



Pr. Bouzid.M

Chimie générale

Atome – liaison chimique – Molécule,



Pr. Benmounah.A

Chimie générale « Atome - liaison chimique – Molécule », est un manuel de cours de première année universitaire et grande école. Il couvre la première année LMD sciences.

Le cours est présenté en deux chapitres: Atomistique et liaison chimique – molécule. Chaque chapitre est constitué de huit paragraphes avec des repérages sous forme d'exercices corrigés. Cet enchainement pédagogique illustré, permet une bonne assimilation des concepts fondamentaux en première année structure de la matière LMD. Il permet par ailleurs la préparation de l'étudiant aux années de spécialisation attenantes à l'image des méthodes spectrales, biochimie...

L'auteur, co-auteur et le superviseur ont une expérience affirmée dans l'enseignement universitaire et la recherche scientifique Sciences de la vie, Pharmacie, Sciences et techniques, hydrocarbures et préparation des concours.

Université de Boumerdes
University of Boumerdes

Science - Education

Edition Spéciale : N° 01

Dépot l'égal : 04 - 2021

ISBN : 978-9931-9642-0-9



9 789931 964209

CHIMIE GENERALE UR - MPE - Boumerdes Pr M. BOUZID



Chimie générale

Atome – liaison chimique – Molécule

Sciences de la vie - sciences médicales - sciences techniques



Auteur HDR Mohammed Bouzid Enseignant chercheur UR MPE / INIM / UMBB

Co auteur: ATR Amina Ouradi Née Djadi Attachée de recherche UR MPE / UR ADTE /CRAPC / UMBB

Superviseur: Pr Abdelbaki Benmounah UR MPE / UMBB

UR MPE

Unité de Recherche Matériaux, procédés et environnement, Université de Boumerdes

CHIMIE GENERALE

ATOME – LIAISON CHIMIQUE - MOLECULE

Sciences de la vie ~ sciences médicales ~ sciences et techniques

Par

Auteur: *Dr M. BOUZID HDR UR-MPE / FS / UMBB*

Co-auteur : *A. OURADI née DJADIATR UR-ADTE/CRAPC / UR-MP / UMBB*

Superviseur : *Pr M. BENMOUNAH Directeur UR - MPE*

Edition universitaire

Collection: Science - éducation

Spécialité: chimie

Discipline: Structure de la matière

Tome: Chimie Générale

Titre: Atome - Liaison Chimique – Molécule

Dans la même collection : Science – éducation

Chimie organique ISBN 978-9931-9642-1-6

Méthodes spectrales ISBN 978-9931-9642-2-3

Résonance magnétique nucléaire ISBN 978-9931-9642-3-0

**Unité de recherche – Matériaux, Procédés et environnement
Université M'Hamed Bougara, Boumerdes, Algérie.**



**Sciences - éducation
Première édition
UR - MPE**

**ISBN 978-9931-9642-0-9
Dépôt légal : Le 04 202**

Unité de Recherche – Matériaux, Procédés et Environnement

Avant propos

L'atomistique est un domaine de la **chimie** consacré à l'étude de la structure de l'atome et de ses propriétés physicochimiques. Dans un premier élan, nous rappelons brièvement les notions de base de l'élément chimique (Atome, isotope, ion); édifice moléculaire.

Nous insisterons, à juste titre, vu les applications diverses importantes, sur la notion de nucléide, isotopie - abondance isotopique, équivalence masse - énergie, énergie de cohésion et la radioactivité en soulignant les différents types de rayonnement ionisant et leurs propriétés. En fin les principes de la configuration électronique et les propriétés du tableau périodique : Energie d'ionisation, rayon atomique, électronégativité.

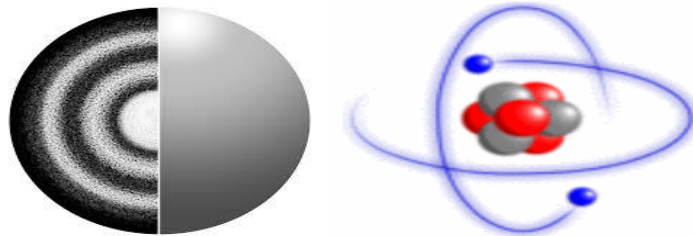
Le Tome 1 présente huit chapitres, édictés par le programme du ministère de l'enseignement supérieur en Algérie, Première année sciences de la vie et sciences médicales.

Une foule de concepts, de propriétés et d'illustration prédisposent l'étudiant à recevoir les modules importants des années attenantes: Méthodes d'analyse spectrales, le transfert de chaleur, la thermodynamique, l'imagerie, la microscopie...

Un chapitre fascinant de part la structure de la matière, l'histoire et les applications. Cette partie occupe une place grandissante en sciences médicales **notamment en médecine exploratoire et thérapeutique**, Biologie, Chimie - physique, agroalimentaire, stérilisation, environnement....

Dr M. BOUZID

CHAPITRE I : ATOMISTIQUE



- I.1 L'évolution des idées en atomistique.**
- I.2 Le modèle atomique planétaire.**
- I.3 Notion de molécule et notion de mole.**
- I.4 Isotopes.**
- I.5 Equivalence masse – énergie.**
- I.6 Phénomène de la Radioactivité.**
- I.7 Configuration électronique des atomes.**
- I.8 Classification périodique des éléments chimiques.**

