

PARTIE I

L'atomistique

I. Introduction et concepts généraux

1. Généralisation sur les atomes

Un atome est un élément chimique. Voici quelques spécifications sur les atomes :

- Loi de Proust : les différents éléments ont une taille fixe
- Loi de combinaison des atomes : Les atomes se combinent en relation simple
- Propriété des gaz : dans un volume donné de gaz, dans des conditions de température et de pression donné, quelque soit le gaz, il y aura toujours le même nombre de molécule dans ce volume qui est donné par l'équation d'état des gaz parfaits suivante : $P.V = n.R.T$ avec P = pression (Pa) ; V = volume (m^3) ; n = quantité de matière contenu dans ce volume (mol) ; R = constante et T = température (Kelvin).

Rappel :

Une mole correspond à la quantité de matière contenu dans $6,02 \cdot 10^{23}$ entités élémentaires ($6,02 \cdot 10^{23}$ correspond au nombre d'Avogadro = N). Cela correspond aussi à la quantité de matière contenu dans 12g de ^{12}C (Exemple : 1mol d' H_2O = 18g).

Il existe à l'heure actuelle environ 100 atomes ou éléments dont 90 sont naturels (Hydrogène → Uranium). Les atomes restant sont artificiels et sont donc créés par l'Homme.

On passe donc de la matière, aux molécules formant cette matière, aux atomes élémentaires formant ces molécules, puis enfin aux particules élémentaires formant les atomes.

2. La mise en évidence des électrons

L'expérience de Thomson qui consiste à créer un potentiel électrique entre deux plaques métalliques parallèles dans une enveloppe en verre où le vide a été effectué, a permis de mettre en évidence une particule élémentaire : **l'électron**. Par ses travaux, il en a déduit le

$$\text{rapport } \frac{e}{m} = \frac{2V}{(B^2 r^2)} .$$

Mulliken a réussi à calculer la charge élémentaire de cet électron : $e = -1,6 \cdot 10^{-19} C$ et sa masse : $m_e = 9 \cdot 10^{-31} kg$.

Cependant, étant donné que les électrons sont des particules élémentaires chargés négativement et sachant que les atomes sont des éléments électriquement neutre, il doit alors exister, dans la partie restante qui constitue avec les électrons l'atome, des particules électriquement chargés, positivement. (Fig. 1)

3. La mise en évidence des protons et des neutrons

La découverte du proton a été faite bien après celle de l'électron. On a pu constater que cette particule était chargée positivement comme il était nécessaire pour assurer l'électro-

neutralité des atomes. La masse d'un proton a été calculé comme étant : $m_p = 1836 m_e$.
Cependant, d'après certains calculs, quelque chose manquait. La solution à ce problème a été résolu en 1932 possédant une masse de : $m_n = 1839 m_e$.

4. Classement des éléments chimiques

Un élément chimique est décrit sous cette forme : ${}^A_Z X$

- ◆ A = nombre de masse : correspond au nombre total de proton et de neutrons
- ◆ Z = nombre de charge (ou numéro atomique) : correspond au nombre de protons qui peut correspondre au nombre d'électrons lorsque l'élément est sous une forme électriquement neutre.

Exemple :

- ${}^{56}_{26} Fe$ $\left\{ \begin{array}{l} 26 \text{ protons} \\ 30 \text{ neutrons} \\ 26 \text{ électrons car neutre} \end{array} \right.$
- ${}^{56}_{26} Fe^{2+}$ $\left\{ \begin{array}{l} 26 \text{ protons} \\ 30 \text{ neutrons} \\ 24 \text{ électrons} \end{array} \right.$
- ${}^{56}_{26} Fe^{3+}$ $\left\{ \begin{array}{l} 26 \text{ protons} \\ 30 \text{ neutrons} \\ 23 \text{ électrons} \end{array} \right.$

5. Les nucléides et les isotopes

Parmi la centaine d'éléments qui existe, il existe des éléments chimiques qui possèdent le même noms que d'autre, qui possèdent le même nombre de charges, mais pas le même nombre de masses : on dit qu'il peut y avoir plusieurs nucléides Ces éléments sont alors appelés : **isotopes**.

Sur les 100 éléments environ, il existe près de 1200 nucléides dont seulement 300 peuvent être considérés comme stable.

Exemple :

- ${}^1_1 H$ (99,7%) ; ${}^2_1 H$ (0.3%) ; ${}^3_1 H^*$ (traces) [hydrogène, deutérium, tritium]
- ${}^{12}_6 C$ (99%) ; ${}^{13}_6 C$ (1%) ; ${}^{14}_6 C^*$ (traces)

6. Stabilité des éléments

Étant donné que des éléments chimiques peuvent avoir plusieurs isotopes, il peut se passer que l'élément possède trop de neutrons ; il peut aussi arriver que l'élément soit gros et donc possède trop d'électrons ou de protons. Dans ces différents cas cité ci-dessus, les éléments deviennent alors instable. Dans ce cas là, il se produit des phénomènes de radioactivité. Suivant les cas, voilà ce qu'il se produit :

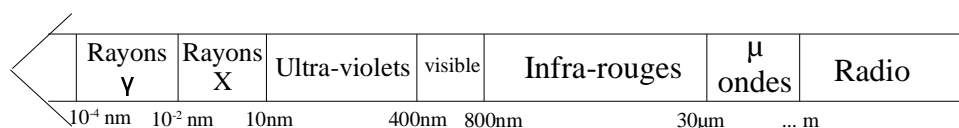
- Quand il y a trop de neutrons, il y a émission de particules β^- selon la formule suivante : ${}_0^1 n \rightarrow {}_1^1 p + {}_{-1}^0 e$

- Quand il y a trop de protons, il y a émission de particules β^+ selon la formule :

$${}_1^1p \rightarrow {}_0^1n + {}_1^0e^+$$
- Quand les éléments sont trop lourds, il y a alors émission d'une particule α
- Lorsque qu'une réaction nucléaire se produit, l'élément est dans un état excité. Pour revenir à la normale, c'est à dire, pour se désexciter, il y aura l'émission d'un rayonnement électromagnétique γ .

Rappel :

Schéma des rayonnements électromagnétiques en fonction de la longueur d'onde :



II. Comment s'assemblent protons, neutrons et électrons ensemble ?

1. Différence noyau / électrons

(Cf. fig. 2)

Cette expérience consiste à bombarder une feuille d'or d'épaisseur de quelques microns qui se trouve au centre d'un écran fluorescent, à partir d'une source de particules α .

