

Introduction à la chimie

♦ INTRO :

→ Qu'entend-on par « chimie » ?

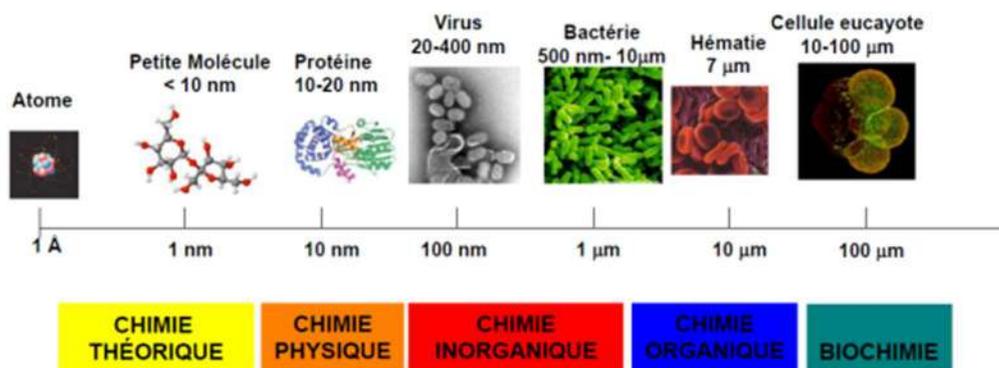
♥ **Définition** (tirée du dictionnaire *Le Petit Robert*) : Science de la **constitution** des divers corps, de leur **transformation** et de leurs **propriétés**.

Cette formule relativement simple décrit bien l'ensemble de la chimie, puisqu'on a la notion de :

- **Constitution** des éléments
- Leur **transformation** : leur réactivité chimique
- Leur **propriétés** : ce qui va leur conférer leurs caractéristiques, que ce soit à l'échelle atomique ou moléculaire.

En ce qui concerne l'échelle de travail de la chimie, nous avons une échelle relativement petite en termes de distance puisque l'on va s'intéresser à ...

- L'atome : nous sommes donc de l'ordre de **l'Angström**
- La molécule : on en trouve des plus ou moins grosse, de l'ordre du **nanomètre**, généralement que l'on considère inférieure à la dizaine du **nanomètre**
- Et de + en +, la chimie s'aventure dans le monde des protéines plutôt un domaine réservé à la biologie et la biochimie.



La chimie est une discipline très vaste qui se subdivise en différents champs allant de la chimie théorique (presque des mathématiques et de la physique) à la biochimie, qui est vraiment à l'interface avec la biologie.

Vous avez aussi tous les développements + ou – récents que l'on observe avec la *police scientifique*. Un autre champ qui se développe énormément : la compréhension et l'interaction au sein d'*écosystèmes complexes comme l'environnement*.

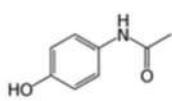
L'écologie : ensemble d'interactions de molécules dans un système complexe, là aussi il faut comprendre le rôle et l'interaction de ces molécules.

⇒ Il faut **comprendre** et **pouvoir créer**.

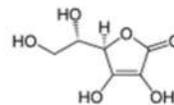
Mais créer des molécules en chimie organique ça concerne aussi des polymères, l'électronique, les nouveaux composants de nos téléphones, ils sont tous dérivés de chimie organique. Enfin, de façon + légère, vous avez tout ce qui concerne les parfums et cosmétiques, le chimiste est de nouveau très présent, que ce soit à l'étape **d'élaboration** ou de **formulation**. Puisque la formulation, que ce soit principalement en cosmétique, est faite par des chimistes, alors que les médicaments c'est souvent fait par des pharmaciens (*qui devraient d'ailleurs avoir une formation en chimie*).

Si on regarde un peu les molécules organiques du quotidien vous verrez que l'on en rencontre un peu partout, et que certaines se retrouvent et sont systématiquement étudiées au quotidien.

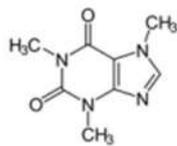
○ Quelques exemples :



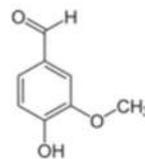
Paracétamol
Antalgique/antipyrétique
Un des médicaments le plus vendu au monde



Vitamine C

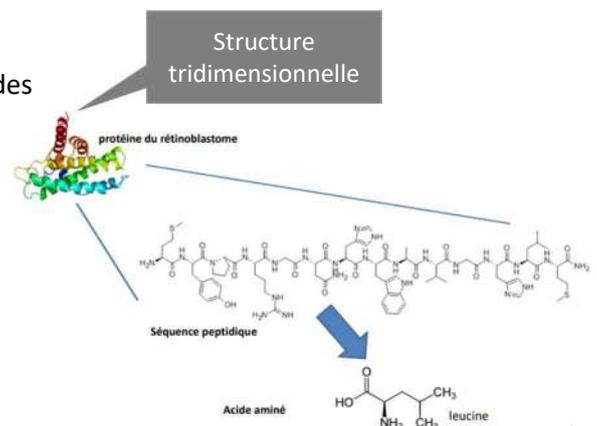


Caféine

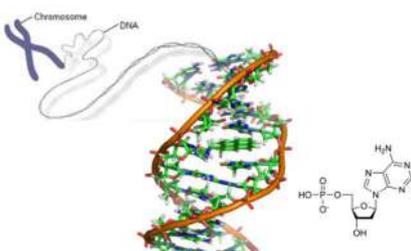


Vaniline
Arôme le plus fabriqué au monde

Si on regarde une protéine dans son ensemble, vous avez des structures, comme la **structure tridimensionnelle**, grosse molécule avec des **feuilletts**, des **hélices** etc... Cependant, cette structure tridimensionnelle n'est possible que par **l'agencement de molécules** (= les *séquences peptidiques*). Ces séquences peptidiques sont elles-mêmes composées d'acides aminés, donc un ensemble de petites molécules qui vont s'assembler pour former cette longue séquence peptidique qui vont se structurer dans l'espace. Cette structuration tridimensionnelle des molécules est un élément essentiel pour former des molécules très complexes



↳ Mais à la base, il faut les **comprendre** puis étudier leurs mécanismes pour pouvoir envisager des modifications, on a cet ensemble de petites molécules qui composent la séquence peptidique.



C'est la même chose avec l'information génétique.

→ Où se stocke l'information génétique ?

Les données qui peuvent être stockées dans les *chromosomes* sont des données en quantité extraordinaire !

→ *Au final, que sont les chromosomes ?*

Tout simplement un assemblage, un « enroulement » d'ADN (l'ADN lui-même composé de seulement **4 bases nucléiques**)

Ainsi avec seulement 4 « petits blocs » (= les bases), qui sont des molécules **très simples** on arrive à créer des génomes contenant des quantités d'informations incroyables !

