Université de Bourgogne

2022-2023

Licence de Sciences et Techniques

05 Janvier 2023

# Contrôle Continu Final d'Atomistique (2h) Chim1A

Calculatrice autorisée.

Il sera tenu compte de la rédaction et de la présentation.

Toute réponse doit être convenablement justifiée.

#### **DONNEES:**

élément	Н	Li	N	F	Ca	S	Br	I
Z	1	3	7	9	20	16	35	53

$h = 6,62.10^{-34} \text{ J.s}$	$1eV = 1,6.10^{-19} J$	$\mathfrak{N} = 6,02.10^{23} \mathrm{mol^{-1}}$
$c = 3.10^8 \text{ m.s}^{-1}$	$e = 1,6.10^{-19} C$	$1D = 3,33.10^{-30} \text{ C.m}$

Tableau résumant les coefficients d'écran de SLATER :

				Etat	de l'élec	tron i			
		1s	2s, 2p	3s, 3p	3d	4s, 4p	4d	4f	5s, 5p
	1s	0,31							
	2s, 2p	0,85	0,35						
Etat de	3s, 3p	1	0,85	0,35					
l'électron	3d	1	1	1	0,35				
j	4s, 4p	1	1	0,85	0,85	0,35			
	4d	1	1	1	1	1	0,35		
	4f	1	1	1	1	1	1	0,35	
	5s, 5p	1	1	1	1	0,85	0,85	0,85	0,35

Tableau résumant les masses molaires et les températures d'ébullition des halogénures d'hydrogène :

Composé	M (g.mol <sup>-1</sup> )	Téb (°C)
HF	20	19
HCl	36	-84
HBr	81	-67
HI	128	-35

Electronégativités des atomes soufre, iode, brome et fluor :

Elément	S	I	Br	F
χ	2,58	2,66	2,96	3,98

### **EXERCICE I**: spectroscopie atomique

La valeur des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène est donnée par la relation suivante :

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}$$
 (1)

- **1.a.** Préciser ce que représentent les termes  $E_n$  et n.
- **1.b.** Quelles valeurs peut prendre le nombre n ? A laquelle d'entre elles correspond le niveau dit « fondamental » de l'atome d'hydrogène ?
- 1.c. Rappeler la relation entre le nombre d'onde  $\sigma$  d'une radiation électromagnétique et l'énergie d'une transition électronique entre deux niveaux d'énergie différents.
- 1.d. Quelle énergie devra avoir une radiation lumineuse capable de porter l'électron de l'atome d'hydrogène à son premier niveau d'excitation? Quelle est la longueur d'onde correspondante (en nm)? Dans quel domaine du spectre électromagnétique se situe-t-elle?
- 1.e. Calculer la longueur d'onde de la raie de plus grande longueur d'onde de la série de BALMER. Dans quel domaine du spectre électromagnétique se situe-t-elle ?

#### **EXERCICE II**: l'atome polyélectronique

- **2.a.** Quels sont les différents états quantiques orbitaux possibles du niveau n = 2? (on donnera les triplets de nombres quantiques les caractérisant)
- **2.b.** Préciser le nom de ces différents nombres quantiques et indiquer la lettre habituellement utilisée pour les désigner. Donner les relations qui existent entre ceux-ci.
- 2.c. Ecrire les configurations électroniques dans son niveau fondamental de :
  - l'atome d'azote N
  - l'ion nitrure N<sup>3</sup>-
- **2.d.** L'azote est un élément de la seconde période de la classification périodique. Quel est le numéro de sa colonne ?
- **2.e.** Donner les numéros atomiques des éléments appartenant à la même colonne que l'azote, que sont, par valeur croissant du numéro atomique, le phosphore et l'arsenic. Justifier votre réponse.
- **2.f.** Rappeler comment évolue l'électronégativité dans une période du tableau périodique. Comment évolue-t-elle dans une colonne ? Le lithium est-il très électronégatif ? Justifier.
- **2.g.** On connaît des structures ioniques telles que Li<sub>3</sub>N et Ca<sub>3</sub>N<sub>2</sub>. Ecrire la configuration électronique dans l'état fondamental du lithium et du calcium dans chacune de ces deux structures.

- **2.h.** La valeur expérimentale de l'énergie de première ionisation de l'atome de lithium vaut 5,4 eV.
  - 2.h.1. Rappeler le principe sur lequel repose la méthode de Slater.
  - **2.h.2.** Calculer l'énergie de première ionisation de l'atome de lithium en utilisant la méthode de Slater. Conclure.

#### **EXERCICE III:** diagramme d'orbitales moléculaires

On veut étudier la molécule diatomique hétéronucléaire de <u>fluorure d'hydrogène</u> HF.

**3.a.** Tracer le diagramme énergétique simplifié de la molécule de HF sur un graphe avec une échelle d'énergie de 25mm pour 10 eV. On donne les énergies des orbitales atomiques suivantes :

	1s	- 654 eV
F	2s	- 37,9 eV
	2p	- 17,4 eV
H	1s	- 13,6 eV

- **3.b.** Préciser si les orbitales moléculaires de la molécule *HF* sont obtenues par recouvrement latéral ou axial, en justifiant votre réponse.
- **3.c.** Combien d'électrons participent à la liaison dans la molécule *HF* ? Placer ces électrons sur le diagramme énergétique précédent.
- **3.d.** Ecrire la configuration électronique de la molécule *HF*. En déduire la valeur de l'indice de liaison.
- **3.e.** La longueur de la liaison de la molécule HF vaut 0,092 nm. Le moment dipolaire de la molécule HF vaut 1,82 D. Quel est le pourcentage de caractère ionique de la liaison ?
- **3.f.** Pourquoi la température d'ébullition de HF est supérieure à celle des autres halogénures d'hydrogène ?

## **EXERCICE IV**: forme et structure des molécules

**4.a.** Proposer des schémas de LEWIS pour les édifices suivants, en rappelant les règles qui y conduisent (expliciter les calculs de A et V, ainsi que leur signification) :

$$S_3^{2-}$$
,  $IBr_2^-$  et  $BrF_5$ 

- **4.b.** Trouver la forme géométrique des édifices  $S_3^{2-}$ ,  $IBr_2^-$  et  $BrF_5$  à l'aide de la théorie V.S.E.P.R et la dessiner en perspective de Cram.
- **4.c.** Tracer les moments dipolaires des liaisons, puis le moment dipolaire total des édifices  $S_3^{2-}$ ,  $IBr_2^-$  et  $BrF_5$ . Préciser si ces édifices sont polaires ou apolaires.