X}, M_{A_2X}, M_{A_nX}$:masses atomiques des isotopes.
- $\%_{A_1X}, \%_{A_2X}, \%_{A_nX}$:abondances naturelles (pourcentages des isotopes, tels qu'ils apparaissent dans la nature)

Note : la somme des abondances naturelles = 100%

Exemple

Isotopes	Nombre de masse A	Masse exacte	Abondance (En %)
³⁵ Cl	35	34.97	75.8%
³⁷ Cl	37	36.97	24.2%

Masse atomique moyenne du chlore (MM) :

$$M_X = (0,758 \times 34,97 \text{ uma}) + (0,242 \times 36,97 \text{ uma}) = 35,454 \text{ uma}$$

I.3 ECHELLES DES MASSES ATOMIQUES

définition :

³ **Abondance isotopique** =La quantité relative (%) de chaque isotope présent dans un élément.

Les chimistes déterminent généralement les proportions relatives des isotopes à l'aide d'un appareil de mesure appelé spectromètre de masse.

uma : L'unité de masse atomique unifiée (symbole **u** ou **uma**) est une unité de mesure standard, utilisée pour mesurer la masse des atomes et des molécules.

L'unité de masse atomique est égale au 1/12 de la masse de l'isotope ^{12}C

1 uma = 1/12 de la masse d'un atome de ^{12}C



Le ^{12}C c'est l'élément le plus stable point de vue structure

Dans 12 g de carbone, il y'a N_A atomes de carbone.

$$1 \text{ mole} = N_A \text{ atomes}$$

$$N_A: \text{nombre d'Avogadro} = 6.023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Ou encore

Une mole d'atomes de Carbone pèse **12g**. Comme la masse d'un atome de carbone vaut **12 uma**.

$$1 \text{ mol} \xrightarrow{\text{sa masse}} 12 \text{ g} \quad \& \quad 1 \text{ atome} \xrightarrow{\text{sa masse}} 12 \text{ uma}$$

Donc

$$12 \text{ g} = N_A 12 \text{ uma} \Rightarrow 1 \text{ uma} = \frac{1}{N_A} \text{ gr}$$

$$1 \text{ uma} = 1.66 \times 10^{-24} \text{ gr}$$

CHAPITRE II. LA RADIOACTIVITE

II.1. INTRODUCTION

Dans la nature il existe des noyaux stables et des noyaux instables (**radioactifs**). La radioactivité est la transformation de noyaux atomiques au cours de laquelle un rayonnement est émis.

Certaines transformations sont possibles :

- a) Radioactivité naturelle.
- b) Radioactivité artificielle.

Ces réactions peuvent avoir lieu si le nombre de neutrons est très grand par rapport au nombre de protons.

Nombre de neutrons \gg **Nombre de protons**

Où le rapport ($\frac{\text{Nombre de neutrons}}{\text{Nombre de protons}}$) est au moins égal à 1.5.

- Dans ce type de réaction on peut avoir :
 - a. *Un changement dans le **nombre de protons**.*
 - b. *Un changement dans le **nombre de neutrons**.*
 - c. *Un changement dans les **deux à la fois**.*

Ces différentes réactions (réactions de changement) sont toujours accompagnées d'émission de rayonnements ou d'émission de nouvelles particules.

- Les **noyaux instables** les **plus légers**, au cours des transformations naturelles vont émettre (dégager) des électrons (e^-) ou des particules β (**béta**).
- Les **noyaux instables** les **plus lourds** vont émettre des particules α (**alpha**) : noyau d'HELIUM.
- En même temps que α et β , il y a émission de **rayonnement γ (gamma)** (**photons de très grande énergie**).

II.2 EMISSION DES PARTICULES

On distingue 3 types de radioactivité :

- **bêta moins β^-** : la particule émise est un électron $_{-1}^0e$
- **bêta plus β^+** : la particule est un positon, c'est à dire l'anti-particule de l'électron $_{+1}^0e$
- **alpha α** : la particule est un noyau d'hélium $4\text{ }_2^4\text{He}$

a) Émission de type α

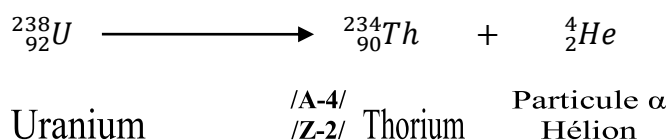
LES PARTICULES α sont des noyaux d'Hélium doublement positifs (He^{++} / He^{2+}) c'est un Hélium.

☞ En chimie nucléaire (en ce qui concerne le noyau), il ne faut pas écrire les charges.

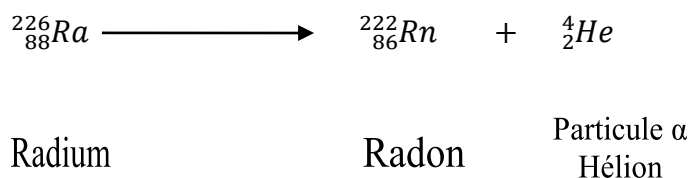
Donc on représente 1 Hélium : $\alpha : {}_2^4\text{He}^{++}$ et on écrit **${}_2^4\text{He}$** au lieu de ${}_2^4\text{He}^{++}$.

Donc dans ce cas le nombre de masse A diminue de 4 et celui des protons diminue de 2.

Exemple 1 :



Exemple 2 :



b) Émission de type β

Lorsque le rapport $\frac{N}{Z}$ est trop élevé, il y a émission des électrons.

- ▣ Il y a deux types d'émission β : (β^+ et β^-)

β^- : Émission d'électrons (β normal)

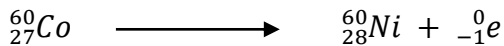
β^+ : Émission d'électrons positifs(positron ou positon)

Radioactivité β^- ou rayonnement β^- :

Le rayonnement β^- est l'émission d'électron ${}_{-1}^0e$.

L'équation s'écrit : ${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z+1} Y + {}_{-1}^0 e$

Exemple :



Cobalt

Nickel

Il n'y a pas d'électrons dans le noyau, mais il peut en émettre en transformant un neutron excédentaire en un électron et un proton suivant le bilan :

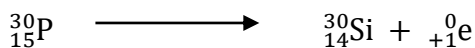


Radioactivité β^+ ou rayonnement β^+ :

Le rayonnement β^+ est l'émission de positon (antiélectron) ${}_{+1}^0e$.

L'équation s'écrit : ${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + {}_{+1}^0 e$

Exemple :

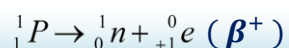


Phosphore

Silicium

Cette radioactivité ne concerne que des noyaux qui possèdent trop de protons.

Le positon provient de la transformation d'un proton excédentaire en un positon suivant le bilan :



c) Le rayonnement γ

L'EMISSION γ est l'émission d'un rayonnement électromagnétique.

Alors, le noyau obtenu en général est dans un état excité (niveau d'énergie élevé). Ce noyau ne reste pas dans cet état, il se désexcite en évacuant cette énergie excédentaire en émettant le rayonnement γ .



II.3 LOIS DE DECROISSANCE RADIOACTIVE

II.3.1 LA DECROISSANCE RADIOACTIVE

La loi de désintégration radioactive a été établie expérimentalement en 1902 par Rutherford et Soddy.

