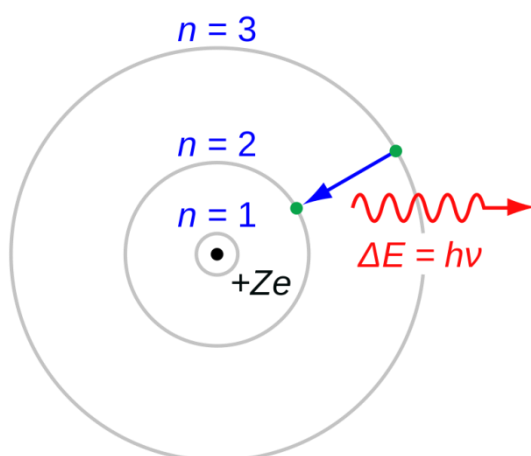


Modèle quantique de l'atome – Classification périodique

Programme Chimie PC

Notions et contenus	Capacités exigibles
Fonctions d'onde électroniques ψ de l'atome d'hydrogène. Nombres quantiques n, l, m_l, m_s . Énergie et rayon associés à une fonction d'onde.	Interpréter $ \psi ^2$ comme la densité de probabilité de présence d'un électron en un point et la relier à la densité de charge. Prévoir qualitativement, pour l'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïdes, l'évolution du rayon et de l'énergie associés à une fonction d'onde en fonction du nombre quantique principal.
Orbitales des atomes polyélectroniques, représentation schématique. Configuration électronique d'un atome et d'un ion monoatomique. Électrons de cœur et de valence.	Dessiner l'allure des orbitales atomiques s et p. Établir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion à l'état fondamental. Déterminer le nombre d'électrons non appariés d'un atome dans son état fondamental.
Notion qualitative de charge effective. Électronégativité. Rayon d'une orbitale atomique, polarisabilité.	Relier qualitativement le rayon associé à une orbitale atomique à la charge effective. Relier qualitativement l'énergie associée à une orbitale atomique à l'électronégativité de l'atome. Relier qualitativement le rayon associé aux orbitales de valence d'un atome à sa polarisabilité.
Architecture du tableau périodique des éléments. Organisation par blocs.	Relier la position d'un élément dans le tableau périodique à la configuration électronique de l'atome associé dans son état fondamental. Situer dans le tableau les familles suivantes : métaux alcalins et alcalino-terreux, halogènes et gaz nobles.

La modélisation quantique de l'atome a été abordée en physique en première année avec le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène. Cette théorie élaborée par **Niels Bohr** établit un modèle planétaire de l'atome : l'électron se place sur une orbite circulaire stable d'énergie définie. Cet électron peut absorber ou émettre un rayonnement lui permettant de passer d'une orbite stable à une autre.



Exemple :

I. Fonction d'onde, description quantique de l'électron

1. Principe d'incertitude d'Heisenberg

En 1926, Heisenberg (Prix Nobel de physique en 1932) énonce deux inégalités qui vont permettre de définir la frontière entre physique classique et physique quantique.

L'inégalité spatiale indique que l'on ne peut pas connaître simultanément la position et la vitesse d'une particule :

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

Avec Δx incertitude sur la position

$\Delta p = m \cdot \Delta v$ incertitude sur la quantité de mouvement

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ constante de Planck réduite

Exemple :

- voiture de $m = 800 \text{ kg}$ à $v = 50 \text{ km} \cdot \text{h}^{-1} = 13,8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ avec $\Delta v = 0,1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
D'après l'inégalité précédente : $\Delta x \geq 1,3 \cdot 10^{-36} \text{ m}$
- électron $v = 2,2 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ donc $\Delta v \approx 0,1 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
D'après l'inégalité précédente : $\Delta x \geq 1,2 \text{ nm}$
Taille d'un atome de l'ordre de $0,1 \text{ nm}$

→ on ne peut pas connaître précisément la position d'un électron au sein d'un atome

2. Fonction d'onde – densité de probabilité de présence

Définition : A toute particule est associée une fonction d'onde notée $\Psi(x, y, z, t)$. C'est une fonction mathématique contenant toute l'information accessible concernant la particule.

Densité de probabilité de présence : La probabilité de trouver une particule décrite par la fonction d'onde $\Psi(x, y, z, t)$ en un point M de l'espace et à un instant t est proportionnelle au carré de la norme de la fonction d'onde :

$$dP = |\Psi(M, t)|^2 dV$$

Probabilité de trouver la particule dans un volume τ : $P(\tau, t) = \iiint |\Psi(M, t)|^2 dV$

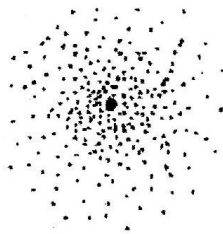
Condition de normation : on est sûr de trouver la particule à un instant t dans l'univers entier.

$$1 = \iiint_{\text{espace}} |\Psi(M, t)|^2 dV$$

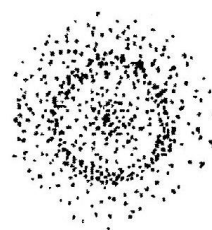
A la notion de position et trajectoire connue de l'électron (modèle de Bohr), on lui substitue la notion de nuage électronique avec une probabilité plus ou moins importante de trouver l'électron. On ne peut plus parler d'orbite pour l'électron mais seulement de probabilité de présence en un point de l'espace.

