Chimie quantique : OA

➢ *Energie d'un photon : Relation de Planck-Einstein*

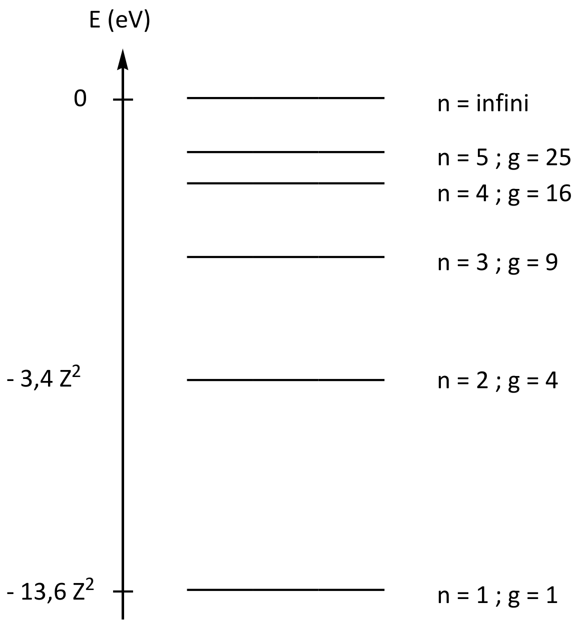
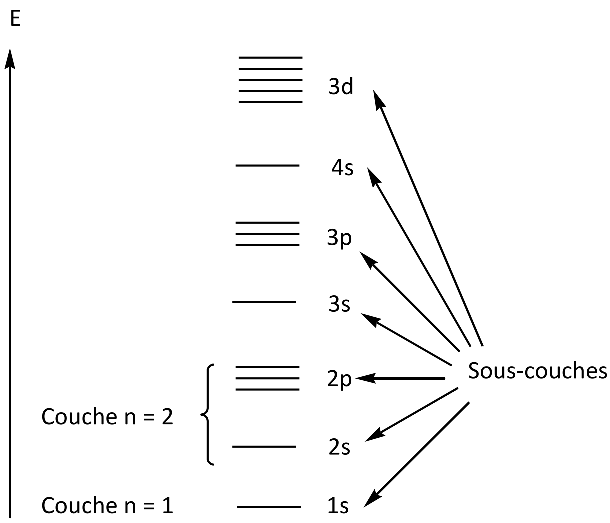
En unités S.I. :

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

Ou encore, après conversion numérique :

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

➢ *Niveaux d'énergie dans l'atome*

Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes	**Atomes et ions polyélectroniques**
$E_n = -13{,}6 \times \frac{Z^2}{n^2}$	$E_{n,l} = -13{,}6 \times \frac{\left(Z^*_{n,l}\right)^2}{n^2}$ avec $Z^*_{n,l} = Z - \sigma_{n,l}$ la charge effective
	
$\rho = \frac{n^2}{Z} a_0$	$\rho = \frac{n^2}{Z_{n,l}^*} a_0$

<u>Remarque</u> : 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 orbitalaire.

➢ *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 :