Bon je vous ai trié un peu la partie précédente (qui était interminable mdr), franchement, j'ai laissé ce qui me semblait le plus important, mais normalement c'est surtout ce qui va suivre qui tombera en QCM, avant c'est vraiment (selon moi toujours) une intro à « pourquoi vous avez un cours de chimie », mais concrètement, je pense que le prof pour l'examen ça l'importe peu de savoir que « la chimie on la retrouve en étudiant les protéines », lui ce qu'il va vraiment l'intéresser c'est surtout si vous savez faire la configuration électronique des atomes (qu'on voit après)

Après je précise, si vous voulez tout apprendre cette partie précédente, vous avez toujours la ronéo complète. Mais ici avec cette fiche vous avez vraiment ce qu'il faut SELON MOI (je ne suis pas le prof mdr) connaître pour perfect l'examen 😊

1) L'ATOME :

A) LA STRUCTURE DE L'ATOME :

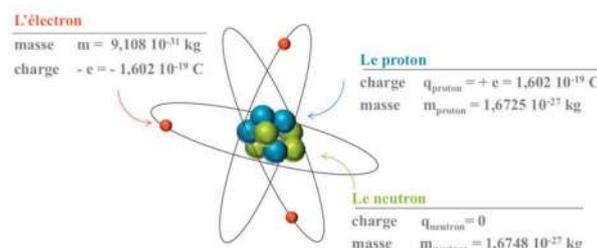
Avant tout, il est important de comprendre la base.

→ *Qu'est-ce que la base ?*

La base c'est la structure et la géométrie des atomes qui vont constituer les molécules.

Ensuite, il faut comprendre comment sont formées les molécules, comment elles s'organisent et se représentent dans l'espace. C'est ce que nous verrons donc dans un premier temps.

A l'origine des molécules il y a un assemblage d'atomes. Un atome c'est composé d'électrons qui vont graviter autour d'un noyau (*c'est le modèle que nous verrons le plus simple, mais qui fonctionne plus ou moins bien*). Le noyau quant à lui est composé de protons et de neutrons.



Ce qui est vraiment important de se rappeler c'est que dans un atome **la masse de l'atome** se trouve principalement dans le **noyau**. En effet les **électrons sont 1800 fois plus légers que les protons/neutrons+++**.

- Les électrons sont chargés négativement.
- Les protons sont chargés positivement.
- Les neutrons sont neutres.

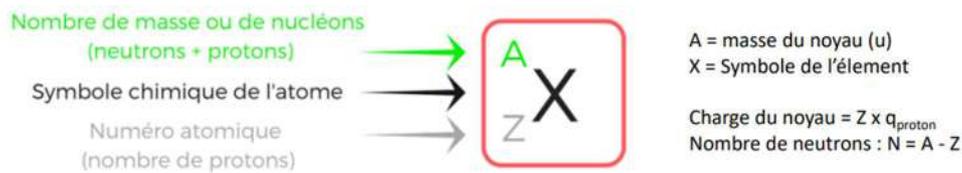
↪ Il y aura alors un **système d'interaction** entre des forces positives et négatives qui vont s'attirer et se repousser pour générer l'atome, cette représentation autour duquel gravitent les électrons.

Parfois, vous pourrez trouver dans certains ouvrages :

- **les grammes** qui ne sont pas adaptés à la mesure de l'atome
- **l'unité de masse atomique u** qui correspond à **1/12^e de la masse de l'atome de carbone +++**. Cette dernière unité permet de décrire de façon plus simple la masse des atomes, on s'en sert d'ailleurs parfois pour certaines molécules.
On utilise u ou le Dalton, c'est la même chose.

Toujours à propos de l'atome, les éléments sont représentés dans le tableau périodique.

Chaque élément est codé avec 2 chiffres :



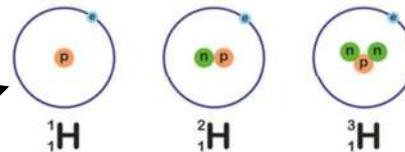
- **Le nombre de masse A** : approximation de la masse, celle-ci principalement située dans le noyau, si on connaît le nombre de protons + neutrons vous aurez quasiment la masse de votre élément.
- **Le numéro atomique Z** : uniquement le nombre de protons puisqu'on a pas forcément la même quantité de protons que de neutrons. Ce numéro atomique participe à la classification des éléments.
 Evidemment on déduit très rapidement le nombre de neutrons en soustrayant au nombre de masse A le numéro atomique Z .
 Enfin, la **charge du noyau** va être exprimée en fonction du **numéro atomique x la charge des protons**

Chaque élément peut présenter des isotopes : ${}^A_Z X$ ${}^{A'}_Z X$

♥ **Isotopes** : atomes avec le **même numéro atomique Z**, mais des nombres de masse **A différents**. Généralement, cela signifiera qu'on a un nombre de neutrons différent.

- Exemple : Les isotopes de l'Hydrogène.

Ici l'hydrogène possède 1 proton et 1 électron.
 Il a 2 isotopes :

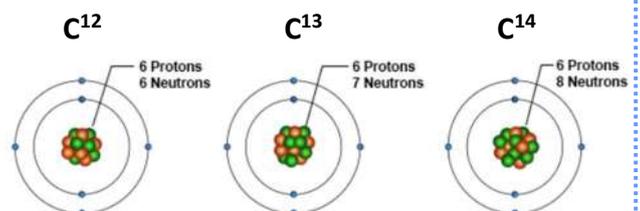


- ✓ **Le deutérium** : même Z , mais A change ($A=2$), il y a 1 proton + 1 neutron. C'est donc un élément plus lourd que l'hydrogène qu'on va par exemple retrouver dans la constitution de l'eau lourde (*utilisée dans les centrales nucléaires*)
- ✓ **Le tritium** : sert à certaines applications en médecine, il a une durée de vie beaucoup plus courte que la plupart des éléments.

Naturellement, on a quasi-exclusivement seulement de l'hydrogène, mais aussi en quantité significative, du deutérium, tandis que le tritium est sous forme de traces, mais on peut le fabriquer.

- Exemple : les isotopes du Carbone.

Vous avez parmi les éléments naturels principalement présents, le Carbone 12, là on aurait 6 protons.
 Son **abondance naturelle est d'environ 98%**



On a une **égalité** de protons et de neutrons pour le carbone 12.

- ✓ On peut retrouver un peu de **Carbone 13**, donc là c'est pareil on a toujours le même numéro atomique Z , c'est A qui change.

