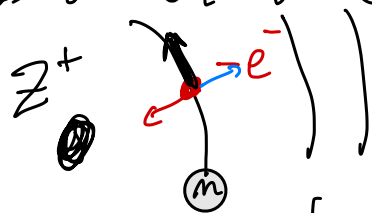


# Ch 2 Modèles de l'Atome

## I Bohr



$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2}$$

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z}$$

Hydrogénoides  $H$ ,  $He^+$ ,  $Li^{2+}$  ....

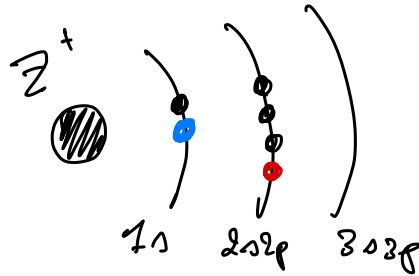
## II Slater

$$E_n = -13,6 \frac{Z_{eff}^2}{n^2}$$

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z_{eff}}$$

avec  $Z_{eff} = Z - \sigma$

écranage  
↓



	1s	2s2p	3s3p
1s	0,30	~	~
2s2p	0,85	0,35	~
3s3p	1	0,85	0,35

Pour  $Z=6$   $Z_{1s}^{eff} = 6 - 1 \times 0,30 = 5,70$

$$E_{1s} = -13,6 \times \frac{(5,70)^2}{1^2}$$

$Z_{2s2p}^{eff} = 6 - [2 \times 0,85 + 3 \times 0,35] = 3,25$

$$E_{2s2p} = -13,6 \times \frac{(3,25)^2}{2^2}$$

$+ E = 0$

Application au  $PI(Be) = E(Be^+) - E(Be)$




Be  $Z=4$   $1s^2 2s^2$   $E(Be) = 2E_{1s}(Be) + 2E_{2s,2p}(Be)$

$E(Be) = 2(-186,18) + 2(-12,93) = -398,22 \text{ eV}$

$E_{1s}(Be) = -186,18 \text{ eV}$

$E_{2s,2p}(Be) = -12,93 \text{ eV}$

$Z_{\text{eff}} = 4 - [2 \times 0,85 - 1 \times 0,35]$



Be<sup>+</sup>  $Z=4$   $1s^2 2s^1$   $E(Be^+) = 2E_{1s}(Be^+) + 1E_{2s,2p}(Be^+)$

$Z_{\text{eff}}^{1s}(Be^+) = 4 - [1 \times 0,3] = 3,7 \Rightarrow E_{2s}(Be^+) = E_{2p}(Be^+) = E_{2s}(Be) = -186,18 \text{ eV}$

$Z_{\text{eff}}^{2s,2p}(Be^+) = 4 - [2 \times 0,85] = 2,30 \Rightarrow E_{2s,2p}(Be^+) = -13,6 \frac{(2,30)^2}{2^2} = -17,10 \text{ eV}$

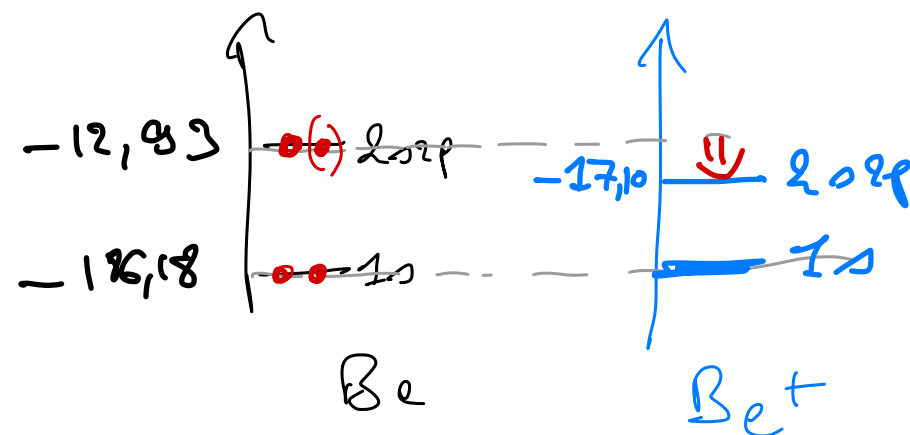
$E(Be^+) = 2 \times (-186,18) + 1 \times (-17,10) = -389,46 \text{ eV}$

