

9

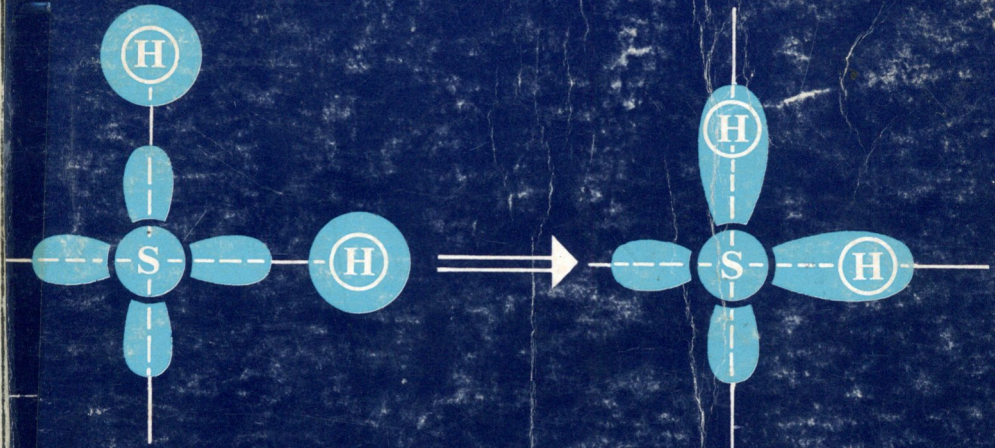
FONDEMENTS

DE LA CHIMIE

MODERNE

Jean HLADIK

ÉLÉMENTS DE CHIMIE QUANTIQUE



DUNOD

COPIE:

A. 54 - 72

T.

EX. 1

Fondements de la chimie moderne - 9



A.54-72 EX.1



ÉLÉMENTS de CHIMIE QUANTIQUE

Jean HLADIK

*Maitre de Conférences
à la Faculté des Sciences de Dakar (Sénégal)*

DUNOD
PARIS
1971

Table des matières

MÉCANIQUE QUANTIQUE

1

QUELQUES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE 1

1. Introduction.....	1
2. Fonction d'onde.....	1
3. Probabilité de présence.....	2
4. Equation de propagation des ondes.....	3
5. Longueur d'onde de L. de Broglie.....	4
6. Equation de Schrödinger.....	4
7. Généralisation de l'équation de Schrödinger.....	5
8. Atome d'hydrogène.....	7
9. Normalisation des fonctions d'onde.....	7
10. Produit des probabilités.....	8
11. Principe d'indiscernabilité.....	8
12. Structure de la fonction d'onde.....	9

2

PROPRIÉTÉS DE L'OPÉRATEUR HAMILTONIEN 11

1. Puits de potentiel carré.....	11
2. Puits de potentiel à trois dimensions.....	13
3. Orthogonalité et dégénérescence.....	15
4. Expression de l'énergie.....	15
5. Propriété d'hermiticité.....	16
6. Orthogonalité des fonctions propres.....	17

3

**MÉTHODES DE RÉOLUTION
DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER 18**

I. Théorie des perturbations.....	18
1. Position du problème.....	18
2. Valeurs propres non dégénérées.....	19
3. Valeurs propres dégénérées.....	21
II. Théorie des variations.....	23
1. Principe de la méthode.....	23
2. Méthode de calcul.....	24

ATOMISTIQUE

4

L'ATOME D'HYDROGÈNE 27

1. Equation de Schrödinger.....	27
2. Fonctions d'onde et énergies.....	26
3. Fonctions de répartition radiale.....	29
4. Répartition angulaire.....	32

5

PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL 34

1. L'atome à plusieurs électrons.....	34
2. Particule dans un champ central.....	36
3. Fonctions angulaires.....	37
4. Equation radiale.....	37
5. Potentiel central.....	38

6

LE SPIN DE L'ÉLECTRON 39

1. Expérience de Stern et Gerlach.....	39
2. Variable de spin.....	40
3. Fonction de spin.....	41
4. Système à plusieurs électrons.....	41

7

ÉTATS DES SYSTÈMES A PLUSIEURS ÉLECTRONS 44

1. Principe de Pauli.....	44
2. Etats des électrons dans l'atome.....	45
3. Fonctions d'onde de l'atome d'hélium.....	45
4. Atome à plusieurs électrons.....	47
5. Etats de l'atome d'hélium.....	48
6. Etats des électrons équivalents.....	49