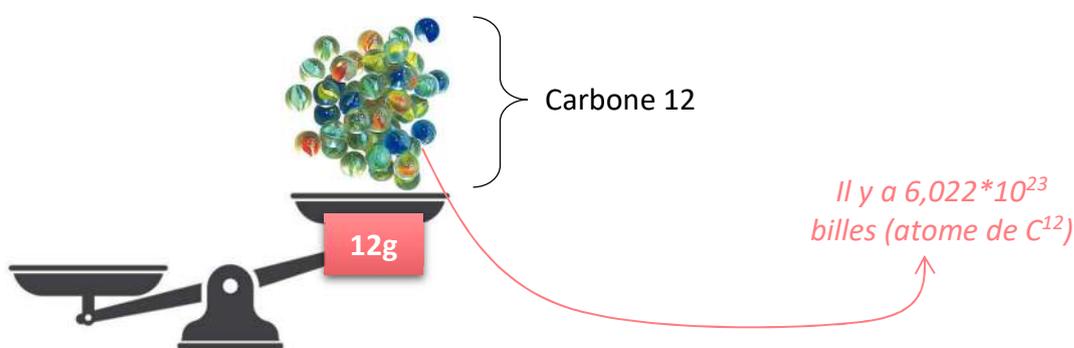
- ✓ Enfin on a le **Carbone 14**, il possède 2 neutrons de plus que le carbone 12 élémentaire, c'est un élément **radioactif** car il émet des particules radioactives, par contre son abondance est très faible, vous avez **1 C¹⁴ pour 1 trillion de C¹² !!!**
Ce C¹⁴ sert ainsi à la datation des éléments. (je vous ai enlevé toute la partie hors sujet sur la datation au C¹⁴ mdr)

B) CARACTÉRISATION DE L'ATOME :

Avant de revenir à la structure de l'atome, vous allez définir les atomes suivant le nombre d'Avogadro.

- ♥ **Nombre d'Avogadro** : nombre, la quantité d'atomes de Carbone dans 12g de Carbone 12

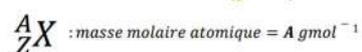
VALEUR : $6,022 \times 10^{23}$



C'est une constante, elle **n'a pas d'unité**. Et de ce nombre d'Avogadro, on en a tiré la **mole (= quantité de matière qui contient $6,022 \times 10^{23}$ entités élémentaires)** (atomes, ions ou bien molécules).

- ♥ **La masse molaire atomique M** d'un atome qui s'exprime en **g/mol** est généralement (à *qlq exceptions près*), le nombre de masse A.

Masse molaire atomique = masse M d'une mole d'atome ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)



→ Pourquoi dit-on « à quelques exceptions près » ??

Parce que c'est une **approximation** qui se réfère à l'*isotope* de l'atome le plus présent, c'est-à-dire que naturellement, si on pèse 1 mole de carbone et 1 mole d'hydrogène, vous allez avoir un mélange de leurs 3 isotopes.

Il se trouve que dans le cas de l'hydrogène (ou du carbone), l'H¹ et le C¹² sont présents en quantité suffisamment grande et large pour « écraser » statistiquement les autres isotopes. Il n'y aura pas d'erreur majeure à dire que cela correspond à 12g par mole. Si on veut être un peu plus précis, ce serait 12g/mol *virgule quelque chose, mais on n'est pas très loin*.

Par contre certains atomes (chlore Cl) vont présenter 2 isotopes dans des rapports assez importants.

Exemple : le Cl³⁵ est présent à **75%** et le Cl³⁷ à **25%**

Donc là, nous ne sommes plus dans l'ordre de 0,01% ou du 1%, dans ces cas-là, les masses qu'on a ne sont plus seulement 35g/mol, mais on devra prendre en considération le rapport avec les 75% d'atome de masse 35 et 25% de masse 37, ce qui vous fait une **masse moyenne de 35,5g/mol**.

→ C'est donc la masse molaire atomique que l'on utilise pour le Cl.

♥ **La masse molaire moléculaire** = somme des masses molaires de chaque atome de la molécule.

Si je reprends la vitamine C (ou acide ascorbique) vous avez une formule brute avec 6 atomes de carbone, 6 d'hydrogène, et 6 d'oxygène, la masse de cette molécule se fait en additionnant la masse des atomes présents.

On peut ici faire une approximation :

$$M(\text{Vit C}) = 6 \cdot M(\text{H}) + 6 \cdot M(\text{C}) + 6 \cdot M(\text{O})$$

$$M(\text{Vit C}) = 6 \cdot 1 + 6 \cdot 12 + 6 \cdot 16$$

$$M(\text{Vit C}) = 176 \text{g/mol}$$

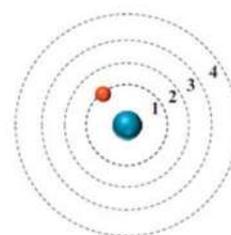
C'est-à-dire que **dans une mole d'acide ascorbique, j'ai 176g d'acide ascorbique**.

A) STRUCTURE DE L'ATOME (SUITE) :

Si on revient à la structure de l'atome, on avait dit que dans le noyau il y avait des protons et des neutrons, autour duquel gravitent les électrons. Cette image généralement acceptée c'est la représentation nommée :

⇒ **Le modèle de Bohr ++**

Où on trouve des électrons avec une orbite circulaire autour du noyau de l'atome.



Ainsi, quand on prend un modèle très simple, *ici l'atome d'Hydrogène*, il y a un proton autour duquel on va rajouter un électron sur une orbite (comme une planète autour du soleil) et ces orbites ont un rayon de :

$$\text{Rayon de l'orbite} = 0,53 \cdot n^2 \text{ \AA}$$

n : numéro de l'orbite, le nombre quantique principal

\AA : l'unité de l'Angström

Avec n étant un entier naturel (ex : 1, 2, 3 ...)

Ce n se réfère au **nombre quantique principal** +++.

Donc ici on a un proton (*le seul dans le noyau*) + un électron qui gravite autour, il va naturellement graviter sur l'orbite $n=1$, mais il peut aussi potentiellement aller graviter sur l'orbite $n=2$, $n=3$, $n=4$ etc...

L'énergie de l'électron va être bien définie, car l'électron ne sera pas diffus sur une distance, il se trouve précisément dans des lieux bien particuliers, ainsi, **l'énergie de l'électron va dépendre de l'orbite dans lequel il se trouve**.

Comme **l'énergie dépend de l'orbite** elle ne peut prendre que des valeurs bien précises, c'est le **quantum d'énergie**, chaque électron aura un quantum bien spécifique.

Énergie de l'électron à l'état fondamental ($n=1$)
(énergie d'ionisation)

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} < 0 \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

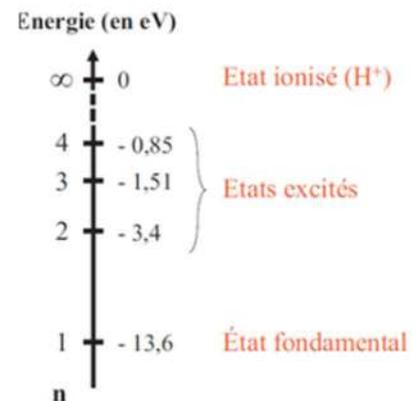
Nombre quantique principal ($1, 2, \dots, \infty$)
(niveau ou couche d'énergie)

L'énergie de l'électron au niveau de n (l'orbite) E_n est définie par l'énergie de l'électron à l'état fondamental, (au niveau $n=1$) divisé par le nombre de l'orbite au carré (n^2).

