

LA DESCRIPTION DES ELECTRONS D'UN ATOME 3

I – LA MODELISATION DE SCHRÖDINGER ET BORN : H ET HYDROGENOÏDES 3

1-D'où vient l'idée de Schrödinger?..... 3

Einstein (1904) : Photon a une masse : $E = h\nu = mc^2 \Rightarrow$ De Broglie : particule de masse m décrite par une onde $\Rightarrow$ fonction mathématique ψ

2-Équation de Schrödinger : les fonctions d'onde de l'hydrogène et des hydrogénéoïdes..... 4

$H\psi = E\psi$ avec ψ fonction d'onde dépendant des coordonnées sphériques de l'électron

3-Résolution de l'équation de Schrödinger pour l'hydrogène et les hydrogénéoïdes..... 5

3-A- LES NIVEAUX D'ÉNERGIE ACCESSIBLES DE L'ELECTRON DE L'ATOME D'HYDROGENE 5

L'équation n'admet des solutions que pour des valeurs particulières de $E_n \Leftrightarrow$ quantification de l'énergie : $n = n_{be}$ quantique principal

$$E_n = -Z^2 \frac{13,6}{n^2} (eV)$$

3-B- LES FONCTIONS D'ONDE DE L'ELECTRON DE L'ATOME D'HYDROGENE ET HYDROGENOÏDES 6

Pour E_n , n^2 fonctions solution (niveau dégénéré), caractérisées par les **nbres quantiques secondaires l , de 0 à $n-1$ et m_l , entre $-l$ et $+l$**

Notations des fonctions : **ns, np, nd, nf** selon les valeurs de n et l (s pour $l=0$, p pour $l=1$, d pour $l=2$, f pour $l=3$)

Les fonctions = produit d'une fonction angulaire R et radiale Y .

4-Probabilité de présence de l'électron des atomes hydrogénéoïdes 7

L'intégrale de ψ^2 sur un volume V de l'espace représente la **probabilité de présence** de l'électron dans ce volume

4-A- LA FONCTION ANGULAIRE DONNE LA FORME DU NUAGE ELECTRONIQUE 8

La probabilité de présence d'un e^- dans une direction donnée se calcule par l'intégrale de Y^2 sur le volume V :

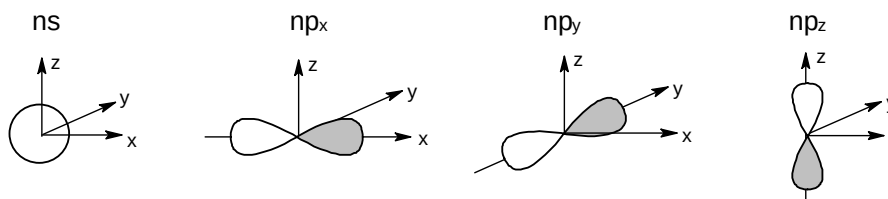
4-B- LA FONCTION RADIALE DONNE LA "TAILLE" DU NUAGE ELECTRONIQUE 9

Les rayons moyens croissent fortement avec n et dépendent peu du nombre quantique l

4-C- ETUDES DE PROBABILITE RADIALE + ANGULAIRE : DES GRAPHIQUES REALISTES 10

Il existe des plans nodaux de probabilité nulle de présence des électrons. Les OA changent de signe à la traversée d'un plan nodal.

5-Bilan et schématisations usuelles (LE S QU'IL FAUT RETENIR !!!)..... 11



II- LES ATOMES POLYELECTRONIQUES.....12

1- Exemple d'un modèle simplificateur, le modèle de Slater : charge effective12

Idee :se ramener à un atome hydrogénoïde.

Noyau + électrons de n inférieur + partie des électrons de même n = noyau fictif de charge $Z_{\text{efficace}} < Z$. Effet des électrons de n supérieurs inexistant dans ce modèle.

Valeurs numériques inexactes mais justifications qualitatives très cohérentes dans ce modèle.

2- Les résultats dans le cadre du « meilleur modèle »12

Nécessaire introduction du nombre quantique de spin, valant +1/2 ou -1/2

L'énergie des électrons dépend de n ET de l $\Leftrightarrow$ levée partielle de dégénérescence des OA .

Forme des OA identique à celles obtenues pour les hydrogénoïdes

3- Règles de remplissage des orbitales atomiques.....14

Règles Hundt, Pauli et Klechkowski.

4-Configuration électronique d'un atome et de ses ions15

4-A- CONFIGURATION ELECTRONIQUE D'UN ATOME15

On appelle **couche de valence** ou **électrons de valence** l'ensemble des électrons de la **couche** de plus grand n + les électrons de la dernière **sous-couche** non pleine.

Justification de l'hypervalence à partir de la 3^e période de la classification car niveaux supérieurs à la valence très proches et accessibles.

Configurations particulières stables : sous-couches pleines ou 1/2 pleines

4-B- CONFIGURATION ELECTRONIQUE D'UN ION16

Pour un ion positif : 1) donner la config de l'atome 2) enlever les e⁻ dans couche de plus grand n

III- LA CLASSIFICATION PERIODIQUE ET LES CONFIGURATIONS ELECTRONIQUES17

1- Architecture de la classification périodique17

Bloc s (2 col) : colonnes 1&2 Bloc d (10 col) : colonnes 3 à 12 Bloc p (6 col) : colonnes 13 à 18 Bloc f (14 col) externalisé (15 cases)

Période = couche de plus grand n. Colonne : même configuration de valence

2- Les groupes d'éléments de la classification périodique.....18

Gaz rares (colonne 18)
inertes

Alcalins (colonne 1)
réducteurs $\Rightarrow A^+$

Alcalino-terreux (colonne 2)
réducteurs $\Rightarrow T^{2+}$

Halogènes (colonne 17)
oxydants $\Rightarrow X^-$

IV- EVOLUTION DES PROP. DES ATOMES DANS LA CLASSIFICATION PERIODIQUE20

1-Rayon des orbitales atomiques et des atomes.....20

Z_{eff} augmente dans une période $\Rightarrow r$ diminue en avançant dans une période,

Z_{eff} diminue fortement par changement de période $\Rightarrow r$ augmente dans une colonne

2- Énergie des orbitales et électronégativité.....21

Plus un rayon d'une OA est faible, plus l'énergie offerte à l'électron est basse $\Rightarrow$ stabilité

$\Rightarrow$ L'électronégativité d'un atome évolue de façon inversement proportionnelle aux rayons.

3-Propriétés périodiques dans la classification23

Les variations de l'affinité électronique et du potentiel d'ionisation sont directement liés à celles de l'électronégativité et donc à celle des rayons

4- Réactivités fonction de la polarisabilité et donc des rayons24

Définitions : polarisabilité = capacité de déformation

Bon groupe partant : neutre $\gg$ chargé ; charge délocalisée par résonance $\gg$ charge localisé ; effets de solvation parfois

majoritaires (hors programme ... en principe...)

Réactivité électrophile $\Leftrightarrow$ conjonction de polarisabilité ET de bon groupe partant.

Réactivité nucléophile $\Leftrightarrow$ conjonction de polarisabilité ET de stabilité de liaison formée.

Espèce chargée souvent + réactive que espèce neutre.