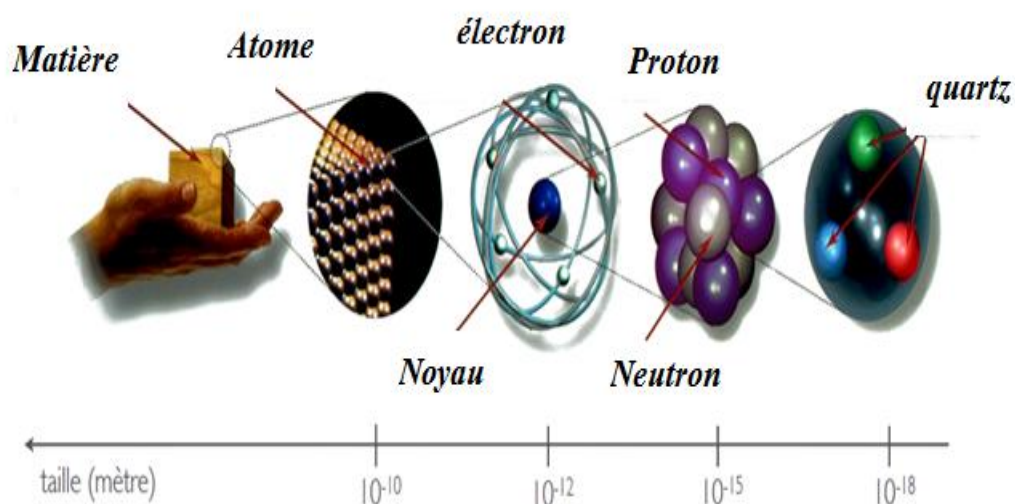
Atomistique

Introduction

L'**atomistique** est intimement liée à la civilisation universelle contemporaine. L'histoire de l'**atome** occupe une place centrale en **chimie - physique**. Elle est à la base des techniques les plus en vue : la physique des particules, Le nucléaire, l'espace, l'imagerie, La radioprospection et radiothérapie, l'énergie propre avec tout récemment la fusion nucléaire...

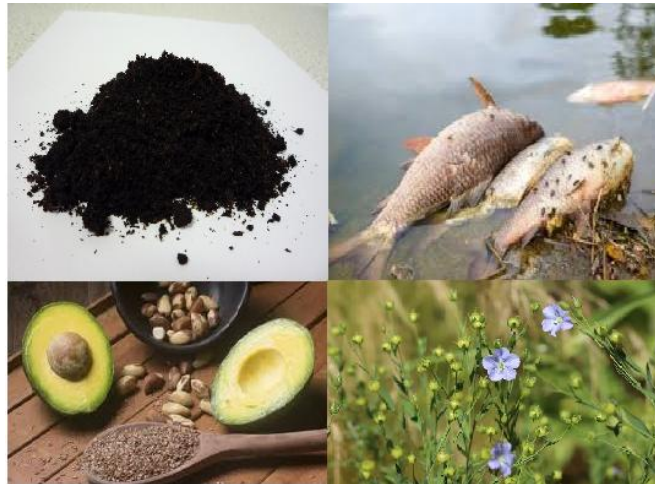
La chimie est la sciences qui étudie la composition, les réactions et les propriétés de la matière. Elle est par nature interdisciplinaire. Elle constitue une passerelles en sciences naturelles. Elle est indisponssable à la compréhension et l'interprétation des propriétés de la **matière**.

Le mot matière vient du latin **Materia** apparenté à **mater (mère)** figurée **origine, source, cause**. La matière est divisible en plus petites parties jusqu'au molécules, puis les molécules en atomes (schéma).



La matière est partout présente dans l'Univers. Les objets célestes (planètes, étoiles, comètes, etc.) comme les vivants (bactéries, plantes, animaux, etc.) sont formés de matière.

La matière se retrouve principalement sous trois états : **solide**, **liquide**, **et gazeux**. Un quatrième état de la matière peut être également observé : il s'agit de l'état plasma. Celui-ci n'est cependant au programme.



I.1 L'évolution des idées en atomistique

Donnée pour la première fois par Démocrite entre - 460 et - 370 avant J.C. Il définit l'atome comme la plus petite partie indivisible constituant la matière. Il faudra cependant attendre le XIX^{ème} siècle pour que l'atome passe d'un concept philosophique à un concept scientifique. Ce n'est qu'au début du XX^{ème} siècle que l'on aura les moyens techniques pour sonder la matière à l'échelle subatomique.

I.1.1 Le modèle atomique de Dalton

Les idées de Dalton ont été à la base de la théorie atomique moderne.



Fig I.1.1 J. DALTON

- Toute matière est faite de particules indivisibles appelées *atomes*, qui ne peuvent ni être créées, ni être détruites.
- Les atomes d'un même élément ont une masse et des propriétés physiques identiques.
- Les composés chimiques sont des combinaisons d'atomes de 222 éléments différents ou plus.
- Toute réaction chimique implique un réarrangement des atomes.

Dalton pensait que les atomes sont les plus petites unités de matière. De minuscules sphères que l'on ne pouvait pas briser en d'autres éléments plus petits.

Cette hypothèse persista jusqu'à ce que d'autres expériences de physique démontrent que les atomes étaient composés de particules encore plus petites.

I.1.2 La découverte de l'électron par J.J. Thomson

Le physicien **J.J. Thomson** commença des expériences sur les *tubes cathodiques*. Un tube cathodique est un tube de verre étanche presque entièrement sous vide. En appliquant une haute tension entre deux électrodes à une extrémité du tube, on crée un **faisceau de particules** qui part de la cathode (l'électrode chargée négativement) vers l'anode (l'électrode chargée positivement).

Ces tubes sont appelés cathodiques parce que le faisceau de particules, ou "faisceau cathodique", part de la cathode. Ce faisceau est détecté grâce à une couche de *phosphore* qui recouvre la partie du tube qui est à l'opposé des électrodes. Le phosphore émet de la lumière « **phosphorescence** » quand il est frappé par le flux cathodique.