L'atome quantique conduit à un nuage électronique dont l'intensité est une représentation de la densité de probabilité de présence de l'électron. Ces densités sont différentes selon que l'électron est dans l'état d'énergie E_1 ou E_2 .

Électron
d'énergie
 E_1
($n = 1$)



Électron
d'énergie
 E_2
($n = 2$)



3. Equation de Schrodinger

Erwin Schrödinger posa en 1926 la relation fondamentale de la mécanique quantique sous la forme d'une équation différentielle. La résolution de cette équation permet de trouver les fonctions d'onde de l'électron et leur énergie associée.

Cette équation ne peut être résolue rigoureusement que dans le cas d'un édifice monoélectronique : atome d'hydrogène ou ions hydrogénoïdes ($\text{He}^+, \text{Li}^{2+} \dots$)

II. L'atome d'hydrogène et les hydrogénoïdes : étude quantique

1. Fonction d'onde électronique

Système considéré : L'attraction électrostatique du noyau sur l'électron est la même dans toutes les directions de l'espace, elle ne dépend que de la distance r entre noyau et l'électron, d'où l'usage adapté des coordonnées sphériques (r, θ, φ) :

La résolution de l'équation de Schrödinger conduit à des solutions faisant apparaître trois nombres quantiques (n, l, m_l) :

Les fonctions d'onde, solution de l'équation de Schrödinger, sont appelées **orbitales atomiques**, notées OA.

2. Nombres quantiques n, l et m

a. Nombre quantique principal n

Définition :

Ce nombre quantique quantifie l'**énergie de l'électron** :

$$\text{Pour l'hydrogène : } E_n = -13,6 \times \frac{1}{n^2} \text{ (eV)}$$

$$\text{Pour l'hydrogénoïde } {}_Z^A X^{(Z-1)+} : E_n = -13,6 \times \frac{Z^2}{n^2} \text{ (eV)}$$

Ce nombre quantique précise également le **volume effectif de l'OA** car il n'intervient que dans la partie radiale.

$$\text{Pour l'hydrogène : } r_n = n^2 a_0 = 52,9 n^2 \text{ (pm)}$$

$$\text{Pour l'hydrogénoïde } {}_Z^A X^{(Z-1)+} : r_n = \frac{n^2 a_0}{Z} = 52,9 \frac{n^2}{Z} \text{ (pm)}$$

On constate que les OA des ions hydrogénoïdes sont plus contractées que les OA de l'hydrogène (car attraction plus forte du noyau).

b. Nombre quantique secondaire l

Définition :

Ce nombre quantique intervient dans la partie radiale et angulaire donc détermine la forme générale de l'OA c'est-à-dire la zone de plus forte probabilité de trouver l'électron.

c. Nombre quantique magnétique m

Définition :

Ce nombre quantique précise l'orientation de l'OA.

d. Nombre quantique magnétique de spin m_s

Introduction nécessaire d'un 4^{ème} nombre quantique pour décrire l'électron

Définition :

3. Orbitales atomiques et niveaux d'énergie

Pour les trois premières valeurs de n , on peut lister les OA suivantes :

Couche quantique $n = 1$

$l = 0, m = 0$ 1s sous-couche s = 1 OA

Couche quantique $n = 2$

$l = 0, m = 0$ 2s sous-couche s = 1 OA

$l = 1, m = \{-1, 0, 1\}$ 2p sous-couche p = 3 OA

Couche quantique $n = 3$

$l = 0, m = 0$ 3s sous-couche s = 1 OA

$l = 1, m = \{-1, 0, 1\}$ 3p sous-couche p = 3 OA

$l = 2, m = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ 3d sous-couche d = 5 OA

Couche quantique $n = 4$

$l = 0, m = 0$ 4s sous-couche s = 1 OA

$l = 1, m = \{-1, 0, 1\}$ 4p sous-couche p = 3 OA

$l = 2, m = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ 4d sous-couche d = 5 OA

$l = 3, m = \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$ 4f sous-couche f = 7 OA

Déf : La dégénérescence d'un niveau d'énergie est le nb d'OA correspondant à ce niveau d'énergie.

