

LC1 Évolution des propriétés atomiques au sein de la classification périodique

EI : Appui sur le modèle quantique de l'atome

Mardi 11 avril 2023

Niveau L1

Pré-requis — Structure de l'atome et répartition des électrons en différentes couches (2^{nde})

- Notion d'électronégativité, lien avec la position d'un élément dans la classification périodique (T^{ale})
- Introduction à la chimie quantique : configuration électronique des atomes et des ions selon la règle de Klechkowski, le principe de Pauli et la règle de Hund ; électrons de coeur et de valence.

Difficultés — Dualité onde-particule de l'électron

- différence entre une grandeur calculée et mesurée

Introduction — La classification périodique doit sa forme actuelle au chimiste russe Dimitri Mendeleiev (1869).

- Classement en lignes et colonnes par numéro atomique croissant.
- Périodicité de propriétés des éléments d'un même colonne : 3 exemples
 1. 1^{re} colonne : métaux alcalins (Li(Z=3), Na(Z=11), K(Z=19)) : métaux mous, T_{fus} basse, très réactifs vis-à-vis de l'eau.
 2. 2^e colonne : métaux alcalino-terreux (Mg (Z=12), Ca (Z=20), Sr (Z=38)) : même réactivité vis-à-vis du dioxygène pour former des oxydes métalliques ($2 \text{Mg (s)} + \text{O}_2(\text{g}) \longrightarrow 2 \text{MgO}(\text{s})$).
 3. 17^e colonne : halogènes (F (Z=9), Cl(Z=17), Br (Z=35)) : état d'agrégation le plus stable dans les CNTP : $\text{X}_2(\text{g})$; tendance à former des sels ioniques avec les alcalins ($2 \text{Na (s)} + \text{X}_2(\text{g}) \longrightarrow 2 \text{NaX}(\text{s})$).

Problématique Comment expliquer cette périodicité de propriétés à l'aide du modèle quantique de l'atome ?

Plan détaillé :

I. Modélisation quantique de l'atome

- 1 Une preuve expérimentale : le spectre d'émission discret de l'atome d'hydrogène (séries de Balmer, Lyman, Paschen)
- 2 Théorie quantique : Orbitales atomiques et énergies
- 3 Configuration électronique et classification périodique

II. Évolution de quelques propriétés

- 1 Rayon atomique
- 2 Énergie des orbitales et potentiel d'ionisation
- 3 Électronégativité

Conseils, remarques :

- Seule la moitié de la 2^e partie de la leçon a pu être faite, bien que c'était le cœur de la leçon. Pour y remédier il aurait fallu se contenter de rappeler le modèle de Slater de l'atome et les expressions qu'on en tire du rayon d'une orbitale et de son énergie, afin de les utiliser pour discuter l'évolution des propriétés atomiques au sein du tableau périodique. Typiquement l'exposé en détail de l'hamiltonien n'avait pas d'intérêt ici.
- Manque d'une problématique clairement énoncée en fil rouge
- Manque d'ordres de grandeur pour chaque propriété atomique
- Insister dans la notion d'écrantage sur la différence entre orbitales de cœur contractées car peu écrantées et orbitales de valence diffuses car fortement écrantées. Exemple du phosphore : rayons des différentes orbitales de sa configuration électronique fondamentale.
- Mieux présenter les figures que l'on expose. Exemple du diagramme $r=f(Z)$: abscisse, ordonnée, périodicité et limites
- la difficulté de la dualité onde/particule mise en évidence n'a pas de lien directe avec l'objectif de la leçon : on aurait vraiment pu s'en passer et ne parler que d'orbite (c'est le point de vue du modèle de Bohr) et partant de la quantification de l'énergie de l'électron sur chaque orbite, l'expression du rayon et de l'énergie étant donné par Slater.

Questions :

- À quoi ressemble l'atome pour les étudiants? Connaissent-ils le terme d'orbitale? Le modèle planétaire?
- Qu'est-ce qu'une *résolution exacte*? C'est une résolution analytique.
- Quel modèle d'électronégativité est le plus rigoureux? L'électronégativité est-elle utile aux physiciens? **Non elle sert surtout aux chimistes pour expliquer la polarité des liaisons et donc leur réactivité, et les interactions intermoléculaires dans certaines phases (solide, liquide).**

Bibliographie :

1. Volatron, *Structure électronique des molécules, 1. De l'atome aux molécules simples* : chapitre 2, éléments d'atomistique : analyse par lignes et par colonnes, et lien avec la structure électronique
2. DUNOD, Tout-en-Un, PCSI
3. Shriver, Atkins, *Chimie inorganique* : pour les données des propriétés atomiques
4. Hollas, *Modern Spectroscopy* : pour une bonne introduction à la mécanique quantique en lien avec l'expérience. Belle figure des raies d'émission de l'hydrogène.