

**Modèle de Bohr 1913**

Noyau chargé positivement avec des électrons chargés négativement qui gravitent autour du noyau. Les électrons se répartissent selon des orbitales circulaires, il se décrit donc par un seul paramètre, la distance qui sépare les électrons du noyau : C'est le niveau d'énergie.

**Paramagnétique** dans le sens du champ

**Diamagnétique** dans le sens opposé du champ

Définition du modèle : un modèle n'est pas forcément juste, c'est un outil pour développer la connaissance.

**Modèle de Sommerfeld 1917**

Les orbitales ne sont pas circulaires mais elliptiques donc deux nouveaux paramètres pour les décrire.

Pas de questions sur les dates

L'**électron** est une particule et **AUSSI** une onde électromagnétique.

L'onde électromagnétique est stationnaire = onde dont les points passent en même temps par leur position d'équilibre et leur position extrême. Tous les points vibrent en phase et tous les points n'ont pas la même amplitude, elle varie entre  $A_{min}$  et  $A_{max}$ .

**Principe d'incertitude d'Heisenberg**

$$\hbar = h/2\pi$$

Masse de l'électron =  $9,11 \times 10^{-31}$  kg

**Équation de Schrödinger**

Associe une fonction d'onde à une notion d'énergie. Dans l'équation retenir Z et r (distance entre noyau et électron)

$$r = 5,29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

Cette équation n'a aujourd'hui de solution que pour l'hydrogène, pour les autres on se contente d'une solution approchée.

**Notion d'orbitales**

1 orbitale est représentée par une case quantique ou se trouvent deux électrons maximum (c'est un modèle).

**Principe de Pauli** : deux électrons d'un même atome ne peuvent pas avoir les mêmes nombres quantiques

Il y a deux types de géométries : sphérique (s) et elliptique (p, d).

Elliptique = anisotropie = un seul point où la réaction va se passer.

Sphérique = isotrope = tous les points sont équivalents en termes de réactivité

Les électrons ne se repoussent pas dans une orbitale, ils sont **indiscernables**.

La valeur de  $l$  définit s, p, d, f :  $l=0$  orbitale s ;  $l=1$  orbitale p ;  $l=2$  orbitale d ;  $l=3$  orbitale f

**Spin** = orientation dans de l'électron dans un champ magnétique  $+1/2$  vers le haut  $-1/2$  vers le bas.

Dans une même case quantique, les deux électrons ont leur trois premiers nombres quantiques identiques mais ils se différencient par le nombre quantique de spin (une flèche en haut, une flèche en bas) suivant le principe de Pauli.

#### **Orbitale s :**

1 seule car  $l=0$   $m=0$

#### **Orbitales p :**

3 car  $l=1$   $m$  à trois valeurs ( $2l + 1$ ) de  $-l$  à  $+l$  pas de 1

Symétrie de révolution

#### **Orbitales d :**

5 car  $l=2$   $m=5$

Sur un plan énergétique, contrairement aux orbitales de type p, elles peuvent ne pas être de même énergie et se séparer en deux niveaux. C'est une **levée de dégénérescence** exclusivement induite par un champ magnétique ou un champ électrique.

### **Orbitales moléculaires**

Dans la nature deux orbitales atomiques vont s'associer pour former une molécule. Cela ne se fait que si il y a un gain d'énergie. Si A et B se lient **spontanément** c'est que l'énergie de AB est plus faible que l'énergie de A et B donc il y a un gain d'énergie.

#### **H<sub>2</sub>**

Deux atomes Ha et Hb, les deux niveaux  $1s$  sont de même énergie. Gain d'énergie :  $1s_a + 1s_b$  supérieure à l'orbitale liante.

**Hund** : Lorsque plusieurs orbitales de même énergie sont disponibles, les électrons en occupent le plus grand nombre

**Ordre de liaison** = (nombre d'électrons liants - nombre d'électrons sur antiliantes)/2

Si il est égal à 0 la molécule n'existe pas.

#### **Molécules diatomiques**

Deux types de symétrie peuvent être conservées : axiale ou par rapport au plan.

Le proton  $H^+$  est plus ou moins labile donc plus ou moins capable de passer en forme de proton.

Plus la différence d'énergie entre deux atomes est grande, plus l'hydrogène sera labile et plus l'acide est fort. Exemple : HF plus fort que HCl.

**Hybridation**

Les angles vont être différents selon les molécules, ils ne font pas tous 90 ou 180 degrés. On parle d'hybridation.

Hybridation  $sp$  : 180 degrés, linéaire

Hybridation  $sp^2$  : 120 degrés, plane

Hybridation  $sp^3$  : 109,28 degrés, tétraédrique