

# Atomes - Classification périodique

## I. Éléments de mécanique quantique

1. Historique
2. Équation de Schrödinger
  - a. L'hamiltonien
  - b. Recherche des fonctions propres et des valeurs propres solutions de l'hamiltonien
3. Propriétés de l'hamiltonien et des fonctions propres

## II. Résolution de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène $H(\chi) = E \chi$

1. Les nombres quantiques  $n, l$  et  $m$
2. Énergies (valeurs propres associées)
3. Orbitales atomiques (fonctions propres)
  - a. La partie radiale
  - b. La partie angulaire
4. Représentations conventionnelle d'une orbitale atomique
5. Ions hydrogéoïdes

## III. Atomes polyélectroniques

1. Le drame du deuxième électron - Charge effective
  - a. Définition - Charge effective ressentie par un électron
  - b. Énergie des OA

## IV. Classification périodique : un outil performant

1. Construction par  $Z$  croissant
2. Architecture du tableau, périodes, familles
3. Configuration électronique d'un atome dans son état fondamental
  - a. Obtention
  - b. Électrons de valence, électrons de coeur
  - c. Lien avec les nombres d'oxydation, propriétés magnétiques
4. Organisation par blocs

## V. Évolutions de propriétés au sein de la classification périodique

1. Charge effective ressentie par les électrons de valence
2. Électronégativité et énergie des orbitales atomiques
3. Rayon associé à une orbitale atomique
  - a. Lien avec la charge effective
  - b. Lien avec la polarisabilité
4. Relation avec les propriétés expérimentales : énergie d'ionisation et affinité électronique
5. Retour sur l'électronégativité : les différentes échelles d'électronégativité

## Chimie quantique : une chimie du XX<sup>ème</sup> siècle.

Niels Bohr en 1913, établit une théorie basée sur le modèle planétaire de Rutherford . Elle a un succès immédiat car elle explique de manière simple les raies spectrales de l'hydrogène et des ions hydrogénoïdes tout en effectuant un rapprochement entre les premiers modèles de l'atome et la théorie des quanta. Cependant, cette théorie ne peut expliquer le spectre d'éléments à plusieurs électrons (comme celui de l'hélium), ni la nature des liaisons chimiques, et elle est totalement abandonnée au profit de la mécanique quantique à partir de 1925.



Niels Bohr (1885-1962) (danois)

Le physicien français, Louis de Broglie associe une fonction d'onde aux particules subatomiques.



Louis de Broglie  
(1892-1987)

Erwin Schrödinger pose l'équation de Schrödinger.



Erwin Schrödinger (1887-1961)  
(autrichien)

Max Born natif de prusse orientale doit sa célébrité à son interprétation du carré du module de la fonction d'onde de la particule comme une probabilité de présence.



Max Born (1882-1970)

# I. Éléments de mécanique quantique

## 1. Historique

— **1900 Planck (PN 1918)** à l'issue de considérations thermodynamiques sur l'entropie (et non à cause de la catastrophe UV du corps noir) montre qu'il y a un **lien entre l'énergie et la fréquence** d'un rayonnement électromagnétique.

$$E = h\nu$$

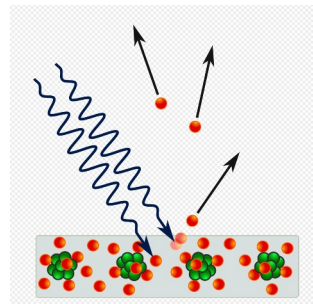
$h$  : constante de Planck,  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{J.s}$

Pourquoi  $h$ ?  $h$  grandeur auxiliaire (**Hilfe** en allemand)

— **1905 Einstein (PN en 1921)** associe une particule, **le photon**, à un quantum d'énergie. Le photon est une particule élémentaire de masse nulle, de charge nulle, se déplaçant à la célérité  $c$ .

On peut ainsi expliquer , l'effet photoélectrique :

L'effet photoélectrique permet l'émission d'électrons par un matériau métallique lorsqu'il est soumis à l'action de la lumière. L'émission de chaque électron (particules rouges) requiert une quantité minimale d'énergie, laquelle est apportée par un photon (ondulations). L'excès d'énergie est communiqué à l'électron sous forme d'énergie cinétique.



— **1913 modèle de Bohr** : C'est le modèle planétaire (étudié en physique l'an dernier). L'électron passe d'une orbite à l'autre en absorbant ou émettant un quantum d'énergie. La quantification des niveaux d'énergie provient de la quantification du moment cinétique de l'électron. Ce modèle explique le spectre de raies en émission de l'atome d'hydrogène mais ne permet pas de rationaliser les spectres d'émission d'aucun atome polyélectronique.

— **1925 Louis de Broglie** étend l'idée d'associer une onde électromagnétique à chaque particule et pose la relation de Broglie qui lie la longueur d'onde du rayonnement électromagnétique associé au corpuscule à sa quantité de mouvement. Il pose les bases de la théorie ondulatoire. Il y a **dualité onde-corpuscule**.

$$\lambda = h/p = h/mv$$

Cette hypothèse sera confirmée en 1927 par l'expérience de Davisson et Germer qui mettent en évidence une figure de diffraction en bombardant une cible de nickel cristallin par des électrons lents de 54 électron-volts ce qui prouve la nature ondulatoire de la matière.

Toutes ses avancées scientifiques vont être à l'origine de l'avènement de **la mécanique quantique**.

Presque simultanément Schrödinger et Heisenberg posent les bases de cette nouvelle théorie :

— **En 1927, Heisenberg**, à l'aide d'un formalisme matriciel, montre que la description à l'échelle atomique de corpuscules matériels (électrons, protons, neutrons, ...) nécessite l'hypothèse d'une **onde associée au corpuscule** mais qu'il n'est pas possible de connaître simultanément avec une précision suffisante vitesse et position pour des système de petite masse se déplaçant à la vitesse de la lumière. C'est le principe **d'indétermination d'Heisenberg** :

$$\Delta p \cdot \Delta x > h/4\pi$$

$h$  : constante de Planck,  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{J.s}$

$\Delta p$  : incertitude type sur la quantité de mouvement, impulsion  $p = mv$

$\Delta x$  : incertitude type sur la position

Comme la masse  $m$  des particules subatomiques est très petite, la relation précédente s'écrit en faisant intervenir la précision et la vitesse,  $\Delta v \cdot \Delta x > h/4\pi m$ . Si on mesure précisément la vitesse (ou la position), on ne peut connaître précisément la position (ou la vitesse).

Pas de problème pour des objets de la mécanique Newtonienne.

**Toute l'information relative à une particule de faible masse se déplaçant à la vitesse  $v$ , est alors contenue dans sa fonction d'onde associée,  $\psi$ .**

— **En 1927, Schrödinger**, établit une équation vérifiée par la fonction d'onde  $\psi$ , associée aux particules de masse  $m$ , non relativistes soumises à une force dérivant d'un potentiel  $V$ , dont l'énergie mécanique totale est classiquement  $E_{\text{mécanique}} = P^2/2m + V(r)$  :

$$H(\psi) = E \cdot \psi$$

## 2. L'équation de Schrödinger

$$H(\psi) = E \cdot \psi$$

### Équation de Schrödinger

#### a. Opérateur hamiltonien : $H$

**$H$  est l'opérateur hamiltonien.** Il symbolise la suite des opérations effectuées sur la fonction  $\Psi$  dans le premier membre de l'équation.

Rappel : Un opérateur transforme une fonction en une autre fonction.

On peut détailler l'opérateur  $H$  :

$$H(\Psi) = -(\hbar^2/2m)\Delta\Psi + V \Psi = H_c(\Psi) + H_p(\Psi)$$

où  $\hbar = h/2\pi$

Il y a deux termes dans cet hamiltonien :

- $-(\hbar^2/2m)\Delta\Psi$ , (où  $\Delta\Psi$  est l'opérateur Laplacien) est un terme d'ordre cinétique.

