

Partie 3 Chapitre 1 Le Modèle G de l'atome

I / Th. quantiq de l'At. d'H → nécessité de la description Ondulatoire

→ dualité Ond/Partic, $\lambda = \frac{h}{p}$ confirmé par diffraction e^- .

⇒ ① On peut décrire l' e^- comme une onde ←

puis Heisenberg $|\Delta x \Delta p_x| \geq \frac{h}{2}$ ⇒ ② OND OIT (∅ motion trajectoires).

II / La fct d'onde

→ sans phys. que, densité de charge q

e^- décrit / $\Psi(x, y, z, t)$ et $\Psi = \text{Ampli onde}$ de e^-

Ψ^2 est la densité de probabilité de présence de l' e^- en $M(x, y, z)$

dP la proba élémentaire: $dP = \Psi^2 d\tau$ appliquée au volume $d\tau$.

P_r pour un volume V $P_r = \iiint_V \Psi^2 d\tau$ et on appelle densité de charge $\rho = -e\Psi^2$

P_r sur tout l'espace ⇒ $\iiint_{\text{espace}} \Psi^2 d\tau = 1$ maj associée à la fct d'onde Ψ .

→ Eq de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \text{ La recherche d'at trouve les } (E, \Psi)$$

opérateur hamiltonien

Comme \hat{H} linéaire, Ψ et $-\Psi$ solutions pour le même E . (on connaît Ψ) (au signe près)

Qd plusieurs Ψ correspondent à un même E , on dit que le niveau d'energ est dégénéré.

III Les résultats pour H et hydrogénéoïdes → $\tau = t$ onde et maj.

Les $\{f\}$ à 1 e sont solubles analytiquement. Les fonctions d'ondes sont appelées OA.

On montre que le problème est à variables séparables $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$

et les mbres quantiques n, l, m s'introduisent par les conditions limites.

Rappel $n \in \mathbb{N}, +\infty$ $l \in [0, n-1]$ $m \in [-l, l]$

△ Hydrogénéoïdes

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me e^2} \xrightarrow{\text{hydrogénéoïdes}} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me q_1 q_2} = \frac{a_0}{Z}$$

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} \xrightarrow{\text{hydrogénéoïdes}} -\frac{E_0 Z^2}{n^2}$$

→ Représentation des OA.

④ Choix de normalisation $\iiint_V \Psi^2 d\tau = 1 = \underbrace{\int_0^\infty R^2(r) r^2 dr}_{=1} \cdot \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y(\theta, \phi)^2 \sin\theta d\theta d\phi}_{=1}$

④ Densité radiale de proba de présence.

On peut montrer que $dP_n = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} dP = R^2(r) r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y^2 \sin\theta d\theta d\phi = R^2(r) r^2 dr = D_n dr$

⑤ $D_n = R^2 r^2$

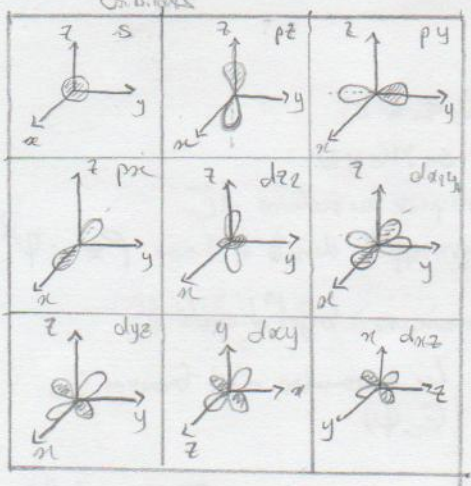
④ direction des rayons atomiques $P = \text{valeur de } n \text{ pour } D_n \text{ max.}$

Ex $P_{1s} = a_0$ — variable pour hyd $\rightarrow a_0' = \frac{a_0}{Z} \Rightarrow P_{1s \text{ hyd}} = \frac{a_0}{Z}$
 (Rayons des OA: $P_{1s} < P_{2s} < P_{3s} < P_{4s} \dots$ Σ nombre de couche e^-
 \rightarrow Représentation d'une OA. OA = $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$