A chaque valeur des entiers n, l, m_l correspond une fonction d'onde $\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi)$ et une énergie associée E_n ; cette énergie ne dépend que de n et est d'autant plus faible que n est petit. Le rayon de l'OA associé est également d'autant plus petit que n est petit. Le diagramme énergétique est donné ci-dessous :

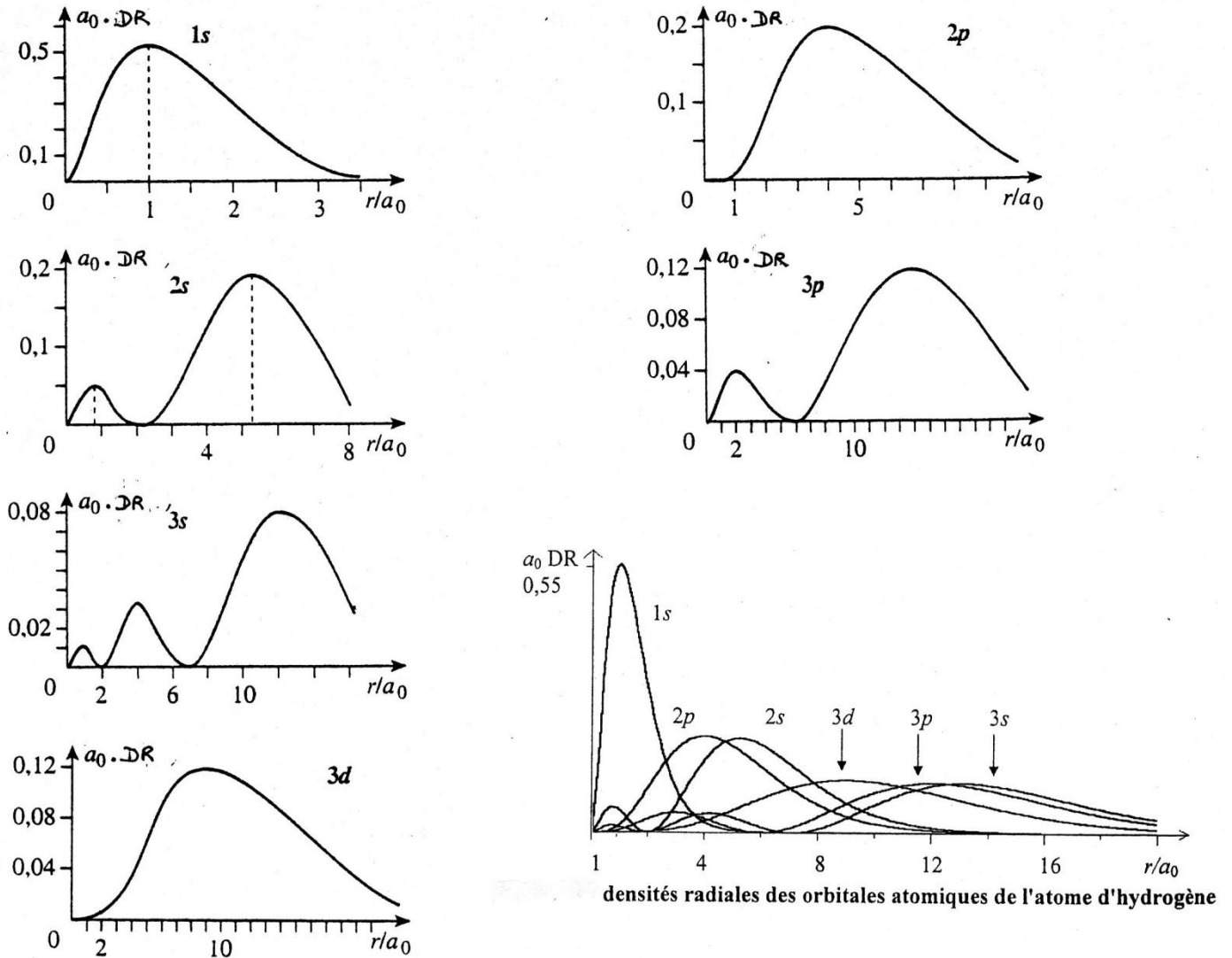
III. Représentation des OA

1. Etude de la densité de probabilité radiale

Définition : Densité de probabilité radiale : probabilité de trouver l'électron à la distance r du noyau

$$DR_{n,l}(r) = r^2 \cdot R_{n,l}(r)^2$$

Densités radiales $DR(r)$ de probabilité de présence des OA de l'atome d'hydrogène :



A remarquer :

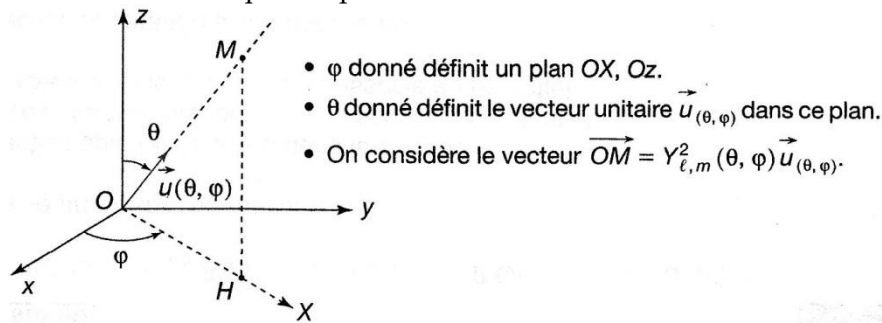
-
-
- Rayon orbitalaire :

