

Orbitales atomiques

* Les électrons dans les atomes sont des particules quantiques auxquelles on peut attribuer une fonction d'onde (voir M. Verrot)

↳ fonction mathématique décrivant l'état quantique du système

↳ Elle est régie par l'équation de Schrödinger $\hat{H}\psi = E\psi$

avec $\hat{H} = E_{CN} + E_{Ce^-} + V_{Ne^-} + V_{e^-}$

* On fait des approximations pour la résoudre

• Born Oppenheimer : les noyaux sont fixes

• Approximation monoélectronique : les e^- écrantent la charge des noyaux

↳ constante écran Slater = "table Slater"

⇒ On se ramène à des hamiltoniens monoélectroniques

$$\hat{H} = \sum_i \hat{h}_i = E_{Ce_i} + V_{Ne_i}^* = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Z^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Par la résolution on peut décomposer ψ en harmoniques sphériques

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$$

• R est la partie radiale (= "densité radiale")

• Y est la partie angulaire (= "densité angulaire")

⇒ On obtient les orbitales atomiques ψ_{n,l,m_l}

• n = nbr. Q.N. principale : sous-couche électronique

• l = " " secondaire : forme des orbitales

• m_l = " " magnétique : orientation des orbitales

* Les orbitales représente la 'densité' de probabilité de l'électron dans l'espace autour de l'atome (du noyau)

* L'énergie d'un électron dans une sous couche vaut

$$E_{n^*} = -13,6 \cdot \frac{Z^{*2}}{n^{*2}}$$

↳ Z^* la charge effective ("Table Slater")

↳ n^* le nombre quant. effectif ("nb quant. effectif")

* Le rayon de l'orbitale vaut:

$$r_{n,l} = \frac{n^{*2}}{Z^{*2}} a_0$$

avec a_0 : rayon Bohr = 52,9 pm

* On peut attribuer à chaque électron un quadruplet de nbr quant. Q

- Ils représente l'orbitale dans laquelle il se trouve et son spin
- Le spin est un état quant. propre à l' e^- , il vaut $\pm 1/2$.

* On peut ensuite remplir les orbitales selon 3 règles

- Pauli: pas 2 e^- avec même quadruplet
- Klechowsky: remplissage par $n+l$ croissant avec n minimal
 - ↳ ⚠ Il y a beaucoup d'exceptions
- Hund: l'état de \oplus basse énergie est celui avec le plus haut spin
 - ↳ pour aller \oplus loin il faut les termes spectroscopiques

* On peut faire interagir les OA pour obtenir des "orbitales moléculaires"