Atomistique - TD Série N°3 / 2019/2020

Correction

Pr. A. AIT-HOU

Exercice N°1 : Les nombres quantiques qui permettent de décrire l'état d'un électron sont :

- le nombre quantique principal n qui caractérise la couche (n=1, couche K ; n=2 couche L ....)
- le nombre quantique secondaire l qui caractérise la sous couche (l=0, sous couche s ; l=1 sous couche p, l=2, sous couche d) $0 \leq l \leq n-1$
- le nombre quantique magnétique m, qui détermine le nombre d'orbitales dans une sous couche, il est lié à n par la relation $-l \leq m \leq +l \Rightarrow$ ($2l+1$ valeurs de m)

$l=2 \Rightarrow$ 5 orbitales, il s'agit de la sous couche d

- le nombre quantique de spin qui a pour valeur $+\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$, il caractérise la rotation de l'électron sur lui même

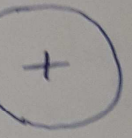
Série 3/11

. $3s^1$

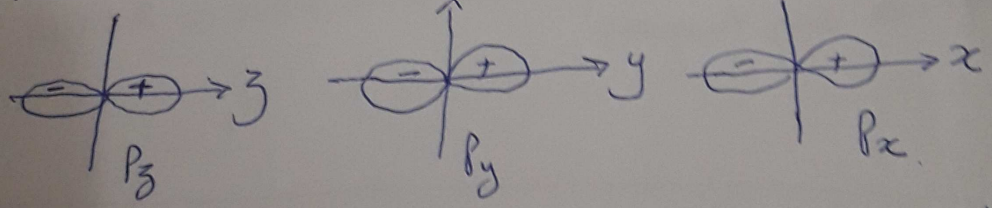
$n=3$
$\ell=0 \Rightarrow m=0$ et $s=+\frac{1}{2}$
quand on a le choix entre $+\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$
On choisit plutôt $+\frac{1}{2}$

. $3d^1$ $n=3$, $\ell=2 \Rightarrow$ $\left.\begin{array}{l} m=-2 \\ m=-1 \\ m=0 \\ m=+1 \\ m=+2 \end{array}\right\}$ toutes équivalentes et $s=+\frac{1}{2}$

Exercice n°2 : Une orbitale représente la région où l'e⁻ la plus grande probabilité de se retrouver, leurs formes sont :

. $n=1$ $\ell=0 \Rightarrow$ 1S  sphérique

. $n=3$ $\ell=1 \Rightarrow$ Orbitale P (P_x, P_y, P_z)



. $n=3$ $\ell=2 \Rightarrow$ Orbitale d (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{z^2}, $d_{(x^2-y^2)}$)

Page 2

Exercice 3 : le nombre d'électrons associés sont :

- D'orbitale : $2e^-$
- Sous couche : S : $2e^-$
  P : $6e^-$
  d : $10e^-$
- Couche : $n=1 \Rightarrow 2e^-$
  $n=2 \Rightarrow 8e^-$
  $n=3 \Rightarrow 18e^-$
  } en général $2n^2$ électrons.

Exercice 4 : 1S, 4P, 5d, 3S, 6S,

⇓

Etats possibles

Par Contre :

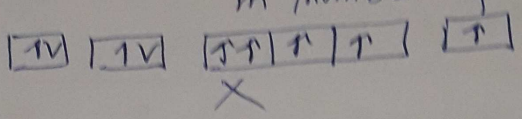
1P ($n=1 \Rightarrow m=0$ dans S) donc cet état ne peut pas exister

2d ($n=2 \Rightarrow m=0, 1 \Rightarrow$ S et P) donc cet état ne peut pas exister

Exercice 5 :

1°// Etat excité

2°// impossible, Contredit le principe de PAULI (dans un atome, deux e⁻ ne peuvent pas avoir les 4 nombres quantiques



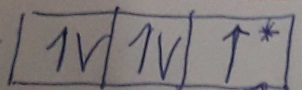
3°// Etat excité

4°// Etat ~~excité~~ fondamental

5°// impossible, la règle de HUND est non satisfaite « occuper un maximum d'orbitales avec un $s = +\frac{1}{2}$

Exercice n°6 :