Définition

Le nombre dN de désintégrations qui se produisent dans une quantité donnée de matière (noyau échantillon) pendant un temps infiniment petit dt et proportionnel au nombre d'atomes radioactifs N selon la relation :

$$dN = -\lambda N dt$$

Où : λ : est la constante radioactive caractéristique de chaque noyau (radionucléide)

⇒ Par intégration on obtient :

$$N_t = N_0 \times \exp(-\lambda t)$$

N_0 : est le nombre d'atomes radioactifs présent à l'instant initial $t=0$

N_t : est le nombre d'atomes radioactifs présent à l'instant t

II.3.2 LA PERIODE RADIOACTIVE

LA PERIODE RADIOACTIVE d'un noyau (radionucléide) T est le temps nécessaire pour que la moitié des atomes radioactifs présents initialement se désintègre.

$$N_t = \frac{N_0}{2} = N_0 \exp(-\lambda T) \Rightarrow \exp(-\lambda T) = \frac{1}{2} \Rightarrow \ln 2 = \lambda T \Rightarrow T = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

Donc :

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda}$$

II.3.3 L'ACTIVITE

L'ACTIVITE "A" d'un radionucléide est le nombre de désintégrations qui se produisent par unité de temps dans une quantité donnée de ce noyau.

- ◆ L'activité représente la vitesse de désintégration.

$$A = -\frac{dN}{dt} = \frac{\lambda N dt}{dt} \Rightarrow A = \lambda N$$

$$A = \lambda N_0 e^{-\lambda t} \Rightarrow A = A_0 e^{-\lambda t}$$

Ou $A_0 = \lambda N_0$

- L'unité internationale d'activité est le becquerel (Bq)

$$1\text{Bq} = 1 \text{ Désintégration Par Seconde}$$

- L'ancienne unité encore très utilisée est le Curie(Ci)

$$1\text{Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$$

II.3.4 LA RELATION MASSE- ACTIVITE

D'après la définition de l'activité on peut dire que **1Bq** est l'activité d'une quantité de radionucléides dans laquelle le nombre moyen de désintégration par seconde est égal à 1 .

- La masse d'un atome :

$$m = \frac{M}{N_A}$$

- La masse de N atomes :

$$m = \frac{M}{N_A} \times N$$

1

.....

$$A = \lambda N \Rightarrow N = \frac{A}{\lambda}$$

2

On remplace 2 dans 1 : $m = \frac{M \cdot A}{N_A \cdot \lambda}$ tel que $\lambda = \frac{\ln 2}{T}$

Donc :

$$m = \frac{M \cdot A \cdot T}{N_A \cdot \ln 2}$$

RESUME

$$N_t = N_0 e^{-\lambda t} A_t = A_0 e^{-\lambda t} A = \lambda N$$
$$T = \frac{\ln 2}{\lambda}$$
$$m = \frac{M}{N_A} \cdot N$$

CHAPITRE III : QUANTIFICATION DE L'ENERGIE

III.1 MODELES CLASSIQUES DE L'ATOME

III.1.1 LE MODELE DE RUTHERFORD

Dans ce modèle, l'atome est constitué d'un noyau dans lequel est pratiquement concentré toute la masse de l'atome et autour duquel gravitent des électrons. Ce modèle n'était pas satisfaisant car il rend l'atome instable d'après la théorie de l'électromagnétisme :

III.1.2 LE MODELE DE BOHR

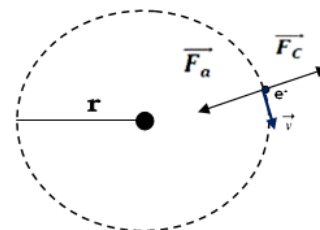
Niels Bohr (1913) a proposé un nouveau modèle de l'atome dans lequel les électrons ne peuvent occuper que certaines orbites bien précises

Exemple 1 : l'atome d'hydrogène $Z=1$

Cas de l'atome d'hydrogène :

\vec{F}_a : Force d'attraction (du noyau)

\vec{F}_c : Force Centrifuge



■ Pour que l'électron reste sur l'orbite (le système en équilibre) :

Il faut que

$$|\vec{F}_a| = |\vec{F}_c|$$

Les postulats du modèle de Bohr

1. L'électron peut se trouver à une distance quelconque du noyau.
2. L'électron se déplace sur une orbite circulaire de rayon r .
3. L'électron est animé d'une certaine vitesse qui dépend de r .

$$r \searrow \Rightarrow v \searrow$$

$$r \nearrow \Rightarrow v \nearrow$$

4. L'électron est toujours de premier état d'équilibre $\sum \vec{F} = \mathbf{0}$

Aspect quantitatif de l'atome de Bohr

$$|\vec{F}_a| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$|\vec{F}_c| = \frac{m \cdot v^2}{r}$$

e : charge d'électron

m : masse d'électron

ϵ_0 : Permittivité du vide **v** : vitesse d'électron

r : rayon de l'orbite

On a : $|\vec{F}_a| = |\vec{F}_c| \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} = \frac{m \cdot v^2}{r} \Rightarrow m \cdot v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$ **1**

(Le système en équilibre)

Énergie totale du système E_T est donnée par

$$E_T = E_C + E_P$$

E_C : énergie cinétique

E_P : énergie potentielle due à l'attraction du noyau.

On a :

$$E_P = -\int_r^\infty F_a dr = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_r^\infty \frac{1}{r^2} dr = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ Sachant que : } \int_r^\infty \frac{1}{r^2} dr = -\frac{1}{r}$$

On a : $E_C = \frac{1}{2} m \cdot v^2$

on remplace dans E_C ; on obtient : $E_C = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Enfin : $E_T = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Rightarrow E_T = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$ **2**

Le Rayon de l'orbite r_T

D'après l'équation du moment cinétique : $m \cdot v \cdot r = \frac{n \cdot h}{2\pi}$

m : masse de l'électron

v : vitesse de l'électron

r : le rayon

n : nombre de couches (orbites circulaire)

nombre entier non nul **h** : constante de

Planck = $6,626 \cdot 10^{-34}$ J.sec

$$m \cdot v \cdot r = \frac{n \cdot h}{2\pi} \Rightarrow v = \frac{n \cdot h}{2\pi \cdot m \cdot r} \Rightarrow v^2 = \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m^2 \cdot r^2} \Rightarrow m \cdot v^2 = \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m \cdot r^2} \Rightarrow m = \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m \cdot r^2}$$

Donc $m \cdot v^2 = \frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m \cdot r^2} \dots$

3

1

3

Donnent $\frac{n^2 \cdot h^2}{4\pi^2 \cdot m \cdot r^2} = \frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$

Donc $r_T = \frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m \cdot e^2} \cdot n^2 \dots$ **Avec**

$$\epsilon_0 = \frac{1}{36\pi \cdot 10^9}$$

4

$$E_T = \frac{-e^2}{8\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} = \frac{-e^2 \cdot \pi \cdot m \cdot e^2}{8\pi \cdot \epsilon_0 \cdot n^2 \cdot h^2 \cdot \epsilon_0} = \frac{-e^4 \cdot m}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot n^2 \cdot h^2}$$

Donc

$$E_T = \frac{-e^4 \cdot m}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot n^2 \cdot h^2} \dots$$

5

■ Calcul de l'énergie des couches :

- Pour **n=1**(état fondamental) : l'électron occupe l'orbite de rayon r_1 et d'énergie E_1)

$$r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} m = 0,529 \text{Å}$$

$$E_1 = -21,78 \cdot 10^{-19} J = -13,6 eV$$

$$1 \text{Å} = 10^{-10} m$$

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

- Pour **n=2**(premier état excité)

$$r_2 = 2^2 r_1 = 2,116 \text{Å} \quad \& \quad E_2 = \frac{E_1}{2^2} = -3,4 eV$$

- Pour **n=3**(deuxième état excité)

$$r_3 = 9r_1 = 4,761 \text{Å} \quad \& \quad E_3 = \frac{E_1}{9} = -1,51 eV$$

De manière générale on écrit :

$$r_n = (n)^2 r_1 \quad \& \quad E_n = \frac{E_1}{(n)^2}$$

ABSORPTION ET ÉMISSION D'ÉNERGIE (DE LA LUMIÈRE)

Un électron ne peut absorber ou émettre de l'énergie que s'il passe d'un niveau (orbite) à un autre.

