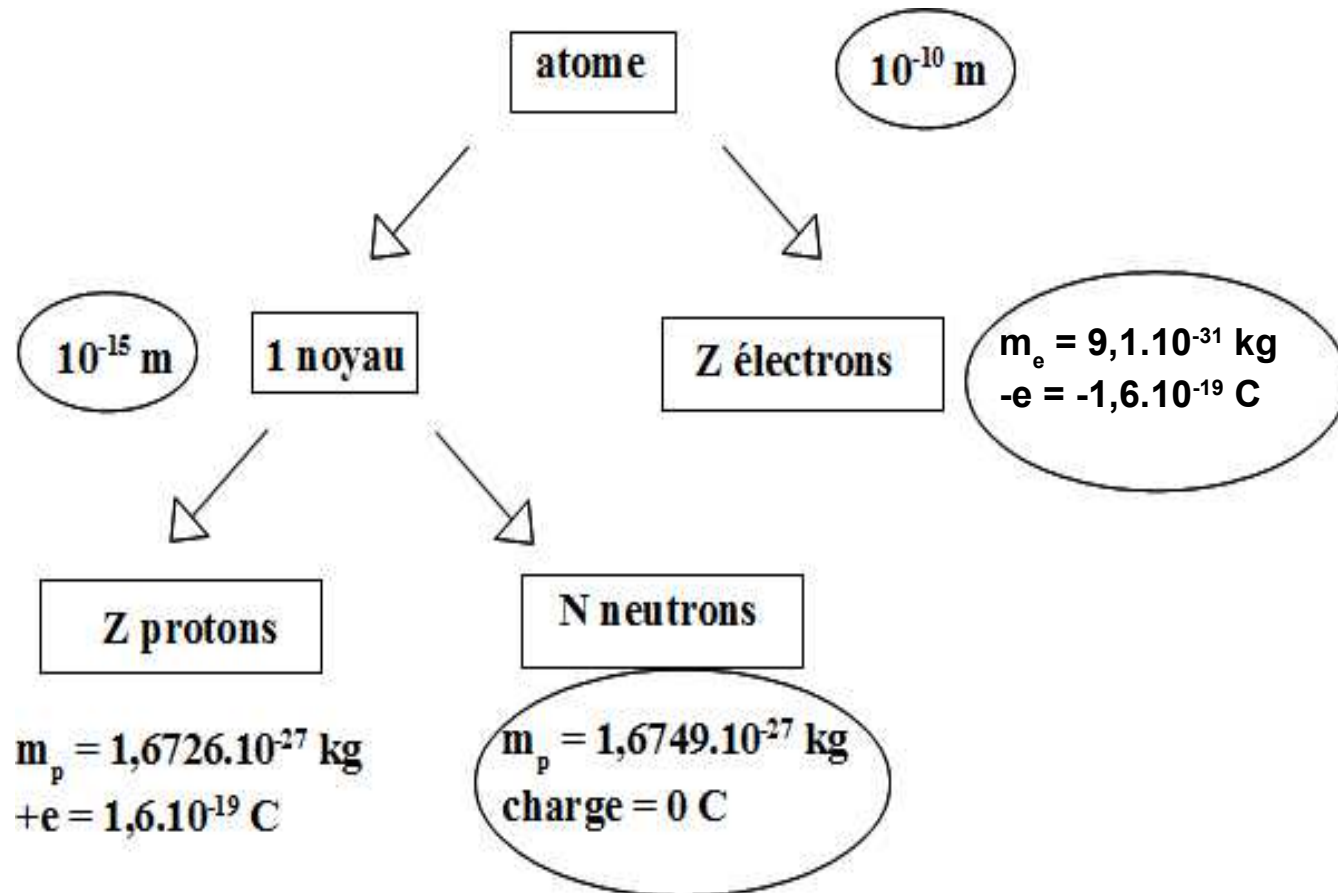


Architecture de la matière

Chapitre 1 : Description quantique des atomes

I) L'atome

1) Constitution d'un atome



2) Autour de Z

Le nombre de protons Z va servir à définir précisément les atomes étudiés.

A chaque **atome** on associe un nombre de protons Z .

On appelle **élément chimique** l'ensemble des atomes comportant le même nombre de protons.

Il est désigné par un symbole comportant une ou deux lettres.

