

Leçon présentée par Lise BOUTENÈGRE  
Lundi 24 janvier 2022

---

## Correction de la Leçon de Chimie :

### *Du modèle quantique de l'atome aux propriétés atomiques* Éléments imposés : Règles de Slater

---

#### ★ Plan présenté :

#### I. Description quantique de l'atome polyélectronique

*I.A. Equations et approximations*

*I.B. Configuration électronique des atomes*

#### II. Modèle de Slater

*I.A. Principe de l'approximation*

*I.B. Evolution de quelques propriétés au sein du tableau périodique*

Niveau : L2

Prérequis : Force électrostatique (L1) - Électronégativité (L1) - Fonction d'onde (L1) - Outils maths, algèbre linéaire (L1/L2) - Configuration électronique, électrons de cœur ou de valence (L1) - Description quantique de l'atome hydrogénoïde (L2 : équation de Schrödinger et résolution, hamiltonien, quantification des énergies, découplage entre parties radiale et angulaire)

Difficultés : Comprendre l'intérêt des approximations effectuées - Ne pas rester fixé sur le côté théorique du chapitre.

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

Applications : EN TD, calcul de la charge effective, d'énergie et de rayon à l'aide du modèle de Slater. En activité informatique, à la fin de la séquence de chimie orbitale, prise en main d'Orbimol et d'HuLis.

Biblio : Fosset PC/PC\* - Jean et Volatron (tome I)

#### ★ Commentaires généraux sur la prestation

Lise a présenté une excellente leçon, de manière soignée et très pédagogique. Sa tenue de tableau était irréprochable, le plan très bien articulé, on pourrait juste donner les deux conseils suivants pour améliorer encore plus les choses :

- Sur la forme : ne pas hésiter à **écrire toutes les définitions** et la signification physique des choses importantes au tableau (par exemple écrire en toute lettre la définition de la charge effective, au cœur de la leçon). Cela permet d'éviter d'avoir un tableau juste rempli d'équations, et

permet de mettre l'accent sur les choses/concepts plus qu'essentiels à retenir.  
Enfin, faites bien attention à **écrire assez gros au tableau**, surtout dans les équations.

- **Sur le fond** : Je pense qu'il est plus qu'important de présenter le **calcul d'énergie d'un atome polyélectronique** à l'aide du modèle de Slater. C'est l'application la plus importante et sans doute la formule à retenir pour les élèves à ce sujet, et en plus cela permet d'**aborder les limites du modèle** (par exemple, calculer l'énergie de l'oxygène, montrer qu'elle diverge avec la valeur attendue du fait de Z déjà trop important). Lise avait en effet précisé que cette application serait traitée en TD, mais même si vous prenez ce parti, il faut présenter la formule que l'étudiant devra utiliser en TD dans votre cours !

## ★ Retour détaillé sur le contenu de la leçon et questions associées

**Introduction pédagogique (chrono : 3'30)** : Lise contextualise sa leçon dans une progression pédagogique annuelle, parle du thème de la leçon abordé ici, des prérequis et des difficultés que les élèves rencontreront. Elle insiste sur le fait qu'elle donnera un **maximum d'exemples** pour pallier à cela, et c'est effectivement ce qu'il faut faire dans ce genre de leçon, ne pas hésiter à donner une multitude d'exemples et d'applications pour contrer l'aspect très théorique du thème et **contextualiser les choses**.

### Introduction de la leçon :

Lise rappelle ce qu'est un hydrogénoïde et présente le cas polyélectronique.

*Remarque correcteur* : On pourrait introduire dès à présent que la description de l'atome se complique à cause des interactions interélectroniques.

## I. Description quantique de l'atome polyélectronique :

### I.A. Equations et approximations :

Lise a présenté dans cette partie l'équation de Schrödinger, l'expression de l'hamiltonien polyélectronique, l'approximation de Born-Oppenheimer, l'approximation monoélectronique...

*Remarque correcteur* : Attention, la fonction d'onde polyélectronique a été présentée comme un produit de Hartree des orbitales atomiques, soyez conscient qu'on ne vérifie ainsi pas le critère d'antisymétrie à respecter pour une fonction d'onde et qu'il faudrait plutôt utiliser un **déterminant de Slater** à la place.

### I.B. Configuration électronique des atomes (chrono : 12'30) :

Lise a donné ici l'expression des orbitales atomiques, en rappelant les relations entre nombres quantiques, énergies des orbitales, etc. Leur forme est donnée sur slide vidéoprojetée.

*Remarque correcteur* : Même si certaines notions sont placées en pré-requis, il est toujours bon de **les rappeler au moins à l'oral** : c'est le cas ici avec les nombres quantiques, où on aurait pu donner leur nom et leur "signification physique", ou du moins ce en quoi ils influencent la forme et l'orientation des OA. Un slides ici aurait été bienvenu à ce sujet.

Les règles de remplissage électronique sont rappelées. Lise dresse un **bilan à la fin de la partie**, ce qui est très appréciable et permet de bien mettre en valeur les notions les plus importantes abordées dedans.

*Remarque correcteur* : Faire en effet un **bilan à chaque fin de partie** est extrêmement appréciable et valorisé. En outre, on notera que Lise a à chaque fois **cité ses sources** correctement dans les slides projetées, n'oubliez pas de le faire car c'est très important en effet.

## II. Modèle de Slater :

### II.A. Principe de l'approximation (chrono : 20'20) :

Lise a ici présenté les approximations derrière le modèle de Slater, la définition de la charge effective et le calcul de constantes d'écrantage sur l'exemple du phosphore.

