UE CHM 131:

Chimie Générale pour les Sciences de la Vie et de la Nature

Groupe A (BIOS & GEOS)
Mardi 13h 05-15h 55; Amphi 1001

Équipe pédagogique:

EC	Responsables	Adjoints
EC1: CHM 1311	Prof. D. E. PEGNYEMB	Prof. J. NGO MBING
EC2: CHM 1312	Prof. D. NGONO	Prof. P. AMBASSA

❑ OBJECTIF GÉNÉRAL:

- ✓ **Permettre aux étudiants de Biologie de comprendre les bases de la Chimie**

EC1: CHM 1311

Structure de la matière (CM=15 ; TD=22.5 ; crédits=3)

- **Objectif spécifique** :
  - ✓ **Comprendre et maîtriser la constitution de la matière et les bases structurales de la chimie : liaisons chimiques. Géométrie des molécules ou ions**

❑ Contenu :

- ➢ la matière - l'atome ;
- ➢ Les constituants de l'atome ;
- ➢ Le noyau atomique ;
- ➢ Les solutions ;
- ➢ Etat solide ;
- ➢ Liaisons chimiques

❑ Compétences visées :

- ✓ Etre capable de déterminer les configurations électroniques des éléments et des composés diatomiques

❑ Mode d'évaluation :

- ✓ Contrôle continu (QROC- QCM) 30% - Examen de Fin de Semestre (QROC, QCM) 70%

- Mots clés : matière, atome, molécules, isotopes

❑ Bibliographie indicative :

- ✓ **P. W. Atkins, J. De Paula, Chimie Physique, M. Mottet et J. Toullec trad., DeBoeck Université, Paris, 2008**
- ✓ **PAES: La CHIMIE GENERALE, Antoine GEDEON 2014-2015**
- ✓ **Peter Atkins, Loretta Jones: Principes de Chimie. DeBoeck Université, Paris (2008), 4ème Edition, W. H. Freeman, NY (2008)**

CHM 1312 :

Thermodynamique et Equilibres en solution (CM=15 ; TD=22.5 ; crédits=3)

- **Objectif spécifique :**
  - ✓ **Permettre aux étudiants de Biologie de comprendre les bases de la Chimie**

❑ Contenu :

- **la thermodynamique :**
  - **Définitions – Energie – Conventions – Unités – Notion de travail reçu;**
  - **1er Principe de la Thermodynamique – Etat standard – Variations des chaleurs de réaction avec la température ; Calcul des énergies de liaison ;**
  - **Introduction au deuxième principe de la Thermodynamique et ses applications – L'enthalpie libre;**

❑ Contenu :

- ➢ **Équilibres chimiques ;**
- ➢ **Équilibres acido-basiques;**
- ➢ **Les solutions ioniques ;**
- ➢ **Oxydoréduction ;**
- ➢ **Cinétique chimique.**

❑ Compétences visées :

- ✓ **Être en mesure de comprendre et de maîtriser un ensemble de concepts et de préciser les conditions de rupture d'équilibre, maitriser les principes et les méthodes propres à la caractérisation d'une réaction chimique.**

Mode d'évaluation :

- ✓ **Contrôle continu (QROC- QCM) 30% - Examen de Fin de Semestre (QROC, QCM) 70%**
  - **Mots clés : thermodynamique, équilibre, acide – base, oxydoréduction, cinétique.**

❑ Bibliographie indicative :

- ✓ **Yunus A. Michael A. Boles, Thermodynamic and engineering approach, 2009;**
- ✓ **Peter Atkins and Julio de Paula, Elements of Physical Chemistry, Fifth Edition 2009.**

CHM 1311: Structure de la matière

- ✓ **Chap 1: MATIERE- ATOME**
- ✓ **Chap 2: LIAISON CHIMIQUE**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 1: MATIERE- ATOME

- ✓ **Calculer les masses atomiques des éléments;**
- ✓ **Déterminer les formules empiriques des composés;**
- ✓ **déterminer les configurations électroniques des éléments et des composés diatomiques.**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 2: LIAISON CHIMIQUE

- **Savoir construire un schéma ou diagramme de Lewis d'une molécule;**
- **Déterminer la géométrie d'une molécule polyatomiques;**

CHM 1312 : Thermodynamique et Equilibre en solution

- **Chap 3: PREMIER PRINCIPE**
- **Chap 4: SECOND PRINCIPE-EQUILIBRE CHIMIQUE**
- **Chap 5: EQUILIBRES ACIDO-BASIQUES**
- **Chap 6: EQUILIBRES D'OXYDO-REDUCTION**
- **Chap 7: CINETIQUE CHIMIQUE**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 3: PREMIER PRINCIPE

- **Connaitre et maitriser les grandeurs thermodynamiques**
- **Calculer et interpréter les grandeurs thermodynamiques**
- **Savoir comment créer un cycle thermodynamique;**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 4: SECOND PRINCIPE-EQUILIBRES CHIMIQUES

- **Expliquer les variations d'entropie lors d'une réaction chimique ;**
- **Appliquer le principe de Le Châtelier dans les réactions chimiques;**
- **Prévoir le sens d'évolution d'une réaction « inversible » ?**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 5: EQUILIBRES ACIDO-BASIQUES

- **Reconnaître une espèce acide, basique ; forte ou faible ;**
- **Calculer le pH d'une solution aqueuse donnée;**
- **Maitriser la variation de la dissociation d'un acide (d'une base) faible en fonction de la concentration.**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 6: EQUILIBRES OXYDO-REDUCTION

- **Équilibrer une réaction d'oxydo-réduction;**
- **Maitriser le sens d'évolution spontanée d'un un système redox :**

  Ox. 1 + Red. 2 ↔ Ox. 2 + Red. 1 ?
- **Principe de constitution d'une pile**

SAVOIR-FAIRE

❑ Chap 7: CINETIQUE CHIMIQUE

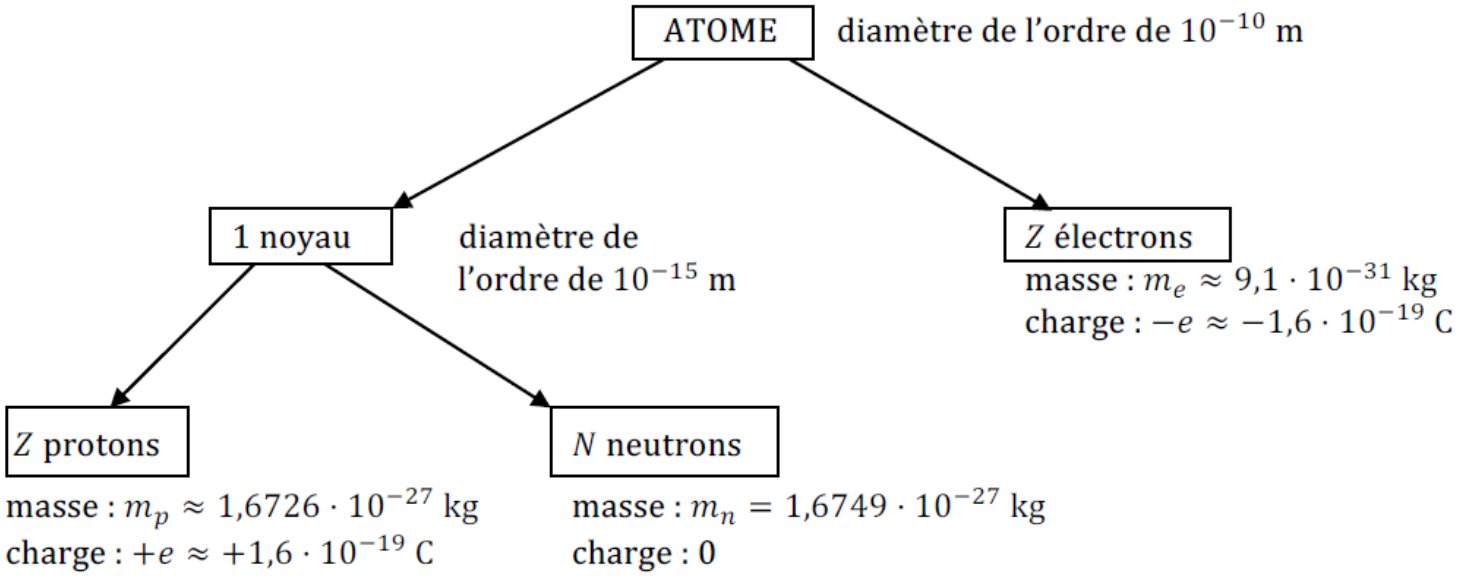
- ➢ **Calculer l'ordre d'une réaction chimique;**
- ➢ **Calculer la vitesse d'une réaction chimique;**
- ➢ **Calculer l'énergie d'activation.**