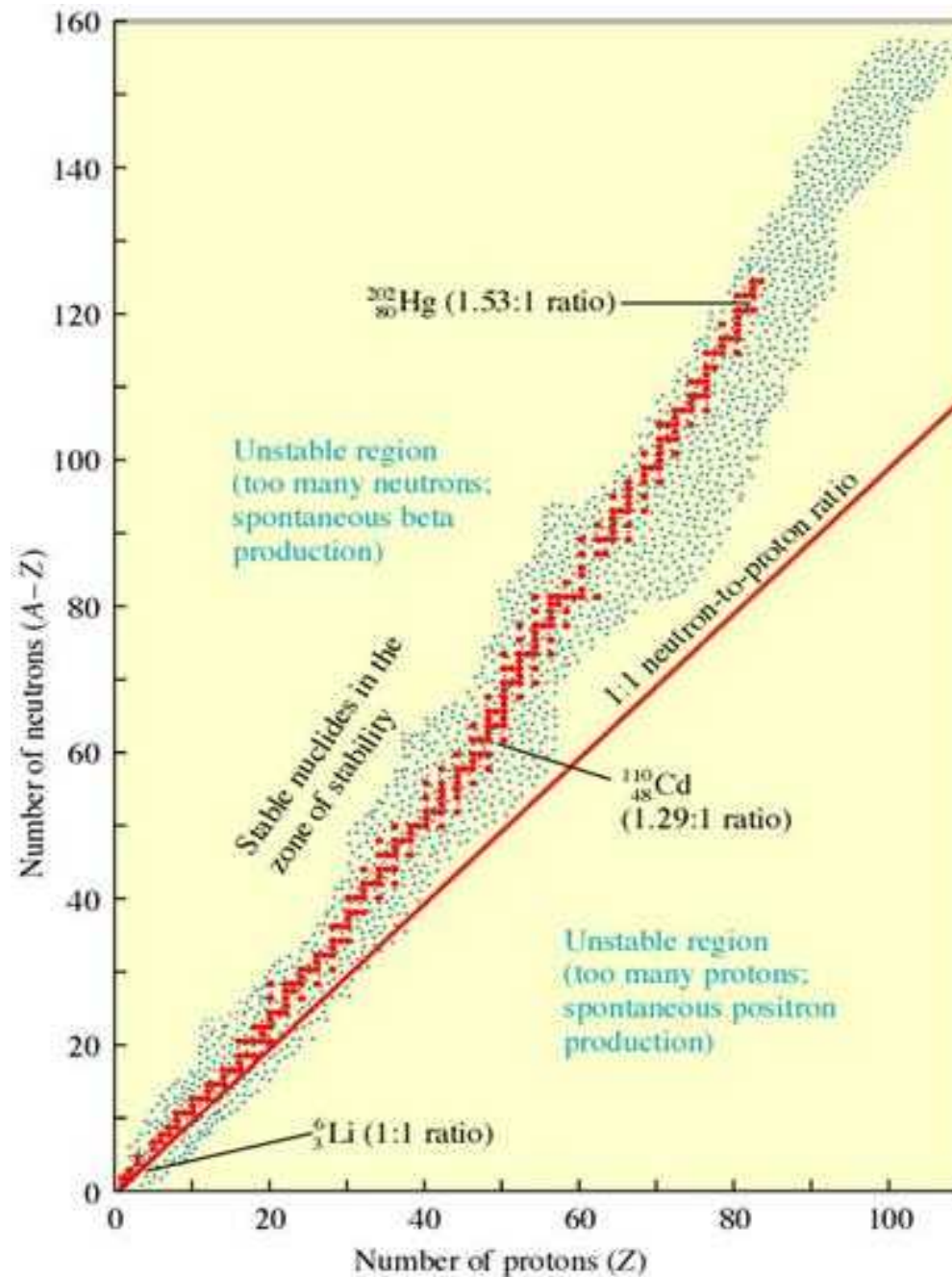
On appelle **isotopes** deux atomes dont le nombre de neutrons est différents.

3) Les isotopes

Les différents types d'isotopes :

- Des isotopes **naturels stables**
- Des isotopes **naturels radioactifs**, qui changent de structure par désintégration nucléaire: ce sont des **radioisotopes**.
- Des isotopes **artificiels radioactifs**, qui sont obtenus par bombardement avec des particules. Leur durée de vie est très courte.

