

# Chimie Quantique

(Durée : 1 heures 30, tous documents autorisés, Partie A et B indépendantes)

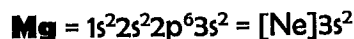
## Partie A – Spectroscopie et Diagramme de Grotian du Magnésium

**A-1** Rappeler la nomenclature générale des termes spectraux. Pour quels types d'éléments de la configuration périodique s'applique-t-elle ?

**A-2** Rappeler les deux méthodes d'obtention de la grandeur  $J$ . Cette grandeur explicite le couplage spin-orbite. Justifier cette terminologie.

**A-3** Pour les cas généraux du couplage LS, dans quel ordre classez-vous les nouveaux termes provenant du couplage spin-orbite ?

**A-4** La configuration électronique fondamentale pour l'élément Magnésium est donnée par l'expression suivante :



Proposer les termes spectraux correspondants aux électrons des couches de **coeur**.

**A-5** Proposer les termes spectraux correspondants aux électrons de la **couche de valence**. Dénombrer le nombre de fonction de spin et d'espace (ou orbite).

**A-6** Proposer la (ou les) fonction(s) déterminantale(s) envisageable(s), dite(s) de Slater, pour les deux électrons de la couche de valence.

**A-7** La configuration électronique de la première configuration excitée pour l'élément Magnésium est la suivante :



Calculer les termes spectraux de cette nouvelle configuration. Dans un premier temps en LS pur puis LS avec couplage spin-orbite.

**A-8** Expliciter succinctement les autres configurations excitées jusque la couche  $n=6$ .

**A-9** Le document joint avec ce texte est le Diagramme de Grotian de l'élément Magnésium. Expliquer d'abord le principe de répartition des états. Expliquer pourquoi il apparaît deux groupes séparés par une ligne verticale en pointillés.

**A-10** Proposer une attribution en terme spectroscopiques des états de ce diagramme sur la base de votre réponse à **A-8**. Attention certains termes n'apparaissent pas sur le diagramme fourni.

### Question subsidiaire :

**A-10** Que représentent les flèches sur le diagramme ? Quelles règles vérifient-t-elles ? Quelle est la signification de la valeur numérique ?

## Partie B – Configuration électronique du Fer

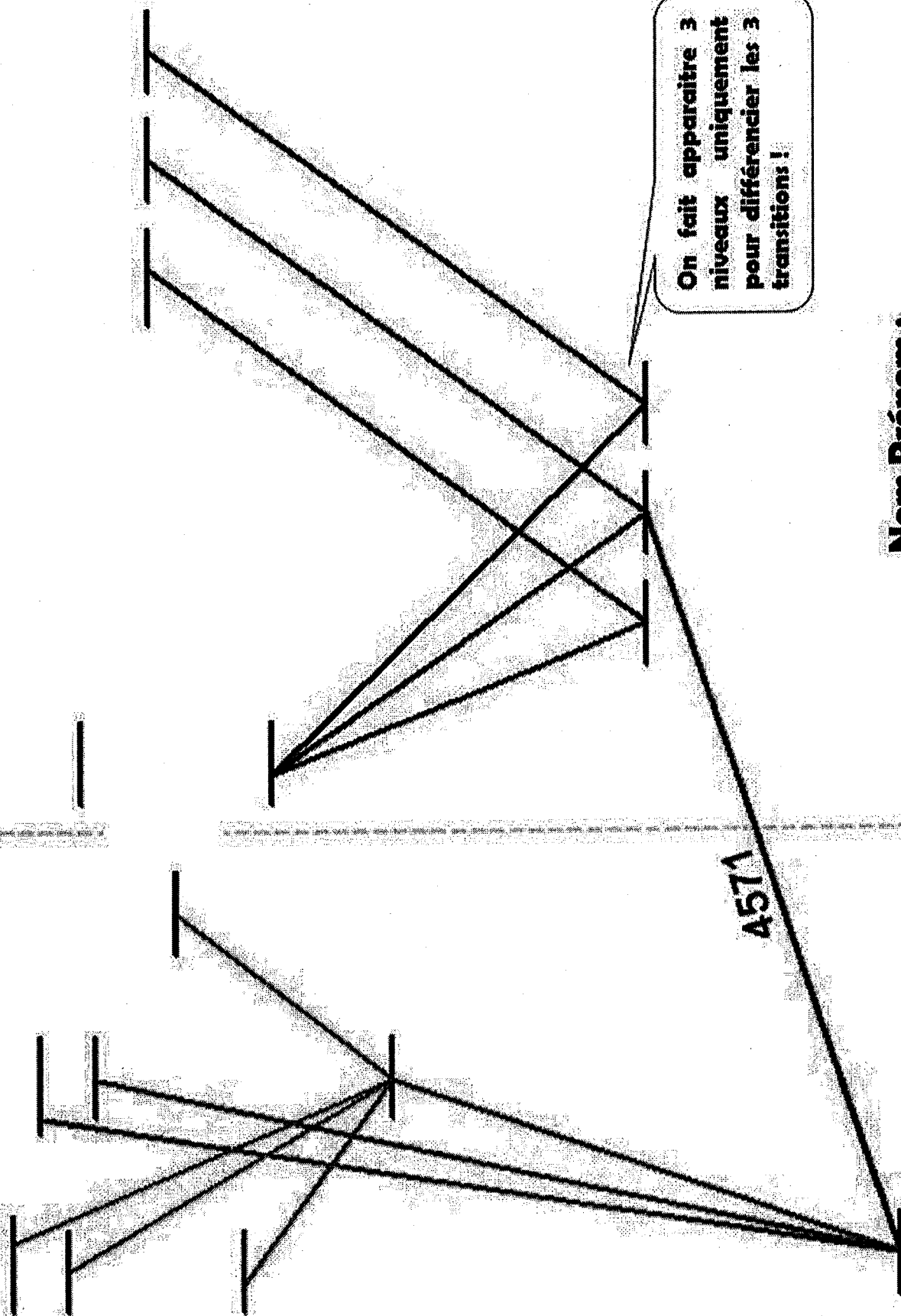
La configuration électronique de l'élément Fer est la suivante :  $\text{Fe} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

**B-1** Proposer la configuration électronique fondamentale du  $\text{Fe}^{2+}$  et le terme spectral associé sachant que la multiplicité de spin est égale à 5. Argumenter votre réponse.

**B-2** Proposer la configuration électronique fondamentale du  $\text{Fe}^{3+}$  et le terme spectral associé sachant que la multiplicité de spin est égale à 6. Argumenter votre réponse.

**B-3** En quoi vos réponses peuvent paraître problématiques vis des positionnements des niveaux 4s et 3d ?

**Limite de ionisation**



**Nom Prénom :**