

# Le modèle quantique de l'atome

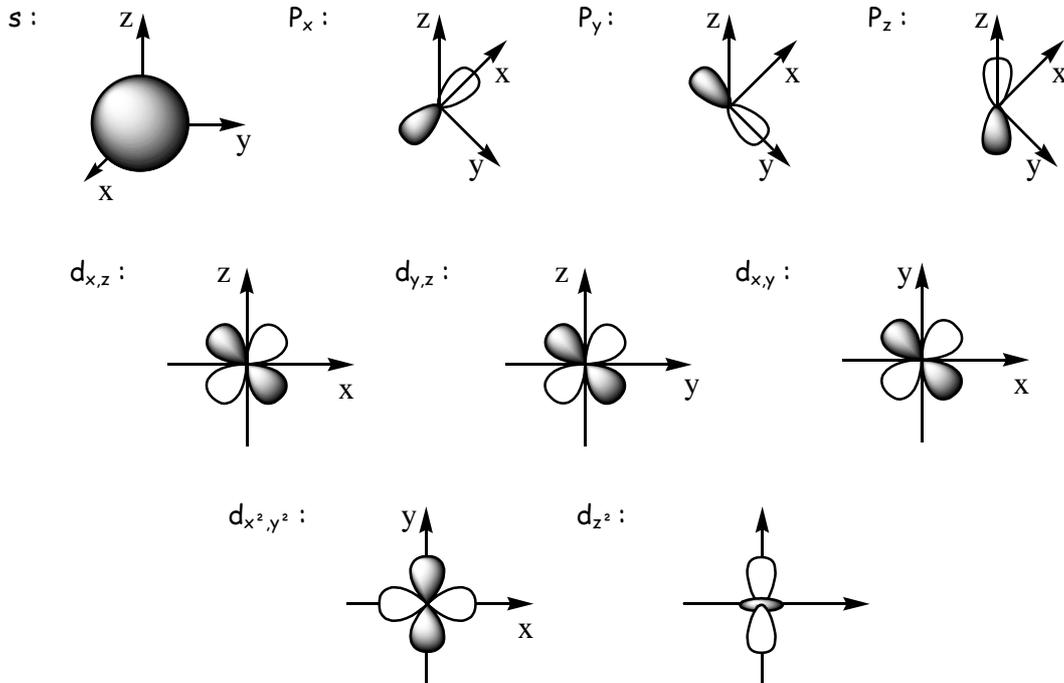
Fonction d'onde → énergie de l'électron  
 → Probabilité de présence

$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$  (en coordonnées sphériques)

$R(r)$  : partie radiale : dépend de  $n$  et  $l$

$Y(\theta, \varphi)$  : partie angulaire, dépend de  $l$  et  $m_l$

## Forme des orbitales atomiques



$n$  : quantifie l'énergie de l'orbitale  
 $l$  : quantifie la norme du moment cinétique  $L$  de l'électron  
 $m_l$  : quantifie la projection de  $L$  selon une direction privilégiée

### Probabilité de présence

Energie des orbitales :

$$E_n = -13,6 \frac{1}{n^2} \text{ en eV (pour l'hydrogène)}$$

$$\rightarrow E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ en eV}$$

### Modèle de Slater

Approximation :

$Z_i^* = Z - \sigma_i$  avec  $Z$  le nombre de proton et  $\sigma_i$  le facteur d'écran

La répulsion inter électronique est prise en compte par  $\sigma_i$  (les électrons dans les couches plus proche du noyau masquent le noyau).

$$\rightarrow Z_i^* < Z$$

→ On ne prend pas en compte les répulsions des couches situées plus loin du noyau.

Ex : électron 3d,  $\sigma_{4s,4p} = 0 = \sigma_{4d} = \sigma_{4f} \dots$

$$Z_i^* = Z - \sum_j \sigma_{ij}$$

## Tableau de coefficients

Règles :

- électron dans une couche plus loin du noyau → pas d'effet d'écran
- calcul de  $Z_{ns,np}^*$  : lecture dans le tableau
- Calcul de  $Z_{nd}^*$  ou  $Z_{nf}^*$  : tous les électrons qui ne sont pas dans la couche nd ont un coefficient d'écran = 1

## Applications

### a) Calculs d'énergie

- Energie de l'électron : énergie de l'OA qu'il occupe
- Energie orbitale d'un atome/ion : somme des énergie de ses électrons

$$\times \text{Energie d'une OA : } E_{n,l} = -13,6 \frac{(Z^*)^2}{(n^*)^2} \text{ en eV}$$

$\times$  Energie d'ionisation

### b) Rayon atomique :

$$r^2 R^2(r) = Dr(r) \quad \frac{dDr}{dr} = 0 \text{ maximum}$$

$$r = \frac{(n^*)^2}{Z^*} a_0 \quad \text{et } a_0 = 52,9 \text{ pm (rayon de l'atome d'hydrogène)}$$

### c) Evolution dans la classification périodique

