

**LICENCE DE CHIMIE. Parcours CHIMIE PHYSIQUE. L3S6 CP M1P4 M1C**

**Interactions non-covalentes.**

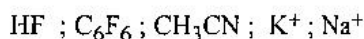
**Mai 2009. Epreuve de 1H30. Sans documents**

**I- Gaz rares**

- 1- On considère l'énergie d'interaction  $\Delta E$  entre deux atomes  $X \cdots X$  de gaz rares identiques.  
Dessiner *sur un même graphe*  $\Delta E$  en fonction de la distance  $d_{XX}$  pour  $X = \text{He}$  et pour  $X = \text{Xe}$ .  
Indiquer les valeurs approximatives des minima de  $\Delta E$  et des distances correspondantes.
- 2- Comment se manifestent *expérimentalement* ces interactions ?  
Comment se comparent la température d'ébullition de l'hélium et du xénon ?
- 3- Des gaz rares peuvent former des liaisons hydrogène, par ex. Kr avec HF.  
a) Dessiner ce "complexe", en précisant son *énergie* et sa *structure* (approximatives).  
b) Comparer les énergies des "complexes" Kr / HCl et Kr / HF .  
Comparer Kr / HCl et Ar / HCl. (Donner des arguments simples).

**II- Interactions avec le benzène**

On considère les dimères que fait le benzène  $\text{C}_6\text{H}_6$  en phase gazeuse avec:



- 1- Dessiner pour chaque dimère la structure qui vous paraît la plus stable, en justifiant brièvement pourquoi.
- 2- Quel est le dimère le plus stable ? Le moins stable ?
- 3- Peut-il y avoir des interactions *électrostatiques* entre deux molécules de benzène ?

**\*\* TSVP \*\***

### III - Réaction $\text{SN}_2$ : $^*\text{Cl}^- + \text{CH}_3\text{-Cl} \rightarrow ^*\text{ClCH}_3 + \text{Cl}^-$

- a) Dessiner les géométries du système de départ, et de son état de transition, ainsi que le profil énergétique de la réaction en phase gazeuse / dans l'eau.
- b) Expliquer brièvement l'évolution énergétique en phase gazeuse / dans l'eau. A quoi est due la barrière ?
- c) Pourquoi la barrière décroît quand on passe de l'eau à un solvant comme la DMF (diméthylformamide) ?

### IV – Simulation de $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$ dans l'eau

On simule par dynamique moléculaire une boîte d'eau (modèle TIP4P) de 30 Å de côté contenant une paire d'ions  $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$  placés "au hasard".

- a) Quelle est la concentration correspondante du sel ?
- b) Quelle durée (approximative) simuler pour bien caractériser la solvation des ions ?
- c) Dessiner les fonctions de distribution radiale  $g_{\text{Na-O}}(r)$  et  $g_{\text{Na-H}}(r)$ , en précisant leurs caractéristiques.
- d) Dessiner les fonctions de distribution radiale  $g_{\text{Cl-O}}(r)$  et  $g_{\text{Cl-H}}(r)$ , en précisant leurs caractéristiques.
- e) Lors de la simulation, comment faire pour calculer la Température  $T(t)$  du système ?