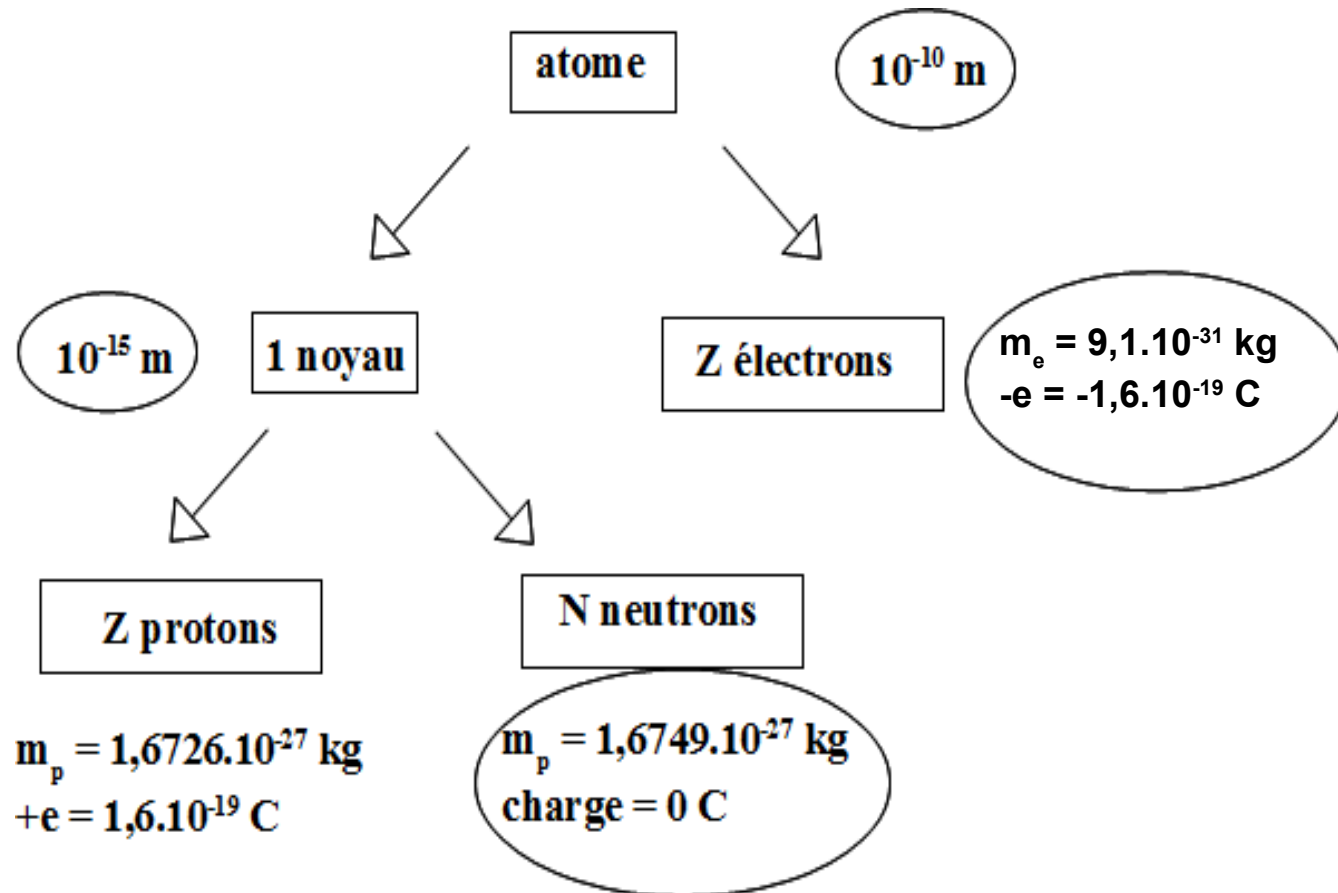


# Architecture de la matière

## 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. L'atome est désigné par un symbole comportant une ou deux lettres.

