Classification Périodique des éléments à partir du modèle quantique de l’atome

Evolution de quelques propriétés atomiques

EI: 15 ème colonne

Plan:

Remarques et questions: Pourquoi il y a des blocs dans le tableau ? Quelle est l'idée de bases du tableau périodique?

On a repéré empiriquement que beaucoup d’éléments présentent des propriétés similaires , certains ont même une structure électronique de valence similaire , or les propriétés particulières des éléments sont dictées par la structure électronique de valence. On a décidé de les classer en fonction du nombre d’électrons de valences pour en déduire des propriétés générales sur les éléments appartenant au même bloc et à la même colonne.

Il faut absolument faire ressortir le pourquoi de la classification périodique.

On part des orbitales atomiques directement , on le place en pré requis. On part de l’atome polyélectronique puis on arrive au tableau.

Les règles de remplissages ne sont pas empiriques , elles sont exacts pour l’atome hydrogénoïde (on nomme aussi: principe Aufbau).

On prend par exemple 2 halogènes , on montre qu’ils ont une structure équivalente et des propriétés équivalentes , on va donc les regrouper ensemble. On arrive à la construction des différents blocs.

On fait ensuite quelques propriétés classiques.

Ouverture sur les nouvelles classifications dite étendues est intéressante, les électrons f sont dans le tableau. Souvent ils sont en dessous car ça prend de la place mais en vérité c’est plus pédagogique qu’ils soient insérés dans le tableau.

Sur l’évolution des propriétés il faut présenter les propriétés classiques comme l’évolution du rayon atomique. Le rayon atomique est défini de manière empirique ou on peut le définir comme le maximum de densité de la dernière couche. Évolution de l’électronégativité dans une ligne et une colonne. Et ensuite énergie d’ionisation ou affinité électronique.

Montrer que le tableau sert à rationaliser et à prédire des propriétés à partir de la structure électronique. La colonne 15 est intéressante car en haut on à des structures moléculaires et en bas on retrouve les métaux. Il y a transition entre les métaux et non métaux au sein de la colonne.

Le repère barycentrique c’est pas Born Oppenheimer, dans le repère barycentrique Ecnoyau est non nulle.

l est le moment cinétique , il y a quantification du moment cinétique qui entraîne l’apparition des ml. s le moment magnétique de spin vient de Dirac et pas de Pauli, il est constant pour un électron. Nous c’est ms qui nous intéresse , la projection du moment magnétique de spin. Pauli apparaît après le spin.

La fonction d’onde décrit l’ensemble des électrons du système , toute l’information est contenue dans la fonction d’onde et ce qui a surtout un sens physique c’est le carré du module de la fonction d’onde.

Dessiner l’allure des R(r)n en fonction de n et donner la structure en couche d'oignons. Pour Slater on prend uniquement les électrons de valence. Les électrons de coeurs ont un blindage plus important.

La corrélation électronique est: énergie du système avec une approximation de champ moyen - énergie système.

Dans l’approximation de champ moyen , on donne un poids trop important aux petites distances.

L’affinité électronique est définie théoriquement par rapport à U et non par rapport à H.

Dans une colonne il y a 2 effets , on augmente Z et le rayon augmente. L’énergie d’ionisation diminue , on remplit des orbitales de plus en plus hautes en énergie en descendant dans une colonne. L’énergie d’ionisation correspond souvent à l’énergie d'un électron dans l’orbitale la plus haute occupée.

Cela fonctionne parce que dans le théorème de Koopman il y a 2 effets qui se compensent. Lorsque l’on retire un électron, le système se réorganise , l’énergie de corrélation diminue donc l’énergie avec le réel diminue aussi. Avec l’affinité ça marche pas.