On peut alors remarquer qu'il y a une majorité de particules α qui ne sont pas déviées (a). Certaines sont déviées (b) et une infime partie est renvoyée en arrière.

Nous pouvons en conclure que les électrons gravitent autour d'un noyau très petit. Cette gravitation peut être expliquée par la **force de Coulomb** : $f_c = \frac{-1}{4 \pi \epsilon_0} \cdot \frac{qq'}{r^2}$.

En effet, si un noyau d'hélium passe loin d'un noyau d'or, il n'est pas dévié, il continue sa trajectoire. En revanche, lorsqu'une particule α rentre dans le champ d'action d'un noyau d'or, il se produira un effet de répulsion et la particule verra sa trajectoire modifiée : elle changera de direction. Une fois qu'elle sera loin de l'effet du noyau d'or, elle continuera en ligne droite et ira s'écraser sur l'écran en (b). Dans le cas où la particule α arrive dans l'axe d'un noyau d'or, il sera renvoyé en arrière et ira s'écraser sur l'écran en (c). Mais lorsqu'il y a une majorité de particules qui s'écrasent en (a), cela signifie qu'il y a très peu de chance de rencontrer des noyaux d'or et donc que les noyaux sont très petits.

En conclusion : le noyau a une taille très petite et est chargé positivement. Il possède un cortège électronique chargé négativement et composé des électrons. D'après le calcul suivant :

$\frac{r_a}{r_n} \simeq 20000$ donc $r_n \simeq 5 \cdot 10^{-15} m$ (taille d'un atome $\simeq 1$ angstrom) . On peut alors en conclure que **la matière est remplie de vide**.

2. Le parcours de la modélisation des électrons par rapport au noyau

a. Le modèle de Rutherford et Perrain

Pour tenter de modéliser le positionnement des électrons par rapport au noyau, Rutherford et Perrain se basent sur les résultats expérimentaux (fig. 5) du spectre de l'hydrogène. Pour ce faire, de l'hydrogène gazeux est placé dans un tube à décharge. Lorsque l'on y fait passer du courant, l'hydrogène s'excite et les électrons possèdent alors une forte énergie qui leur permet de changer de couche électronique. Cependant, étant donné que les électrons sont excités, ils vont tenter de se désexciter en libérant l'énergie qui leur avait été fournie par l'émission d'un rayonnement lumineux. Cette énergie est envoyée en paquet que l'on nomme : **quantum**. Un dispositif adéquat permet de voir les longueurs d'onde émises par l'hydrogène. L'énergie libérée peut être mesurée par la formule suivante :

$$\Delta E = h \delta = h \frac{c}{\lambda} \text{ avec } h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s et } c = 3 \cdot 10^8 \text{ m.s et } \lambda = \text{longueur d'onde}$$

$$\text{et } E_n = -13,6 \frac{1}{n^2}$$

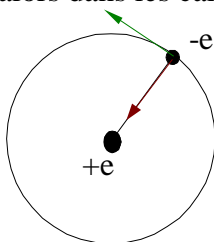
Cependant, l'idée de Rutherford avait besoin d'avoir une discontinuité dans l'énergie, mais Maxwell, avec les lois de l'électromagnétisme ne rendent pas compte de l'aspect discontinue de l'énergie. Par conséquent, il faut donc envisager d'autres idées.

b. Le modèle Niels Bohr

Bohr part sur de nouvelles bases et commence par affirmer qu'il n'est pas possible d'utiliser les lois de la physique « normale » pour les particules élémentaires. Alors, pour ce faire, il applique les lois de la mécanique classique avec une **condition de quantification (Quantification du moment cinétique)**.

Pour établir un modèle, Bohr se base sur des niveaux d'énergies quantifiés. D'après lui, l'électron définit des orbites stationnaires et ne rayonne pas d'énergie. Dans le cas où l'on excite l'électron, celui-ci va acquérir de l'énergie et va alors, de ce fait, changer d'orbite stationnaire, uniquement si l'énergie fournie à l'électron est suffisante pour qu'il accède à cette orbite. Pour retourner à son état initial, il n'a qu'à restaurer l'énergie qu'on lui a fournie, et, n'ayant pas assez d'énergie pour rester sur cette orbite, il change d'orbite et retombe sur son orbite stationnaire de départ.

Bohr se lance alors dans les calculs pour vérifier son modèle :



$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \text{ et } \sigma = m \vec{v} \wedge \vec{r} \Leftrightarrow \sigma = mvr = n \hbar (n \in \mathbb{N})$$

$$\sum \vec{f} = m \vec{a} = m (\vec{a}_n + \vec{a}_r) = m \vec{a}_n \text{ et } \sum \vec{f} = \vec{p} + \vec{f}_c \text{ or comme mon néglige } \vec{p} \text{ alors :}$$

$$m \vec{a}_n = \vec{f}_c \Leftrightarrow \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \Leftrightarrow mv^2 = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Mais d'après la formule de l'énergie totale d'un système, on peut dire :

$$E_t = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} \right) - \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{r} \Leftrightarrow E_t = \frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \left(\frac{-e^2}{2r} \right)$$

$$m^2 v^2 r^2 = n^2 \hbar^2 \Leftrightarrow m (mv^2) r^2 = m r^2 \left(\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \right) = n^2 \hbar^2$$

$$r_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2 n^2}{m e^2} \Leftrightarrow r_n = a_{0n}^2 \text{ et}$$

$$E_t = \frac{-1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2 m e^2}{2 \times 4 \pi \epsilon_0 \hbar^2 n^2} \Leftrightarrow E_t = \frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} = -13,6 \times \frac{1}{n^2}$$

Exemple :

$$E_{n_1} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(4 \pi \epsilon_0)^2} \frac{m e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n_1^2}$$

$$E_{n_2} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(4 \pi \epsilon_0)^2} \frac{m e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n_2^2}$$

$$\Delta E = h \delta = h \frac{c}{\lambda} = hc \times \frac{1}{\lambda} \text{ (où } \frac{1}{\lambda} \text{ est le nombre d'onde noté } \bar{\delta} \text{)}$$

$$\Delta E = \frac{1}{2} \frac{1}{(4 \pi \epsilon_0)^2} \frac{m e^4}{\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \Leftrightarrow \bar{\delta} = r_h \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

On peut alors remarquer que l'on a un écart de 0,01% entre la théorie et la pratique

On peut donc penser que le modèle de Bohr convient. Seulement, dès que l'on test le modèle avec des atomes possédant plus d'un électron, elle ne convient plus.