8

LES ATOMES 51

1. Hiérarchie des niveaux à l'approximation de l'interaction coulombienne.....	51
2. Structure fine des niveaux atomiques.....	52
3. Système périodique des éléments.....	54

LIAISON CHIMIQUE

9

LES MOLÉCULES DIATOMIQUES 60

I. L'ion moléculaire H_2^+	60
1. Liaison chimique.....	60
2. L'ion moléculaire H_2^+	60

X TABLE DES MATIÈRES

3. Calcul variationnel.....	61
4. Discussion des solutions.....	63
5. Molécule d'hydrogène.....	65
II. Molécules diatomiques.....	66
1. Niveaux d'énergie.....	66
2. Nomenclature des liaisons.....	67
3. Molécules diatomiques symétriques.....	69

10

L'ORIENTATION DES LIAISONS 71

I. Orbitales moléculaires localisées.....	71
1. Localisation des liaisons.....	71
2. Forme des molécules.....	72
3. Polarisation des liaisons.....	72
II. Hybridation des orbitales atomiques.....	73
1. Définition.....	73
2. Hybridation sp^3 symétrique : orbitales tétraédrales.....	74
3. Hybridation sp^3 non symétrique.....	78
4. Hybridation sp^2 : orbitales trigonales.....	78
5. Hybridation sp : orbitales digonales.....	80
III. Les liaisons multiples.....	81
1. La liaison double.....	81
2. La liaison triple.....	83
IV. Conjugaison des liaisons multiples.....	85
1. Définition.....	85
2. Molécule de butadiène.....	85
V. Stéréochimie.....	86
1. Principe.....	86
2. Carbures d'hydrogène.....	86
3. Dérivés azotés.....	88
4. Dérivés oxygénés.....	90
5. Dérivés du soufre.....	91

11

COMBINAISONS LINÉAIRES D'ORBITALES ATOMIQUES (MÉTHODE L.C.A.O.) 92

1. Théorie générale.....	92
2. Intégrales coulombiennes et intégrales d'échange.....	94
3. Charges électroniques et indice de liaison.....	94
4. Liaison éthylénique.....	96
5. Benzène.....	100
6. Butadiène.....	103

THÉORIE DES GROUPES

12

LES GROUPES DE SYMÉTRIE 108

1. Intérêt de la théorie des groupes.....	108
2. Définitions.....	108
3. Eléments d'un groupe de symétrie.....	109
4. Propriétés d'un groupe.....	110
5. Classes d'un groupe.....	110
6. Nomenclature des groupes ponctuels finis.....	112
7. Groupes continus.....	116
8. Exemples de symétrie des molécules.....	117

13

REPRÉSENTATION DES GROUPES 119

1. Exemple de représentation.....	119
2. Représentations réductibles et irréductibles.....	121
3. Caractères des matrices.....	121
4. Caractères des représentations unidimensionnelles.....	122
5. Table des caractères.....	123
6. Réduction d'une représentation.....	124

14

ORBITALES HYBRIDES 126

I. Construction des orbitales σ	126
1. Propriétés de symétrie des orbitales atomiques.....	126
2. Orbitales tétraédrales.....	127
3. Calcul des orbitales hybrides σ	129
II. Construction des orbitales π	131
1. Orbitales π	131
2. Molécule plane.....	131

15

ORBITALES MOLÉCULAIRES 134

1. Théorie générale.....	134
2. Benzène.....	135
3. Tétraméthylèncyclobutane.....	137

BIBLIOGRAPHIE 143

COLLECTION "DUNOD UNIVERSITÉ"

**APPLICATIONS
DE LA THÉORIE DES GROUPES
A LA CHIMIE**

Maîtrise de chimie physique

PAR **F.A. COTTON**

304 pages 16 x 25. 1968. Broché 38 F

COLLECTION "FONDEMENTS DE LA CHIMIE MODERNE"

LA CHIMIE DU GROUPE OH

PAR **L.B. CLAPP**

150 pages 15 x 22. 1970. Broché 28 F

**INTRODUCTION A LA CHIMIE
DES RADICAUX LIBRES**

PAR **W.A. PRYOR**

148 pages 15 x 22. 1969. Broché 27 F

**LES ÉLÉMENTS TRANSURANIENS
ARTIFICIELS**

PAR **G.T. SEABORG**

180 pages 15 x 22. 1967. Broché 27 F

DUNOD ÉDITEUR, 92, RUE BONAPARTE - PARIS-6^e - 326-99-15