

Exercice III-7 : Atome de béryllium et ses ions
Énoncé

Calculer l'énergie totale électronique de 4^{Be} et de ses ions positifs en utilisant le modèle de Slater ainsi que les énergies d'ionisation successives.

Remarque :

On appelle que l'énergie de $n^{\text{ième}}$ ionisation I_n d'un atome X, est l'énergie d'ionisation de l'espèce $X^{(n-1)+}$ dans son état fondamental.

Données : Constantes de Slater :

| groupe de l'électron étudié | Contribution des autres électrons | | | | | | couches supérieures |
|-----------------------------------|-----------------------------------|---------------|------------------------------|--------|------|------|------------------------|
| | couches n-2, n-3 | couche n-1 | autres électrons de niveau n | | | | |
| | | | 1s | s et p | d | f | |
| 1s | - | - | 0,30 | | | | 0 |
| s et p | 1,00 | 0,85 | | 0,35 | 0 | 0 | 0 |
| d | 1,00 | 1,00 | | 1,00 | 0,35 | 0 | 0 |
| f | 1,00 | 1,00 | | 1,00 | 1,00 | 0,35 | 0 |

Correction :

- 1- $4\text{Be} : 1s^2 2s^2$. La configuration électronique d'un atome est déterminée en appliquant les règles de construction ou *Aufbau*.

Les charges effectives des électrons de l'atome de béryllium sont (la charge du noyau étant de +4 car 4 protons) :

$$Z_{1s}^* = 4 - \sigma_{1s \rightarrow 1s} = 4 - 0,31 = 3,69 ;$$

$$Z_{2s}^* = 4 - 2\sigma_{1s \rightarrow 2s} - \sigma_{2s \rightarrow 2s} = 4 - (2 \times 0,85) - 0,35 = 1,95$$

On en déduit alors l'énergie électronique de l'atome de béryllium :

$$E_{\text{Be}} = -2R_H \frac{(3,69)^2}{1^2} - 2R_H \frac{(1,95)^2}{2^2} = -396,2 \text{ eV}$$

- 2- $4\text{Be}^+ : 1s^2 2s$.

On calcule de même que précédemment les charges effectives de l'ion Be^+ , la charge du noyau étant inchangée (+4) et on en déduit l'énergie électronique de cet ion :

$$Z_{1s}^* = 3,69 \quad Z_{2s}^* = 4 - (2 \times 0,85) = 2,3 \quad E_{\text{Be}^+} = -388,35 \text{ eV}$$

- 3- $4\text{Be}^{2+} : 1s^2$.

$$Z_{1s}^* = 3,69 \quad E_{\text{Be}^{2+}} = -370,36 \text{ eV}$$

- 4- $4\text{Be}^{3+} : 1s^1$. Il s'agit d'un hydrogénoïde. Les niveaux énergétiques électroniques sont :

$$E_{\text{Be}^{3+}} = -R_H \frac{(Z_{\text{Be}} = 4)^2}{1^2} = -217,6 \text{ eV} \quad (\text{Energie de l'ion hydrogénoïde}) ;$$

On en déduit alors les énergies d'ionisation successive d'après la définition rappelée dans l'exercice :

$$EI_1 = E_{\text{Be}^+} - E_{\text{Be}} = 7,85 \text{ eV} \quad (\text{expérimentalement : } 9,50 \text{ eV}) ;$$

$$EI_2 = 17,99 \text{ eV} \quad (\text{exp } 18,1 \text{ eV}) ;$$

$$EI_3 = 152,8 \text{ eV} \quad (\text{exp } 155 \text{ eV})$$

$$\text{et } EI_4 = 217,6 \text{ eV}.$$