En conclusion, nous pouvons dire que ce modèle ne convient uniquement que pour les systèmes à un électron et uniquement ça.

c. Amélioration du modèle de Niels Bohr

Pour parer à ces problèmes, Bohr va modifier son principe : la nouveauté est de passer d'une orbite circulaire à une orbite elliptique. Pour ce faire, nous devons apporter, en plus du nombre quantique : $n \in \mathbb{N}^*$ qui décrit l'orbite circulaire, un nouveau nombre quantique noté l , et qui répond à cette équation : $\forall l \in \mathbb{N}; 0 \leq l \leq n-1$ et qui décrira l'orbite elliptique. Pour compléter la chose, il est nécessaire d'intégrer un troisième nombre quantique pour l'effet Zeeman (dans le champs magnétique) : $\forall n_l \in \mathbb{Z}; -l \leq n_l \leq l$.

Mais il est aussi nécessaire d'intégrer un quatrième nombre quantique : $n_s = \pm \frac{1}{2}$.

Cependant, ce modèle n'explique pas tout, en particulier pour certaines réactions radioactives (Quand le noyau capte des électrons).

d. De Broglie : la dualité de la matière

Après les recherches d'Einstein sur l'effet photoélectrique qui prouve qu'un photon est à la fois une onde et à la fois une particule, De Broglie a émit l'hypothèse que toute particule en mouvement pouvait se voir associer un mouvement ondulatoire de longueur d'onde :

$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$. En effet, d'après les expériences d'Einstein : si la fréquence de la lumière

$\delta = h \nu$ est inférieure à l'énergie d'arrachage d'un électron au métal $\delta_0 = h \nu_0 = \theta_0$, alors le photon peut être assimilé à une quantité d'énergie d'après la formule $E = mc^2$

$$h \nu = mc^2 = h \frac{c}{\lambda} \Leftrightarrow \lambda = \frac{h}{mc} = \frac{h}{p} .$$

D'après l'effet Compton (fig 7 et 8), lorsque le photon rentre en collision avec l'électron, on remarque que le photon est diffusé. Cela prouve donc le fait qu'un photon est aussi une particule, en plus d'une onde.

S'il on émet l'hypothèse qu'une particule en mouvement peut se voir associer un mouvement ondulatoire respectant la formule ci-dessus, alors, intéressons nous aux effets que ceci aurait pour les objets macroscopiques et microscopiques :

<i>données</i>	<i>Balle de tennis</i>	<i>électron</i>
<i>masse</i>	0,05 kg	$9,1 \cdot 10^{-31}$ kg
<i>vitesse</i>	50 m.s ⁻¹	$7 \cdot 10^6$ m.s ⁻¹
$\lambda = \frac{h}{mv}$	$2,6 \cdot 10^{-34}$ m	$1 \cdot 10^{-10}$ m (taille des atomes)

On peut donc voir que si cela était vérifié, les conséquences les plus importantes seraient pour les particules microscopiques comme les électrons et n'auraient absolument aucune influence sur de grosses particules.

Ce ne sera qu'en 1927 que Davisson et Germer démontreront que la matière peut se comporter comme une onde. Pour réussir à le démontrer, ils se sont servi d'un montage permettant de faire des diffractions de molécules par rayon X (10^{-2} à 10nm) en remplaçant le faisceau de rayons X par un faisceau d'électrons. Et si la relation s'avère exact, il suffit de faire varier la vitesse des électrons pour pouvoir ajuster la longueur d'onde. Le résultat de cette expérience (fig. 11) en a été que le faisceau d'électrons a fourni les mêmes résultats que le faisceau de rayons X, ce qui prouve que les électrons et plus particulièrement, **les particules, peuvent se comporter comme des rayons X et affichent des propriétés ondulatoires.**

e. Mécanique quantique, principe d'incertitude

Grâce à toutes ces nouvelles découvertes, Heisenberg et Schrodinger développent une nouvelle mécanique : la mécanique ondulatoire ou mécanique quantique.

Heisenberg développe un tout nouveau principe qui bouleverse un peu les données qui est le principe d'incertitude. Celui-ci nous explique que l'on ne peut pas connaître toutes les informations sur la position d'une particule. $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.

Exemple :

Pour illustrer ce principe, prenons l'exemple d'un électron dont on connaît sa vitesse à

1/1000 :

$$\Delta v = 7 \cdot 10^3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\Delta x \geq \frac{10^{-34}}{2 \cdot 10^{-30} \times 7 \cdot 10^3} = \frac{1}{14} \cdot 10^{-7} \text{ m} = 7 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 7 \text{ nm}$$

D'après cet exemple, nous pouvons voir que nous avons une très grande imprécision sur la position de l'électron par rapport au noyau.

On passe alors de la notion de trajectoire à la notion de domaine de probabilité de présence que l'on appelle orbitale (orbitale atomique).

f. Équation de Schrodinger

ψ est la fonction de l'onde de la particule :

$$\psi = A \sin(2 \pi \delta t + \varphi) = A \sin\left(2 \pi \frac{u_\varphi}{\lambda} \times t + \varphi\right) = A \sin\left(2 \pi \frac{x}{\lambda} + \varphi\right)$$

$$u_\varphi \text{ (vitesse de phase)} = \lambda \delta \Leftrightarrow \delta = \frac{u_\varphi}{\lambda}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = A \frac{2\pi}{\lambda} \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} + \varphi\right)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -A \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \left(\sin \frac{2\pi x}{\lambda} + \varphi\right)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{h^2} m^2 v^2 \psi = 0 \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2 m}{h^2} \cdot 2E_c \psi = 0$$

$$\text{or } E_t = E_c + V \text{ donc } \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \Leftrightarrow -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V \psi = E \psi$$

$$\text{et à tout l'espace : } \boxed{-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left[\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} \right] + V \psi = E \psi}$$

Pour simplifier l'équation de Schrodinger, on utilise des opérateurs. Le résultat est :

$$H \psi = E \psi$$

$$H = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left[\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} \right] + V$$

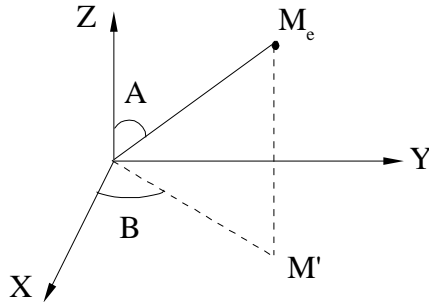
On remarque donc que la trajectoire est remplacé par la probabilité de présence : ψ est une fonction d'onde, qui, en passant par l'orbitale atomique, permet d'aboutir à l'équation de Schrodinger.

