

# DM 2

# Ex 1

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

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



- 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  $\text{CO}_2$ , en utilisant le même repère que celui donné en 1<sup>ière</sup> partie. En étudiant la symétrie des orbitales fragments, en déduire quelles sont les OA du carbone qui peuvent interagir par symétrie avec **les OM  $\pi$  de  $\text{O}_2$**  ?

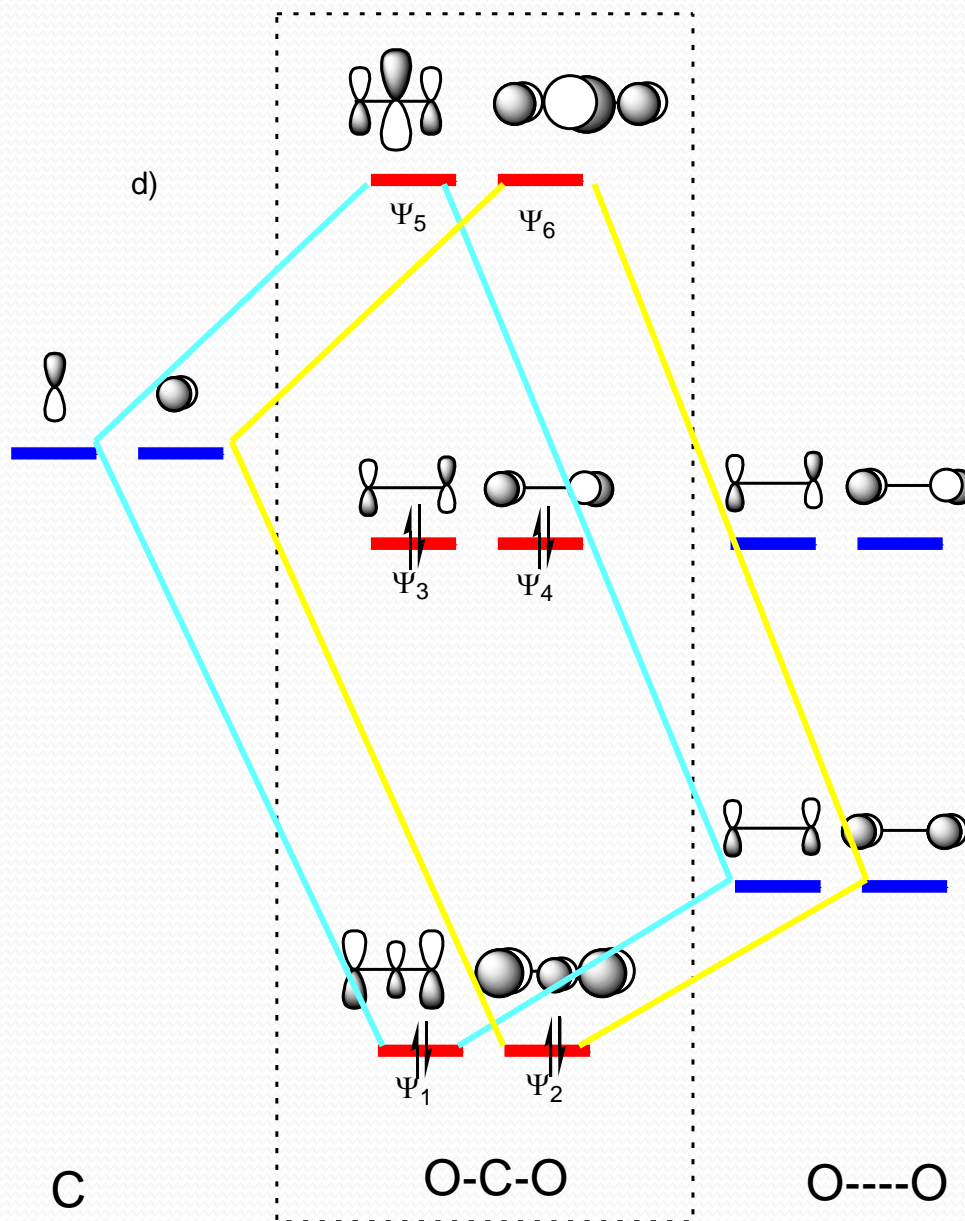
- Les OM de type  **$\pi$  cad les  $\pi$  liantes et les  $\pi$  anti-liantes**

OA	2s	2px	2py	2pz	$\pi_x$	$\pi_y$	$\pi_x^*$	$\pi_y^*$
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

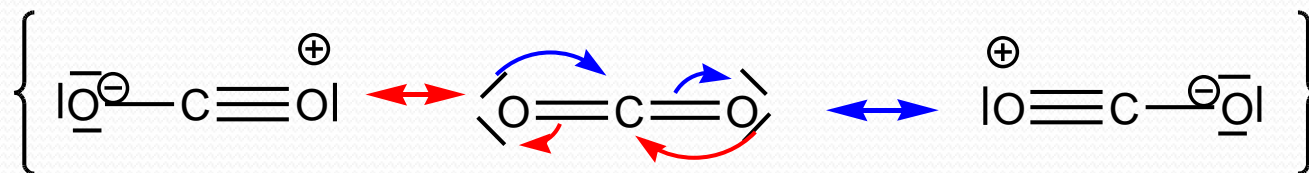
- Les antiliantes n'interagissent avec aucune OA de C
- $\pi_x$  interagit avec la 2px(C)
- $\pi_y$  interagit avec la 2py(C)

- On a 2 interactions à 2 orbitales différentes :

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



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



- On n'a déterminé que les « Deuxième partie : **OM  $\pi$  de CO<sub>2</sub>** »
  - donc on ne peut trouver que :
    - les liaisons  $\pi$
    - Les dnl délocalisés avec le système  $\pi$  : cad 2 des 4 dnl





*That's all Folks!*