Ex 1 : autour des nombres quantiques :

1. Citer les différentes sous couches correspondant au nombre quantique principal n = 4 ;

2. Préciser les quadruplets de nombres quantiques possibles commençant par (3,1, …., ….) et (3, 2, …., ….)

3. Les triplets de nombres quantiques suivants sont-ils possibles pour un électron ? Si oui, identifier la sous-couche associée.

(5,0,2) ; (2,2,0) ; (0,0,0) ; (4,1,1) ; (3,2,-1)

4. Expliquer à l'aide des propriétés des nombres quantiques pourquoi le bloc d comporte 10 colonnes, et pourquoi le bloc f en comporte 14.

5. Le bloc g (les superactinides) (*)

a. A quelle valeur de ℓ correspond le bloc g ?

b. A l'aide de la règle de Klechkowski, déterminer le numéro atomique du premier élément appartenant au bloc g.

c. Sur quelle ligne de la classification apparaitrait-il ? Quelle serait la largeur de ce bloc ? où serait placer ce bloc (par rapport aux autres blocs) ?

Ex 2 : Configurations électroniques .

1/ Parmi les configurations électroniques suivantes d'un atome, entourer celles qui correspondent à un état fondamental. Parmi les configurations non encore entourées, lesquelles pourraient correspondre à celle d'un ion dans son état fondamental ?

a- $1s^1 2s^1 2p^1$ b-$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^1$

c- $1s^1 2s^2 2p^6$ d- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 4p^1$

e- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$ f-$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9$

g- $1s^2 2s^1 2p^3$ h- $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 3f^1 4s^2$

&2/ Parmi les structures électroniques suivantes d'**atome**, quelles sont celles qui correspondent à un état fondamental, à un état excité ou n'existe pas. Expliquer.

	3s	3p			4s		3d			
a-	↑↓	↑	↑	↑						
b-	↑	↑	↑							
c-	↑↓	↑	↑	↑						
d-	↑↓	↑	↑	↓						
e-	↑↓	↑↓	↑							
f-	↑↓	↑↑	↑	↑						
g-	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓				
h-	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑			
i-	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓		↑	↑	↑		

Ex 3 : Configurations électroniques.

1. Décrire les configurations électroniques dans l'état fondamental des atomes ou des ions suivants : Cl^-, Mn^{2+}, Ar, Ca^{2+}, Fe^{3+}, Kr, Br^-, I^-. Pour chaque configuration, distinguer les électrons de cœur des électrons de valence.

2. En utilisant uniquement les données du tableau ci-dessous, citer trois ions isoélectroniques du néon Ne (ayant même configuration électronique que le néon). Expliquer.

élément	Cl	Na	Fe	Ar	O	Ca	Mg	Kr	Br	I	Ne
Z	17	11	26	18	8	20	12	36	35	53	10

Ex 4 : Atome d'hydrogène excité.

On considère l'atome d'hydrogène dans l'état excité 3p.

Quelles sont les transitions d'émission possibles ? Les représenter sur un schéma.

Calculer les longueurs d'onde des photons associées à ces transitions.

Quel est le potentiel d'ionisation de l'hydrogène dans cet état (en eV et en $kJ.mol^{-1}$), c'est-à-dire l'énergie qu'il faut fournir à l'atome pour l'ioniser (vous pourrez vous aider du schéma précédent) ?

Ex 5 : Hydrogénoïdes.

1. Calculer en eV l'énergie d'ionisation des ions He^+ et C^{5+} dans leur état fondamental. Comment expliquer une telle différence ?

2. On considère l'ion B^{4+} dans son état 6d. Combien de fonctions propres dégénérées peuvent le décrire ? Combien de raies contient son spectre d'émission ? Quelle est son énergie d'ionisation ?

Ex 6 : une petite série d'exercices à résoudre <u>sans classification périodique sous les yeux :</u>

1. Donner la structure électronique de l'étain (Z = 50) dans son état fondamental ; combien a-t-il d'électrons de valence ?

Citer un élément de la même famille.

Quelle est la structure électronique du gaz rare précédant l'étain dans la classification périodique ?

2. Etablir la configuration électronique dans l'état fondamental de l'iridium (Z=77) ; en déduire sa position dans la classification périodique.