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

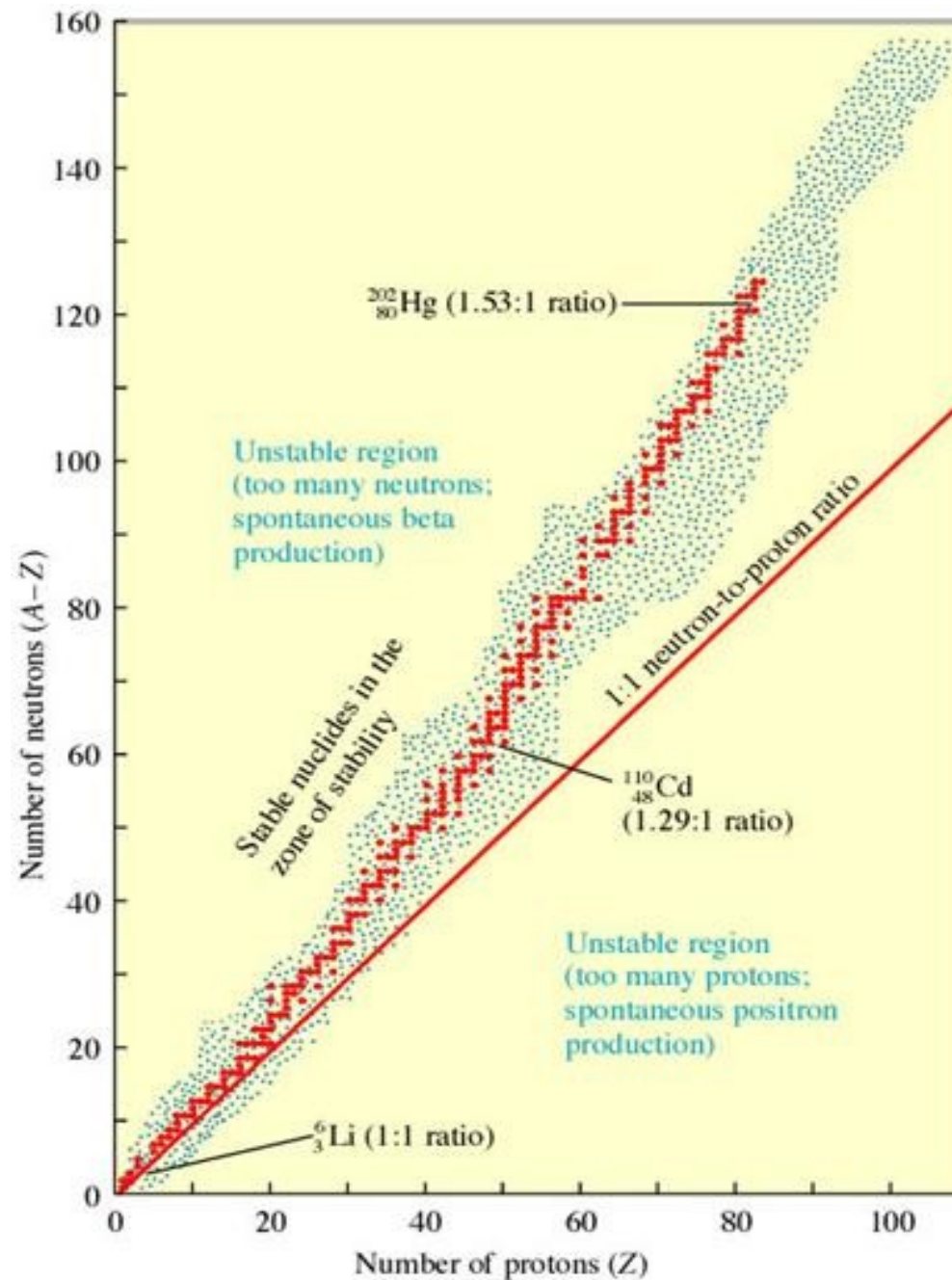
On appelle **corps simples** les molécules formées par association d'atomes d'un même élément chimique.

