



ECOLE  
POLYTECHNIQUE  
DE BRUXELLES

UNIVERSITÉ LIBRE DE BRUXELLES

SYNTHÈSE

---

## Science des matériaux CHIM-H-300

---

*Auteur :*  
Enes ULUSOY

*Professeur :*  
Stéphane GODET

Année 2015 - 2016

# Appel à contribution

## Synthèse OpenSource



Ce document est grandement inspiré de l'excellent cours donné par NomDuProf à l'EPB (École Polytechnique de Bruxelles), faculté de l'ULB (Université Libre de Bruxelles). Il est écrit par les auteurs susnommés avec l'aide de tous les autres étudiants et votre aide est la bienvenue ! En effet, il y a toujours moyen de l'améliorer

surtout que si le cours change, la synthèse doit être changée en conséquence. On peut retrouver le code source à l'adresse suivante

<https://github.com/nenglebert/Syntheses>

Pour contribuer à cette synthèse, il vous suffira de créer un compte sur *Github.com*. De légères modifications (petites coquilles, orthographe, ...) peuvent directement être faites sur le site ! Vous avez vu une petite faute ? Si oui, la corriger de cette façon ne prendra que quelques secondes, une bonne raison de le faire !

Pour de plus longues modifications, il est intéressant de disposer des fichiers : il vous faudra pour cela installer  $\text{\LaTeX}$ , mais aussi *git*. Si cela pose problème, nous sommes évidemment ouverts à des contributeurs envoyant leur changement par mail ou n'importe quel autre moyen.

Le lien donné ci-dessus contient aussi le README contient de plus amples informations, vous êtes invités à le lire si vous voulez faire avancer ce projet !

## Licence Creative Commons

Le contenu de ce document est sous la licence Creative Commons : *Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International (CC BY-NC-SA 4.0)*. Celle-ci vous autorise à l'exploiter pleinement, compte- tenu de trois choses :



1. *Attribution* ; si vous utilisez/modifiez ce document vous devez signaler le(s) nom(s) de(s) auteur(s).
2. *Non Commercial* ; interdiction de tirer un profit commercial de l'œuvre sans autorisation de l'auteur
3. *Share alike* ; partage de l'œuvre, avec obligation de rediffuser selon la même licence ou une licence similaire

Si vous voulez en savoir plus sur cette licence :

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

**Merci !**

# Chapitre 1

## Architecture atomique

### 1.1 Atome : fiche technique

Commençons par un bref rappel des propriétés principales :

- Le noyau est formé de **protons** et **neutrons**, appelés **nucléons** et entouré d'**électrons** qui se déplacent dans des **orbitales** dictées par la fonction d'onde.
- Le **nombre atomique Z** désigne le nombre d'électrons = le nombre de protons.
- Le nombre de neutrons peut différer pour un même atome donnant lieu à des **isotopes**.
- La masse d'un nucléon est de  $1.66 \cdot 10^{-24}$  g et celle de l'électron de  $9.1 \cdot 10^{-31}$  g (rapport 1/1800).
- La charge d'un électron est de  $1.602 \cdot 10^{-19}$  g.
- L'unité de **mole** correspond à  $6.02 \cdot 10^{23}$  **particules** (nombre d'avogadro) et une mole de nucléons pèse 1 g.

### 1.2 Comportement ondulatoire de l'électron

#### 1.2.1 Dualité onde/corpuscule

Etudié en long et en large dans le cours de *Physique quantique II*, on sait grâce à **de Broglie** qu'une onde est associée à toute particule et sa longueur d'onde est donnée par

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad \mathbf{h} = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s (constante de Planck)} \quad (1.1)$$

En 1927, Davisson et Germer mettent en évidence expérimentalement cet aspect grâce au phénomène d'**interférence**.

En 1926, **Schrödinger** proposera que l'onde associée à un électron en mouvement résulte de la variation périodique d'une fonction  $\psi$  appelée **fonction d'onde**. Les électrons seront alors dans des orbitales occupant un volume de l'espace et non plus dans des orbites circulaires.

De plus, les états énergétiques correspondent à des ondes stationnaires qu'on peut caractériser par l'équation

$$\frac{d^2}{dx^2} a + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} a = 0 \quad (1.2)$$

qui régit également les oscillations d'une corde fixée à ses deux extrémités, à une dimension. L'amplitude  $a$  varie en fonction de la position  $x$  sur la corde pour un  $\lambda$  donné.

En se rappelant que  $E_{cin} = E - V = \frac{1}{2}mv^2$  et en remplaçant l'amplitude de (1.2) par  $\psi$ , on retrouve l'équation de Schrödinger à une dimension

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = (E - V)\psi \quad (1.3)$$

Rappelons-nous qu'on obtient la **probabilité de présence** avec  $\int |\psi|^2 dV$ .

### 1.2.2 Orbitales et nombres quantiques

On sait donc que chaque atome possède un certain nombre d'orbitales électroniques caractérisées par des valeurs de l'énergie. Seules les orbitales de plus **basses énergies** sont occupées. Ces dernières sont définies par 4 nombres quantique :

- **Le nombre quantique principal  $n$**  ( $n > 0$ ) qui fixe la **taille** de l'orbital. On associe les lettres K, L, M, ... à  $n = 1, 2, 3, \dots$
- **Le nombre quantique azimutal  $l$**  ( $0 < l < n - 1$ ) qui fixe la forme de l'orbitale. Les sous-niveaux énergétique  $l = 0, 1, 2, \dots$  sont désignés par les lettres s (sphérique), p, d, f, ...
- **Le nombre quantique magnétique  $m_l$**  ( $-l < m_l < l$ )