E_1 a une énergie de **$E_1 = -13,6 \text{ eV}$** . Donc l'énergie de l'électron à l'état fondamental pour l'hydrogène (on extrapolera pour les autres molécules) est de **$-13,6 \text{ eV}$** .

Quand on parle de différentes orbites de l'état fondamental, cela signifie qu'il y a d'autres états :

- ✓ **Etat fondamental** : en absence d'énergie, les électrons se situent (dans le cas de l'hydrogène) au niveau de $n = 1$, il y a absence de toute excitation extérieure, c'est un niveau bas en énergie, stable.
- ✓ **Etat excité** : on fournit de l'énergie au système, à l'atome, l'électron passe dans des orbites supérieures.



A chaque fois, **lorsqu'on passe de l'état fondamental à un état excité, il faut apporter de l'énergie.**

Cette énergie peut être sous forme de chaleur, d'onde lumineuse...

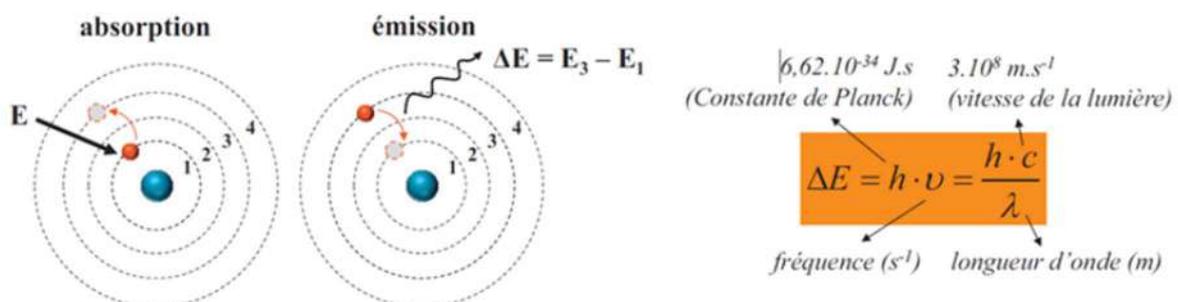
Il va absorber l'énergie fournie par le système et passer sur une autre orbite.

Les états excités n'ont PAS pour vocation de perdurer dans le temps, ce n'est pas l'état « naturel » de l'atome. Il va y avoir un moment où l'électron va retourner sur son orbite, l'atome va repasser dans son état fondamental, moins énergétique.

Et lorsqu'il retourne dans son état fondamental il va dégager de l'énergie ΔE qui sera émise sous forme de rayonnement (longueur d'onde).

On a donc une longueur d'onde bien précise qui correspondra à la différence d'énergie entre le niveau excité et le niveau fondamental.

→ Cette différence d'énergie peut être reliée à d'autres équations :



→ Si on regarde l'atome d'hydrogène, on ne peut pas faire toutes les étapes possibles, il y a des limites physiques, et on risque **d'arracher** l'atome de l'électron.

Cependant, cette **dualité** qui associe une onde et un corpuscule **N'**est absolument **PAS** compatible avec la mécanique classique où on a une interprétation très physique de l'onde. *On est dans un caractère très quantifié des choses.*

Ainsi, si on étend cette théorie à

- *des objets de masses élevée* → la question d'onde n'est plus concevable
- *des objets d'échelle atomique* → la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que les dimensions du système, et cela n'a pas de sens.

Là on se rend bien compte que le modèle, *très simple de Bohr* NE représente PAS la réalité que l'on observe.

- Pour connecter et rationaliser les différents aspects, on a **Heisenberg** qui va introduire **le principe d'incertitude** qui signifie que l'on NE peut PAS connaître simultanément et avec certitude à la fois la **vitesse** et la **position** d'un électron dans l'espace +++.

$$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v_x) \geq \frac{h}{2\pi}$$

Incertitude sur la position

Incertitude sur la vitesse

Du fait de cette dualité onde-corpuscule, si on connaît précisément la vitesse, on ne peut pas connaître précisément la position et inversement.

On a la fois donc, une **incertitude sur la position** et une **incertitude sur la vitesse** qui s'exprime par un rapport $\frac{h}{2\pi}$. Pour essayer de reconnecter tout ça, la mécanique quantique va reprendre ce concept d'incertitude en relation avec la dualité onde-corpuscule, et dire qu'on NE peut PAS localiser précisément l'électron.

↪ On peut par contre définir une **probabilité de présence** de l'électron dans une zone déterminée +++++

Schrödinger va ainsi reprendre la théorie de Louis De Broglie, l'adapter avec le principe d'incertitude et associer toute particule à un mouvement d'une fonction d'onde. **Il va relier les particules en mouvement à une fonction d'onde.**

L'équation postulée par Schrödinger va être de relier l'énergie d'un système à ses propriétés ondulatoires. On dépasse le modèle purement classique de Bohr (*orbite définie avec une position bien précise*), on reconnecte la dualité onde-corpuscule grâce au **principe d'incertitude**, on exprime alors une **probabilité de présence de l'électron**, et on connecte donc la particule à un mouvement d'une fonction d'onde.

♥ Ce **modèle ondulatoire de Schrödinger** permettra de développer « **la notion d'orbitale** ».

La mécanique ondulatoire, contrairement à la mécanique classique va définir l'électron avec à la fois :

- Son énergie
- Sa probabilité de présence dans l'espace

Les particules vont être associées à des **fonctions d'ondes ψ** qui dépendent à la fois de x, y et z (dans un repère).

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

Opérateur mathématique hamiltonien

Energie associée à ψ

Fonction d'onde stationnaire ou orbitale atomique (OA) caractérisant l'e = f(x,y,z)

♀ Pas de paniqueeee : j'ai demandé au prof à la fin du cours, vous n'aurez pas de calculs sur ça, toute cette partie assez « mathématique » est juste là pour vous introduire comment nous sommes arrivés à décrire des nombres quantiques.

Ψ n'a pas de signification physique, c'est une fonction qui décrit l'onde.

Pour donner une signification physique à ceci, on va travailler avec Ψ^2 = densité de probabilité de présence de l'électron dans un volume donné.

Cette notion a permis de développer « **les orbitales atomiques** » qui ne seront ni + ni - que la représentation du volume à l'intérieur duquel il y a **95%** de chance de trouver l'électron.

Evidemment, comme c'est un volume, celui-ci est associé à une fonction d'onde.

→ Pour résoudre l'équation de **Schrödinger** nous devons introduire 3 nombres quantiques :

- ♥ **Nombre quantique principal n** : déjà utilisé dans le modèle simple de Bohr qui va définir la couche, « l'orbite de base » et le volume de l'orbitale moléculaire.

A chaque couche n est associée une énergie. Ce nombre n est aussi un entier non-nul (ex : 3).

On verra aussi qu'il peut être associé à des périodes K, L, M...

