BELIN sup

Chimie

Cours

# Structure de la matière

## *Atomes, liaisons chimiques et cristallographie*

Michel GUYMONT

LICENCE 1 · 2 · 3

Belin

# Sommaire


**Avant-propos** ..... 5

**1. La théorie atomique avant la mécanique quantique** ..... 7
Résultats expérimentaux de la spectroscopie atomique ..... 8
Interprétation des interactions matière/lumière ..... 12
Le modèle planétaire et l'atome de Bohr ..... 18

**2. La mécanique quantique** ..... 32
La formule de de Broglie (1924) ..... 33
L'équation de Schrödinger des états stationnaires (1926) ..... 37
Signification physique de la fonction d'onde $\Psi(x, y, z)$ ..... 42
Le principe d'incertitude de Heisenberg (1927) ..... 45
Autres principes de la mécanique quantique ..... 46
*Les opérateurs ..... 46
*Notation de Dirac ..... 59

**3. *Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger** ..... 64
Résolution de l'équation dans des cas simples (1 dimension) ..... 65
Méthode variationnelle ..... 82
Méthode des perturbations ..... 85

**4. L'atome à un électron** ..... 93
Orbitales atomiques des hydrogénoïdes ..... 94
*Le moment cinétique orbital de l'électron ..... 111
Le spin de l'électron ..... 116

**5. Atomes polyélectroniques 1. Principes généraux** ..... 126
L'atome à deux électrons indépendants ..... 127
Principes généraux appliqués à l'atome à deux électrons ..... 130
Description des états des atomes par la configuration électronique ..... 140

**6. Atomes polyélectroniques 2. Les descriptions fines** ..... 156
Le modèle de la charge effective de Slater ..... 157
*Le modèle de Hartree-Fock ..... 160
*Le modèle de Thomas et Fermi ..... 181
*La prise en compte qualitative des interactions interélectroniques ..... 183
*L'atome dans un champ magnétique ..... 195
Énergies expérimentales des orbitales atomiques ..... 197

**7. Les divers types de liaisons chimiques** ..... 202
Introduction. Énergies de liaison et de dissociation ..... 203
Les liaisons fortes ..... 203
Les liaisons faibles ..... 217
Forme géométrique des molécules ..... 221
Valeurs des énergies de liaison ..... 223



جامعة ... المكتبة ... كلية علوم الطبيعة و الحياة

**8. Théorie quantique de la liaison chimique 1. Les molécules diatomiques** ..... 229
L'approximation de Born et Oppenheimer (1927) ..... 230
Étude de la molécule $H_2$ ..... 234
Les molécules diatomiques homonucléaires (étude qualitative) ..... 255
Les molécules diatomiques hétéronucléaires ..... 274
Mise en garde à propos de l'emploi des symboles σ et π ..... 277

**9. * Symétrie des molécules et théorie des groupes** ..... 280
Opérateurs de symétrie ..... 281
Les groupes de symétrie ..... 282
Les représentations des groupes ..... 287
Applications des représentations ..... 297

**10. * Théorie quantique de la liaison chimique 2. Les molécules polyatomiques** 304
Les orbitales moléculaires des molécules polyatomiques ..... 306
Évolution des orbitales moléculaires (diagrammes de corrélation) ..... 319
L'hybridation des OA et les orbitales localisées OL ..... 321
La méthode de Hückel ..... 329
Les complexes (composés de coordination) ..... 337

**11. Les cristaux et le réseau cristallin** ..... 356
Le réseau tripériodique d'un cristal ..... 357
Les sept systèmes cristallins (syngonies) ..... 362
* Le réseau réciproque du cristal ..... 365
* La symétrie d'orientation des cristaux (groupes ponctuels) ..... 368
* Les mailles élémentaires de symétrie maximum (mailles de Bravais) ..... 371
* Les groupes spatiaux ..... 374

**12. Cristallochimie** ..... 380
Les solides classés en quatre types suivant les liaisons ..... 381
* Les orbitales cristallines (OC) ..... 396

**13. * Diffraction des rayons X par les cristaux (radiocristallographie)** ..... 405
Production et détection des rayons X ..... 406
Interaction des rayons X avec la matière ..... 408
Diffraction par un cristal ..... 410
Méthodes expérimentales de diffraction X ..... 418

**Réponses aux exercices** ..... 422

**Appendice** ..... 441

**Bibliographie** ..... 444

**Index** ..... 445

LICENCE
1 · 2 · 3

Chimie

BELIN sup

**COLLECTION BELIN SUP SCIENCES**
Cette nouvelle collection couvre en quelques ouvrages l'ensemble du programme des 1er et 2e cycles universitaires. Elle comporte des livres de cours et des livres d'exercices. Les **ouvrages de cours** associent une présentation des notions de base à des encadrés sur l'histoire et sur les développements récents de la science ou de la technologie. En fin de chapitre, un **résumé de cours** et des **exercices** d'application résolus.

# Structure de la matière
## *Cours*

Michel GUYMONT

**Public concerné : étudiants en licence 1, 2 et 3, candidats au CAPES et à l'agrégation, étudiants en classes préparatoires, élèves ingénieurs.**

Cet ouvrage présente l'ensemble des notions de mécanique quantique et de cristallographie étudiées au cours des trois premières années universitaires en chimie. Il constitue un réel outil de compréhension et de référence pour l'étudiant : les différents modèles et théories utiles y sont exposés de façon détaillée et sont clairement reliés entre eux ; aucune étape de calcul ou de raisonnement n'est laissée dans l'ombre.

Michel Guymont est professeur à l'université Paris-XI (Orsay).

Dans la même collection :
*CAPES de Sciences physiques. Tome 1. La physique.* Cours et exercices
*CAPES de Sciences physiques. Tome 2. La chimie.* Cours et exercices
*Optique ondulatoire.* Cours
*Optique ondulatoire.* Rappels de cours et exercices
*Optique géométrique.* Cours
*Optique géométrique.* Rappels de cours et exercices
*Électrostatique et magnétostatique.* Cours
*Électrostatique et magnétostatique.* Rappels de cours et exercices

Belin
ÉDITEUR INDÉPENDANT DEPUIS 1777

www.editions-belin.com
ISBN 978-2-7011-3631-8
9 782701 136318
003631
27,90 €