

Moment dipolaire des molécules et forces intermoléculaires

1 Série 1

Problèmes 1 à 7 tirés et adaptés du Atkins (22.1(a+b), 22.5(a+b), 22.6a, 22.6b, 22.7a, 22.8(a+b), problème 22.1)

1.1 Problème 1

Parmi les molécules suivantes, lesquelles peuvent être polaires: ClF_3 , O_3 , H_2O_2 , SO_3 , XeF_4 , SF_4 ?

1.2 Problème 2

Les moments dipolaires des liaisons $C - O$ et $C - F$ sont respectivement égaux à $1,2 D$ et $1,4 D$. Les longueurs de liaison sont respectivement de $143 pm$ et $141 pm$. Comment ces résultats sont-ils corrélés avec les différences d'électronégativité des atomes des liaisons? Dans quel sens le moment dipolaire devrait-il s'orienter?

1.3 Problème 3

Le moment dipolaire du toluène (méthylbenzène) vaut $0,4 D$. Évaluez les moments dipolaires des trois formes de xylène (diméthylbenzène). De quelle réponse pouvez-vous être sûr?

1.4 Problème 4

Calculez la résultante de 2 moments dipolaires de $1,5 D$ et $0,80 D$ formant un angle de $109,5 \text{ deg}$ entre eux.

1.5 Problème 5

Déterminez, en valeur et en direction, le moment dipolaire de l'ensemble de charges suivant, disposées dans le plan (xy): $3e$ à $(0,0)$, $-e$ à $(0,32 \text{ nm}, 0)$ et $-2e$ à un angle de 20 deg par rapport à l'axe x et à $0,23 \text{ nm}$ de l'origine.

1.6 Problème 6

Le volume de polarisabilité de H_2O vaut $1,48 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$, celui de NH_3 , $2,22 \times 10^{-30} \text{ m}^3$. Calculez le moment dipolaire induit par un champ électrique appliqué de $15,0 \text{ kV.m}^{-1}$ dans chacune de ces deux molécules.

1.7 Problème 7

Quelle serait l'orientation favorable d'une molécule de H_2O ($\mu = 1.82 \text{ D}$) quand elle s'approche d'un anion? Calculez l'énergie d'interaction entre la molécule dans cette orientation et l'anion quand le dipôle de la molécule d'eau est à (a) $1,0 \text{ nm}$, (b) $0,3 \text{ nm}$ et (c) $30,0 \text{ nm}$ de l'ion.

2 Série 2

Problèmes 8 à 13 tirés et adaptés du Chang (16.7, 16.8, 16.9, 16.14, 16.28, 16.30)

2.1 Problème 8

Calculez l'énergie d'interaction entre deux molécules H_2O ($\mu = 1.82 \text{ D}$) distantes l'une de l'autre de 2.76 \AA .

2.2 Problème 9

La force de Coulomb (en $1/r^2$) est qualifiée 'de longue portée', tandis que les forces d'interaction de Van der Waals sont appelées 'de courte portée'.

1. Donnez la forme de la force d'attraction dérivant d'un potentiel en $-1/r^6$.
2. Portez sur le même graphique la force d'attraction obtenue à la question précédente et celle de la force de Coulomb $F_{coul} = 1/r^2$.

2.3 Problème 10

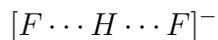
Calculez le moment dipolaire induit au sein d'une molécule I_2 ($\alpha' = 12.5 \times 10^{-30} \text{ m}^3$) par un ion Na^+ qui se trouve à une distance de 5.0 \AA de la molécule.¹

2.4 Problème 11

Si la molécule H_2O était linéaire, serait-elle (a) toujours polaire? (b) toujours capable de former des liaisons H avec d'autres molécules?

2.5 Problème 12

L'ion HF_2^- existe et a une géométrie linéaire symétrique



Donnez une description LCAO-MO de la structure électronique de l'ion à partir de ce que vous connaissez de la molécule HF .

2.6 Problème 13

Le potentiel d'interaction entre les deux atomes d'hélium dans le dimère He_2 est donnée par

$$V(r) = \frac{B}{r^{13}} - \frac{C}{r^6}$$

avec $B = 9.29 \times 10^4 \text{ kJA}^{13} \cdot \text{mole}^{-1}$ et $C = 97,7 \text{ kJA}^6 \cdot \text{mole}^{-1}$

1. Rappelez la configuration électronique de He_2 dans son état fondamental, ainsi que son ordre de liaison. Que représente $V(r)$ donné ci-dessus, à la lumière de ces résultats?
2. Calculez la distance internucléaire d'équilibre de He_2 ainsi que son énergie de dissociation.

¹Il faut d'abord calculer le champ électrique exercé par l'ion à la position de la molécule. Ce champ dérive du potentiel de Coulomb

$$V(\vec{r}) = -\frac{Z_{Na}e}{(4\pi\epsilon_0)r}$$

exercé par l'ion sur une charge test unitaire placée au point \vec{r}

3. Le dimère sera-t-il stable à la température ambiante ($T = 300\text{ K}$)?
(NB: Comparez l'énergie de de dissociation du dimère avec l'énergie thermique $k_B T$)