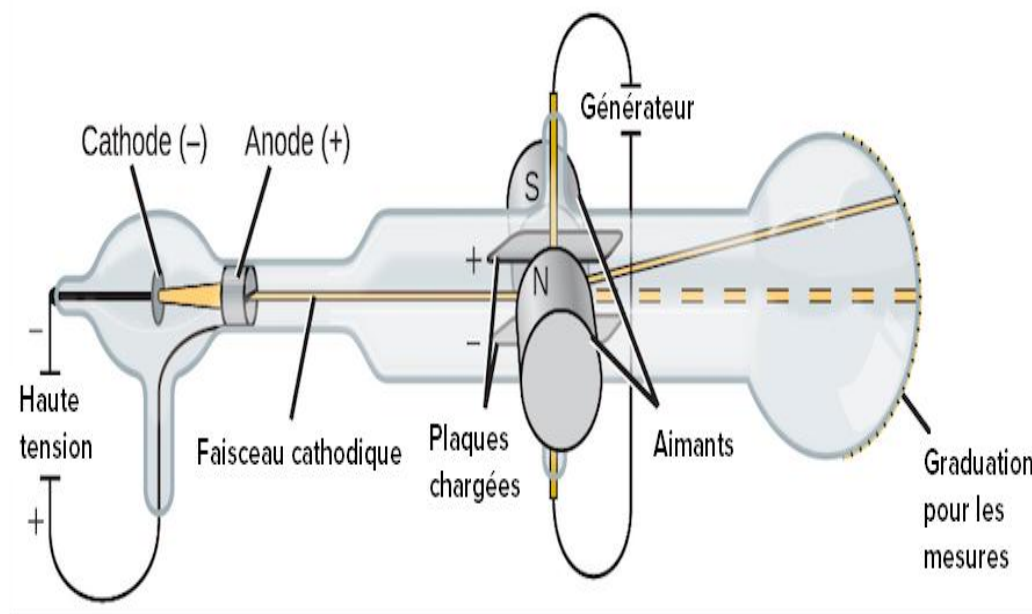


Schéma I.1.1 : d'un tube cathodique ([Image](#) issue de Openstax, [CC BY 4.0.](#))

Schéma du tube cathodique de J.J. Thomson. Le faisceau est créé à la cathode et passe à travers une fente dans l'anode. Le faisceau cathodique est repoussé par la plaque chargée négativement et attiré par la plaque chargée positivement. En mesurant la déviation causée par un champ magnétique appliqué au tube, Thomson détermina le rapport masse sur charge des particules.

Pour tester les propriétés des particules, Thomson plaça deux plaques portant des charges électriques opposées de chaque côté du faisceau cathodique. Le flux de particules fut alors dévié vers la plaque chargée positivement. Il déduisit que le faisceau cathodique était composé de particules de charge négative.

Thomson plaça également deux aimants de part et d'autre du tube, et observa que le champ magnétique ainsi créé faisait également dévier le faisceau.

Les résultats de ces expériences lui permirent de déterminer le **rapport masse sur charge** des particules du faisceau cathodique, ce qui entraîna une découverte fascinante la masse de chacune de ces particules était beaucoup plus petite que celle de n'importe quel atome connu.

Thomson essaya de répéter l'expérience en utilisant différents métaux pour les électrodes, et à chaque fois les propriétés du faisceau cathodique restaient les mêmes, quelque soit le métal formant la cathode dont il était issu. Thomson en tira les conclusions suivantes :

« **Le faisceau cathodique est composé de particules chargées négativement.**
Ces particules font partie de l'atome »

« **Ces particules subatomiques se trouvent dans tous les atomes, quelque soit l'élément chimique** »

Les particules composant le faisceau cathodique ont reçu le nom d'**électrons**.

Le modèle du pudding aux raisins

Thomson savait que les atomes étaient électriquement neutres. Comme les électrons sont chargés négativement, il déduisit qu'il devait y avoir une source positive à l'intérieur de l'atome pour compenser ces charges négatives.

Il proposa donc un modèle dans lequel les électrons, chargés négativement, "flottent" dans une soupe diffuse de charge positive. Ce modèle est souvent appelé le **modèle en pudding aux raisins de l'atome**, en référence au pudding aux raisins ou pudding de Noël qui est un célèbre gâteau Anglais (voir figure ci-dessous).

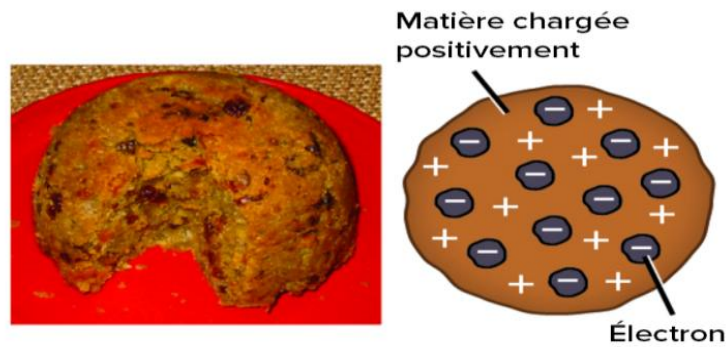


Schéma I.1.2 : Modèle du pudding aux raisins (droite), image d'un vrai pudding aux raisins (gauche). (*Image issue de Openstax, CC BY 4.0.*)

Les scientifiques ont continué leurs recherches sur la structure de l'atome, et ont notamment testé la validité du modèle de pudding aux raisins de **Thomson**.

I.1.3 Ernest Rutherford et l'expérience de la feuille d'or

Quelque temps après une autre expérience significative dans le domaine de l'atome fut réalisée par **Ernest Rutherford**, un physicien Néo-zélandais. Dans sa célèbre expérience de la feuille d'or, **Rutherford** projeta un rayon de particules alpha (He^{2+}) sur une fine couche d'or pur (**Schéma 1.3**).

Les particules alpha sont des noyaux d'hélium et sont des produits de certaines réactions de radioactivité. Pour cette expérience, **Rutherford** plaça un échantillon de radium (un métal radioactif) dans une boîte en plomb avec un minuscule trou. La plupart des radiations sont absorbées par le plomb, mais un fin rayon de particules alpha passe par le petit trou, en direction de la feuille d'or. Tout autour de la feuille d'or se trouve un écran détecteur qui produit une lumière en cas de contact avec une particule alpha.

En se basant sur le modèle de pudding aux raisins de Thomson, **Rutherford** prédit que la plupart des particules α passeraient à travers la feuille d'or. La raison est que la charge positive, selon le modèle du pudding, est supposée être dispersée à travers tout le volume de l'atome. Par conséquent, le champ électrique créé par la "soupe" chargée positivement serait trop faible pour entraver significativement la trajectoire des particules α , relativement lourdes et rapides.

