

# LC 1: Du modèle quantique de l'atome aux propriétés atomiques

## Element imposé

Règles de Slater

## Introduction pédagogique

Niveau L2

### Prérequis :

- Force électrostatique (L1)
- Electronégativité (L1)
- Fonction d'onde (L1)
- Outils mathématiques. Algèbre linéaire (L1/L2)
- Configuration électronique, électrons de coeur ou valence (L1)
- Description quantique de l'atome hydrogénoïde (L2) (équation de Shro, Hamiltonien, quantification des énergies, découplage partie radicale/angulaire)

### Difficultés :

- Comprendre l'intérêt des approximations effectuées
- Ne pas rester fixés sur le côté théorique du chapitre
- 

### Biblio :

- Fosset PC/PC\*
- Jean et Volatron T1

### Activités liées

- TD : Calcul de charge effective, d'énergie et de rayons à l'aide de Slater
- activité informatique : à la fin de la séquence de chimie orbitale, prise en main d'Orbimol et Huckel.

**Objectif** Réussir à faire le lien entre le modèle quantique de l'atome et l'évolution de certaines propriétés au sein du tableau périodique.

# Introduction

## 1 Description quantique de l'atome polyelectronique

### 1.1 Equation et approximation

Noyau de charge  $Ze$  autour duquel gravitent 2 électrons Equation de Schro puis approximation BO puis approx monoélectronique (orbitale)

Calculs voir Annabelle

### 1.2 Configuration électronique

$\psi = R_{nl} Y_{lm}$  Nombres quantiques + signification physique Energies : depend de  $n$  (atome hydrogénoide), de  $n$  et  $l$  pour polyelec Pour  $l$  fixe  $E$  augmente quand  $n$  augmente et pour  $n$  fixe  $E$  augmente quand  $l$  augmente. Règles de remplissage elec.

## 2 Modèle de Slater

### 2.1 Principe de l'approximation

Explication avec projection Fosset P446 Règles de Slater projetées

Exemple du phosphore, décompte elec jusqu'à la charge effective de chaque couche.

### 2.2 Evolution de quelques propriétés au sein du tableau périodique

Energie

Rayon atomique avec exemple du phosphore

Electronégativité (trois échelles) avec expression de Arref Rochow

## 3 Conclusion

## 4 Question

- Comment définir une fonction d'onde ? Propriétés ? Fonction de plusieurs variables (complexe), solution de l'équation de Schro, normalisable, son carré définit la probabilité de présence.
- Qui a formulé la dualité onde corpuscule ? De Broglie
- OM produit ? Non, produit de Hartree
- Signification de  $n, l, m$  ?  $n$ =evolution en taille,  $l$ =forme des orbitales,  $m$ =projection du moment angulaire orbitale (orientation de l'orbitale dans l'espace)
- Principe en plus ? Stabilité max Définition du rayon de covalence ? Moitié de A-A
- Comment déterminer le rayon de covalence ? DRX
- Formule pour l'énergie ?
- Pourquoi energie de Slater en TD ? manque de temps, electronégativité importante car on voit pas beaucoup la formule
- Choix de pas donner la formule ? bof
- Limites du modèle dans un autre cours ou en TD ? TD
- Conception de cet exercice ? Passer de H à He
- Est ce qu'on calcul toujours l'énergie avec Slater ? Non calculs théoriques, HF, DFT
- Quelles compétences exigibles ? Analyser, s'approprier
- Chimie orbitale dans les programmes ? Tout en PC
- Différence didactique/ pédagogique ? Didactique = quoi apprendre, pédagogique = comment apprendre.
- Comment faire un TD ? exercices, quizz, projets,...

## 5 Retour