Pour utiliser ψ , on effectue un changement de variable :

$$\psi_{(x; y; z)} \Rightarrow \psi_{(r; \nu; \varphi)} = \mathbb{R}_{(r)} \times \Theta_{(\theta)} \times \Phi_{(\varphi)}$$

$\mathbb{R}_{(r)}$ est une fonction radiale qui nous donne l'énergie de la fonction

$\Theta_{(\theta)} \times \Phi_{(\varphi)}$ est une fonction angulaire qui nous donne la forme de la fonction



($A = \theta$ et $B = \varphi$)

La fonction ψ est :

- ✓ Continue et définie sur tout l'espace
- ✓ Bornée
- ✓ S'annule à l'infinité
- ✓ Doit être normalisée

g. Densité de probabilité de la présence de l'électron

Nous allons maintenant rechercher une équation qui nous donne la probabilité de trouver l'électron dans un espace donné.

$$\frac{dP}{d\tau} = \psi^2 \text{ (ou } \psi \psi^* \text{ (complexe))}$$

avec dP qui correspond à la variation élémentaire de la probabilité de présence et $d\tau$ qui correspond à la variation élémentaire de volume. (Analogie entre les phénomènes optiques et la mécanique quantique).

$$\text{Condition de normalisation : } \int_{\tau} \psi^2 d\tau = 1 \Leftrightarrow \int dP = \int_{\tau} \psi d\tau$$

$$\text{Condition d'orthogonalité : } \left. \begin{array}{l} H \psi_n = E_n \psi_n \\ H \psi_m = E_m \psi_m \end{array} \right\} \Leftrightarrow \int_{\tau} \psi_n \psi_m d\tau = 0$$

La résolution des fonctions $\mathbb{R}_{(r)}; \Theta_{(\theta)}; \Phi_{(\varphi)}$ nécessite d'introduire des nombres entiers :

- $\mathbb{R}_{(r)}$ nécessite l'introduction de n et l (les deux premiers nombres quantiques)
- $\Theta_{(\theta)}$ nécessite l'introduction de l et m_e
- $\Phi_{(\varphi)}$ nécessite l'introduction de m_e

ψ est une fonction de l'espace : $\psi_{n; l; m_e}$

h. Les améliorations de la modélisation par Dirac

Dirac a tenu compte de la théorie de la relativité dans la mécanique quantique et se sert d'un quatrième nombre quantique : $n_s = \pm \frac{1}{2}$.

La fonction d'onde globale devient alors : $\psi_{(\text{espace})} \times f_{(\text{spin})}$. Et analysons de suite ce que cela nous donne en fonction de n :

→ $n = 1$ (niveau fondamental de l'atome d'hydrogène)

alors $l = 0$ et $n_l = 0$. Donc : $\psi_{(1;0;0)} = 1s$ (orbitale à symétrie sphérique) (fig. 18). Chaque orbitale peut alors contenir :

- ✓ 0 électron : c'est une **lacune électronique**
- ✓ 1 électron : c'est un **électron célibataire**
- ✓ 2 électrons (au maximum) : c'est un **doublet** ; étant opposé par le nombre de spin ($+\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$).

Mais d'après le *principe de Pauli* : **deux électrons ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques tous identiques.**

→ $n = 2$ Alors : $l = 0 \rightarrow n_l = 0 \rightarrow \psi_{(2;0;0)}$ (2s) ou

$$l = 1 \rightarrow \begin{cases} n_l = -1 \rightarrow \psi_{(2;1;-1)} \text{ (2p)} \\ n_l = 0 \rightarrow \psi_{(2;1;0)} \text{ (2p)} \\ n_l = 1 \rightarrow \psi_{(2;1;1)} \text{ (2p)} \end{cases} \quad (2p_x \text{ ou } 2p_y \text{ ou } 2p_z)$$

Étant donné que tous les trois ont la même énergie, on dit alors qu'ils sont **dégénérés**.

→ $n = 3$: nous avons alors 3s, 3p et 3d ($n_l = -2 ; -1 ; 0 ; 1 ; 2$)

i. Les niveaux d'énergies

La valeur de l'énergie est donnée par l'équation de Schrodinger : $H \psi_{(1s)} = E_{(1s)} \psi_{(1s)}$ où E est nommé la **valeur propre** et qui donne l'énergie en électron volt (eV) :

$$E_{(1s)} = -13,6 \text{ eV}$$

ψ est appelée fonction propre de l'opérateur si le ψ des deux côté du signe d'égalité est le même.

Dans le cas où l'on arrive plus à calculer le résultat de l'équation de Schrodinger, on obtient des valeurs moyennes. On arrive à calculer les valeurs exactes pour les atomes à un seul électron, car cela devient très vite compliqué.

Pour les hydrogénoïdes : $E = f(n)$

Pour les atomes polyélectroniques : $E = f(n; l)$

Par conséquent : pour les hydrogénoïdes, le niveau d'énergie est donné par le nombre quantique n . (fig. 17)

III. Étude de l'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène

1. Calcul de la densité de probabilité volumique

Étant donné que nous étudions la couche 1s, les nombres quantiques sont :

$$n = 1 ; l = 0 ; m_l = 0$$

Alors : $H \psi_{(1;0;0)} = E_1 \psi_{(1;0;0)} \Rightarrow \psi = N e^{\frac{-r}{a_0}}$ avec r qui est la distance et a_0 qui est la distance de la première orbite de Bohr.

$$\int_{\tau} \psi^2 d\tau = 1 \Rightarrow \int_{\tau} N^2 e^{\frac{-2r}{a_0}} d\tau \quad \text{rappel : } d\tau = 4\pi r^2 dr$$

$$\int_0^{\infty} N^2 e^{\frac{-2r}{a_0}} 4\pi r^2 dr \Rightarrow 4\pi N^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{\frac{-2r}{a_0}} dr = 1$$

$$\int_0^{\infty} x^r e^{-\alpha x} dx = \frac{r!}{\alpha^{r+1}}$$

$$n = 2 \Rightarrow \alpha = \frac{2}{a_0} \Rightarrow \int = \frac{2!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^3} = \frac{a_0^3}{4}$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

$$\psi_{1s} = N e^{\frac{-r}{a_0}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{\frac{-r}{a_0}}$$

$$\frac{dP}{d\tau} = \psi^2 \Leftrightarrow \frac{dP}{d\tau} = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}}$$