Rapide démonstration :

Cette équation a été construite en utilisant l'équation de propagation de Maxwell (1).

$$(1) \Delta\Psi = \frac{1}{v^2} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} \quad \text{où } v \text{ est la vitesse de propagation de l'onde}$$

Pour une onde stationnaire de la forme,  $\Psi = \Psi(x,y,z)\cos(\omega t + \phi)$  où  $\omega = 2\pi\nu$  est la pulsation.

$$(2) \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\omega^2 \Psi = -(2\pi\nu)^2 \Psi$$

avec (1),  $\Delta\Psi = -(\omega/v)^2 \Psi = -(2\pi\nu/v)^2 \Psi$

Or  $\lambda\nu = v$ , donc  $\Delta\Psi = -(2\pi/\lambda)^2 \Psi$  cad  $(1/\lambda)^2 = -\Delta\Psi/(\Psi(2\pi)^2)$

En mécanique classique, l'énergie cinétique peut s'écrire  $E_c = 1/2 mV^2 = p^2/2m$

En introduisant la longueur d'onde de de Broglie,  $\lambda = h/p$ ,  $E_c = h^2/(\lambda^2 \times 2m) = -(\hbar^2/2m)\Delta\Psi/\Psi$

On écrit ensuite que  $E = E_c + E_p$

•  $V(r)$  est le potentiel auquel la particule est soumise. Le deuxième terme de l'équation de Schrödinger est un terme d'ordre potentiel,  $H_p$ .

C'est le deuxième terme qui va poser problème dans la résolution de l'équation pour les atomes polyélectroniques.

#### b. Recherche des fonctions propres et les valeurs propres associées à l'hamiltonien

Résoudre l'équation de Schrödinger revient à déterminer les fonctions d'ondes  $\Psi$  qui décrivent les états possibles de la particule dans l'environnement défini par le terme attractif de potentiel  $V(x,y,z)$ , qui après avoir été transformées par l'opérateur hamiltonien, sont proportionnelles à la fonction d'origine. Ce sont **des fonctions propres** au sens mathématique.

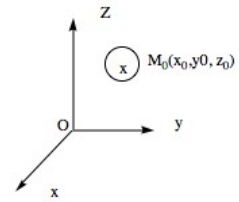
Le coefficient de proportionnalité est la **valeur propre** associée à  $\Psi$ , au sens mathématique. Physiquement, cette valeur propre associée à  $\Psi$ , figure l'**énergie** de la particule dans cet état.

**Mathématiquement, résoudre l'équation de Schrödinger, revient à chercher les fonctions propres du système et leurs valeurs propres associées.**

Formellement, la résolution de cette équation revient à résoudre un système d'équations différentielles couplées qui se fait sous forme matricielle. On trouve les valeurs propres puis pour chaque valeur propre, on détermine la fonction d'onde  $\Psi$  associée.

### 3. Propriétés de l'hamiltonien et des fonctions propres

La fonction d'onde  $\Psi$  associée à la particule n'a pas, en elle même de signification physique. Le carré de cette fonction  $\Psi^2(x,y,z)$  représente la densité de probabilité de présence de l'électron en ce point. La probabilité de trouver l'électron dans un volume infinitésimal  $d\tau$  centré autour du point  $M_0$  de coordonnées  $(x_0, y_0, z_0)$  est donnée par la relation **(1)** :



$$dP = \Psi^2(x_0, y_0, z_0) d\tau \quad \textbf{(1)}$$

$\Psi^2(x_0, y_0, z_0)$  représente donc la probabilité de présence de l'électron en ce point par unité de volume. On parle parfois de densité électronique.

La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace devant bien sûr être égale à 1, la fonction  $\Psi$  est normalisée et vérifie la relation **(1 bis)** :

$$\iiint \Psi^2(x, y, z) d\tau = 1 \quad \textbf{(1bis)}$$

Toutes les fonctions considérées sont donc **normées (normalisées)**.

- L'opérateur hamiltonien **H** est **linéaire** :

$$H(\lambda\Psi) = \lambda H(\Psi) \text{ et } H(\Psi_i + \Psi_j) = H(\Psi_i) + H(\Psi_j)$$

- De cette linéarité, on peut déduire que si  $\Psi_i$  est solution de l'équation de Schrödinger -  $\Psi_i$  l'est également.

$\Psi_i$  est solution de l'équation de Schrödinger  $H(\Psi_i) = E_i \Psi_i$

Calculons  $H(-\Psi_i) = -H(\Psi_i) = -E_i \Psi_i = E_i (-\Psi_i)$

On ne peut donc attribuer de sens physique au signe global d'une fonction propre solution. On peut utiliser aussi bien la fonction  $\Psi_i$  que son opposé.

- On appelle recouvrement de deux fonctions  $\Psi_i$  et  $\Psi_j$  l'intégrale  $S_{ij}$  suivante :

$$S_{ij} = \iiint \Psi_i \cdot \Psi_j d\tau$$

On admet que **le recouvrement entre deux fonctions solutions d'un même hamiltonien** est nul; on dit que les fonctions sont orthogonales.

$$S_{ij} = 0 \text{ si } i \neq j$$

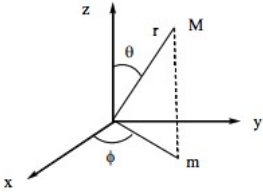
L'ensemble des fonctions propres de l'hamiltonien forment un jeu de fonctions **orthogonales**.

- Si deux fonctions différentes  $\Psi_i$  et  $\Psi_j$  sont associées à la même valeur propre  $E$ , on dit que  $\Psi_i$  et  $\Psi_j$  sont **dégénérées**.

- Toute combinaison linéaire de deux fonctions dégénérées est elle aussi fonction propre de l'hamiltonien avec la même énergie (propriétés de l'hamiltonien linéaire).

## II. Résolution de l'équation de Schrödinger pour l'électron de l'atome d'hydrogène

La résolution se fait en coordonnées sphériques.



$$\begin{aligned}
 r &\geq 0 & x &= r \sin \theta \cos \phi \\
 0 \leq \theta &\leq \pi & y &= r \sin \theta \sin \phi \\
 0 \leq \phi &< 2\pi & z &= r \cos \theta
 \end{aligned}$$

$$d\tau = dr \times r d\theta \times r \sin \theta d\phi = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

La résolution de cette équation fait apparaître les nombres quantiques  $n, l, m$ .  
 On montre que , à tout triplet  $(n, l, m)$  correspond une orbitale atomique, fonction propre  $\chi_{n,l,m}$  associée à une énergie, valeur propre,  $E_n$ .

1. les nombres quantiques  $n, l, m$ .

2. Énergies (valeurs propres associées)

La résolution de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène montre que les énergies dépendent du seul nombre quantique principal  $n$  :

$$E_n = - \frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8 \epsilon_0^2 h^2}$$

Application numérique :  $E_n = \frac{-21,80 \cdot 10^{-19}}{n^2} \text{ J}$

On constate que le Joule n'est pas une unité adaptée ici .

On utilise une unité adaptée à cette valeur : il s'agit de **l'électron-volt** (symbole eV) qui est l'énergie acquise par un électron accéléré par une ddp de 1 volt .