### 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



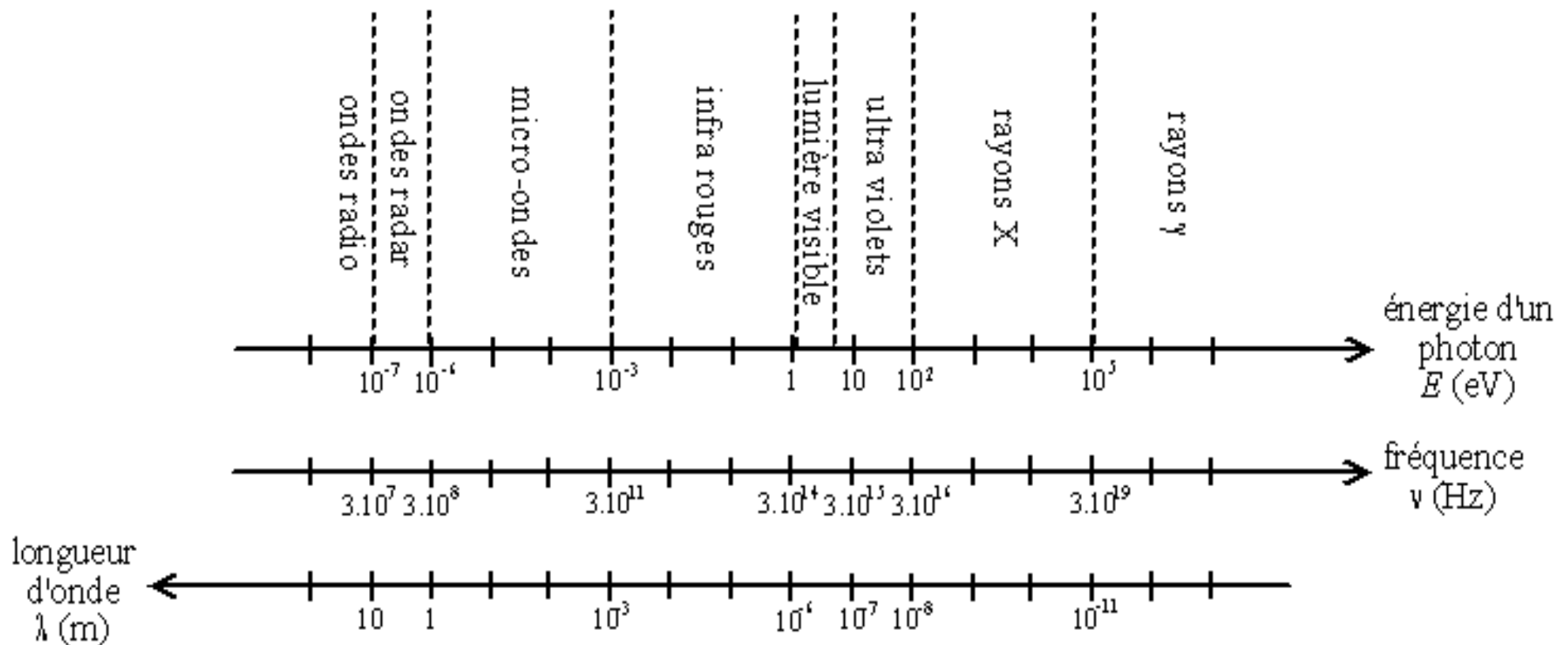
# L'abondance isotopique

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

|                            | $^{12}\text{C}$ | $^{13}\text{C}$ | $^{14}\text{C}$ |
|----------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| <b>stabilité</b>           | stable          | stable          | radioactif      |
| <b>abondance naturelle</b> | 0.989           | 0.011           | $< 10^{-12}$    |