(fig. 15 2 derniers graphes en bas à droite)

2. Calcul de la densité de probabilité radiale

Maintenant, nous allons rechercher la probabilité de trouver l'électron en fonction de la distance par rapport au noyau :

$$\frac{dP}{d\tau} = \frac{dP}{4\pi r^2 dr} = \psi^2$$

$$\frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 \psi^2 \Leftrightarrow \frac{dP}{dr} = 4\pi r^2 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{\frac{-2r}{a_0}} = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{\frac{-2r}{a_0}}$$

$$\text{donc } \frac{d}{dr} \left(\frac{dP}{dr} \right) = \frac{4}{a_0^3} \left[2r e^{\frac{-2r}{a_0}} + r^2 \left(\frac{-2}{a_0} \right) e^{\frac{-2r}{a_0}} \right]$$

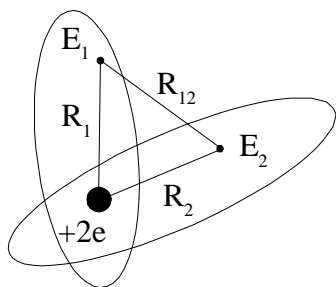
r	0	a_0	∞		
$\frac{d}{dr} \left(\frac{dP}{dr} \right)$	0	+	0	-	0
$\frac{dP}{dr}$	0	↗ ↘		0	

Toute surface où la probabilité de présence de l'électron est nulle est appelée une **surface nodale**.

IV. Les atomes polyélectroniques

Une chose importante qu'il reste à faire est de voir si le dernier modèle retenu, vérifié et fonctionnant pour les hydrogénoïdes fonctionne avec les atomes polyélectroniques. Mais pour vérifier cela, il faut tenter de calculer leurs énergies, leurs probabilités de présence, etc... en se servant des formules précédentes :

1. L'atome d'hélium



$$\Delta = \frac{\nabla^2}{r^2} + \frac{\nabla^2}{r^2} + \frac{\nabla^2}{r^2} \quad \widehat{H} = - \underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \psi + V_1 \psi \right)}_{\widehat{H}_1} - \underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 \psi + V_2 \psi \right)}_{\widehat{H}_2} + \underbrace{\left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_{12}} \right)}_{\widehat{H}_{12}}$$

avec $V_1 = -\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{2e^2}{r_1}$. En forme simplifier, on peut écrire : $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2 + \widehat{H}_{12}$

Dans un premier cas, nous allons négliger H_{12} en se disant que ce cas est rare et qu'il peut ne pas trop influencer (cela signifie que l'on considère qu'il n'y a pas trop d'interaction entre les deux électrons).

Décomposition en deux hydrogénoïdes :

$$\varphi_1 = N e^{-z \frac{r_1}{a_0}} \text{ et } \varphi_2 = N e^{-z \frac{r_2}{a_0}} \text{ donc } \widehat{H}_1 \varphi_1 = E_1 \varphi_1 \text{ et } \widehat{H}_2 \varphi_2 = E_2 \varphi_2$$

$$\left. \begin{array}{l} \varphi_2 \widehat{H}_1 \varphi_1 = E_1 \varphi_1 \varphi_2 \\ \varphi_1 \widehat{H}_2 \varphi_2 = E_2 \varphi_2 \varphi_1 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left. \begin{array}{l} \widehat{H}_1 (\varphi_1 \varphi_2) = E_1 \varphi_1 \varphi_2 \\ \widehat{H}_2 (\varphi_1 \varphi_2) = E_2 \varphi_1 \varphi_2 \end{array} \right\} \Leftrightarrow$$

$$\widehat{H}_1 (\varphi_1 \varphi_2) + \widehat{H}_2 (\varphi_1 \varphi_2) = E_1 \varphi_1 \varphi_2 + E_2 \varphi_1 \varphi_2 \Leftrightarrow$$

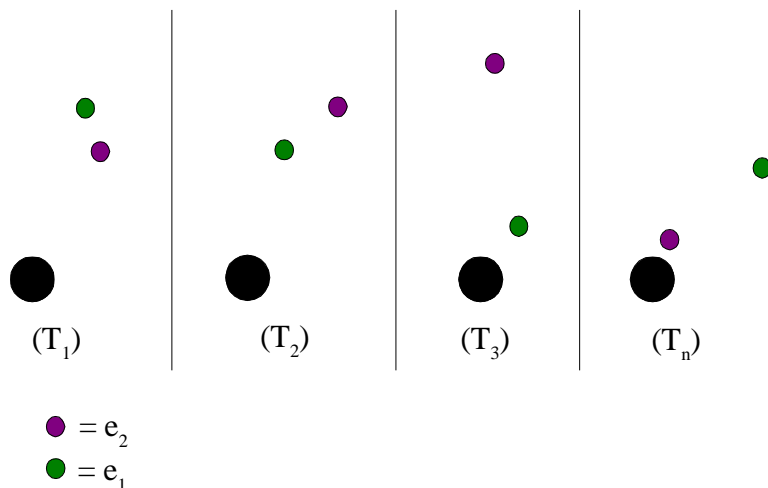
$$\underbrace{(H_1 + H_2)}_{\widehat{H}} + \underbrace{(\varphi_1 \varphi_2)}_{\psi} = (E_1 + E_2) \varphi_1 \varphi_2$$

$\varphi_1 \varphi_2$ est une fonction propre de $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2$ et $E_1 + E_2$ est la valeur propre.

$$E_{\text{hydrogénoïde}} = -13,6 \times \frac{Z^2}{n^2}$$

$$\Rightarrow \left. \begin{array}{l} E_1 = -13,6 \times \frac{4}{1} = -54,4 \\ E_2 = -13,6 \times \frac{4}{1} = -54,4 \end{array} \right\} E_1 + E_2 = -108,8 \text{ eV}$$

Cependant, dans la réalité, on ne trouve pas cette valeur mais : $-79,4 \text{ eV}$. On peut donc en conclure que l'on ne peut pas se permettre de négliger les interactions entre les électrons : ce modèle n'est donc pas correct. En effet, il s'avère qu'à certains moments, e_2 « gêne » en s'interposant entre e_1 et le noyau. Cela produit un effet que l'on nomme : **écran électronique**.



