

Contrôle continu 23 Novembre 2009

1 heure 30

Documents interdits, calculatrices type « collège » autorisées. Toute réponse doit être justifiée.

A. L'atome de bore

1. On s'intéresse dans cette partie à l'atome de bore ${}^{11}_5B$.

Une expression approchée pour les orbitales atomiques est de la forme générale :

$$\Psi(r, \theta, \phi) = N \left(\frac{Z^*}{a_0} \right)^{3/2} P_r(Z^* r) \cdot \exp\left(-\frac{Z^* r}{\alpha a_0}\right) P_\theta(\cos \theta, \sin \theta) e^{i\beta\phi}$$

1.1. Que représente Z^* ? Est-il supérieur, inférieur ou égal à 5 ?

1.2 Pour chacune des OA de valence du bore, préciser :

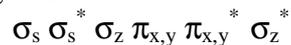
- le degré du polynôme $P_r(Z^* r)$;
- le degré du polynôme $P_\theta(\cos \theta, \sin \theta)$;
- la valeur prise par les paramètres α et β ?

2. Donner, dans la nomenclature usuelle, l'état fondamental (terme spectral) de l'atome de bore et du cation B^+ .

On précisera les grandeurs physiques impliquées dans cette nomenclature et leurs valeurs dans les deux cas concernés.

B. La molécule B_2

1. On rappelle que pour des molécules telles que F_2 et O_2 , les niveaux d'énergie sont, avec les notations usuelles par ordre d'énergie croissante :



Quelle inversion de ces niveaux intervient-il dans les autres molécules de la période, en particulier B_2 ? A quel phénomène cette inversion est-elle due et pourquoi n'est-elle pas observée sur toute la ligne ?

2. Donner le diagramme orbitalaire de B_2 (position relative et représentation conventionnelle des OA et des OM) et sa configuration électronique à l'état fondamental. La molécule est-elle paramagnétique ou diamagnétique ?

3. Calculer le coefficient de normalisation N d'une fonction d'onde

$$\Psi = N(\phi_1 + \phi_2)$$

où ϕ_1 et ϕ_2 sont normées et orthogonales (ou de recouvrement négligeable devant 1).

En déduire l'expression mathématique des deux orbitales occupées de plus haute énergie en supposant le recouvrement des OA négligeable devant 1.

.../...

C. Combinaisons hétéronucléaires du bore

1. En supposant que le diagramme orbitalaire de la question B.2 n'est pas qualitativement modifié, donner la configuration électronique prévisible des molécules BN et BO. Préciser la multiplicité de spin.

2. En utilisant l'indice (l'ordre) des liaisons concernées, attribuer à chaque molécule BB, BN et BO sa distance internucléaire d'équilibre (longueur de liaison) parmi les valeurs ci-dessous. En déduire le caractère (liant, non-liant, anti-liant) de l'orbitale moléculaire σ_p .
Longueur de liaison (Å) : 1,20 ; 1,28 ; 1,59

3. En supposant que le diagramme orbitalaire de la question B.2 n'est pas qualitativement modifié, quelle est la multiplicité de spin prévisible pour BC ? L'expérience montre qu'elle est en fait de 4 (état quartet). Sans modifier l'ordre des niveaux, proposer une explication à cette observation et en déduire une conséquence quant aux niveaux concernés.