# II ) Quantification de l'énergie

## 1 ) Les différents types de transition



# Interactions

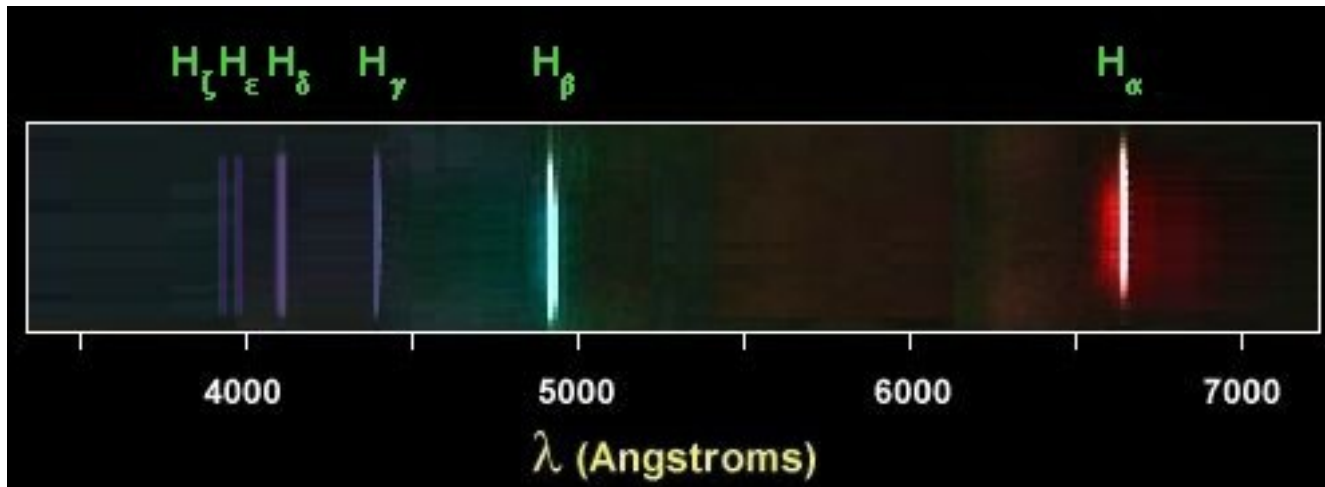
|                           | $\lambda$   | $\nu$                    | <i>type de radiation</i>   |
|---------------------------|-------------|--------------------------|--|
| RMN sous quelques teslas  | 0,1 à 100 m | 3 à 3000 MHz             | ondes radio et micro-ondes   |
| vibrations-rotations      | 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

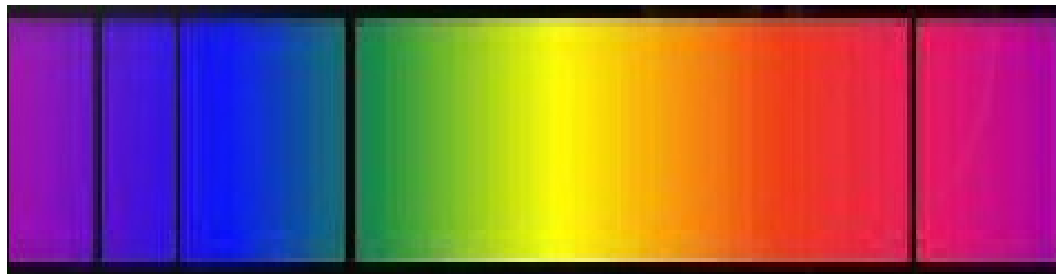
$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda$$

## 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   | $\pm 1$ | $\pm (1/2)\sqrt{3/2\pi} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}$              |
| 2   | 0       | $(1/4)\sqrt{5/\pi}(3 \cos^2 \theta - 1)$                                 |
| 2   | $\pm 1$ | $\pm (1/2)\sqrt{15/2\pi} \cos \theta \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}$ |
| 2   | $\pm 2$ | $(1/4)\sqrt{15/2\pi} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}$              |

