

LC 1
Modèle quantique
De l'atome

El possibles : Atome monoélectronique, atome polyélectronique, équation de schrodinger

Niveau : L2 (début)

Prérequis :

- Coordonnées radiales
- Règles de remplissage

Choix pédagogique :

Leçon où on introduit beaucoup de nouvelles notions, vers la fin on s'appuie sur des choses qu'ils ont déjà vu comme la configuration électronique pour le montrer que tout est lié et donner un sens aux nouvelles notions.

Biblio :

- Volatron Structure électronique des molécules tome I
- Hprépa PCSI 2010
- Schott PSCI
- Ribeyre PC

Intro :

En chimie, l'objectif est de pouvoir comprendre les propriétés d'espèces vis à vis d'autres espèces, et même de pouvoir les anticiper.

Pour cela, on va étudier l'électron car on peut dire très grossièrement que la chimie est une science des électrons.

=> Montrer la représentation d'un nuage électronique (slide)

En chimie, on va voir des transformations des nuages électroniques au niveau des atomes et des molécules.

Il faut donc pouvoir savoir comment s'agencent les électrons dans le nuage, et quelles sont les énergies qu'ils possèdent.

Avec ces infos, on pourra prédire et comprendre les propriétés et réactivité des espèces chimiques.

Vous connaissez déjà un peu ces infos :

règle de remplissage électronique : on vous a dit que 1s était plus bas en énergie que 2s et que 2s pouvait avoir 2 électrons et 2p, 6 électrons. Mais vous êtes-vous demandé comment on pouvait le savoir ?

On va utiliser un nouvel outil qui va nous permettre d'avoir accès à l'énergie de l'électron et à son arrangement spatial.

L'objectif de la leçon :

- Étudier l'outil qui nous permet d'avoir accès aux infos importantes de l'électron (son énergie et agencement spatial)

I. Éléments de mécanique quantique

1. Fonction d'onde (avec slide pour passer rapidement)

- Dualité onde corpuscule de la matière. Vous avez eu plus l'habitude d'étudier l'aspect particulaire (particule chargée localisée dans l'espace) là on va voir l'aspect ondulatoire car c'est cet aspect-là qui nous donne les infos E et spatial.
- En mécanique quantique, l'électron est décrit par une onde à laquelle est associée une fonction d'onde noté Psi. C'est l'outil dont on parlait en intro.
- L'amplitude de l'onde dépend des coordonnées de l'espace et du temps de l'électron
- On se place dans un système stationnaire : indépendant vis à vis du temps
- La fonction d'onde donne deux infos sur l'électron : la première : espace (avec normalisation)

=> Volatron Chap n°2 Elements d'atomistiques p.29 (c'est très bien)

=> HPrépa 2010 Chap n°9 modèle quantique de l'atome 1.3 Fonction d'onde p.263 (ça complète)

Transition : et comment avoir accès à cette deuxième info qui est l'énergie ? Et comment déterminer cette fonction d'onde qui nous donne autant d'info ?

2. Équation de Schrödinger

Définir le système correctement :

- Système : électron en interaction avec le proton du noyau (qu'on considère fixe)
- Interaction prise en compte (électrostatique et gravitationnelles (qu'on néglige))

Équation de Schrödinger

- Expression de l'équation (analogie avec le PFD, nous ce qu'on cherche c'est psi et E)
- Hamiltonien,
- Valeurs propres : Energie associée à la fonction d'onde (donc à l'électron qu'elle décrit)
- Expliquer l'idée de la quantification d'énergie (les fonctions psi ne peuvent jouer le rôle de fonction d'onde que si elles possèdent certaines propriétés : condition de normalisation, ce qui est réalisé que pour certaines valeurs de E. E peut prendre que certaines valeurs : Energie quantifiée)

Ainsi, la fonction d'onde caractérise l'électron en prenant en compte toutes les interactions.

=> Volatron Chap n°2 Elements d'atomistiques p.29 et 30 (équation de Schro)

=> HPrépa 2010 Chap n°9 modèle quantique de l'atome 1.3 Fonction d'onde p.266 et 265 (ça complète et il y a l'aspect sur la quantification de l'énergie)

Transition : on va étudier des atomes possédant un seul électron. On va étudier leur fonction d'onde et valeur propres et on va voir qu'on va revenir à des choses qu'on connaît.

II. Atome monoélectronique

On s'intéresse à l'atome d'hydrogène.

Quand on a un système avec un seul électron, on peut résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger c'est à dire qu'on peut trouver l'expression exacte de la fonction d'onde.