Courbe de stabilité



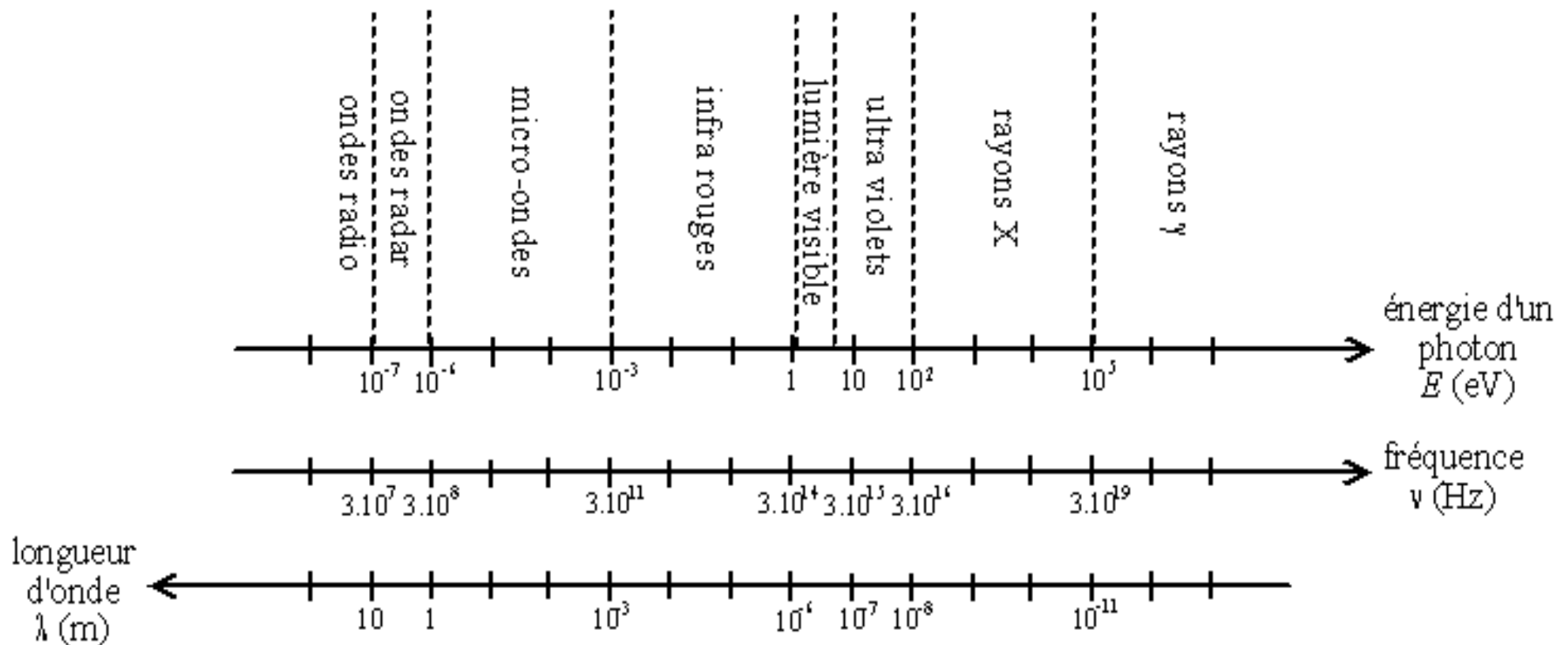
L'abondance isotopique

L'abondance isotopique (ou abondance naturelle) correspond aux proportions (en quantité de matière) de chaque isotope d'un même élément dans un échantillon naturel.

| | ^{12}C | ^{13}C | ^{14}C |
|----------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| stabilité | stable | stable | radioactif |
| abondance naturelle | 0.989 | 0.011 | $< 10^{-12}$ |

