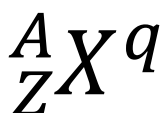


Atomistique

A. Structure de l'atome



X est l'élément,
Z est le nombre de Protons (ou numéro atomique),
A est le nombre de masse,
N=A-Z est le nombre de Neutrons, **q** le nombre de Charges (ions).

→ **X** et **Z** caractérisent l'élément.

→ Protons et Neutrons constituent le noyau et autour de lui se trouve le nuage électronique (le/les électrons).

→ Notion d'Isotopes : deux atomes sont isotopes s'ils ont un même nombre de Proton et un nombre de neutron différent. Exemple : ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{13}_6\text{C}$, ${}^{14}_6\text{C}$.

B. Interaction Rayonnement / Matière

1 - Notions d'électromagnétisme

Un Rayonnement électromagnétique (REM) est une forme d'énergie que l'on peut caractériser comme un phénomène vibratoire. Il est représenté par :

$$c = \lambda \nu \text{ ou } \lambda = c/\nu$$

La vitesse, **c** en m.s^{-1}
 La fréquence **ν** , en **Hz** (ou s^{-1})
 La longueur d'onde **λ** , en **m**

Théorie des Quanta : l'échange d'énergie entre la matière et un rayonnement ne peut se faire que via des **quantités définies**.

Ces quantités sont des multiples d'une quantité d'énergie minimale : un « quantum » ou grain d'énergie.

→ Un REM est un flux de particules, les **Photons**.

Energie d'un photon (en J) : $E = h\nu = hc/\lambda$ avec $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$, la constante de Planck.

De manière plus pratique, on utilise comme unité l'**Electronvolt (eV)** à la place du **Joule**. L'eV est par définition l'énergie cinétique acquise par un e^- initialement au repos et accéléré par une différence de potentiel de 1 Volt : $1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Dans ce cas-là, le calcul de l'énergie d'un photon en **eV** est : $E = 1240/\lambda$ avec λ en **NANOMETRE** !

Si un atome absorbe une énergie par un REM de fréquence **ν** , son énergie augmentera de $E_{\text{absorbée}} = h\nu$ (Excitation).

Si un atome émet une énergie par un REM de fréquence **ν** , son énergie diminuera de $E_{\text{émise}} = h\nu$ (Désexcitation).

Absorption et Emission d'énergie se font par des valeurs d'énergies **quantifiées**.

2 - Niveau d'énergie

Dans l'atome, les électrons sont définis par des fonctions d'ondes **ψ** , et leur énergie **E** est donnée par la résolution de l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$.

4 paramètres (**n**, **l**, **m** et **s**) permettent la description du système électronique dans un atome.

→ Les électrons sont sur des **niveaux d'énergies quantifiés** ou « **couche** ». On note l'énergie du niveau **n** " **E_n** "

→ Les énergies dans l'atome sont **négatives**.

Les électrons sont donc sur des couches disposées autour du noyau :

n=1	couche K	E_1
n=2	couche L	E_2
n=3	Couche M	E_3

... etc ...

3 - Transition électronique dans l'atome

Une transition est le passage d'un électron d'une couche (ou niveau d'énergie) à une autre.

Un apport ou une émission d'énergie est nécessaire et ce fait par l'intermédiaire de photons. Pour qu'il y ait transition d'un électron d'une couche « n » à une couche « $n + 1$ » (**excitation !**), l'énergie apportée à l'atome doit correspondre à l'**exacte** différence des niveaux d'énergie.

On parle d'**état fondamental** quand **tous** les électrons d'un atome occupent les couches les plus basses (+++).

3-1 Exemple de l'atome d'Hydrogène (Rappel : $Z=1$, donc un e^-)

-Excitation : Passage de la couche **K** (**H** alors dans son état fondamental), d'énergie E_1 , à une couche supérieure n d'énergie E_n . Pour ce faire, il faut que l'atome **absorbe** un photon d'énergie : $\Delta E_{1 \rightarrow n} = E_n - E_1 = h\nu$
L'atome possède alors un excès d'énergie.

-Désexcitation : Retour de l' e^- de la couche n vers la couche **K**. Le système redescend **spontanément** vers son état fondamental, il y a restitution de l'excès d'énergie.

L'atome émet alors un photon d'énergie $\Delta E_{n \rightarrow 1} = E_n - E_1 = h\nu$

Les photons que l'atome d'**H** peut absorber ou émettre ont des énergies (et donc longueurs d'onde / fréquences) quantifiées. Il a donc un spectre d'émission et d'absorption de raie qui lui est propre.

-Ionisation : L'électron est éjecté de l'atome, il est envoyé à l'infini. Il effectue la « transition » $E_1 \rightarrow E_\infty$

3-2 Extension aux Hydrogénoïdes

Ce sont les atomes avec un seul électron : **H**, **He⁺**, **Li²⁺**, **Be³⁺** ...

Les niveaux d'énergies sont donnés par la formule empirique : $E_n = -K \times Z^2 / n^2$

Z étant le numéro atomique, n le niveau énergétique de l'électron et K une constante :

→ E_n est en **eV** pour $K = 13,6$

→ E_n est en **Joule** pour $K = 2,179 \cdot 10^{-18}$

Attention : Plus n est bas, plus E_n est négatif.

Pour $n = 1$, on parle de **niveau fondamental**,

Pour $n > 1$, on parle de **niveaux excités**.

