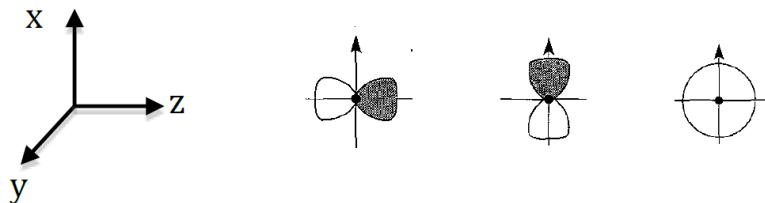


TD : Q_1 Modèle quantique de l'atome

Exercice 1 : Représentation conventionnelles des OA (*)

1. Nommer les orbitales atomiques représentées ci-après.



2. Indiquer si ces orbitales atomiques sont symétriques ou antisymétriques par rapport aux plans (xOy), (yOz) et (xOz).

3. Ces orbitales atomiques présentent-elles des surfaces nodales ? Si oui, les indiquer.

Exercice 2 : Autour de la configuration électronique (**)

1. Donner la structure électronique dans l'état fondamental des ions et atomes suivants :

N ; Cu ($Z=29$) ; Fe^{2+} ($Z=26$) ; Cr ($Z=24$) ; I^- ($Z=53$) ; Ce ($Z=58$)

2. Le chrome et le cuivre ont des configurations à l'état fondamental qui n'obéissent pas à la règle de Klechkowski. Justifier pourquoi.

3. Pour chacune des configurations précédentes, souligner les électrons de valence et représenter les orbitales atomiques des électrons de valence.

4. Quelle est la position dans la classification (période, colonne) des éléments suivants :

- Niobium ($_{41}\text{Nb}$)

- Bore ($_{5}\text{B}$)

5. Le polonium (Po) appartient à la colonne 16 et à la sixième période. Quel est son numéro atomique ?

6. Sans regarder la classification, donner la configuration électronique dans l'état fondamental des atomes des éléments désignés par :

- Période 3, colonne 17

- Période 4, colonne 4

7. Indiquer les ions que peuvent former les éléments de la question 4.

8. Le brome appartient à la colonne de $_{9}\text{F}$ et à la période de $_{19}\text{K}$. Déterminer son numéro atomique et sa configuration électronique dans l'état fondamental. A quelle famille chimique appartient-il ? Citer deux autres éléments de la famille et une propriété chimique de cette famille.

9. A quelle famille appartiennent le lithium, le sodium et le potassium ?

Exercice 3 : Diagramme énergétique (**)

Établir et remplir les diagrammes énergétiques à l'état fondamental des atomes et des ions suivants (on ne cherchera pas à calculer les niveaux d'énergie). Donner leur nombre d'électrons célibataires.

- $_{5}\text{B}$

- $_{17}\text{Cl}^-$

Exercice 4 : Évolution de quelques propriétés dans le tableau périodique (**)

Pour cet exercice, il est possible de s'aider de la classification périodique.

1. Pour chacun des couples suivants, déterminer l'élément qui a le plus grand rayon atomique. Justifier.

a. C ou O ? b. B ou Al ? c. F ou F⁻ ?

2. Définir la polarisabilité d'un atome. Pour chacun couples précédent, déterminer l'élément le plus polarisable.

3. On donne les énergies des OA de valence (en eV) de la famille des halogènes. Justifier les évolutions de ces grandeurs.

	F	Cl	Br
ns	- 40,1	- 25,3	- 24,5
np	- 18,6	- 13,7	- 12,6

4. On donne les énergies de troisième ionisation de quelques éléments de la période du manganèse ($Z_{\text{Mn}} = 25$) :

Elément	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
El ₃ (eV)	24,8	27,5	29,3	31,0	33,7	30,6	33,5	35,2	36,8

4.1. A quel bloc appartiennent ces éléments ?

4.2. Expliquer l'allure générale de ce tableau, fonction globalement croissante du numéro atomique Z.

4.3. Expliquer les particularités locales de ce tableau.

Exercice 5 : Diagramme d'OA et spectre d'émission pour un atome hydrogénoïde (**)

L'ion He⁺ est un ion hydrogénoïde que l'on rencontre au sommet de l'ionosphère de la Terre, provenant d'un atome d'hélium auquel un électron a été arraché par un rayonnement UV provenant du Soleil.