CHM1311

Chap 1: MATIERE- ATOME

- **Connaitre les articules qui composent un atome;**
- **Savoir écrire la structure électronique d'un atome;**
- **Savoir positionner un atome dans le Tableau de classification périodique;**
- **Maitriser l'évolution des propriétés des atomes dans le Tableau de classification.**

Chap 1: MATIERE- ATOME



Chap 1: MATIERE- ATOME

Z **est appelé nombre de charge ou numéro atomique :**

- **c'est le nombre de protons dans le noyau et d'électrons dans l'atome neutre;**
- **c'est le paramètre essentiel quant à la réactivité chimique de l'atome.**

On appelle élément chimique la famille d'atomes ou d'ions comportant le même numéro atomique.

À chaque élément chimique est associé un nom et un symbole.

Chap 1: MATIERE- ATOME

- ✓ **Deux atomes dont les noyaux ont même numéro atomique Z mais un nombre de neutrons N différent sont appelés des isotopes;**
- ✓ **Ce sont des représentants du même élément chimique.**
- ❑ **Le nombre total de nucléons (protons et neutrons) est noté:**
  - ➢ $A = Z + N$
  - ➢ **Et est appelé nombre de masse;**
  - ➢ **sert à désigner un nucléide.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Pour indiquer le numéro atomique Z et le nombre de masse A d'un nucléide de l'élément Y, on utilise la notation:

$${}^{A}_{Z}\mathrm{Y}. \qquad A = Z + N$$

Avec: **A= nombre de masse**
Z = numéro atomique
= nombre de protons
= nombre d'électrons
N = nombre de neutrons

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exemples d'isotopes:

élément	isotopes stables	Abondance naturelle moyenne (%)
hydrogène	$^{1}_{1}H$ $^{2}_{1}H$	99,9885 0,0115
carbone	$^{12}_{6}C$ $^{13}_{6}C$	98,93 1,07
oxygène	$^{16}_{8}O$ $^{17}_{8}O$ $^{18}_{8}O$	99,757 0,038 0,205
chlore	$^{35}_{17}Cl$ $^{37}_{17}Cl$	75,78 24,22

Chap 1: MATIERE- ATOME

Masse atomique réelle:

- **Masse d'un atome réelle;**
- **s'exprime en kg ou en u.m.a. (u) (unité de masse atomique);**

L'isotope $^{12}_{6}C$ sert souvent de référence:
on postule qu'un atome réel qui pèse 1.99625 x 10-26 kg correspond à 12 u:

$$\Rightarrow 1\ u = 1{,}66054.10^{-27}\ kg$$

$$\Rightarrow 1\ u \approx m_p \approx m_n$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

La mole (mol) :

- Quantité de matière contenant $6{,}02 \times 10^{23}$ entités
  (entités = molécules, atomes ou ions)

Le nombre d'Avogadro:

- Nombre d'atomes contenus dans une mole de carbone;
- Il est noté $N_A = 6{,}02 \times 10^{23}\ mol^{-1}$

La masse molaire atomique (M):

- Masse relative (A_r)exprimée en gramme par mole ($g.mol^{-1}$)
- Les masses molaires atomiques figurent dans le tableau périodique ($M_{Cl} = 35{,}453\ g.mol^{-1}$)

Chap 1: MATIERE- ATOME

Masse molaire d'un élément (u.m.a.) :

- **La moyenne de la masse molaire de ses isotopes pondérée par leur abondance naturelle:**

$$M = \sum_i \frac{\tau_i M_i}{\sum_i \tau_i}$$

$\tau_1, \tau_2, \ldots \tau_n$: % — **Abondance des différents isotopes de l'élément**

$M_1, M_2, \ldots M_n$ — **Masses atomiques des différents isotopes de l'élément**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercices d'application:

1) **Donner les représentations symboliques des trois isotopes de l'oxygène (Z = 8) sachant que leurs nombres de neutrons valent respectivement 8, 9 et 10;**

2) **Calculer la masse atomique moyenne du chlore naturel sachant qu'il contient 75,78% de l'isotope ^{35}Cl et 24,22% de l'isotope ^{37}Cl, ayant respectivement une masse molaire égale à 35 g.mol^{-1}et 37 g.mol^{-1}.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercices d'application:

3) **Quel est le nombre atomique du carbone?**
   - a) 12
   - b) 6
   - c) 13

4) **Quel est le nombre de masse de l'isotope le plus abondant du carbone?**
   - a) 12
   - b) 6
   - c) 13

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercices d'application:

5) Combien de protons et de neutrons cet isotope a-t-il ?

a) 6 protons et 6 neutrons

b) 12 protons et 12 neutrons

c) 6 protons et 7 neutrons

Chap 1: MATIERE- ATOME

Modèles atomiques

- **Un modèle atomique est une représentation graphique (ou théorique) des propriétés de l'atome,**

1. Modèle de J.J Thomson:

l'atome est constitué:

- ✓ **D'une sphère remplie d'une matière positive;**
- ✓ **Des électrons sont incrustés dans cette matière**
  - **Ensemble électriquement neutre.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

2. *Modèle de Rutherford*

Les électrons tournent autour du noyau

- ✓ **Un noyau exerçant une force d'attraction électrostatique ;**
- ✓ **Les électrons sont animés par un mouvement de rotation uniforme**

Modèle en contradiction avec la théorie électromagnétique.

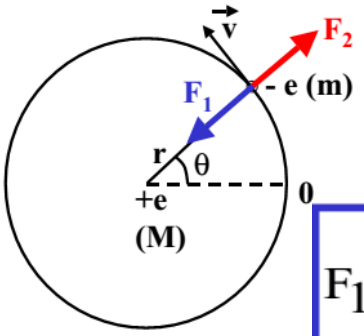
- ➢ **Tout corps en mouvement rayonne de l'énergie (donc perd de l'énergie) et l'électron devait finir par tomber sur le noyau.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

3. *Modèle de Bohr*

Modèle basé sur la répartition des électrons autour du noyau:

- ✓ **Permet de déterminer l'énergie d'un électron dans un état stationnaire.**



L'électron qui décrit une orbite circulaire centrée sur le noyau immobile est soumis à une force d'attraction coulombienne F_1

$$F_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r^2}$$

r = rayon de l'orbite

$\varepsilon_0 = 8{,}85\ 10^{-12}\ C^2\ N^{-1}\ m^{-2}$ (permittivité du vide)

Chap 1: MATIERE- ATOME

3. *Modèle de Bohr*

Cet électron est aussi soumis à la force centrifuge F_2

$$F_2 = m\,\mathbf{a} = mv^2 / r$$

À l'équilibre, on a: $F_1 = F_2$

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad \Rightarrow \quad r = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{mv^2} \quad \textbf{(1)}$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

3. *Modèle de Bohr*

- **L' énergie potentielle de cet électron est donnée par:**

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r}$$

- **L' énergie cinétique de cet électron est donnée par:**

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r}\right)$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

3. *Modèle de Bohr*

- **L'énergie totale = énergie cinétique + énergie potentielle**

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{8 \pi \varepsilon_0 r} \quad ; \quad E_p = \frac{-e^2}{4 \pi \varepsilon_0 r}$$

$$\boxed{E = E_c + E_p = -\frac{e^2}{8 \pi \varepsilon_0 r}} \quad (2)$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Hypothèses de Bohr de l'atome d'hydrogène:

1er postulat de Bohr :

L'électron en mouvement autour du proton dans l'atome d'hydrogène ne peut avoir comme trajectoires que certaines orbites répondant à une relation de quantification du moment cinétique

Chap 1: MATIERE- ATOME

Hypothèses de Bohr de l'atome d'hydrogène:

2ème postulat de Bohr :

Ces orbites sont stables.

