

DM 2

Ex 1

3. Classer, par ordre d'énergie croissante, les différentes configurations.

- 1^{ière} : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^0$
- 2^{ième} : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$: FONDAMENTALE
- ~~3^{ième} : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^8 3d^3 4s^0$: N'EXISTE PAS~~
- 4^{ième} : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^0 4p^2$
- plus c'est stable, plus basse est l'énergie
- configuration fondamentale = celle de moindre énergie, donc LA PLUS STABLE !!!
 - $E(2) < \text{reste}$
- 1^{ere} : sous-couche d $\frac{1}{2}$ remplie : assez stable
 - $E(1) < E(4)$
- $E(2) < E(1) < E(4)$

Ex 2 :

- 7. Quels sont les degrés d'oxydation les plus probables pour le thallium? (rappel : les do correspondent aux charges que peut porter l'ion Tl)
 - Les do peuvent aller de $-V$ (on sature toute la couche) à $+III$ (on arrache tous les e^- de valence)
 - Les do les plus stables sont $+I$ ($[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^0$) ; $+III$ ($[Xe] 6s^0 4f^{14} 5d^{10} 6p^0$ sous-couche pleine) ; $-II$ ($[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^3$ sous-couche demi-remplie) ; $-V$ ($[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 = [Rn]$ couche pleine).
- 8. Indiquer précisément la signification des dessins (que représente un lobe, que représentent les couleurs....).
 - Un lobe représente le volume où on a 90% de chance de trouver l' e^- .
 - La couleur représente le signe de la fonction d'onde (ce qui permet d'identifier les plans nodaux).

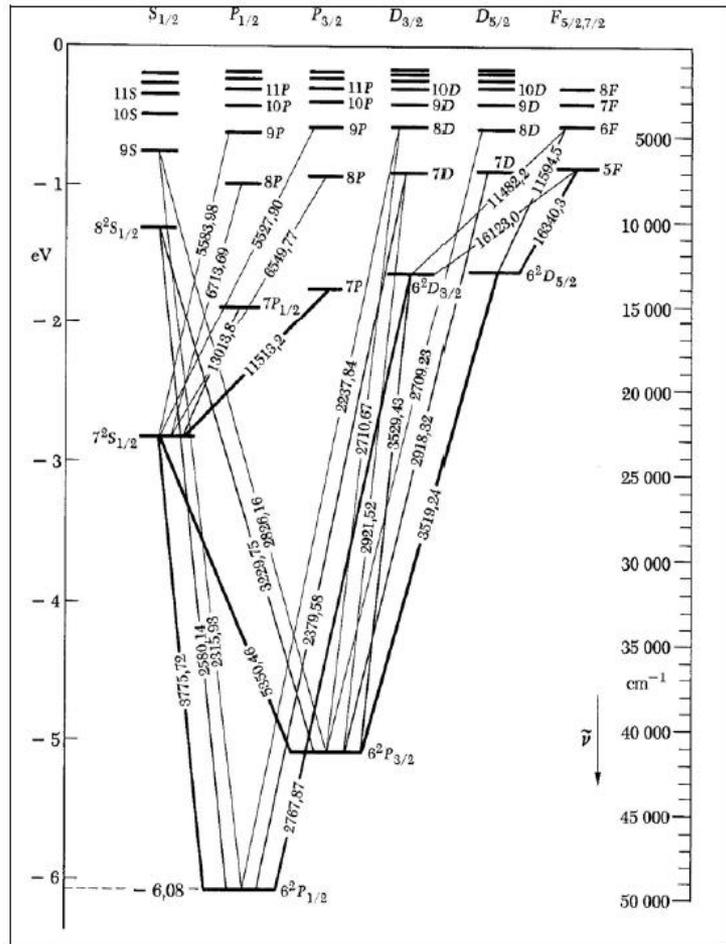


Figure 1

- 11. Quelle est la transition : niveau de départ et niveau d'arrivée, responsable de la raie verte observée par Crookes

- *William Crookes observe la présence d'une raie verte inconnue dans le spectre d'émission*
- l'émission étant le passage d'un niveau haut vers un niveau inférieur
- **vert et intense : $7^2S_{1/2}$ à $6^2P_{3/2}$**
- **$\Delta E =$**
 - Lecture graphique $(-2,8 - -5,1) = 3,3$ eV, BOF car 2 CS
 - $-13,6 \times Z^2 \left(\frac{1}{7^2} - \frac{1}{6^2} \right)$, FAUX
 - $-13,6 \times Z^*{}^2 \left(\frac{1}{7^2} - \frac{1}{6^2} \right)$, on ne connaît pas Z^*
 - $\frac{hc}{\lambda}$, super puisque λ à 6 CS !!!