La quantité d'énergie émise ou absorbée est la différence d'énergie entre les 2 niveaux.

Relation de Planck :

$$\Delta E = |E_f - E_i| = h \cdot \nu$$

h : Constante de Planck " h " = $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J/s}$

ν (Nu) : fréquence de rotation (Hz)

1. L'absorption

Lorsqu'un électron passe d'un niveau inférieur n (orbite de rayon $n \ll r_n$) à un niveau supérieur p ($p > n$), il absorbe une radiation de fréquence ν_{n-p} (ν qui le mène de $n \rightarrow p$)

2. L'émission

Lorsqu'un électron passe d'un niveau supérieur p à un niveau inférieur n ($p > n$), il émet une radiation de fréquence ν_{p-n} (ν qui le mène de $p \rightarrow n$)

RAYONNEMENT ÉLECTROMAGNETIQUE

LES RAYONS LUMINEUX sont caractérisés par la propagation d'une onde électromagnétique à la vitesse de la lumière. Cette onde est caractérisée par sa longueur d'onde (λ).

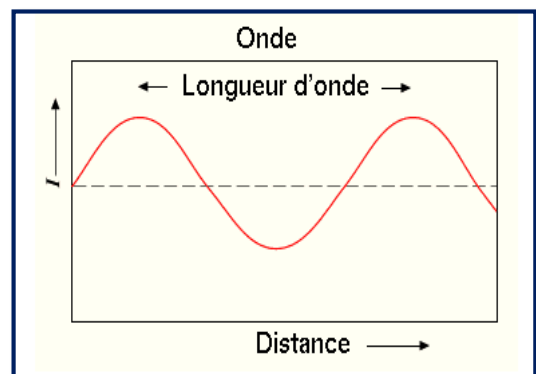
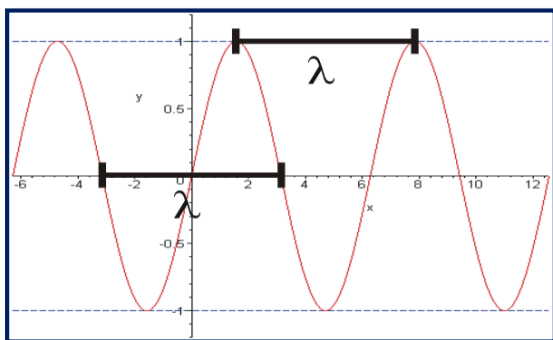
$$\lambda = \frac{1}{\sigma} = \frac{c}{\nu}$$

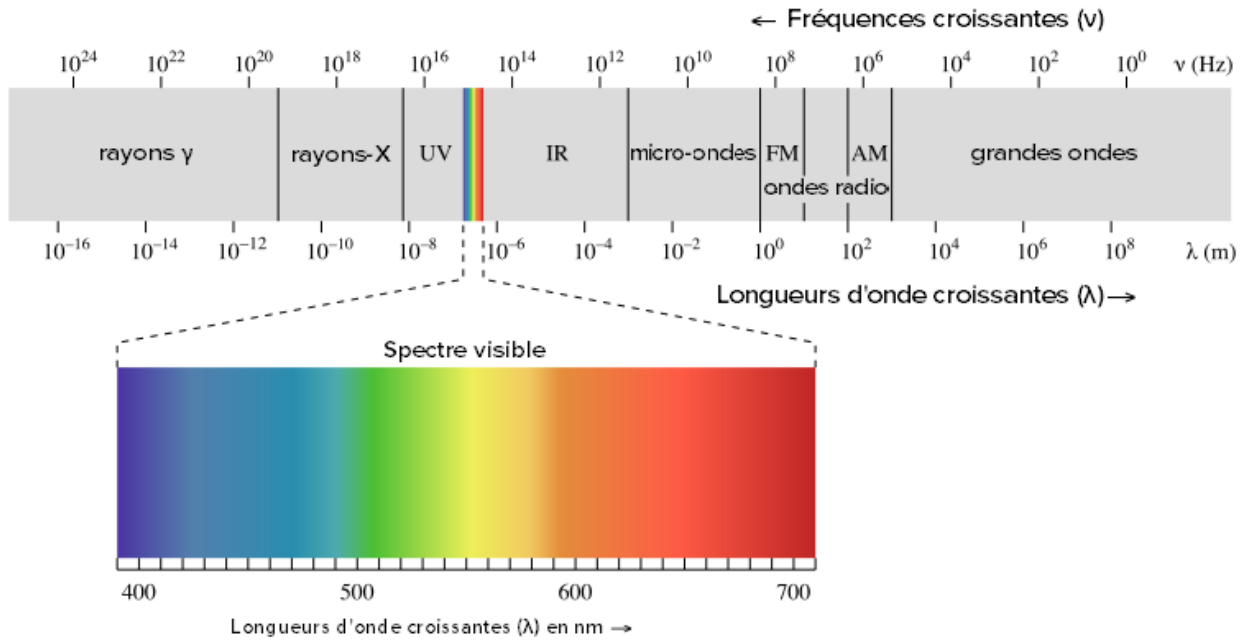
λ : La longueur d'ondes (m)

σ : Le Nombre d'ondes

c : La vitesse de la lumière

ν : La Fréquence de la radiation

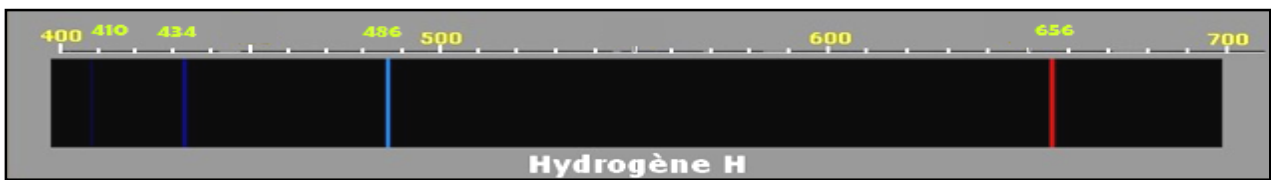




Spectre électromagnétique
 (Un spectre des différents domaines de radiation dans la nature)

Spectre d'émission de l'atome d'hydrogène

Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène présente 4 groupes de raies principales :



Raie : la longueur d'onde où le rayon est visible

$$\Delta E = |E_f - E_i| = |E_p - E_n| = h \cdot \nu$$

$$= \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right) \times \left(\frac{-m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \right)$$

$$\Delta E = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \times \left(\frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \right)$$

$$\Delta E = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{h \cdot \nu}{c \cdot h} = \frac{\Delta E}{c \cdot h}$$

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\Delta E}{c \cdot h} = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \times \left(\frac{m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^3 \cdot c} \right) \rightarrow \mathbf{R_H}$$

Donc : $\sigma = \frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$ **Relation de Ritz**

R_H : constante de Rydberg $R_H = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$$

Cette relation permet de calculer les différentes longueurs d'ondes.

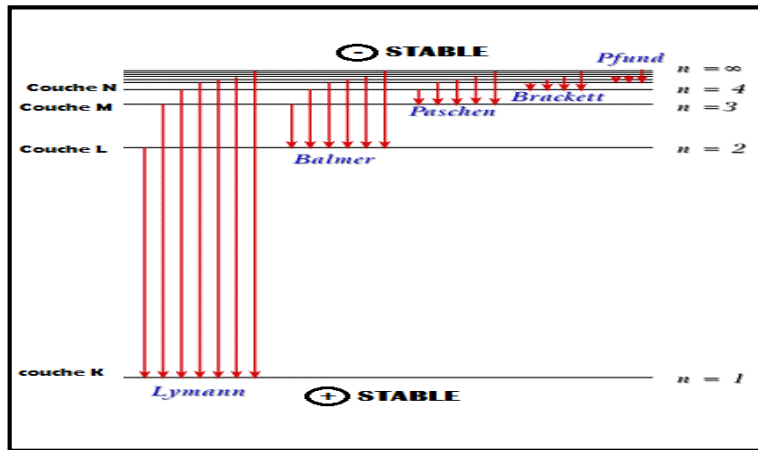
En général, on trouve plusieurs séries de spectre selon l'état où se trouve l'électron et ses transitions.

