

DM3 : Chimie

1 Structure de la matière

- Règles de remplissage :
 - règle de Pauli : deux électrons ne peuvent avoir leurs quatre nombres quantiques identiques
 - règle de Hund : les électrons se répartissent dans les cases quantiques avant de s'apparier
 - règle de Klechkowski : Le remplissage s'effectue selon des valeurs croissantes de $(n + l)$, en cas d'égalité on remplit d'abord le plus petit n .
- Carbone : $Z_C = 6 : 1s^2 2s^2 2p^2$
- Le silicium est juste en dessous du carbone donc sa configuration électronique finit en $3p^2$. Sa configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ donc son numéro atomique est $Z_{Si} = 14$
- Les deux atomes ont le même nombre d'électrons de valence (4) : ils auront des propriétés chimiques similaires.

2 Structure cristalline du β -SiC

- Dans la maille, il y a :
 - 4 atomes de carbone ;
 - $8 \times (1/8) + 6 \times (1/2) = 4$ atomes de silicium.

Il y a donc autant d'atomes de carbone que de silicium dans la maille : on pourra prendre la formule SiC pour le carbure de silicium.

3 Formation de SiC par CVD

- Quotient de la réaction : $Q_r = \frac{(P_{HCl}/P^\circ)^3}{P_{CH_3SiCl_3}/P^\circ} = \frac{P_{HCl}^3}{P^\circ{}^2 P_{CH_3SiCl_3}}$
- Tableau d'avancement :

	$CH_3SiCl_{3(g)}$	$SiC(s)$	$HCl_{(g)}$	n_{totgaz}
E.I	n	0	0	n
E(t)	$n(1 - \alpha)$	$n\alpha$	$3n\alpha$	$n(1 + 2\alpha)$

- À l'équilibre on a $K = Q_r = \frac{P_{HCl}^3}{P^\circ{}^2 P_{CH_3SiCl_3}}$ où la pression partielle P_i d'une espèce gazeuse est donnée par $P_i = x_i P_{tot} = x_i P^\circ$. Avec $x_i = n_i / n_{totgaz}$. On en déduit que $K = \frac{27\alpha_q^3}{(1+2\alpha_q)^2(1-\alpha_q)}$, dont la résolution numérique donne $\alpha_q = 0.80$.
- Une augmentation isotherme (à température constante) de la pression augmente la valeur de Q et aura tendance à déplacer l'équilibre dans le sens de fabrication des réactifs, et donc aura tendance à faire diminuer la valeur de α_q
- Le temps de demi-réaction correspond au temps au bout duquel la quantité de matière est divisée par 2.

n (mol)	0.10	0.20	0.30
$\tau_{1/2}$ (min)	21	21	21

Le temps de demi-réaction est indépendant de la quantité de matière initiale : la réaction est d'ordre 1.

- Comme la réaction est d'ordre 1 la vitesse de réaction est $v(t) = k[MTS]$ Donc la concentration de MTS vérifie l'équation différentielle $k[MTS] = -\frac{d[MTS]}{dt}$.
- En résolvant l'équation différentielle précédente, on trouve :

$$[MTS](t) = [MTS]_0 e^{-kt}$$

- Le temps $\tau_{3/4}$ de 3/4 de réaction est atteint lorsque $MTS(\tau_{3/4}) = [MTS]_0/4$ d'où $\tau_{3/4} = \frac{\ln(4)}{k} = \frac{2\ln(2)}{k}$
- On a $\tau_{1/2} = \frac{\ln(2)}{k}$ donc $\tau_{3/4}/\tau_{1/2} = 2$. Cela est vérifié sur les courbes où l'on trouve que $\tau_{3/4}$ est d'environ 42 minutes.
- On écrit la loi d'ARRHENIUS aux températures T_2 et T_3 :
 - à T_2 : $k(T_2) = A \exp(-E_a/RT_2)$

$$- \text{ à } T_3 : k(T_3) = A \exp(-E_a/RT_3)$$

Or $\tau_{1/2}(T_3) = \tau_{1/2}(T_2)/20 = \ln(2)/(20k(T_2))$ donc $k(T_3) = 20k(T_2)$. D'où

$$E_a = \frac{\ln(20)R}{\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_3}} = 388 \text{ kJ mol}^{-1}$$