

La structure électronique des atomes

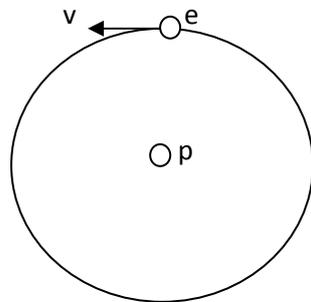
Ils sont constitués d'un noyau autour duquel tournent des électrons. Le noyau est lui-même formé par des protons et des neutrons.

Leurs nombres sont liés par la relation $A = Z + N$. Z est le nombre de charges, protons ou électrons, N est le nombre de neutrons et A est le nombre de nucléons. C'est aussi le nombre de masse en considérant que la masse d'un noyau est sensiblement égale à la masse d'un neutron et très grand devant la masse d'un électron.

	Masse en kg	Charge en C
électron	$9,1 \cdot 10^{-31}$	$-1,6 \cdot 10^{-19}$
proton	$1,67 \cdot 10^{-27}$	$1,6 \cdot 10^{-19}$
neutron	$1,67 \cdot 10^{-27}$	0

1. Le modèle de Bohr

On considère l'atome d'hydrogène comme un petit système planétaire :



L'électron a une énergie cinétique $E_c = \frac{1}{2}mv^2$. Il est soumis à une force centripète $F = \frac{mv^2}{r}$ et à force d'attraction électrostatique, dite loi de Coulomb, $F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$. On a l'égalité de ces 2 forces

$$F_c = F_e \text{ que l'on peut écrire sous la forme : } E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$$\text{L'énergie de l'atome est donnée par la relation } E = - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Pour un rayon, rayon à l'état fondamental, $r_0 = 0,053 \text{ nm}$, on calcule $E = -13,6 \text{ eV}$.

En fait, ce qui est remarquable et ne peut être expliqué par la physique classique, c'est que l'électron tourne sur une orbite stable. D'où, on a $E = - \frac{E_0}{n^2}$ avec n qui est le numéro de la couche.

$$\frac{E_{\text{ionisation}} \quad n \rightarrow \infty}{n = 4, E = -0,85 \text{ eV}}$$

$$n = 3, E = -1,51 \text{ eV}$$

$$n = 2, E = -3,4 \text{ eV}$$

$$n = 1, E = -13,6 \text{ eV}$$

2. La mécanique quantique et la loi de de Broglie

La physique ondulatoire ou mécanique quantique fondée par de Broglie justifie la structure et la stabilité des atomes. Elle permet de développer une nouvelle physique contemporaine.

De Broglie généralise la loi de Planck $E = h\nu$ à toutes les particules. On peut associer une onde à une particule, telle que $\lambda = \frac{h}{p}$ où h est la constante de Planck et p la quantité de mouvement de la particule. On notera que $p = mv$ en physique non-relativiste.

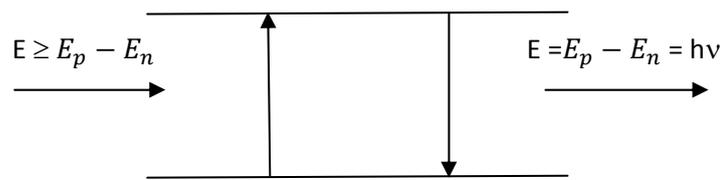
Les orbites des électrons sur une couche sont telles que $2\pi r = n\lambda$ d'où $v = \frac{nh}{2\pi mr}$.

Dans ces conditions, $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2}m \left(\frac{nh}{2\pi mr} \right)^2$