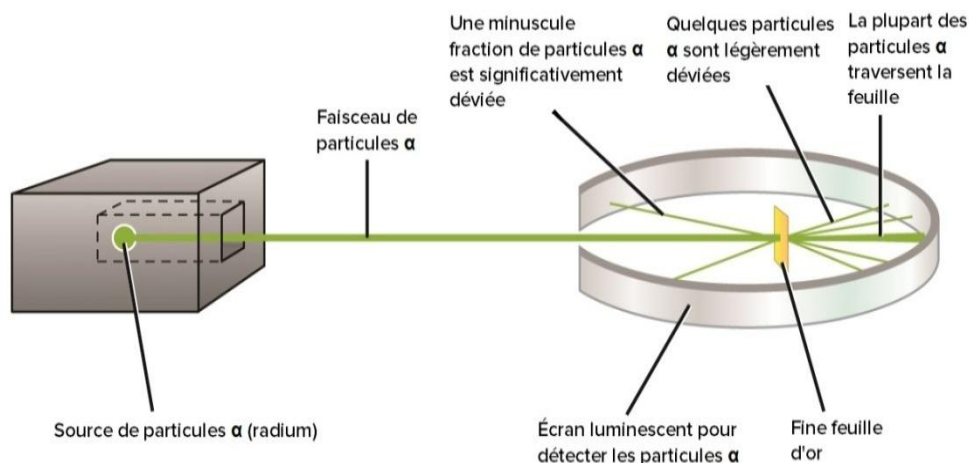


Image issue de Openstax, CC BY 4.0

Schéma I.1.3 : Le matériel utilisé pour l'expérience de Rutherford.

Dans l'expérience de la feuille d'or de Rutherford, un faisceau de particules α est dirigé sur une fine couche de feuille d'or. La plupart des particules α passent tout droit à travers la feuille d'or, mais un petit nombre de particules est légèrement dévié et un nombre encore plus faible de particules est déviée de plus de 90 degrés par rapport à leur trajectoire initiale. .

Les résultats de l'expérience furent pourtant bien plus surprenants. Bien que la plupart des particules α soient passées directement à travers la feuille d'or comme prévu, un certain nombre de particules α (environ 1 sur 20 000) avaient été déviées de plus de 90 degrés de leur trajectoire! **Rutherford** lui-même décrit ces résultats avec l'analogie suivante : "C'était la chose la plus incroyable qui me soit jamais arrivée. Imaginez que vous tiriez un obus de 151515 pouces sur un mouchoir en papier tendu au milieu de la pièce et que l'obus rebondisse et revienne vers vous."

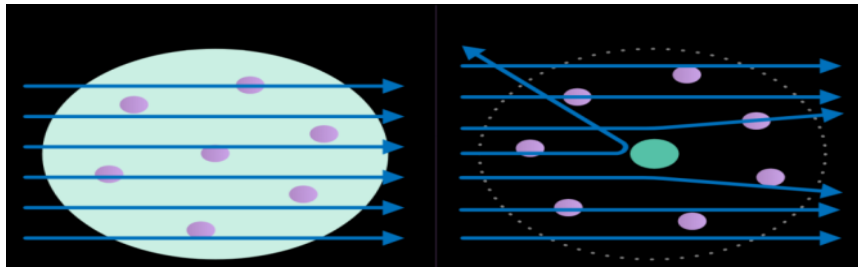


Schéma I.1.4 : Mise en évidence du noyau atomique

En se basant sur le modèle atomique de pudding aux raisins de Thomson, on supposait que rien à l'intérieur des atomes d'or n'était assez dense ou lourd pour dévier les massives particules α de leur trajectoire (image de gauche). Mais Rutherford n'observa pas du tout le même résultat lors de ses expériences (image de droite) nouveau modèle atomique était nécessaire.

I.1.4 Le modèle nucléaire (planétaire) de l'atome

A partir des résultats de ses expériences, **Rutherford** arriva aux conclusions suivantes concernant la structure de l'atome :

La charge positive doit être située dans un très petit volume dans l'atome, Comme la plupart des particules alpha sont passées tout droit à travers la feuille d'or, l'atome doit être presque entièrement constitué d'espace vide !

Image représentant des électrons (en rouge) en orbite autour d'un noyau (petite sphère noire).

À partir de ces conclusions, Rutherford proposa le *modèle nucléaire* de l'atome, dans lequel l'atome est constitué d'un minuscule noyau chargé positivement, autour duquel gravitent les électrons chargés négativement. Etant donné que le nombre de particules α significativement déviées était très faible, Rutherford estima que le noyau n'occupait qu'une minuscule fraction du volume de l'atome.

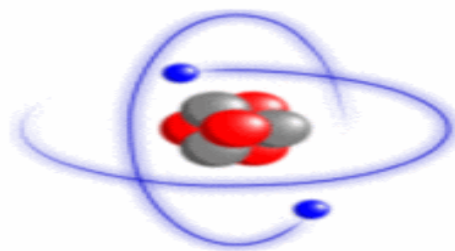


Schéma I.1.5: Modèle nucléaire (planétaire) de l'atome.

Le modèle nucléaire permet d'expliquer les résultats expérimentaux de Rutherford, mais il souleva aussi d'autres questions.

Par exemple, le rôle des électrons dans l'atome ?

Comment les électrons font-ils pour ne pas s'écraser dans le noyau, étant donné que les charges opposées s'attirent ?