➤ **U.V (ultraviolet)** : série de **Lyman** : de $p > 1$ à $n=1$ ($p=2,3,\dots,\infty$)

➤ **Visible** : série de **Balmer** : de $p > 2$ à $n=2$ ($p=3,4,\dots,\infty$)

IR (INFRAROUGE) {

- série de **Paschen** : de $p > 3$ à $n=3$ ($p=4,5,\dots,\infty$)
- série de **Brackett** : de $p > 4$ à $n=4$ ($p=5,6,\dots,\infty$)
- série de **Pfund** : de $p > 5$ à $n=5$ ($p=6,7,\dots,\infty$)



Remarque : les énergies émises ou absorbées sont égales en valeur absolue entre deux niveaux ;.

III.2.1 Généralisation aux ions Hydrogénéoïdes

Définition LES IONS HYDROGENOÏDES se sont des ions qui possèdent un seul électron.

Exemple : ${}^4_2\text{He} : (Z=2) \text{ -----} \rightarrow \text{He}^+ \quad (1 e^-) \text{He}^+$ et Li^{++} sont les ions hydrogénéoïdes

${}^7_3\text{Li} (Z=3) \text{ -----} \rightarrow \text{Li}^{++} (1 e^-)$

Pour l'Hydrogène : $E_T = \frac{-m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot n^2 \cdot h^2}$

Pour les Hydrogénéoïdes : $E_T = \frac{Z^2}{n^2} \cdot \left(\frac{-m \cdot e^4}{8 \cdot \epsilon_0^2 \cdot h^2} \right) = E_1 \times \frac{Z^2}{n^2}$ Tel que $E_1 = -13.6 \text{ ev}$

Le rayon d'une orbite d'un ion Hydrogénéoïdes

$r = \frac{n^2}{Z} \cdot \left(\frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m \cdot e^2} \right) = r_1 \cdot \frac{n^2}{Z}$ Avec : $r_1 = 0,529 \text{ \AA}$

$\frac{1}{\lambda} = Z^2 \cdot R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$

Énergie d'ionisation

C'est l'énergie nécessaire pour emmener l'électron de son état fondamental $n=1$ vers l'infini $n=\infty$.

L'ionisation de l'hydrogène $H \rightarrow H^+ + 1e^-$ (l'hydrogène a perdu un électron)

$$\Delta E = |E_f - E_i| = |E_\infty - E_1| = 13,6 \text{ eV} \quad (E_\infty = 0)$$

Ou $E_i = 13,6 \text{ eV}$ (énergie d'ionisation)

L'IONISATION DES HYDROGENOIDES :

$$E_i = 13,6 Z^2 \text{ eV}$$

CHAPITRE IV. MODELE QUANTIQUE DE L'ATOME

IV. 1 NOTION DE MECANIQUE QUANTIQUE

A. Postulats de Broglie

À toute particule (corpuscule) de masse m et de vitesse v est associée une onde de longueur d'onde λ : on applique ainsi à la matière (exemple : un électron) le caractère combiné d'ondes et de particules.

La relation de Broglie s'écrit : $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$

λ : Longueur d'ondes

h : Constante de Planck

$m \cdot v$: Quantité du mouvement

B. Principe d'incertitude d'Heisenberg

Il est impossible de définir avec précision à la fois la position et la vitesse d'une particule. Cela se

traduit par la relation suivante : $\Delta x \cdot \Delta P_x \geq \frac{h}{2\pi}$

Δx : Incertitude sur la position

ΔP_x : Incertitude sur la quantité du mouvement

C. PROBABILITE DE PRESENCE

En mécanique classique (conception de Bohr) l'étude du mouvement d'un électron consiste à rechercher sa trajectoire avec précision.

Par contre, en mécanique quantique on parle de probabilité de trouver l'électron en un certain point de l'espace.

IV.2 EQUATION DE SCHRÖDINGER POUR L'ATOME D'HYDROGENE

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} (E - E_p) \Psi = 0$$

E : énergie totale de l'électron, E_p : énergie potentielle de l'électron

Δ : operateur laplacien

$$= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$\Psi(x,y,z)$ = fonction d'onde de l'électron : c'est la partie qui ne dépend que des coordonnées d'espace (x,y,z)

Ψ^2 = densité de probabilité.

L'équation de Schrödinger est résolue pour l'hydrogène et les ions Hydrogénéoides.

La résolution de l'équation introduit quatre nombre quantique.

IV.3.1 LES NOMBRES QUANTIQUES

1.NombreQuantique Principale (n)

Il caractérise la couche $n \geq 1$ (n : entier positif)

- ☞ $n=1$ le niveau le plus bas : couche **K**
- ☞ $n=2$ couche **L**
- ☞ $n=3$ couche **M**
- ☞ $n=4$ couche **N**

Remarque :le nombre maximum d'électrons dans une couche est égale a $2n^2$

2.Nombre Quantique Secondaire (l)

Il caractérise la **sous-couche**

$$0 \leq l \leq n - 1$$

- ☞ $l=0$ → la sous couche s ou orbitale s
- ☞ $l=1$ → la sous couche p ou orbitale p
- ☞ $l=2$ → la sous couche d ou orbitale d

- ☛ $l=3 \rightarrow$ la sous couche f ou orbitale f
 exp : La couche K est composée d'une seule sous couche s
 La couche L est composée de deux sous couches s et p

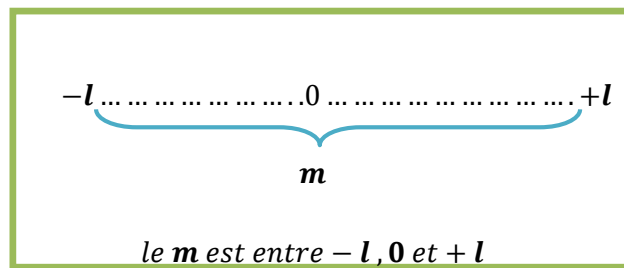
3. Nombre Quantique Magnétique (m)

Il détermine le nombre d'orbitales de chaque sous-couche ainsi que leurs orientations spatiales

$$-l \leq m \leq +l$$

chaque sous couche est composé de $(2l + 1)$ orbitales

- ☛ si $l = 0 \rightarrow$ une valeur de $m : m = 0$ (1 seule orbitale)
- ☛ si $l = 1 \rightarrow$ trois valeurs de $m : m = -1, 0, 1$ (3 orbitales) P_x, P_y, P_z
- ☛ si $l = 2 \rightarrow$ Cinq valeurs de $m : m = -2, -1, 0, 1, 2$ (5 orbitales)



☛ Couche K

$n = 1 \Rightarrow l = 0$: orbitale (s) , $m = 0 \Rightarrow$ une valeur = une case quantique 0
□

☛ Couche L

$n = 2 \Rightarrow l = 0$: orbitale (s) , $m = 0 \Rightarrow$ une valeur = une case quantique
 $l = 1$: orbitale (p) , $m = -1, 0, +1 \Rightarrow$ trois valeurs = trois cases quantiques -1 0 1
□ □ □