Une radiation est émise seulement si un électron transite d'un état d'énergie noté n_i vers un état d'énergie n_f avec n_i supérieure à n_f .

L'énergie de la radiation émise est $\Delta E = h\upsilon$, égale à la différence d'énergie entre les deux états.

Chap 1: MATIERE- ATOME

Hypothèses de Bohr de l'atome d'hydrogène:

2ème postulat de Bohr :

- **Le moment cinétique L est quantifié:**

$$L = m\,v\,r = n\,\hbar :$$

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\,\hbar^2}{m\,e^2}\,n^2 = 0{,}53\,n^2 \quad (\mathring{A})$$

$a_0 = 0.53\ A$: **1er rayon de Bohr**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Hypothèses de Bohr de l'atome d'hydrogène:

2ème postulat de Bohr :

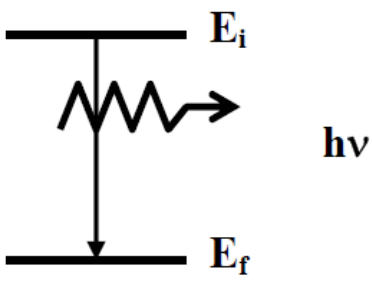
$$\hbar = \frac{\mathbf{h}}{\mathbf{2\pi}} = \mathbf{1.05\,10^{-34}\ J.s}$$

$$E_n = \frac{-m e^4}{8 h^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -13{,}6 \frac{1}{n^2} \quad (eV)$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

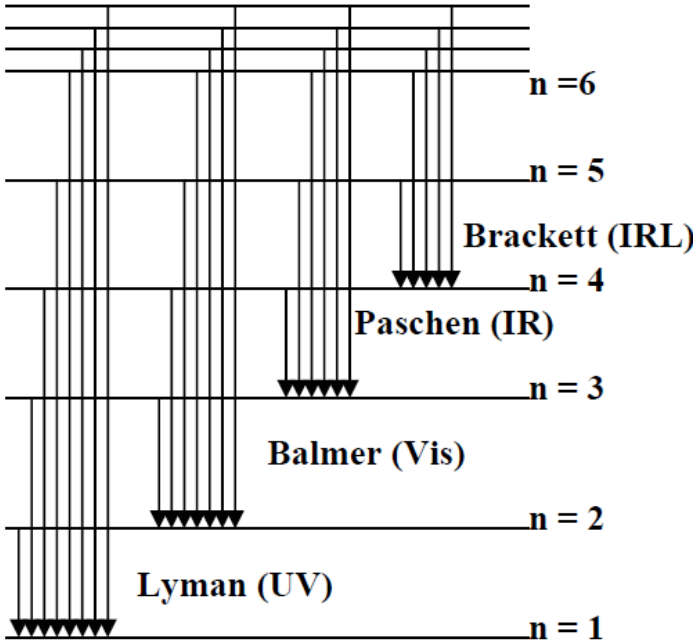
L'électron émet un rayonnement lorsqu'il passe d'une orbite permise stable d'énergie E_i, à une orbite permise aussi d'énergie E_f plus faible.

L'énergie du photon émis est telle que :



$$h\nu = E_i - E_f \Rightarrow \boxed{\frac{1}{\lambda} = R\left[\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right]} \Rightarrow R^{th} = \frac{m\,e^4}{8\,h^3\,c\,\varepsilon_0^2} \approx R^{exp}$$

Chap 1: MATIERE- ATOME



$$E_3 = -\frac{13.6}{3^2} = -1.5\,ev$$

$$E_2 = -\frac{13.6}{2^2} = -3.40\,ev$$

$$E_1 = -\frac{13.6}{1^2} = -13.6\,ev$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

4. Modèle quantique

Nombres quantiques

L'état d'un électron dans un atome:

- ✓ **son énergie;**
- ✓ **ses mouvements autour du noyau;**
- ✓ **la forme de l'orbitale**

est défini par 4 paramètres appelés *nombres quantiques*:

Chap 1: MATIERE- ATOME

4. *Modèle quantique*

a) Le nombre quantique principal n, n ≥ 1:

- **quantifie l'énergie;**
- **définit une couche électronique ou un niveau d'énergie**

$n = 1 \Rightarrow$ couche K ;

$n = 2 \Rightarrow$ couche L

$n = 3 \Rightarrow$ couche M ; *etc...*

Chap 1: MATIERE- ATOME

b) Le nombre quantique secondaire *l*, avec: $0 \leq l \leq n-1$

- **caractérise la « forme » de l'orbitale;**
- **définit une sous-couche électronique, ou un sous-niveau d'énergie:**

$$l = 0 \Rightarrow \text{sous-couche } s$$
$$l = 1 \Rightarrow \text{sous-couche } p$$
$$l = 2 \Rightarrow \text{sous-couche } d$$
$$l = 3 \Rightarrow \text{sous-couche } f$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

c) Le nombre quantique magnétique ml, avec: $-l \leq m_l \leq +l$

- **définit l'orientation de l'orbitale, ou le « nombre de cases quantiques » présentes dans la sous-couche:**

$l = 0 \Rightarrow m_l = 0 \Rightarrow$ 1 seule orientation $\Rightarrow$ 1 orbitale s $\Rightarrow$ 1 case quantique

s

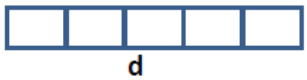
$l = 1 \Rightarrow m_l = -1; 0; 1 \Rightarrow$ 3 orientations $\Rightarrow$ 3 orbitales p de même énergie

$\Rightarrow$ 3 cases quantiques

p

$l = 2 \Rightarrow m_l = -2; -1; 0; +1; +2 \Rightarrow$ 5 orientations $\Rightarrow$ 5 orbitales d de même énergie

$\Rightarrow$ 5 cases quantiques



d

Chap 1: MATIERE- ATOME

d) Le nombre quantique de spin S, avec S = ± ½.

- **définit l'orientation de l'électron, due à la rotation de l'électron sur lui-même;**
- **Deux orientations sont possibles:**

$$S = + ½ (\uparrow) \text{ ou } S = - ½ (\downarrow)$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de fonction d'onde Ψ.

Ψ est une fonction purement mathématique qui n'a aucune signification physique;

- **elle est en fonction des coordonnés de l'électron ;**
- **elle est définie par les 3 nombres quantiques n, *l*, et m_l : $\Psi_{n, l, ml}$**

Exemple:

l'orbitale 2s est représentée par la fonction d'onde : $\Psi_{2, 0, 0}$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de fonction d'onde Ψ.