Mise en équation (on l'a déjà dit dans la partie d'avant donc on peut passer vite)

on marque exactement ce qui a écrit dans JV p.32 (pour la mise en équation) et JV p.36 (pour l'espace)

=> *Volatron p.32 et 37*

=> *HPrépa 2010 Chap n°9 modèle quantique de l'atome 2.1 p.265* (pour se préparer aux questions)

1. Fonction d'onde

- Expression de la fonction d'onde (partie radiale et partie angulaire qui vont dépendre des nombres quantiques)
 - Rappel des nombre quantique (JV p.35)
 - Partie radiale dépend de n et l et partie angulaire dépend de l et m
 - Analogie avec l'employé (Ribeyre p.397)
 - Expliquer que la fonction propre c'est une OA => OA : fonction d'onde monoélectronique. Montrer l'expression et la forme pour 1s (on revient bien à une fonction qu'on connaît la 1s mais là on voit d'où viennent les infos qui la concerne donc c'est cool (JV p.37 et 38))
- => *Volatron Chap n°2 Elements d'atomistiques p.37* (fonction propre, c'est très bien)
- => *HPrépa 2010 Chap n°9 modèle quantique de l'atome p.265* (ça complète)
- => *Ribeyre chap n°9 Orbitales atomiques p.397* (analogie)

2. Valeurs propres

- Donner l'expression de la valeur propre $-13,6/n^2$
 - Etat quantité
 - Spectre d'émission
 - Série de Balmer, Lyman ... (Schéma JV p.34)
- => *Volatron Chap n°2 Elements d'atomistiques p.37* (reprendre tel quel)

3. Hydrogénoïde

- Présentation de l'hydrogénoïde
- Expression de sa valeur propre (JV p.44)

Transition : on aimerait maintenant connaître les fonction et valeurs propres des atomes polyélectroniques. On a donc plusieurs électrons. Mais on va avoir une nouvelle interaction à prendre en compte et ça va compliquer les calculs ...

Si on a pas le temps de finir, on fait une grosse conclusion pour introduire le fait qu'on fera l'étude pour un atome polyélectronique, nouvelle interaction ee à prendre en compte, approximation que ça engendre, et du coup ça engendre des valeurs approché de fonction d'onde et d'OA.

III. Atome polyélectronique

Nouvelle interaction à prendre en compte : interaction répulsive électron-électron.

On ne peut pas résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger dans ce cas-là. On va donc avoir besoin d'approximation : les citer (JV p.45-46)

1. Orbitales atomiques et leur énergie

- Expression des fonctions d'onde (partie radiale et angulaire qui dépendent des nombre quantiques)
- Expression de l'énergie qui dépend de n et l
- On a donc différentes fonction d'onde avec leur énergie $1s, 2s, 2p, \dots$ (ça revient à ce qu'on connaît !)
=> *Volatron Chap n°2 Elements d'atomistiques p.46 et 47* (reprendre tel quel)

OA : Fonction d'onde monoélectronique approchée

OA $1s$: Fonction d'onde pour 1 électrons sur $1s$

OA $2p$: fonction d'onde pour 1 électron sur $2p, \dots$

Pourquoi approché ? Car c'est pas l'expression exacte vu qu'on a fait des approximations.

Transtion : maintenant qu'on sait d'où viennent ces infos sur les énergie et formes des OA, on peut procéder au remplissage en comprenant ce qu'on fait.

2. Configuration électronique

Règle de Klechkowski (Classement énergétique, dégénération des états de même n et l) (montrer l'interpénétration $4s$ et $3d$, cours PCSI p.13)

- Règle de Pauli
- Règle de Hund
- Une application

(Le faire rapidement on les énonce juste, on passe pas 3 heure dessus, il l'ont vu en seconde mais c'est loin de la L1)

=> *Cours PSCI : <http://www.pcsi1.bginette.com/Chim/Polys/1-Atome-2015.pdf> p.12* (très bien, bien clair et concis)

=> *Schott Chap n°5 La classification périodique des éléments p.142* (illustrations en couleurs)

=> *Volatron Tome I Chap n°2 Eléments d'atomistiques p.48* (propre, plus terre à terre)

=> *Hprépa PCSI 2010 Chap n°1 Classification périodique des éléments p. 10* (il y a des exemples de remplissage)

3. Modèle de Slater (partie Bonus , si c'est l'EI, on raccourci le I en l'appelant I. Equation de Schrodinger et on l'introduit comme dans le JV p.29 ou alors on le met en prérequis)

- Introduire la notion d'effet écran
- Constante d'écran

=> *HPrépa 2010 Chap n°9 modèle quantique de l'atome p.276 et 277* (reprendre tel quel c'est assez on ira plus loin dans la prochaine séance)

Ouverture :

Pour prévoir les réactivité, il faudrait connaître les fonction d'ondes des molécules qui nous donnerait toutes les infos.

Ca parait super compliqué car plein d'électron ... Pas de panique, on part de ce qu'on connaît, les fonction d'onde (OA) des atomes pour construire celle des molécules et on verra ça au prochain cours.