

LC1 : Le modèle quantique de l'atome

Élément imposé : Modèle de Slater, affinité, énergie d'ionisation

Biblio : Cours M.Vérot L3 Orbitaire, Jean & Volatron 1, Schott, HP PCSI, Fosset PC

Niveau : L2

Prérequis : Structure de l'atome, Mécanique quantique: Notion de fonction d'onde, équation de Schrodinger, description quantique de l'électron.

Intro pédagogique :

Difficulté : différencier cas exact de l'hydrogène et approximations dans les autres cas.

Introduction

Rappel équation de Schrodinger + def fonction d'onde Jean p29, Fosset PC p 422

I. L'atome d'hydrogène

A. Fonction d'onde électronique

Hamiltonien mono-électronique : énergie cinétique du noyau + énergie cinétique des électrons + interaction coulombienne Cours M. Vérot

Simplification : Référentiel du noyau \rightarrow annule le 1er terme. Résolution sous forme de fonction d'onde.

Résolution exacte possible \rightarrow Notion d'OA : Partie radiale + harmonique sphérique Fosset PC p428-431

\rightarrow lien avec les nombres quantiques Cours M.Vérot

Nombre quantique \rightarrow Fosset PC p429, Schott p 140, HP p 266

Niveau d'énergie : Série de Balmer, Lyman ... Jean p34, diagramme Schott p141

B. Représentation des orbitales atomiques

Niveau d'énergie : \rightarrow Diagramme énergétique de l'hydrogène Schott p141

Représentation des orbitales : Densités radiale + Distribution angulaire et représentation simplifiée Schéma + graph cours M.Vérot, Jean p37, HP p268 détaillé

Représentation schématique des OA en fonction des sous couches Schott p 141

C. Fonction d'onde des ions hydrogénoïdes

Niveau d'énergie Jean p44, Hpp267 et p277

Fonctions d'ondes de hydrogénoïdes : Fosset PC p 434. Représentation partie radiale, densité radiale, rayon orbitaire

Représentation des orbitales spd

II. Atomes poly-électroniques

A. Orbitale atomique

Obligation d'approximation : Approximation orbitaire/monoélectronique Cours M.Vérot, Fosset PC p 444, Jean p45

Énergie des OA Jean p47, HP p 282 Diagramme énergétique Schott p141-142

B. Configuration électronique d'un atome

Remplissage électronique : principe de Pauli, règle de Klechkowski + exception, règle de Hund Cours M.Vérot, Fosset PC p 449, Jean p47, Schott p 143, HP p283

Spin de l'électron : HP p279

Électron de cœur/valence

C. Modèle de Slater

Notion d'écrantage et de champ moyen : charge effective, constante d'écran, table de Slater. Cours M.Vérot. Jean p56, Fosset PC p 445, Schéma Schott p151, Tableau charge effective Hp p282

Rayon atomique Fosset PC p447, Jean p 57, HP p 286

D. Lien avec la classification périodique Cours M.Vérot

Charge effective, Énergie d'ionisation, Électronégativité, Rayon atomique

Cf leçon Classification périodique

Ouverture : autres propriétés + réactivité