

PHY2301P - Molécules et Cristaux - DM

À soumettre sous format PDF sur Moodle avant 23h55 le janvier 1 2023.

Exercice 1. Quelques molécules dangereuses utilisées par l'industrie

Les deux prochaines parties traitent des représentations de Lewis et VSEPR de molécules dangereuses utilisées par l'industrie chimique.

- Le phosgène COCl_2 , gaz très toxique, produit à plusieurs milliers de tonnes par an pour l'industrie des polymères (l'atome de carbone est central).
- Les chlorures de phosphore est une famille de molécules – comprenant notamment PCl_3 , PCl_4^+ , PCl_5 , PCl_6^- – utilisé dans plusieurs domaines de l'industrie chimique. Par exemple, PCl_3 est utilisé pour la production de composés organophosphorés alors que PCl_5 est utilisé pour améliorer les rendements de production d'ester.

Données :

- Moment dipolaire électrique de PCl_3 : $|\vec{\mu}_{\text{tot}}| = 0,97 \text{ D}$.
- Longueur de la liaison P – Cl dans la molécule PCl_3 : $d = 204 \text{ pm}$.

Le phosgène

1. Déterminer le nombre d'électrons de valence de chaque atome qui compose le phosgène.
2. Déterminer le nombre de doublets électroniques dans le phosgène.
3. Déterminer les représentations de Lewis des cinq formes mésomères du phosgène.
4. Quelle est la forme la plus stable ? Justifier.

Les chlorures de phosphores

5. Donner, sans justifier, les représentations stables de Lewis pour les chlorures de phosphore.
6. À l'aide de la théorie VSEPR, déterminer et représenter la figure de répulsion de chaque chlorure de phosphore. Indiquer la valeur des angles théoriques entre deux liaisons P – Cl.
7. En réalité, l'angle entre deux liaisons P – Cl pour la molécule PCl_3 est $\alpha = 100,3^\circ$. Commenter.
8. Déterminer $\vec{\mu}$ le moment dipolaire électrique de la liaison P – Cl dans la molécule PCl_3 . En déduire δ le pourcentage ionique de cette liaison. Commenter.
9. Que vaut le moment dipolaire électrique de l'ion moléculaire PCl_4^+ ? Justifier.

Exercice 2 : Autour du baryum

Le baryum de symbole ${}_{56}\text{Ba}$ ($M = 137 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$) est utilisé pour piéger les gaz résiduels dans les tubes à vide, lors de la désoxydation de la fonte ou encore pour former des alliages. Les composés ioniques du baryum sont utilisés dans diverses fabrications industrielles : céramiques, peinture, verres, caoutchouc... En médecine, le sulfate de baryum est également une substance de marquage en radiographie.

1. Donner la configuration électronique du baryum dans son état fondamental.
2. En déduire l'ion ou les ions le(s) plus courant(s) de cet élément.
3. Dans quelle période et quelle colonne du tableau périodique se situe le baryum ? Justifier.

Le baryum, en brûlant dans le dioxygène, donne lieu à la formation d'un oxyde de baryum solide BaO dont le paramètre de maille est égal à $0,554 \text{ nm}$. La maille élémentaire est de symétrie cubique. Les ions oxyde O^{2-} forment un réseau cubique à faces centrées (CFC). Le rayon ionique de l'ion oxyde est égal à $0,140 \text{ nm}$.

4. Combien existe-t-il de motifs par maille ? Justifier.
5. Combien y-a-t-il de sites interstitiels tétraédriques (T) et octaédriques (O) dans la maille CFC formée par les anions ? Justifier.
6. Sachant que les cations occupent soit 100% des sites T, soit 100% des sites O, établir quel type de site interstitiel occupent les ions baryum.
7. Calculer le rayon ionique de l'ion Ba^{2+} .