☛ Couche M

$n = 3 \Rightarrow l = 0$: orbitale (s) , $m = 0 \Rightarrow$ une case quantique
 $l = 1$: orbitale (p) , $m = -1, 0, +1 \Rightarrow$ trois cases quantiques
 $l = 2$: e^- orbitale (d) , $m = -2, -1, 0, +1, +2 \Rightarrow$ cinq cases quantiques -2 -1 0 1 2
□ □ □ □ □

☛ Couche N

$n = 4 \Rightarrow l = 0$: orbitale (s) , $m = 0 \Rightarrow$ une case quantique
 $l = 1$: orbitale (p) , $m = -1, 0, +1 \Rightarrow$ trois cases quantiques

$l = 2$: orbitale (d) , $m = -2, -1, 0, +1, +2 \Rightarrow$ cinq cases quantiques

$l = 3$: orbitale (f) , $m = -3, -2, 0, +1, +2, +3 \Rightarrow$ sept cases quantiques

-3	-2	-1	0	1	2	3

4. Spin (s) Ou le nombre quantique de spin

L'électron est toujours en mouvement de rotation autour de lui-même ce mouvement est dit de spin ;

Deux rotation dans deux sens opposés sont associées à deux valeurs :

Valeur propre à l'électron $s = +\frac{1}{2}$ $s = -\frac{1}{2}$ $\begin{matrix} +\frac{1}{2} \\ \uparrow \downarrow \\ -\frac{1}{2} \end{matrix}$

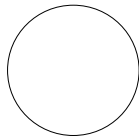
On représente l'électron avec un spin $+1/2$ ou $-1/2$ par une flèche dans la case quantique.

Remarque

Une case quantique peut avoir au maximum deux électrons.

IV.3.2 REPRESENTATION GEOMETRIQUE DES ORBITALES

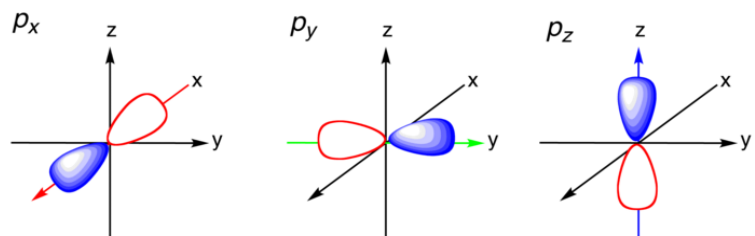
Orbitale s



Les orbitales " s " sont caractérisées par $l=0$ et $m=0$

Toutes les orbitales s (ns) sont de **symétrie sphérique** car la probabilité de présence de l'électron varie de la même façon dans toutes les directions autour du noyau.

1. Orbitale P



Pour le $l = 1 \Rightarrow m =$

$-1, 0$ ou $1 \Rightarrow 3$ orbitales p

-1 0 1

--	--	--

- On parle des orbitales P_x, P_y, P_z ayant la même forme (des lobes), mais chacune est allongée sur un des trois axes (x, y, z) P_x, P_y, P_z

2. Orbitale d

Pour le $l = 2 \Rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2 \Rightarrow 5$ orbitales d

-2 -1 0 1 2



3. Orbitale f

Pour le $l = 3 \Rightarrow m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 \Rightarrow 7$ orbitales f

IV. 3 STRUCTURE ÉLECTRONIQUE DES ATOMES POLY-ÉLECTRONIQUES

(Configuration Électronique)

La configuration électronique d'un atome est la répartition de Z électrons (numéro atomique) de l'atome dans un état fondamental sur les orbitales atomiques.

Ce remplissage se fait selon **4 règles** :

a. Principe d'exclusion de PAULI

Dans un atome deux électrons ne peuvent pas avoir leurs quatre nombres quantiques identiques.

- Si deux électrons d'un atome occupent la même orbitale (même n, l et m) la valeur du spin est forcément différente

Exemple 1s $\boxed{\uparrow\downarrow}$

- 1^{er} électron : $n = 1, l = 0, m = 0, s = +\frac{1}{2}$
- 2^{ème} électron : $n = 1, l = 0, m = 0, s = -\frac{1}{2}$

Remarque

- Pour une couche n le nombre quantique de cases est n^2 , le nombre d'électrons est de $2n^2$.

couche n → Nombre de cases n^2 → Nombre d'électrons $2n^2$

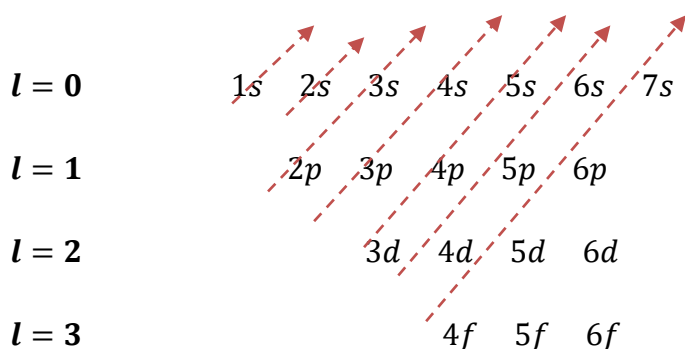
b. Principe de stabilité

Les électrons occupent les niveaux d'énergie les plus bas dans la limite des places disponibles.

c. Règle de HUND

À l'état fondamental, quand les électrons se placent dans une sous-couche multiple p, d, f, ils occupent le maximum d'orbitales de même énergie avec des électrons célibataires qui ont des spin parallèles (même valeurs de spin).

d. Règle de KLECHKOVSKI



Ordre de remplissage : $1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\ 4p\ 5s\ 4d\ 5p\ 6s\ 4f\ 5d\ 6p\ 7s\ 5f\ 6d\ 7p$

Exemples Structure Électronique

- ☛ Le carbone : ${}^6\text{C}\ 1s^2 2s^2 2p^2$
- ☛ L'oxygène : ${}^8\text{O}\ 1s^2 2s^2 2p^4$
- ☛ Sodium ${}^{11}\text{Na}\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
- ☛ Potassium : ${}^{19}\text{K}\ 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
- ☛ Pour le Sodium ${}^{11}\text{Na}\ 1s^2 \underbrace{2s^2 2p^6}_{\text{}} 3s^1$: $\boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow\downarrow}\ \boxed{\uparrow}$

2 ^{ème} électron	8 ^{ème} électron	9 ^{ème} électron	11 ^{ème} électron
$n = 1$	$n = 2$	$n = 2$	$n = 3$
$l = 0$	$l = 1$	$l = 1$	$l = 0$
$m = 0$	$m = -1$	$m = 0$	$m = 0$
$s = -\frac{1}{2}$	$s = -\frac{1}{2}$	$s = -\frac{1}{2}$	$s = +\frac{1}{2}$

- ☛ Titane²²Ti : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
- ☛ Cuivre²⁹Cu : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$ on met $4s^1 3d^{10}$ plus stable
- ☛ Chrome²⁴Cr : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ on met $4s^1 3d^5$ plus stable

Remarque

La **d** est stable que lorsqu'elle est complètement ou à moitié remplie.

CHAPITRE V. CLASSIFICATION PERIODIQUE ET PROPRIETES DES ÉLÉMENTS

V.1 DESCRIPTION DU TABLEAU PERIODIQUE DE MENDELIEFF (1869)

Le tableau périodique est une conséquence des configurations électroniques. La classification périodique est basée sur la structure électronique de la couche externe et qui permet de classer les éléments chimiques en groupes.