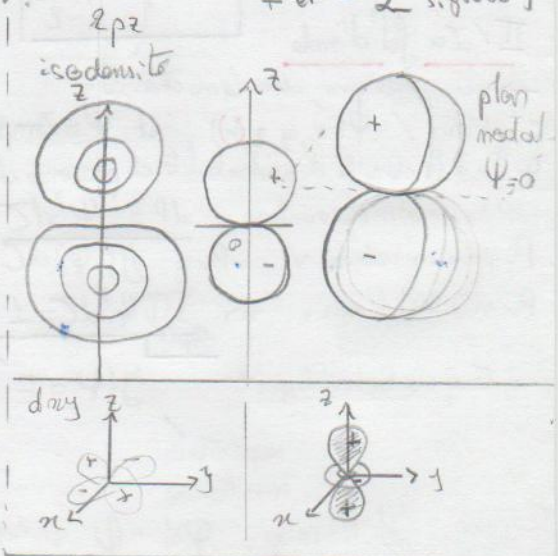
⊕ Etude $R(r)$ et $Y(\theta, \varphi)$ séparées.

④ Rep. conventionnelle \rightarrow Document 7.
 on fixe n , on trace directeur (θ, φ) le segment $Y(\theta, \varphi)$
 + et - Σ signe de ψ

Orbitales



à compléter.



IV Les atomes poly e

\rightarrow 1 ES : $\exists \psi = E \psi$. Dans \exists l'ensemble e^- / ray $\frac{4 \times 9 \times 9}{148.7}$

Mais Pb pour atome poly e : plus et : $e^- \times 2e^- \rightarrow \frac{e_1 e_2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} + \frac{e_2 e_1}{4\pi\epsilon_0 r_{21}} - \frac{e_1 e_2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \rightarrow$ empêche résolution analytq de ES.

④ On ne peut plus résoudre ES.

\rightarrow Approximation orb. tab / effet d'écran.

\rightarrow considère mts e^- sont ind. permutables

les e^- se superposent \rightarrow effet d'écran.

$Z^* = Z - \sigma$

\rightarrow OA de Slater

points angulaires de H.
 points radiaux simplifiés

[Complément : calculs de Z^* , voir fin]

Emoi de OAS \rightarrow ϕ formules explicites $\rightarrow E$ et m, l
 (dégénérescence possible)

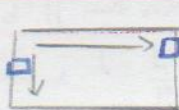
\rightarrow Config e^- d'un élément : OA $\leftrightarrow (m, l, mp)$ $e^- \leftrightarrow +ms$ (Pauli $\Rightarrow 2e^- / OA$)

④ Kleshkauskay / Hund

e^- de $\uparrow \neq e^-$ de \downarrow et passage à e^-
 \rightarrow caract. e^- à m, l, σ, s, d .

Application à l'étude de quelques caract. de l'atome polye⁻

→ Variation de Z^*



Z^* ↗

-) Sur ligne = gain $m \pm p$ et $1e^-$ de plus → $\sigma \leftarrow 0,35$
-) Discontinuité au changt de ligne

→ Variation du rayon atomique

$$r = \frac{m^2 a_0}{Z^*}$$

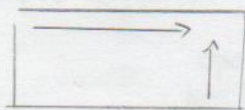


$r_{at} =$ rayon de l'O de valence
 r_{sat} sur une ligne $m = cte$
 et $Z^* \nearrow$ don $r \searrow$

→ m_{ij} CA valence et χ_i

m_{ij} CA d'atome ⊕ faible que interaction e^- moyen, est forte car D Z^* grand r petit

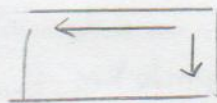
et m_{ij} CA corrélate à variation de χ : ⊕ élément électro⊖, ⊖ ses CA sont bases en énergie $\epsilon(2p(a)) < \epsilon(2p(c))$.



χ ↗

→ r_{at} et α → aptitude à vainc son nuage e^- se déformer sous l'action d'un champ $e^- E$.

dip $\vec{p} = \otimes \vec{E}$ → réactivité (C-I > C-Cl car ⊕ polarisable bien que ⊖ polarisé)



α ↗