

## ATOMES POLYÉLECTRONIQUES - exercices

### I. Ionisation d'un atome d'hélium et approximation de Slater

- Dans son état fondamental, l'atome d'hélium peut être décrit par deux électrons appartenant à une orbitale 1s. Calculer l'énergie de cet atome en utilisant la règle de Slater avec un coefficient d'écran  $\zeta = 0,3$  (pour décrire l'interaction entre les deux électrons 1s).
- Calculer l'énergie de l'ion "hydrogénoidé"  $\text{He}^+$  dans l'état fondamental. En déduire l'énergie d'ionisation de l'atome d'hélium, puis la comparer à l'énergie des électrons dans l'orbitale 1s.

### II. Spectre d'émission du lithium et approximation de Rydberg

- Dans l'état fondamental, l'atome de lithium peut être décrit avec deux électrons dans l'état 1s et un électron dans l'état 2s (électron intervenant dans les transitions usuelles). Plutôt que d'utiliser un coefficient d'écran de charge, comme le fait l'approximation de Slater, Rydberg a proposé d'utiliser une dépendance en énergie de la forme :  $E_n = -\frac{hcR_H}{(n+a)^2}$  avec :  $a = -0,4$  pour un sous-niveau s ;  $a = -0,04$  pour un sous-niveau p.

- Calculer les longueurs d'onde des quatre premières raies et de la raie limite de la série "principale" de Li (pour les transitions entre les niveaux  $(n)p$  et le niveau  $(2)s$ ). En déduire l'énergie d'ionisation de Li.
- Calculer l'énergie d'ionisation du lithium dans l'approximation de Slater, avec un coefficient d'écran  $\zeta = 0,3$  pour décrire l'interaction entre les deux électrons 1s, et un coefficient d'écran  $\zeta = 0,85$  pour décrire l'interaction entre les électrons 1s et l'électron 2s. Comparer à la valeur obtenue avec l'approximation de Rydberg, et comparer avec la valeur expérimentale : 5,39 eV.
- Peut-on en conclure que l'un des modèles est "meilleur" que l'autre ?

Données : constante de Rydberg :  $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$  ;  $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ .

### III. Structure électronique et ions du fer et du cuivre

- Décrire les structures électroniques des atomes de fer ( $Z = 26$ ) et de cuivre ( $Z = 29$ ).
- Compte tenu de la stabilité "empirique" des structures électroniques avec des niveaux "plus ou moins complets", proposer des structures électroniques pour les ions  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{3+}$ .
- Proposer de même des structures électroniques pour les ions  $\text{Cu}^+$  et  $\text{Cu}^{2+}$ .

Données : coefficients d'écran de Slater :

$e^- n^o "j"$ (subit l'effet d'écran)	1s	0,30						
	2s, p	0,85	0,35					
	3s, p	1	0,85	0,35				
	3d	1	1	1	0,35			
	4s, p	1	1	0,85	0,85	0,35		
	4d	1	1	1	1	1	0,35	
	4f	1	1	1	1	1	0,35	
	5s, p	1	1	1	1	0,85	0,85	0,35
		1s	2s, p	3s, p	3d	4s, p	4d	4f
								5s, p

électron  $n^o "j"$  (crée l'effet d'écran)

**IV. Structure électronique du chlore et du potassium**

1. • Décrire les structures électroniques des atomes de chlore ( $Z = 17$ ) et de potassium ( $Z = 19$ ).
2. • Calculer leurs rayons dans l'approximation de Slater ; commenter.
3. • Calculer leurs électronégativités dans l'approximation de Slater ; commenter les différences correspondantes du point de vue des propriétés chimiques.