Chapitre II :
Atomes poly-électroniques et Classification Périodique

Plan :

****

I- NOTION D'ORBITALES ATOMIQUES 2

1- Fonctions d'onde polyélectronique 2
- *a- Présentation du problème* *2*
- *b- Approximation de Born-Oppenheimer* *3*

2- Approximation orbitalaire 4
- *a- Répulsions électroniques moyennées* *4*
- *b- Orbitale atomique* *5*

3- Résultats de mécanique quantiques (*à admettre*) 5
- *a- Orbitale atomique* *5*
- *b- Energies des orbitales atomiques* *6*

****

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 8 pages.

Chapitre II : Atomes poly-électroniques et Classification Périodique

Le but de ce chapitre est d'introduire la notion d'***Orbitale Atomique*** ou ***OA*** permettant d'écrire la ***configuration électronique*** d'un atome dans son état fondamental.

L'écriture à utiliser pour la ***configuration électronique*** d'un atome dans son état fondamental est non plus celle correspondant à un remplissage des « ***couches électroniques*** » :

- K à 2 électrons ;
- L à 8 électrons
- ou M à 8 électrons

L'écriture à utiliser pour la ***configuration électronique*** d'un atome dans son état fondamental est celle des ***orbitales atomiques*** 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s…. en adoptant une description des électrons de l'atome *via* la ***Mécanique Quantique***.

A partir de la ***configuration électronique*** d'un atome, on peut en déduire le nombre d'électrons de valence. Les électrons de valence permettent d'écrire des structures de Lewis de molécules polyatomiques et de comprendre un certain nombre de propriétés physico-chimiques des atomes.

La deuxième partie de ce chapitre aborde :

- la construction de la ***classification périodique*** des éléments telle qu'elle est actuellement présentée ;
- les différentes ***familles*** d'éléments et l'étude de leurs propriétés physico-chimiques ;
- l'évolution de ces mêmes ***propriétés physico-chimiques*** dans la ***classification périodique***.

I- Notion d'orbitales atomiques

1- Fonctions d'onde polyélectronique

a- Présentation du problème

L'***atome polyélectronique*** est constitué :

- d'un ***noyau*** constitué de Z protons et A-Z neutrons ;
- et de ***Z électrons***

Rappels :

Z est le numéro atomique de l'atome étudié, A son nombre de masse. Z est noté en indice, A en exposant et précédant le symbole M de l'atome, soit ${}^{A}_{Z}\mathrm{M}$.

On a par exemple :

l'hélium ${}^{4}_{2}\mathrm{He}$, le lithium ${}^{7}_{3}\mathrm{Li}$, le béryllium ${}^{9}_{4}\mathrm{Be}$ ….

Le problème est similaire à celui abordé lors de l'étude de l'atome d'hydrogène ou de l'***ion hydrogénoïde*** à savoir :

donner une « ***description*** » des électrons, objets quantiques
via la ***Mécanique Quantique***

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 8 pages.

En effet, d'après le ***principe d'incertitude d'Heisenberg***, il n'est pas possible de déterminer simultanément et précisément le vecteur position $\vec{r}$, et le vecteur quantité de mouvement $\vec{p}$, d'un objet quantique tel que l'électron soumis à l'attraction d'un noyau.
Les résultats de ***Mécanique Quantique*** qui suivront dans la suite de paragraphe sont admettre sans démonstration.

b- Approximation de Born-Oppenheimer

On suppose que le noyau, assimilé à un point matériel est immobile par rapport aux électrons

En effet, la masse du noyau est largement supérieure à celle de l'électron.

A priori la fonction d'onde décrivant l'atome polyélectronique dépend des coordonnées de l'espace du noyau et des Z électrons :

$$\Psi\left(\vec{r}_{noyau}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_Z\right)$$

Dans l'***approximation de Born-Oppenheimer***, le noyau étant supposé immobile, la probabilité de présence de ce dernier est **indépendante** de celles des Z électrons.
La fonction d'onde est donc dans le cadre de cette approximation un ***produit*** de deux fonctions d'onde, l'une dite « ***nucléaire*** » ne dépendant que des coordonnées du noyau, l'autre « ***électronique*** » dépendant de celles des Z électrons.

On a donc :

$$\Psi\left(\vec{r}_{noyau}, \vec{r}_1, \vec{r}_2 ..., \vec{r}_Z\right) \approx \Psi^{\text{nucléaire}}\left(\vec{r}_{noyau}\right) \times \Psi^{\text{électronique}}\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2 ..., \vec{r}_Z\right)$$

On souhaite donc, en ***Mécanique Quantique***, déterminer la ***fonction d'onde polyélectronique*** et l'énergie associée à cette fonction d'onde, permettant de décrire les électrons de l'atome polyélectronique. On rappelle que :

- la ***fonction d'onde polyélectronique***, $\Psi^{\text{électronique}}$, est une fonction mathématique réelle ou complexe dont le carré s'il s'agit d'une fonction réelle, ou la norme au carré s'il s'agit d'une fonction complexe, représente une ***densité volumique de probabilité de présence*** des Z électrons ;
- l'***énergie*** associé à cette fonction d'onde représente l'énergie des Z électrons décrit par la ***fonction d'onde électronique***.

La ***fonction d'onde polyélectronique*** est une fonction mathématique ***réelle ou complexe*** :

- dépendant des coordonnées de l'espace des Z électrons, soit $\Psi^{\text{électronique}}\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_Z\right)$,
- et solution de l'équation différentielle de ***Schrödinger*** dont l'écriture générale est la suivante :

$$\tilde{H} \cdot \Psi^{\text{électronique}}\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_Z\right) = E^{\text{électronique}} \cdot \Psi^{\text{électronique}}\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_Z\right)$$

avec $\vec{r}_1, \vec{r}_2, ... \vec{r}_Z$ vecteurs position des électrons 1, 2 …Z

et $\tilde{H}$ ***opérateur Hamiltonien***

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 8 pages.