

Hydrogéoïdes et méthode de Slater

Un hydrogéoïde ou atome hydrogéoïde est un ion monoatomique ne possédant qu'un seul électron comme l'hydrogène. Il a donc une structure électronique semblable à celle de l'atome d'hydrogène : $1s^1$. C'est un atome auquel on a arraché les $(Z-1)$ électrons. Il s'agit toujours d'un cation.

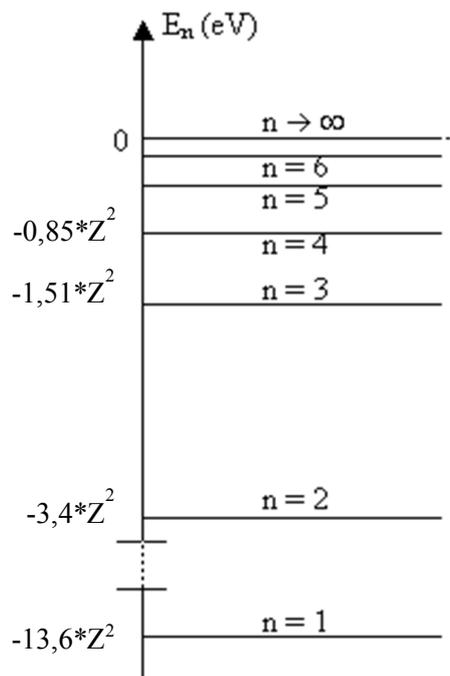
Formule générale des hydrogéoïdes : ${}_Z X^{(Z-1)+}$

Par contre, contrairement à l'hydrogène, la charge de son noyau est $+Ze$ (où Z est le numéro atomique de l'élément chimique et e la charge élémentaire).

L'énergie de l'électron d'un hydrogéoïde est donnée par l'expression :

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

où n est le nombre quantique principal (entier positif non nul) qui désigne le numéro de la couche électronique dans laquelle se situe l'électron et $1eV = 1,602 \cdot 10^{-19} J$.

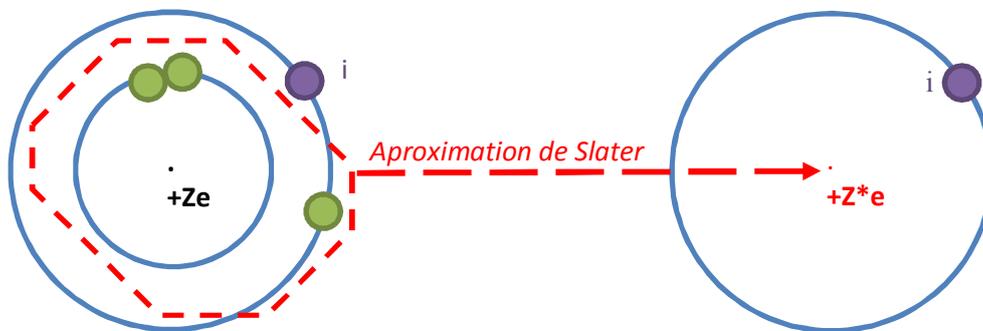


Énergie d'ionisation des hydrogéoïdes

La réaction de première ionisation d'un hydrogéoïde s'écrit : $X^{(Z-1)+}_{(g)} \rightarrow X^{Z+}_{(g)} + 1e^-$

D'où : $E_{ionisation}({}_Z X^{(Z-1)+}) = \Delta E_{1 \rightarrow \infty} = |E_{\infty} - E_1| = |0 - E_1| = 13,6 Z^2 eV$

La méthode de Slater permet de « transformer » un atome polyélectronique en un hydrogénoïde. Pour simuler un édifice électronique à un électron, on calcule une charge nucléaire effective perçue par chaque électron : $Z^* = Z - \sigma$, où Z est la charge nucléaire réelle et σ représente l'effet d'écran produit par les électrons plus proches ou aussi proches du noyau. Par conséquent, on aura toujours $Z^* < Z$. L'effet d'écran σ_i sur l'électron i est la somme des effets d'écran $\sigma_{j \rightarrow i}$ exercés sur l'électron i par **tout autre électron j** , en tenant compte de la situation de l'électron i .



L'énergie de l'électron de l'hydrogénoïde dans le modèle de Slater (figure de droite) est donnée par l'expression suivante :

$$E_n(eV) = -13,6 \frac{(Z^*)^2}{n^2}$$

Il faut suivre la démarche suivante pour calculer Z^* :

- Ecrire la configuration électronique de l'élément et l'ordonner selon : (1s) (2s,2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p)...
- Choisir l'électron pour lequel on cherche la charge effective. Tous les autres électrons apporteront une contribution partielle s_i à la constante d'écran totale σ . Cette contribution dépend :
 - o du type d'orbitale (s, p), (d) ou (f) de l'électron,
 - o de la couche électronique n de l'électron.
- La valeur de σ_i est résumée dans le tableau suivant.

Constantes d'écran

| électron j/électron i | 1s | 2s 2p | 3s 3p | 3d | 4s 4p | 4d |
|-----------------------|------|-------|-------|------|-------|------|
| 1s | 0,30 | | | | | |
| 2s 2p | 0,85 | 0,35 | | | | |
| 3s 3p | 1 | 0,85 | 0,35 | | | |
| 3d | 1 | 1 | 1 | 0,35 | | |
| 4s 4p | 1 | 1 | 0,85 | 0,85 | 0,35 | |
| 4d | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0,35 |

Exemple : charge effective d'un électron externe de l'azote

L'azote ${}_7N$ a pour configuration électronique : $1s^2 2s^2 2p^3$. On peut l'écrire sous la forme : $(1s)^2 (2s, 2p)^5$.

Un électron de la couche externe (2s, 2p) a donc comme électrons d'écran :

4 électrons (s, p) de la couche n : $\sigma_i = 0,35$,

2 électrons s de la couche $n-1$: $\sigma_i = 0,85$.

On en déduit : $\sigma = (2 \times 0,85) + (4 \times 0,35) = 3,10$

Donc la charge effective : $Z^* = Z - \sigma = 7 - 3,1 = 3,9$