

Exercice III-10:

Modèle de Slater et calcul des énergies de l'azote et de ses ions

Énoncé

- 1- Définir l'énergie de première ionisation et l'affinité électronique de l'atome d'azote.
- 2- Quelle est la charge effective ressentie par chaque électron de valence dans les espèces suivantes :
 ${}^7\text{N}$ ${}^7\text{N}^+$ ${}^7\text{N}^-$
- 3- Calculer l'énergie totale des électrons de valence pour ces trois espèces.
- 4- En déduire l'énergie de première ionisation et l'affinité électronique de l'atome d'azote.
- 5- Que peut-on en conclure quant à la stabilité de N^- par rapport à l'atome neutre ?

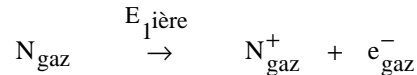
Données : Constantes de Slater :

groupe de l'électron étudié	Contribution des autres électrons						couches supérieures
	couches n-2, n-3	couche n-1	autres électrons de niveau n				
			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

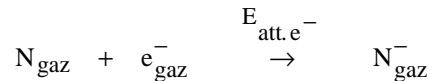
Energies des orbitales atomiques de l'azote (en eV)		
E_{1s}	E_{2s}	E_{2p}
-425,26	-25,72	-15,44

Correction :

- 1- Le potentiel (ou énergie) de première ionisation d'un élément est l'énergie qu'il faut fournir à cet élément en phase gazeuse pour lui arracher un électron (considéré en phase gazeuse) et former son ion en phase gazeuse soit :



L'affinité électronique (grandeur positive en générale) est l'opposé de l'énergie d'attachement électronique (ou est égale à l'énergie d'ionisation de l'anion N^-) c'est-à-dire l'énergie que cède l'atome lorsqu'il capte un électron (grandeur négative en général) :



- 2- Charge effective ressentie par chaque électron de valence dans les espèces suivantes :

- ${}^7\text{N} : Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}) = Z_{\text{noyau}} - \sigma_{2s,2p}^{\text{N}}$

$$\text{avec } \sigma_{2s,2p}^{\text{N}} = 2 \cdot 0,85 + 4 \cdot 0,35 = 3,1$$

$$\text{soit } Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}) = 3,9$$

- ${}^7\text{N}^+ : Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}^+) = Z_{\text{noyau}} - \sigma_{2s,2p}^{\text{N}^+}$

$$\text{avec } \sigma_{2s,2p}^{\text{N}^+} = 2 \cdot 0,85 + 3 \cdot 0,35 = 2,75$$

$$\text{soit } Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}^+) = 4,25$$

- ${}^7\text{N}^- : Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}^-) = Z_{\text{noyau}} - \sigma_{2s,2p}^{\text{N}^-}$

$$\text{avec } \sigma_{2s,2p}^{\text{N}^-} = 2 \cdot 0,85 + 5 \cdot 0,35 = 3,45$$

$$\text{soit } Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}^-) = 3,55$$

- 3- L'énergie totale des électrons de valence pour ces trois espèces est calculée à partir de l'énergie de l'orbitale 2s,2p et du nombre d'électrons l'occupant :

$$E_{2s,2p}(\text{N}) = -5 \cdot 13,6 \cdot \left(\frac{Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N})}{2} \right)^2 = -258,57 \text{ eV} ;$$

$$E_{2s,2p}(\text{N}^+) = -4 \cdot 13,6 \cdot \left(\frac{Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}^+)}{2} \right)^2 = -245,65 \text{ eV} ;$$

$$E_{2s,2p}(\text{N}^-) = -6 \cdot 13,6 \cdot \left(\frac{Z_{2s,2p}^{\text{eff}}(\text{N}^-)}{2} \right)^2 = -257,09 \text{ eV}$$

4- L'énergie de première ionisation vaut :

$$E.I = E_{2s,2p}(\text{N}^+) - E_{2s,2p}(\text{N}) = 12,92 \text{ eV}$$

et l'affinité électronique de l'atome d'azote vaut :

$$A.E = E_{2s,2p}(\text{N}) - E_{2s,2p}(\text{N}^-) = -1,48 \text{ eV}.$$

5- On peut conclure que N^- est moins stable que l'atome neutre ce qui peut simplement s'expliquer par le fait que la sous-couche p de l'azote est à moitié remplie donc particulièrement stable.