$PI(Be) = -389,46 - (-398,22) = +8,76 \text{ eV}$

$PI(Be) = E(Be^+) - E(Be)$

qd on arrache  $1e^-$  d'un niveau  $n_1$   
les niveaux de  $n \geq n_1$  sont stabilisés

C'est pourquoi le théorème de Koopmans  
est en gal faux

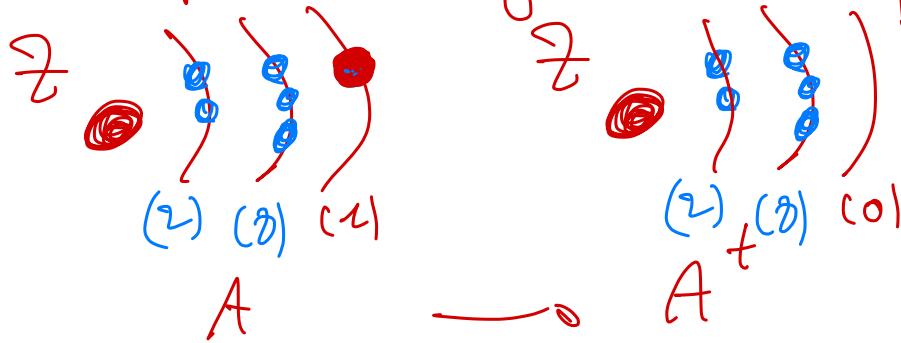


Koopman's: le PI d'un atome =  $-(E_{\text{orbitale}})_{n \text{ la plus gr.}}$

expl. Koopman's pour Be

$$PI_K(\text{Be}) = +12,93 \text{ eV}$$

Koopman's est juste si l'e qu'on arrache est seul sur son orbitale



$$E(A^+) = 2 E_{1s}(A^+) + 8 E_{2s}(A^+)$$

$$E(A) = 2 E_{1s}(A) + 8 E_{2s}(A) + 1 E_{2p}(A)$$

$$PI(A) = E(A^+) - E(A) = -1 E_{2p}(A)$$

# Chap 3 Spectroscopie atomique

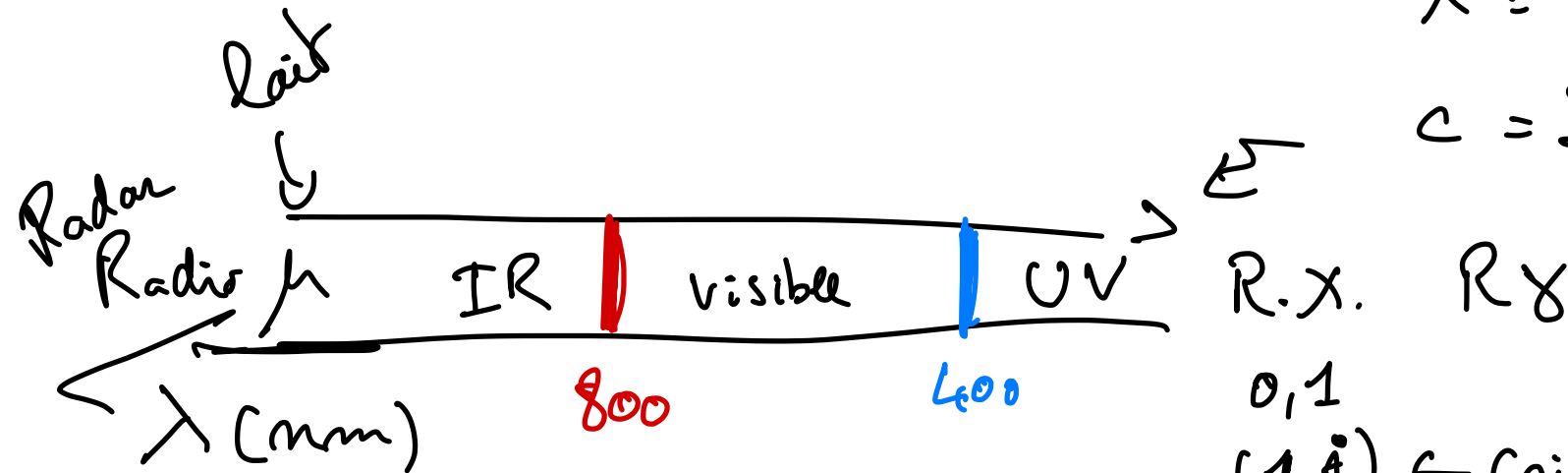
I Lumière :  $E = h \nu = \frac{hc}{\lambda}$   
 $[E] = [h \cdot \nu] = [J \cdot s^{-1}]$