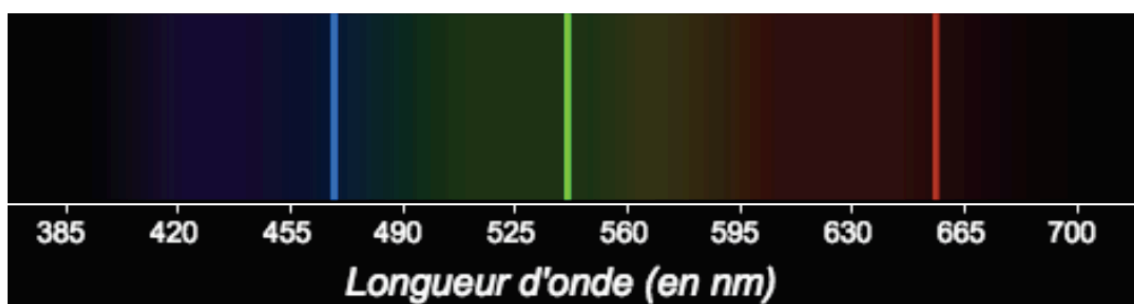
1. Représenter le diagramme énergétique de l'ion He⁺ ($Z = 2$) en faisant figurer les niveaux $n = 1$ à $n = 3$. Écrire le symbole des orbitales du diagramme et les nombres quantiques associés.

2. Quelle est l'énergie nécessaire (en eV et en kJ/mol) pour exciter cet ion jusqu'à son 3^{ème} état excité ?

3. Le niveau $n = 3$ est dit dégénéré. Expliquer ce que cela signifie. Quelle est sa dégénérescence ?

4. A partir de cet état excité, représenter toutes les désexcitations possibles de cet ion sur le diagramme énergétique.

5. On donne ci-dessous le spectre d'émission de l'ion He⁺. L'une des désexcitations précédentes est-elle responsable d'une des raies ci-dessous ? Justifier.



Données : $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$, $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$, $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Exercice 6 : Utilisation du modèle de Slater (***)

1. Les deux électrons de l'hélium occupent une orbitale atomique 1s dans l'état fondamental.

1.1. Calculer l'énergie de l'atome d'hélium en négligeant la répulsion électronique.

1.2. Sachant que la constante d'écran d'un électron vis-à-vis d'un autre électron s vaut $\sigma = 0,30$, calculer l'énergie de l'atome sans négliger la répulsion électronique.

1.3. La valeur expérimentale est $E(\text{He}) = -79 \text{ eV}$. Conclure.

1.4. Calculer l'énergie de l'ion He^+ . En déduire l'énergie d'ionisation de He. La comparer à la valeur expérimentale : 24 eV .

2. On s'intéresse dans cette partie à l'atome de vanadium ($Z = 23$).

2.1. Établir la configuration électronique de l'atome de vanadium dans l'état fondamental. Identifier les électrons de cœur et les électrons de valence.

Des règles empiriques (règles de SLATER) permettent de calculer la charge fictive subie par les électrons de valence du vanadium dans ces conditions : $Z_{4s}^* = 3,30$ et $Z_{3d}^* = 4,30$.

Dans le modèle de Slater, l'énergie d'un électron appartenant à la couche n s'exprime sous la forme :

$$E_i(\text{eV}) = -13,6 \left(\frac{Z_i^*}{n} \right)^2$$

où la valeur de n^* s'obtient à partir du tableau suivant :

n	1	2	3	4
n^*	1	2	3	3,7

2.2. Calculer l'énergie totale (en eV) des électrons de valence du vanadium dans l'état fondamental.

Exercice 7 : Étude de l'orbitale atomique 1s (*)**

Soit l'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène. On donne :

$$\Psi_{1s}(r) = \kappa \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

où κ est une constante et $a_0 = 52 \text{ pm}$ le rayon de la première orbite de Bohr.

1. Exprimer la probabilité dP de trouver l'électron dans un volume dV autour du point $M(r, \theta, \phi)$.

2. Comment déterminer la constante κ ? Le calcul explicite n'est pas demandé.

3. En intégrant sur les parties angulaires, déterminer alors la probabilité radiale dPr (probabilité de trouver l'électron entre r et $r+dr$, tout angle confondu). Évaluer la densité radiale de probabilité.

4. Montrer que la densité radiale de probabilité passe par un maximum pour une certaine valeur de r . Interpréter l'existence de cette valeur.