Chapitre III : Modèle de Slater

Et interprétation de l'évolution des propriétés physiques des éléments de la classification périodique

Plan

****

****

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 12 pages.

Le modèle de Slater est un modèle simple qui permet de calculer des charges moyennes, effectivement perçues par les électrons (en tenant compte de la charge du noyau et de celles des autres électrons, ces derniers écrantant le noyau).

A partir de ces charges effectives, on peut calculer les niveaux énergétiques des orbitales atomiques ainsi que des énergies électroniques des atomes dans leur état fondamental. Il est alors possible de calculer certaines grandeurs physiques des éléments de la classification périodique telle que :

- l'énergie d'onisation, l'affinité électronique et l'électronégativité ;
- la taille des atomes et leur polarisabilité

Ce modèle n'a pas pour but de donner les valeurs de ces grandeurs physiques mesurées expérimentalement mais simplement d'interpréter leur évolution pour les éléments de la classification périodique.

I- Présentation du modèle de Slater

1- Charge effectivement perçue

a- Constante d'écran

Considérons un système constitué d'un noyau de charge Z en unité de charge électronique et supposé immobile (la charge élémentaire est de $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ C) et de 2 électrons e1 et e2.

On souhaite calculer la charge effectivement perçue par l'électron e1.

Si l'électron e2 est à l'infini du noyau, l'électron e1 n'est soumis qu'à la charge attractive du noyau, soit Z.

Au contraire, si l'électron e1 est à l'infini du noyau, il perçoit l'électron e2 et le noyau confondu et donc une charge de Z-1. Don la charge effectivement perçue par l'électron e1, Z_{e1}^{eff}, est comprise entre :

$$Z - 1 \leq Z_{e1}^{eff} \leq Z$$

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 12 pages.

Le modèle de Slater permet de calculer cette charge effectivement perçue à partir de constantes d'écran regroupées dans le tableau ci-après avec :

$$Z_{e1}^{eff} = Z - \sigma$$

avec Z charge du noyau

et σ constante d'écran calculée à partir des constantes de Slater

groupe de l'électron étudié	Contribution des autres électrons						
	couches n-2, n-3	couche n-1	autres électrons de niveau n				couches supérieures
			1s	s et p	d	f	
1s	-	-	0,30				0
s et p	1,00	0,85		0,35	0	0	0
d	1,00	1,00		1,00	0,35	0	0
f	1,00	1,00		1,00	1,00	0,35	0

Constantes de Slater

On considère que seul les électrons placés sur des sous-couches de quantique principal n'=n ou n' < n, écrantent la charge du noyau perçu par l'électron placé sur une sous-couche de nombre quantique principal n. Les électrons, placés sur une sous-couche de nombre quantique n' > n, sont considérés comme étant à l'infini du noyau et n'écrantent pas l'électron placé sur une sous-couche de nombre quantique n.

b- Exemple de calcul de charge effectivement perçue

Considérons l'atome d'hélium de configuration électronique : $1s^2$.

La charge effectivement perçue par l'électron 1s est égale :

$$Z_{1s}^{eff} = 2 - \sigma,$$

2 étant la charge du noyau en unité de charge électronique

$$\text{et } \sigma = \sigma_{1s \to 1s} = 0{,}3$$

l'écrantage étant dû à l'autre électron 1s sur cet électron 1s étudié

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 12 pages.

Considérons l'atome de lithium de configuration électronique : $1s^2 2s^1$.

- La charge effectivement perçue par l'électron 1s est égale :

$$Z_{1s}^{eff} = 3 - \sigma_{1s},$$

3 étant la charge du noyau en unité de charge électronique

$$\text{et } \sigma_{1s} = \sigma_{1s \to 1s} = 0{,}3$$

l'écrantage étant dû à l'autre électron 1s sur cet électron 1s étudié

l'électron 2s étant considéré à l'infini du noyau, son écrantage de la charge du noyau est nul

- La charge effectivement perçue par l'électron 2s est égale :

$$Z_{2s}^{eff} = 3 - \sigma_{2s}$$

3 étant la charge du noyau en unité de charge électronique

$$\text{et } \sigma_{2s} = 2 \cdot \sigma_{1s \to 1s} = 2 \times 0{,}85$$

l'écrantage étant dû aux 2 électrons 1s sur cet électron 2s étudié

l'électron 1s étant placé sur une sous-couche de nombre quantique n'=n-1 par rapport à l'électron 2s placé sur une sous-couche de nombre quantique n

Considérons l'atome de béryllium de configuration électronique : $1s^2 2s^2$.

- La charge effectivement perçue par l'électron 1s est égale :

$$Z_{1s}^{eff} = 4 - \sigma_{1s},$$

4 étant la charge du noyau en unité de charge électronique

$$\text{et } \sigma_{1s} = \sigma_{1s \to 1s} = 0{,}3$$

l'écrantage n'étant dû qu'à l'autre électron 1s sur cet électron 1s étudié

les électrons 2s étant considérés à l'infini du noyau,

leur écrantage de la charge du noyau est nul

- La charge effectivement perçue par l'un des électrons 2s est égale :

$$Z_{2s}^{eff} = 4 - \sigma_{2s}$$

4 étant la charge du noyau en unité de charge électronique

$$\text{et } \sigma_{2s} = 2 \cdot \sigma_{1s \to 2s} + \sigma_{2s \to 2s} = 2 \times 0{,}85 + 0{,}35$$

l'écrantage étant dû aux 2 électrons 1s sur cet électron 2s étudié

et de l'autre électron 2s sur cet électron 2s étudié

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 12 pages.