2. Etude de la densité de probabilité angulaire

Définition : Densité de probabilité angulaire : probabilité de trouver l'électron dans la direction (θ, φ)

$$D_{l,m_l}(\theta, \varphi) = Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)^2$$

On va construire des surfaces telles que les points M de cette surface vérifient :



Plus un point sera loin de O, plus $D_{l,m_l}(\theta, \varphi)$ sera grand et plus la probabilité de présence de l'électron dans cette direction de l'espace sera importante.

Sur chacun des lobes, on indique le signe de la fonction $Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$. Ce signe n'a pas de signification physique puisque c'est le carré de la fonction d'onde qui donne la probabilité de présence. Cependant, nous verrons dans le chapitre suivant que le signe relatif d'une OA par rapport à celui d'une OA voisine a un sens dans la formation d'une liaison chimique.

3. Représentation conventionnelle des OA

a. *Orbitales Atomiques de type s*

Son expression analytique est indépendante de (θ, φ) .

L'orbitale atomique de type s est donc à symétrie sphérique : correspond à $l = 0$ donc nécessairement à $m_l = 0$.

b. *Orbitales Atomiques de type p*

Leurs expressions analytiques sont dépendantes de (θ, φ) .

On constate qu'une OA p_x possède :

- Une symétrie de révolution par rapport à Ox
- Un plan d'antisymétrie, le plan yOz (car la fonction d'onde change de signe en passant par le noyau)
- Un plan nodal, le plan yOz : la probabilité de trouver l'électron dans ce plan est nulle

IV. Atomes polyélectroniques

1. Approximations

A partir de trois particules (noyau et deux électrons), on ne sait plus résoudre exactement l'équation de Schrödinger du fait de l'apparition de termes de répulsion électrostatiques entre électrons.

a. *Approximation monoélectronique ou orbitale*

Approximation monoélectronique ou orbitale : On suppose que les électrons sont indépendants les uns des autres :

Cela revient à négliger le terme de répulsion électrostatique entre électrons.

χ est donc une fonction d'onde monoélectronique correspondant aux OA vues pour l'hydrogène.

Mais, négliger complètement le terme de répulsion électrostatique entre électrons est une approximation grossière donc...

b. *Approximation de Slater – effet d'écran*

Pour améliorer l'approximation précédente qui est trop forte, on va modéliser l'influence des électrons sur l'électron étudié.

Approximation de Slater : Soit un atome de numéro atomique Z , chaque électron de cet atome est soumis :

- à une force attractive du noyau de charge $+Ze$
- à des forces répulsives de la part des $(Z-1)$ autres électrons

On considère l'électron i : les $(Z-1)$ autres électrons font écran, par leur charge négative, entre cet électron et le noyau. Il subit donc une charge nucléaire effective notée Z^*e plus faible :

Schéma de modélisation :

Suite à ces deux approximations, les différents électrons vont être décrits par les mêmes fonctions d'ondes que celles de l'atome d'hydrogène, les orbitales atomiques.

2. Configuration électronique d'un atome

Dans l'atome, l'électron est décrit par les 4 nombres quantiques (n, l, m, m_s) .

Les OA de même n appartiennent à la même couche quantique.

Les OA de même n et l appartiennent à la même sous-couche quantique.

Quel est l'ordre en énergie de ces niveaux ?

On définit l'état fondamental d'un atome comme son état de plus basse. (État excité : état d'énergie supérieure à l'état fondamental)

Exemple :

La configuration électronique est obtenue de manière expérimentale (spectroscopie) mais il existe des règles permettant de la retrouver.

a. *Principe d'exclusion de Pauli*

Principe d'exclusion de Pauli :

Corollaire :

Une OA peut donc accueillir au maximum deux électrons. Si l'OA est doublement occupée, les électrons sont appariés. Si l'OA est occupée par un électron, on parle d'électron célibataire.

