

Exercices

Orbitales atomiques

Questions préliminaires :

- Rappeler les trois premières lignes de la classification périodique des éléments.
- Énoncer précisément les règles de remplissage électronique.
- Représenter les OA s, p et d tout en rappelant leurs propriétés de symétrie.

[Faire le quiz de cours](#)



Exercice n° 1 : Quantification et diagrammes d'énergie

Données : $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$; $N_a = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

L'hydrogène

1. Calculer en $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène, définie comme l'énergie minimale à fournir pour arracher l'électron à l'atome d'hydrogène, à 0 K et à l'état gazeux.
2. Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène présente quatre raies dans le visible : c'est la série de Balmer. Il s'agit des premières transitions des niveaux $n > 2$ vers le niveau $n = 2$. Calculer les longueurs d'onde associées.

Le sodium

3. Écrire la configuration électronique de l'atome de sodium dans l'état fondamental. Préciser les propriétés redox du sodium.
4. Tracer qualitativement le diagramme énergétique de l'atome de sodium.
5. Calculer l'énergie de première ionisation du sodium sachant que pour la sous-couche électronique la plus externe la constante d'écran vaut 8,8.

Exercice n° 2 : Les halogènes

1. Donner la configuration électronique fondamentale du brome et de l'iode. Justifier. Préciser les propriétés redox du diiode et du dibrome.
2. Entre l'iode et le brome, indiquer quel est l'atome le plus électronégatif. Préciser les conséquences sur les propriétés spatiales et énergétiques des OA de ces deux atomes.
3. De ces deux ions, quel est le plus volumineux ? Le plus polarisable ? Le plus nucléophile ?
4. Pour le brome, calculer le rayon ρ de l'OA de valence la plus externe. Une expression approchée est donnée ci-dessous :

$$\rho_{n,l} = \frac{n^2}{Z_{n,l}^*} a_0$$

avec a_0 le rayon de Bohr : $a_0 = 52,9 \text{ pm}$.

On pourra utiliser les énergies fournies dans le tableau en fin de TD.

Exercice n° 3 : Atome d'hélium

On s'intéresse à l'atome d'hélium dans son état fondamental.

Expérimentalement, on détermine l'énergie des électrons de l'atome d'hélium : $E_{\text{He}} = -79 \text{ eV}$ et son énergie de première ionisation $EI_1 = +24,6 \text{ eV}$.

1. Sachant que la constante d'écran d'un électron s vis-à-vis d'un autre électron s vaut $\sigma = 0,30$, calculer l'énergie des électrons de l'hélium.
2. En négligeant la répulsion électronique (ce qui revient à dire que les énergies sont identiques à celles calculées dans l'ion hydrogénoïde), calculer l'énergie des électrons de l'hélium. En déduire l'énergie potentielle d'interaction entre les électrons.
3. Calculer l'énergie de première ionisation, définie comme l'énergie minimale à fournir pour arracher un électron à l'atome gazeux à 0 K.
4. L'ion He^+ admet-il des raies d'émission dans le spectre visible ?

Exercice n° 4 : Étude d'une OA

La partie angulaire d'une OA 3d est de la forme : $Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N \sin \theta \cos \theta \sin \varphi$.

1. Sur un repère orthonormé direct, définir les coordonnées sphériques.
2. Les plans xy, yz et xz sont-ils des plans de symétrie ou d'antisymétrie ? Dans quelle direction du plan yz la probabilité de présence d'un électron décrit par cette OA est-elle la plus grande ?
4. Identifier cette OA.

Exercice n° 5 : Étude de l'atome polyélectronique

Une forme approchée de la partie radiale des atomes polyélectroniques a été proposée par Slater :

$$R_{n,l}(r) = N \left(\frac{r}{a_0} \right)^{n-1} \exp\left(-\frac{Z_{n,l}^* r}{n a_0} \right)$$

1. Que représentent N , $Z_{n,l}^*$ et $a_0 = 52,9 \text{ pm}$?
2. Exprimer la densité de probabilité de présence radiale en fonction de $R_{n,l}(r)$.
3. En déduire l'expression du rayon d'une OA dans le cadre de ce modèle.
4. Donner la configuration électronique du chlore dans son état fondamental.
5. Le rayon atomique du chlore vaut 78 pm , calculer la charge effective pour les électrons de la sous-couche externe puis la constante d'écran associée.
6. Comparer le rayon atomique de Cl à celui de l'ion monoatomique obtenu facilement à partir du chlore.
7. Pour les rayons atomiques du fluor et du phosphore, on trouve 100 et 41 pm . Attribuer à chaque atome son rayon atomique.

