

BELIN **sup**

Chimie

Cours



Structure de la matière

*Atomes, liaisons chimiques
et cristallographie*

Michel GUYMONT

LICENCE
1 • 2 • 3
IDEUG • LICENCE

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 hydrogéoïdes	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

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

COLLECTION BELIN SUP SCIENCES

Cette nouvelle collection couvre en quelques ouvrages l'ensemble du programme des 1^{er} et 2^e 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 (anciens Deug et licence), 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

Consultez notre site
www.editions-belin.com



code 003631