Remarque correcteur : Il ne faut pas hésiter à **écrire en toute lettre les définitions importantes**, comme Lise aurait pu le faire ici sur la charge effective, en plus de juste donner son expression mathématique. De plus, il ne faut également pas hésiter à **détailler systématiquement les calculs réalisés et qui servent d'exemples**, ici dans le cas des constantes d'écran pour des électrons des couches  $1s$ ,  $2s/2p$  et  $3s$ . C'est important de le faire à chaque fois, **pour que les élèves assimilent bien la méthodologie à adopter**, et non pas leur donner directement le résultat par exemple pour  $\sigma_{3s}$  sous prétexte que c'est la même démarche que pour  $\sigma_{2s,2p}$ . Enfin, **garder un exemple qui serve de fil conducteur** comme l'a fait Lise avec le phosphore est très bien.

### II.B. Evolution de quelques propriétés au sein du tableau périodique (chrono : 28'49) :

Lise a choisi de présenter ici la déduction du rayon atomique d'un atome à partir de Slater (toujours sur l'exemple du phosphore), puis a présenté les trois définitions de l'électronégativité (et notamment celle d'Allred-Rochow), en justifiant son évolution au sein de la classification avec la charge effective.

Remarque correcteur : Faire des **schémas récapitulatifs pour décrire l'évolution** du rayon atomique et de l'électronégativité au sein du tableau est très bien, veillez juste à prendre soin de bien les compléter et de les formaliser un peu plus, en esquissant par exemple la forme du tableau, et non pas juste des flèches disposées au milieu du reste sur le tableau.

Une mise en lien avec **l'aspect expérimental** aurait pu être réalisé (détermination expérimentale des rayons atomiques cf DRX et cie).

Lise termine la partie en précisant que d'autres grandeurs comme l'affinité électronique ou l'énergie des atomes peut être estimée via Slater et que cela fera l'objet d'un TD.

Remarque correcteur : Pour moi le **calcul d'énergies atomique et d'ionisation est le plus important avec Slater** ! Il faut le mettre dans votre leçon, en donnant un exemple par exemple sur O ou P. C'est ce qu'on va demander de savoir-faire en premier lieu aux étudiants, et même si on ne veut pas le détailler ici, il faut au moins donner la formule à utiliser, au tableau ou sur vos slides.

J'aurais préféré voir traiter dans l'ordre : calcul d'énergie, de rayon atomique et électronégativité, quitte à s'étendre un peu moins sur cette dernière ou à recourir à des slides pour expliciter les calculs de rayons atomique et d'électronégativité.

En outre, cela permet de pointer du doigt **les limites du modèle** (divergence des résultats quand  $Z$  augmente cf interactions interélectroniques), seul point qui manquait à la leçon et qu'il fallait aborder pour traiter complètement cet élément imposé.

**Conclusion (chrono : 39') :** Lise reprend les principaux résultats. On aurait pu ouvrir sur les limites du modèle de Slater à ce moment-là.

**Quelques questions posées :**Questions scientifiques :

- Quelles sont les propriétés mathématiques que doit satisfaire une fonction d'onde ?
- Trois règles/principes de remplissage électroniques ont été présentés : ne pourrait-on pas en ajouter un quatrième ? (principe de stabilité maximale)
- Quel est le nom et la signification physique des nombres quantiques ?
- Pourquoi écrire un produit de Hartree et non pas un déterminant de Slater comme on voit souvent ?
- Quelle est la date où Slater a proposé son modèle ?
- Quelles autres manières existe-t-il pour calculer une énergie atomique ? (cf Hartree Fock, DFT)
- Le rayon calculé du phosphore est de 99 pm contre 100 pm dans le document vidéoprojeté : pourquoi cette différence ? Comment déterminer expérimentalement un rayon atomique ?
- Quelle influence a chaque nombre quantique sur l'orbitale atomique qu'il décrit ? (cf  $l$  = forme,  $m$  = orientation, etc)
- Pourquoi avoir pris le rayon de Bohr environ égal à 53 pm alors que sa valeur est parfaitement définie ?
- Quelles sont les limites du modèle de Slater ? Et pourquoi ?

Questions didactiques et pédagogiques :

- Pourquoi avoir choisi de ne pas présenter le calcul d'énergie atomique avec le modèle de Slater et de le repousser en TD ?
- Vous proposez de réaliser un TD par la suite, quel en serait son contenu ? Comment vous prendriez-vous pour le donner ? Sous quel format ? Avec quelles activités ou supports pédagogiques ?
- Même question pour l'activité informatique.
- Si vous proposez de l'analyse documentaire, quels sont les compétences du BO à faire travailler à vos élèves ? (voir BO et les termes précis du type : s'approprier, analyser/raisonner, réaliser, valider, communiquer etc.)
- Quelle différence pour vous entre pédagogie et didactique ? (Didactique = la théorie pour donner accès à la connaissance et qui concerne le contenu que l'on doit enseigner, Pédagogie = comment on met en œuvre la didactique, son application pratique en fonction du public visé.)
- Quelle est la part de chimie orbitale dans les nouveaux programmes des classes CPGE 2021, et notamment PCSI 2021 ?

Bon courage à vous tous. N'hésitez pas à revenir vers moi pour toute question ou conseil.

Bien à vous,  
Lilian GUILLEMENEY  
[lilian.guillemeney@ens-lyon.fr](mailto:lilian.guillemeney@ens-lyon.fr)