V.2 PROPRIETES DU TABLEAU PERIODIQUE

- ☞ Le tableau périodique est constitué de **quatre blocs** : ***s***, ***p***, ***d*** et ***f***
- ☞ Les éléments d'une **même ligne horizontale** constituent **une période**.
- ☞ Les éléments d'une même colonne ayant la même **configuration électronique de la couche externe** constituent **une famille** ou **un groupe**.
- ☞ Le tableau périodique est constitué de **18 colonnes** réparties en groupes, les 7 premiers comporte chacun **2 sous-groupe A** et **B** selon l'état des électrons externes.
 - ◆ **Sous-groupe A** : contient les éléments dont la couche externe est ***ns***, ***np***
 - ◆ **Sous-groupe B** : contient les atomes qui possèdent un état ***d***
- ☞ Les indices **I, II, III ...** indiquent le nombre d'électrons sur la couche externe appelés des **électrons de valence**.

<i>s</i>		<i>d</i>										<i>p</i>						<i>G.R</i>
IA	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII	
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIII				IB	IIB						
<i>ns</i> ¹	<i>ns</i> ²	<i>nd</i> ¹	<i>nd</i> ²	<i>nd</i> ³	<i>nd</i> ⁴	<i>nd</i> ⁵	<i>nd</i> ⁶	<i>nd</i> ⁷	<i>nd</i> ⁸	<i>nd</i> ⁹	<i>nd</i> ¹⁰	<i>np</i> ¹	<i>np</i> ²	<i>np</i> ³	<i>np</i> ⁴	<i>np</i> ⁵	<i>np</i> ⁶	

Les principales familles du tableau périodique

- 1) Famille des alcalins : groupe **IA** : ns^1
- 2) Famille des alcalino-terreux : groupe **IIA** : ns^2
- 3) Famille des Halogènes : groupe **VIIA** : $ns^2 np^5$
- 4) Famille des Gaz rares : groupe **VIIIA** : $ns^2 np^6$

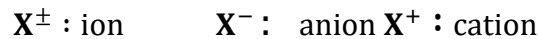
- 5) La famille des éléments de transition : sous-groupe B caractérisé par la sous couche externe $nd(n d^1 \text{-----} n d^{10})$.

V.3 PERIODICITE ET PROPRIETES

1. Le rayon atomique (r_a)

- Sur la même période si **Z augmente**, **r_a diminue**.
(parce que la même couche : le Z augmente et la force d'attraction aussi).
- Sur la même colonne (groupe/famille) si **Z augmente**, **r_a augmente** aussi.

2. Le rayon ionique (r_i)



- Les cations** sont plus petits que leurs atomes parents ($r_i < r_a$)
- Les anions** sont plus gros que leurs atomes parents ($r_i > r_a$)

3. L'énergie d'ionisation (EI)

C'est l'énergie qu'il faut fournir pour arracher un électron à un atome ou un ion (précisément un cation X^+)

- Sur une même période si le **Z augmente**, **l'énergie d'ionisation EI augmente** aussi (parce que la même couche : le Z augmente et la force d'attraction aussi).
- Sur une même colonne si le **Z augmente**, **l'énergie d'ionisation EI diminue** (parce la force d'attraction diminue).

4. L'affinité électronique

C'est le phénomène inverse de l'ionisation.

- L'affinité électronique** d'un élément X est l'énergie dégagée lorsque cet élément (atome) capte (gagne) un électron.

5. L'électronégativité (EN)

C'est le pouvoir d'attirer un électron par un élément.

- **Un élément qui perd** facilement un ou plusieurs électrons est dit **électropositif**.
- Quand **un élément a tendance à gagner** des électrons il est dit **électronégatif**.
- Sur une même période si le **Z augmente**, **l'électronégativité EN augmente** aussi.
- Sur un même groupe si **Z augmente**, **l'électronégativité EN diminue**.

L'électronégativité \neq l'électropositivité

CHAPITRE.VI. LA LIAISON CHIMIQUE

La valence est la capacité de chaque atome à former une liaison. Sa valeur est égale au nombre d'électrons célibataires dans la couche externe.

Exemple

- Hydrogène ${}^1\text{H}$: $1s^1$ -----> $V=1$
- Oxygène ${}^8\text{O}$: $1s^2 2s^2 2p^4$ $\boxed{\uparrow\downarrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}$: Deux électrons célibataires -----> $V=2$

La liaison concerne la dernière couche chimique.

VI-1 La liaison atomique covalente

a. Principe

La liaison (A-B) : est le résultat de la mise en commun (mettre ensemble) entre les atomes de deux électrons célibataires (de spin opposé) pour former un doublet électronique.

Remarque : B peut être identique à A. **Exemple** : O_2, H_2

Exemple 1 : H_2

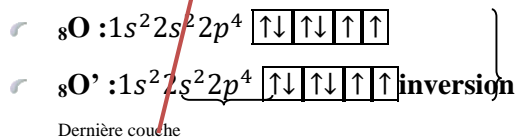
- ${}^1\text{H}$: $1s^1$ $\boxed{\uparrow}$ $\text{H} \times \cdot \text{-----} \text{H}$ (selon Lewis)
- ${}^1\text{H}'$: $1s^1$ $\boxed{\uparrow}$ $\text{H} - \text{H}$

Remarque

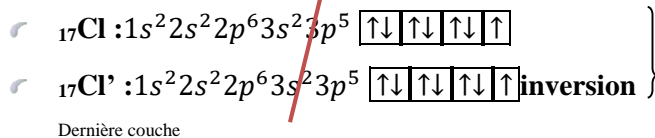
L'un des deux hydrogènes inverse automatiquement son spin.

Exemple 2

O₂



Cl₂

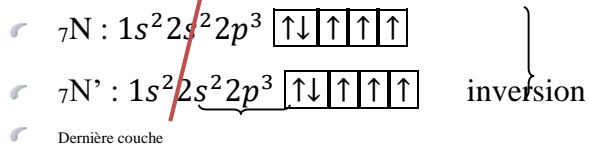


➤ Il y a 3 doublets électroniques et 1 électron célibataire.

Donc :

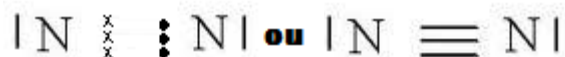


N₂

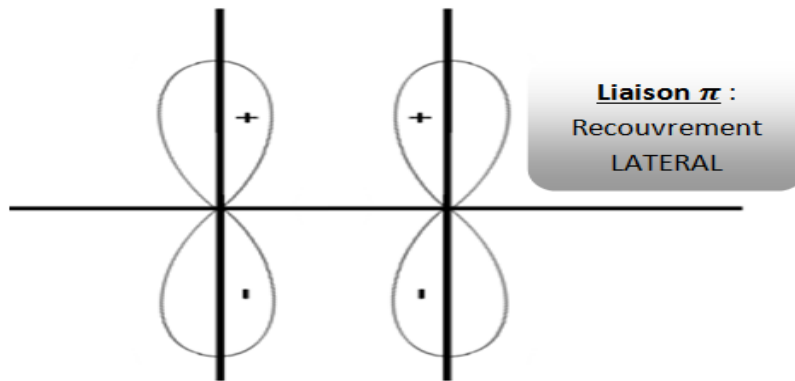
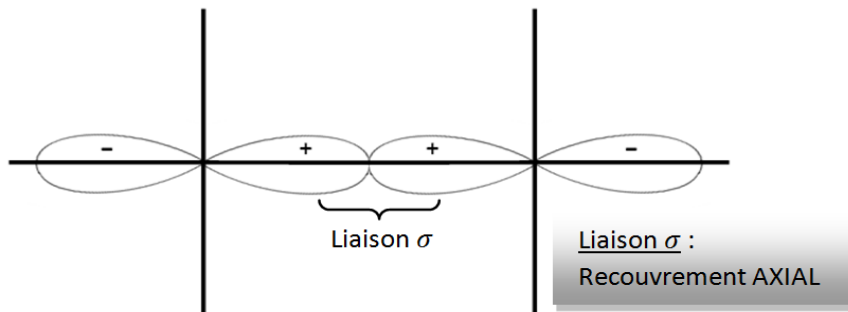
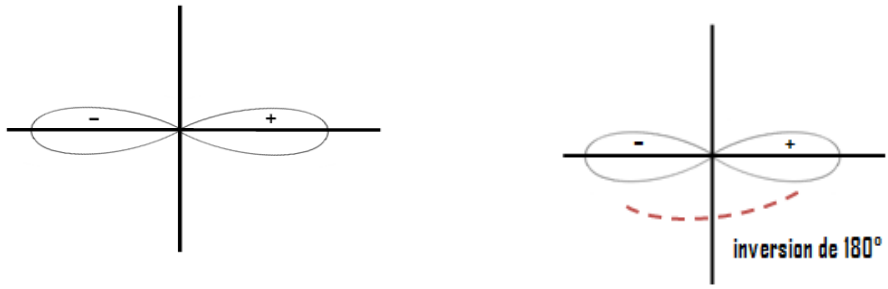


➤ Il y a 1 doublet électroniques et 3 électrons célibataires.