**Soit  $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Joule}$**

$$\text{Alors , } E_n = \frac{-13,6}{n^2} \text{ eV}$$

$$n=1 \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

$$n=2 \quad E_2 = -3,4 \text{ eV}$$

$$n=3 \quad E_3 = -1,51 \text{ eV}$$

### 3. Orbitales atomiques (fonctions propres)

**Sur chaque niveaux d'énergie quantifié  $n$  :  $n^2$  : OA dégénérées**

Les fonctions propres se présentent sous forme d'un produit d'une fonctions radiale  $R_{n,l} ( r )$  qui dépend des nombres quantiques  $n$  et  $l$  et d'une fonction angulaire  $Y_{l,m}(\theta,\phi)$  dépendant des deux nombres quantiques  $l$  et  $m$  :

$$\chi_{n,l,m} (r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

Chacune des deux fonctions est normée : compte tenu de l'expression de  $d\tau$  en coordonnées sphériques  $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$

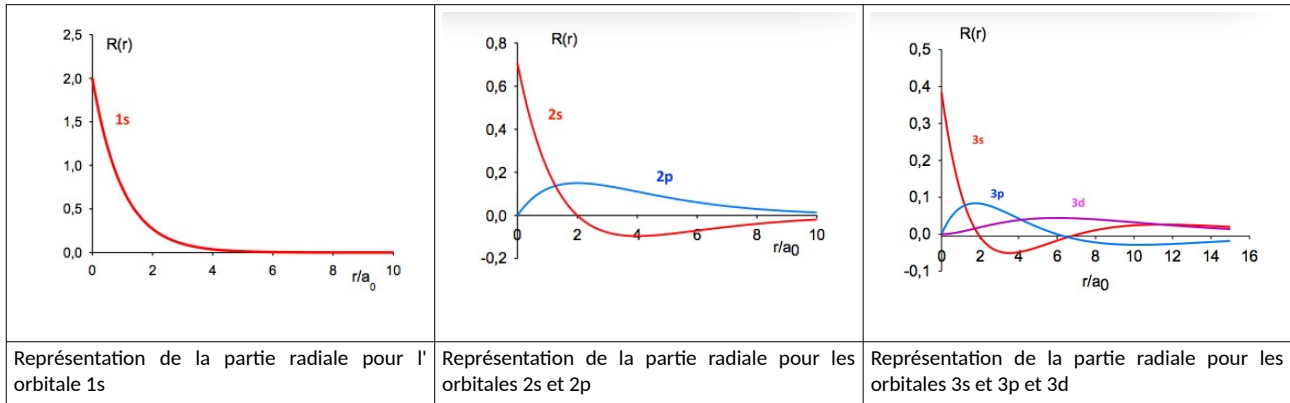
$$\int_0^\infty R_{n,l}^2 r^2 dr = 1$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l,m}^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1$$

- **a. La partie radiale**

La partie radiale est elle même le produit d'un polynôme de degré (n-1) et d'une exponentielle en  $-r/a_0$  où  $a_0$  est une constante homogène à une longueur appelée rayon de Bohr ( $a_0 = 52,9$  pm).

Cette partie radiale est de symétrie sphérique et ne privilégie aucune direction de l'espace. Elle détermine la distance moyenne de l'électron au noyau, qui augmente avec le nombre quantique  $n$ . On dira que les fonctions sont de plus en plus diffuses quand  $n$  croît, (ou de moins en moins contractées).



Remarque Une surface où une fonction d'onde s'annule est appelée **surface nodale**. La fonction change de signe quand on traverse une **surface nodale**.

Notez la présence de surface nodale radiale : des **sphères radiales**.

**Pour être plus précis, le rayon d'une fonction propre est défini comme le maximum de densité de probabilité radiale, croît avec  $n$  et dépend peu de  $l$ .**

En effet la densité de probabilité radiale pour une fonction propre est la probabilité  $D(r) = dS/dr$  où  $dS$  est la probabilité de trouver l'électron dans un volume compris entre la sphère de rayon  $r$  et celle de rayon  $r+dr$ , quelles que soient les valeurs des angles  $\theta$  et  $\phi$  :

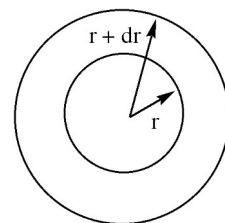
$$dS = \int_{\theta, \phi} R_{n,l}^2 Y_{l,m}^2(\theta, \phi) dr \cdot r \sin\theta d\phi \cdot r d\theta$$

$$dS = R_{n,l}^2(r) r^2 dr \int_{\theta, \phi} Y_{l,m}^2 \sin\theta \cdot d\phi \cdot d\theta$$

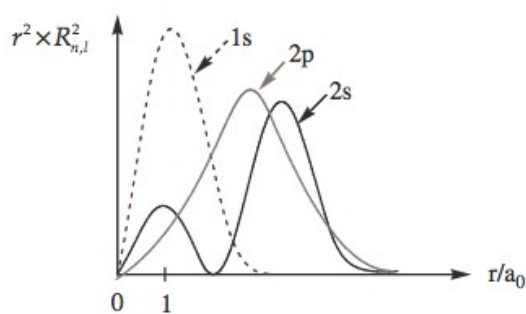
la partie angulaire étant normée

$$\int_{\theta, \phi} Y_{l,m}^2 \sin\theta \cdot d\phi \cdot d\theta = 1$$

$$D(r) = dS/dr = R_{n,l}^2(r) r^2$$



Densités de probabilité radiale des fonctions  $\chi_{1s}$ ,  $\chi_{2s}$  et  $\chi_{2p}$



En prenant une valeur approchée pour la partie radiale d'une OA, on peut trouver une valeur approchée du rayon  $\rho$  d'une orbitale :

**$\rho$  croît avec  $n$**   
 **$\rho = n^2 a_0$**

### b. La partie angulaire

Elle traduit au contraire les propriétés directionnelles de la fonction d'onde, essentielles pour le chimiste, puisqu'elles imposent les angles de valence.  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$

Le tableau suivant présente l'expression mathématique (à un facteur près) de la partie angulaire en fonction de  $\theta$  et  $\phi$  et en fonction de  $x, y, z$  et  $r$ .

| Type de fonction | $Y_{lm}$           |                                       |
|------------------|--------------------|---------------------------------------|
| s                | 1                  | 1                                     |
| $p_x$            | $x/r$              | $\sin \theta \cos \phi$               |
| $p_y$            | $y/r$              | $\sin \theta \sin \phi$               |
| $p_z$            | $z/r$              | $\cos \theta$                         |
| $d_{x^2 - y^2}$  | $(x^2 - y^2)/r^2$  | $\sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi$ |
| $d_{z^2}$        | $(3z^2 - r^2)/r^2$ | $3\cos^2 \theta - 1$                  |
| $d_{xy}$         | $xy/r^2$           | $\sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi$ |
| $d_{xz}$         | $xz/r^2$           | $\sin^2 \theta \cos \phi$             |
| $d_{yz}$         | $yz/r^2$           | $\sin^2 \theta \sin \phi$             |

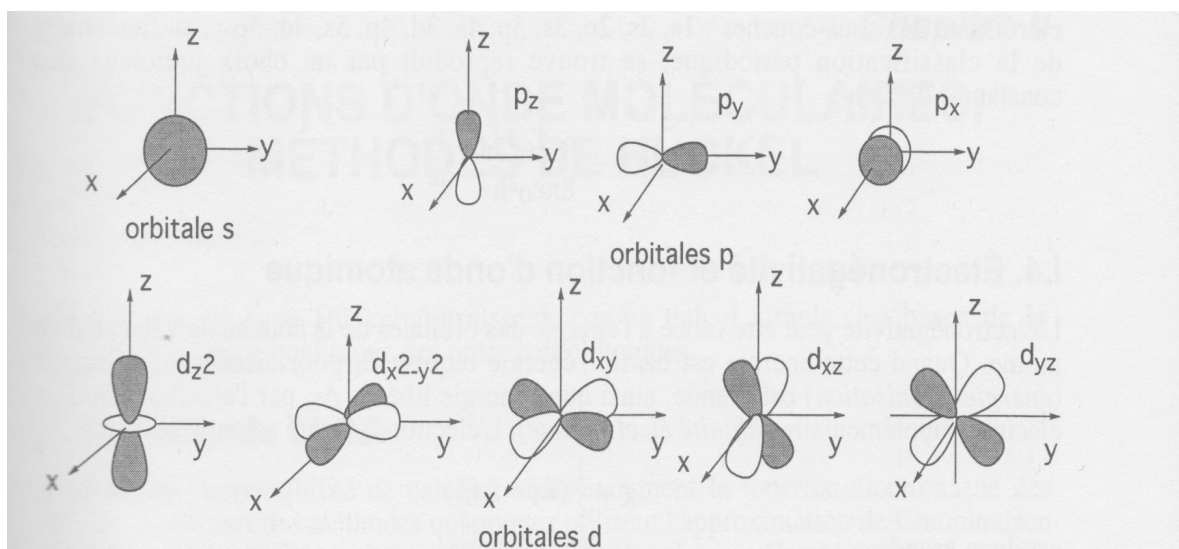
Expression mathématique de la partie angulaire des fonctions atomiques (à un facteur près) en coordonnées cartésiennes et sphériques.

