

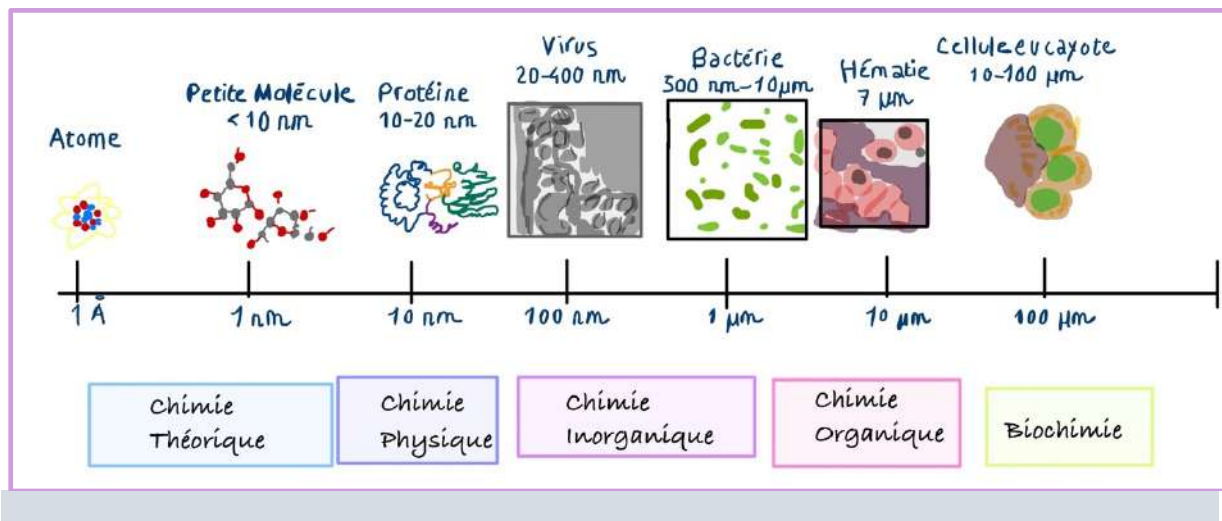
INTRODUCTION À LA CHIMIE

Qu'entend-on par « chimie » ?

♥ C'est une 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
- Leurs **propriétés** : ce qui va leur conférer leurs caractéristiques, que ce soit à l'échelle atomique ou moléculaire.



En chimie, l'échelle de travail est relativement petite en termes de distance puisque l'on va s'intéresser à :

- **L'atome** : nous sommes de l'ordre de l'**Angstrom**
- La **molécule** : on en trouve des plus ou moins grosses, 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.

C'est ainsi une science qui est en interaction et qui vit avec les autres disciplines.

Vous avez également tous les développements plus ou moins 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 il faut comprendre le rôle et l'interaction de ces molécules.

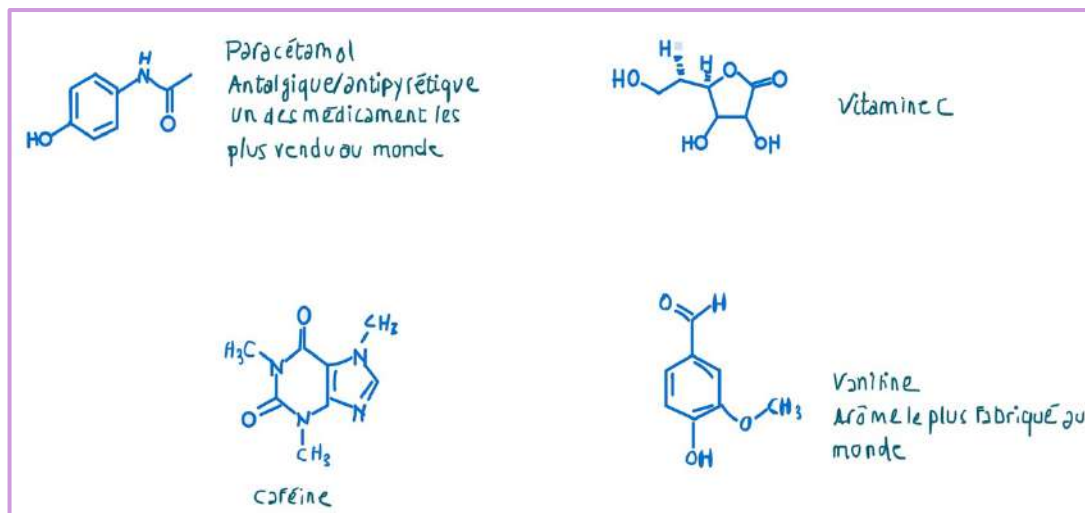
➔ Il faut comprendre et pouvoir créer

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 plus 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 l'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.

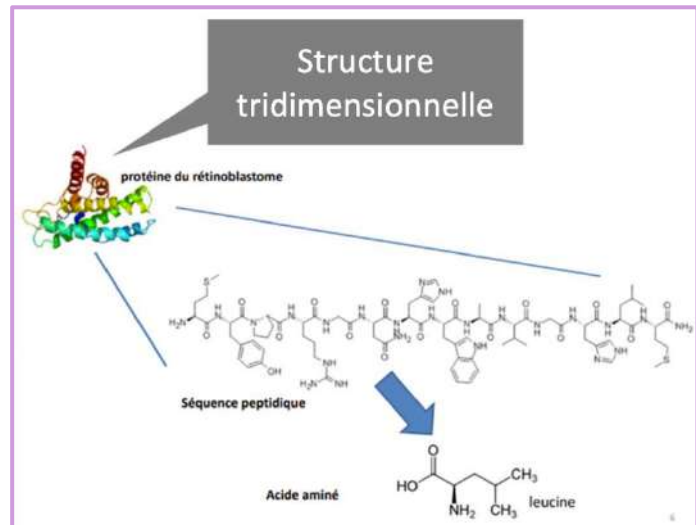
Quelques exemples :



Si l'on regarde également une protéine dans son ensemble, vous avez des structures, comme la **structure tridimensionnelle**, une 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 une 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 ?

C'est 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 !

