

## Point méthode – Charge nucléaire effective (CNE ou Z\*)

### I. Calcul de CNE

Partons d'un exemple, l'atome de Nickel Ni ( $Z = 28$ ).

Pour faire une CNE on regarde d'abord la configuration électronique de l'atome. Ici  $Z = 28$ . Pour placer ces électrons on utilisera la règle de remplissage des couches de Klechkowski :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$  ( $2 + 2 + 6 + 2 + 6 + 2 + 8 = 28$ ).

On doit ensuite calculer la somme des écrantages ( $\Sigma\sigma$ ). Pour cela il faut utiliser le tableau des écrantages du modèle de Slater (en fin de fiche).

**Remarque** – Le tableau ne sera donné en exercice qu'à partir de la 3d (peut changer selon l'année, vérifiez bien ce que la prof dira pour vous).

Ici nous finissons en 4s. La 4s a le  $n$  le plus grand (pas pareil que l'ordre de remplissage des sous-couches) donc nous regarderons la ligne de 4s pour faire notre calcul :  $\Sigma\sigma = (2 \times 1(1s)) + (8 \times 1(2s2p)) + (8 \times 0,85(3s3p)) + (8 \times 0,85(3d)) + (1 \times 0,35(4s4p)) = 23,95$ .

**Remarque** – Pensez bien à retirer un électron de la couche étudié pour le calcul car un électron ne s'écrante pas lui-même.

Pour obtenir la CNE il suffira de soustraire  $\Sigma\sigma$  au  $Z$  de l'atome étudié :  $Z^* = Z - \Sigma\sigma = 28 - 23,95 = 4,05$ .

### II. Calcul du rayon atomique

Continuons avec l'atome de Nickel Ni ( $Z=28$ ).

On utilisera la formule du calcul du rayon atomique :  $R_a = (n^{*2} / Z^*) \times a_0$ .

$Z^*$  veut dire **CNE** de l'atome donc la première chose à faire pour calculer le rayon d'un atome est de calculer sa CNE comme vu précédemment.

$n^*$  est le numéro principal de la couche de valence après correction. Ici on finit en 4s donc  $n = 4$  sans correction. Or, à partir de  $n = 4$  il faut appliquer une correction à ce nombre à l'aide du tableau ci-dessous :

$n$	1	2	3	4	5	6
Remplacé par $n^*$	1	2	3	3,7	4,0	4,2

Ici  $n^* = 3,7$ .

$a_0$  est une constante, le rayon de l'atome de Bohr tel que  $a_0 = 52,9$  pm.

On aura donc :  $R_a = (3,7^2 / 4,05) \times 52,9 = 178,82$  pm.

Électron étudié	Coefficients d'écran						
	1s	Type d'électron faisant écran					
	1s	2s2p	3s3p	3d	4s4p	4d	4f
1s	0,31	0	0	0	0	0	0
2s2p	0,85	0,35	0	0	0	0	0
3s3p	1	0,85	0,35	0	0	0	0
3d	1	1	1	0,35	0	0	0
4s4p	1	1	0,85	0,85	0,35	0	0
4d	1	1	1	1	1	0,35	0
4f	1	1	1	1	0,85	0,85	0,35