ISTIA EI-1	**Structure de la matière**	**CC2 - Session 1** **Sans document** **Calculette autorisée**

Cours : Expliciter et énoncer la règle de Slater pour le calcul de l'énergie d'un atome polyélectronique à Z électrons (vous expliciterez les termes et unités)

Application :

a) Calculer dans l'état fondamental, l'énergie de l'atome de carbone $_6C$ selon Slater et représenter son diagramme énergétique.

b) Calculer selon Slater, l'énergie de première ionisation (PI1) de l'atome $_6C$ (en eV et en $kJ.mol^{-1}$)

Données : Constantes d'écran d'un électron i :

1 eV = 1.602 10^{-19} J
Nombre Avogadro N_A = 6.02223 10^{23} mol^{-1}

i \ j	1s	2s ou 2p
1s	0.3	0
2s ou 2p	0.85	0.35
3s ou 3p	1	0.85

Exercice 1 :

Soient les molécules CO_2, PCl_5 et SF_4 – Indiquer pour chacune d'elle :

1) son schéma de Lewis
2) sa géométrie (VSEPR) avec un schéma
3) la présence ou non de moments dipolaires sur les liaisons et le cas échéant, la présence d'un moment dipolaire permanent que vous représenterez sur le schéma précédent.

Données :

Elément	$_6C$	$_8O$	$_9F$	$_{15}P$	$_{16}S$	$_{17}Cl$
Electronégativité χ	2.55	3.44	3.98	2.19	2.58	3.16

Exercice 3 : Pour cet exercice vous reprendrez les données de l'exercice 1.

La molécule SO_2 a une géométrie coudée en V ; l'angle des deux liaisons S=O est α = 119°. Son moment dipolaire mesuré est de 1,633 D.

1) Donner la structure de Lewis de cette molécule.
2) Représenter la molécule et son moment dipolaire global $\overrightarrow{\mu_D}$
3) Calculer le moment dipolaire d'une liaison S=O : $\left\|\overrightarrow{\mu_{SO}}\right\|$
4) Calculer le caractère ionique δ de la liaison S=O.
5) Calculer les charges partielles portées par chaque atome dans cette liaison (en C)

Donnée : 1 D = 1/3 10^{-29} C.m Longueur liaison S=O : 1,431 Å. Charge e- = -1.602 10^{-19} C

Exercice 4 :

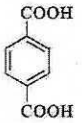
Le **zirconium** est l'élément chimique métallique de symbole $_{40}Zr$. Il est trois fois plus abondant que le cuivre dans la croûte terrestre, dont il compose 0,0165 % (principalement sous forme de zircon $ZrSiO_4$ et de zircone ZrO_2). Au-dessus de 863 °C, sa structure est **cubique centrée** (variété allotropique Zirconium β).

1) Calculer le nombre d'atomes Zr_β par maille et la coordinence de chaque atome.
2) Indiquer sur quel axe du cube, les atomes sont tangents – En déduire le paramètre de maille a du réseau (en nm).
3) Calculer la compacité C de la maille de Zr_β (en %).
4) Calculer sa masse volumique du Zr_β (en $kg.m^{-3}$).
5) Caractériser le type de liaison entre atomes et justifier les valeurs élevées des températures de changement d'état, à P atm : T_f = 1855 °C et T_V = 4409 °C.

Données : A(Zr) = 91.22 u.m.a Nombre Avogadro N_A = 6.02223 10^{23} mol^{-1}
Rayon atome Zr : r = 0,160 nm

Exercice 5 :

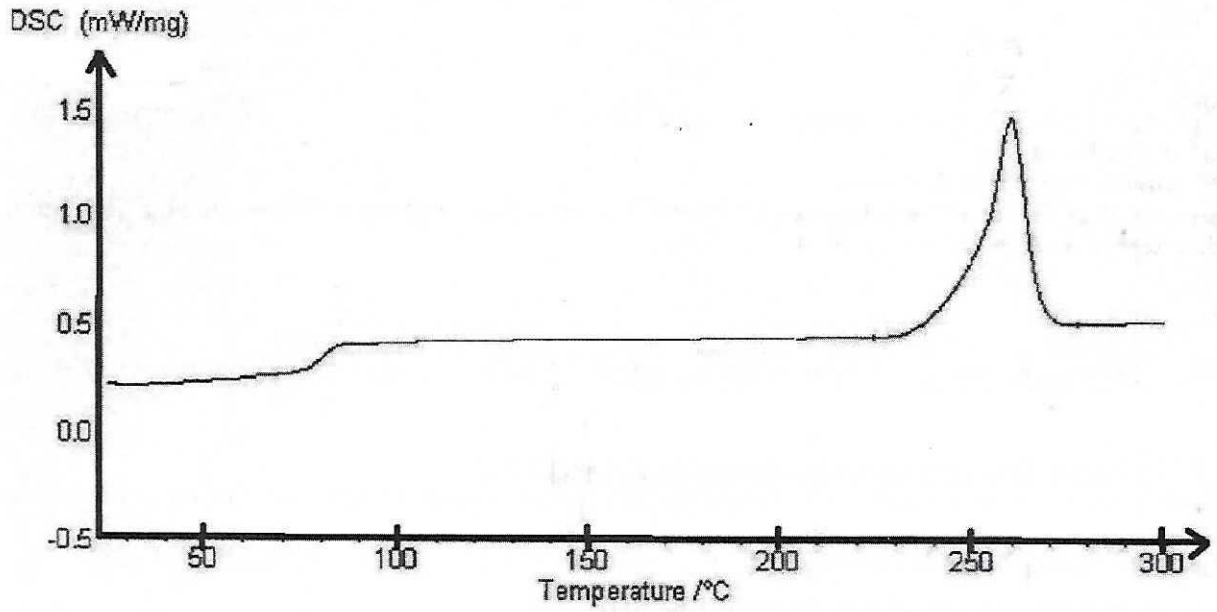
Le polyéthylène téréphtalate (PET) est un polymère obtenu par condensation de l'acide téréphtalique de formule globale représentée ci-contre ($C_8H_6O_4$) avec de l'éthylène glycol ($HO\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}OH$).



Il trouve des applications très nombreuses en particulier pour l'emballage de l'eau gazeuse et les fibres textiles dites « polaires ».

1) Calculer la masse molaire des deux monomères entrant dans la composition du PET
2) Ecrire la réaction de polycondensation du polymère (avec élimination d'eau) – Donner le motif de répétition et sa masse molaire.
3) Quelle est la fonction organique stable assurant la liaison entre monomères ?
4) On synthétise un échantillon de PET de masse moléculaire moyenne : $\overline{\mathbf{M_n}} = 500\,000$ g.mol^{-1}, quel est le degré de polymérisation moyen en nombre $\overline{\mathbf{DP_n}}$ du PET synthétisé.
5) Quelle est la masse d'eau éliminée lors de la polymérisation par macromolécule de PET synthétisée ?
6) Indiquer en justifiant la nature des liaisons entre les macromolécules de PET à l'état solide.
7) Refroidi brutalement, le PET est amorphe et transparent. Un refroidissement lent ou l'adjonction de germes de cristallisation peut le rendre semi-cristallin et translucide. D'après le thermogramme ci-contre obtenu sur un échantillon de PET. Indiquer en justifiant la nature amorphe ou semi-cristalline de l'échantillon ainsi que leurs températures caractéristiques.

Données : **M(H)=1 g.mol^{-1}** **M(C)=12 g.mol^{-1}** **M(O)=16 g.mol^{-1}**



Thermogramme du PET analysé en DSC (10 °C.min^{-1} ; sous N_2)