II) Quantification de l'énergie

1) Les différents types de transition



Interactions

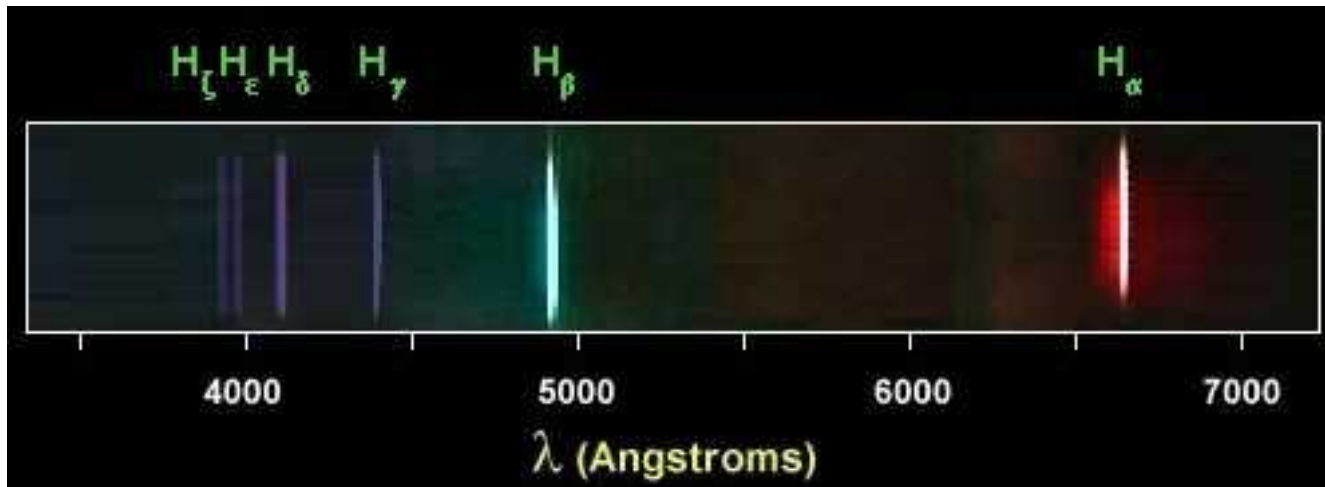
| | λ | ν | <i>type de radiation</i> |
|---------------------------|-------------|--------------------------|--|
| RMN sous quelques teslas | 0,1 à 100 m | 3 à 3000 MHz | ondes radio et micro-ondes |
| vibrations-rotations | 0,2 à 50 mm | 6 à 1500 GHz | infrarouge |
| transitions électroniques | > 10 nm | $< 3 \times 10^{16}$ Hz | UV proche, visible et IR proche |
| ionisation | 0,3 à 30 nm | 10^{16} à 10^{18} Hz | rayons X (<i>mous</i> pour les niveaux de valence, <i>durs</i> pour les niveaux profonds) |

Relation énergie – fréquence

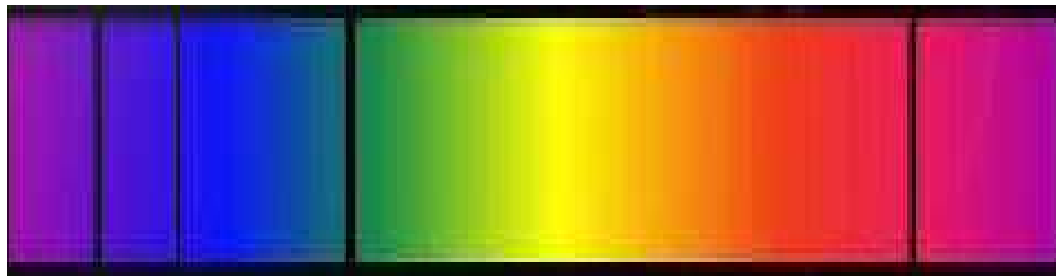
$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda$$

2) Etude de l'atome d'hydrogène

Spectre d'émission de l'atome d'hydrogène :



Spectre d'absorption de l'atome d'hydrogène :



3) Les orbitales atomiques et les nombres quantiques

La mécanique classique ne peut s'appliquer aux particules comme les électrons → il est **impossible de localiser** avec précision la position de l'électron autour du noyau.

On traite alors la particule comme une **onde**, dont l'expression du carré du module aura une signification physique: elle donnera la **densité de probabilité de présence**.