Donc :



Liaison σ et liaison π :



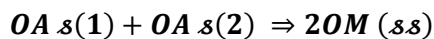
Stabilité σ \gg liaison π

VI-2. DESCRIPTION DES ORBITALES MOLECULAIRES

Exemple

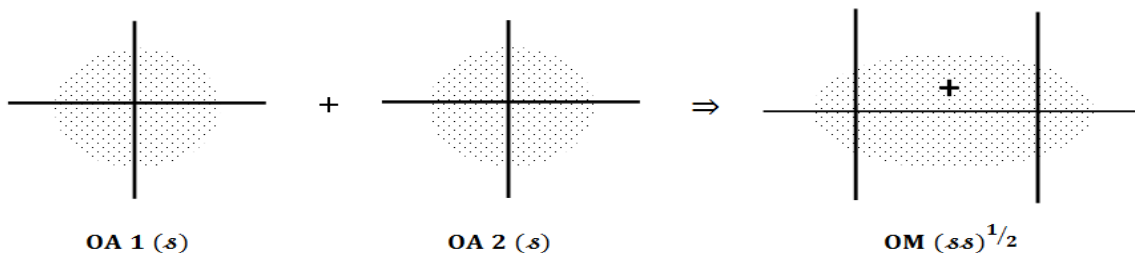
1) **H₂**

- ☛ ${}^1\text{H} : 1s^1$
- ☛ ${}^1\text{H}' : 1s^1$



OA : *Orbital Atomique*

OM : *Orbital Moléculaire*



2) $\text{Cl}_2 = [\text{Ne}] 3s^2 3p^5 \text{Cl} - \text{Cl}$ (une seule liaison)

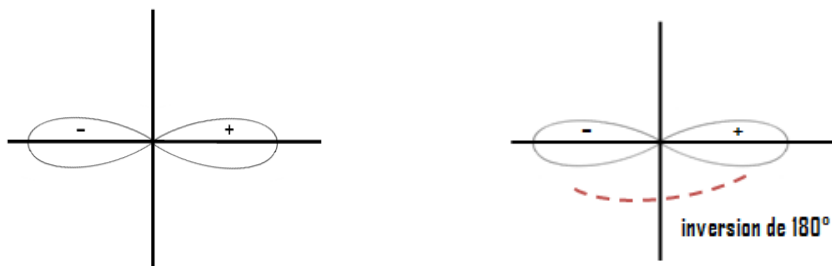
(${}_{10}\text{Ne}$: 10 électrons)

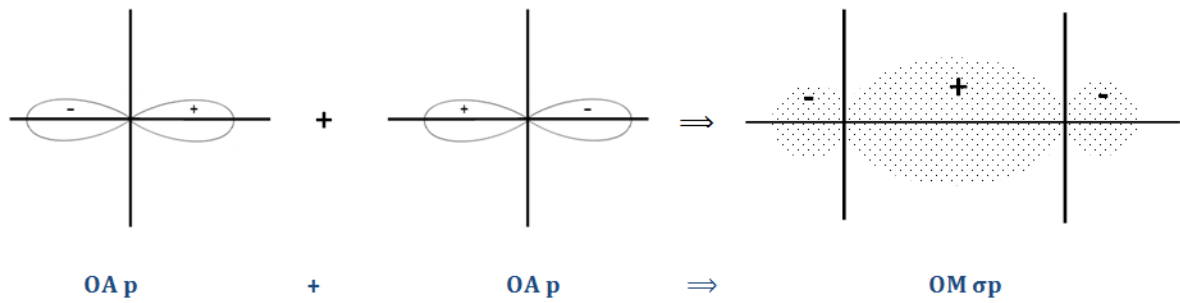
Remarque

On ne peut pas avoir la liaison π sans avoir la liaison σ .

Cl₂

- ☛ ${}_{17}\text{Cl}_{(1)} : \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow}$
- ☛ ${}_{17}\text{Cl}_{(2)} : \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow}$





VI-3 REPRESENTATION DES DIAGRAMMES ÉNERGETIQUES :(ça concerne les molécules)

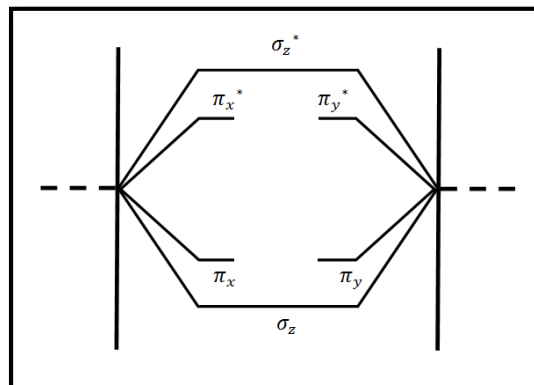
Par convention les orbitales atomiques de l'élément le plus électro-négatif se représente à droite en bas.

☛ Molécule A-B

$$\sum e_s^- A + \sum e_s^- B = \sum e_s^- A - B \begin{cases} \nearrow \leq 14 \Rightarrow \sigma_z \text{ après } \pi_x, \pi_y \\ \searrow > 14 \Rightarrow \sigma_z \text{ avant } \pi_x, \pi_y \end{cases}$$

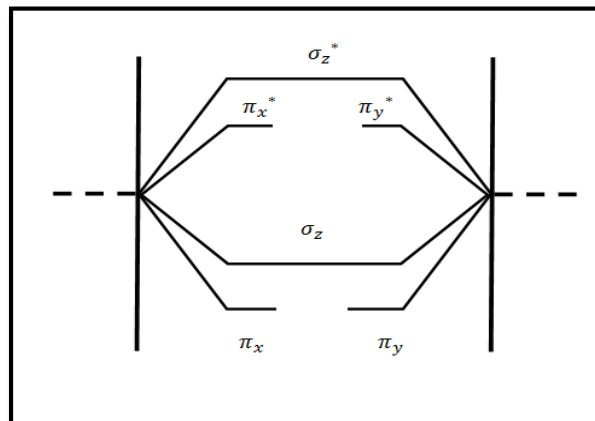
1^{ère} Possibilité :