## 4. Représentation conventionnelle

Les propriétés directionnelles des fonctions d'onde peuvent être mises en évidence par une représentation polaire des fonctions angulaires, obtenue en portant dans un plan  $\phi$  donné, sur chaque rayon vecteur de direction  $\theta$ , une grandeur proportionnelle à  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ .

**On adopte alors une représentation graphique conventionnelle qui synthétise ses principales propriétés :**

- un volume approximatif de localisation de l'électron dans l'espace dans lequel il est probable à 90% de trouver l'électron à un instant donné.
- Des phases relatives, symbolisées par l'opposition blanc noir indiquant un changement de signe de la fonction d'onde quand on passe d'une région de l'espace à une autre.



| Orbitales                               | s               | px                              | py  | pz  |     |
|-----------------------------------------|-----------------|---------------------------------|-----|-----|-----|
| Surfaces nodales de la partie angulaire |                 |                                 |     |     |     |
| Symétries                               |                 |                                 |     |     |     |
| Orbitales                               | dz <sup>2</sup> | dx <sup>2</sup> -y <sup>2</sup> | dxy | dyz | dxz |
| Surfaces nodales de la partie angulaire |                 |                                 |     |     |     |
| Symétries                               |                 |                                 |     |     |     |

Remarque : On confond sous le terme d'orbitale plusieurs notions différentes; En effet, on appelle indifféremment orbitale la fonction d'onde décrivant l'état d'un électron (fonction d'onde mono-électronique) et une représentation graphique conventionnelle qui synthétise ses principales propriétés.

## 5. Ions hydrogénoïdes

**Les ions hydrogénoïdes sont des systèmes qualitativement identiques à l'atome d'hydrogène : 1 électron en interaction électrostatique avec un noyau de charge Ze.**



Les résultats sont analogues à ceux que l'on obtient pour l'atome H; Quelques différences

quantitatives apparaissent toutefois en **raison de la charge plus importante** portée par le noyau.

- Dans les ions hydrogénoïdes, l'énergie associée à une fonction propre donnée est d'autant **plus basse** que la charge du noyau est grande, ce qui traduit l'interaction plus forte qui existe entre l'électron et le noyau de l'ion hydrogénoïde.

Les valeurs propres, les énergies sont de la forme :

$$E_n = -13,6 Z^2/n^2$$

- L' électron ressent une interaction attractive d'énergie potentielle plus forte du fait de la charge nucléaire plus importante. Les OA sont alors **plus contractées**.

L'expression analytique des fonctions propres se déduit de celles obtenues pour l'hydrogène en remplaçant  $a_0$  par  $a_0/Z$  dans les différentes relations et en première approximation :

$$\rho = n^2(a_0/Z)$$

Par conséquent elles présenteront une extension spatiale plus faible puisque l'unité de longueur est remplacée par  $a_0/Z$ .

### III. Atomes polyélectroniques

#### 1. Le drame du deuxième électron - Charge effective

##### a. Définition

Il n'existe pas de solution analytique de l'équation de Schrödinger pour les atomes à plusieurs électrons. Dans un atome qui possède plus d'un électron, **des répulsions électrons - électrons** s'ajoutent aux interactions d'attractions électrons - noyaux.

Ces répulsions électroniques électrons-électrons rendent l'expression du potentiel (deuxième terme dans l'expression de l'hamiltonien) très complexe.

Dans un premier temps, on peut considérer qu'elles affaiblissent l'attraction effectuée par le noyau. Pour un électron  $i$  donné, les électrons  $j \neq i$  agissent comme un écran entre l'électron singularisé  $i$  et le noyau chargé positivement. On fait donc l'approximation que les fonctions d'onde ont la même forme que celles d'un ion hydrogénoïde et **on tient compte de la répulsion des électrons en substituant à la charge du noyau  $Ze$  une charge effective  $Z^*(i)e$  qui prend en compte l'effet moyen des autres électrons sur l'électron donné ( $i$ ). C'est l'approximation monoélectronique ou approximation orbitale.**

Le numéro atomique effectif associé à l'électron  $i$ ,  $Z^*(i)$  est donné par la relation suivante :

$$Z^*(i) = Z - \sigma(i)$$
$$\sigma_i = \sum_{j \neq i} \sigma_{j,i}$$

où  $\sigma(i)$  est appelé constante d'écran pour l'électron  $i$  due aux autres électrons  $j$  différents de  $i$  et  $\sigma_{j,i}$  les valeurs d'écran de chaque électron  $j$  sur l'électron  $i$ .

Le principe du calcul de la constante d'écran est simple. Dans un atome polyélectronique les électrons proches du noyau sont sur des orbitales beaucoup plus contractées alors que les électrons plus éloignés -ie les électrons de valence- qui vont être responsables des propriétés chimiques de l'atome en question sont sur des orbites beaucoup plus diffuses. L'attraction exercée par le noyau sur ces électrons est beaucoup plus faible que celle exercée sur les électrons de proches du noyau. Ces électrons ne perçoivent qu'une partie de la charge atomique. Slater a proposé que ce numéro atomique effectif, qui est le plus souvent notée  $Z^*(i)$ , peut être calculé en tenant compte de la constante d'écran. Cette constante d'écran  $\sigma(i)$  représente l'effet moyen des autres électrons sur l'électron considéré. Il existe des règles empiriques permettant de calculer  $\sigma$  pour chaque électron (règles de Slater) hors programme.

Généralement les électrons  $s$  sont plus écrantant que les électrons  $p$  eux mêmes plus écrantant que les électrons  $d$  (cf allure des parties radiales des OA).

A retenir

**L'effet moyen des autres électrons est pris en compte par l'existence d'un écrantage de la charge du noyau, qui conduit un électron à ressentir une charge nucléaire effectivement inférieure à la charge réelle.  $\sigma(i)$  dépend des nombres quantiques  $n$  et  $l$  associés à l'électron  $i$ .**

### **b. Énergie des OA**

Dans le cadre de cette approximation, par analogie avec les ions hydrogénoïdes, à la différence de l'atome d'hydrogène, à cause de la présence des autres électrons qui s'interposent entre l'électron étudié associé aux nombres quantiques  $n$  et  $l$ , **l'énergie de cet électron ne dépend plus seulement du nombre quantique  $n$  mais aussi de  $l$ .**

$$E(n,l) = - 13,6 \cdot Z^*(n,l)^2 \cdot 1/n^2$$

en première approximation

### **c. Forme des orbitales**

**On admet que les formes des orbitales des atomes hydrogénoïdes peuvent s'étendre à l'atome polyélectronique.**

## **IV. Classification périodique : un outil performant**

La classification périodique va tenir compte des orbitales atomiques des différents atomes. Les propriétés atomiques sont liées aux électrons des orbitales des externes, les électrons de valence. Elle fait apparaître cette périodicité des propriétés chimiques.

