



Chapitre II : Atomes poly-électroniques et Classification Périodique

Plan :

I- NOTION D'ORBITALES ATOMIQUES	2
1- Fonctions d'onde polyélectronique	2
<i>a- Présentation du problème.....</i>	<i>2</i>
<i>b- Approximation de Born-Oppenheimer</i>	<i>3</i>
2- Approximation orbitale.....	4
<i>a- Répulsions électroniques moyennées.....</i>	<i>4</i>
<i>b- Orbitale atomique.....</i>	<i>5</i>
3- Résultats de mécanique quantiques (à admettre).....	5
<i>a- Orbitale atomique.....</i>	<i>5</i>
<i>b- Energies des orbitales atomiques.....</i>	<i>6</i>

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_ZM .

On a par exemple :

l'hélium ${}^4_2\text{He}$, le lithium ${}^7_3\text{Li}$, le béryllium ${}^9_4\text{Be}$

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**

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 :

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

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 :

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

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 $\Psi^{\text{électronique}} \left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z \right)$,
- et solution de l'équation différentielle de **Schrödinger** dont l'écriture générale est la suivante :

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

avec $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z$ vecteurs position des électrons 1, 2 ... Z
et \tilde{H} **opérateur Hamiltonien**