Représentation conventionnelle d'une OA :

Sous-couche ns \rightarrow 1 OA \rightarrow 2 électrons au max
Sous-couche np \rightarrow 3 OA \rightarrow 6 électrons au max
Sous-couche nd \rightarrow 5 OA \rightarrow 10 électrons au max
Sous-couche nf \rightarrow 7 OA \rightarrow 14 électrons au max

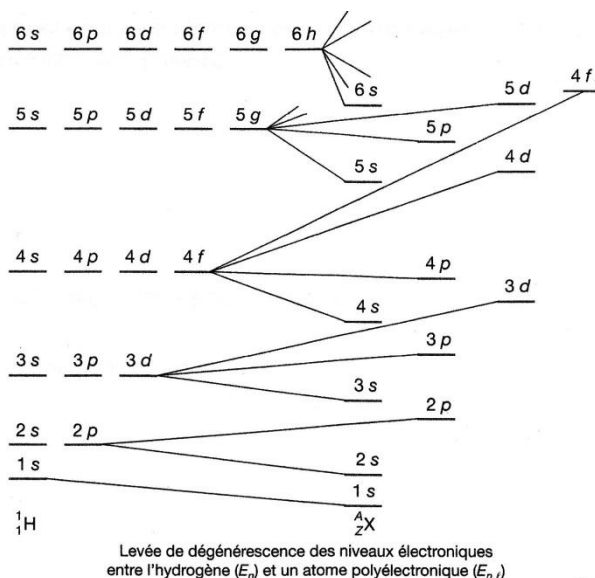
b. *Règle de Klechkowski*

Comment répartir les électrons dans les sous-couches pour avoir une stabilité maximale du système ? Remplir les OA par énergie croissante... La règle de Klechkowski nous permet de retrouver l'ordre en énergie des OA.

Règle de Klechkowski :

Pyramide mnémotechnique.

Diagramme énergétique des OA avec dégénérescence des niveaux



Exemples : Be ($Z = 4$), N ($Z = 7$), Ti ($Z = 22$)

Mais, il existe des exceptions à cette règle : Cr ($Z = 24$) et Cu ($Z = 29$).

→ *Gain de stabilité avec des configurations à sous-couches remplies ou à demi-remplies.*

Exceptions de plus en plus nombreuses en bas de classification à cause de la proximité énergétique des niveaux.

c. Règle de Hund

L'énergie d'une OA dépend de n et l . 3 OA p dégénérées, 5 OA d dégénérées, 7 OA f dégénérées...

Comment remplir les électrons dans des OA d'énergie similaire ?

Règle de Hund :

Cette règle peut se comprendre en considérant la répulsion électrostatique de 2 électrons occupants une même orbitale. Pour ce qui est de la nécessité des spins parallèles, c'est quantique (énergie d'échange).

Exemple : N ($Z = 7$)

3. Électrons de cœur et électrons de valence

Les propriétés chimiques d'un élément sont liées au comportement des électrons externes, peu liés au noyau et de haute énergie.

- Électrons de cœur : interne, peu engagés dans la réactivité chimique
- Électrons de valence : peu soumis à l'influence de noyau, responsables de la réactivité chimique

Définition :

Exemples : C ($Z = 6$), Fe ($Z = 26$)

Écriture simplifiée les gaz rares [Ne]...

4. Cas des ions

Anions : écrire la configuration électronique de l'atome et ajouter le nb d'électrons correspondant à la charge en suivant les règles précédentes.

Un atome a tendance à capter des électrons jusqu'à saturation de sa couche de valence.

Exemple : Cl⁻ ($Z = 17$)

Cations : écrire la configuration électronique de l'atome et enlever le nb d'électrons correspondant à la charge. Les électrons les plus facilement éjectés de l'atome sont les électrons les moins liés au noyau. *On retire les électrons dans l'ordre inverse du remplissage SAUF pour les éléments de transition, on enlève les ns avant les (n-1)d !*

Un atome a tendance à céder un ou des électrons de sa couche de valence de manière à obtenir une couche de valence vide ou semi-remplie.

Exemples : Na⁺ ($Z = 11$), Al³⁺ ($Z = 13$), Fe²⁺ ($Z = 26$)

V. Construction de la classification

1. Aspect historique

1^{ère} moitié du XIX^{ème} siècle : les chimistes remarquent l'existence d'analogies entre les propriétés de certains éléments (par exemple les halogènes). Les éléments présentant ces analogies vont être regroupés en **familles chimiques**.

1860 – 1870 : la notion de **périodicité des éléments** est citée et va être utilisée en vue de classer les éléments connus à l'époque.

D. Mendeleiev 1869

Sa classification est établie par masse atomique croissante comme précédemment. Sa classification rend compte de la périodicité des propriétés chimiques.

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Li 7.03	Be 9.08	B 10.95	C 12.0	N 14.04	O 16.0	F 19.06	
Na 23.05	Mg 24.3	Al 27.1	Si 28.4	P 31.02	S 32.1	Cl 35.45	
K 39.11	Ca 40.1	Sc 44.1	Ti 48.2	V 51.4	Cr 52.14	Mn 55.0	Fe 56.0
	Cu 63.6	Zn 65.4	Ga 69.9	Ge 72.5	As 75.0	Se 79.0	Br 80.0
Rb 85.4	Sr 87.6	Y 89.0	Zr 90.4	Nb 93.7	Mo 96.0	?	Ru 101.7
	Ag 107.9	Cd 112.0	In 113.9	Sn 119.1	Sb 120.4	Te 127.5	Rh 103.0
Cs 132.9	Ba 137.4	La 138.6	Ce 140.2				Pd 106.4
		Vb 173.2		Ta 182.8	W 184.8		Os 191
			Pb 206.9	Bi 208.1			Jr 193.1
Au 197.2	Hg 200.0	Tl 204.1	Th 232.6		U 239.6		Pt 194.9

Ex : Li, Na, K

Ce sont des éléments :

- moins denses que l'eau,
- mous (sectionnés par un simple couteau),
- à la température de fusion basse (< 200°C),
- réactifs vis à vis de l'eau et forment des hydroxydes solides, blancs, translucides et corrosifs.