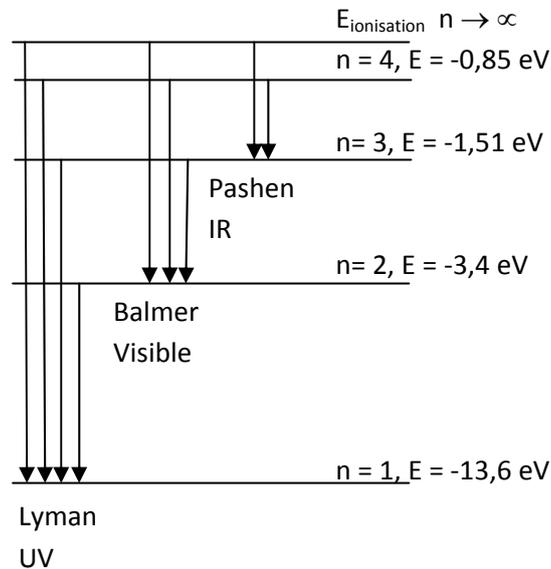
et donc $r = n^2 \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$ avec $r_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0,053 \text{ nm}$

3. Le spectre des atomes

L'atome en recevant de l'énergie va passer de l'état fondamental à l'état excité. Il retombera ensuite dans l'état fondamental en redonnant exactement l'énergie entre les 2 états.



Pour l'atome d'hydrogène, on a le spectre suivant :



En faisant passer la lumière émise par un élément à travers un prisme ou un réseau, elle se décompose. Le spectre d'émission est une signature des atomes.

4. Les nombres quantiques associés aux électrons

Chaque électron est caractérisé par 4 nombres quantiques n , l , m et s .

- n est le nombre quantique principal, il caractérise le numéro de la couche électronique. n est un nombre entier non nul $\in \mathbb{N}^*$
- l est le nombre quantique secondaire, il est compris entre 0 et $n-1$.
- m est le nombre quantique magnétique, il est compris entre $-l$ et $+l$.
- s est le nombre quantique de spin

2 électrons d'un même atome ont au moins un nombre quantique différent.

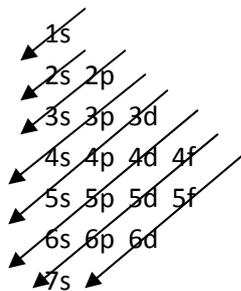
Exemple : $n = 4$

l	m	s
0	0	$\pm \frac{1}{2}$
1	0, ± 1	$\pm \frac{1}{2}$
2	0, $\pm 1, \pm 2$	$\pm \frac{1}{2}$
3	0, $\pm 1, \pm 2, \pm 3$	$\pm \frac{1}{2}$

On caractérise ainsi les sous – couches quantiques s , p , d et f .

	Nombre de cases	Nombre d'électrons
s	1	2
p	3	6
d	5	10
f	7	14

Le remplissage des Z électrons d'un atome suit pour l'essentiel la règle de Klechkowski :



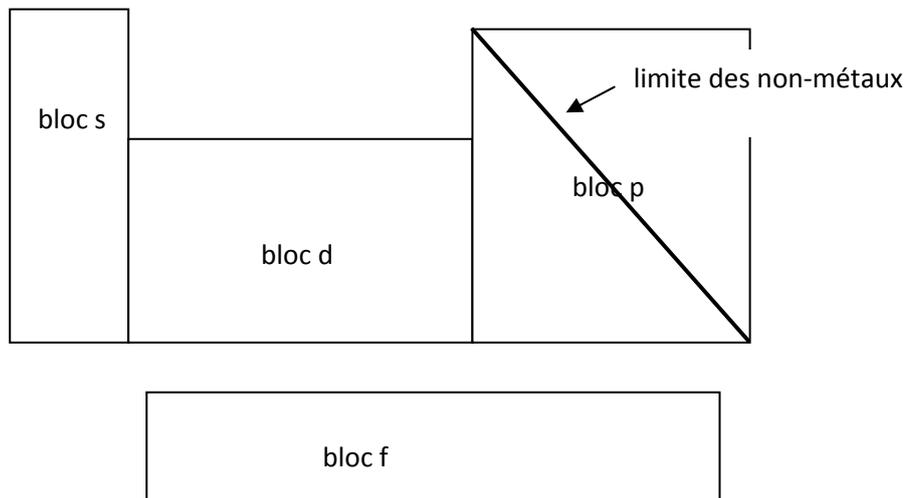
Exemples :

