



Corrigé type examen final. Chimie minérale (partie exercice). Option C

Réponse :

A. Echelle de Pauling

1) Calcul de l'électronégativité des éléments Li, Na et K dans l'échelle de Pauling.

Soit à déterminer l'électronégativité du Lithium Li (χ_{Li})

Données : $\chi_H = 2,1$; $D_{H-H} = 104,2 \text{ kcal/mol}$; $D_{LiH} = 58,5 \text{ kcal/mol}$; $D_{LiLi} = 26,5 \text{ kcal/mol}$.

En remplaçant dans l'expression de Pauling, il s'ensuit :

$$\Delta\chi_{LiH} = 0,45 * \sqrt{D_{LiH} - \sqrt{(D_{LiLi} * D_{HH})}}$$

$$|\chi_H - \chi_{Li}| = 0,45 * \sqrt{D_{LiH} - \sqrt{(D_{LiLi} * D_{HH})}}$$

$$\chi_{Li} = \chi_H - 0,45 * \sqrt{D_{LiH} - \sqrt{(D_{LiLi} * D_{HH})}}$$

En généralisant pour un hydruure alcalin MH

$$\chi_M = \chi_H - 0,45 * \sqrt{D_{MH} - \sqrt{(D_{MM} * D_{HH})}}$$

0,5 point

Application numérique :

Li

$$\chi_{Li} = \chi_H - 0,45 * \sqrt{D_{LiH} - \sqrt{(D_{LiLi} * D_{HH})}}$$

$$\chi_{Li} = 2,1 - 0,45 * \sqrt{58,5 - \sqrt{(26,5 * 104,2)}}$$

$$\chi_{Li} = 2,1 - 0,45 * \sqrt{58,5 - 52,548}$$

$$\chi_{Li} = 2,1 - 0,45 * \sqrt{5,95}$$

$$\chi_{Li} = 2,1 - 0,45 * 2,439$$

$$\chi_{Li} = 2,1 - 1,09755$$

$$\chi_{Li} = 1,00$$

1 point

Na

$$\chi_{Na} = 2,1 - 0,45 * \sqrt{48,2 - \sqrt{16,5 * 104,2}}$$

$$\chi_{Na} = 2,1 - 0,45 * \sqrt{48,2 - 41,46}$$

$$\chi_{Na} = 2,1 - 0,45 * \sqrt{6,736}$$

$$\chi_{Na} = 2,1 - 0,45 * 2,595$$

$$\chi_{Na} = 2,1 - 1,16788$$

$$\chi_{Na} = 0,932$$

1 point

K

$$\chi_K = \chi_H - 0,45 * \sqrt{D_{KH} - \sqrt{(D_{KK} * D_{HH})}}$$

$$\chi_K = 2,1 - 0,45 * \sqrt{43,8 - \sqrt{(12,2 * 104,2)}}$$

$$\chi_K = 2,1 - 0,45 * \sqrt{43,8 - 35,6544}$$

$$\chi_K = 2,1 - 0,45 * \sqrt{8,1455}$$

$$\chi_K = 2,1 - 0,45 * 2,552$$

$$\chi_K = 2,1 - 0,45 * 2,854$$

$$\chi_K = 2,1 - 1,2843$$

$$\chi_K = 0,815$$

1 point

	H	Li	Na	K
	2,1	1,00	0,93	0,82

2) Pourquoi, ne pas utiliser la première formule (moyenne arithmétique) ?

Prenons l'exemple de Li

$$D_{H-H} = 104,2 \text{ kcal/mol}; D_{LiH} = 58,5 \text{ kcal/mol}; D_{LiLi} = 26,5 \text{ kcal/mol}.$$

$$D_{A-B} - \frac{(D_{A-A} + D_{B-B})}{2} = D_{Li-H} - \frac{(D_{Li-Li} + D_{H-H})}{2} = 58,5 - \frac{(26,5 + 104,2)}{2} = 58,5 - 65,35 = -6,85$$

$$\sqrt{D_{A-B} - \frac{(D_{A-A} + D_{B-B})}{2}} = \sqrt{-6,85} \text{ (Indéterminée, la formule n'est pas valable).}$$

0,5 point

B. Echelle d'Allred-Rockow

1) Calcul de Z_{eff}

$$Z_{eff} = Z - \sigma$$

Li ($Z = 3$) :

Configuration: $1s^2 2s^1$

$$Z_{eff} = 3 - 0,35 - 2 * 0,85$$

$$Z_{eff} = 0,95$$

0,5 point

Na ($Z = 11$) :

Configuration: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

$$Z_{eff} = 11 - 0,35 - 8 * 0,85 - 2 * 1$$

$$Z_{eff} = 1,85$$

0,5 point

K ($Z = 19$) :

Configuration: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

$$Z_{eff} = 19 - 0,35 - 8 * 0,85 - 8 * 1 - 2 * 1$$

$$Z_{eff} = 1,85$$

0,5 point

2) Calcul de l'électronégativité :

Li : $Z_{eff} = 0,95$; $Rcov = 1,225 \text{ \AA}$

$$\chi_{Li} = 0.359 * \frac{0.95}{1,225^2} + 0.744$$

$$\chi_{Li} = 0,22727 + 0.744$$

$$\chi_{Li} = 0,97$$

0,5 point

Na : $Z_{eff} = 1,85$; $Rcov = 1,516 \text{ \AA}$

$$\chi_{Na} = 0.359 * \frac{1,85}{1,66^2} + 0.744$$

$$\chi_{Na} = 0,103 + 0.744$$

$$\chi_{Na} = 0,98$$

0,5 point

K : $Z_{eff} = 1,85$; $Rcov = 1,516 \text{ \AA}$

$$\chi_K = 0.359 * \frac{1,85}{2,03^2} + 0.744$$

$$\chi_K = 0,161 + 0.744$$

$$\chi_K = 0,905$$

0,5 point

3) Comparaison

	H	Li	Na	K
$\chi_{Pauling}$	2,1	1,00	0,93	0,82
χ_{Allred_Rockow}	2,58	0,97	0,98	0,905

0,5 point

Les valeurs des électronégativités calculées par les deux méthodes sont sensiblement similaires.

0,5 point