
TD 1 : Atomistique, Orbitales, Méthodes de Slater, Énergie d'ionisation

1. L'hélium (${}^2\text{He}$)
 - (a) En utilisant la méthode de Slater, calculez l'énergie de l'électron 1s de l'atome d'hélium dans son état fondamental.
 - (b) Quelle est l'énergie électronique de l'atome d'hélium dans son état fondamental ?
 - (c) Faites de même pour l'ion hydrogénoïde He^+ et déduisez en l'énergie d'ionisation de l'hélium.
 - (d) La valeur expérimentale de l'énergie d'ionisation de l'hélium est de 24,6 eV. Commentez vos résultats.

2. Le lithium (${}^3\text{Li}$)
 - (a) L'énergie de première ionisation du lithium est de 5,590 eV. Déduisez en l'énergie de l'électron 2s de cet atome.
 - (b) Quel devrait être la valeur de la charge nucléaire effective (Z^*) à utiliser dans la formule donnant l'énergie de l'électron 2s pour que le résultat soit en accord avec l'expérience ?
 - (c) Déduisez en le coefficient d'écran exercé par la couche 1s sur l'électron 2s du lithium.

3. Le cuivre (${}^{29}\text{Cu}$)
 - (a) Écrivez la configuration électronique du cuivre. Pourquoi dit-on que le cuivre est un élément "pseudo-alcalin" ?
 - (b) L'énergie de première ionisation du cuivre est de 7,724 eV. Calculez, en utilisant la méthode de Slater, cette même énergie. La méthode donne-t-elle un résultat satisfaisant ?

4. La méthode de Slater permet aussi d'estimer la taille des orbitales pour une couche donnée. Le rayon où la densité radiale associée aux électrons est maximale s'exprime selon la relation $r = \frac{a_0 n^2}{Z^*}$ où $a_0 = 53$ pm est le rayon de l'orbitale 1s de l'atome d'hydrogène (rayon de Bohr).
 - (a) Déterminez la charge nucléaire effective ressentie par les électrons des couches $n = 1, 2$ et 3 , ainsi que les rayons des orbitales correspondantes pour les éléments lithium (${}^3\text{Li}$) et chlore (${}^{17}\text{Cl}$).
 - (b) Comment définit-on théoriquement un longueur de liaison ? Calculez la longueur théorique de la liaison de Li_2 et de Cl_2 .
 - (c) Les valeurs expérimentales des longueurs de liaison de Li_2 et de Cl_2 sont respectivement 2,67 et 1,99 Å. Quel type de méthode expérimentale peut-on utiliser pour déterminer ces longueurs de liaison ? Les résultats théoriques sont-ils en accord avec les valeurs expérimentales ? Commentez.

5. L'énergie de première ionisation du potassium (${}^{19}\text{K}$) est plus faible que celle du calcium (${}^{20}\text{Ca}$). Par contre, la deuxième ionisation du potassium demande beaucoup plus d'énergie que celle du calcium. Quelle est la raison de cette inversion.