3. Sachant que l'arsenic As appartient à la 15e colonne et à la quatrième période, donner sa configuration électronique fondamentale.

4. Le calcium est le troisième élément de la famille des alcalino-terreux (2eme colonne). Donner sa configuration électronique fondamentale, et en déduire son numéro atomique.

Ex 7 : évolution de l'énergie d'ionisation :

Document : Energie d'ionisation

Le potentiel d'ionisation ou énergie d'ionisation d'un atome ou d'une molécule est l'énergie qu'il faut fournir à un atome neutre pour arracher un électron (le moins lié) à l'état gazeux et former un ion positif.

La réaction de première ionisation de l'atome A s'écrit : $A(g) \rightarrow A^+(g) + 1\ e^-$

Une évaluation de l'énergie d'ionisation peut être donnée par $EI = E(A^+) - E(A)$

D'une façon générale, les énergies d'ionisation décroissent le long d'une colonne du Tableau périodique des éléments et croissent de gauche à droite le long d'une période de la table.

On donne les valeurs des énergies de première ionisation des éléments des groupes s et p de la quatrième période :

	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
EI (eV)	4,34	6,11	6,00	7,90	9,81	9,75	11,81	14,0

L'évolution générale est-elle en accord avec l'évolution classique au sein du tableau périodique ? Expliquer cette évolution générale au sein d'une période en cinq lignes maximum.

Expliquer les irrégularités locales dans cette évolution générale.

Ex 8. Atomes polyélectroniques

1. Etablir la configuration électronique de l'atome de vanadium (Z = 23) dans l'état fondamental.

2. Identifier les électrons de cœur, de valence. Placer l'atome dans la classification.

Quels sont les nombres d'oxydation minimum et maximum, et les plus stables, du vanadium.

Des règles empiriques (règles de Slater) permettent d'établir pour les électrons de valence du vanadium dans ces conditions : Z*4s = 3,30 et Z*3d = 4,30

3. Calculer l'énergie totale (en eV) des électrons de valence du vanadium dans la configuration électronique proposée.

4. Considérons l'atome de vanadium dans la configuration électronique hypothétique pour laquelle tous les électrons de valence sont rassemblés dans des orbitales 3d. Ecrire cette configuration électronique. Quelle règle de remplissage n'est pas respectée ?

Des règles de Slater permettent d'établir dans ces conditions : Z*3d = 3,60

5. Calculer l'énergie totale (en eV) des électrons de valence du vanadium dans la configuration électronique proposée. Commenter ce résultat en considérant que l'énergie des électrons de cœur est la même pour les deux configurations proposées.

Données : corrélation entre le nombre quantique principal n et le nombre quantique effectif n*

n	1	2	3	4	5
n*	1	2	3	3.7	4

Ex 9 : pour aller plus loin (💣💣💣 MATHS 💣💣💣)

Soit l'OA 1s de l'atome d'hydrogène : $\Psi_{1s} = N\,exp\left(\frac{-r}{a_0}\right)$ avec N = constante, a_0 = 52 pm = rayon de la première orbite de Bohr

1. Exprimer la probabilité élémentaire dP de trouver l'électron dans un volume dV autour du point M(r,θ,φ). On donne l'élément de volume dV en coordonnées sphériques : On donne en coordonnées sphériques dV =(dr)×(rdθ)×(r sin(θ)dϕ).

2. Comment pourrait-on déterminer la constante N ? Faire le calcul. On donne $\int_0^{+\infty} u^2 \exp(-u)\, du = 2$

3. En intégrant sur les parties angulaires, déterminer la probabilité radiale dP(r) (probabilité de trouver l'électron entre r et r+dr, tous angles confondus). Evaluer la densité radiale $DR = \frac{dP(r)}{dr}$

4. Montrer que la densité de probabilité radiale passe par un maximum et calculer le rayon r correspondant.

5. On donne la partie radiale de l'OA 2s de l'atome d'hydrogène : $R_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8a_0^3}}(2 - \frac{r}{a_0})\,exp(\frac{-r}{2a_0})$

Déterminer le rayon orbitalaire des électrons 2s en calculant le maximum de la densité de probabilité radiale de l'OA 2s.