I.1.5 Postulat de Bohr

- Sans émission de rayonnement, les électrons ne peuvent graviter autour du noyau que sur certaines **orbites permises**.
- Celles-ci sont déterminées par la condition de **quantification**:

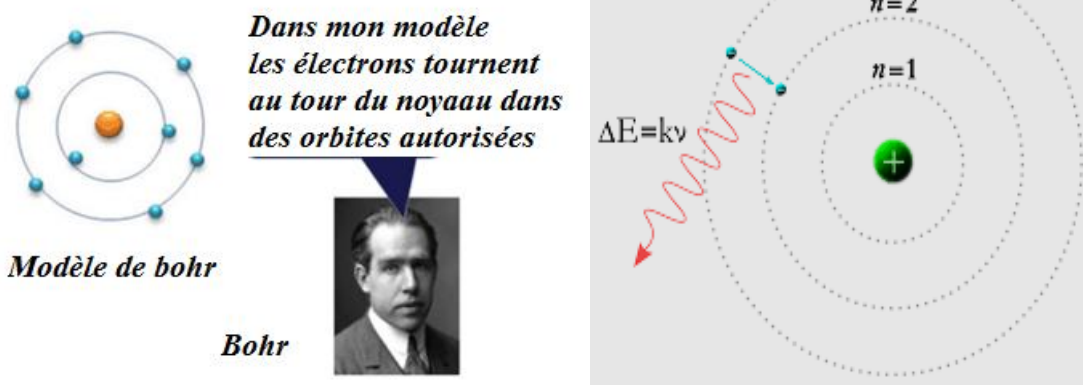


Schéma I.1.6 : Postulat de Bohr

I.1.6 postulat de Louis de Broglie

Que toute particule pouvait aussi être considérée comme une onde de matière de longueur d'onde λ



Figure I.1.2 : Louis de Broglie postulat

Postulat de De Broglie : A toute particule de masse m en mouvement de vitesse v est associé une longueur d'onde λ .

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

λ : longueur d'onde

h : constante de Planck

mv : Quantité de mouvement

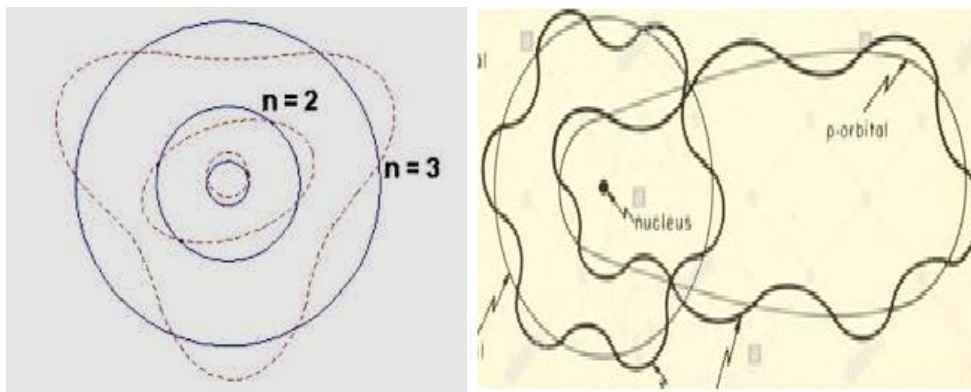


Schéma I.1.7: L'atome en mécanique ondulatoire

I.1.7 Mécanique quantique Probabiliste

Erwin Schrödinger : Rejette cette idée de trajectoire de Bohr. Pour lui, on ne peut connaître les positions d'un électron précisément, mais on définit une probabilité de trouver un électron notée $|\Psi|^2$.

Ψ étant la fonction d'onde de l'électron.

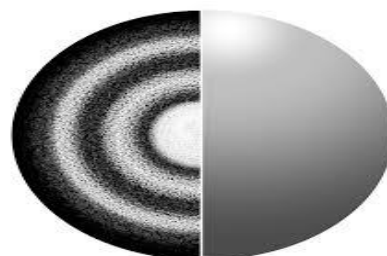
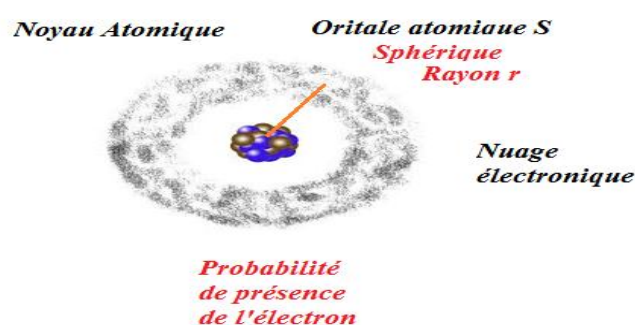


Schéma I.1.8: L'atome en mécanique quantique

Erwin Schrödinger développa le modèle quantique de l'atome, dans lequel les électrons sont traités comme des ondes de matières.



Conclusion

L'évolution des idées en atomistique montre que la science est évolutive. Le modèle de l'atome est un exemple à méditer. En effet, c'est Les expériences qui enfantent les découvertes. Les découvertes engendrent des théories, des concepts et des modèles qui permettent la compréhension, l'enseignement et le développement de la discipline.

Bibliographie

- 1) *J. WIEMANN, Y.PSCAL, J.CHUCHE, Masson & Cie Editeurs. 1965, Cours de chimie structurale : Relation entre la structure et les propriétés physiques*
- 2) [Bernard Fernandez](#), EAN : 9782729827847, 597 pages,Édi: [ELLIPSES](#)
(02/05/2006) ,*De l'atome au noyau : Une approche historique de la physique atomique et de la physique nucléaire.*
- 3) *A. Einstein., L. Infeld., L'évolution des idées en physique : des premiers concepts aux théories de la relativité et des quanta. Paris, Flammarion, 1983, p. 53.*

I.2 Le modèle atomique planétaire

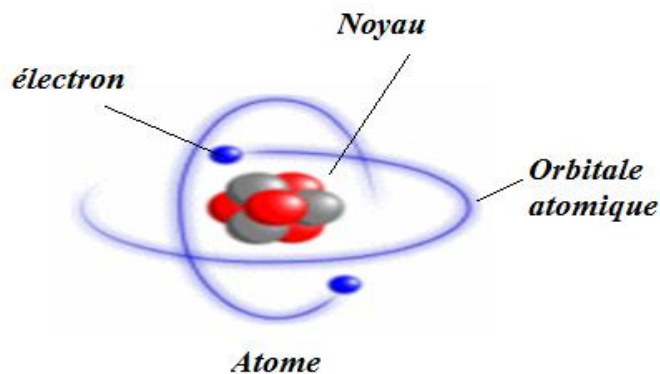


Schéma I.2.1 : Atome planétaire

I.2.1 L'ordre de grandeur des éléments de l'atome

Le volume d'un atome, représenté par une sphère, est essentiellement composé de vide. Les particules les plus « imposantes » se trouvent concentrées dans le noyau.