$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

$\nu = s^{-1} \text{ Hz}$  fréquence

$\lambda = m$  longueur d'onde

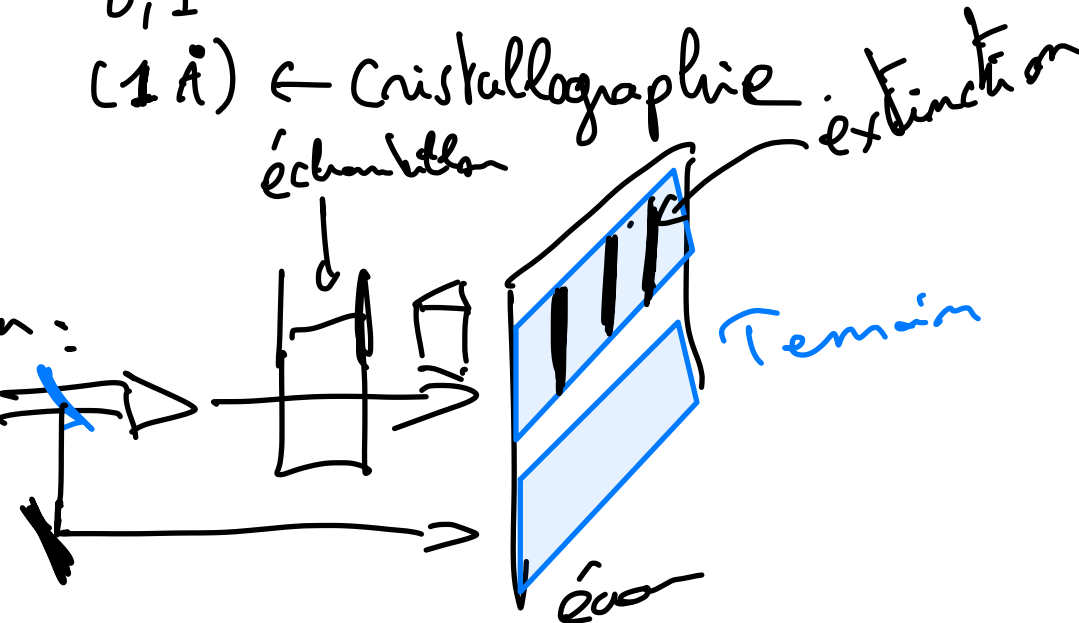
$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot s^{-1}$  célérité de la lumière