[Correction en vidéo](#)



ENERGIES DES ORBITALES ATOMIQUES

Valeurs absolues de l'énergie des orbitales (en Hartree*)
des éléments dans leur état fondamental

Élément	Configuration	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p
H	1s ¹	0,50000							
He	1s ²	0,91796							
Li	(He)2s ¹	2,47775	0,19632						
Be	(He)2s ²	4,73267	0,30927						
B	(He)2s ² 2p ¹	7,69528	0,49468	0,30987					
C	(He)2s ² 2p ²	11,32552	0,70563	0,43334					
N	(He)2s ² 2p ³	15,62892	0,94523	0,56753					
O	(He)2s ² 2p ⁴	20,66864	1,24428	0,63186					
F	(He)2s ² 2p ⁵	26,38294	1,57255	0,73001					
Ne	(He)2s ² 2p ⁶	32,77276	1,93048	0,85048					
Na	(Ne)3s ¹	40,47849	2,79702	1,51813	0,18211				
Mg	(Ne)3s ²	49,03165	3,76768	2,28219	0,25304				
Al	(Ne)3s ² 3p ¹	58,50128	4,91094	3,21858	0,39348	0,21017			
Si	(Ne)3s ² 3p ²	68,81244	6,15659	4,25611	0,53991	0,29709			
P	(Ne)3s ² 3p ³	79,96982	7,51119	5,04105	0,69645	0,39170			
S	(Ne)3s ² 3p ⁴	92,00461	9,00446	6,68268	0,87963	0,43739			
Cl	(Ne)3s ² 3p ⁵	104,88465	10,60775	8,07250	1,07310	0,50652			

Ar	(Ne)3s ² 3p ⁶	118,61064	12,32244	9,57176	1,27752	0,59116			
K	(Ar)4s ¹	133,53357	14,49036	11,51969	1,74883	0,95441		0,14742	
Ca	(Ar)4s ²	149,36379	16,82223	13,62938	2,24536	1,34068		0,19550	
Sc	(Ar)3d ¹ 4s ²	165,89982	19,08061	15,66825	2,56739	1,57461	0,34360	0,21010	
Ti	(Ar)3d ² 4s ²	183,27192	21,42236	17,79065	2,87326	1,79494	0,44028	0,22081	
V	(Ar)3d ³ 4s ²	201,50192	23,87424	20,02207	3,18313	2,01907	0,50942	0,23067	
Cr	(Ar)3d ⁵ 4s ¹	220,59135	26,43866	22,36478	3,49901	2,24828	0,56886	0,24002	
Mn	(Ar)3d ⁵ 4s ²	240,53357	29,11007	24,81302	3,81684	2,47967	0,63899	0,24801	
Fe	(Ar)3d ⁶ 4s ²	261,37311	31,93623	27,41431	4,16972	2,74242	0,64710	0,25832	
Co	(Ar)3d ⁷ 4s ²	283,06709	34,86897	30,12083	4,52451	3,00640	0,67554	0,26744	
Ni	(Ar)3d ⁸ 4s ²	305,61754	37,91754	32,94135	4,88794	3,27776	0,70688	0,27626	
Cu	(Ar)3d ¹⁰ 4s ¹	328,79337	40,81991	35,61884	5,01322	3,32613	0,49280	0,23673	
Zn	(Ar)3d ¹⁰ 4s ²	353,30417	44,36183	38,92495	5,63790	3,83943	0,78265	0,29248	
Ga	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	378,81761	48,16834	42,49397	6,39463	4,48236	1,19333	0,42450	0,20851
Ge	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	405,24359	52,15028	46,23608	7,19088	5,16147	1,63478	0,55332	0,28730
As	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	432,58556	56,30999	50,15387	8,02963	5,88069	2,11267	0,68593	0,36950
Se	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	460,86637	60,66843	54,26843	8,93188	6,66133	2,64941	0,83729	0,40280
Br	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	490,05964	65,19998	58,55425	9,87193	7,47826	3,22023	0,99265	0,45704
Kr	(Ar)3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	520,16444	69,90297	63,00967	10,84936	8,33140	3,82516	1,15286	0,52410

* 1 Hartree = 2 Rydberg = 27.21 eV = 26 26 kJ.mol⁻¹