- 14. A l'aide du modèle de Slater développé dans le TD (utiliser les documents associés et les tableaux ci-après), calculer le potentiel d'ionisation de Tl.

- $PI = 2 \times E_{6s6p}(Tl^+) - 3 \times E_{6s6p}(Tl)$

- $E_{n,l} = -13,6 \times \frac{Z^{*2}}{n^{*2}} = -13,6 \times \frac{(Z - \sigma_{6s6p})^2}{n^{*2}}$

| Groupe d'origine de l'électron étudié | Contribution des autres électrons | | | | | |
|---------------------------------------|-----------------------------------|------------|----------|------|------|---------------------|
| | Couches n-2, n-3, ... | Couche n-1 | Couche n | | | Couches supérieures |
| | | | s, p | d | f | |
| s, p | 1.0 | 0.85 | 0.35 ** | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| d | 1.0 | 1.0 | 1.0 | 0.35 | 0.0 | 0.0 |
| f | 1.0 | 1.0 | 1.0 | 1.0 | 0.35 | 0.0 |

| | | | | | | |
|----|---|---|---|-----|---|-----|
| n | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| n* | 1 | 2 | 3 | 3,8 | 4 | 4,2 |

** sauf entre 2 électrons 1s (0,30)

Ex 3

- 3- Quels sont les plans de symétrie de CO_2 , en utilisant le même repère que celui donné en 1^{ière} partie. En étudiant la symétrie des orbitales fragments, en déduire quelles sont les OA du carbone qui peuvent interagir par symétrie avec **les OM π de O_2** ?

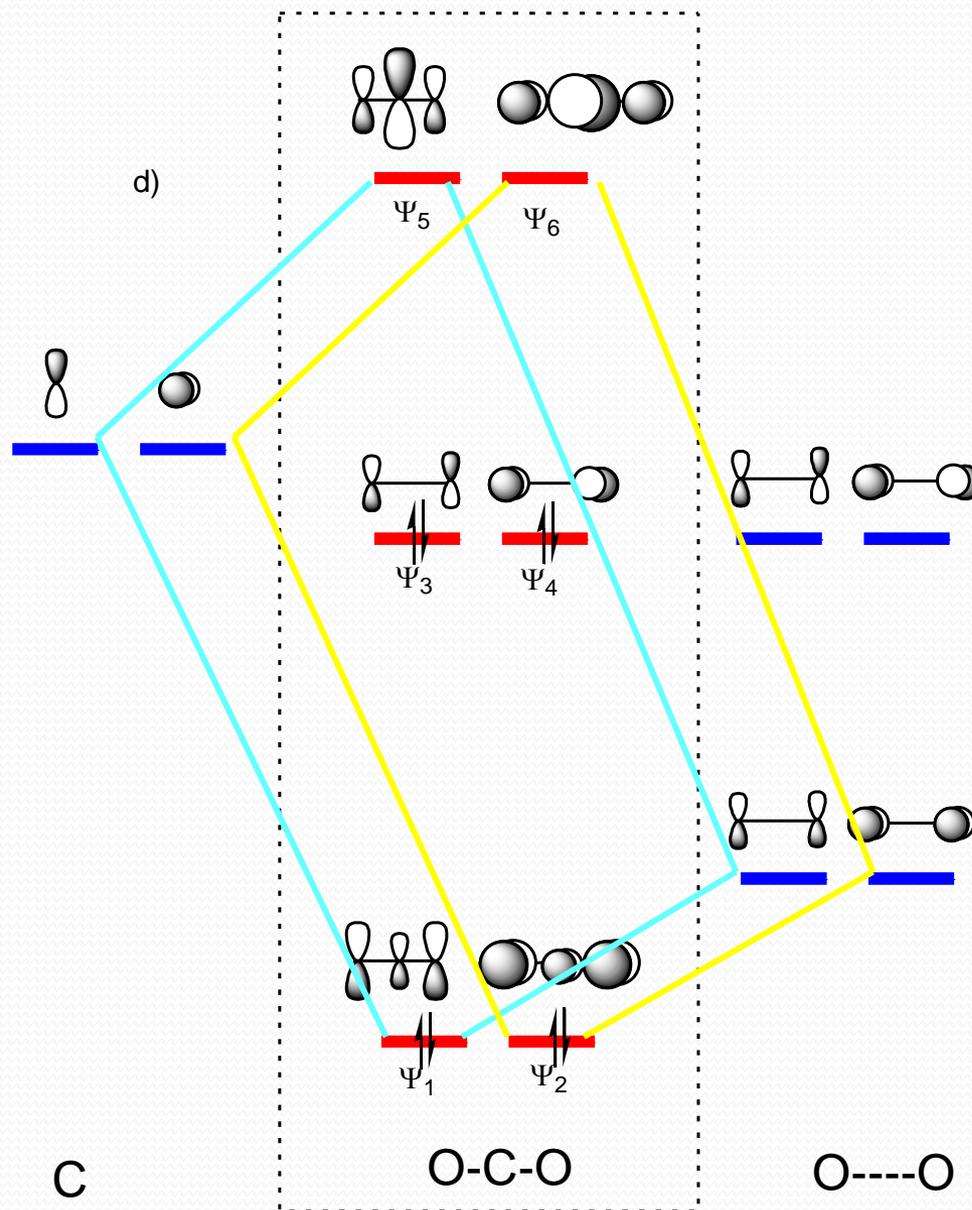
- Les OM de type **π cad les π liantes et les π anti-liantes**