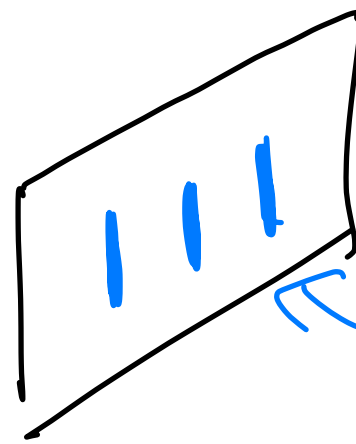
## II Spectroscopie

II-1 2 types

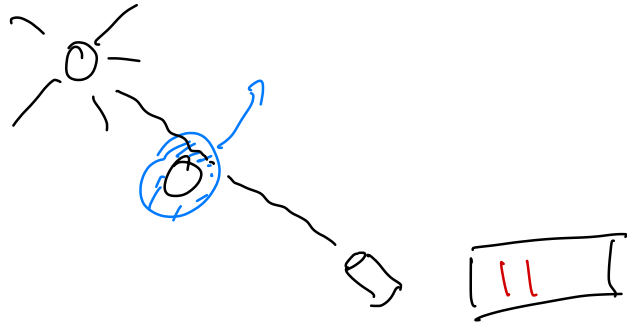
absorption:  
 $h\nu$



Emission



lignes d'émission

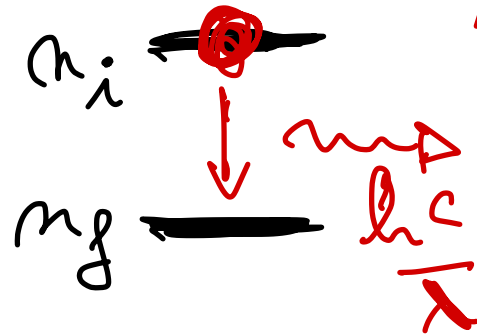


II - 2 interprétation

• formule de Ryd (émission) =

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

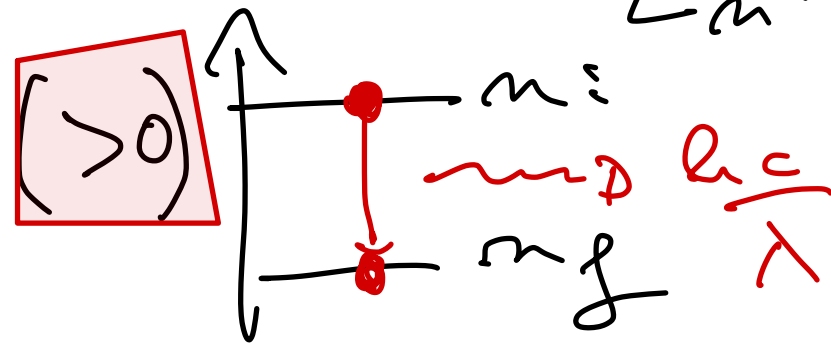
$n-1$



Ch Ryd pour H  
 $\frac{1}{\lambda} > 0$

• Interprétation une transition se produit exactement entre 2 niveaux d'énergie (tels que décrit par Bohr)

$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2}$$

$$\frac{hc}{\lambda} = (E_{n_i} - E_{n_f}) \quad (>0)$$


$$\frac{hc}{\lambda} = -13,6 Z^2 \times \frac{1}{n_i^2} - (-13,6 Z^2) \times \frac{1}{n_f^2}$$

$$\frac{hc}{\lambda} = -13,6 Z^2 \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = + \frac{13,6 Z^2}{hc} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