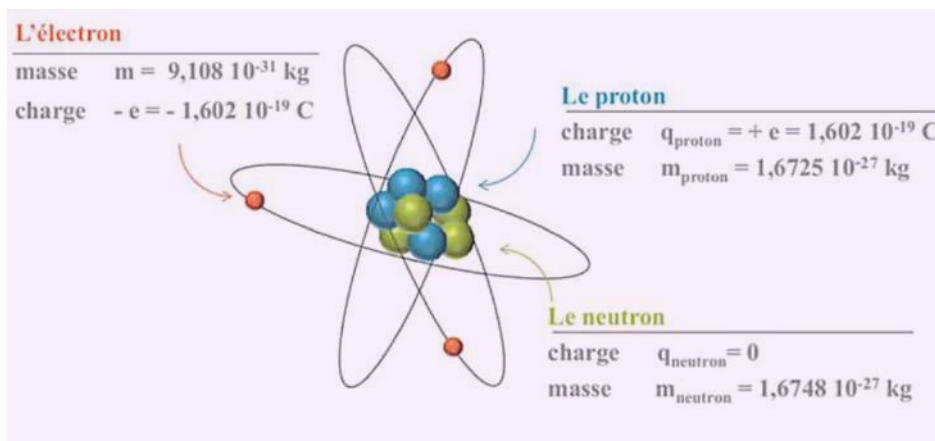
I. L'ATOME :

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 se compose d'électrons qui vont graviter autour du noyau.

Le noyau quant à lui est composé de protons et de neutrons.

Ce qui est vraiment important de se rappeler 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 et les 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.

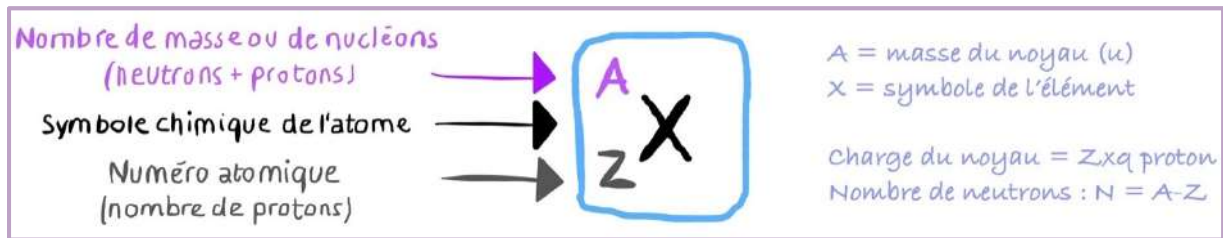
Parfois, vous pourrez trouver dans certains ouvrages :

- 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.

Les éléments atomiques sont représentés dans le tableau périodique.

Chaque élément se compose de 2 chiffres :



Les deux chiffres vont représenter les symboles A et Z, ainsi nous allons avoir :

- **Le nombre de masse A ou de nucléons** : approximation de la masse, celle-ci est majoritairement dans le noyau, si on connaît le nombre de protons + neutrons. On obtient quasiment la masse de l'élément.
- **Le numéro atomique Z** : représente uniquement le nombre de protons. Nous n'avons pas obligatoirement le même nombre de protons et de neutrons. Ce numéro atomique est également le symbole qui permet la classification des éléments dans le tableau périodique.

Pour obtenir le nombre de neutrons, on effectue une soustraction : le nombre de masse A moins le numéro atomique Z.

Enfin, la charge du noyau va être exprimée en fonction du numéro atomique x la charge des protons.

De plus, les éléments peuvent présenter des isotopes : A_ZX ${}^{A'}_ZX$

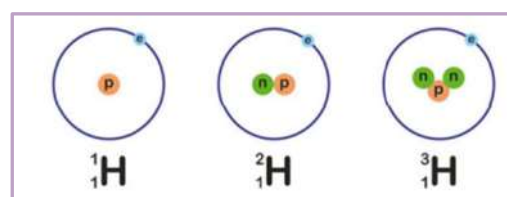
♥ Un **isotope** : un atome avec le même numéro atomique Z, mais des nombres de masse A différents. Généralement, cela signifiera qu'on a un nombre de neutrons différent.

On va ainsi voir plusieurs exemples pour comprendre ce principe.

Exemple I. l'Hydrogène et ses isotopes

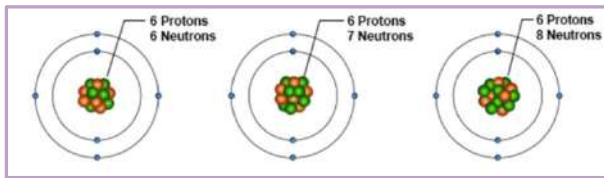
L'Hydrogène, le premier élément du tableau périodique comme son classement possède 1 proton et 1 électron. Il possède 2 isotopes :

- Le **deutérium** : même Z, mais A change (=2), il y a 1 proton + 1 neutron = élément plus lourd que l'hydrogène qui compose l'eau lourde (utilisée dans les centrales nucléaires).
- Le **tritium** : sert à certaines applications en médecine, une durée de vie bcp plus courte que la plupart des éléments.



On a principalement de l'hydrogène dans la nature, cependant on retrouve en grande quantité le deutérium, tandis que le tritium est sous forme de traces, mais nous pouvons le fabriquer.

Exemple II. Le carbone et ses isotopes



Parmi les éléments naturels, on retrouve en abondance le **carbone 12** (98%), là on aurait 6 protons.

Il possède ainsi une grande abondance naturelle, on a aussi une égalité de protons et de neutrons pour le carbone 12.

On peut cependant dans les 2% restant trouver du **carbone 13** en petite quantité, c'est la même règle que l'Hydrogène : on a toujours le même numéro atomique Z et c'est A qui change.

Enfin, on peut avoir du **Carbone 14**, il possède 2 neutrons de plus que le Carbone 12 élémentaire, c'est un élément **radioactif** car il émet des particules radioactives et est peu présent dans la nature même de façon très faible, vous **avez 1 C¹⁴ pour 1 trillion de C¹²**.

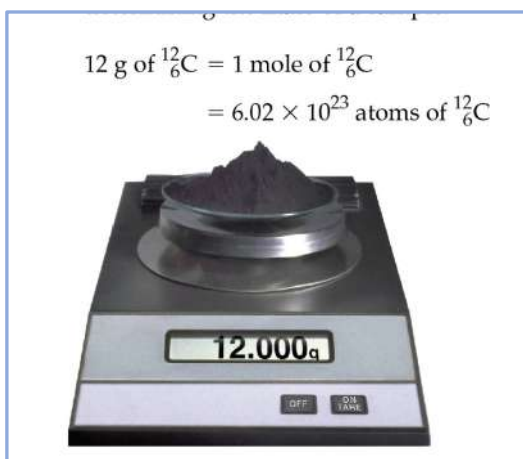
Le Carbone 14 sert ainsi à la datation des éléments.