- ♥ **Nombre quantique secondaire l** : définit la sous-couche de l'orbitale + la forme de l'orbitale atomique.

Ce nombre l ne peut prendre que des valeurs précises comprises entre 0 et $n-1$ inclus. On NE peut PAS avoir $l > n$, le nombre quantique secondaire est toujours d'au moins une unité inférieure au nombre quantique principal n .

Il va donc définir la forme de l'orbitale atomique
Quand l augmente, l'énergie de la sous-couche augmente aussi.

Valeur de l	Forme
0	s
1	p
2	d
3	f

- ♥ **Nombre quantique magnétique m** : le dernier des 3 nombres quantiques nécessaire à la résolution de l'équation de Schrödinger. Détermine l'orientation de l'orbitale atomique suivant l'axe des x , y ou des z (en 3D). Celui-ci est compris entre $-l$ et $+l$ (inclus).

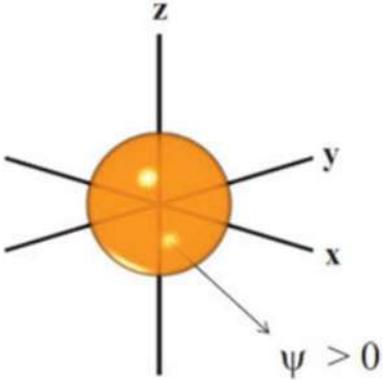
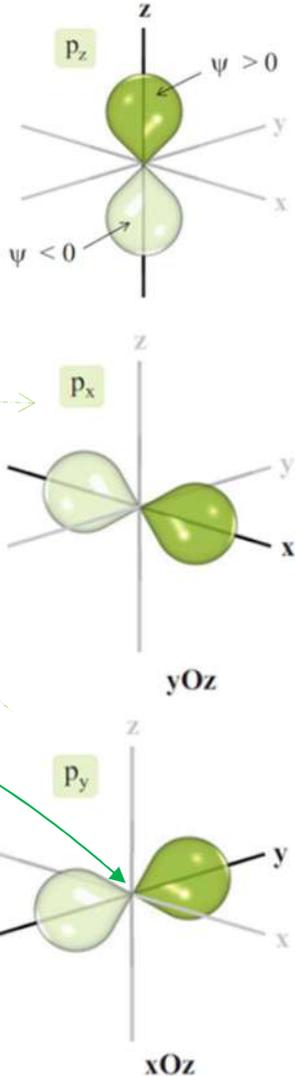
Le nombre de m possible détermine le nombre d'OA dans une sous couche donnée : on va alors avoir $2l + 1$ valeurs de m .

Si on revient à des choses plus concrètes, on a vu que la résolution de l'équation de Schrödinger permettait de résoudre cette dualité onde-corpuscule puisqu'elle associait à un électron un volume, une zone de probabilité de présence.

↳ Cette probabilité de présence se traduit physiquement par des orbitales atomiques +++

- ♥ **Orbitale atomique** : volume dans l'espace qui définit la zone de présence des électrons.

La forme de l'orbitale atomique va dépendre de la valeur de l tandis que m va donner le **nombre** d'orbitales de même forme. L'orbitale sera **normée** suivant un système orthonormé, la forme et la direction des orbitales va permettre de **MINIMISER LES REPULSIONS** des électrons de même énergie.

Si $l=0$	
<p>On va avoir des orbitales de forme S. L'orbitale de forme s est une sphère, c'est l'orbitale la + simple.</p> <p>Si $l=0$, alors m ne peut être = qu'à 0, car celui-ci doit être compris entre $-l$ et $+l$, donc il n'y a qu'une seule valeur de m.</p> <p>Ainsi, quand $l=0$, quel que soit le nombre n (n peut être égal à 1, 2, 3, 4, 5, 6 ...), $m=0$, on a alors l'orbitale atomique qui est une sphère.</p> <p><i>Ainsi, l'électron a de grandes chances de se trouver n'importe où dans cette sphère</i></p>	
Si $l=1$	
<p>On est dans des orbitales de type p, dans ce cas là on a forcément une valeur de $n \geq 2$</p> <p>Dans ce cas-là, m peut prendre 3 valeurs : - 1 / 0 / + 1.</p> <p>Sachant qu'il y a 3 valeurs de m qui indique les directions de l'orbitale on va retrouver la même orbitale dans 3 directions différentes :</p> <ul style="list-style-type: none"> - L'orbitale p_z selon l'axe des z - L'orbitale p_x selon l'axe des x - L'orbitale p_y selon l'axe des y <p>Contrairement à $n=0$ avec une seule orbitale, ici m a 3 valeurs possibles.</p> <p>Au niveau du « plan nodal » (intersection entre les 2 plans x et y ou z) on a ici une probabilité de présence des électrons qui est nulle !</p> <p>→ <i>Il n'y a pas de probabilité de présence puisque ce sera la position où se trouvera le noyau.</i></p>	

Si $l=2$	
<p>Alors $n \geq 3$, on a les orbitales d.</p> <p>A ce moment-là, m est compris entre $l = -2$ et $l = +2$ avec tous les nombres entiers qu'il y a donc : $-2 ; -1 ; 0 ; 1 ; +1$</p> <p>↪ On a 5 valeurs de m, donc on a 5 directions possibles de l'orbitale.</p> <p>Dans le cas présent, on va avoir <u>3 orbitales atomiques</u>. Pour pouvoir exploiter l'ensemble des 5 directions, on ne va plus avoir une orbitale <u>strictement de la même forme et dans différentes directions</u> (pas comme la p du coup).</p> <p>On aura forcément des <u>orbitales de forme différentes</u> :</p> <ul style="list-style-type: none"> - On en aura 3 identiques, sous forme de lobes qui iront sur les plans : $yz ; xy ; xz$. - On en aura une autre sur les axes, toujours de la même forme mais développée sur l'axe. - Enfin, la 3^e un peu particulière : d_{z^2} qui a une forme différente des autres pour arriver à recombinaison toutes ces orbitales entre elles et exploiter tout l'espace donné en <u>minimisant les interactions</u> 	

On a les 3 nombres quantiques n , l , et m , et il y en a un dernier qui permet de caractériser les répulsions :

↪ **le nombre magnétique de spin s .**

Il ne sert pas dans la résolution de l'équation de Schrödinger, mais va être 1 élément supplémentaire à caractériser l'électron. En effet, l'électron est animé d'un mouvement de rotation autour de lui-même. On lui associe un nombre magnétique de spin s pouvant prendre uniquement 2 valeurs : $+1/2$ et $-1/2$.

Ainsi, un électron va être caractérisé par 4 nombres quantiques :

- Le nombre quantique principal n
- Le nombre quantique secondaire l
- Le nombre magnétique m
- Le nombre de spin s

🔗 Si vous avez du mal avec les nombres quantiques imaginez que c'est comme du codage d'ordinateur. Vous voulez dire sur votre ordi par exemple : « cette personne est une femme », donc sur l'ordi vous coderez de telle manière : « si $n=1$ c'est une femme, si $n=0$ c'est un homme ».