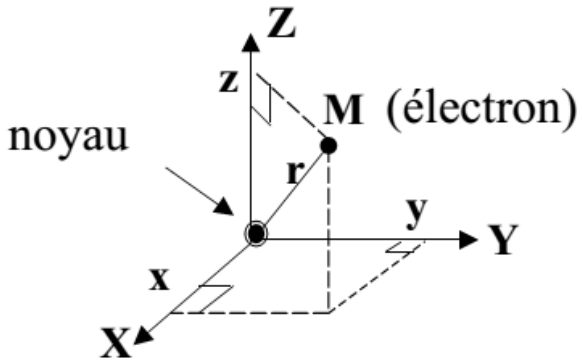
La résolution de l'équation de Schrödinger de la mécanique ondulatoire:

$$\hat{H}\,\psi = E.\,\psi$$

Permet de calculer Ψ.

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de densité de probabilité de présence



L'électron est caractérisé, en plus de son état énergétique, par sa probabilité de présence en un endroit donné.

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de densité de probabilité de présence

La probabilité de trouver l'électron dans un volume dV au point M (x, y, z) est définie par:

$$dP = |\psi|^2 \, dV$$

avec $|\psi|^2$: densité volumique de probabilité de présence ou **densité électronique**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de densité de probabilité de présence

- La notion classique de position est alors remplacée par la notion de densité de probabilité de présence;
- La condition de normalisation permet de dire que la probabilité de trouver l'électron dans tout l'espace est égale à 1

$$\int_{\text{espace}} dP = \int_{\text{espace}} \psi^2 dV = 1$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Représentation graphique des orbitales

- **Une orbitale est représentée par la fonction d'onde $\Psi_{n, l, ml}$**

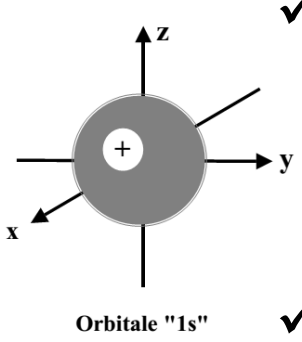
❑ *l'orbitale « s »*

- ✓ **La condition $l = 0$ implique $m_l = 0$;**
- ✓ **les fonctions d'onde qui décrivent ces orbitales s'écrivent:**

  $\Psi_{n, 0, 0}$ ou Ψ_{ns}

Chap 1: MATIERE- ATOME

❑ *l'orbitale « s »*



Orbitale "1s"

- ✓ **Pour les orbitales *s*, la densité de probabilité de présence Ψ^2 à la surface d'une sphère de rayon *r*, est la même dans toutes les directions de l'espace;**
- ✓ **L'orbitale est alors dite de symétrie sphérique;**
- ✓ **Le signe + est le signe de la fonction d'onde Ψ_{1s}**

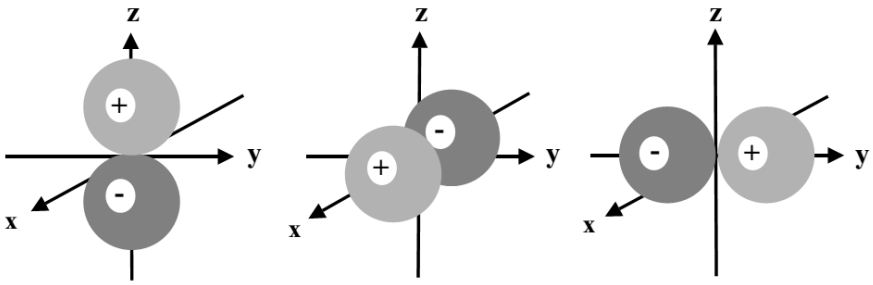
Chap 1: MATIERE- ATOME

❑ *Les orbitale « p »*

- ✓ **Les orbitales *p* (l = 1) peuvent être représentées par deux lobes à peu près sphériques , accolés ayant pour axes de symétrie, les axes x, y et z du trièdre de référence;**
- ✓ **on les appelle donc « np_x », « np_y » et « np_z » selon les valeurs de m_l (n ≥ 2)**

Chap 1: MATIERE- ATOME

❑ *Les orbitale « p »*

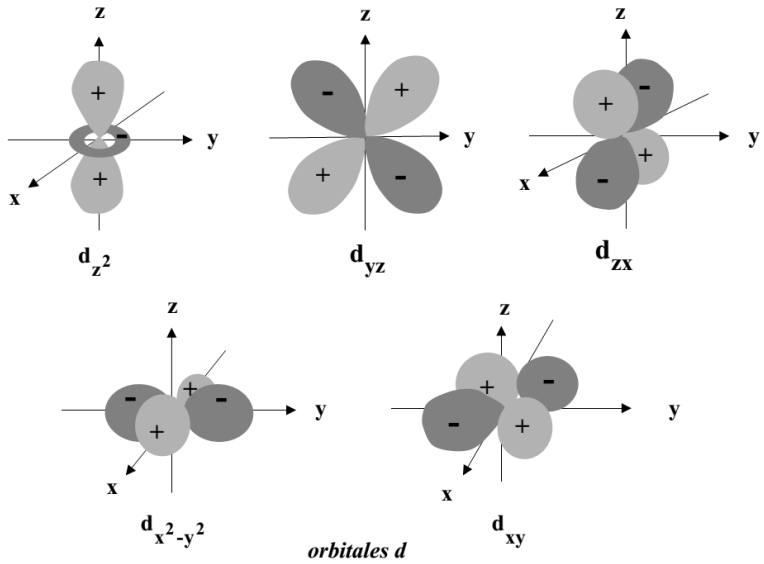


$2p_z$ $2p_x$ $2p_y$

$m_l = 0$ $m_l = \pm 1$

Chap 1: MATIERE- ATOME

- *les orbitale « d »* $l = 2 \Rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1, 2 \ (n \geq 3)$



orbitales d

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercices d'application

1) **Indiquer si les triplets suivants sont VRAIS ou FAUX**
   a) n = 3; l =2; m_l =0
   b) n = 2; l =2; m_l = -1
   c) n = 3; l =0; m_l =3
   d) n = 3; l = -2; m_l =0
2) **Indiquer si les différents symboles suivants caractérisent (VRAIS) ou non (FAUX) une orbitale atomique**
   a) 1p; b) 3f; c) 5d; d) 4s; e) 2d.

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercices d'application

3) Quelle sous-couche a un nombre quantique principal de 4 et un nombre quantique de moment angulaire de 2?

a) 4s; b) 2p; c) 4f; d) 4d

Chap 1: MATIERE- ATOME

Structure électronique des atomes

Répartition des électrons ou configuration électronique

La répartition des électrons dans les orbitales atomiques est régie par:

1) **le principe d'exclusion de Pauli;**
2) **le principe de stabilité (règle de Klechkowski);**
3) **la règle de Hund (règle du spin maximal)**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Structure électronique des atomes

1) Principe d'exclusion de Pauli:

- **Deux électrons d'un même atome ne peuvent pas avoir leurs quartes nombres quantiques identiques;**

En d'autres termes:

- **Deux électrons dans une même orbitale atomique doivent différer par leur nombre quantique de spin, qui ne peut prendre que deux valeurs:**

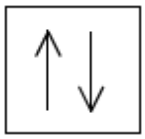
$$m_s = +1/2\ (\uparrow)\ \text{ou}\ -1/2\ (\downarrow)$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Structure électronique des atomes

En d'autres termes:

- **Une orbitale atomique ne peut « contenir » au maximum que 2 électrons qui auront des spins opposés;**
- **ils sont dits antiparallèles ou appariés:**



Si une orbitale ne contient qu'un seul électron, celui-ci est dit non-apparié ou célibataire.