CARACTÉRISATION DE L'ATOME :

Tout d'abord nous allons définir le nombre d'Avogadro qui est une constante importante pour les atomes.

Nombre d'Avogadro : nombre ou la quantité d'atomes de carbone dans 12g de Carbone 12.

Ce nombre est égale à : **6,022x10²³**



On constate sur la balance que 12,0g de Carbone 12 correspond à 6,022x10²³ atomes de Carbone 12.

Le nb d'Avogadro est ainsi une constante qui ne possède pas d'unité. De ce nombre, on en a tiré la mole (= quantité de matière qui contient 6,022x10²³ entités élémentaires) (Atomes, ions, ou bien molécules).

La masse molaire atomique M d'un atome qui s'exprime en g/mol est à quelques exceptions près, le nombre de masse A .

C'est une **approximation** qui va correspondre à l'isotope de l'atome le plus présent dans la nature. C'est-à-dire si on pèse 1 mole de carbone et une mole d'hydrogène, on va avoir un mélange de leurs 3 isotopes correspondant.

Il se trouve que pour ces 2 atomes, l'isotope 1 de l'hydrogène et 12 du carbone sont en quantité suffisante pour ne pas fausser les statistiques des autres isotopes. Il n'y aura ainsi pas de problème à dire que cela correspond à 12g par mole. Si on est plus précis on peut dire 12,0g/mol.

Cependant certains atomes comme le chlore (Cl) vont présenter 2 isotopes dans des rapports assez distingués.

Prenons l'exemple du chlore 35 et 37 :

Le Cl35 est présent à 75% et le Cl37 à 25%

Donc dans cet exemple, l'ordre ne sera plus de 0,01% ou du 1%. Les masses que l'on a ne sont plus de 35g/mol, on devra prendre en considération leur rapport ce qui donne une masse moyenne égale à 35,5g/mol.

C'est ainsi la masse molaire atomique que l'on utilise pour le Chlore.

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

Prenons l'exemple de l'éthanol de formule brute : C_2H_5OH . La masse de cette molécule est donc la somme des masses atomiques, on obtient :

$$M(C_2H_5OH) = 2 \cdot M(C) + 6 \cdot M(H) + 1 \cdot M(O)$$

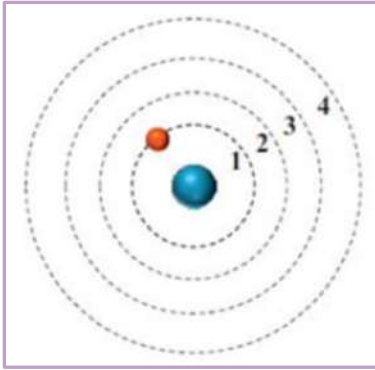
$$M(C_2H_5OH) = 2 \cdot 12 + 6 \cdot 1 + 1 \cdot 16$$

$$M(C_2H_5OH) = 46 \text{g/mol}$$

Ainsi dans une mole d'éthanol, il y a 46g d'éthanol.

STRUCTURE DE L'ATOME (SUITE) :

La structure d'un atome est composée d'un noyau contenant les protons et les neutrons, autour duquel gravitent les électrons ayant une masse plus faible. Cette structure peut être représenté selon un modèle appelé :

Le modèle de Bohr

On retrouve les électrons avec une orbite circulaire autour du noyau de l'atome.

Si on choisit un modèle simple comme l'atome d'Hydrogène possédant un proton autour duquel on rajoute un électron qui gravite sur une orbite (comme la Terre autour du Soleil) et ces orbites ont un **rayon = $0,53 \cdot n^2 \text{ \AA}$** .

(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...)

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

Le n représentera le nombre quantique principal : il indique la couche électronique dans laquelle l'électron se situe, c'est-à-dire la distance moyenne entre l'électron et le noyau de l'atome.

Dans notre exemple de l'hydrogène, l'électron qui gravite va naturellement graviter sur l'orbite $n=1$ qui est la couche la plus proche du noyau avec la plus basse énergie. Les électrons doivent d'abord occuper les niveaux d'énergie les plus bas, c'est-à-dire les plus proches du noyau, avant de pouvoir remplir les niveaux d'énergie plus élevés.

L'électron pourra selon son état énergétique graviter également sur l'orbite $n=2$, $n=3$, $n=4$, etc.

Donc l'énergie de l'électron va être bien définie, car l'électron ne sera pas diffus sur une distance, il se trouve précisément à une place bien particulière, 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. Ces concepts sont fondamentaux pour comprendre la structure électronique des atomes.

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} < 0$$

L'énergie de l'électron au niveau 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 quantique principal qui peut prendre des valeurs entières (n^2).

E_1 possède une énergie : $E_1 = -13,6\text{eV}$ qui correspond à l'énergie d'ionisation de l'état fondamental de l'électron dans l'atome d'hydrogène, selon le modèle atomique de Bohr.

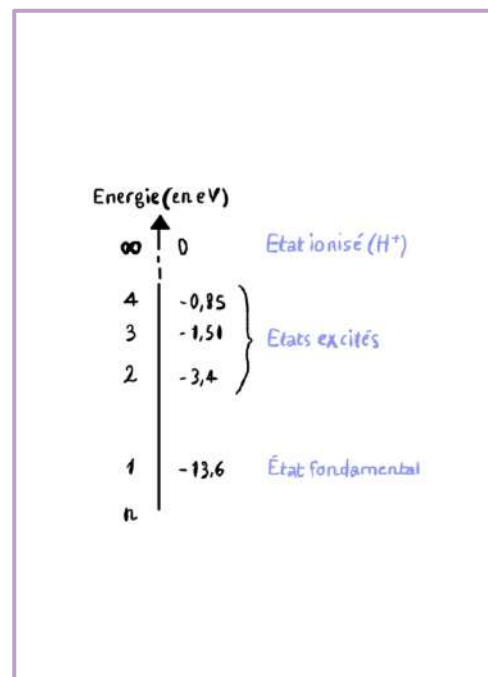
Il y a différents états énergétiques pour un électron dans un atome qui sont liés à ses niveaux d'énergie quantifiés, nous avons ainsi :

- **État fondamental** : C'est l'état énergétique le plus bas qu'un électron peut avoir au sein d'un atome. Dans le modèle de Bohr pour l'atome d'hydrogène, l'énergie fondamentale est de $-13,6\text{eV}$. C'est donc le niveau le plus stable.
- **État excité** ($n > 1$) : cela correspond aux niveaux d'énergie plus élevés. Ils sont cependant temporaires, car l'électron a une tendance à vouloir retourner à l'état fondamental car celui-ci est le plus stable.

