

TD Modèle quantique de l'atome et classification périodique

Ex 1 : nombres quantiques (*)

- Les triplets suivants de nombres quantiques sont-ils possibles ou non pour un électron :
 $(n = 3, l = 0, m = 0)$ $(n = 3, l = 2, m = 0)$ $(n = 0, l = 0, m = 0)$
 $(n = 2, l = 1, m = -1)$ $(n = 3, l = 1, m = -2)$ $(n = 5, l = 3, m = 2)$
- Lorsque ces triplets de nombres quantiques sont possibles, donner le nom de la sous-couche électronique correspondante.

Ex 2 : L'atome d'hydrogène et les transitions électroniques (**)

- Quelle est l'OA décrivant l'état fondamental de l'atome d'hydrogène ? On précisera les valeurs des nombres quantiques correspondants.
- De quels nombres quantiques dépend l'expression de l'énergie de l'atome d'hydrogène ? Donner l'énergie du niveau fondamental pour l'hydrogène.

On soumet l'atome d'hydrogène initialement dans son état fondamental à un rayonnement de longueur d'onde $\lambda = 102,8 \text{ nm}$.

- Le rayonnement est-il absorbé. Si oui, préciser l'énergie de l'état excité éventuellement atteint.
- Quel nombre quantique caractérise la couche occupée par l'électron dans cet état excité ?
- Quelles sont dans cette couche les orbitales atomiques susceptibles d'être occupées par l'électron ?
- On soumet ces atomes excités à un rayonnement de longueur d'onde $\lambda = 1283 \text{ nm}$. Ce rayonnement est-il absorbé ? Si oui, quel est le nouvel état de l'atome ?
- Mêmes questions pour un rayonnement de longueur d'onde $\lambda = 750 \text{ nm}$ et pour un rayonnement de longueur d'onde $\lambda = 1169 \text{ nm}$.

Données :

$$\begin{aligned}e &= 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ C} \\h &= 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \\c &= 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \\NA &= 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}\end{aligned}$$

Ex 3 : configuration électronique (*)

- Donner la configuration électronique dans l'état fondamental des atomes suivants : Ne ($Z = 10$), P ($Z = 15$), Sc ($Z = 21$), V ($Z = 23$), Ni ($Z = 28$), Pd ($Z = 46$) et Gd ($Z = 64$).
- Indiquer pour chaque atome les électrons de cœur et de valence.
- Donner la configuration électronique dans l'état fondamental des ions suivants : Ni^{2+} , V^{3+} , Ca^{2+} ($Z(\text{Ca}) = 20$) et S^{2-} ($Z(\text{S}) = 16$).

Ex 4 : exception à la règle de Klechkowsky (*)

Le molybdène (du grec ancien μόλυβδος / molubdos signifiant plomb) est un métal de transition. Ses composés naturels ont été confondus jusqu'au XVIII^{ème} siècle avec des composés d'autres éléments tels que le carbone ou le plomb. L'addition d'une faible quantité de molybdène durcit l'acier. Plus des deux tiers de la production de molybdène sont utilisés dans les alliages.



- Établir la configuration électronique de l'atome de molybdène Mo ($Z = 42$) à l'état fondamental en utilisant les règles classiques. Remplir le diagramme énergétique pour les OA de valence.
- En fait, les énergies des OA 5s et 4d sont pratiquement égales. Quelle conclusion peut-on en tirer en ce qui concerne le remplissage des OA ? En appliquant la règle de Hund, donner la configuration électronique effectivement observée pour l'atome de molybdène à l'état fondamental.

Ex 5 : un peu d'imagination (*)

La chimie évolue et rien ne dit que des choses impossibles aujourd'hui ne deviennent accessibles demain... La théorie quantique prévoit l'existence d'orbitales ng correspondant à la valeur $l = 4$ pour le nombre quantique secondaire.

- Préciser le nombre d'électrons que peut alors contenir une sous-couche ng et la plus petite valeur de n possible pour cette sous-couche.
- Prévoir à l'aide de la règle de Klechkowski, après quelle sous-couche doit intervenir le remplissage de la première sous-couche ng .
- En déduire le numéro atomique de l'élément dont la configuration électronique se terminerait par $(ng)^1$.

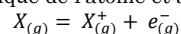
Ex 6 : lien configuration électronique – classification périodique (*)

- Donner la configuration électronique des éléments suivants à l'état fondamental : silicium Si ($Z = 14$), rubidium Rb ($Z = 37$), manganèse Mn ($Z = 25$) et mercure Hg ($Z = 80$). Identifier leur électrons de valence.
- En déduire leur position dans la classification périodique.
- Donner la configuration électronique des atomes suivants à l'état fondamental en utilisant pour seule donnée leur position dans la classification.
 - Le strontium Sr appartient à la 5^{ème} période et à la 2^{ème} colonne.
 - Le soufre S appartient à la 3^{ème} période et à la 16^{ème} colonne.
 - L'antimoine Sb appartient à la 5^{ème} période et à la 15^{ème} colonne.
 - Le cobalt Co appartient à la 4^{ème} période et à la 9^{ème} colonne.