Chap 1: MATIERE- ATOME

Structure électronique des atomes

- **Une orbitale vide constitue une lacune électronique**

2) le principe de stabilité (règle de Klechkowski)

- **A l'état fondamental, un atome se trouve dans son état énergétique le plus stable;**
- **cet état correspond à l'énergie la plus basse.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

2) le principe de stabilité (règle de Klechkowski)

- **Les électrons commencent par saturer les niveaux de plus basse énergie, dans l'ordre:**

"1s", "2s", "2p", "3s", "3p"...

- **c'est la règle dite de «(n + l) minimal »:**

$(n + l) \searrow \Rightarrow E \searrow$

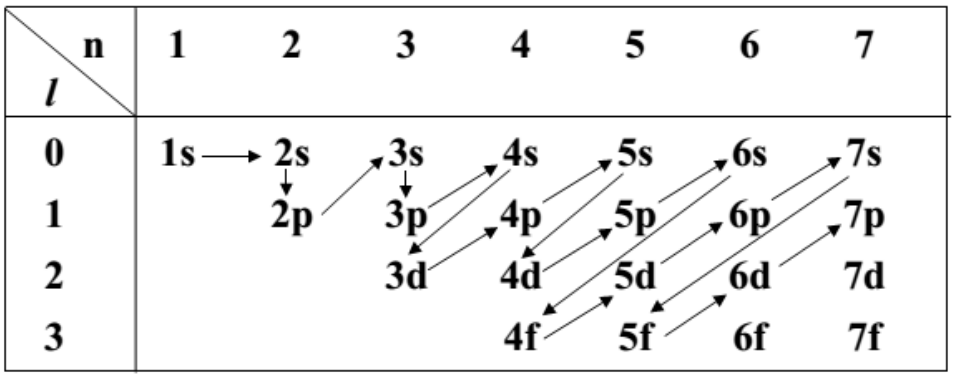
- **Pour les niveaux ayant le même (n +l):**

$n \searrow \Rightarrow E \searrow$

Chap 1: MATIERE- ATOME

2) le principe de stabilité (règle de Klechkowski)

- **la première sous-couche à remplir est celle qui a la somme (n +l) la plus petite;**
- **Ce principe est la *règle de Klechkowski*:**
  - **elle permet d'établir l'ordre de remplissage des orbitales atomiques**



Chap 1: MATIERE- ATOME

Exemples:

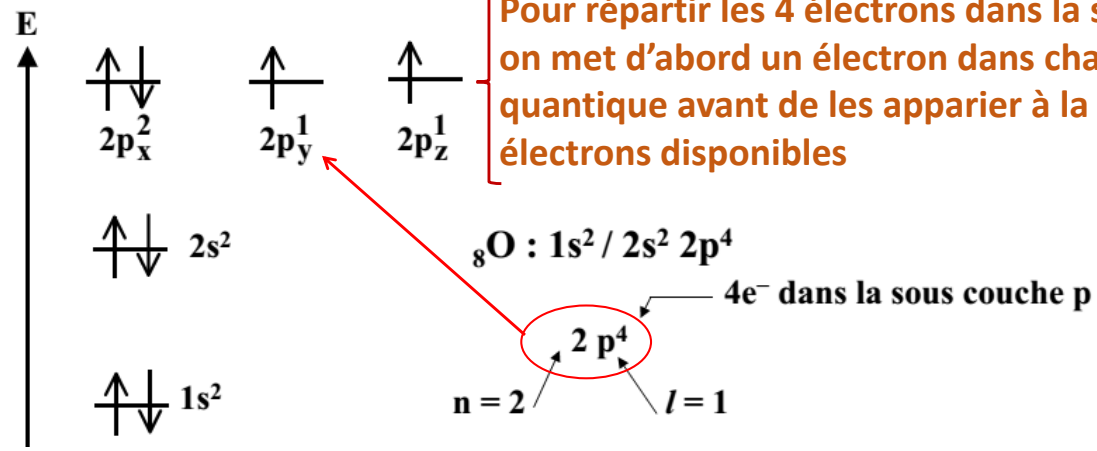
on note le nombre d'électrons en exposant de l'orbitale atomique:

1) ^{8}O (Z = 8, 8 électrons à placer): $1S^2\ 2S^2\ 2P^4$
2) ^{27}Co (Z = 27): $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 4S^2\ 3d^7$
   - ➢ écrire: $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^7\ 4S^2$

Chap 1: MATIERE- ATOME

3) Règle de Hund

- **Lorsque les orbitales ont même énergie (dégénérées), les électrons se répartissent avec un nombre maximum de spins parallèles.**



Chap 1: MATIERE- ATOME

Exceptions à la règle de Klechkowski:

Le chrome (24):

$^{24}Cr: 1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^4 4S^2$ **NON**

$1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^5 4S^1$ **OUI**

Selon ces exceptions,

- **$nd^4(n+1)s^2$ devient $nd^5(n+1)s^1$**

Le cuivre (Z =29):

$^{29}Cu: 1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^9 4S^2$ **NON**

$1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^{10} 4S^1$ **OUI**

- **$nd^9(n+1)s^2$ devient $nd^{10}(n+1)s^1$**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exceptions à la règle de Klechkowski:

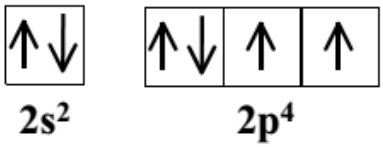
En d'autres termes:

- **Lorsqu'il qu'il reste un nombre d'électrons à partager entre les sous-couches (n+1)s et nd, et que ce nombre permette de remplir à moitié (5 électrons)ou totalement (10 électrons) la sous-couche nd, on la remplit d'abord à moitié ou totalement et on met le seul électron restant dans la sous-couche (n +1)s.**
- **Il en est de même pour les sous-couches (n +2)s et nf et (n+1)d.**

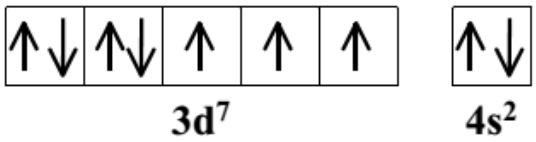
Chap 1: MATIERE- ATOME

Usage des cases quantiques

- pour $_{8}O$: … /



- pour $_{27}Co$: … /



Structure électronique d'un ion:

- **On enlève d'abord les électrons les plus externes, c'est-à-dire ceux qui correspondant à *n* le plus grand**

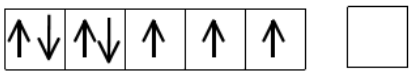
Chap 1: MATIERE- ATOME

Structure électronique d'un ion:

- **Dans le cas des métaux de transition, on enlève d'abord les électrons « s ».**

Exemples:

$Co \longrightarrow Co^{2+} + 2e^-$ - pour $_{27}Co^{2+}$: (25 e^-)



$3d^7$ $4s^0$

$Co \longrightarrow Co^{3+} + 3e^-$ - pour $_{27}Co^{3+}$: (24 e^-)

$3d^6$ $4s^0$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Structure électronique d'un ion:

- **Dans le cas des métaux de transition, on enlève d'abord les électrons « s ».**

Exemples:

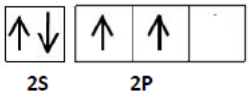
$_{29}Cu^{+} : 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6 / 3d^{10}, 4s^0$

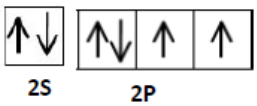
$_{29}Cu^{2+} : 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6 / 3d^{9}, 4s^0$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Propriétés magnétiques d'un atome

- ✓ **Si un atome possède dans son état fondamental, un ou plusieurs électrons célibataires**, il est dit **PARAMAGNETIQUE:**

$1s^2 2s^2 2p^2$ 

$1s^2 2s^2 2p^4$ 

- ✓ **Si un atome ne possède dans son état fondamental**, d'**électrons célibataires**, il est dit **DIAMAGNETIQUE :**