Donc le deuxième niveau ($n = 2$) est appelé 1^{er} niveau excité, le troisième niveau ($n = 3$) est appelé 2^{ième} niveau excité, et ainsi de suite. (+++)

Formule pratique pour calculer l'énergie nécessaire pour une transition :

$$\Delta E_{n \rightarrow m} = -13,6 \times Z^2 (1/m^2 - 1/n^2)$$

C. L'électron

1 - Notion de dualité Onde / Corpuscule

A toute particule de masse m et de vitesse v peut être associée une longueur d'onde.

ATTENTION, cette formule ne peut pas s'appliquer pour un photon, car celui-ci n'a PAS de masse !

$$\lambda = h/mv$$

λ est la longueur d'onde de **De Broglie**, en **m**
 v est en **m.s⁻¹**, m en **Kg**

2 – Les Nombres Quantiques / Les Orbitales atomiques

L'état d'un e^- dans un atome est défini par 4 nombres quantiques. Les valeurs de ces nombres sont reliées entre elles.

n : nombre principal

l : nombre secondaire ou azimutal

m : nombre magnétique

s : spin

$$n \geq 1$$


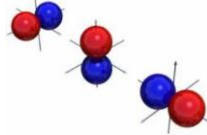
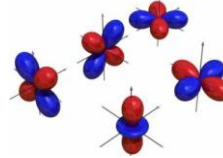
$$0 \leq l \leq n - 1$$

$$-l \leq m \leq l$$

$$s = \pm 1/2$$

Les e^- sont définis comme des ondes : ils ne sont pas parfaitement localisables autour de l'atome. Ils se situent dans des Orbitales Atomiques (OA). Les OA sont des zones autour de l'atome où la probabilité de trouver l' e^- est grande.

n	Définit le niveau d'énergie ou la couche principale E_n : $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$
l	Définit le sous-niveau ou la sous-couche d'un niveau d'énergie. $l = 0 \rightarrow$ Orbitale Atomique de type s (ne pas confondre avec s , qui est le nombre quantique de spin) $l = 1 \rightarrow$ Orbitale Atomique de type p $l = 2 \rightarrow$ Orbitale Atomique de type d $l = 3 \rightarrow$ Orbitale Atomique de type f
m	Il détermine la direction, l'orientation dans l'espace de l'OA. Pour $l = 0, m = 0$: Pas de direction privilégiée. Les OA s sont sphériques et uniques. Pour $l = 1, m = -1, 0, +1$: 3 directions (axes x, y, z), les OA p sont trois (px, py, pz). Pour $l = 2, m = -2, -1, 0, +1, +2$: 5 directions, 5 OA d.

Orbitale s	Orbitales p	Orbitales D
		

3 - Représentation d'une case quantique

Les cases quantiques sont les places dans les orbitales atomiques qui peuvent être occupées par un électron, ou par une paire d'électrons de spin complémentaires (+1/2 et -1/2). Le nombre de case quantique par sous couche est donné par le nombre quantique magnétique.

↑ représente un e^- de spin $s = +1/2$ et ↓ représente un e^- de spin $s = -1/2$

OA vide : ☐ OA 1/2 remplie : ☐↑☐ OA remplie : ☐↑☐↓

4 - Principe d'exclusion de Pauli :

Dans un atome, deux électrons ne peuvent être décrits par un même ensemble $\{n, l, m, s\}$.

→ Les électrons se situent dans des cases quantiques ou orbitales. Pour une même case quantique, **n**, **l** et **m** sont fixés et le spin peut prendre 2 valeurs : on place ainsi 2 électrons par case quantique.

Ainsi on peut mettre 2 e^- dans un niveau s, 6 e^- dans un niveau p, 10 e^- dans un niveau d, 14 e^- dans un niveau f.

OA s : ☐↑☐↓ OA p : ☐↑☐↓☐↑☐↓☐↑☐↓ OA d : ☐↑☐↓☐↑☐↓☐↑☐↓☐↑☐↓

D. Configuration électronique/ Remplissage des Orbitales Atomiques

1 - Règle du « n + l minimal » :

A chaque OA correspond une valeur **n + l**. On remplit l'OA ayant le plus petit **n + l** en priorité. Si 2 OA ont un même **n + l**, la priorité ira à celle possédant le plus petit **n**.

→ Notation : s'il y a 5 électrons dans les OA 3d, alors on note $3d^5$.

Comment retenir l'ordre de remplissage des OA ?

⇒ Moyen mnémotechnique : **ss / ps.ps / dps.dps / fdps.fdps**

On remplit en premier l'OA 1s, puis la 2s, puis la 2p ...

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 \dots$

2 - Règle de Hund :

On place les électrons dans une sous couche incomplète à raison de 1 par case avant de les lier par paires.

Exemple : ${}_6\text{C}$: sa configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^2$

☐↑☐↓ ☐↑☐↓ ☐↑☐↑

~~☐↑☐↓ ☐↑☐↓ ☐↑☐↓~~

3 - Exceptions (+++) :

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

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

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

Exemple du ${}_{29}\text{Cu}$: ~~$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$~~ ⇒ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

Dans le cas d'une ionisation, la méthode est d'écrire la composition de l'atome sans prendre en compte l'ionisation. Puis, on enlève ou on rajoute le nombre d'électron indiqué par l'ionisation sur les couches les plus **externes** (n le plus grand) et **en cours de remplissage**.

Le tutorat est gratuit. Toutes reproductions ou ventes sont interdites.