## 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)

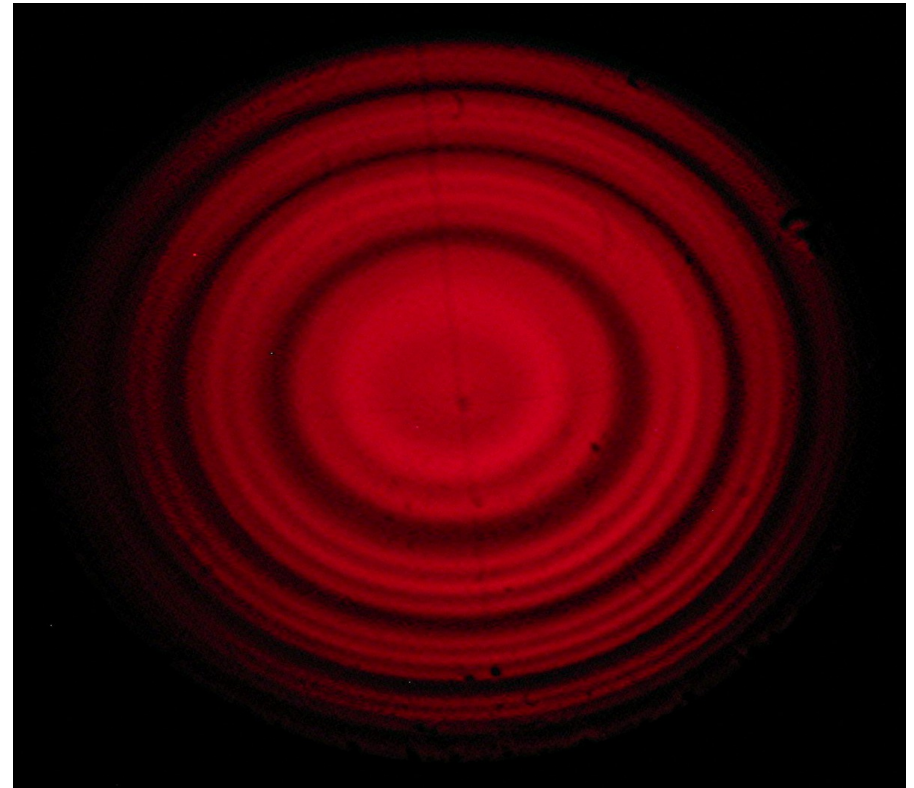
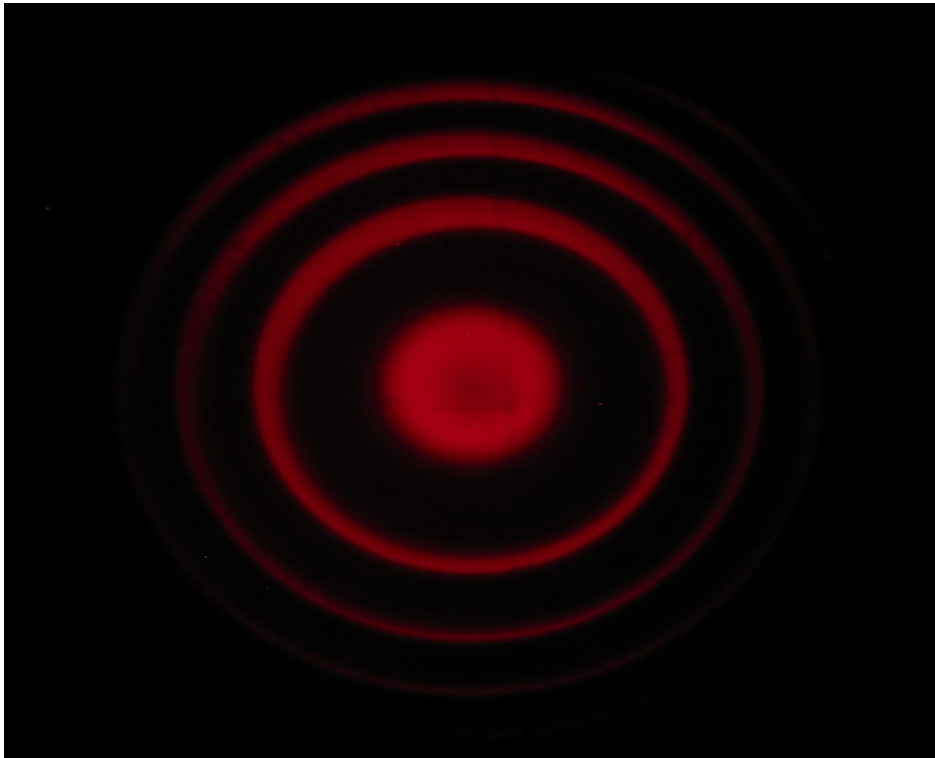
$l = 2 \rightarrow d$  (diffuse)

$l = 3 \rightarrow f$  (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** :