Ex : Mg, Ca, Sr, Ba

Ces éléments s'enflamment de façon violente en présence de dioxygène pour former des oxydes cristallins.

Ex : F, Cl, Br, I

Ils sont sous forme moléculaire à température et pression ambiante. Ils s'associent avec le sodium pour former des solides blancs.

La classification de Mendeleiev est constituée de plusieurs lignes appelées **périodes**. Au sein d'une période, les **propriétés chimiques évoluent de manière régulière**. Le passage à la ligne marque une **discontinuité de ces propriétés**. Néanmoins, les éléments situés dans une même colonne présentent des **propriétés chimiques analogues**.

Du temps de Mendeleiev, seulement 63 éléments chimiques étaient connus. L'iode est placé après le tellure alors que la masse atomique de l'iode est inférieure à celle du tellure ; cette inversion est faite afin que l'iode se retrouve dans la même colonne que le fluor, le chlore et le brome (famille des halogènes).

Des cases vides sont laissées lorsqu'aucun élément connu ne présente les caractéristiques (masse atomique ou propriétés chimiques) associées à cette place dans la classification. Ainsi, le tableau présente un **caractère prédictif** ce qui en fait toute sa puissance.

Ex : l'élément situé en dessous du silicium est nommé éka-silicium. Ses propriétés sont prévues à partir de sa place dans la classification. En 1886, le germanium est découvert ; les chimistes se rendent compte qu'il possède les propriétés de l'éka-silicium. Le germanium trouve alors immédiatement sa place dans la case de l'éka-silicium ce qui marque la réussite du caractère prédictif de la classification de Mendeleiev.

Moseley 1913

Il étudie le spectre d'émission des rayons X de différents éléments et introduit le numéro atomique Z. Il remarque alors que **Mendeleiev avait classé par numéro atomique croissant** d'où l'inversion opérée entre l'iode et le tellure.

Aujourd'hui, **118 éléments sont connus**. Les éléments de numéro atomique supérieur à celui de l'uranium sont instables et sont obtenus par fusion nucléaire.

2. Construction à partir du modèle quantique de l'atome

Les éléments sont classés par numéro atomique croissant et leur disposition dépend de leur configuration électronique. En effet, des éléments d'une même colonne ont des propriétés chimiques comparables. Ils doivent donc avoir le même type de configuration de valence.

Ordre de remplissage des sous-couches :

La classification périodique est donc constituée de 4 blocs :

- Le **bloc s**

- Le **bloc d**

- Le **bloc p**

- Le **bloc f**

Il convient de connaître le nom, le symbole et le numéro atomique des éléments des trois premières périodes de la classification périodique.

3. Détermination de la configuration électronique

Notons n le numéro de ligne et c le numéro de colonne

Bloc s : configuration des électrons de valence

Bloc p : configuration des électrons de valence

Bloc d : configuration des électrons de valence

Compléter les sous-couches de cœur pour obtenir la configuration complète.

Exemples : K, Fe, Si

La position d'un élément dans le tableau donne sa configuration électronique *selon Klechkovsky* mais cette configuration n'est pas toujours la bonne...

Exemple : Cu

VI. Évolution de quelques propriétés atomiques

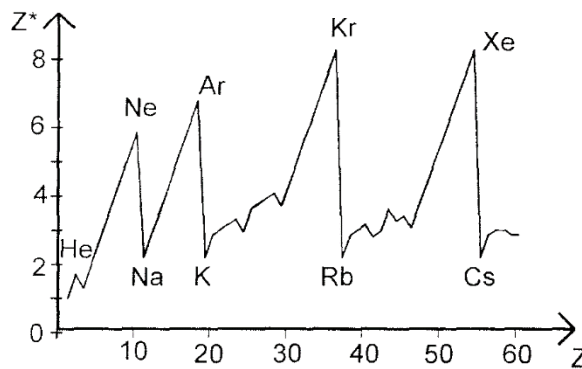
1. Charge effective

Pour comprendre l'évolution de certaines propriétés de l'atome dans la classification périodique, il faut s'intéresser aux propriétés des électrons de valence. La charge effective qu'ils ressentent permet de déterminer à quel point les électrons de valences sont retenus par le noyau.

$$Z^* = Z - \sigma$$

La charge effective des électrons de valence correspond à la charge du noyau diminuée par l'écrantage des électrons de cœur :

-
- De haut en bas dans une colonne, Z^* augmente faiblement.



