Département de Chimie **2023/2024**
Faculté des Sciences et Techniques
Université Cheikh Anta Diop/ Dakar

L_1PCSM - ATOMISTIQUE

Série 5

Hydrogènes et hydrogénoïdes en mécanique quantique

<u>Exercice 1</u> : Les Nombres Quantiques

1°)- Quels sont les nombres quantiques définissant une orbitale ? Expliciter leur signification physique.

2°)- Que représente **n** pour une O.A ? Quelles sont les relations liant ces nombres quantiques ?

3°)- On considère les symboles suivants : 1s ; 4p ; 2p ; 2d ; 3d ; 3f ; 1p ; 2f ; 6s ; 5f

Quels sont ceux qui ne représentent pas des orbitales atomiques ? Pourquoi ?

4°)- Par quels symboles désigne-t-on les états quantiques correspondant aux triplets suivants :

(3, 2, +2) - (2, 1, 0) – (3,-2, -1) – (1, 1,0) – (3, 1, 2) – (5, 0, 0) – (6,1, -2) – (6, 4, -3)

5°)- Préciser toutes les valeurs des triplets possibles pour n = 3. Préciser si possible les orbitales atomiques envisagées.

<u>Exercice 2</u> : Orbitales Atomiques, fonction d'onde et densité de probabilité (*L1PCSM -22)*

A - Soit $\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r).Y(\theta,\varphi)$ une orbitale d'un hydrogénoïde de numéro atomique Z.

1°)- De quels nombres quantiques dépendent $R(r)$ et $Y(\theta,\varphi)$?

2°)- Quelles sont les orbitales atomiques pour lesquelles $Y(\theta,\varphi)$ est une constante ? Que valent alors les nombres quantiques dont dépend $Y(\theta,\varphi)$?

B -Soient les fonctions d'ondes suivantes :

$$-\ \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{Z}{a_0}r\right).\left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\right]$$

$$\psi_2 = \left[\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2}{{a_0}^2}r^2 exp\left(-\frac{Z}{3a_0}r\right)\right] sin\theta cos\theta cos\varphi : \quad OA\ de\ type\ nd$$

I-1 Donner la partie angulaire des fonctions

I-2 Donner le nom usuel de ces fonctions d'onde, représenter la ψ_2 en y mettant les signes.

I-3 Etablir l'expression de la densité de probabilité radiale $D(r)$ associée à ψ_1 et déduire les rayons les plus probables

Exercice 3 : ***Représentation d'O.A et fonction d'onde d'un hydrogénoïde*** (*L1PCSM -23*

1-1 Représenter graphiquement les orbitales atomiques OA suivantes : $2p_x$; $3d_{x^2-y^2}$, $3d_{xz}$

1-2 Soit $\psi(r,\theta,\varphi) = \left[K_1\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Z^2}{{a_0}^2}r^2\exp\left(-\frac{Z}{3a_0}r\right)\right][K_2 \sin\theta\cos\theta\cos\varphi]$ une fonction d'onde d'une orbitale atomique de type $\boldsymbol{nd}$. K_1 et K_2 sont des constantes.

1-3 Donner l'expression de la partie radiale $R(r)$ et celle de la partie angulaire $Y(\theta,\varphi)$.

1-4 Déterminer les valeurs des nombres quantiques n et l associés à cette fonction d'onde.

1-5 En passant des coordonnées sphériques aux coordonnées cartésiennes déterminer le nom usuel de cette orbitale atomique

1-6 Donner l'expression de la densité de probabilité présence radiale $D(r) = [R(r)]^2.r^2$.

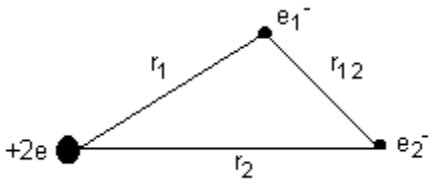
1-7 Montrer que :$D'(r) = K_1\left(\frac{Z}{a_0}\right)^7 r^5 2\left[3-\frac{Zr}{3a_0}\right]\exp(\frac{-2Zr}{3a_0})$

1-8 Déterminer le rayon le plus probable de rencontrer l'électron.