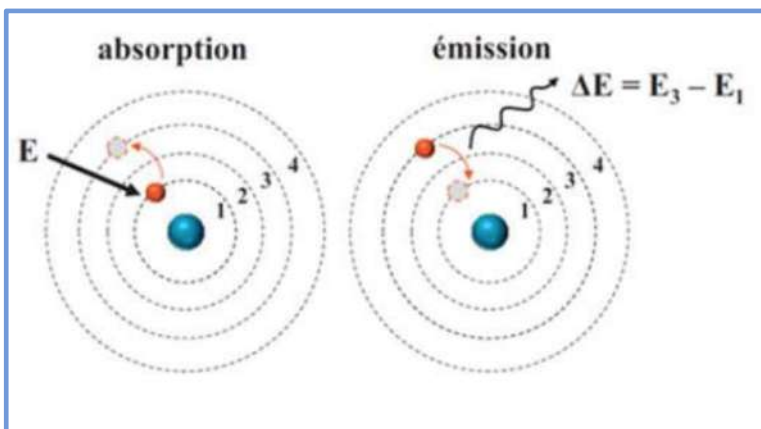
Donc pour passer aux états excités, il faut fournir de l'énergie au système, à l'atome, l'électron passe dans des orbites supérieures.

À chaque fois, lorsque l'on passe de l'état fondamental à un état excité, il faut apporter de l'énergie. Cette énergie est sous forme thermique, d'onde lumineuse.

L'électron va ainsi absorber cette énergie fournie par le système et pouvoir passer sur un autre niveau ou orbite.



Lorsque l'électron retombera à son état le plus stable, c'est-à-dire l'état fondamental. Il va dégager de l'énergie 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.



$6,62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ (Constante de Planck) $3 \cdot 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ (vitesse de la lumière)

$$\Delta E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

fréquence (s⁻¹) longueur d'onde (m)

Le ΔE donnée dans la formule ci-dessus représente le changement d'énergie associé à la transition quantique. Cette formule est souvent utilisée pour déterminer l'énergie des photons émis ou absorbés lors des transitions électroniques dans les atomes ou les molécules.

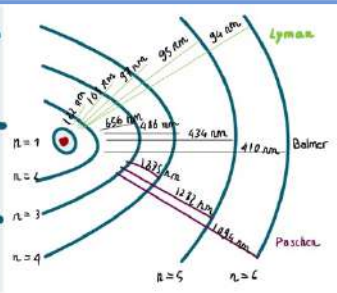
Lorsqu'un électron dans un atome passe d'un niveau énergétique à un autre, il peut soit émettre ou absorber un photon dont l'énergie sera inversement proportionnelle à la longueur d'onde du photon.

Ainsi, le passage vers les états dits excités aura pleins de conséquences en termes d'atomes et de molécules, puisqu'on va pouvoir potentiellement émettre de la lumière, et aussi en termes d'interaction et de réactivité dans des systèmes complexes.

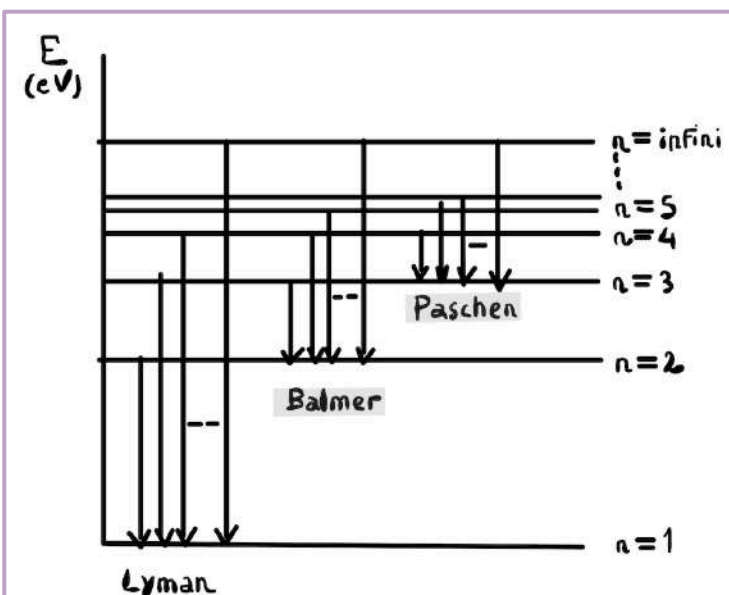
Si l'on regarde l'atome d'hydrogène, on ne peut pas effectuer toutes les étapes possibles, il y a des limites physiques, et on risque d'arracher l'atome de l'électron.

Dans le cas de l'hydrogène, on pourra observer **3 séries de raies** différentes puisqu'il va retourner systématiquement dans l'état fondamental depuis les autres niveaux d'énergie.

Retour à...	Série de ...	Longueur d'onde
État fondamental $n=1$	Lyman	UV On a des petites longueurs d'ondes < 120nm, invisibles à l'œil nu
$n=2$	Balmer	Série avec des longueurs d'onde visibles De 600 à 400nm' elles émettent de la lumière que nous sommes capable de voir
$n=3$	Paschen	IR Pour 1800nm, là aussi invisible à l'œil nu



Lorsqu'un électron est excité, il va y avoir de multiples possibilités pour lui, il peut retourner d'un seul coup à l'état fondamental. Mais, on peut envisager qu'il passe avant par le niveau 3 avec émission d'une certaine longueur d'onde. Puis à partir de ce niveau 3, il peut rejoindre le niveau 1 ou le niveau 2 avec de nouveau une émission.



Une série spectrale est un donc un ensemble de raies spectrales caractéristiques qui apparaissent dans le spectre d'émission ou d'absorption d'un atome ou d'une molécule.

Chaque série spectrale est associée à des transitions électroniques spécifiques entre les niveaux d'énergie quantifiés du système.

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 à la fois, une **incertitude sur la position** et une **incertitude sur la vitesse** qui est représenté par le rapport **$h/2\pi$** . La mécanique quantique va mettre en relation ce concept d'incertitude d'Heisenberg avec la dualité onde-corpuscule, et ainsi dire qu'on NE peut Pas localiser précisément l'électron.

