Département de Chimie **2021/2022**
Faculté des Sciences et Techniques
Université Cheikh Anta Diop/ Dakar

L_1PCSM - ATOMISTIQUE

Séries 5 et 6

Série 5 : Hydrogène et hydrogénoïdes en mécanique quantique

Exercice 1 : Fonction d'onde – Equation de Schrödinger

1) Définir la notion de fonction d'onde.

2) La fonction d'onde $\Psi(x)$d'une particule de masse m qui ne peut se mouvoir que le long d'un segment $[0, L]$ sur l'axe des x. Son énergie potentielle est telle V(0) = V(L) = 0 :

a) Donner l'équation de Schrödinger de la fonction d'onde $\Psi(x)$ associée à cette particule en fonction de $\alpha = \frac{8\pi^2 mE}{h^2}$ (avec E énergie totale de la particule et $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$).

b) Déterminer l'expression des valeurs possibles de E_n de cette particule. Montrer qu'elle est quantifiée.

c) Donner l'expression des fonctions d'onde associées à cette particule

Exercice 2 : **Nombres quantiques**

1) Définir la notion d'orbitale atomique OA et donner sa signification physique. Quels sont les nombres quantiques qui la caractérisent.

2) Définir ces nombres quantiques et donner leurs significations physiques.

3) Quelles sont les valeurs de (n, ℓ, m) pour les trois premières couches et donner les noms des orbitales atomiques (ou OA) correspondants.

4) Quelles sont les valeurs des nombres quantiques (n, l, m_l) des fonctions d'onde des O.A ; suivantes : $2p_{-1}$, $1p_{+1}$, $3d_{+3}$, 4s, $5f_{-3}$ et $4f_{-2}$

5) Combien d'orbitale atomique existe-il pour $n = 4$; $pour\ n = 4, l = 2\ et\ et\ pour\ n = 4, l = 3, m = -1$

Exercice 3 : Fonctions d'ondes-Densité de probabilité et rayons probables

1) Pour chacune des fonctions d'onde associée à un hydrogénoïde suivantes donner le triplet de nombre quantiques qui les caractérisent et déduire l'OA correspondante.

a) $\psi_a = \sqrt{\frac{Z^3}{8a_0^3}} \cdot \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(\frac{-Zr}{2a_0}\right) \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\right]$ b) ψ_b

$$= \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{a_0}} \left[\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta\right]$$

$c)$ $\psi_b = \frac{4}{27\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{3a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{a_0}} \cdot [Ksin\,\theta \cos\varphi]$

2) Pour l'OA ψ_a donner l'expression de la densité de probabilité de présence radiale que l'on notera $D(r)$.

3) Montrer que $D'(r) = \frac{dD(r)}{dr} = \frac{Z^3}{8a_0^3} \cdot r \cdot \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \cdot \left(\frac{Z^2 r^2}{a_0^2} - \frac{6Zr}{a_0} + 4\right) \cdot \exp\left(\frac{-Zr}{a_0}\right)$

4) Déterminer les` rayons les plus probables c'est-à-dire là où la densité de probabilité est maximale.

5) Calculer en **pm** les valeurs de ces deux rayons pour $Z = 8$. *Données : 1* Å = 10^2*pm et* $a_0 = 0{,}529$ Å

Série 6 : Systèmes polyélectroniques

Exercice 1 : Configurations électroniques

1) Définir la configuration électronique d'un élément et rappeler les règles permettant d'établir la configuration électronique d'un atome dans l'état fondamental

2) Classer les orbitales atomiques suivantes d'un atome polyélectronique par énergie croissante : 3s, 2px, 4d, 1s, 2py, 3d, 5px, 3px, 4s, 4f.

3) On considère l'atome de chlore $_{17}$Cl. Donner la configuration de Cl à l'état fondamental, le nombre d'électrons célibataires, d'électrons de valence, d'électrons de nombre quantique secondaire égal 0, 1, ou 2. Donner les nombres quantique du ou des électrons célibataires de Cl et 2 états excités de cet atome

4) Donner les différents états de valence du chlore

5) Écrire la configuration électronique des atomes et ions suivants : $_{8}$O, $_{13}$Al, $_{24}$Cr, $_{26}$Fe; $_{29}$Cu, $_{38}$Sr, $_{42}$Mo, $_{47}$Ag; $_{78}$Pt, $_{87}$Fr; $_{13}Al^{3+}$; Fe^{2+} ; Sr^{2+}puis donner la structure externe à l'aide des cases quantiques.

Exercice 2 : Configuration électronique – Règle de Slater

1. Le zinc a pour numéro atomique Z = 30. Donner la configuration électronique de l'élément en rappelant le nom des principes et règles qui permettent d'obtenir cette configuration.

2. Le seul degré d'oxydation stable du zinc est le degré +II. Donner la configuration électronique de l'ion Zn^{2+}. Le zinc est-il un métal de transition ?

3. Calculer les charges nucléaires effectives des électrons de valence de l'atome de zinc Zn et de l'ion Zn^{2+} à l'aide du modèle de Slater.

4. Expliquer pourquoi la charge effective ressentie par un électron occupant une orbitale 3d est plus forte que celle d'un électron occupant une orbitale 4s. Prévoir, parmi les orbitales 3d et 4s, l'orbitale de rayon atomique le plus grand

Exercice 3 : Exceptions à la règle de Klechkowski (L1PCSM 2020)

On considère les trois éléments de transition suivants : $_{44}Ru$, $_{45}Rh$ et $_{46}Pd$. Ces trois éléments constituent un groupe appelé « triades du ruthénium ».

1) Donner leurs structures électroniques suivant la règle de Klechkowski sous la forme en précisant leur couche de valence : $ns^x(n-1)d^z$

2) *Ces 3 éléments sont des exceptions à la règle de Klechkowski*. Donner leurs structures réelles sachant que pour $_{44}Ru$, et $_{45}Rh$ l'orbitale atomique ns ne contient qu'un seul électron. Proposer une structure pour le $_{46}Pd$.

3) Calculer pour $_{\mathbf{44}}\boldsymbol{Ru}$ les énergies de la couche de valence $ns^x(n-1)d^z$ des deux structures proposées. *Données : E_0=13,6 eV*

4) Comparer les deux valeurs et conclure

Exercice 1 : A propos des alcalins

Le sodium $_{11}Na$, le potassium $_{19}K$, et le rubidium $_{37}Rb$ appartiennent à la famille.

1) Donner leur configuration électronique en précisant leur couche de valence :

2) En utilisant une méthode simple, montrer que l'énergie de première ionisation de ces 3 éléments est de la forme

$$I_i = \frac{K}{n^{*2}}$$

2) Donner l'expression de K et calculer sa valeur en eV.