Série 6
Atomes polyélectroniques

Exercice 1 On considère l'atome d'hélium en mécanique quantique, (Z=2).

1)- Donner en fonction de r_1, r_2 et r_{12} les expressions :



a) U_1 et U_2, les énergies potentielles de répulsion entre les électrons

b) U_3 l'énergie potentielle d'attraction entre les électrons et le noyau

c) U l'énergie potentielle totale du système

2) Sachant que les quantités de mouvement des électrons 1 et 2 sont respectivement p_1 et p_2, donner l'expression l'énergie totale du système

3) Calculer la valeur de l'énergie totale du système

-- a) Si l'interaction interélectronique est nulle (c'est-à-dire que l'on peut traiter séparément les 2 électrons évoluant dans le champ du noyau et que le noyau exerce une charge Z sur chaque électron), (cas d'un hydrogénoïde).

--b) En tenant compte de l'interaction interélectronique, un facteur d'écran σ est introduit et chaque électron est attiré avec une charge $Z^* = Z-\sigma$ (σ =0,30). Conclure/

4) Classer les orbitales atomiques suivantes d'un atome polyélectronique par ordre d'énergie croissante : 3s, $2p_x$, 4d, 1s, $2p_y$, 3d, $5p_x$, $3p_x$, 4s, $3p_z$.

Exercice 2 Nombres Quantiques (L1PCSM Juillet 2010)

1)- Écrire la configuration électronique à l'état fondamental de l'azote ($_7$N)

2**)-** Quelles sont les valeurs des quatre nombres quantiques de chaque type d'électron.

3) Quel est le nombre d'électron ayant un nombre quantique secondaire *l* égal à 2 ? magnétique *m* = 1?

4) Quel est le nombre d'électron ayant un nombre quantique *l* = 1 et *m* = 1? *l* =2 et *m*= -1

Exercice 3 : 1)- Écrire la configuration électronique dans l'état fondamental de l'étain $_{50}$Sn. Préciser ses électrons de valence et de cœur (internes).

2)- Représenter en utilisant les cases quantiques le remplissage des OA de valence. Indiquer le nombre d'électrons célibataires et d'électrons appariés.

3)- Citer un élément chimique répandu ayant la même configuration électronique de valence.

4)- Proposer une configuration électronique d'un état excité de l'étain.

5)- Préciser les quadruplets de nombres quantiques représentant un électron d'une orbitale 5p.

6)- L'étain conduit aux ions stanneux Sn^{2+} et stannique Sn^{4+}. Écrire chaque configuration électronique et justifier leur stabilité.

Exercice 4 : Énergie orbitalaire

A - 1) Calculer les différentes énergies orbitalaires de $_{26}$Fe, en déduire celle de l'atome de fer.

2) L'ion Au^{3+} a le même nombre d'électrons que l'osmium $_{76}$Os. Donner la structure électronique de l'atome d'or, dans son état fondamental, selon Klechkowski. Cette configuration n'est cependant pas la plus stable. Expliquer pourquoi et donner sa configuration électronique fondamentale la plus stable.

3) Calculer l'énergie minimale à fournir à l'atome d'or pour former l'ion Au^{3+}

B - 4°)- Évaluer l'énergie orbitalaire du chrome ($Z = 24$) selon que sa configuration électronique suit la règle de Klechkowski (état C) ou qu'elle traduit la règle de Hund, c'est à dire, la multiplicité maximale de la fonction de spin pour les électrons de valence (état D).

5°)- L'expérience montre que la structure électronique du chrome à l'état fondamental est plutôt conforme à l'état D : quelles conclusions pouvez-vous en tirer en ce qui concerne le modèle de Slater.