Exemples d'orbitales atomiques

| Type d'O.A. | Partie radiale $R_{n,l}(r)$ |
|-------------|---|
| 1s | $R_{1,0}(r) = (Z/a_0)^{3/2} 2 \exp(-\omega/2)$ |
| 2s | $R_{2,0}(r) = (Z/a_0)^{3/2} (1/2\sqrt{2})(2 - \omega)\exp(-\omega/2)$ |
| 2p | $R_{2,1}(r) = (Z/a_0)^{3/2} (1/2\sqrt{6})\omega \exp(-\omega/2)$ |
| 3s | $R_{3,0}(r) = (Z/a_0)^{3/2} (1/9\sqrt{3})(6 - 6\omega + \omega^2)\exp(-\omega/2)$ |
| 3p | $R_{3,1}(r) = (Z/a_0)^{3/2} (1/9\sqrt{6})(4 - \omega)\omega \exp(-\omega/2)$ |
| 3d | $R_{3,2}(r) = (Z/a_0)^{3/2} (1/9\sqrt{30})\omega^2 \exp(-\omega/2)$ |

où $\omega = 2Zr/na_0$; $a_0 = 52,92$ pm et Z est le numéro atomique

| l | m_l | Partie angulaire $Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$ |
|-----|---------|--|
| 0 | 0 | $1/(2\sqrt{\pi})$ |
| 1 | 0 | $(1/2)\sqrt{3/\pi} \cos \theta$ |
| 1 | ± 1 | $\pm (1/2)\sqrt{3/2\pi} \sin \theta . e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | 0 | $(1/4)\sqrt{5/\pi}(3 \cos^2 \theta - 1)$ |
| 2 | ± 1 | $\pm (1/2)\sqrt{15/2\pi} \cos \theta \sin \theta . e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | ± 2 | $(1/4)\sqrt{15/2\pi} \sin^2 \theta . e^{\pm 2i\varphi}$ |

4) Utilisation des nombres quantiques

a) Le nombre quantique principal n

C'est un **entier strictement positif**.

Il est utilisé notamment dans l'expression des niveaux d'énergie électroniques de l'atome d'hydrogène :

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

b) Nombre quantique secondaire (ou azimutal) l

Il va définir la **forme des orbitales atomiques**.

Il prend des **valeurs entières positives, comprises entre 0 et n-1**.

On fait en général correspondre à chaque valeur de l une lettre :

$l = 0 \rightarrow s$ (sharp)

$l = 1 \rightarrow p$ (principal)