Dès 1870, Mendéléev avait eu l'intuition de cette périodicité. Sans avoir les orbitales à disposition ,

il a proposé un classement reposant sur les masses atomiques des différents éléments. Avec la mécanique quantique, la classification s'affine :

### 1. Construction par Z croissant

Rappel Z

80 % des éléments sont des métaux

### 2. Architecture du tableau, périodes, familles

7 lignes = 7 périodes

18 colonnes = 18 familles Dans chaque colonne, chaque élément a le même nombre d'électrons de valence cad des propriétés chimiques analogues.

|         |          |                 |            |           |           |
|---------|----------|-----------------|------------|-----------|-----------|
| Colonne | 1        | 2               | 16         | 17        | 18        |
| Nom     | alcalins | Alcalinoterreux | chalogènes | halogènes | Gaz rares |

Précisons avec la notion d'OA et de configuration électronique.

### 3. Configuration électronique d'un atome dans son état fondamental

Définition : la **configuration électronique**, également appelée structure électronique ou formule électronique, décrit la distribution des électrons de cet atome dans son état fondamental dans l'ensemble de fonctions d'onde correspondant à ses orbitales atomiques.

#### a. Obtention

#### Le quatrième nombre quantique : le spin de l'électron

La notion théorique de spin a été introduite par Pauli en 1924 pour l'électron, afin d'expliquer un résultat expérimental qui restait incompréhensible dans le cadre naissant de la mécanique quantique non-relativiste : l'effet Zeeman. (analogie RMN pour le proton)

Chaque électron possède un moment magnétique intrinsèque  $\vec{\mu}_s$  lié à un moment cinétique propre, le vecteur spin  $\vec{s}$ .

$$\vec{\mu}_s = 2 \mu_B \cdot \vec{s} \quad \text{Où } \mu_B \text{ est le magnéton de Bohr}$$

Historiquement, le spin a d'abord été interprété comme un degré de liberté supplémentaire, s'ajoutant aux trois degrés de liberté de translation de l'électron : son moment cinétique intrinsèque (ou *propre*). En d'autres termes, l'électron *ponctuel* était vu comme tournant sur lui-même — d'où le nom de « *spin* » (de l'anglais « to spin » : faire tourner). Mais il est vite apparu que cette « rotation » devait être considérée comme purement quantique : elle n'a pas d'équivalent en mécanique classique.

Un électron placé dans un champ magnétique  $\vec{B}$  pourra se placer dans deux états énergétiques différents ; de façon parallèle ou antiparallèle à  $\vec{B}$ . La projection de  $\vec{s}$  sur l'axe Oz colinéaire à  $\vec{B}$  permet de définir deux derniers nombres quantiques de l'électron  $m_s = \pm 1/2$ .

On représente symboliquement par une flèche vers le haut  $\uparrow$ , un électron associé au nombre quantique  $m_s = 1/2$  (on parle de spin  $\alpha$ ) et par une flèche vers le bas  $\downarrow$  un électron associé à  $m_s =$

-1/2 (on parle de spin  $\beta$ ).

Pour un électron  $m_s$  = est 1/2 ou -1/2

**Comment établir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion dans son état fondamental?**

**Par construction (Aufbau), on remplit les orbitales atomiques selon la règle empirique de Klechkowski. Au cours de ce remplissage, on respecte le principe d'exclusion de Pauli et la règle de Hund.**

- La règle de Klechkowski permet de retrouver l'ordre de remplissage des OA : elles sont remplies par valeur croissante de  $(n+l)$  et quand  $n$  augmente à  $n+l$  fixé. (Ainsi c'est l'OA correspondant à la plus petite valeur de  $n$  qui se remplit en premier à  $n+l$  fixé).

(Moyen mnémotechnique : la connaissance de la structure de la classification périodique).

- Principe de Pauli : un électron a quatre nombres quantiques différents; ainsi dans une OA, il n'y a que 2 électrons qui se distinguent par leur nombre quantique de spin.

- Règle de Hund : lorsque plusieurs électrons doivent être placés dans des orbitales dégénérées, la configuration la plus stable est obtenue lorsque l'on a le plus d'électrons à spins parallèles.

### b. électrons de valence, électrons de cœur

**Les électrons de valence** sont les électrons qui occupent les OA de nombre quantique principal  $n$ , le plus élevé et les électrons des couches  $(n-1)d$  ou  $(n-2)f$  si elles sont incomplètes. Les électrons qui ne sont pas des électrons de valence sont les **électrons de cœur**.

Li :  $Z=3$  :  $1s^2 2s^1$       Na :  $Z=11$  :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

même nombre d'électrons de valence 1

les électrons de valence sont à l'origine des propriétés chimiques des éléments.

Une famille regroupe les éléments qui ont des propriétés chimiques analogues.

Sc :  $Z=21$   $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$  3 électrons de valence 3ème colonne

### c. Lien avec les nombres d'oxydation, propriétés magnétiques

- Un atome **peut perdre ses électrons de valence** ( $DO > 0$  le plus grand) ou gagner des électrons pour acquérir la structure du GR qui le suit ( $DO < 0$ ).

- Les propriétés magnétiques sont liées au spin totale de l'atome et donc aux électrons non appariés.

cas du manganèse paramagnétique

Ca : diamagnétique

#### 4. Organisation par blocs

On visualise les bloc s, p, d et f suivant la nature des électrons de valence des différents éléments.

### V. Évolutions de propriétés au sein de la classification périodique

#### 1. Charge effective ressentie par les électrons de valence

- La charge effective ressentie par les électrons de valence est beaucoup plus faible que celle ressentie par les électrons de cœur.
- Pour l'électron le plus externe, la charge effective croît de gauche à droite au sein d'une période.

+1 dans Z mais dans  $\sigma$  pas de -1 car les électrons au sein d'une même couche écrantent moins.

- Elle diminue brusquement quand on passe de la fin d'une ligne au début de la suivante.

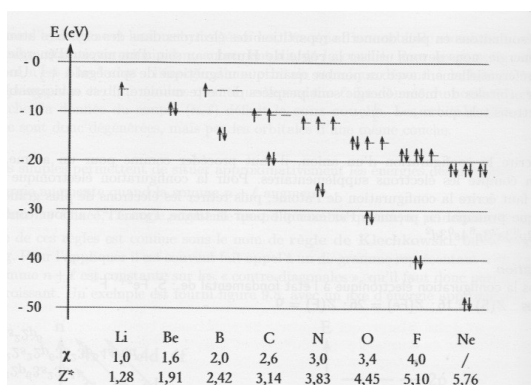
#### 2. Électronégativité et énergie des orbitales atomiques

**Définition :** l'électronégativité,  $\chi$  d'un élément est une grandeur qui caractérise sa capacité à attirer les électrons lors de la formation d'une liaison chimique avec un autre élément.

L'électronégativité peut-être reliée à l'énergie des orbitales de la couche de valence d'un atome. Si l'énergie des OA de la couche de valence d'un atome est basse, l'autre atome intervenant dans la liaison, aura tendance à lui donner des électrons.

E(2p)

E(2s)



On a vu que  $E_{n,l} = -13,6 Z^{*2}_{n,l} / n^2$

L'énergie des orbitales de la couche de valence est d'autant plus basse que l'interaction noyau-électron est forte c'est à dire que  $Z^*$  (électron de valence) est grand.

L'électronégativité augmente de la gauche vers la droite sur une même ligne (même variation que  $Z^*$ , même  $n$ ) et du bas vers le haut dans une colonne (effet de  $n$  et énergie  $<0$ ).