$$\sum e_s^- A - B > 14 \Rightarrow \sigma_z \text{ avant } \pi_x, \pi_y$$

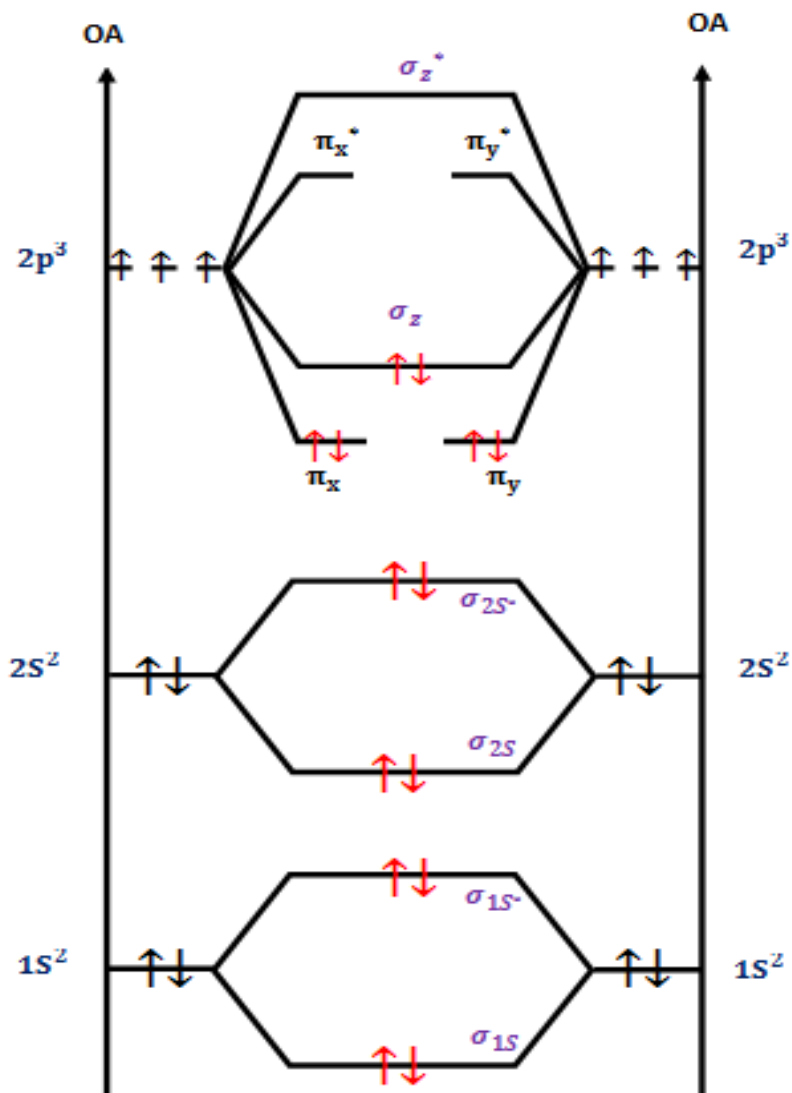


2^{ème} Possibilité :

$$\sum e_s^- A - B \leq 14 \Rightarrow \sigma_z \text{ après } \pi_x, \pi_y$$



Exemple :



**L'ORDRE DE
(OL)
Liaison)**

c'est
deux

**LIAISON
(L'indice De**

Définition :
le nombre de
liaison entre
atomes.

Exemple



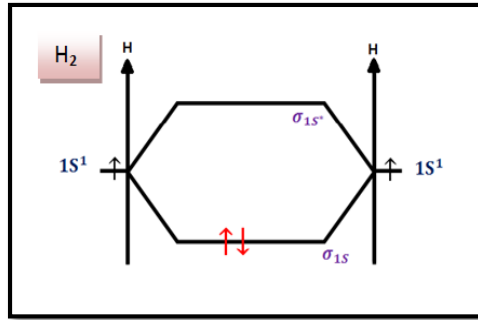
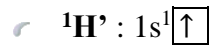
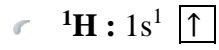
$$OL_{\sigma(N_2)} = \frac{\sum e^-_{\sigma} - \sum e^-_{\sigma^*}}{2} = \frac{6 - 4}{2} = \frac{2}{2} = 1 \quad \text{une liaison } \sigma$$

$$OL_{\pi(N_2)} = \frac{\sum e^-_{\pi} - \sum e^-_{\pi^*}}{2} = \frac{4 - 0}{2} = 2 \quad \text{Deux liaisons } \pi$$

$$OL_{Global(N_2)} = \frac{\sum e^-_{liants} - \sum e^-_{antiliants}}{2} = \frac{10 - 4}{2} = \frac{6}{2} = 3$$

Donc : $N_2 \Rightarrow$ Trois liaisons \nearrow une liaison σ
 \searrow Deux liaisons π

2) **H₂**

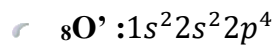
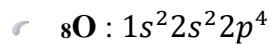


Remarque :

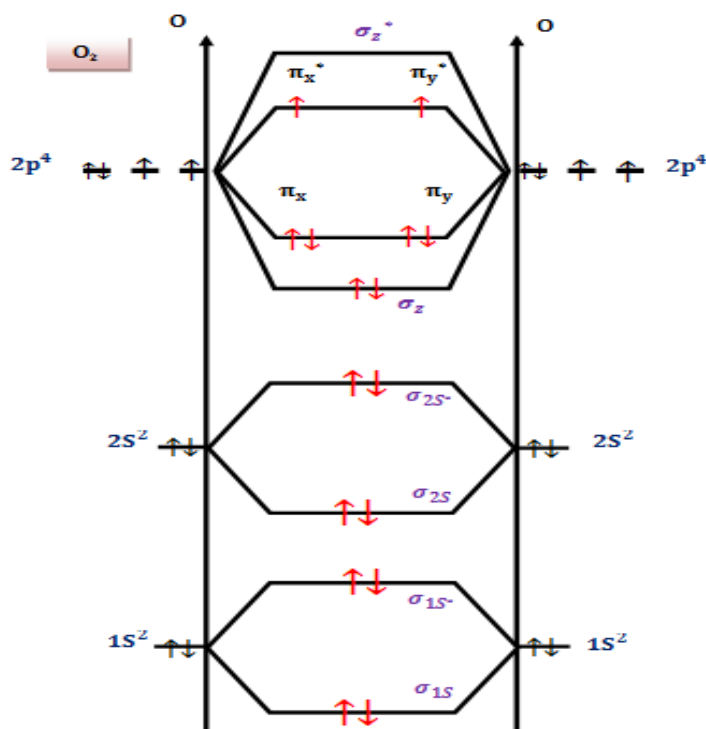
Dans le remplissage, on commence toujours par le niveau le plus bas
 (la σ_{1s} avant et après la σ_{1s}^*)

$$OL_{\text{Global}}(\text{H}_2) = \frac{\sum e^- \text{ liants} - \sum e^- \text{ antiliants}}{2} = \frac{2 - 0}{2} = 1 \text{ une liaison } \sigma\text{H} - \text{H}$$

3) **O₂**



$$\sum e_s^-(O_2) = 16 > 14 \Rightarrow \sigma_z \text{ avant } \pi_x, \pi_y$$



$$OL_{\text{Global}}(O_2) = \frac{\sum e^- \text{ liants} - \sum e^- \text{ antiliants}}{2} = \frac{10 - 6}{2} = 2$$

Donc **O₂** \Rightarrow **Deux liaisons** $\begin{matrix} \nearrow & \text{une liaison } \sigma \\ \searrow & \text{une liaison } \pi \end{matrix}$

Remarque Pour le remplissage, on commence toujours par le niveau le plus bas au niveau le plus haut. Entre π_x et π_y comme si c'était **deux cases quantiques (remplissage en parallèle)**

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Ⓢ M.FAYARD, structure électronique atomes et molécules simples, Hermann, France (1969).
- Ⓢ Y.JEAN, structure électronique des molécules : 1 de l'atome aux molécules simples 3^{ème} Ed. Dunod, Paris, (2003).
- Ⓢ M.GUYMONT, structure de la matière ; Belin Coll., Paris (2003)
- Ⓢ G.DEVORE, Chimie générale : T1, étude des structures, coll. Vuibert Paris (1980).
- Ⓢ M.KARAPETIANTZ, Constitution de la matière, Ed. Mir, Moscou, (1980).