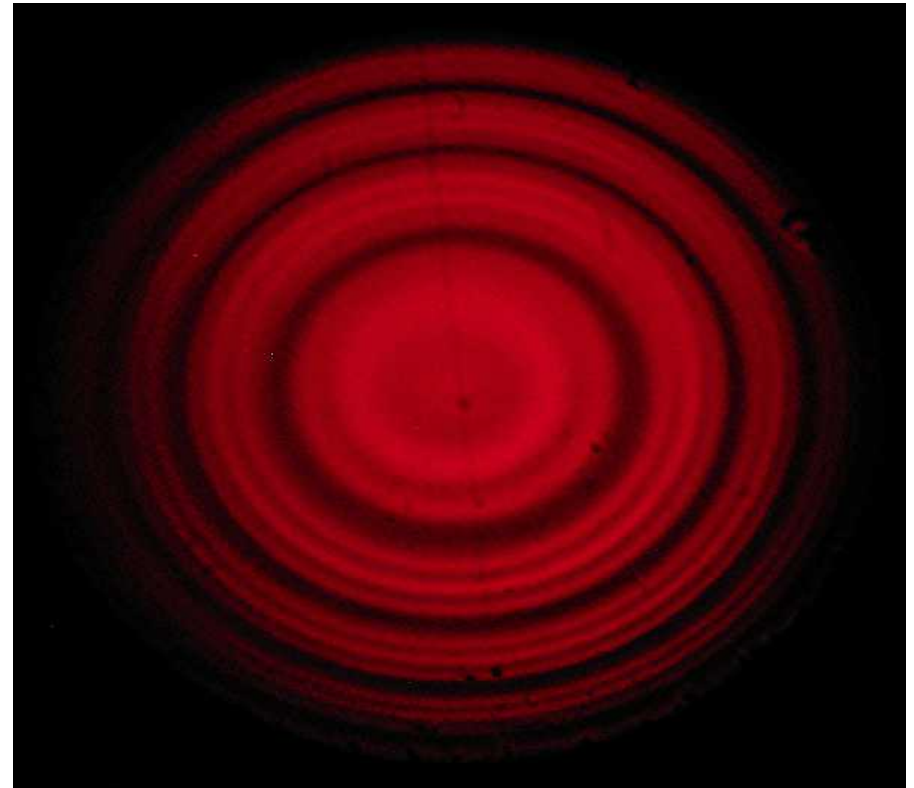
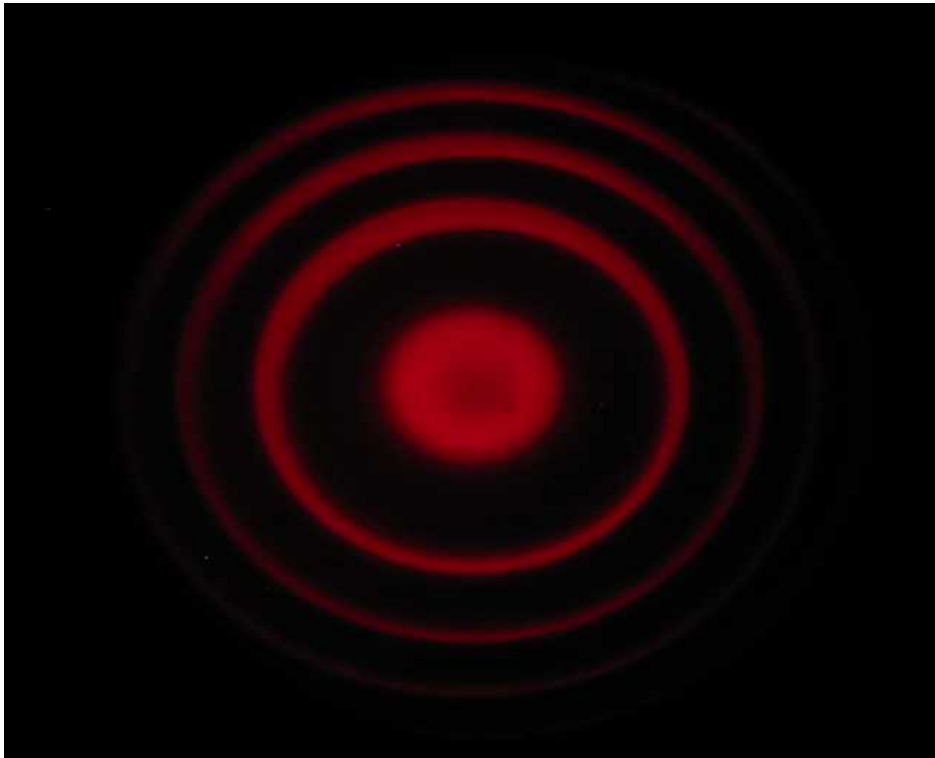
$l = 2 \rightarrow d$ (diffuse)

$l = 3 \rightarrow f$ (fundamental)

c) Nombre quantique magnétique m_l

Il peut prendre des **valeurs entières comprises entre $-l$ et $+l$** .

Ce terme provient de l'**effet Zeeman** :