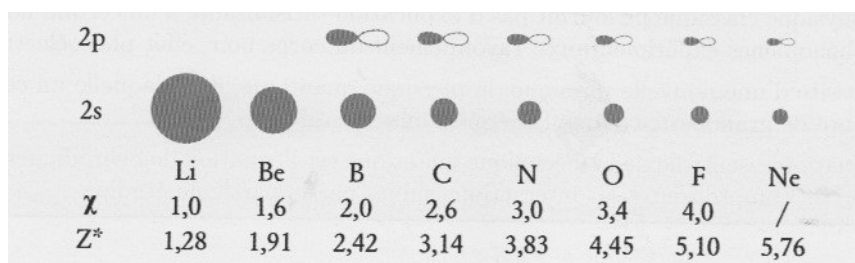
### 3. Rayon associé à une orbitale atomique

La formule approchée du rayon d'une orbitale s'écrit :  $\rho = (a_0/Z_{n,l}^*) \cdot n^2$

L'orbitale sera d'autant plus contractée que  $n$  est petit (le rayon des OA de valence est beaucoup plus grand que celui des orbitales de cœur) et que la charge effective est grande.

#### a. Lien avec la charge effective

Au sein d'une même période, on a la même valeur pour le nombre quantique principal des électrons de valence. Or  $Z^*$  (des électrons de valence) croît avec  $Z$ , donc le rayon d'une OA diminue quand on se déplace de gauche à droite.



#### b. Lien avec la polarisabilité

Un champ électrique externe, (du par exemple à la présence de molécules voisines), peut déformer le nuage électronique d'un atome (forcément apolaire). Les positions du barycentre des charges positives et du barycentre des charges négatives sont alors modifiées. Il y a apparition d'un

moment dipolaire induit :  $\vec{p} = \alpha \cdot \vec{E}$

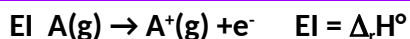
La constante de proportionnalité  $\alpha$  est la polarisabilité de l'atome. Elle caractérise l'aptitude du nuage électronique de l'atome à se déformer sous l'effet d'un champ électrique. Elle est directement proportionnelle au volume de l'atome.

Plus le rayon d'une OA est grand plus l'aptitude du nuage électronique à se déformer est grande : plus la polarisabilité est grande.

Sur une même période la polarisabilité diminue quand on se déplace de la gauche vers la droite et augmente quand on descend dans une période.

## 4. Relations avec les propriétés expérimentales

- **L'énergie d'ionisation, EI**, est l'énergie **requis**e pour arracher un électron.  $EI > 0$



Cet électron part de la dernière sous-couche.

Pour H : l'énergie de l'OA.

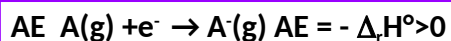
Dans les atomes polyélectroniques, la situation est différente dans la mesure où le bilan énergétique dépend de deux facteurs :

- l'énergie de l'OA qu'occupait l'électron arraché. ( $EI = E_{\text{orbitale}}$  (théorème de Koopmans))
- la réorganisation électronique instantanée qui se produit dans le cation. (facteur nouveau/H)

**L'énergie de l'orbitale occupée par l'électron le plus externe fournit une bonne approximation du potentiel d'ionisation.**

**L'EI augmente de la gauche vers la droite sur une même ligne et du bas vers le haut dans une colonne (comme  $Z^*$  (électrons de valence)).**

- L'énergie **libérée** par l'attachement d'un électron supplémentaire est l'affinité électronique, **AE**.



Cet électron arrive dans la dernière sous-couche. Le bilan énergétique dépend de deux facteurs :

- l'énergie de l'OA de la dernière place libre.
- la réorganisation électronique instantanée associée à la capture de cet électron supplémentaire (formation d'un anion). Plus l'atome est petit plus, plus les répulsions inter-électronique dans l'anion formé sont grandes.

Certains éléments n'ont pas d'AE colonnes 2 et 18.

L'ordre de grandeur de l'AE est très différent de l'ordre de grandeur de l'énergie de l'orbitale qui reçoit l'électron.

L'affinité électronique a tendance à augmenter lorsqu'on se déplace sur une ligne de la colonne 13 à la colonne 17. Les atomes qui ont la plus forte affinité électronique sont les halogènes.

## 5. Retour sur l'électronégativité : les différentes échelles d'électronégativité

| Échelle de Mulliken                                                                                                                                               | Échelle Allred - Rochov                         | Échelle de Pauling                                                                                                                                                                                                                                            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\chi_m = k_m \cdot (EI + AE + K)$<br>K et $k_m$ sont des coefficients pour que les différentes échelles soient cohérentes entre elles.<br>$\chi$ évolue comme EI | $\chi_{AR}(A) = k_{AR} Z^* / r^2 + \text{cste}$ | $((\chi_p(A) - \chi_p(B))^2 = k_p (D_{AB} - (D_{AA} \cdot D_{BB})^{1/2})$<br>$D_{AB}$ énergie à fournir pour dissocier la liaison A—B<br>$D_{AA}$ énergie à fournir pour dissocier la liaison A—A<br>$D_{BB}$ énergie à fournir pour dissocier la liaison B—B |

Mulliken : moyenne arithmétique entre capacité d'un électron à partir et à se fixer.

Allred - Rochov : tient compte de la charge effective des électrons de valence et rayon de l'atome

Pauling : moyenne géométrique des énergies de liaison stabilité de A—B par rapport à A—A et B—B

### Expressions analytiques précises des OA

| nombres quantiques |   | Orbitale atomique                           | $R_{n,l}(r)$                                                                                      | $Y_{l,m}(\phi, \varphi)$                                                      |
|--------------------|---|---------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| n                  | l |                                             |                                                                                                   |                                                                               |
| 1                  | 0 | 1s                                          | $2 \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \cdot e^{-r/a_0}$                                             | $\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$                                                       |
| 2                  | 0 | 2s                                          | $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$ | $\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$                                                       |
|                    | 1 | 2p <sub>x</sub>                             | $\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{5/2} \cdot r \cdot e^{-r/2a_0}$                  | $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cdot \cos\varphi$                   |
|                    | 1 | 2p <sub>y</sub>                             | $\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{5/2} \cdot r \cdot e^{-r/2a_0}$                  | $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cdot \sin\varphi$                   |
|                    | 1 | 2p <sub>z</sub>                             | $\frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{5/2} \cdot r \cdot e^{-r/2a_0}$                  | $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$                                     |
| 3                  | 0 | 3s                                          |                                                                                                   | $\frac{1}{4\sqrt{\pi}}$                                                       |
|                    | 1 | 3p <sub>x</sub>                             |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cdot \cos\varphi$                   |
|                    | 1 | 3p <sub>y</sub>                             |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cdot \sin\varphi$                   |
|                    | 1 | 3p <sub>z</sub>                             |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$                                     |
|                    | 2 | 3d <sub>z<sup>2</sup></sub>                 |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$                            |
|                    | 2 | 3d <sub>(x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup>)</sub> |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin^2\theta \cdot \cos 2\varphi$              |
|                    | 2 | 3d <sub>xy</sub>                            |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin^2\theta \cdot \sin 2\varphi$              |
|                    | 2 | 3d <sub>yz</sub>                            |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin\theta \cdot \cos\theta \cdot \sin\varphi$ |
|                    | 2 | 3d <sub>zx</sub>                            |                                                                                                   | $\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin\theta \cdot \cos\theta \cdot \cos\varphi$ |