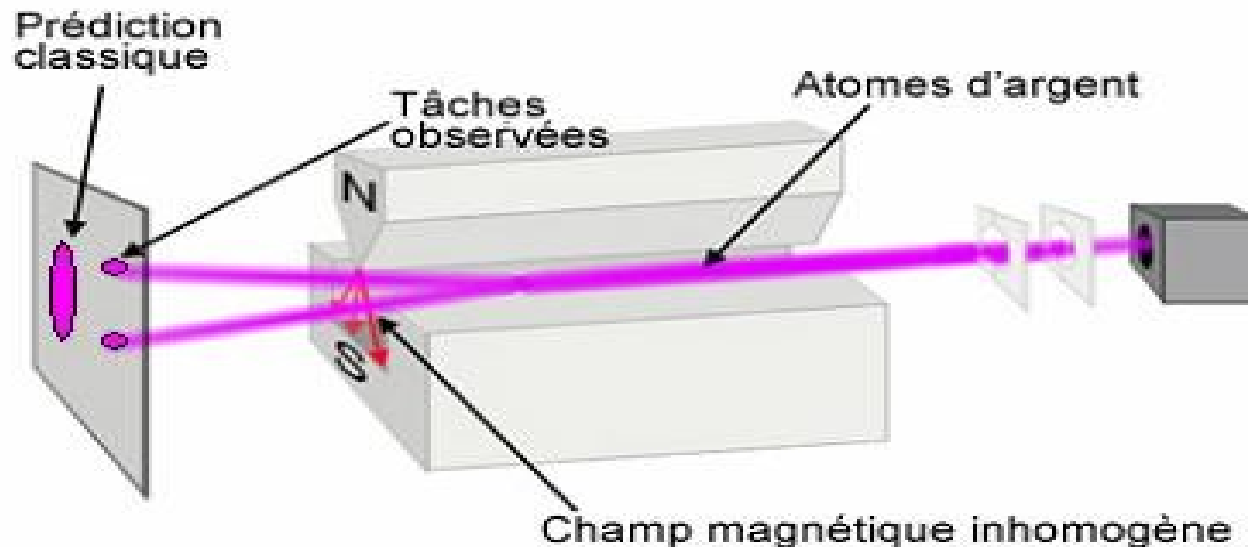


## d ) Exemples d'orbitales atomiques

## 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.

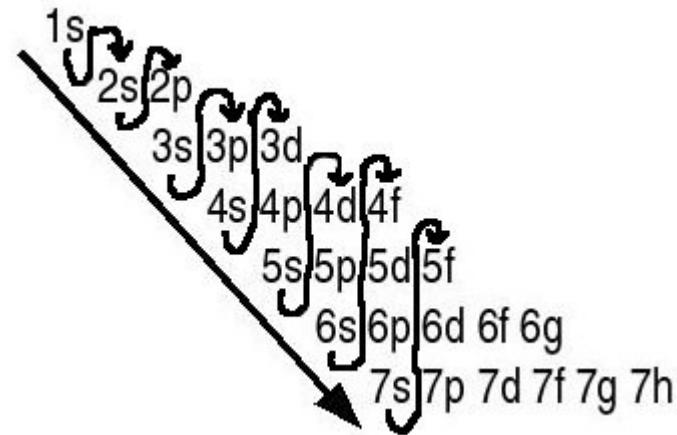
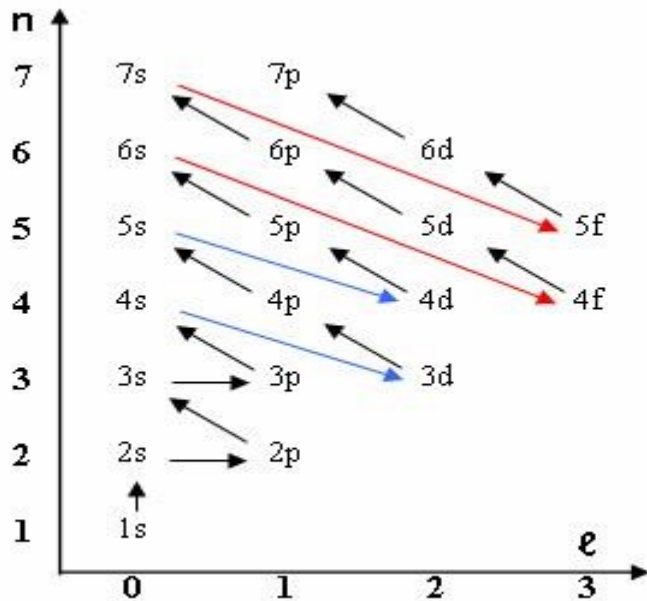
Exemple : OA 2p



# 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