On peut cependant définir une **probabilité de présence de l'électron dans une zone déterminée +++**

Cette probabilité de présence de l'électron est donc liée à la densité de probabilité d'y trouver l'électron. Les régions de l'espace où la densité de probabilité est élevée sont plus susceptibles de contenir l'électron et inversement.

Schrödinger va reprendre la théorie de Louis De Broglie, en l'adaptant 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.

Ainsi les solutions de cette équation sont des fonctions d'onde qui décrivent le comportement ondulatoire des particules et leur nature probabiliste.

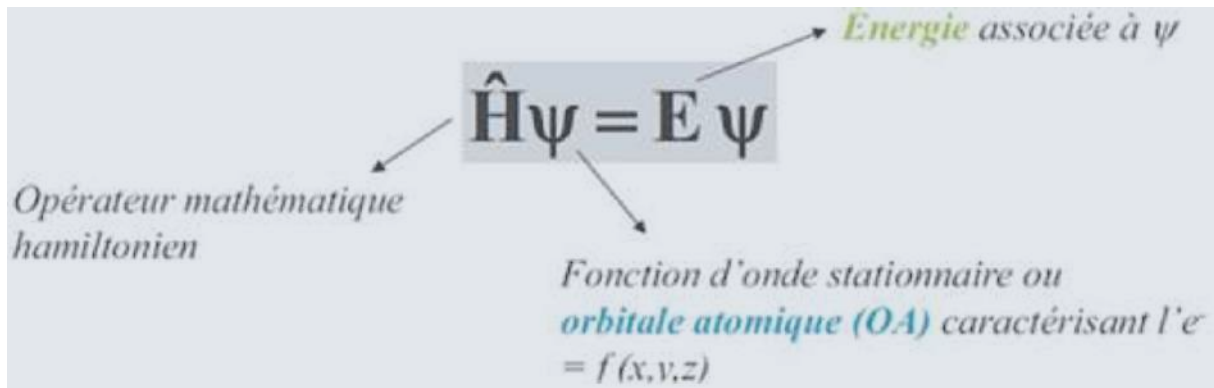
Ce modèle ondulatoire de Schrödinger permettra de développer « **la notion d'orbitale** ».

Une orbitale atomique est une région de l'espace où la probabilité de trouver un électron est maximale.

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 seront associées à des **fonctions d'ondes ψ** qui dépendent à la fois des coordonnées x, y et z (dans un repère).



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

Pour pouvoir introduire une signification physique, on va travailler avec ψ^2 = densité de probabilité de présence de l'électron dans un volume donnée. Cela indique que la particule peut être présente dans plusieurs endroits simultanément avec des probabilités différentes.

Cette notion a permis de développer « **les orbitales atomiques** » qui représente le volume à l'intérieur duquel il y a 95% de chance de trouver l'électron.

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

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

Nb quantique	Valeur	Concepts		
n	$n \geq 1$	Nb principal	Période	Energie
l	$0 \leq l \leq n-1$	Nb secondaire	Type OA	Forme OA
m	$-l \leq m \leq +l$	Nb magnétique	OA	Direction
s	$\pm 1/2$	Spin	Sens rotation	

- **Nombre quantique principal n** : définit la couche et le volume de l'orbitale moléculaire. Chaque couche n est associée à une énergie. Cela indique le niveau d'énergie quantifié de l'orbite. Les valeurs de n sont des nombres entiers positifs. + la valeur de n est élevée + l'orbite est éloignée du noyau = + l'énergie de l'électron est élevée.

- **Nombre quantique l** : définit la sous-couche de l'orbitale + la forme de l'orbitale atomique. Le nombre quantique secondaire sera toujours inférieure au nombre quantique principal n.

- **Nombre quantique magnétique m** : cela indique l'orientation spatiale spécifique de l'orbite autour du noyau suivant l'axe x,y ou des z (en 3D). il est nécessaire à la résolution de l'équation de Schrödinger. Le nb m détermine le nombre d'OA dans une sous couche donnée.

On a donc 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 physique par des orbitales atomiques +++



Orbitale atomique : C'est le volume dans l'espace qui définit la zone de présence des électrons.

La forme de l'orbitale atomique va dépendre du nombre quantique secondaire donc de la valeur de l tandis que le nombre quantique magnétique 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 répulsions** des électrons de même énergie.

C'est important, cela permet de positionner les électrons pour minimiser leurs interactions. (puisque les électrons sont 2 particules de mêmes charges qui vont se repousser)

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>L'électron, sa probabilité de présence est dans une sphère.</p>	
si $l=1$	
<p>On est dans des orbitales de type p, dans ce cas là on a forcément une valeur de n supérieure ou égale à 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 indiquent 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 ! Il n'y a pas de probabilité de présence puisque ce sera la position où se trouvera le noyau.</p>	

($n \geq 3$) et pareil pour $l=1$, c'est $n \geq 2$ et non >2

$Si\ l=2$	
<p>Alors $n > 3$, on a, es orbitales d.</p> <p>À ce moment-là, m est compris entre $l=-2$ et $l=+2$ avec tous les Nombres entiers <u>au il y a</u> (donc : $-2, -1, 0, +1, +2$)</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 3 orbitales atomiques. Pour Pouvoir exploiter l'ensemble des 5 directions, on ne va plus avoir une orbitale strictement de la même forme et dans différentes Directions (pas comme la p du coup).</p> <p>On aura forcément des orbitales de forme différentes :</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, tjrs de la même forme mais Dvlp sur l'axe. - Enfin, la 3e un peu particulière : dz^2 qui a une forme Différente des autres pour arriver à recombinaison toutes ces orbitales Entre elles et exploiter tt l'espace donné en l'intimant les Interactions. 	<p>3 OA développées sur Les bissectrices des Axes 3 plans 2 plans nodaux pour chacune</p> <p>2 OA développées sur les axes</p>

On a les 3 nombres quantiques n , l et m , et il y a en a un dernier qui est inscrit dans un des tableaux plus au-dessus qui permet de caractériser les répulsions : **le nombre magnétique de spin s** .

Il se ne sert pas dans la résolution de l'équation de Schrödinger, mais va être 1 élément supplémentaire A 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

(En utilisant ces nombres quantiques, on pourra mieux comprendre l'électron ainsi que son énergie, sa forme orbitale, son orientation et son spin. Ils ont un rôle essentiel pour comprendre la structure électronique des atomes).

Dès qu'on passe à des atomes poly-électronique, c'est-à-dire avec plusieurs électrons, ce qui va être le cas pour la totalité des éléments du tableau périodique sauf l'hydrogène. Ça se compliquera d'avantage car il y aura 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 la même équation.