$1s^2 2s^2 2p^6$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de couche de valence

✓ **La couche de valence d'un atome est la couche contenant les électrons possédant le nombre n le plus élevé (les plus externes)**

- **O (Z = 8): $1S^2 2S^2\ 2P^4$: couche de valence: $2S^2\ 2P^4$: 6 électrons**
- **Na (Z = 11): $1S^2 2S^2\ 2P^6\ 3S^1$: couche de valence: $3S^1$: 1 électron**
- **Co (Z = 27): $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^7\ 4S^2$**
  couche de valence: $3d^7\ 4S^2$: 9 électrons

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercice d'application

Parmi les proposition suivantes concernant la théorie quantique et la configuration électronique, répondre par VRAIS ou FAUX

A	La règle de Hund consiste à mettre un maximum de spins parallèles	
B	La couche n = 3 peut contenir jusqu'à 18 électrons	
C	Le remplissage des sous-couches se fait dans cet ordre 6s < 5d < 6p < 7s	
D	La configuration électronique du $_{28}$Ni est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$	
E	La configuration électronique du $_{47}$Ag est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^9$	
F	La configuration électronique du $_{24}$Cr est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$	
G	La configuration électronique du $_{15}$P est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	

Chap 1: MATIERE- ATOME

Notion de couche de valence

Les électrons de la couche de valence:

- **Participent aux liaisons chimiques;**
- **Donnent des informations sur la réactivité des éléments ainsi que sur leurs propriétés physiques;**
- **donnent les informations sur la position (groupe) d'un élément dans le tableau de classification périodique**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Classification périodique des éléments

Classification de Mendeleïev (1869)

- ✓ **Basée sur le classement des éléments par masse atomique croissante**

Classification Moderne

- ✓ **Basée sur le classement des éléments par numéro atomique Z croissant;**
- ✓ **elle s'appuie sur la structure électronique des atomes.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Le tableau de classification périodique est constitué de:

- **7 lignes appelées « périodes »** ;
- **18 colonnes appelées « familles » ou « groupes »**

Les éléments d'une même période:

- ✓ **même valeur du nombre quantique principal maximal *n:***

K (Z = 19): $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ \underline{4}S^1$

V (Z = 23): $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 3d^3\underline{4}S^2$

} $4^{ème}$ période

Chap 1: MATIERE- ATOME

Les éléments appartenant à une même colonne:

- ✓ **Même structure électronique externe**

En d'autres termes:

- ✓ **Même nombre d'électrons sur leur couche de valence:**

Li (Z = 3): $1S^2\ 2S^{\textcircled{1}}$
Na (Z = 19): $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^{\textcircled{1}}$
} 1ère colonne

Be (Z = 4): $1S^2\ 2S^{\textcircled{2}}$
Ca (Z = 20): $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^6\ 4S^{\textcircled{2}}$
} 2ème colonne

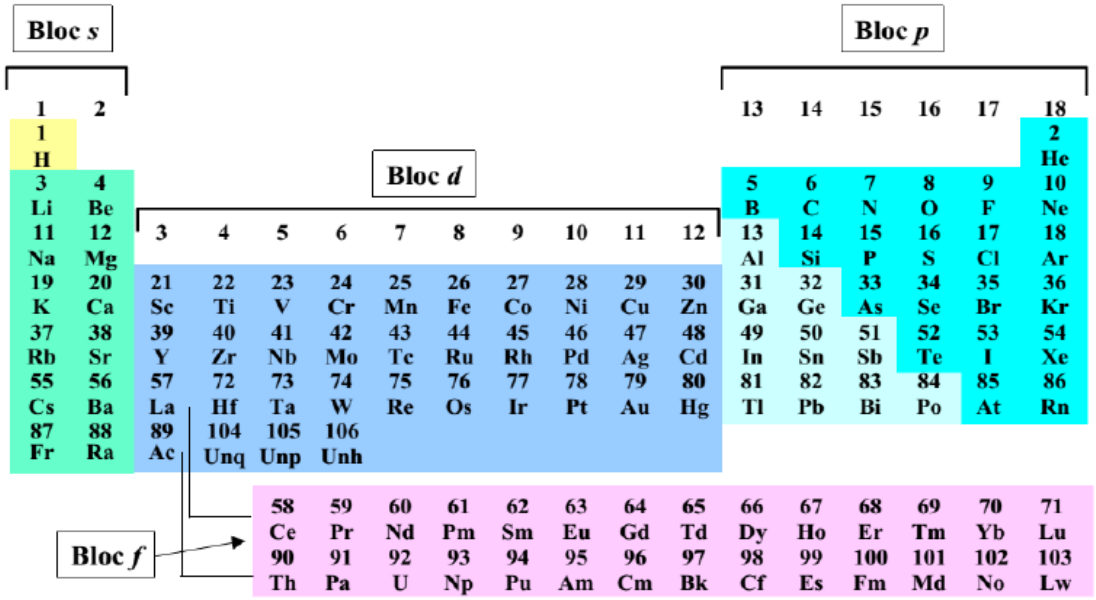
Chap 1: MATIERE- ATOME

la classification périodique:

- ✓ **4 blocs** en fonction de la **structure électronique externe des éléments**:
  - ➢ **Bloc *s***: ns^1 ou ns^2: **colonnes 1 et 2**;
  - ➢ **Bloc *p*: ns^2np^x (avec $1 \leq x \leq 6$): colonnes 13 à 18**
    - le rang de la colonne est donné par: **10 + (2+x) = 12 +x**
  - ➢ **Bloc *d*:** $(n-1)d^xns^y$ (avec $1 \leq x \leq 10$ et $0 \leq x \leq 2$): **colonnes 3 à 12: «*les métaux de transition*»;**
    - **le rang de la colonne est donné par: (x + y);**
  - ➢ **Bloc *f*:** $(n-2)f^x(n-1)d^yns^2$ **(avec n = 6 ou 7; $0 \leq x \leq 14$, y = 0 ou 1 ou exceptionnellement 2 pour $_{90}$Th).**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Les éléments pour lesquels *n* =6, sont appelés les «Lanthanides», et ceux pour lesquels *n* =7, sont appelés les «Actinides» (radioactifs)



Chap 1: MATIERE- ATOME

Propriétés physiques des éléments

On distingue trois grandes catégories:

- ✓ **Les métaux;**
- ✓ **Les non-métaux;**
- ✓ **Les semi-métaux.**

Les métaux

- **Situés à gauche et au centre du tableau périodique: blocs *s* (sauf H), *d*, *f* et une partie du bloc *p* (voir partie bleu-claire du tableau périodique; exemples: Al, Sn, Pb, Po, bi…);**
- **sont tous solides à température ambiante (25 °C), excepté le mercure (80Hg) qui est liquide;**
- **sont bons conducteurs de la chaleur et de l'électricité.**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Les non-métaux

- ✓ **situés à droite du tableau périodique: seconde moitié du bloc *p* (voir partie bleu-vert du tableau périodique; exemples: F, O, N, C, P…);**
- ✓ **solides ou gazeux à température ambiante (25 °C), excepté le brome (Br2)qui est liquide;**
- ✓ **mauvais conducteurs de la chaleur et se sont des isolants électriques. Sauf le carbone qui peut être isolant (quand il est sous forme de diamant) et conducteur (quand il est sous forme de graphite).**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Les semi-métaux

- ✓ **Situés à la frontière des deux catégories précédentes;**
- ✓ **se comportent comme des semi-conducteurs (composés dont la conductivité augmente avec la température, par exemple le Silicium ($_{14}$Si) et le Germanium ($_{32}$Ge) utilisés en électronique).**

Chap 1: MATIERE- ATOME

les familles (colonnes)

