

# Chimie quantique : OA

## ➤ Energie d'un photon : Relation de Planck-Einstein

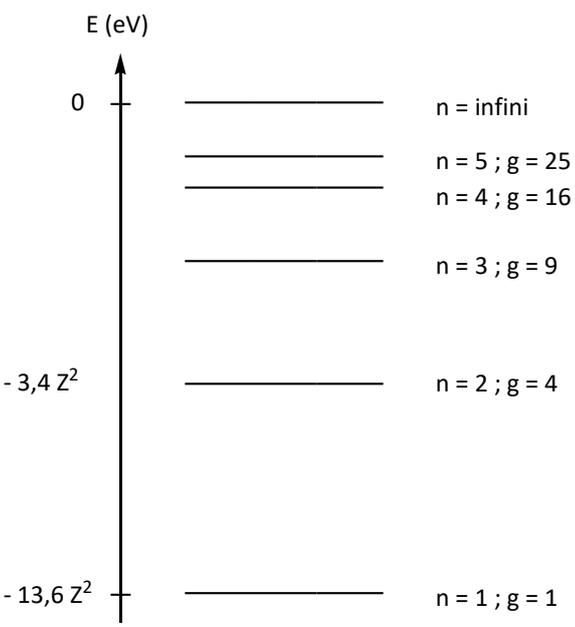
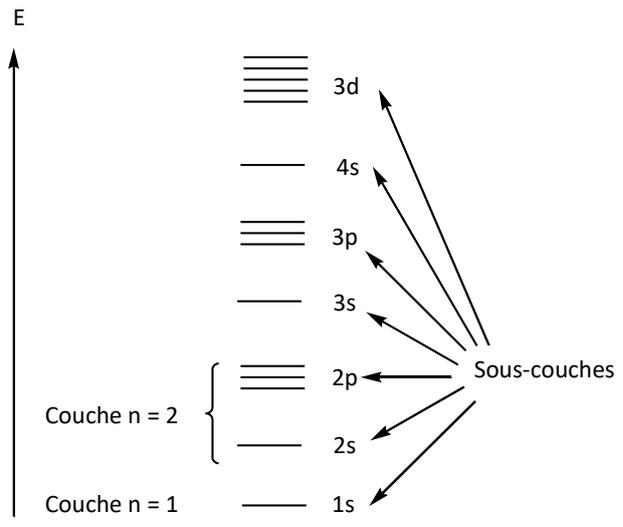
En unités S.I. :

$$E_{\text{photon}} = h \cdot \nu = \frac{hc}{\lambda}$$

Ou encore, après conversion numérique :

$$E_{\text{photon(eV)}} = \frac{1240}{\lambda_{\text{(nm)}}}$$

## ➤ Niveaux d'énergie dans l'atome

Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes	Atomes et ions polyélectroniques
$E_n = -13,6 \times \frac{Z^2}{n^2}$	$E_{n,l} = -13,6 \times \frac{(Z_{n,l}^*)^2}{n^2}$ avec $Z_{n,l}^* = Z - \sigma_{n,l}$ la charge effective
 <p>Energy level diagram for hydrogen-like atoms. The vertical axis is Energy E (eV). Levels are shown as horizontal lines. The ground state is at <math>-13,6 Z^2</math> eV (<math>n=1; g=1</math>). The next level is at <math>-3,4 Z^2</math> eV (<math>n=2; g=4</math>). Above it are levels for <math>n=3; g=9</math>, <math>n=4; g=16</math>, and <math>n=5; g=25</math>. The ionization limit is at 0 eV (<math>n = \text{infini}</math>).</p>	 <p>Energy level diagram for multi-electron atoms. The vertical axis is Energy E. Levels are shown as horizontal lines. The ground state is 1s. Above it are 2s and 2p (labeled as 'Couche n=2'). Above that are 3s, 3p, and 3d (labeled as 'Couche n=3'). Above that are 4s and 3d (labeled as 'Couche n=4'). The levels are split into sub-shells (Sous-couches) and converge towards the ionization limit.</p>
$\rho = \frac{n^2}{Z} a_0$	$\rho = \frac{n^2}{Z_{n,l}^*} a_0$

Remarque: Pour les entités à plus d'un électron, l'équation de Schrödinger ne peut pas être traitée analytiquement. On arrive à des solutions approchées à l'aide de l'approximation orbitale.

## ➤ Probabilité de présence de l'électron

Longueur d'onde de l'onde de matière de De Broglie :

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$$

Probabilité  $dP$  de trouver l'électron occupant une OA  $\Psi_{n,l,m}$ , dans un élément de volume  $dV$  :

$$dP = |\Psi_{n,l,m}|^2 \cdot dV$$

La condition de normalisation traduit le fait que l'on est certain de trouver une particule dans tout l'espace, s'écrit :