La charge effective à chaque moment n'est pas la même :

Exemple : $T_1 = +1$; $T_2 = +2$; $T_3 = +2$; $T_4 = +1$ (pour la charge e_1)

Par conséquent, l'attraction de e_1 par le noyau est : $Z - \sigma$ (constante d'écran) = Z^*

alors $E_1 = -13,6 \frac{Z^{*2}}{n^2}$.

Cette formule s'appelle : **l'attraction mono électronique de Staler**.

2. L'orbitale de Staler

Staler propose une écriture de la fonction radiale comme suit :

$$R_{n;l}(r) = N r_r^{l-1} e^{-\frac{Z^*}{n} r_r} \text{ avec } r_r \text{ qui est le rayon relatif qui est égal à : } \frac{r}{a_0} \text{ et } Z^* = Z - \sigma \text{ où } \sigma \text{ est une constante dite d'écran.}$$

Mais il y a un problème : comment déterminer Z^* ? Pour cela, on utilise les règles (empiriques) de Slater (cf. fig 23).

Exemple :

x Hélium : $Z - \sigma = Z^* = 1,69 \approx 1,7$ (avec les deux électrons en 1s)

x Lithium : $Z^* = Z - \sigma$ avec $\sigma = \sum_i \sigma_i = 3 - 2 \times 0,85 = 1,3$

x Calcul de l'énergie d'ionisation de l'hélium : $He \rightarrow He^+ + e^-$
 E_i
libre

$$E_i = E_{He^+} - E_{He} \Leftrightarrow E_i = -13,6 \times 4 - (-13,6 \times 1,69^2) \times 2 \Leftrightarrow E_i = 23,2 \text{ eV}$$

L'expérience nous indique 24,5eV. On peut donc voir que l'idée de Slater fonctionne à peu près bien.

3. Élaboration de Slater

Pour parer aux petits défauts de ses règles, Slater va corriger sa formule pour coller au plus près des expériences (fig. 22)

Cela aura des conséquences au niveau de la dégénérescence des atomes polyélectroniques (fig. 26).

Exemple :

(Ces structures électroniques correspondent à l'état le plus bas d'énergie.)

x ${}_4Be \rightarrow 1s^2$ (électrons appariés) ; $2s^2$

x ${}_{11}Na \rightarrow 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6 ; 3s^1$

x Exemple du Chlore :

$${}_{11}Cl : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6 ; 3s^2 ; 3p^5 \text{ et } {}_{11}Cl^+ : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6 ; 3s^2 ; 3p^4$$

Énergie pour : $Cl \rightarrow Cl^+ + e^-$: $E_{(Cl^+)} - E_{(Cl)}$

$$Z^*(Cl) = 17 - 2 \times 1 - 8 \times 0,85 - 6 \times 0,35 = 6,1$$

$$Z^*(Cl^+) = 17 - 2 \times 1 - 8 \times 0,85 - 5 \times 0,35 = 6,45$$

$$E_{(Cl)} = 2E_{(1s)} + 8E_{(2s; 2p)} + 7E_{(3s; 3p)}$$

$$E_{(Cl^+)} = 2E_{(1s)} + 8E_{(2s; 2p)} + 6E_{(3s; 3p)}$$

$$E_i = 6E_{(3s; 3p)^+} - 7E_{(3s; 3p)}$$

$$E_i = 6 \left(-13,6 \left(\frac{Z^*(Cl^+)}{n} \right)^2 \right) - 7 \left(-13,6 \left(\frac{Z^*(Cl)}{n} \right)^2 \right)$$

$$E_i = \frac{13,6}{n^2} (7 \times Z_a^{*2} - 6 \times Z_a^{*2}) = 16,4 \text{ eV}$$

(l'énergie doit être compté positivement)

V. Structure électronique des atomes dans leur configuration fondamentale (énergie les plus faibles).

1. Principe de Pauli

Ce principe relativement simple n'est pas des moins importants. Bien au contraire, il permet de connaître les électrons dans leur couches d'énergie :

Deux électrons ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques tous identiques.

2. Principe de stabilité

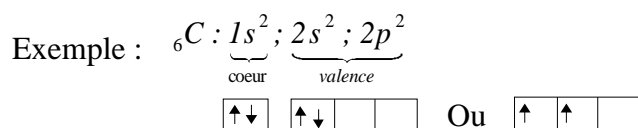
Là encore, un autre principe simpliste permet de modéliser la localisation des électrons lorsque ils sont dans un état de stabilité, c'est à dire non excité :

Lorsque les électrons ne sont pas excités, ils se « rangent » dans les couches les plus basses.

3. Règle de Hound

Enfin, pour parfaire la modélisation, il est nécessaire de connaître cette dernière loi qui s'applique lorsque plusieurs possibilités s'offrent à nous pour choisir la localisation et le nombre de spin dans les cases quantiques :

L'état fondamental est donné par un maximum de spins parallèles. On occupe donc un maximum d'orbitales avant de saturer les orbitales.



D'après la règle de Hound, on choisira alors la seconde proposition

4. Quelques exemples et quelques exceptions

- ${}_1H : 1s^1$
- ${}_2He : 1s^2$
- ${}_3Li : 1s^2 ; 2s^1$
- ${}_4Be : 1s^2 ; 2s^2$
- ${}_5B : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^1$
- ${}_6C : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^2$
- ${}_7N : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^3$
- ${}_8O : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^4$
- ${}_9F : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^5$
- ${}_{10}Ne : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6$
- ${}_{11}Na : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6 ; 3s^1$

Le niveau 3d est au dessus du niveau 4s. Par conséquent, d'après la règle de stabilité, on commence par remplir le niveau 4s et une fois complet, on continue au niveau 3d.

Pour se faciliter le remplissage des cases quantiques, nous pouvons nous aider du schéma de Klechkowski (fig. 28) : il suffit de saturer les niveaux en suivant les flèches.

Une chose importante est que plus l'on descend dans les niveaux d'énergie, plus il y aura des exceptions.

