Université Mohammed V
Faculté des Sciences-Rabat
Département de Chimie

Travaux dirigés d'Atomistique 2020 /2021
SMPC Semestre 1 (Série 4)

I) Classification périodique

1) Soient les atomes suivants :
He(Z=2) ; Li(Z=3) ; Be(Z=4) ; O(Z=8) ; Ne(Z=10) ; Na(Z=11) ; Mg(Z=12) ; S(Z=16) ; Cl(Z=17) ; Ar(Z=18) ; K(Z=19) ; Ti(Z=22) ; Cr(Z=24) ; Cu(Z=29) ; Br(Z=35) ; Kr(Z=36); Rb(Z=37) ; Cd(Z=48) ; Xe(Z=54) et Cs(Z=55)

- **a-** Donner la structure électronique de chacun des atomes à **l'état fondamental**.
- **b-** Remplacer les électrons de cœur (électrons internes) par le symbole du gaz rare correspondant.
- **c-** A l'aide des cases quantiques, écrire la dernière couche (couche de valence) pour chaque atome, en déduire les électrons de valence.
- **d-** Situer ces éléments dans la classification périodique et les grouper si possible par famille ou par période.
- **e-** Quelles sont les propriétés magnétiques de chacun de ces atomes quand il est isolé ?

2) Un élément a moins de 18 électrons et possède 2 électrons célibataires.
- **a-** Quelles sont les configurations électroniques possibles pour cet élément ?
- **b-** Quel est cet élément sachant qu'il appartient à la période du lithium Li (Z=3) et au groupe de l'étain Sn (Z=50) ?

3) Un élément appartient à la quatrième période et possède deux électrons célibataires.
- **a-** Combien y a-t-il de possibilités ? Préciser pour chacune la colonne et la période.
- **b-** On sait de plus que cet élément n'est pas un élément de transition. Combien reste-t-il de possibilités ? Préciser pour chacune la colonne et la période.
- **c-** On sait de plus que cet élément appartient à la famille des chalcogènes. Combien reste-t-il de possibilités ?

II) Règle de Sanderson

La règle dite de Sanderson permet de déterminer si un élément est métallique ou non. Par utilisation de cette règle, dire entre Mg, S et V qui est métallique et qui ne l'est pas.
Données : Mg(Z=12) ; S(Z=16) et V(Z=23).

III) Charge effective, constante d'écran, énergie d'ionisation et rayon atomique

1) Calculer la charge nucléaire effective Z* perçue par **les électrons de valence** de chacun des atomes suivants : Li ; Na et Cl. Calculer leurs énergies correspondantes.

2) Calculer les énergies d'ionisation successives du béryllium Be (Z=4). Comparer les valeurs obtenues aux valeurs expérimentales : 9,28 ; 18,1 ; 155 et 217 eV.

3) Le tableau suivant donne le rayon de covalence et le rayon ionique (en Å) ainsi que les énergies de première ionisation (EI_1) et de deuxième ionisation (EI_2) en kJ/mol des quatre premiers alcalins.

Elément	Rayon covalent (Å)	Rayon ionique (Å)	EI_1 (kJ/mol)	EI_2 (kJ/mol)
Lithium	1,23	0,60	520,3	7298
Sodium	1,54	0,95	495,8	4562
Potassium	2,03	1,33	419	3051
Rubidium	2,16	1,48	403	2632

a- Rappeler l'expression des rayons des orbites permises pour l'électron des atomes hydrogénoïdes obtenue dans le modèle de Bohr.

b- Que devient cette expression dans le modèle de Slater ?

c- A partir de cette expression, justifier l'évolution observée du rayon de covalence des alcalins.

d- Justifier le fait que le rayon ionique des alcalins est très inférieur à leur rayon de covalence.

e- Quel lien qualitatif peut-on faire entre le rayon atomique et l'énergie de première ionisation ?

f- Justifier l'évolution observée pour l'énergie de première ionisation des alcalins.

g- Expliquer pourquoi l'énergie de deuxième ionisation d'un atome est forcément plus grande que son énergie de première ionisation.

h- Dans le cas des alcalins, on observe que l'énergie de deuxième ionisation est beaucoup plus élevée que l'énergie de première ionisation. Comment peut-on justifier cela ?

i- En utilisant le modèle de Slater, calculer les deux premières énergies d'ionisation de l'atome de Sodium et les comparer aux valeurs expérimentales.

Rappel des règles de Slater :

Soit i l'électron considéré, la charge nucléaire effective Z_i^* est donnée par la relation :

$$Z_i^* = Z - \sum_j \sigma_{j \to i}$$

Avec Z : numéro atomique de l'atome considéré ;

et $\sigma_{j \to i}$: constante d'écran due aux électrons j autres que i.

On considère les groupes de Slater suivant la disposition spatiale:

(1s) ; (2s2p) ; (3s3p) ; (3d) ; (4s4p) ; (4d) ; (4f) ; (5s5p) ; (5d) ; (5f) ; (6s6p)

Les valeurs des différentes constantes d'écran d'un électron du groupe j sur un électron du groupe ($\sigma_{j \to i}$) sont :

Quand i = j $\quad \sigma_{j \to i} = 0,35$ (sauf si i = j = 1s, $\sigma_{j \to i} = 0,30$)

Quand i > j $\quad \sigma_{j \to i} = 1$ (sauf si i est sur s ou sur p et $\Delta n = 1$, alors $\sigma_{j \to i} = 0,85$)

Quand i < j $\quad \sigma_{j \to i} = 0$

n* : nombre quantique apparent.

n	1	2	3	4	5	6
n*	1,0	2,0	3,0	3,7	4,0	4,2