$$\iiint_{\text{espace}} |\Psi_{n,l,m}|^2 dV = 1$$

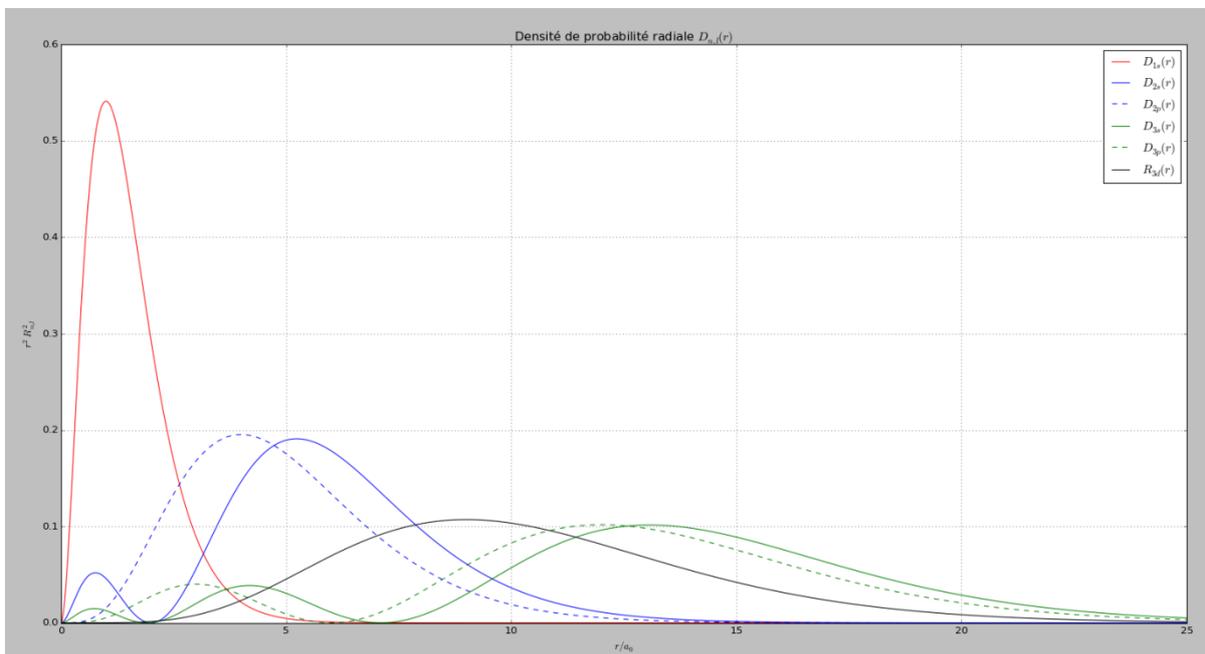
En coordonnées sphériques, l'élément de volume s'écrit :  $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$

On admet qu'une OA  $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$  peut s'écrire :

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \times Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

On peut en déduire la densité de probabilité radiale  $D_{n,l}(r)$ :

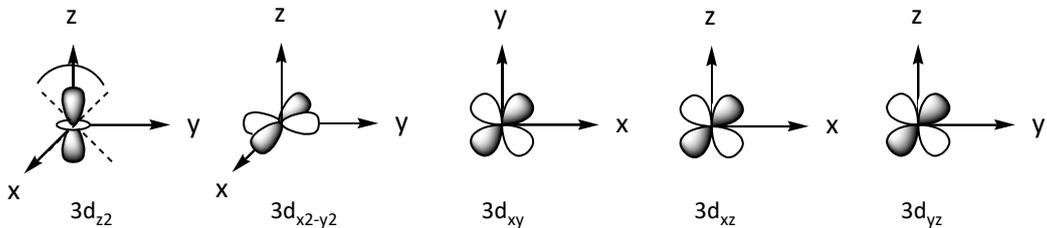
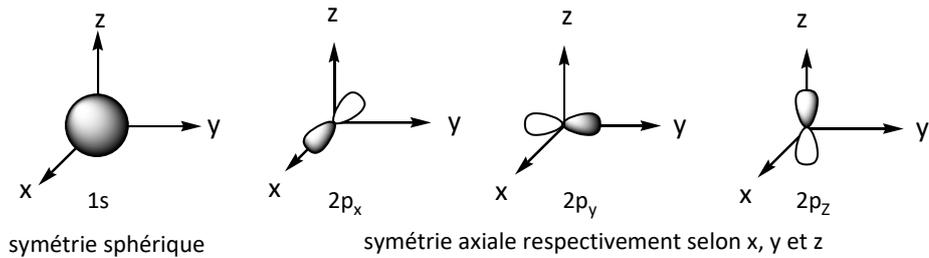
$$D_{n,l}(r) = |R_{n,l}(r)|^2 r^2$$



Rayon  $\rho$  d'une OA : distance correspondant au maximum de densité de probabilité radiale, c'est-à-dire le maximum de la fonction  $D_{n,l}(r) = |R_{n,l}(r)|^2 r^2$ .

Rayon atomique : Distance pour laquelle la densité de probabilité radiale associée aux électrons de valence est maximale. Autrement dit, **le rayon atomique est égal au rayon des OA de valence.**

➤ Représentation spatiale des OA

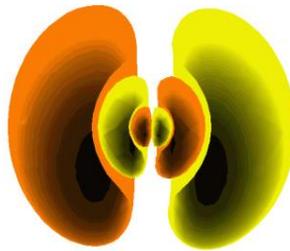


Surface nodale : Surface définie par  $\Psi = 0$

Propriétés de symétrie de la 2p<sub>z</sub> :

- Symétrique par rapport à l'axe z
- Antisymétrique par rapport à son plan nodal xy

Représentation d'une OA 4p :



➤ Principe d'indétermination de Heisenberg

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$$

Expression de l'indétermination quantique :

$$\Delta Y = \sqrt{\langle Y^2 \rangle - \langle Y \rangle^2}$$

➤ Evolution des propriétés atomiques dans la classification périodique