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 :

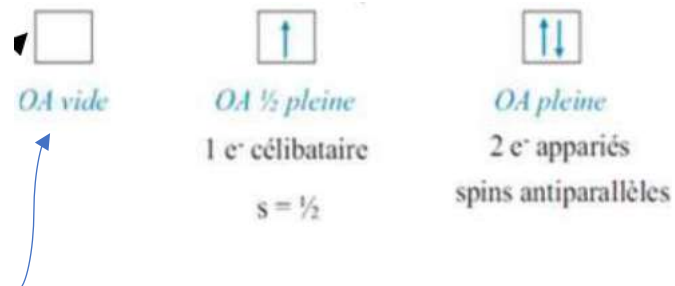
- Pauli
- Hund
- Klechkowski

On étudiera ces règles dans la deuxième partie.

II. ORGANISATION DES ÉLECTRONS DANS L'ATOME :

LES DIFFÉRENTES RÈGLES :

<p><u>PRINCIPE</u> <u>D'EXCLUSION DE</u> <u>PAULI</u></p>	<p style="text-align: center;">« Dans un atome, 2 électrons ne peuvent jamais avoir les 4 mêmes nb quantiques »</p> <p>Cela signifie que n, l, m peuvent être pareils, mais s sera forcément #, on ne peut pas avoir n, l, m et s identiques.</p> <p>On doit alors tjrs avoir des combinaisons qui soient #. 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 ».</p>
---	--



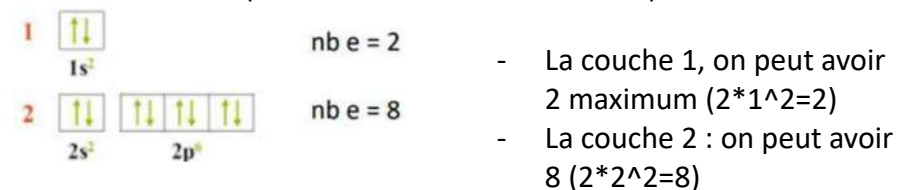
Une case quantique représente une orbitale atomique vide. Dans une orbitale, on va pouvoir placer au maximum 2 électrons.

Car nous aurons la capacité de placer seulement 2 particules avec des nombres quantiques différents (ils vont donc différer au niveau du spin s).

Si on met un 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 **spins antiparallèles +++**

Les nb de spin sont différents, les électrons sont antiparallèles. C'est pour cela que l'on fait des flèches en sens inverse dans les cases quantiques.

Ça nous permet de pouvoir avoir le nombre d'électron maximal par couche $N = 2n^2$. (N : le nb d'électrons maximum)



Ainsi, cette première règle, nous dit qu'on peut ranger les électrons dans les cases quantiques à nb de 2 avec des spins

LA RÈGLE DE HUND

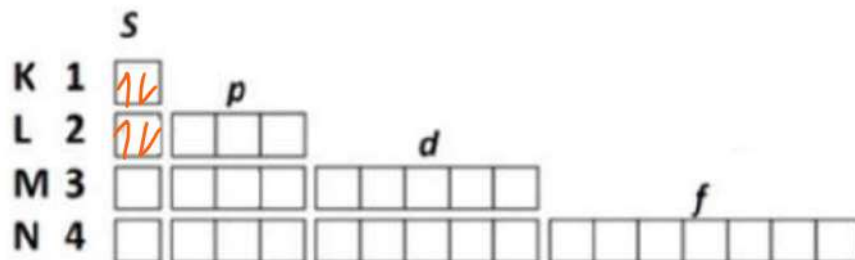
« Dans une sous-couche, le niveau minimum d'énergie est atteint lorsque le remplissage d'électrons se fait avec une valeur maximale de spin. »

Cela signifie que dans un premier temps, on va mettre tous les électrons séparés dans chaque case quantique.

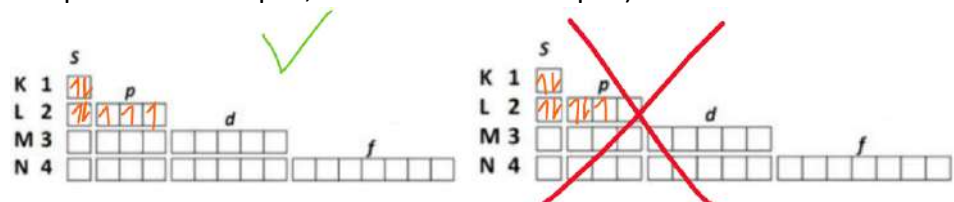
Pour une sous-couche donnée, les électrons occupent le nombre maximum d'orbitales atomiques de même énergie (le nombre de cases quantiques pour une même sous-couche) et ont des spins de mêmes valeurs s'ils ne sont pas appariés.

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

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).



Il faudra d'abord placer un électron dans chacune des cases. On les étale avec le même nombre de spin (= on a donc toutes nos flèches dans le même sens). Après avoir fait cela on rajoute les électrons afin de former des couples.

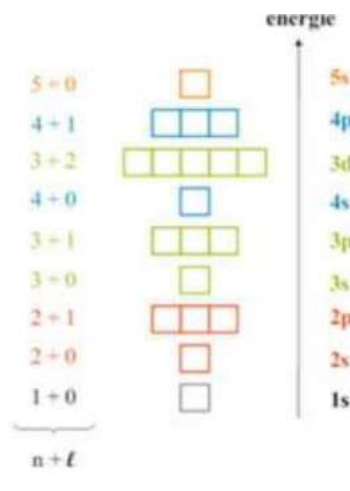
Ainsi on ne les apparie pas d'abord, on les distribue dans les cases quantiques et seulement ensuite on les apparie +++

Cette règle permet ainsi de minimiser la répulsion électron-électron et d'obtenir une configuration électronique plus stable et de plus basse énergie.

LA RÈGLE DE KLECHKOWSKI

C'est une règle complémentaire à celle de Hund permettant de comprendre la répartition des électrons dans les atomes.

Elle va permettre de prévoir comment remplir chaque niveau d'orbitale atomique

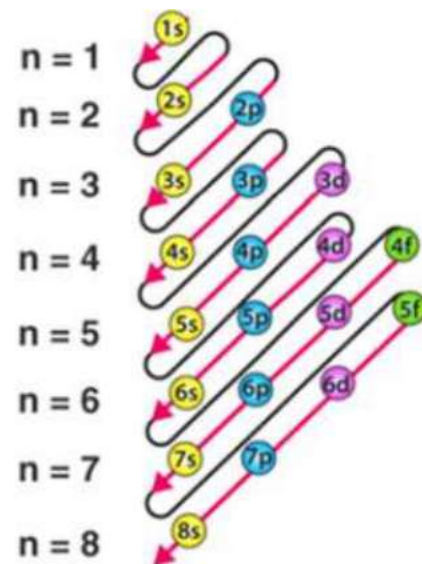


Ce remplissage se fait par ordre croissant $n + l$ d'énergie.