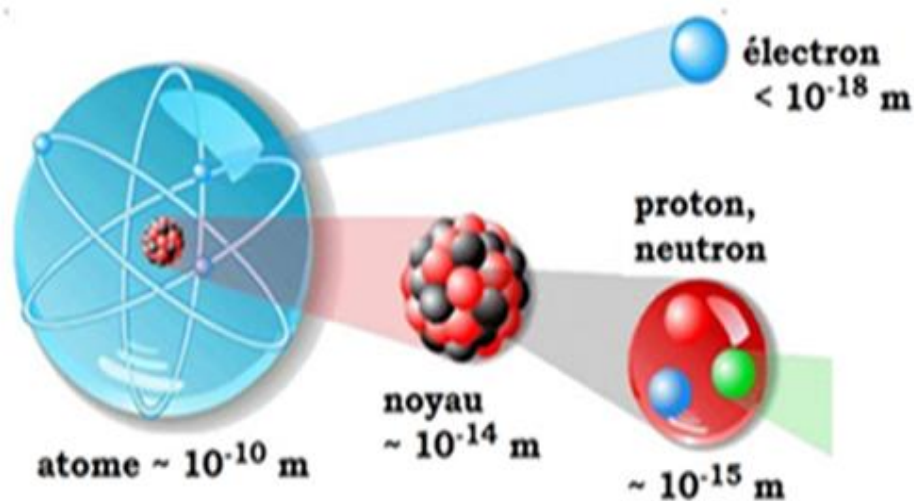


Schéma I.2.2 : Ordre de grandeur des éléments de l'atome

$$[\text{Diamètre de l'atome}] / [\text{Diamètre du noyau}] = [10^{-10}] / [10^{-14}] = 10^4$$

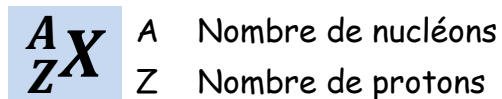
$$[\text{Diamètre de proton}] \sim [\text{Diamètre de neutron}] \sim 10^{-15} \text{ m}$$

Le noyau de l'atome est formé de deux types de particules : les **nucléons**:

Les protons et Les neutrons

I.2.2 Représentation symbolique de l'élément chimique

Chaque élément est représenté par un symbole:



Notation symbolique d'un noyau atomique



$$A = Z + N$$

Nombre de Nucléons = Nombre de Protons + Nombre de Neutrons

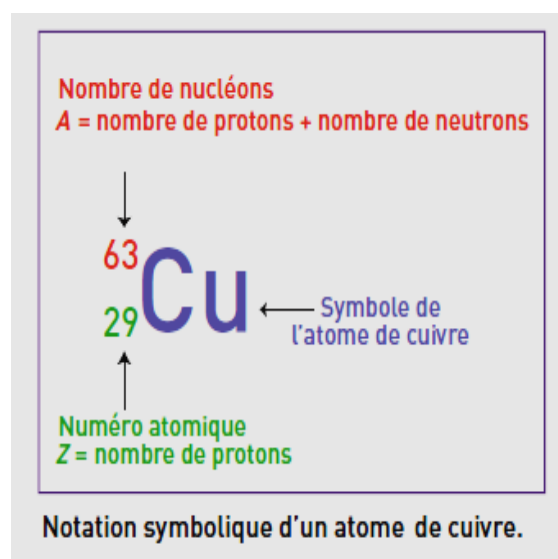


Schéma I.2.3

Exemples :

$^{12}_6\text{C}$	A = 12	nombre de nucléons
	Z = 6	nombre de protons
	N = 6	Nombre de neutrons
$^{56}_{26}\text{Fe}$	A = 56	nombre de nucléons
	Z = 26	nombre de protons
	N = 30	Nombre de neutrons

I.2.3 Numéro atomique

Le **numéro atomique** d'un élément, noté **Z**, est égal au nombre de **protons** dans le noyau de cet élément.

Nombre de masse A : Le **nombre de masse** d'un élément, noté **A**, est égal au nombre de **nucléons** (**protons** et **neutrons**) contenu dans les **noyaux** des **atomes** de cet élément.

Repérage 2.1: Atome de carbone

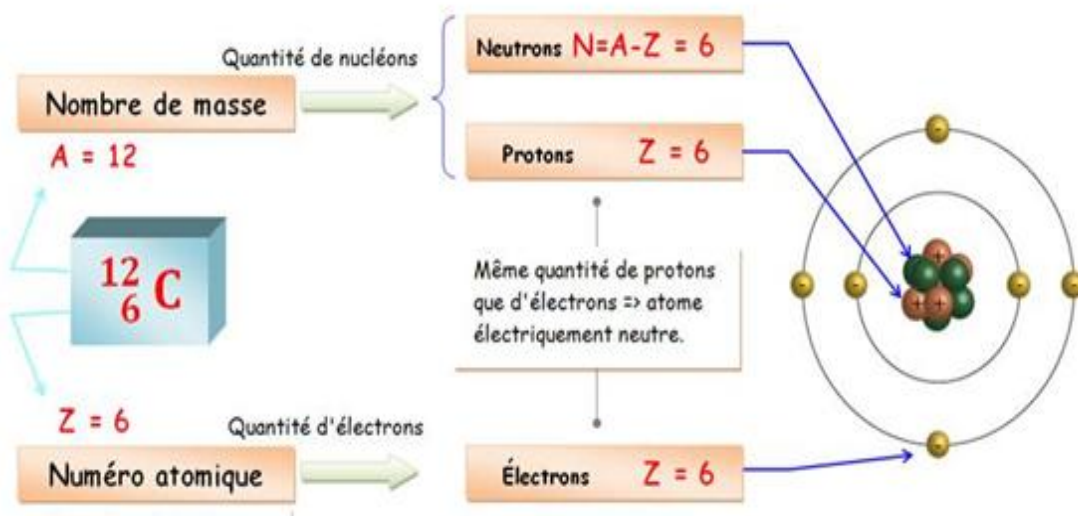


Schéma I.2.4 : Atome de carbone

I.2.4 Particules élémentaires: propriétés

	Proton	Neutron	Electron
Masse (Kg)	$1,6726 \cdot 10^{-27}$	$1,6749 \cdot 10^{-27}$	$9,1094 \cdot 10^{-31}$
Charge (Coulomb)	$+ 1,602 \cdot 10^{-19}$	0	$-1,602 \cdot 10^{-19}$