H	1	$1s^1$	\uparrow							
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"> <tr> <td>$\uparrow\downarrow$</td> <td>\uparrow</td> <td>\uparrow</td> <td></td> </tr> </table> <table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle; margin-left: 20px;"> <tr> <td>\uparrow</td> <td>\uparrow</td> <td>\uparrow</td> </tr> </table>	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow		\uparrow	\uparrow	\uparrow
$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow								
\uparrow	\uparrow	\uparrow								
Hybridation sp^3										
Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$	<table border="1" style="display: inline-table; vertical-align: middle;"> <tr> <td>$\uparrow\downarrow$</td> <td>$\uparrow\downarrow$</td> <td>\uparrow</td> <td>\uparrow</td> <td>\uparrow</td> <td>\uparrow</td> </tr> </table>	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	
$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow					

5. Conséquences

a. La classification périodique et ses blocs

Les éléments sont rangés par ordre de numéro atomique croissant dans une classification introduite par Mendeleïev en 1869, bien qu'à l'époque l'existence de l'électron n'est pas encore connue. Il inverse certains éléments classés par masse atomique croissante et place l'un en dessous de l'autre des éléments de propriétés chimiques semblables.



Le bloc s contient les métaux alcalins avec 1 électron sur la couche externe et les métaux alcalino-terreux avec les électrons s.

Le bloc p contient les éléments non-métalliques. C'est le cas du carbone ${}^6\text{C}$, de l'oxygène ${}^8\text{O}$, de l'azote ${}^7\text{N}$

La dernière colonne est celle des gaz rares pour lesquels la structure électronique ns^2np^6 est particulièrement stable. C'est ce qu'on appelle la règle de l'octet.

Le bloc d correspond aux métaux de transition avec le fer ${}^{26}\text{Fe}$, le cuivre ${}^{29}\text{Cu}$...

Le bloc f est celui des lanthanides avec en particulier l'uranium ${}^{92}\text{U}$.

b. Les liaisons de covalence

Les atomes peuvent s'associer par mise en commun des électrons et forment des liaisons de covalence.

C'est le cas de H_2 : les 2 électrons $1s^1$ de chaque atome est partagé par les 2 atomes d'où ils ont la structure $1s^2$.



De façon analogue, la mise en commun des électrons permet de former le chlore moléculaire Cl_2 :



On aura la même structure du chlore pour le chlorure d'hydrogène HCl .

On aura l'eau H₂O :



l'ammoniac :



et le méthane CH₄ :



Chaque paire d'électron, liante ou non-liante occupe une place dans l'espace.

La molécule de méthane est donc logiquement tétraédrique, chaque liaison C-H étant équivalente.

La présence des paires non-liantes implique que la molécule d'ammoniac est pyramidale et la molécule d'eau angulaire. Expérimentalement, les paires non-liantes repoussent les paires liantes. Les angles sont donc de 109°30' pour le méthane, 107° pour l'ammoniac, 104°30' pour l'eau.

c. Les ions simples

L'association d'un métal et d'un non-métal ne peut permettre la formation d'une liaison de covalence. Le métal perd un ou plusieurs électrons, il a un caractère électropositif. Le non-métal lui en gagne, il est électronégatif.

Ils acquièrent souvent la structure électronique du gaz rare le plus proche.

La stabilité de la structure ionique est assurée par l'attraction électrostatique entre des charges de signes opposés suivant la loi de Coulomb.

On aura ainsi :

Le chlorure de sodium (Na⁺ + Cl⁻). Na⁺ a la structure du néon, Cl⁻ la structure de l'argon.

De façon analogue, on aura le chlorure de baryum (Ba²⁺ + 2 Cl⁻) et le chlorure l'aluminium (Al³⁺ + 3 Cl⁻).

A partir de là, on peut facilement comprendre la formation d'ions composés comme l'ion ammonium NH₄⁺, l'ion hydroxyde OH⁻, l'ion sulfate SO₄²⁻...

d. La liaison métallique

Les métaux sont entourés d'électrons libres qui n'appartiennent pas en propre à un atome mais circulent dans l'ensemble du matériau et forment un nuage électronique. Les ions métalliques positifs et ces électrons assurent la stabilité et l'électroneutralité de l'ensemble.