En effet, on va au fur et à mesure remplir des niveaux de + en + importants.

Il se fait par ordre croissant de n lorsque les sous couches ont des valeurs de $n + l$ égales.

Selon le prof : il suffit de suivre les flèches :

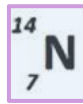


Ordre: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d... +++

Attention : la 4s a un niveau d'énergie **inférieur** à la 3d, c'est la raison pour laquelle on l'a rempli avant la 3d.

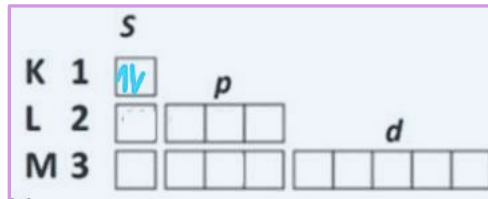
On ne finit pas la série 3, on commence par la série 4 avant.

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 !

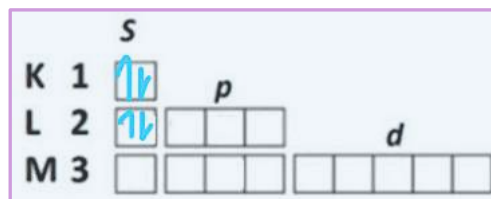
Quelques exemples :

Exemple 1 : Z=7 (Azote) :

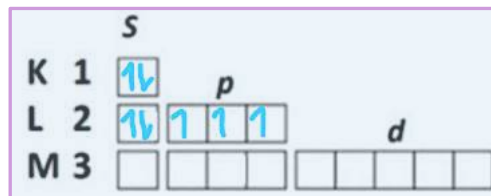
- Le numéro atomique Z correspond aussi au nombre d'électrons.
- On a alors 7 électrons à placer dans les cases quantiques.
- On remplit la première case 1s : on met 2 spins antiparallèles.



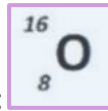
- Il reste ainsi 5 électrons à positionner
- On remplit d'abord la 2s dans son intégralité (vous constatez que ce diagramme très simplifié ne donne pas le niveau des cases quantiques, il donne juste l'ordre qui peut amener à confusion lors du remplissage => on retient l'ordre de Klechkowski !!)
- On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



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

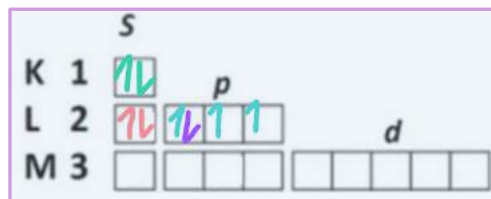


- Si on veut écrire la structure de l'atome, on va avoir : 1s² (l'orbitale 1s est pleine de 2 électrons), 2s² (l'orbitale 2s est pleine), 2p³ (l'orbitale p qui peut normalement accueillir 6 électrons est alors à moitié remplie).



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 correspondantes.**
- Ensuite, avant de passer à la couche suivante je dois absolument remplir la 2p.
- Mais il n'en reste **qu'1, le 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 À SAVOIR FAIRE !
-



Exemple 3 : le soufre Z = 16

Si on regarde le soufre un peu + complexe, cependant ça reste toujours pareil dans la façon de faire :

- On remplit la 1s, la 2s, il reste 12 électrons
- On passe à la 2p, je remplis 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 remplis et il restera 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 électron par cases quantiques**, puis l'électron restant s'apparie en **doublet**.
- On obtient: **1s², 2s², 2p⁶, 3s², 3p⁴**.

Petite remarque : selon le prof, il ne faut pas se prendre la tête avec les exceptions à règle de Klechkowski, donc retenez l'ordre et vous ne mettez JAMAIS la 3d avant la 4s ok !!! le prof aime piéger dessus ! et aussi vous n'utiliserez pas non plus les gaz nobles pour simplifier la conf Électronique, vous devez tout écrire.

LE TABLEAU PÉRIODIQUE ET LES PROPRIÉTÉS DES ÉLÉMENTS :

Tous ces éléments mis ensemble se retrouve 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 nb 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 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).

	Alcalins		Alcalino-terreux										Éléments de transition					Halogènes	Gaz rares
	1	2	18 groupes										13	14	15	16	17	18	
1	H	He																	
2	Li	Be											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					
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Nd	No	Lr			

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

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

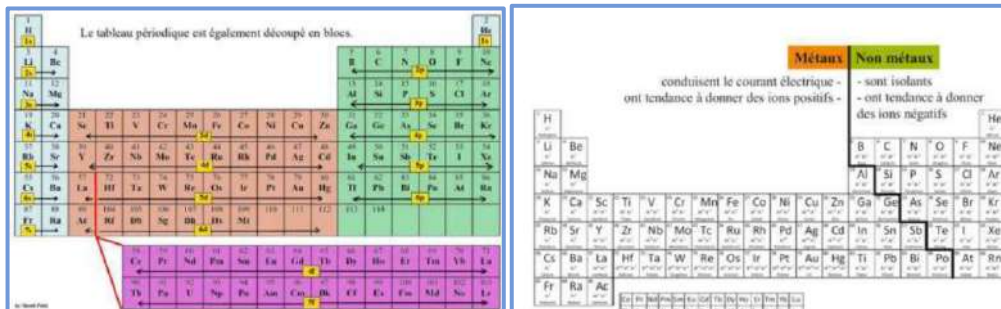
⇒ On peut les regrouper par bloc :

- 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.