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

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

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

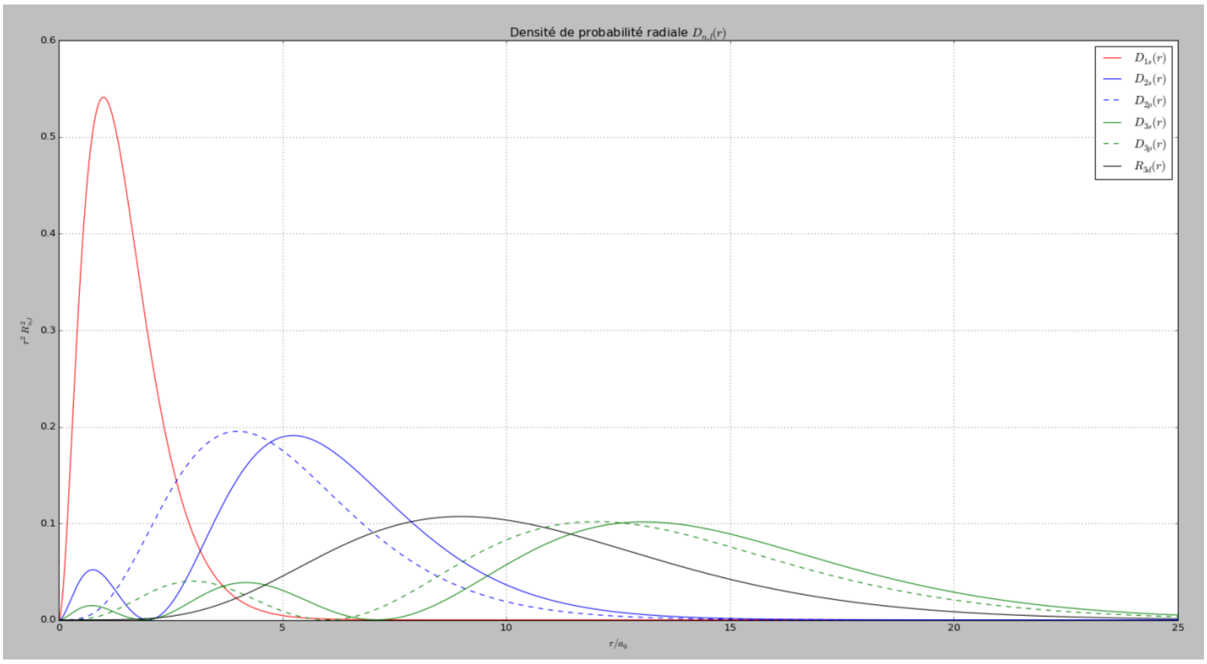
En coordonnées sphériques, l'élément de volume s'écrit : $dV = r^2 \, dr \sin\theta \ d\theta \, d\varphi$

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 <u>densité de probabilité radiale</u> $D_{n,l}(r)$:

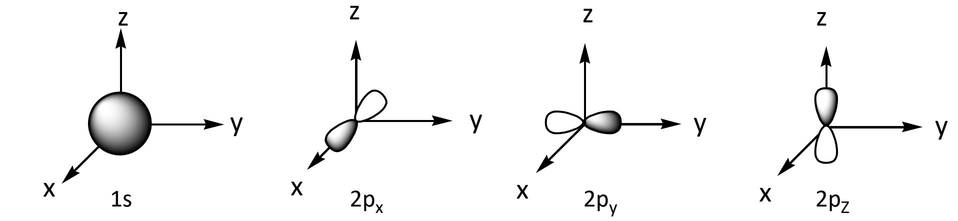
$$D_{n,l}(r) = |R_{n,l}(r)|^2 r^2$$



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

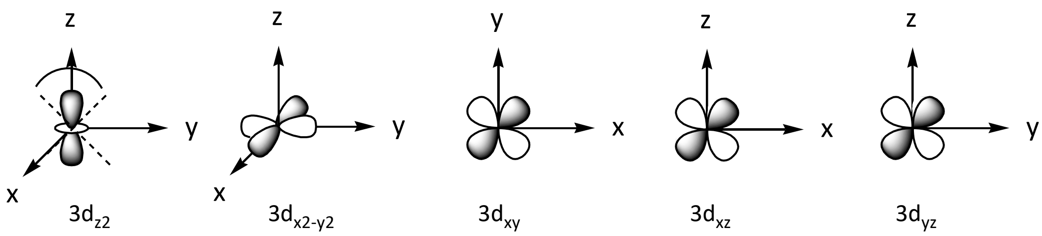
<u>Rayon atomique</u> : Distance pour laquelle la densité de probabilité radiale associée aux électrons de valence est maximale. Autrement dit, **le rayon atomique est égal au rayon des OA de valence.**

➢ *Représentation spatiale des OA*



symétrie sphérique

symétrie axiale respectivement selon x, y et z



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

Propriétés de symétrie de la $2p_z$:

- 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*

Expression de l'indétermination quantique :

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

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

➢ *Evolution des propriétés atomiques dans la classification périodique*