Voici deux exceptions qui doivent être connues en DEUG (ces exceptions sont en fait des moyens pour l'atome, soit d'être encore plus stable, soit de se rapprocher le plus possible d'un état parfait) :

- $_{20}\text{Ca} : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6 ; 3s^2 ; 3p^6 ; 4s^2$
- $_{21}\text{Sc} : 1s^2 ; 2s^2 ; 2p^6 ; 3s^2 ; 3p^6 ; 3d^1 ; 4s^2 \equiv [_{18}\text{Ar}]3d^1 ; 4s^2$
- $_{22}\text{Ti} : [_{18}\text{Ar}]3d^2 ; 4s^2$
- $_{23}\text{V} : [_{18}\text{Ar}]3d^3 ; 4s^2$
- $_{24}\text{Cr} : [_{18}\text{Ar}]3d^4 ; 4s^2$ **exception** $\boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow}$
- $_{25}\text{Mn} : [_{18}\text{Ar}]3d^5 ; 4s^2$
- $_{26}\text{Fe} : [_{18}\text{Ar}]3d^6 ; 4s^2$
- $_{27}\text{Co} : [_{18}\text{Ar}]3d^7 ; 4s^2$
- $_{28}\text{Ni} : [_{18}\text{Ar}]3d^8 ; 4s^2$
- $_{29}\text{Cu} : [_{18}\text{Ar}]3d^9 ; 4s^2$ **exception** $\boxed{\uparrow} \boxed{\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow}$

VI. Étude approfondie des classifications

1. Mandeleiev (1860)

A son époque, il avait à sa disposition pour créer une classification des éléments connus (60 éléments) : leur propriétés physiques, leurs propriétés chimiques et leurs masses relatives.

Alors, il décida de classer les éléments de la masse la plus petite à la masse la plus grande, de gauche à droite. De plus, il décida d'aligner sur une même colonne, les éléments de la même famille, possédant des propriétés similaires.

Pour arranger au mieux son tableau, il a favorisé le classement par famille au détriment de leur masse, ce qui l'a poussé à échanger quelques éléments de place. Enfin, là où il a cru qu'il existait d'autres éléments non découverts à son époque, il a laissé des cases vides.

Une ligne du tableau périodique des éléments est appelée **une période**. Tandis qu'une colonne s'appelle **une famille**.

Enfin, il est important de savoir que les propriétés physiques et chimiques d'un élément sont conférés par l'agencement de la couche externe électronique de cet élément.

Seulement sept périodes sont suffisantes pour décrire la totalité des éléments chimiques

connu à ce jour. La première période contient deux éléments, la seconde période en contient huit, tout comme la troisième. Cependant, la quatrième et la cinquième en contiennent dix-huit et enfin la sixième et la septième en contiennent trente-trois. (fig. 30)

2. Distinction entre les colonnes – séparation en bloc

Comme il a été indiqué ci-dessus, chaque colonne du tableau périodique contient une famille d'éléments, ayant des propriétés physiques et chimiques similaires. On a alors donné un nom aux colonnes les plus importantes :

- 1^{ère} colonne : **famille des alcalins** (ns^1)
- 2^{ème} colonne : **famille des alcalino-terreux** (ns^2)
- 3^{ème} à la 13^{ème} colonne : **famille des métaux de transition** (nd^1 à d^{10})
- 14^{ème} colonne : famille du bore ($ns^2 np^1$)
- 15^{ème} colonne : famille du carbone ($ns^2 np^2$)
- 16^{ème} colonne : famille de l'azote ($ns^2 np^3$)
- 17^{ème} colonne : famille des oxygènes ($ns^2 np^4$)
- 18^{ème} colonne : **famille des halogènes** ($ns^2 np^5$)
- 19^{ème} colonne : **famille des gaz rares** ($ns^2 np^6$)

De plus, pour classer ses familles, nous pouvons mettre en place des blocs. Ceux-ci se forment à partir du type de la plus grande couche électronique : bloc S, bloc D, bloc P et bloc F.

3. Les 3 types d'éléments

Les éléments chimiques connus jusqu'ici peuvent être placés dans trois grandes catégories bien distinctes : **les métaux, les non métaux et les semi-métaux.**

a. Les métaux

Un métal peut être caractérisé par :

- ✓ sa conduction de l'électricité et de la chaleur
- ✓ son état solide à température ambiante (en grande majorité)
- ✓ il présente l'éclat métallique

Dans la classification périodique, les métaux sont placés majoritairement à gauche. Plus on se déplace vers la droite, moins les éléments sont métalliques. Et bien que la très grande majorité des métaux sont solide à température ambiante, il en existe quelques uns qui ne vérifient pas cela :

- × Le mercure (liquide)
- × Le gallium (solide, mais possède une température de fusion très basse : 30°C)
- × Le césium (solide, mais possède une température de fusion très basse : 30°C)

b. Les non métaux

Les non métaux sont placés à droite dans le tableau périodique des éléments. Leur état peut être :

- ◆ solide (Ex : carbone)
- ◆ gaz (Ex : Azote)
- ◆ Liquide (Ex: Bore)

Pour la grande majorité, ils ne conduisent ni l'électricité ni la chaleur. Mais l'exception confirmant la règle fait qu'il existe certains non métaux comme le carbone sous forme de graphite conduit l'électricité (alors que le carbone sous forme de diamant est un très bon isolant).

c. Les semi-métaux

Les semi-métaux sont tantôt des métaux, tantôt des isolants, comme par exemple le silicium (dont sa structure est comparable à celle du carbone sous forme de diamant).

4. Conclusion

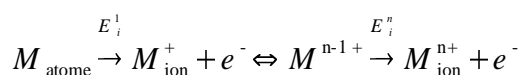
Nous pourrions simplement conclure sur le fait que la grande disparité entre tous ces éléments chimiques : leurs propriétés physiques et chimiques, leur taille, leur électrons de valence, ... nous permettent de nous en servir dans notre vie actuelle. Par exemple : le sodium dans les lampes à vapeur de sodium qui émettent des ondes γ lors de la désexcitation des électrons, une fois excité par un courant électrique, qui se trouve dans le spectre du visible et qui nous renvoie cette couleur orange ; le lithium qui est utilisé dans les batteries, l'hélium utilisé dans les bouteilles de plongées pour atteindre de plus grandes profondeurs ; le silicium utilisé dans l'électronique pour miniaturiser les composants (utilisé dans tous les circuits intégrés, contrôleurs, processeurs, ...) ; etc...

VII. Énergie d'ionisation des éléments

1. Définition

L'énergie d'ionisation est une **énergie toujours positive** : on doit fournir de l'énergie.