1°//



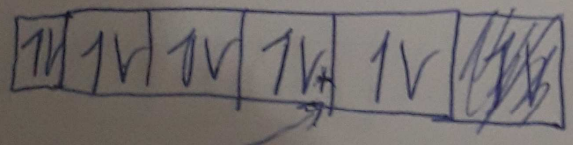
3p

$n = 3$

$\ell = 1$

$m = 1$, $s = +\frac{1}{2}$

2°//



3d

$n = 3$, $\ell = 2$, $m = 1$, $s = -\frac{1}{2}$

/Page 4/

39/ [↑↓ | ↑ | ↑]

4p $n=4,\ \ell=1,\ m=-1,\ s=+\frac{1}{2}$

40/ [↑↓ | ↑↓ | ↑ | ↑ | ↑ | ↑ | ↑↓]

4p $n=4,\ \ell=3,\ m=+3,\ s=+\frac{1}{2}$

Exercice 7 : la Configuration électronique d'un atome / ion correspond à la façon dont les électrons sont répartis entre les couches, les sous couches et les cases quantiques.

- Principe d'exclusion de PAULI :

Dans un atome, 2 électrons ne peuvent avoir les 4 nombres quantiques identiques

[↑↓] [↑↑]

- Règle de HUND :

les e⁻ doivent d'abord occuper un maximum d'orbitales vides par un e⁻ de spin $s=+\frac{1}{2}$

[↑ | ↑ | ↑] [↑↓ | ↑ |]

- Règle de KLECHKOWSKI
l'ordre de remplissage des orbitales est celui pour lequel la somme $(n+\ell)$ croit

$O(Z=8)$ $1s^2 2s^2 2p^4$

$F(Z=9)$ $1s^2 2s^2 2p^5$

$S(Z=16)$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

$Cl(Z=17)$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

$Ca^{2+}(Z=20)$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

$Mn(Z=25)$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^5$

$Cr(Z=24)$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$

$3d^5 4s^1$

$Cu(Z=29)$ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$

$3d^{10} 4s^1$

les orbitales d sont stables totalement ou à moitié remplie

Exercice 8 : • la première ionisation du Carbone correspond à la réaction : $C(g) \rightarrow C^+(g) + 1e^-$

I_1 = la différence entre l'état final et l'Etat Initial

$$I_1 = E_{C^+} - E_C$$

C $\quad 1s^2 2s^2 2p^2 \Rightarrow \begin{cases} E_C = 2E_{1s} + 4E_{(2s2p)} \\ E_{C^+} = 2E_{1s} + 3E'_{(2s2p)} \end{cases}$

donc $I_1 = 3E'_{(2s2p)} - 4E_{(2s2p)}$

pour C : $Z^* = 6 - (2 \times 0{,}85 + 3 \times 0{,}35) = 3{,}25$

$$\Rightarrow E_{(2s2p)} = -13{,}6 \times \frac{Z^{*2}}{n^2} = -13{,}6 \times \frac{(3{,}25)^2}{2^2}$$

$$= -35{,}913 \text{ eV}$$

pour C^+ : $Z^* = 6 - (2 \times 0{,}85 + 2 \times 0{,}35) = 3{,}6$

$$\Rightarrow E'_{(2s2p)} = -13{,}6 \times \frac{3{,}6^2}{2^2} = -44{,}064 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow I_1 = 3 \times (-44{,}064) - 4(-35{,}913)$$

$$= \boxed{11{,}46 \text{ eV}}$$

La 2ème ionisation correspond à :

$$C^{+}_{(g)} \longrightarrow C^{2+}_{(g)} + 1e^{-}$$

$$I_2 = E_{C^{2+}} - E_{C^{+}}$$

$$E_{C^{2+}} = 2E_{1s} + 2E''_{(2s2p)}$$

et $Z^{*} = 6 - (2 \times 0{,}85 + 0{,}35) = 3{,}95$

$$E''_{(2s2p)} = -13{,}6 \times \frac{(3{,}95)^2}{4} = -53{,}049\,eV$$

$$I_2 = 2E''_{(2s2p)} - 3E'_{(2s2p)}$$

$$= 2(-53{,}049) - 3(-44{,}064)$$

$$= \boxed{26{,}095\ eV}$$