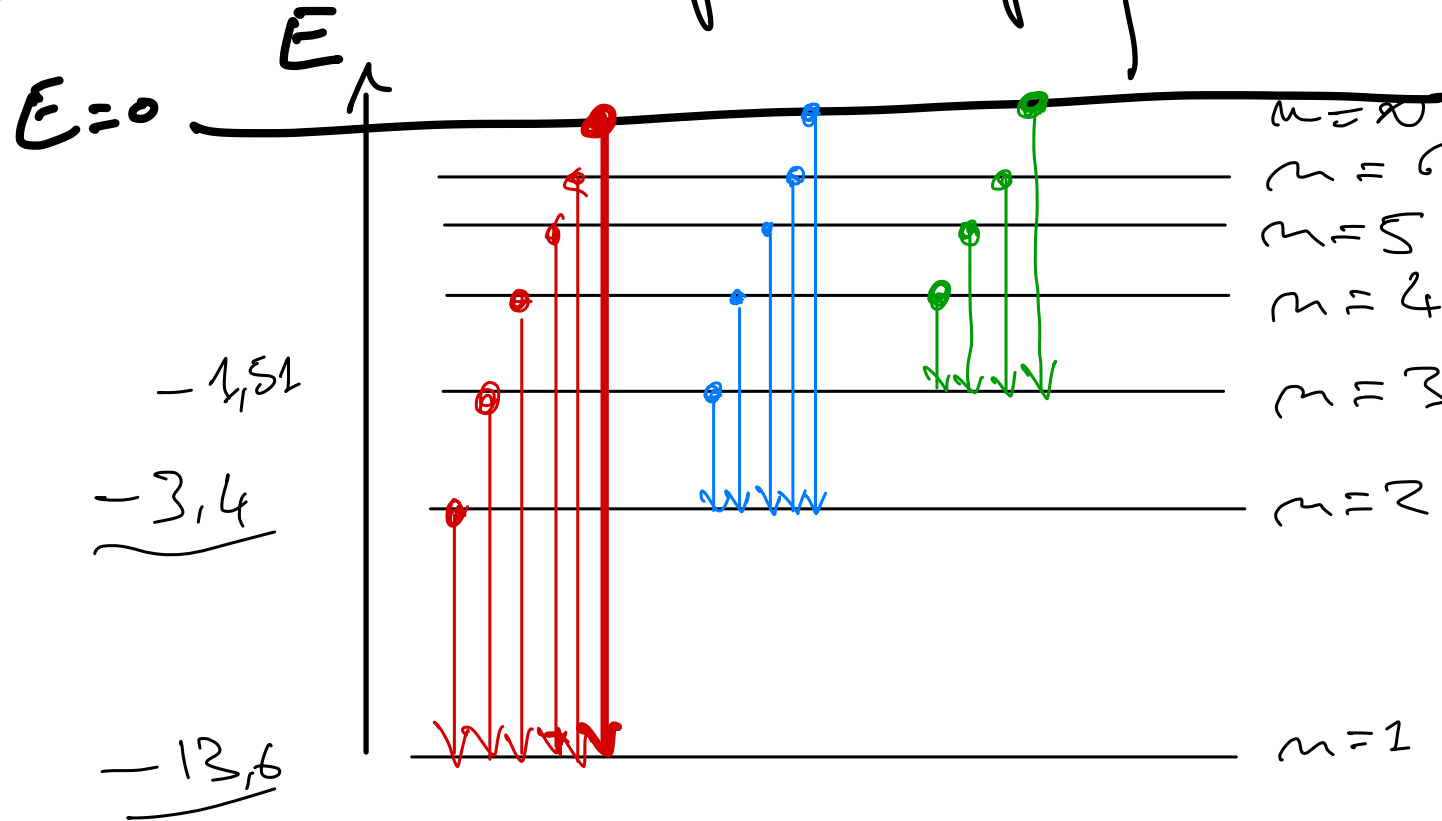
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$R_H = + \frac{hc}{13,6 \times 1^2}$$

$$R_H = 1.10^7 \text{ m}^{-1}$$

# II-3 Séries Spectroscopiques

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \cdot \frac{m \cdot 1}{m}$$



Série de

Lyman  $n_f = 1$

$$\Delta E_{\min} = 13,6 - 3,4 = 10,2 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{\max} = 13,6 \text{ eV}$$

ds UV  $\lambda_{\min}, \lambda_{\max}$

BALMER  $n_f = 2$

ds visible:  $\Delta E \approx 2 \text{ eV}$

Paschen  $n_f = 3$