Colonne 1: les alcalins, structure électronique externe: ns^1

- ✓ donnent des **cations monovalents**: Li^+, Na^+, K^+, ….
- ✓ donnent des **oxydes basiques**: $Na_2O + H_2O \rightarrow 2NaOH$

Colonne 2: les alcalino-terreux, structure électronique externe est: ns^2

- ✓ donnent des **cations bivalents**: Mg^{2+}, Ca^{2+}, ….
- ✓ donnent des **oxydes basiques**: $CaO + H_2O \rightarrow Ca(OH)_2$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Colonnes 3 à 12: métaux de transition

- **structure électronique externe est: $(n-1)d^x ns^2$ avec $1 \leq x \leq 10$**
  - ✓ **Donnent des cations à valences multiples: Fe^{2+}, Fe^{3+}, Cu^{+}, Cu^{2+}**

Colonne 13: la famille du bore

- **structure électronique externe est: $ns^2\ np^1$**

Colonne 14: la famille du carbone

- **structure électronique externe est: ns^2np^2**
  - ✓ **Forment principalement des liaisons de covalence**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Colonne 15: la famille de l'azote

- **structure électronique externe est: ns2 np3**
  - ✓ **donnent principalement des liaisons de covalence;**
  - ✓ **donnent des oxydes acides: $N_2O_2 + H_2O \rightarrow 2HNO_3$**

Colonne 16: la famille de l'oxygène ou des chalcogènes

- **structure électronique externe est: ns2 np4**
  - ✓ **donnent des anions bivalents: O^{2-}, S^{2-}, ….**
  - ✓ **Donnent des oxydes acides: $SO_3 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$**

Colonne 17: les halogènes

- **structure électronique externe est: $ns^2\ np^5$**
  - ✓ **donnent des anions monovalents: F-, Cl-,Br-, ….**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Colonne 18: les gaz rares

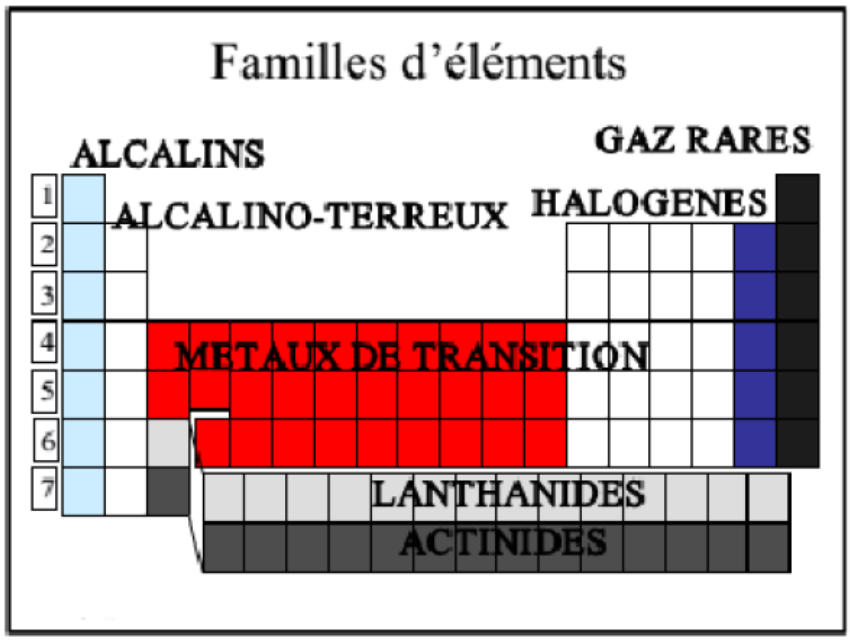
- **structure électronique externe est: $ns^2\ np^6$, sauf He ($1s^2$) La configuration de gaz rare correspond à la saturation de la couche électronique externe;**
  - ✓ **Présentent une grande inertie chimique, mais leur réactivité augmente avec le numéro atomique Z;**

Exemple:

le Xénon ($_{54}Xe$) donne des composés très stables lorsqu'il se combine avec des atomes très électronégatifs comme F ou O (XeF_2, XeF_4, $XeOF_4$, XeO_3).

Chap 1: MATIERE- ATOME

Résumé des groupes (familles) du tableau périodique



Chap 1: MATIERE- ATOME

Exercice d'application

On étudie l'élément du tableau périodique de numéro atomique Z = 25

1.Cet élément est du bloc				
A-s	B-p	C-d	D-f	E-gaz rare
2. Cet élément est un :				
A-Alcalin	B-Métal de transition	C-Alcalino-terreux	D-Actinide	E-Lanthanide
3. Cet élément appartient à la période :				
A-6	B-3	C-4	D-2	E-7
4. Cet élément appartient à la colonne :				
A-12	B-3	C-9	D-18	E-7
5. Combien cet élément possède-t-il d'électrons de type s ?				
A-7	B-11	C-9	D-0	E-6
6. Combien cet élément possède-t-il d'électrons célibataires ?				
A-3	B-6	C-1	D-5	E-0
7. Combien cet élément possède-t-il d'électrons dans sa couche de valence ?				
A-7	B-5	C-0	D-9	E-3

Chap 1: MATIERE- ATOME

Caractéristiques atomiques dans le tableau périodique

Energie de première ionisation: EI_1,

✓ **Énergie qu'il faut fournir à un atome isolé, pris à l'état gazeux A(g) pour lui arracher un électron:** $A_{(g)} \xrightarrow{EI_1} A^+_{(g)} + e^-$ $\quad EI_1 > 0$

Exemple: $Ca_{(g)} \xrightarrow{EI_1} Ca^+_{(g)} + e^-$

Énergie de n^{ième} ionisation EI_n:

✓ **Énergie de la réaction:**

$$A^{(n-1)+}_{(g)} \xrightarrow{EI_n} A^{n+}_{(g)} + e^-$$

$$Ca^+_{(g)} \xrightarrow{EI_2} Ca^{2+}_{(g)} + e^- \qquad EI_2 > EI_1$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Variation de l'énergie d'ionisation dans le tableau périodique:

a) Dans une colonne, lorsque Z augmente (du haut vers le bas):

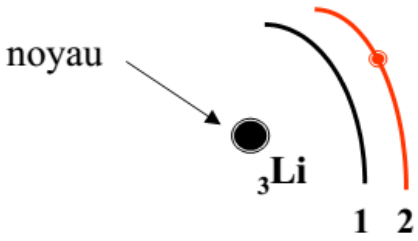
- ✓ **Le nombre de couche augmente;**
- ✓ **la distance noyau-électron périphérique augmente (rayon atomique augmente) → «effet distance »;**
- ✓ **La force d'attraction noyau-électron périphérique diminue (électron de plus en plus libre)**

➢ **Donc l'énergie d'ionisation diminue du haut vers le bas**

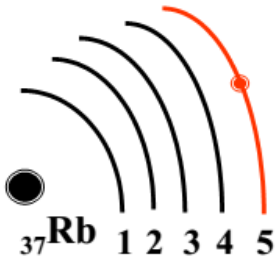
Chap 1: MATIERE- ATOME

Exemple:

$_{3}Li : 1s^2 / \underline{2s^1}$



$_{37}Rb : 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6 / \underline{5s^1}$



Effet distance : $EI_1(Rb) < EI_1(Li)$

$EI_1(Rb) = 402\ kJ.mol^{-1}$; $EI_1(Li) = 520\ kJ.mol^{-1}$

Chap 1: MATIERE- ATOME

b) Dans une période, lorsque Z augmente (de la gauche vers la droite):