I.2.5 Unité masse atomique

	Unité de masse atomique uma	Kg
Uma	1	$1,66055 \cdot 10^{-27}$
Electron	0,0005486	$9,10953 \cdot 10^{-31}$
Proton	1,007276	$1,67265 \cdot 10^{-27}$
Neutron	1,008665	$1,67496 \cdot 10^{-27}$

I.2.6 Masse de l'atome

La masse d'un atome dépend du nombre de protons, de neutrons, car 99,97 % de la masse d'un atome se trouve dans son noyau. En effet, la masse des électrons étant presque nulle, celle-ci n'est pas considérée pour déterminer la masse atomique.

$$m_e \ll m_p \sim m_n \Rightarrow \text{Masse de l'atome} = Z \times m_p + (A - Z) m_n$$

Masse de l'atome = $Z \times \text{masse proton} + (A - Z) \times \text{masse de neutron} + Z \times \text{masse électron}$.

Exercice : Calculer le rapport de masse m_p / m_e en uma.

I.2.7 Le nombre d'Avogadro

En chimie et en physique, le **nombre d'Avogadro**, (ou **constante d'Avogadro**), nommé en l'honneur du physicien et chimiste **Amedeo Avogadro**, noté N_A , est défini comme le nombre d'entités élémentaires (atomes, molécules, ou ions en général) qui se trouvent dans une **mole** de matière.

$$N_A = 6,022\,140\,857(74) \times 10^{23} \sim 6,023 \times 10^{23}$$

I.2.8 La masse atomique (Atome gramme)

$$M_{\text{Atomique}} = \text{Nombre d'Avogadro} \times \text{masse de l'atome} = N_A \times m_a$$

Repérage :

Calculer la masse atomique de l'élément carbone :

$^{12}_6\text{C}$ Comprend : 6 Protons et 6 Neutrons.

$$M = 6,023 \times 10^{23} (6 \times 1,67 \times 10^{-27} + 6 \times 1,67 \times 10^{-27}) \sim 12 \text{ g.}$$

Repérage 2.2: Complétez le tableau

Eléments chimiques	Nbre de protons	Nbre de neutrons	Nbre d'électron
$^{23}_{11}\text{Na}$			
$^{23}_{11}\text{Na}^+$			
$^{56}_{26}\text{Fe}$			
$^{56}_{26}\text{Fe}^{2+}$			

${}^{56}_{26}\text{Fe}^{3+}$			
${}^{32}_{16}\text{S}$			
${}^{32}_{16}\text{S}^{2-}$			

I.3 Notion de molécule et notion de mole

I.3.1 Molécule

Une molécule est un assemblage d'atome stable

I.3.2 Ecriture des formules moléculaires

La formule moléculaire d'un corps pur est notée par une succession de symboles, chacun suivi d'un indice signifiant le nombre d'atomes de l'élément symbolisé. Lorsqu'il n'y a qu'un seul atome, l'indice "1" est sous-entendu. Par exemple, pour le sulfate d'hydrogène (= acide sulfurique):

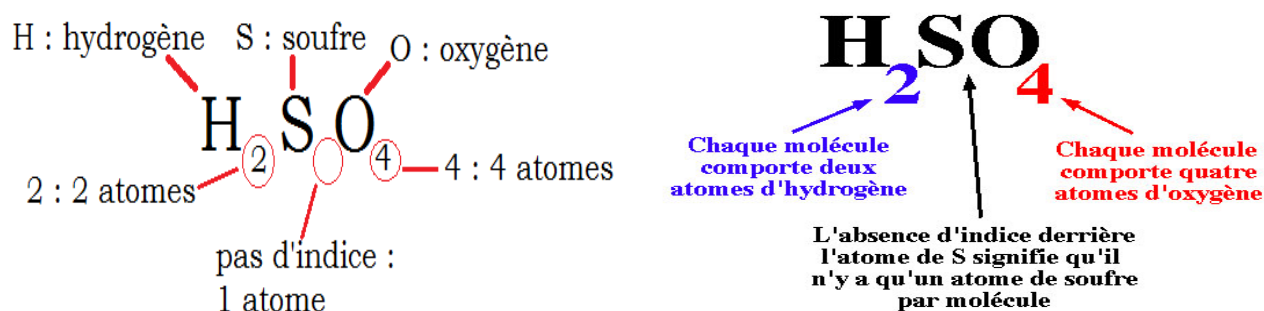


Schéma I.3.1 : Représentation de la molécule d'acide sulfurique

Exemples de molécules:

- Molécule monoatomique : He, Ar, Ne les gaz rares ...
- Molécule diatomique : O₂, N₂, H₂, ...
- Molécule polyatomique : H₂O, CH₃(OH), H₃PO₄ ...

Si une formule comprend une parenthèse, l'indice qui suit la parenthèse agit sur tout son contenu: il s'agit donc de multiplier les indices pour déterminer le nombre d'atomes de chaque espèce.

Par exemple:

Fe₂(SO₄)₃ comporte 2 atomes de fer, 3 atomes de soufre et 12 d'oxygène.

I.3.3 La masse de la molécule (masse moléculaire)

Est égale à la somme des masses des atomes constituant la molécule.