| OA | 2s | 2px | 2py | 2pz | π_x | π_y | π_x^* | π_y^* |
|-----|----|-----|-----|-----|---------|---------|-----------|-----------|
| Oxz | S | S | A | S | S | A | S | A |
| Oyz | S | A | S | S | A | S | A | S |
| Oxy | S | S | S | A | S | S | A | A |

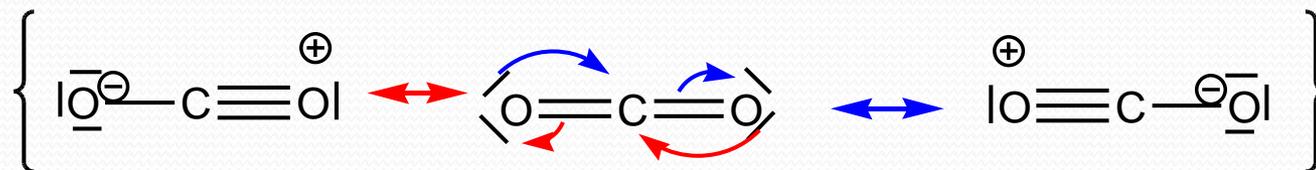
- Les antiliantes n'interagissent avec aucune OA de C
- π_x interagit avec la 2px(C)
- π_y interagit avec la 2py(C)

- On a 2 interactions à 2 orbitales différentes :

- $|\Delta E_+| < \Delta E_-$
- dissymétrie dans les OM
-  géométrie !!!
 - O-C-O
 - ~~C-O-O~~



- C apporte 2 e- π et O₂ 6 e- π (configuration $\pi_x^2 \pi_y^2 \pi_x^{*1} \pi_y^{*1}$) \Rightarrow 8 e- π à placer \Rightarrow Configuration de CO₂ : $\Psi_1^2 \Psi_2^2 \Psi_3^2 \Psi_4^2$
- Il y a bien **2 liaisons π (CO) et 2 doublets NON liants** qui peuvent intervenir dans le système π (délocalisables par mésomérie).



- On n'a déterminé que les « Deuxième partie : **OM π de CO₂** »
 - donc on ne peut trouver que :
 - les liaisons π
 - Les dnl délocalisés avec le système π : cad 2 des 4 dnl



That's all Folks!