2. Energie des OA

L'énergie d'une OA change d'un atome à l'autre, elle est d'autant plus basse que l'interaction électron-noyau est forte. L'énergie d'une OA va donc être d'autant plus basse que :

- Z^* ressenti par un électron est grand
- n associé à l'OA est petit

De gauche à droite dans une période,

Dans une colonne, le haut en bas, les OA de valence ont un n de plus en plus élevé donc l'énergie des OA de valence augmente.

3. Rayon atomique

Définition : rayon orbitaire ou rayon de l'OA (n, l)

Dans le cadre du modèle de Slater :

$$r_{(n,l)} = \frac{n^2}{Z^*} a_0$$

avec $a_0 = 52,9 \text{ pm}$: rayon de Bohr

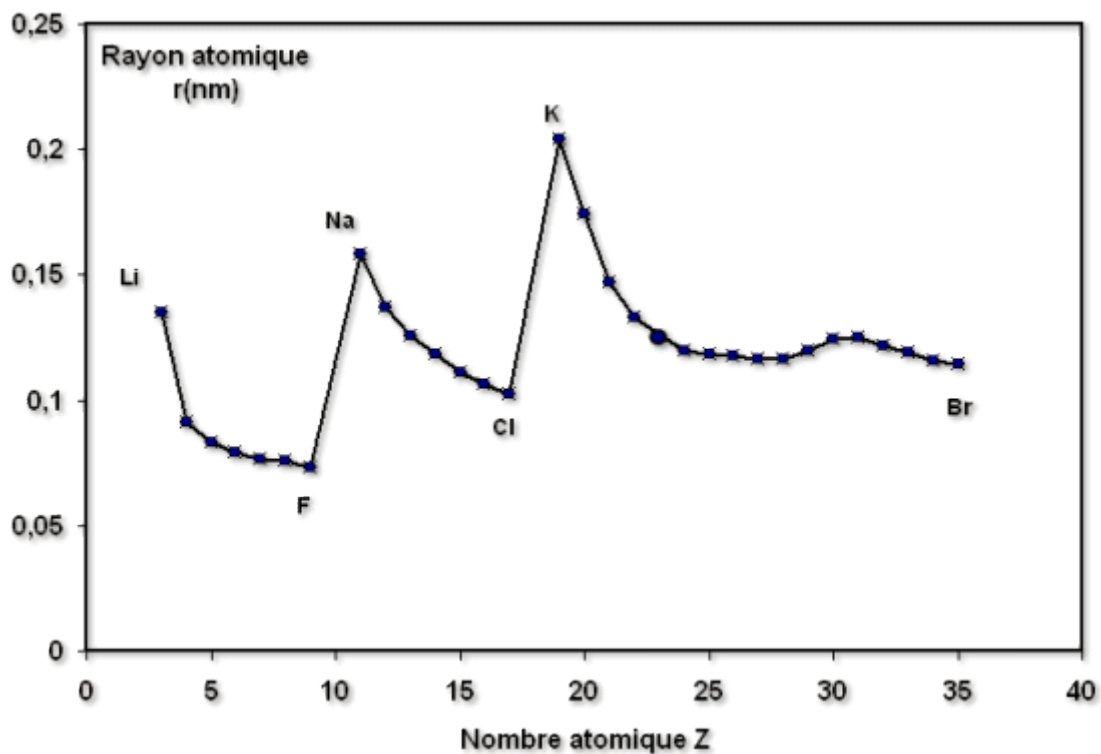
Définition :

Rayon atomique :

De gauche à droite sur une période, Z^* augmente et n reste constant, alors l'électron externe est de plus en plus attiré par le noyau : le rayon atomique diminue.

De haut en bas dans une colonne, n augmente davantage que Z^* : le rayon atomique augmente.

Evolution du rayon atomique ou rayon des OA de valence :

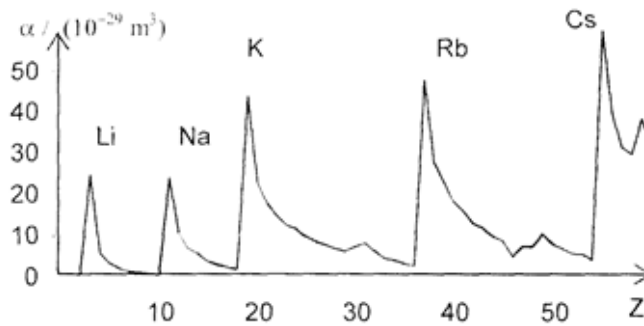


4. Polarisabilité

Définition :

Plus le nuage électronique est diffus, plus il se déforme facilement, et donc plus l'atome est polarisable. La polarisabilité augmente donc avec le rayon atomique.