🔗 Bah là c'est pareil, si $l=1$ c'est une orbitale de forme s.

🔗 En fait, les nombres quantiques, c'est un peu comme des adjectifs qui vont vous aider à décrire, qualifier ou bien tout simplement donner les différentes caractéristiques des électrons. Vous dites

d'une personne qu'elle est blonde, et bien ici on va pas décrire la couleur des cheveux d'un électron (puisqu'il en a pas logik, merci camille de la précision) mais on va décrire l'orbitale dans laquelle il peut se trouver.

♀ Récap du love :

	Nombre quantique...	Défini			Valeurs
		Couche	Volume/ énergie de l'OA	Période	
n	principal	Couche	Volume/ énergie de l'OA	Période	Entiers non-nuls
l	secondaire	Sous-couche	Forme de l'OA	Type d'OA	$0 \leq l \leq n-1$
m	magnétique	Case quantique	Orientaion de l'OA	L'orbitale	$-l \leq m \leq +l$
s	Magnétique de spin	Spin	Sens de rotation		+1/2 ou -1/2

♀ Je vous rajoute des petites explications en + au cas où vous ne visualisez pas bien les orbitales :

C'est quoi en fait une orbitale ?

Imaginez que votre orbitale c'est un ballon, et que vos électrons ce sont des petites mouches coincées dans ce ballon.

Vu que vous n'avez pas des yeux supersoniques, vous ne pouvez pas voir à travers le ballon où sont les mouches (= électrons).



Et si je vous demande « où ils sont les électrons (mouches) ? »

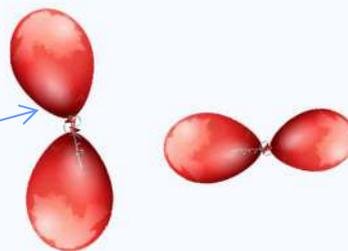
Vous allez me dire « dans le ballon (l'orbitale) », mais vous ne saurez jamais où exactement !

Par contre vous saurez bien sûr qu'ils ne peuvent pas être en dehors de l'orbitale (les mouches ne peuvent pas sortir du ballon) donc vous avez une probabilité de présence de vos électrons dans l'espace représentée par l'orbitale. Vous savez qu'à n'importe quel point dans votre ballon vous aurez une probabilité de trouver les mouches qui sera non nulle.

⇒ Métaphore un peu chelou j'avoue, mais normalement ça aide à visualiser.

Et donc concrètement avec cet exemple comment je retrouve les nombres quantiques ?

- n : c'est un étage un peu où vous pouvez retrouver des orbitales (un étage où on peut mettre des ballons), en fonction de l'étage vous aurez un volume d'air différent dans le ballon, donc un volume différent d'orbitale
- l : c'est la forme de tes ballons
- m : c'est la direction de tes ballons dans l'espace (par exemple tu peux le retourner etc...)
- s : ça, ça ne dépend pas de tes ballons, c'est un peu dans quel sens vont voler tes mouches, c'est le sens de rotation des électrons.



Fin de la métaphore WTF 😊

Dès qu'on passe à des atomes poly-électroniques (avec + d'un seul électron), *ce qui va être la cas de tous les élément du tableau périodique, sauf de l'hydrogène*. Ça se complique un peu, car il y aura forcément des **interactions** entre les électrons. Cependant, il **n'y a plus de solution stricte** de l'équation de Schrödinger comme vu précédemment, on va utiliser des **approximations**, *mais toujours avec l'équation de Schrödinger*.

Mais le principal point c'est que :

- On va considérer que les **électrons sont indépendants**
- On va considérer que les **orbitales atomiques s'adaptent** pour les autres atomes, elles doivent avoir la **même forme** principalement que pour l'atome d'hydrogène
- On va enfin introduire les **règles** pour remplir les électrons dans les couches électroniques.

Les règles de bases pour remplir des couches électroniques sont celles de :

- Pauli
- Hund
- Klechkowski

2) ORGANISATION DES ÉLECTRONS DANS L'ATOME :

A) LES DIFFÉRENTES RÈGLES :

**Principe
d'exclusion de
Pauli**

« Dans un atome, 2 électrons ne peuvent jamais avoir les 4 mêmes nombres quantiques »

📌 Mémo : C'est pô li (pauli) même nombres quantiques :)

Cela signifie que n, l, m peuvent être pareils, mais s sera forcément différent, on ne peut pas avoir n, l, m et s identiques.

On doit alors toujours avoir des combinaisons qui soient différentes.
Si on représente les orbitales (*pour simplifier on ne représentera jamais les orbitales atomiques qui ont des formes complexes dès que l'on passe à l'orbitale p*), on utilise les « **cases quantiques** ».



OA vide



OA ½ pleine
1 e⁻ célibataire
 $s = \frac{1}{2}$



OA pleine
2 e⁻ appariés
spins antiparallèles

Une **case quantique** représente une **orbitale atomique vide** (un ballon quoi). Dans une orbitale (*représentée par le carré donc*), on va pouvoir placer au **MAXIMUM 2 ELECTRONS**. Car nous aurons la capacité de placer seulement 2 particules avec des nombres quantiques différents (*ils vont donc différer au niveau du spin s*).

On met 1 électron avec un spin positif (*c'est donc un électron célibataire*), puis le second électron va arriver avec un spin négatif ($-1/2$), on a alors les deux électrons appariés dans une case quantique, avec des **spin antiparallèles +++**, les nombres de spin sont différents, les électrons sont antiparallèles.

Si les spin était tous les 2 positifs, ou tous les deux négatifs, on représenterait nos 2 électrons par des flèches dans le même sens, là ils seraient parallèles.

Ça nous permet de pouvoir prendre mesure du nombre d'électrons maximal par couche **$N = 2n^2$**

(avec N : le nombre d'électrons maximum)

- Vous voyez que sur la couche 1 on peut en avoir 2 au maximum ($2 \cdot 1^2 = 2$)
- Sur la couche 2 : on peut en avoir 8 ($2 \cdot 2^2 = 8$) au maximum



⇒ Ainsi, cette première règle, nous dit qu'on peut ranger les électrons dans les cases quantiques à nombre de 2 avec des spin différents.

« Dans une sous-couche, le niveau minimum d'énergie est atteint lorsque le remplissage d'électrons se fait avec une valeur maximale de spin. »

⇒ Ça signifie que dans un premier temps on va mettre tous les électrons séparés dans chaque case quantiques.

Pour une sous-couche donnée, les électrons occupent le nombre maximum d'orbitales atomiques de même énergie (le nombre de cases quantiques pour une même sous-couche) et ont des spin de même valeurs s'ils ne sont pas appariés.