## Classification et évolutions de propriétés

|                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |                   |
|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| <b>H</b><br>1,0   |                   |                   |                   |                   |                   |                   | <b>He</b><br>1,70 |
| <b>Li</b><br>1,30 | <b>Be</b><br>1,95 | <b>B</b><br>2,60  | <b>C</b><br>3,25  | <b>N</b><br>3,90  | <b>O</b><br>4,55  | <b>F</b><br>5,20  | <b>Ne</b><br>5,85 |
| <b>Na</b><br>2,20 | <b>Mg</b><br>2,85 | <b>Al</b><br>3,50 | <b>Si</b><br>4,15 | <b>P</b><br>4,80  | <b>S</b><br>5,45  | <b>Cl</b><br>6,10 | <b>Ar</b><br>6,75 |
| <b>K</b><br>2,20  | <b>Ca</b><br>2,85 | <b>Ga</b><br>5,00 | <b>Ge</b><br>5,65 | <b>As</b><br>6,30 | <b>Se</b><br>6,95 | <b>Br</b><br>7,60 | <b>Kr</b><br>8,25 |
| <b>Rb</b><br>2,20 | <b>Sr</b><br>2,85 | <b>In</b><br>5,00 | <b>Sn</b><br>5,65 | <b>Sb</b><br>6,30 | <b>Te</b><br>6,95 | <b>I</b><br>7,60  | <b>Xe</b><br>8,25 |

|                  |                  |                  |                  |                  |                  |                 |                  |
|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|-----------------|------------------|
| <b>H</b><br>53   |                  |                  |                  |                  |                  |                 | <b>He</b><br>31  |
| <b>Li</b><br>163 | <b>Be</b><br>109 | <b>B</b><br>82   | <b>C</b><br>65   | <b>N</b><br>55   | <b>O</b><br>47   | <b>F</b><br>41  | <b>Ne</b><br>36  |
| <b>Na</b><br>217 | <b>Mg</b><br>168 | <b>Al</b><br>137 | <b>Si</b><br>115 | <b>P</b><br>100  | <b>S</b><br>88   | <b>Cl</b><br>78 | <b>Ar</b><br>71  |
| <b>K</b><br>332  | <b>Ca</b><br>256 | <b>Ga</b><br>146 | <b>Ge</b><br>129 | <b>As</b><br>116 | <b>Se</b><br>105 | <b>Br</b><br>96 | <b>Kr</b><br>88  |
| <b>Rb</b><br>386 | <b>Sr</b><br>300 | <b>In</b><br>171 | <b>Sn</b><br>151 | <b>Sb</b><br>135 | <b>Te</b><br>122 | <b>I</b><br>112 | <b>Xe</b><br>103 |

Charge effective ressentie par les électrons de valence pour les atomes des cinq premières périodes

Rayons atomiques (pm)

|                  |                  |                  |                  |                  |                  |                   |                   |
|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------|-------------------|
| 1                |                  |                  |                  |                  |                  |                   | 18                |
| <b>H</b><br>13,6 | 2                | 13               | 14               | 15               | 16               | 17                | <b>He</b><br>24,6 |
| <b>Li</b><br>5,4 | <b>Be</b><br>9,3 | <b>B</b><br>8,3  | <b>C</b><br>11,3 | <b>N</b><br>14,5 | <b>O</b><br>13,6 | <b>F</b><br>17,4  | <b>Ne</b><br>21,6 |
| <b>Na</b><br>5,1 | <b>Mg</b><br>7,6 | <b>Al</b><br>6,0 | <b>Si</b><br>8,2 | <b>P</b><br>10,5 | <b>S</b><br>10,4 | <b>Cl</b><br>13,0 | <b>Ar</b><br>15,8 |
| <b>K</b><br>4,3  | <b>Ca</b><br>6,1 | <b>Ga</b><br>6,0 | <b>Ge</b><br>7,9 | <b>As</b><br>9,8 | <b>Se</b><br>9,8 | <b>Br</b><br>11,8 | <b>Kr</b><br>14,0 |
| <b>Rb</b><br>4,2 | <b>Sr</b><br>5,7 | <b>In</b><br>5,8 | <b>Sn</b><br>7,3 | <b>Sb</b><br>8,6 | <b>Te</b><br>9,0 | <b>I</b><br>10,5  | <b>Xe</b><br>12,1 |

|                   |                  |                   |                   |                   |                   |                   |                  |
|-------------------|------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|------------------|
| 1                 |                  |                   |                   |                   |                   |                   | 18               |
| <b>H</b><br>0,75  | 2                | 13                | 14                | 15                | 16                | 17                | <b>He</b><br>0,0 |
| <b>Li</b><br>0,62 | <b>Be</b><br>0,0 | <b>B</b><br>0,28  | <b>C</b><br>1,26  | <b>N</b><br>0,0   | <b>O</b><br>1,46  | <b>F</b><br>3,40  | <b>Ne</b><br>0,0 |
| <b>Na</b><br>0,55 | <b>Mg</b><br>0,0 | <b>Al</b><br>0,44 | <b>Si</b><br>1,39 | <b>P</b><br>0,75  | <b>S</b><br>2,08  | <b>Cl</b><br>3,62 | <b>Ar</b><br>0,0 |
| <b>K</b><br>0,50  | <b>Ca</b><br>0,0 | <b>Ga</b><br>0,30 | <b>Ge</b><br>1,23 | <b>As</b><br>0,81 | <b>Se</b><br>2,02 | <b>Br</b><br>3,37 | <b>Kr</b><br>0,0 |
| <b>Rb</b><br>0,49 | <b>Sr</b><br>0,0 | <b>In</b><br>0,30 | <b>Sn</b><br>1,11 | <b>Sb</b><br>1,07 | <b>Te</b><br>1,97 | <b>I</b><br>3,06  | <b>Xe</b><br>0,0 |

Potentils d'ionisation (eV)

Affinité électronique(eV)

|   |                  |                  |                  |                  |                 |                 |                  |
|---|------------------|------------------|------------------|------------------|-----------------|-----------------|------------------|
| a | <b>H</b><br>3,1  |                  |                  |                  |                 |                 |                  |
|   | <b>Li</b><br>1,3 | <b>Be</b><br>2,0 | <b>B</b><br>1,8  | <b>C</b><br>2,7  | <b>N</b><br>3,1 | <b>O</b><br>3,2 | <b>F</b><br>4,4  |
|   | <b>Na</b><br>1,2 | <b>Mg</b><br>1,6 | <b>Al</b><br>1,4 | <b>Si</b><br>2,0 | <b>P</b><br>2,4 | <b>S</b><br>2,7 | <b>Cl</b><br>3,5 |
| b | <b>H</b><br>2,2  |                  |                  |                  |                 |                 |                  |
|   | <b>Li</b><br>1,0 | <b>Be</b><br>1,5 | <b>B</b><br>2,0  | <b>C</b><br>2,5  | <b>N</b><br>3,1 | <b>O</b><br>3,5 | <b>F</b><br>4,1  |
|   | <b>Na</b><br>1,0 | <b>Mg</b><br>1,2 | <b>Al</b><br>1,5 | <b>Si</b><br>1,7 | <b>P</b><br>2,1 | <b>S</b><br>2,4 | <b>Cl</b><br>2,8 |
| c | <b>H</b><br>2,2  |                  |                  |                  |                 |                 |                  |
|   | <b>Li</b><br>1,0 | <b>Be</b><br>1,6 | <b>B</b><br>2,0  | <b>C</b><br>2,6  | <b>N</b><br>3,0 | <b>O</b><br>3,4 | <b>F</b><br>4,0  |
|   | <b>Na</b><br>0,9 | <b>Mg</b><br>1,3 | <b>Al</b><br>1,6 | <b>Si</b><br>1,9 | <b>P</b><br>2,2 | <b>S</b><br>2,6 | <b>Cl</b><br>3,2 |