Evolution de la polarisabilité :



5. Electronégativité

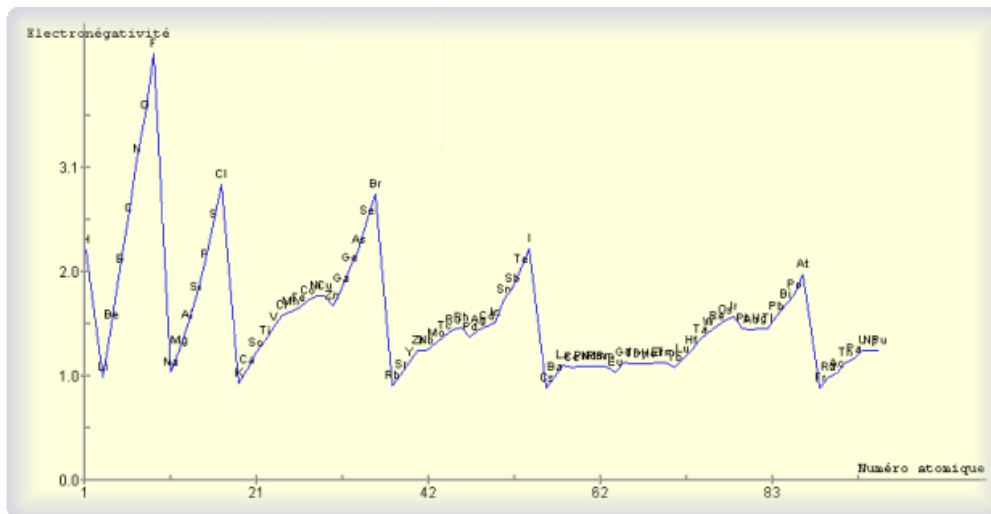
Définition : Electronégativité :

Plusieurs échelles :

- échelle de Mulliken :
- échelle de Pauling (couramment utilisée en chimie organique) : basée sur la différence de force des liaisons A-B, A-A et B-B.

Plus le nuage électronique est diffus et moins l'atome peut attirer à lui les électrons qui le lient à un autre atome : l'électronégativité varie à l'inverse du rayon atomique.

De plus, plus l'énergie des OA de valence est basse, plus il faut fournir d'énergie pour céder un électron, et donc plus l'atome est électronégatif.



Evolution de l'électronégativité :

VII. Étude de quelques familles

1. Bloc s

a. Alcalins

Alcalins :

Ces éléments ont tendance à perdre leur unique électron de valence pour conduire à la formation d'un cation isoélectronique du gaz noble qui le précède.

Ex : Li^+ , Na^+ , K^+

Ces éléments sont les plus électropositifs et ce sont des métaux réducteurs.

b. Alcalino-terreux

Alcalino-terreux :

Ces éléments ont tendance à perdre deux électrons pour conduire à la formation d'un cation isoélectronique du gaz noble qui le précède (sauf le béryllium qui a tendance à former des liaisons covalentes).

Ex : Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+}

Ces éléments sont moins électropositifs et moins réducteurs que les alcalins.

2. Bloc p

a. Halogènes

Halogènes :

Ces éléments ont tendance à capter un électron pour donner un ion halogénure.

Ex : F^- , Cl^- , Br^- , I^-

Deux atomes d'halogène s'associent par liaison covalente pour former un dihalogène fortement oxydant.

Ex : F_2 gaz jaune pâle, Cl_2 gaz jaune vert, Br_2 liquide rouge brun, I_2 solide violacé

b. Gaz rares ou gaz nobles

Gaz rares ou nobles :

Ces éléments ont une faible réactivité chimique et se présentent souvent à l'état atomique.

ANNEXE : Expressions mathématiques des fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène et des ions hydrogénoïdes

n	ℓ	m	Nom de l'orbitale	$R_{n,\ell}(r)$	$Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \varphi)$
1	0	0	1s	$\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2	0	0	2s	$\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2	1	-1	2p _x	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cos\varphi$
2	1	0	2p _y	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \sin\varphi$
2	1	-1	2p _z	$\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} r \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$
3	0	0	3s	$\frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - 4\frac{Zr}{a_0} + 4\frac{Z^2r^2}{a_0^2}\right) r \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
3	1	-1	3p _x	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$	$\sin\theta \cos\varphi$
3	1	0	3p _y	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$	$\sin\theta \sin\varphi$
3	1	-1	3p _z	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right)$	$\cos\theta$
3			3d _{z²}	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$	$3\cos^2\theta - 1$
3			3d _{xz}	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$	$\sin\theta \cos\theta \cos\varphi$
3			3d _{yz}	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$	$\sin\theta \cos\theta \sin\varphi$
3			3d _{x²-y²}	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$	$\sin^2\theta \cos 2\varphi$
3			3d _{xy}	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right)$	$\sin^2\theta \sin 2\varphi$