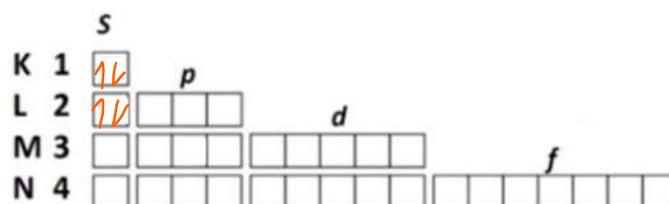
Très concrètement, les électrons se placent à raison de 1 par case quantique avant de s'apparier en doublets +++++.

La règle de Hund

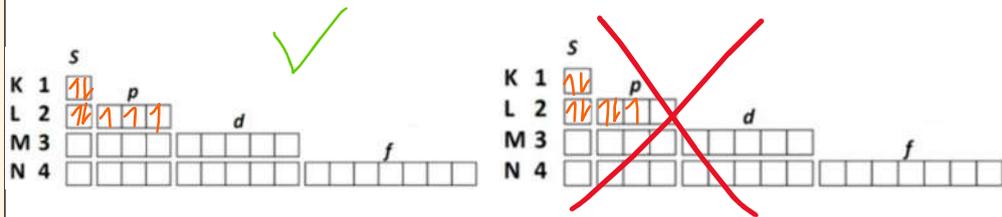
🔑 Mémo : on remplit les cases quantiques hund (une) par hund (une) avant de former les doublets

☞ Les électrons sont en théorie des flèches simple croche.

✓ Première étape : on remplit d'abord la 2s



✓ 2^e étape : pour la 2p, s'il nous reste 3 électrons à placer on ne va pas remplir une case avec 2 électrons puis, dans la case suivante mettre le dernier électron restant (laissant alors une case vide avec une complètement remplie, et une à moitié remplie)

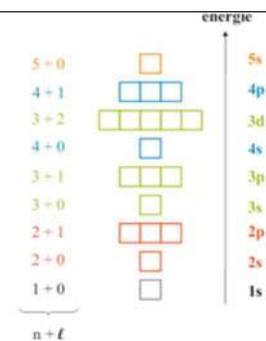


✓ Non, on va d'abord placer 1 électron dans chacune des cases (les 3 cases quantiques ont chacune 1 électron). On les étale avec le même nombre de spin (= on a donc toutes nos flèches dans le même sens) = dans chaque cases quantiques tous les spin sont parallèles (vous voyez dans l'exemple que les électrons ont tous un spin de +1/2, les flèches sont dans le même sens). C'est uniquement si on a un 4^e électron (dans ce cas-là) que l'on va remplir une case quantique avec des doublets.

On ne les apparie pas d'abord, on les distribue et seulement ENSUITE on les apparie ++

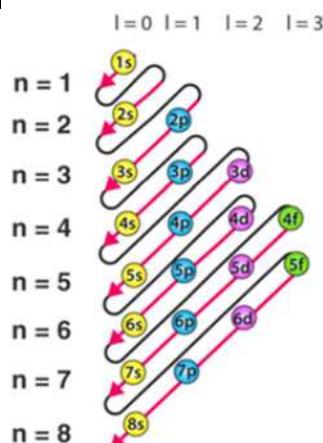
Elle permet de prévoir comment remplir chaque niveau d'orbitale atomique.

Ce remplissage se fait par ordre croissant $n + l$ d'énergie. En effet, on va au fur et à mesure remplir des niveaux d'énergie de + en + importants. Il se fait par ordre croissant de n lorsque les sous couches ont des valeurs de $n + l$ égales.



Moyen mémo du prof :
Vous avez juste à suivre les flèches

La règle de Klechkowski



+++ Ordre : 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d ...
+++

ATTENTION : la 4s a un niveau d'énergie inférieur à la 3d, c'est la raison pour laquelle on la remplit avant la 3d. On ne fini pas la série 3, on commence la série 4 avant.

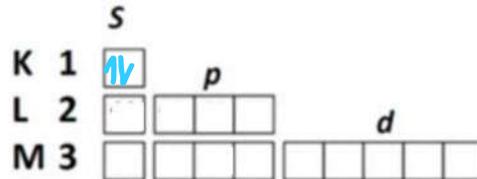
De la même façon, pour la 4p, on ne passe pas à la d, on va à la 5s car celle-ci a un niveau inférieur à la 4d. Il faut se rappeler de l'ordre de remplissage des couches !

♥ Quelques exemples :

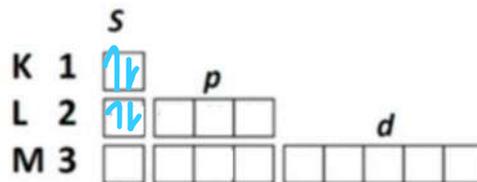
↪ Exemple 1 : Z=7 (Azote)



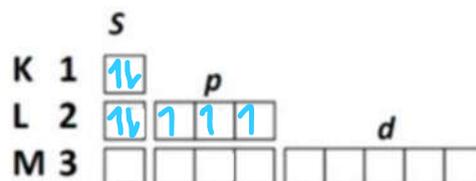
- Le numéro atomique Z correspond aussi au nombre d'électrons.
- On a alors 7 électrons à placer dans les cases quantiques.
- On remplit la première case 1s : on en met 2 de spin antiparallèles



- Il en reste 5 à positionner
- On remplit d'abord la 2s dans son intégralité (vous constatez que ce diagramme très simplifié ne donne pas le niveau des cases quantiques, il donne juste l'ordre qui peut amener à confusion lors du remplissage → on retient l'ordre de Klechkowski !!)
- On place alors les 2 électrons de spin **antiparallèles** dans la 2s.



- 7-4 = 3 électrons encore à placer
- On va avoir alors les 3 électrons qui vont se répartir dans les 3 cases quantiques de la 2p.

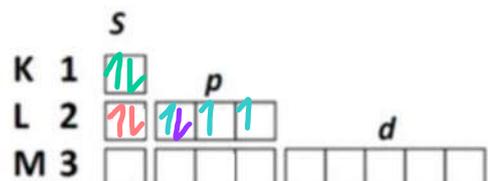


- Si on veut écrire la structure de l'atome on va avoir : **1s²** (l'orbitale 1s est pleine de 2 électrons), **2s²** (l'orbitale 2s est pleine), **2p³** (l'orbitale p qui peut normalement accueillir 6 électrons est alors à moitié remplie).