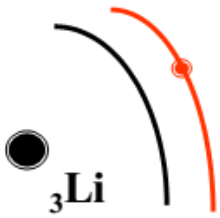
- ✓ **Le nombre de couche est le même; mais Z augmente (le nombre de charge + dans le noyau augmente) → «effet de charge »;**
- ✓ **La force d'attraction noyau-électron périphérique augmente ;**
- ✓ **la distance noyau-électron périphérique diminue (rayon atomique diminue)**

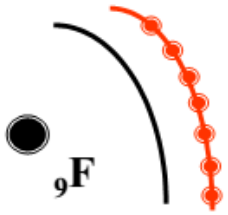
➢ **Donc l'énergie d'ionisation augmente de la gauche vers la droite**

Chap 1: MATIERE- ATOME

Exemple

$_3Li$: $1s^2 / \underbrace{2s^1}$ $_9F$: $1s^2 / \underbrace{2s^2\ 2p^5}$

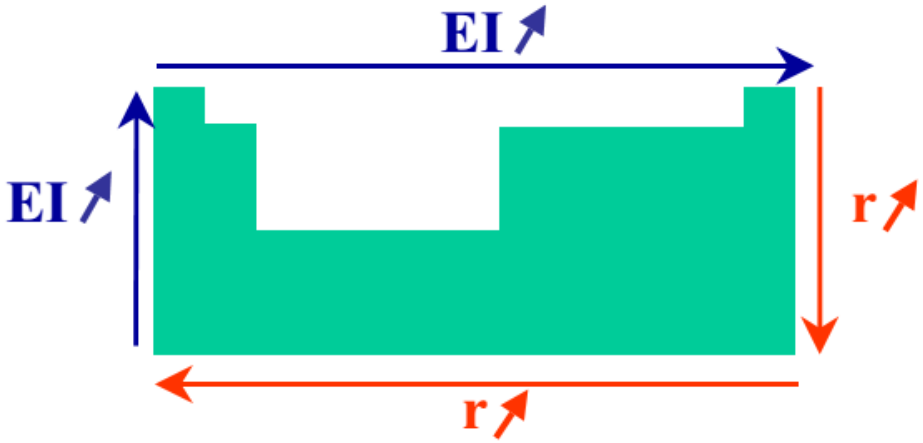




Effet de charge : $EI_1(F) > EI_1(Li)$
$EI_1(F) = 1681$ kJ.mol^{-1} ; $EI_1(Li) = 520$ kJ.mol^{-1}

Chap 1: MATIERE- ATOME

Résumé



Chap 1: MATIERE- ATOME

Affinité électronique: AE

Energie de fixation électronique E_{fix}

✓ L' affinité électronique, **AE**, est l'opposé en « signe » de l'énergie de fixation **E_{fix}** d'un électron sur un atome isolé A(g) : **AE = - E_{fix}.**

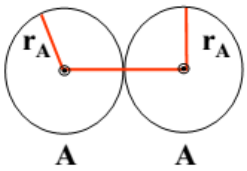
$$A_{(g)} + e^- \xrightarrow{E_{fix.}} A^-_{(g)} \Rightarrow AE = -E_{fix.}$$

Contrairement à l'énergie d'ionisation, l'affinité électronique peut être positive ou négative.

Chap 1: MATIERE- ATOME

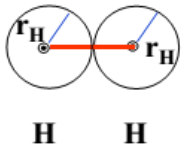
Rayon atomique (rayon de covalence) r_c.

✓ **Moitié de la distance qui sépare les 2 noyaux d'une molécule diatomique homonucléaire liés par une liaison de covalence simple**



$d_{A-A} = 2\ r_A$

Ex : $H_{2(g)}$



$d_{H-H} = 2\ r_H = 74$ pm

$\Rightarrow r_H = 37$ pm

Remarque: **Pour déterminer le rayon atomique de O, on prendra la moitié de la distance O-O dans H_2O_2 (g) (d_{O-O} = 148 pm) et non dans O_2 (g) ($d_{O=O}$ = 121 pm)**

Chap 1: MATIERE- ATOME

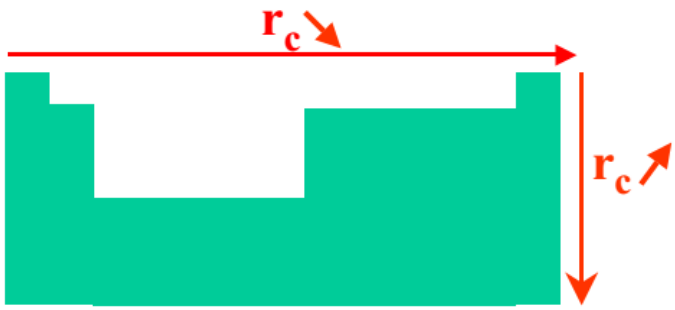
Variation du rayon atomique dans le tableau périodique

a) Dans une colonne, lorsque Z augmente (du haut vers le bas):

- ✓ **Le rayon atomique augmente**

b) Dans une période, lorsque Z augmente (de la gauche vers la droite):

- ✓ **Le rayon atomique diminue**



Chap 1: MATIERE- ATOME

Electronégativité «EN»

- ✓ **Grandeur qui mesure l'aptitude d'un élément à attirer vers lui les électrons (doublet) au sein d'une liaison de covalence, entrainant ainsi l'apparition de charges partielles.**

$$\overset{\delta^+}{A} \text{———} \overset{\delta^-}{B}$$ **(B est plus électronégatif que A)**

Echelles d'électronégativité

a) Echelle de Mulliken

- ✓ **Est égale à la moyenne arithmétique de l'énergie de première ionisation EI_1 et de l'affinité électronique AE.**

$$EN = \frac{(EI_1 + AE)}{2} \qquad \text{(en eV)}$$

Chap 1: MATIERE- ATOME

b) Echelle de Pauling

- ✓ **Basée sur les énergies de dissociation des liaisons des molécules diatomiques simples: E_{A-A}, E_{B-B} et E_{A-B}: énergies en KJ/mol pour rompre les liaisons A-A, B-B et A-B**
- ✓ **La différence d'électronégativité entre les éléments B et A est donnée par:**

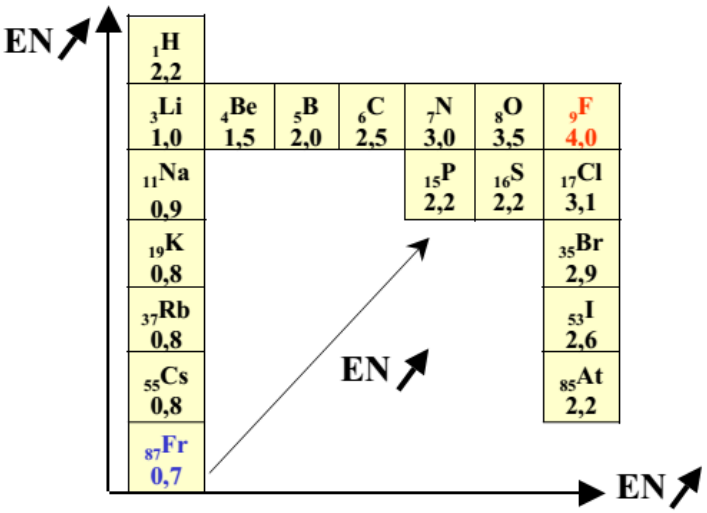
$$\left| EN_{(B)} - EN_{(A)} \right| = \Delta^{1/2}$$

Δ = énergie de résonance

Δ est exprimé en eV

L'échelle de Pauling est une échelle relative. Dans cette échelle, le Fluor est l'élément le plus électronégatif: EN (F) = 4.0 $eV^{1/2}$

Chap 1: MATIERE- ATOME

Variation de l'électronégativité dans le tableau périodique

- **l'électronégativité augmente de gauche à droite dans une période et de bas en haut dans une colonne.**