Électronégativités : a)Mulliken b)Allred Rochov et c)Pauling

# Classification périodique des éléments

| 1                                      | 2                                        | 3                                        | 4                                          | 5                                       | 6                                       | 7                                         | 8                                      | 9                                       | 10                                        | 11                                       | 12                                       | 13                                    | 14                                     | 15                                        | 16                                       | 17                                        | 18                                       |
|----------------------------------------|------------------------------------------|------------------------------------------|--------------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------|----------------------------------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------|------------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------|
| 1<br><b>H</b><br>Hydrogène<br>1,008    |                                          |                                          |                                            |                                         |                                         |                                           |                                        |                                         |                                           |                                          |                                          |                                       |                                        |                                           |                                          |                                           | 2<br><b>He</b><br>Hélium<br>4,002602     |
| 3<br><b>Li</b><br>Lithium<br>6,94      | 4<br><b>Be</b><br>Béryllium<br>9,0121... |                                          |                                            |                                         |                                         |                                           |                                        |                                         |                                           |                                          |                                          |                                       |                                        |                                           |                                          |                                           |                                          |
| 11<br><b>Na</b><br>Sodium<br>22,989... | 12<br><b>Mg</b><br>Magnésium<br>24,305   |                                          |                                            |                                         |                                         |                                           |                                        |                                         |                                           |                                          |                                          |                                       |                                        |                                           |                                          |                                           |                                          |
| 19<br><b>K</b><br>Potassium<br>39,0983 | 20<br><b>Ca</b><br>Calcium<br>40,078     | 21<br><b>Sc</b><br>Scandium<br>44,955... | 22<br><b>Ti</b><br>Titane<br>47,867        | 23<br><b>V</b><br>Vanadium<br>50,9415   | 24<br><b>Cr</b><br>Chrome<br>51,9961    | 25<br><b>Mn</b><br>Manganèse<br>54,938... | 26<br><b>Fe</b><br>Fer<br>55,845       | 27<br><b>Co</b><br>Cobalt<br>58,933...  | 28<br><b>Ni</b><br>Nickel<br>58,6934      | 29<br><b>Cu</b><br>Cuivre<br>63,546      | 30<br><b>Zn</b><br>Zinc<br>65,38         | 31<br><b>Ga</b><br>Gallium<br>69,723  | 32<br><b>Ge</b><br>Germanium<br>72,63  | 33<br><b>As</b><br>Arsenic<br>74,921...   | 34<br><b>Se</b><br>Sélénium<br>78,971    | 35<br><b>Br</b><br>Brome<br>79,904        | 36<br><b>Kr</b><br>Krypton<br>83,798     |
| 37<br><b>Rb</b><br>Rubidium<br>85,4678 | 38<br><b>Sr</b><br>Strontium<br>87,62    | 39<br><b>Y</b><br>Yttrium<br>88,90584    | 40<br><b>Zr</b><br>Zirconium<br>91,224     | 41<br><b>Nb</b><br>Niobium<br>92,90537  | 42<br><b>Mo</b><br>Molybdène<br>95,95   | 43<br><b>Tc</b><br>Technétium<br>(98)     | 44<br><b>Ru</b><br>Ruthénium<br>101,07 | 45<br><b>Rh</b><br>Rhodium<br>102,90... | 46<br><b>Pd</b><br>Palladium<br>106,42    | 47<br><b>Ag</b><br>Argent<br>107,8682    | 48<br><b>Cd</b><br>Cadmium<br>112,414    | 49<br><b>In</b><br>Indium<br>114,818  | 50<br><b>Sn</b><br>Étain<br>118,710    | 51<br><b>Sb</b><br>Antimoine<br>121,760   | 52<br><b>Te</b><br>Tellure<br>127,60     | 53<br><b>I</b><br>Iode<br>126,90...       | 54<br><b>Xe</b><br>Xénon<br>131,293      |
| 55<br><b>Cs</b><br>Césium<br>132,90... | 56<br><b>Ba</b><br>Baryum<br>137,327     | 57-71                                    | 72<br><b>Hf</b><br>Hafnium<br>178,49       | 73<br><b>Ta</b><br>Tantale<br>180,94... | 74<br><b>W</b><br>Tungstène<br>183,84   | 75<br><b>Re</b><br>Rhenium<br>186,207     | 76<br><b>Os</b><br>Osmium<br>190,23    | 77<br><b>Ir</b><br>Iridium<br>192,217   | 78<br><b>Pt</b><br>Platine<br>195,084     | 79<br><b>Au</b><br>Or<br>196,96...       | 80<br><b>Hg</b><br>Mercure<br>200,59     | 81<br><b>Tl</b><br>Thallium<br>204,38 | 82<br><b>Pb</b><br>Plomb<br>207,2      | 83<br><b>Bi</b><br>Bismuth<br>208,98...   | 84<br><b>Po</b><br>Polonium<br>(209)     | 85<br><b>At</b><br>Astate<br>(210)        | 86<br><b>Rn</b><br>Radon<br>(222)        |
| 87<br><b>Fr</b><br>Francium<br>(223)   | 88<br><b>Ra</b><br>Radium<br>(226)       | 89-103                                   | 104<br><b>Rf</b><br>Rutherfordium<br>(261) | 105<br><b>Db</b><br>Dubnium<br>(268)    | 106<br><b>Sg</b><br>Seaborgium<br>(271) | 107<br><b>Bh</b><br>Bohrium<br>(272)      | 108<br><b>Hs</b><br>Hassium<br>(270)   | 109<br><b>Mt</b><br>Meitnerium<br>(276) | 110<br><b>Ds</b><br>Darmstadtium<br>(281) | 111<br><b>Rg</b><br>Roentgenium<br>(280) | 112<br><b>Cn</b><br>Copernicium<br>(285) | 113<br><b>Uut</b><br>Ununium<br>(284) | 114<br><b>Fl</b><br>Flerovium<br>(289) | 115<br><b>Uup</b><br>Ununpentium<br>(288) | 116<br><b>Lv</b><br>Livermorium<br>(293) | 117<br><b>Uus</b><br>Ununseptium<br>(294) | 118<br><b>Uuo</b><br>Ununoctium<br>(294) |

Les masses atomiques entre parenthèses sont celles de l'isotope le plus stable ou le plus commun.

Tableau Périodique Copyright du design et interface © 1997 Michael Dayah. Plable.com Dernière mise à jour 22 mai 2015

|                                          |                                        |                                              |                                        |                                        |                                       |                                        |                                         |                                         |                                          |                                         |                                      |                                          |                                         |                                         |
|------------------------------------------|----------------------------------------|----------------------------------------------|----------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|------------------------------------------|-----------------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|
| 57<br><b>La</b><br>Lanthane<br>138,90... | 58<br><b>Ce</b><br>Cérium<br>140,116   | 59<br><b>Pr</b><br>Praseodyme<br>140,90...   | 60<br><b>Nd</b><br>Néodyme<br>144,242  | 61<br><b>Pm</b><br>Prométhium<br>(145) | 62<br><b>Sm</b><br>Samarium<br>150,36 | 63<br><b>Eu</b><br>Europium<br>151,964 | 64<br><b>Gd</b><br>Gadolinium<br>157,25 | 65<br><b>Tb</b><br>Terbium<br>158,92... | 66<br><b>Dy</b><br>Dysprosium<br>162,500 | 67<br><b>Ho</b><br>Holmium<br>164,93... | 68<br><b>Er</b><br>Erbium<br>167,259 | 69<br><b>Tm</b><br>Thulium<br>168,93...  | 70<br><b>Yb</b><br>Ytterbium<br>173,054 | 71<br><b>Lu</b><br>Lutécium<br>174,9668 |
| 89<br><b>Ac</b><br>Actinium<br>(227)     | 90<br><b>Th</b><br>Thorium<br>232,0377 | 91<br><b>Pa</b><br>Protactinium<br>231,03... | 92<br><b>U</b><br>Uranium<br>238,02... | 93<br><b>Np</b><br>Neptunium<br>(237)  | 94<br><b>Pu</b><br>Plutonium<br>(244) | 95<br><b>Am</b><br>Américium<br>(243)  | 96<br><b>Cm</b><br>Curium<br>(247)      | 97<br><b>Bk</b><br>Berkélium<br>(247)   | 98<br><b>Cf</b><br>Californium<br>(251)  | 99<br><b>Es</b><br>Einsteinium<br>(252) | 100<br><b>Fm</b><br>Fermium<br>(257) | 101<br><b>Md</b><br>Mendélévium<br>(258) | 102<br><b>No</b><br>Nobélium<br>(259)   | 103<br><b>Lr</b><br>Lawrencium<br>(262) |