↪ Exemple 2 : Avec 8 électrons (oxygène)



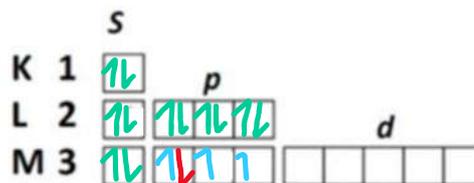
- On a le même principe, on remplit la **1s**, la **2s**.
- Il en reste 4 à placer dans la 2p
- On remplit d'abord les **3** dans chacune des cases
- Et après, avant de passer à la couche suivante je dois absolument remplir la 2p.
- Mais il n'en reste **qu'1**, je l'apparie alors dans la première case de la 2p.
- Dans ce cas-là on obtient : **1s², 2s², 2p⁴**
- Comme code de représentation de l'atome. **IMPORTANT A SAVOIR FAIRE !**



↳ Exemple 3 : le soufre Z=16

Si on regarde le soufre un peu + complexe, c'est toujours pareil :

- On remplit la **1s**, la **2s**, il reste 12 électrons
- On passe à la **2p**, je rempli avec des électrons antiparallèles toujours suivant la règle de Hund.
- $12-6 = 6$ électrons à encore devoir placer
- Je passe à la **3s** : je la remplit il en reste 4
- Je passe à la 3p (suivant une suite relativement logique ici, nous ne sommes pas encore au moment où la 3p est pleine et où nous devons passer à la 4s avant de remplir la 3d)
- Donc pareil, on place **1 électrons par cases quantiques**, puis l'électron restant s'apparie en **doublet**
- On obtient : **1s², 2s², 2p⁶, 3s², 3p⁴**



- 🔗 Je ne vous ai pas détaillé le procédé de remplissage pour l'oxygène et le soufre, si jamais vous avez besoin d'explications → forum <3
- 🔗 + petite remarque : j'ai demandé au prof et il ne se prend pas la tête avec les exceptions à la règle de Klechkowski, donc vous reprenez l'ordre et vous NE METTEZ JAMAIS la 3d AVANT la 4s ok ??? Le prof piège pas dessus 😊 Et aussi vous n'utiliserez pas non plus les gaz nobles pour simplifier la conf. Electronique, vous devrez tout écrire

B) LE TABLEAU PÉRIODIQUE ET LES PROPRIÉTÉS DES ÉLÉMENTS :

Tous ces éléments mis ensemble se retrouvent dans le **tableau périodique**.

Ce tableau est dû à **Mendeleïev**, qui a eu le génie de trouver comment arranger tous les atomes de façon très simple et représentative. Ce tableau périodique a une force logique.

- Les atomes sont alors classés dans un premier temps suivant leur **numéro atomique**, de 1 à un nombre assez important.
- Plus important encore, la structuration du tableau périodique fait en sorte que tous les éléments dans chaque **colonne** ont exactement **la même structure électronique de leur couche externes** (leur dernier niveau d'énergie). Ainsi, leur dernier niveau d'énergie est rempli de la même façon.

Le tableau périodique peut aussi être représenté par **blocs**, on a le bloc s, tous les éléments de ce bloc auront sur leur dernier niveau d'énergie un $n s^1$ ou $n s^2$. On a aussi des blocs p, d etc...

Le fait que les atomes aient la **même structure** électronique de **la couche externe (couche de valence ++)** fait qu'ils ont des **propriétés physico-chimiques** qui leur sont un peu **similaires**. C'est pour cela qu'en les classant par colonnes on a adopté **des noms de colonnes**.

Les éléments du tableau périodique sont classés par période (de 1 à 7) et par groupe (de 1 à 18).

7 périodes	1	H	Éléments de transition										13	14	15	16	17	18	
	2	Li	Be	18 groupes										B	C	N	O	F	Ne
	3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
	4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
	5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
	6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
	7	Fr	Ra	Ac	Lanthanides Actinides														

Exemple :

- La première colonne → alcalins
- La deuxième colonne → alcalino-terreux
- Un gros bloc → les éléments de transition
- L'avant-dernière colonne → halogène
- Dernière colonne → gaz rare

♀ Essayez de connaître juste l'ordre des colonnes, en mode si je vous dis « la deuxième colonne correspond à quoi ? » vous devez me répondre les alcalino-terreux (mais apprenez pas tous les éléments hein ptdrrr)

↪ Tout cela contribue à des similarités au niveau des propriétés physico-chimiques +++.

→ On peut les regrouper par bloc :

- Dans le **bloc s** : on remplit les orbitales s en dernier
- Dans le **bloc p** : on remplit les orbitales p en dernier
- Dans le **bloc d** : on remplit les orbitales d en dernier etc...

L'hélium est un peu à part, c'est un gaz rare (sa dernière couche est complète) mais sa dernière orbitale est une s, il a donc des propriétés particulières

Le tableau périodique est également découpé en blocs.

On peut aussi les diviser schématiquement entre les métaux et les non-métaux :

- **Métaux** : atomes qui conduisent le courant → tendance à former des ions positifs
- **Non-métaux** : Atomes isolants, qui ne conduisent PAS le courant → tendance à former des ions négatifs
- On peut aussi subdiviser en **métaux de transition** (bloc du milieu).

										Métaux					Non métaux																																																																									
										conduisent le courant électrique - ont tendance à donner des ions positifs					- sont isolants - ont tendance à donner des ions négatifs																																																																									
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

En prenant le **Bore B** ou le **Lithium Li**, on va représenter des cases vacantes.

Sur la dernière couche externe, **la couche de valence**, toutes les cases ne seront pas remplies.

Si on revient au lithium par exemple, d'après le tableau périodique on a $Z=3$, on a besoin de l'orbitale 1s et du niveau 2. On remplit la 1s, on a un seul électron au niveau 2.

		s											
K	1	1											
L	2	1					p						
M	3											d	

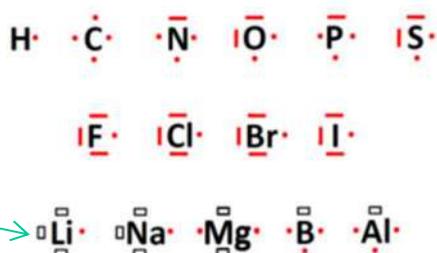
Par contre, vu que je suis au niveau 2, les orbitales p existent quand même. Ce qu'il y a de très important à se rappeler c'est que du moment où on a des électrons à un certain niveau, **ce n'est pas parce que les autres orbitales sont vides qu'elles ne sont pas présentes**.

Elles sont systématiquement présentes lorsqu'on est à un certain niveau.

- Au niveau 2, on a toujours les orbitales 2s et 2p qui sont présentes.
- Au niveau 3, on a les orbitales 3s, 3p et 3d.

Et le fait que ces orbitales soient **présentes** mais **VIDES**, on les représente par **des cases quantiques vides**.

↳ Ces cases quantiques vides vont avoir la particularité de pouvoir accepter des DNL.



Et voilà fin de ce cours sur l'intro, j'essaierai de vous sortir une fiche récap rapidement, un nouveau DM sur ce cours va sortir aussi, comme ça vous pourrez vous entraîner comme il se doit. Rapide dédis à Nilay et son sandwich poulet parce que c'était archi drôle et improbable ptdrr. Bisous bossez bien vous êtes des boss, vous êtes les meilleurs, on reste detet les gars le prochain EB vous me le détruisez parce que vous êtes incr <3

♥ Petite photo mimi pour vous donner un coup de boost :