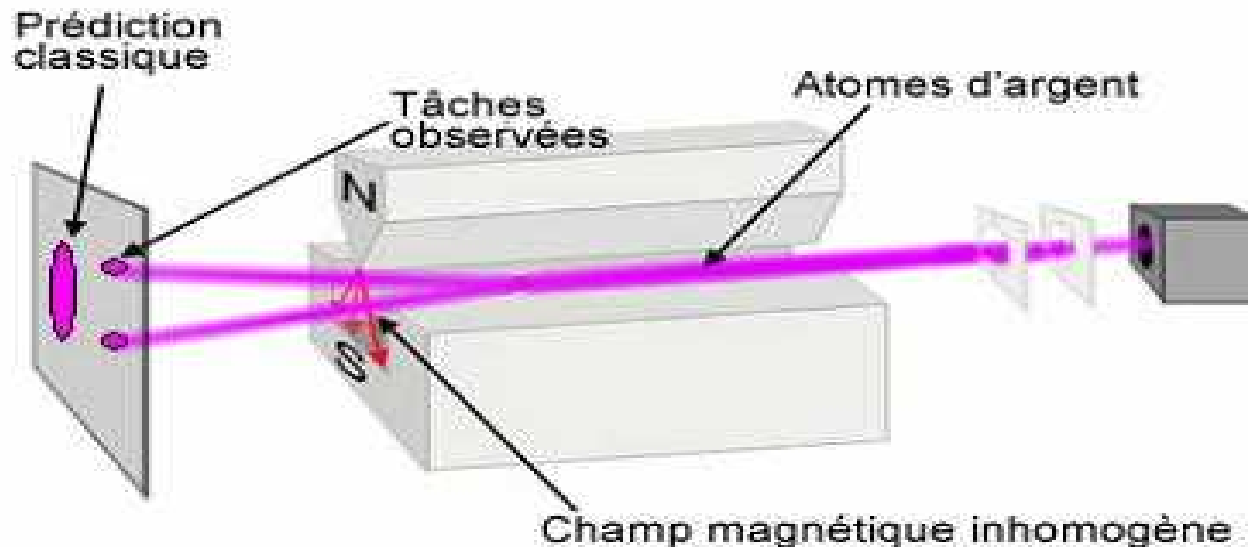


d) Exemples d'orbitales atomiques

5) Le spin m_s

Ce nombre a été introduit pour expliquer certaines propriétés des atomes que ne pouvaient expliquer les 3 autres nombres quantiques.

Expérience de Stern et Gerlach (1922) :



6) Comment établir une configuration électronique ?

Le principe de Pauli

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

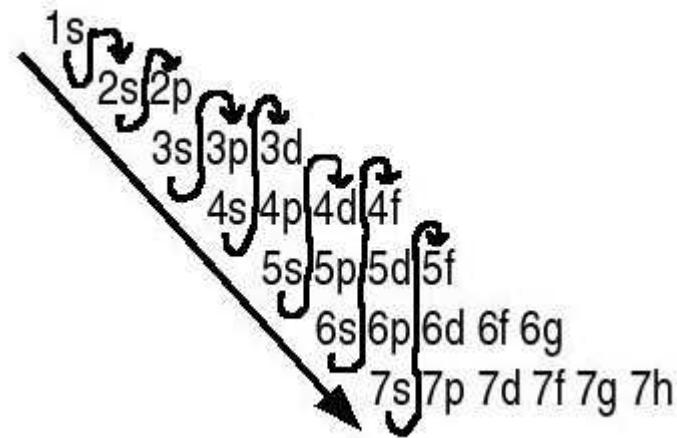
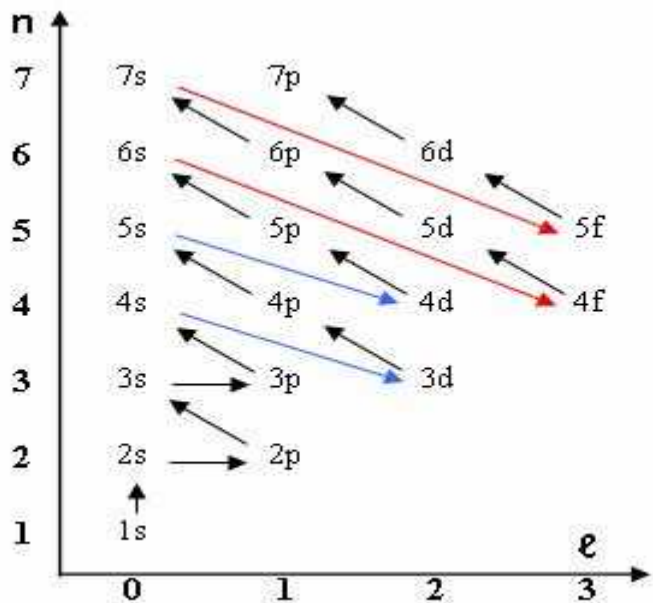
Conséquence → Une OA ne peut comporter que deux électrons au maximum.

Exemple : OA 2p

La règle de Klechkowski

Les OA se remplissent dans l'ordre croissant de $n + l$ et, en cas d'égalité, par ordre croissant de n .

Tracé du diagramme $n = f(l)$



Exemples et exceptions

La règle de Hund

Lorsque plusieurs OA de même énergie sont disponibles, les électrons occupent d'abord le maximum d'OA avec leurs spins parallèles avant de s'apparier.

7) Les électrons de coeur et de valence

Les **électrons de valence** sont ceux dont le nombre quantique principal est le plus élevé ou ceux qui appartiennent à des orbitales en cours de remplissage.

8) Configurations électroniques des ions

Exemples : classiques + métaux de transition