Ex 7 : éléments de la 2^{ème} période de la classification périodique (**)

- Donner la configuration électronique des atomes de carbone (Z = 6), d'azote (Z = 7) et d'oxygène (Z = 8).
- Les éléments de la 2^{ème} période existent sous forme de différents isotopes.
 - Citer deux isotopes du carbone. Donner la structure du noyau et la configuration électronique dans chaque cas.
 - L'oxygène existe essentiellement sous deux formes isotopiques ¹⁶O et ¹⁸O dont les masses molaires sont respectivement M(¹⁶O) = 15,9949 g.mol⁻¹ et M(¹⁸O) = 17,9922 g.mol⁻¹. Sachant que la masse molaire de l'oxygène naturel est M = 15,9989 g.mol⁻¹, calculer les proportions des deux isotopes.

L'énergie de première ionisation E_{i1} est l'énergie nécessaire pour arracher à l'état gazeux un premier électron du cortège électronique de l'atome et associée au processus :



L'énergie de première ionisation de certains éléments de la 2^{ème} période est donnée dans le tableau suivant :

	Li	Be	B	C	N	O	F
Numéro atomique	3	4	5	6	7	8	9
E _{i1} (en eV)	5,32	9,32	8,29	11,26	14,53	13,62	17,42

- Donner la structure électronique de l'élément de la 2^{ème} période non présent dans le tableau ci-dessus. A quelle colonne de la classification périodique appartient-il ?
- Justifier que l'énergie de première ionisation du Lithium soit faible tandis que celle du fluor soit importante.
- Donner la configuration électronique du cation X_(g)⁺ obtenu après ionisation des éléments suivant : Be, B, N et O.
- Justifier alors que, contrairement à l'évolution générale, E_{i1}(Be) > E_{i1}(B) et E_{i1}(N) > E_{i1}(O).

On donne en vrac la valeur des rayons atomiques des 7 éléments étudiés : 50 pm, 60 pm, 65 pm, 70 pm, 85 pm, 105 pm et 145 pm.

- Attribuer chaque rayon à un élément de la 2^{ème} période.
- Donner la configuration électronique de l'ion le plus stable formé par les éléments suivants : Li, O et F.
- A quelle famille appartient le Lithium ? Cet élément fait-il parti des métaux ? Même question pour le fluor.

Ex 8 : ionisation du fer (**)

Le fer Fe a pour numéro atomique Z = 26.

- Ecrire la configuration fondamentale du fer. Identifier les électrons de valence.

En 1930, le physicien John Clarke Slater propose un modèle pour calculer la charge effective ressentie par un électron dans un atome. Ce modèle permet de calculer notamment l'énergie et le rayon des orbitales atomiques.

Les règles de Slater sont des règles empiriques permettant de calculer la constante d'écran σ_i pour l'électron i :

→ l'effet d'écran exercé sur l'électron i par l'électron j dépend de la position respective moyenne de ces deux électrons

→ si j en moyenne plus éloigné du noyau que i : l'effet d'écran faible

→ si j en moyenne plus près du noyau que i : l'effet d'écran fort

On répartit les électrons en plusieurs gp : (1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f)...

La constante d'écran de l'électron σ_i étudié est obtenue en additionnant les facteurs d'écrantage traduisant l'écrantage exercé par les électrons appartenant au même groupe ou aux groupes inférieurs. Le tableau ci-dessous résume les règles de Slater pour le calcul d'un écrantage σ_i.

Electron étudié (niveau n)	Contribution des autres électrons						Niveaux supérieurs
	Niveaux n' < n - 1	Niveaux n - 1	Autres électrons du niveau n				
			1s	s, p	d	f	
1s			0,3				0
ns, np	1	0,85		0,35	0	0	0
nd	1	1		1	0,35	0	0
nf	1	1		1	1	0,35	0

Le rayon de l'OA occupée par l'électron est donné par :

$$r_{(n,l)} = \frac{n^2}{Z - \sigma_i} a_0$$

avec a₀ = 52,9 pm : rayon de Bohr

L'énergie de l'électron est donnée par :

$$E_i = -13,6 \left(\frac{Z - \sigma_i}{n_i^*} \right)^2 \quad (\text{en eV})$$

L'énergie totale d'un atome à N électrons est donnée par :

$$E = -13,6 \sum_{i=1}^N \left(\frac{Z - \sigma_i}{n_i^*} \right)^2 \quad (\text{en eV})$$

Avec : n_i^{*} nombre quantique apparent est obtenu à partir de n :

n	1	2	3	4	5	6
n _i [*]	1	2	3	3,7	4,0	4,2

- Calculer, dans le modèle de Slater, la charge effective et le rayon des orbitales atomiques de valence.

On désire savoir, lors du passage de Fe à Fe²⁺, quels sont les électrons qui sont préférentiellement éjectés : 2 électrons 4s, ou 2 électrons 3d.

- Calculer l'énergie de Fe²⁺, lorsque 2 électrons 4s ont été éjectés.
- Calculer l'énergie de Fe²⁺, lorsque 2 électrons 3d ont été éjectés.
- Conclure. Aurait-on pu prévoir qualitativement le résultat, à l'examen des résultats du 2. ?