Constantes

Constante de Planck : h= 6.62×10^{-34} J s

Vitesse de la lumière : c= 3×10^{8} $m\cdot s^{-1}$

Charge de l'électron : e = 1.60×10^{-19} C

Masse de l'électron : m_e= 9.11×10^{-31} kg

Masse du proton: m_p =1.673×10^{-27} kg

Masse du neutron m_n =1.675×10^{-27} kg

1 eV = 1.602×10^{-19} J

1 uma = 1.66054×10^{-27} kg

$N_A = 6.022 \times 10^{23}$ mol^{-1}

$m_e = e = \hbar = 4\pi\varepsilon_0 = 1$ en unités atomiques

Constante de Rydberg : $\mathfrak{R} = 3.29 \cdot 10^{-15}$ Hz

Constante diélectrique du vide ε_0 :8.8542×10^{-12} As/Vm

***Constante de Slater* Rappel :** $Z_{eff} = Z - \sum S$

Si l'on considère un électron de valence n_is ou n_ip:

- chaque électron de la même couche ($n = n_i$) et $l = 0$ ou 1 ⇒ $S = 0.35$
- chaque électron avec $n = n_i$-1 ⇒ S = 0.85
- chaque électron avec $n = n_i$-2 ⇒ S = 1.00

Fonctions d'onde, opérateurs et énergies

Les fonctions d'onde de la particule dans la boîte à une dimension:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) : n = 1,2,3,\ldots$$

Les fonctions d'onde de la particule dans la boîte à trois dimension:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L}}\sin\left(\frac{n_x\pi z}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{L}\right) : n = 1,2,3,\ldots$$

Les fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène :

1*s* $$\psi = \left(\frac{1}{\pi a_0^{3}}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

2*s* $$\psi = -\frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a_0^{3}}\right)^{1/2}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$$

2*p* $$\psi = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi a_0^{5}}\right)^{1/2} r e^{-r/2a_0}\begin{cases} \cos\theta & (2p_z) \\ \sin\theta\cos\phi & (2p_x) \\ \sin\theta\sin\phi & (2p_y) \end{cases}$$

3*s* $$\psi = \frac{1}{9}\left(\frac{1}{3\pi a_0^{3}}\right)^{1/2}\left(3 - \frac{2r}{a_0} + \frac{2r^2}{9a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$$

3*p* $$\psi = -\frac{2}{27}\left(\frac{1}{2\pi a_0^{5}}\right)^{1/2}\left(2 - \frac{r}{3a_0}\right) r e^{-r/3a_0}\begin{cases} \cos\theta & (3p_z) \\ \sin\theta\cos\phi & (3p_x) \\ \sin\theta\sin\phi & (3p_y) \end{cases}$$

3*d* $$\psi = \frac{1}{81}\left(\frac{1}{6\pi a_0^{7}}\right)^{1/2} r^2 e^{-r/3a_0}\begin{cases} (3\cos^2\theta - 1) & (3d_{z^2}) \\ 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta\cos\phi & (3d_{zx}) \\ 2\sqrt{3}\sin\theta\cos\theta\sin\phi & (3d_{yz}) \\ \sqrt{3}\sin^2\theta\cos 2\phi & (3d_{x^2-y^2}) \\ \sqrt{3}\sin^2\theta\sin 2\phi & (3d_{xy}) \end{cases}$$

Note: In each case, $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$, or close to 52.9 pm.

Hamiltonien de l'atome polyélectronique

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i} + \sum_{j>i}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}\right)$$

L'énergie réticulaire (kJ·mol^{-1}):

$$E^R = \frac{z_1 z_2 N_A q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r} M$$