Formule de l'énergie de première ionisation :



2. Variation de l'énergie d'ionisation dans la classification

(fig .32) Plus l'électron se trouve loin du noyau, plus il est facile de lui retirer son électron. En effet, plus l'électron se trouve moins du noyau, moins la force de Coulomb devient importante, et donc moins nous devons fournir d'énergie pour contrer cette force pour « arracher » l'électron.

a. Variation de l'énergie d'ionisation dans une colonne du tableau périodique

On peut alors remarquer que dans la classification, l'énergie d'ionisation décroît s'il on descend dans les colonnes. Cette énergie peut-être exprimée en $kJ \cdot mol^{-1}$ ou en eV . Le potentiel d'ionisation s'exprime en V .

Exemple :

- $E_n^1 = 13,6 \text{ eV}$
- $V_n^1 = 13,6 \text{ V}$

b. Variation de l'énergie d'ionisation dans une ligne du tableau périodique

Nous pouvons remarquer que l'énergie d'ionisation augmente. Cependant, nous remarquons des décrochements par moment. Cette augmentation est compréhensible : sachant que nous ajoutons une charge positive dans le noyau mais que nous restons sur la même couche électronique, l'électron est plus attiré par le noyau par la force de Coulomb, donc il sera plus difficile de l'arracher. Enfin, les décrochements sont explicables par l'intermédiaire des structures électroniques :

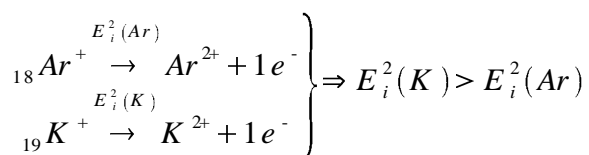
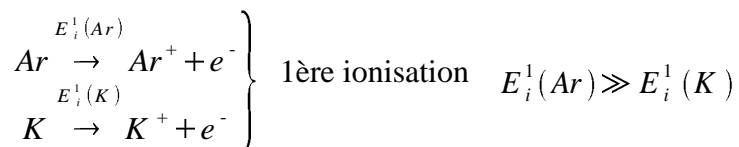
- Be : $1S^2 2S^2$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$
- B : $1S^2 2S^2 2P^1$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{}$ $\boxed{}$

=> Il est plus dur d'arracher un électron dans la couche 2s que 2p

- N : $2S^2 2P^3$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{\uparrow}$ qui devient $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{}$
- O : $2S^2 2P^4$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{}$ qui devient $\boxed{\uparrow\downarrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{\uparrow}$ $\boxed{\uparrow}$

=> O devient plus stable qu'avant tandis que N est assez stable et va devenir moins stable. Il faudra donc plus d'énergie pour retirer un électron de N que pour O.

3. Énergie de seconde ionisation



4. Affinité électronique

a. Taille des atomes

- R_a : rayon atomique : ceci est trouvé par deux grandes méthodes :
 - cristallographie : recherche par calcul (bonne méthode, mais nécessite une structure cristalline)
 - orbitalaire : $\rho \frac{n^* - 2}{Z^*} a_0$
- R_c : rayon de covalence : exemple « F – F » alors : $R_c = \frac{d}{2}$ (d étant la distance qui sépare les deux fluors)
- R_i : rayon ionique

Dans la classification, on peut apercevoir que le R_a augmente à l'intérieur d'une colonne (en allant de haut en bas) et diminue si l'on va de gauche à droite.

En revanche, pour le R_c , celui-ci varie en fonction du type de liaison.

b. Polarisation des atomes

La polarisation est une grandeur mesurée en $\frac{1}{\text{volume}}$. Elle mesure l'aptitude d'un nuage électronique à se déformer sous une action extérieure (exemple : choc entre deux électrons). Plus l'atome est volumineux et plus il est polarisable.

c. Électronégativité

L'électronégativité est la tendance que possède un élément à attirer les électrons. Pour mesurer cela, on met en place une échelle d'électronégativité. Pour ce faire, il y a plusieurs possibilités :

1. on utilise l'énergie d'ionisation et son affinité électronique :

électronégativité = $\frac{1}{2}k(I + A_e)$ (k étant le facteur de proportionnalité). Ceci est l'échelle de Mulliken.

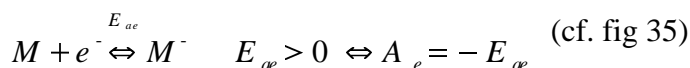
2. Échelle de Pauli : $|X_a - X_b| = 0.102 \sqrt{E_{ab} - \sqrt{E_a - E_{b-a}}}$. C'est une échelle relative. Comme on a accès à une différence, il faut choisir un élément de référence. Pour ce faire, Pauli a choisi le Fluor et lui a attribué la valeur de 4.

3. Échelle d'Albert – Rochon : $X_0 = 0.0136 \frac{Z^*}{r_r^2} + 1.74$

En ce qui concerne de la variation de l'électronégativité dans le tableau périodique : elle décroît plus on descend à l'intérieur d'une famille. Dans une période en revanche, elle augmente. Les décrochages observés sont pour les métaux de transitions.

L'électronégativité est en rapport avec les potentiels des couples rédox)

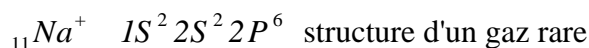
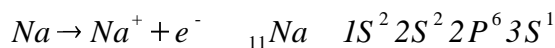
d. Gain et perte d'électrons



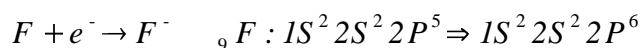
On peut remarquer que pour les gaz rares, E_{ae} est pratiquement une constante alors que pour les autres, il y a une certaine périodicité.

- Bloc S et P :
 - Les éléments qui ont 1, 2 ou 3 électrons externes perdent des électrons

Exemple :



- Les éléments possédant 5, 6 ou 7 électrons externes gagnent des électrons

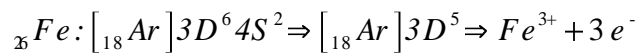


Seuls les éléments les plus électronégatifs peuvent gagner des électrons.

- Les éléments ayant 4 électrons externes sont souvent des éléments créant des liaisons de covalence

- Les métaux de transition peuvent donner des cations

Exemple :



L'état de ces atomes n'étant pas très stable, il se complexe en général avec autre chose.

Plusieurs états d'ionisation sont possible.