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

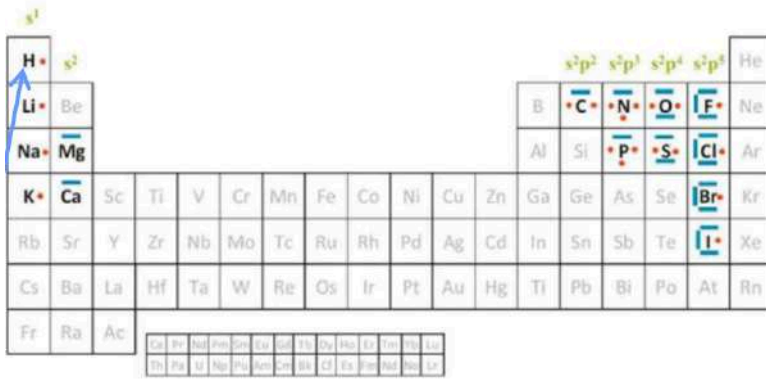
- **Métaux** : atomes qui conduisent le courant => tendance à former des ions **positifs**.
- **Non-métaux** : atomes isolants, qui ne conduisent PAS le courant => tendance à former des ions **négatifs**.
- On peut aussi subdiviser en **métaux de transition** (bloc du milieu).



STRUCTURE DE L'ATOME ET MODÈLE DE LEWIS :

Tous ces atomes dans la même colonne ont la **même couche électronique externe = la couche de valence**. Cette couche de valence va nous permettre de représenter les atomes suivant le modèle de Lewis.

Le **modèle de Lewis** va représenter les électrons des couches extérieures d'un atome appelé également les électrons de valence. Ce sont ces électrons-là qui seront impliqués dans la liaison et donc dans la construction des molécules.



Apprenez les différentes représentations de Lewis ci-contre, c'est utile en QCM.

Exemple : atome d'hydrogène

Où le point représente 1 électron

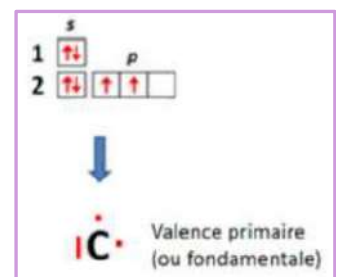
Où le doublet (la barre) = 2 électrons

On voit que cette représentation de l'azote correspond bien à la dernière couche extérieure, la couche de valence. On a ici **2 électrons appariés** qui forment le **doublet** (barre) et **3 électrons célibataires** (points).

CAS PARTICULIER DU CARBONE :

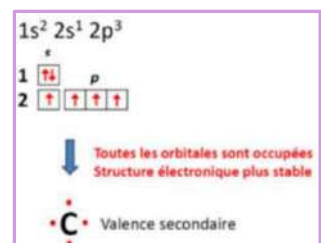
Dans le cas du carbone, on a **1s², 2s², 2p² = 6 électrons**.

On a alors la représentation de la couche de valence qui nous donne ceci.



On sait d'expérience que le carbone peut faire + que 2 liaisons, il peut en faire **4**.

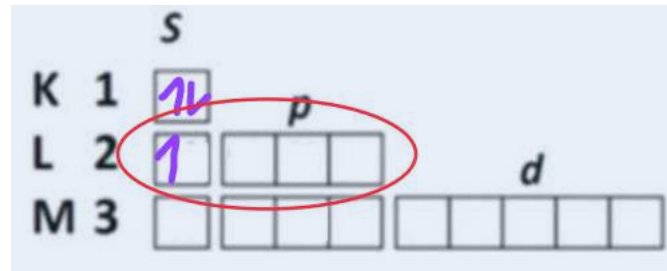
Et c'est pour ça que le carbone est souvent représenté dans sa **valence secondaire** (déplacement d'électrons par rapport à la configuration initiale du carbone) qui comporte **4 électrons célibataires** qui pourront faire 4 liaisons.



Il subit ce que l'on appelle une « transition électronique » que vous verrez dans le cours suivant.
Le tutorat est gratuit, toute reproduction ou vente est interdite

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.



En revanche, vu que je suis au niveau 2, les orbitales p existent quand même.

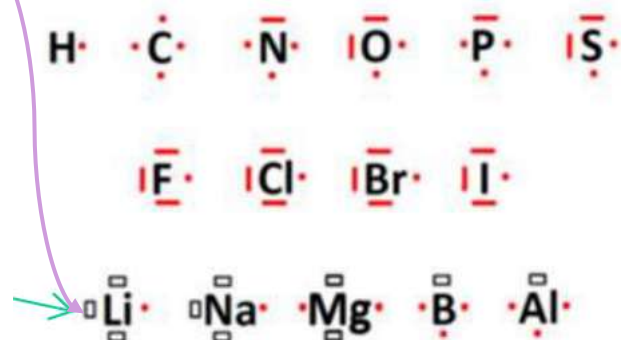
Ce qu'il y a de très important à se rappeler c'est que du moment où on a des électrons à un certain niveau, **ce n'est pas parce que les autres orbitales sont vides qu'elles ne sont pas présentes**.

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



Bravo à toi d'avoir fini ce premier cours ! j'espère que la majorité des notions ont été comprises. Si besoin je suis là, envoyer un max de message ! je vous ferais des schémas, vidéos explicatifs. Pleins de Dm en folie et des récap de la mort

Ne vous inquiétez pas je suis là ! <333333

Déiiiiii :

Aux meilleures tutrices qui ont remportés le SG, vous avez sur le podium : Meyli, aka votre meilleure tutrice d'histologie (oupsss nahélé et louu), Elisa qui va vous faire adorer l'anatomie générale au S2 accompagnée d'Anaëlle. C'est une équipe de choc. Ensuite Manonn qui va aussi vous faire adorer la microbiologie. Ce sont des personnes en or vraiment.

Dédi à Emma aka ma binome de TP de chimie où on ne s'avait même pas calculer une concentration.

Dédi à Jade qui a les meilleurs goût musicaux

Dédi à mes fillotsss : Célia, Emilie, Manon et téa, ce sont mes fillotes officielles, elles sont incroyables. Je souhaite votre réussite <3
Également mes fillots officieux : Nathan, lina et emna, donnez tout je crois aussi en vous <33

Dédi à toute la clic des tuteurs et chefs tuts, on vous aime <333

Dédi aux meilleurs co-tuts : Bidoli et Killian, j'aurais pas pu avoir mieux

Dédi à mes amis de P1, il y en a tellement : Iris aka babette, on adore toucher l'eau. Soleme notre future pharmacienne toujours dans l'ambiance, Alexy toujours la pour avoir les références pour rigoler et Lilouu qui ramène sa meilleure humeur h24.

Dédi à ma famille et amis de longues dates

Dédi à mes nouveaux pootes de PROMO de Dentaire, ils sont trop cools !!! Margaux toujours partante pour faire la fête et Shara qui n'a pas le droit de manger trop de sucres. On a aussi notre élu de promo baptiste et notre BDE (chacha la best) désolé ma marraine

Kilianémie