Soit la molécule O_2 : Constituée de deux atomes d'oxygène

$$m(O_2) = 2 \times m(O)$$

$$m({}^{16}_8O) = 2 \times [8 \times m_p + 8 \times m_n] = 2 \times [16 \times 1,67 \cdot 10^{-27}] = 53,44 \times 10^{-27} \text{ K}$$

I.3.4 Notion de mole de molécule

Une mole est égale à N_A molécules : $6,22 \cdot 10^{23}$ molécules

- Masse molaire

Masse d'une mole de molécules = $N_A \times m_{\text{de la molécule}}$

$$\begin{aligned} \text{Masse d'une mole de molécules d'oxygène} &= N_A \times m({}^{16}_8O) \\ &= 6,22 \cdot 10^{23} \times 53,44 \times 10^{-27} \\ &= 332,4 \cdot 10^{-4} \text{ Kg} = 33,4 \text{ g} \end{aligned}$$

Tous les éléments sont groupés dans le tableau périodique classés par ordre de Z croissant (Détailé plus tard)

I.3.5 Notion d'ion

Un ion est un atome ou une molécule chargée

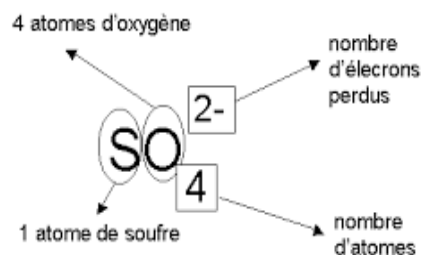
Les ions constitués d'un seul atome sont appelés ions atomiques

Ions Monoatomiques : Na^+ , Cl^- , Fe^{2+} ,

Ou plusieurs atomes forment des ions moléculaires ou des ions Polyatomiques :



Ion minéral polyatomique **Ion organique polyatomique**



Un **cation** est un atome ou molécule chargé positivement

Un **anion** est un atome ou molécule chargé négativement

Exemples : Les ions

Chimie minérale (Les minéraux) Cl^- , SO_4^{2-} , Li^+ , ...

Un composé ionique est un **composé chimique** créé par association d'ions. Dans l'eau minérale.

Eau Minérale Naturelle Gazéifiée		
Source/Bron Montfrais		
Autorisée par le Ministère de la Santé le 28/04/05.		
Toelating door het Ministerie van Volksgezondheid sinds 28/04/05.		
Minéralisation caractéristique		
Calcium	Ca^{2+}	96,00 mg/l
Magnésium	Mg^{2+}	6,10 mg/l
Sodium	Na^+	10,60 mg/l
Potassium	K^+	3,70 mg/l
Bicarbonate	HCO_3^-	297 mg/l
Sulfate	SO_4^{2-}	9,30 mg/l
Nitrate	NO_3^-	<2 mg/l
Chlorure	Cl^-	22,60 mg/l
Résidus secs à 180°C = 349 mg/l		
Droogresten op 180°C = 349 mg/l		

Exemple de fiche de l'eau minérale

Dans la roche Le chlorure de sodium (sel) est un assemblage d'**ions** Na^+ et Cl^- de **maille** cubique. Le sel est un **cristal**, car ses atomes forment une structure **périodique** et **symétrique**

*Liaison ionique
Dans le chlorure
de sodium NaCl*

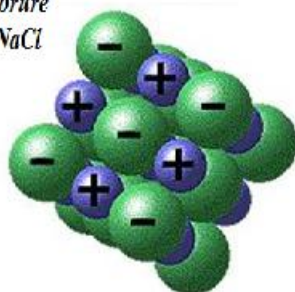
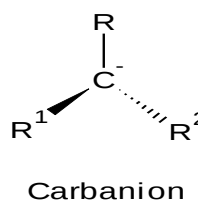
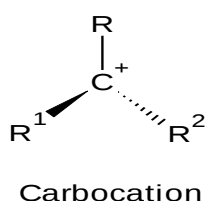


Figure I.3.1: Chlorure de sodium (sel)

Tableau : Quelques molécules à caractère ionique, Complétez la case des masses molaires.

Composés ioniques	Formules	Ions	Masse Molaire
Chlorure de sodium (sel)	NaCl	Na ⁺ et Cl ⁻	
Hydroxyde de sodium (soude)	NaOH	Na ⁺ et OH ⁻	
Hydroxyde de potassium (potasse)	KOH	K ⁺ et OH ⁻	
Sulfate de cuivre	CuSO ₄	Cu ²⁺ et SO ₄ ²⁻	
Nitrate d'argent	AgNO ₃	Ag ⁺ et NO ₃ ⁻	
Chlorure d'argent	AgCl	Ag ⁺ et Cl ⁻	
Permanganate de potassium	KMnO ₄	K ⁺ et MnO ₄ ⁻	
Dichromate de potassium	K ₂ Cr ₂ O ₇	2 K ⁺ et Cr ₂ O ₇ ²⁻	
Chlorure de fer (III)	FeCl ₃	Fe ³⁺ et 3 Cl ⁻	

Chimie organique (approfondissement : chapitre chimie organique)



I.3.6 Notion d'élément chimique

L'élément rassemble l'espèce d'atome ayant le même nombre de protons Z.

Exemple : élément Hydrogène ${}_1\text{H}\{ {}^1_1\text{H}, {}^2_1\text{H}, {}^3_1\text{H}, \text{H}^-, \text{H}^+ \}$

I.3.7 Notion de corps simple et de corps composés

Un *corps pur* est un matériau constitué d'une seule espèce chimique,

Corps pur:

Corps pur simples: On appelle **corps pur simple**, une substance chimique qui n'est composée que d'un seul type d'élément chimique:

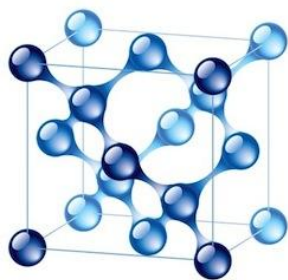
Parmi les corps simples élémentaires, on peut citer :
le fer (Fe) ; le cuivre (Cu) ; le mercure (Hg).

Certains corps simples moléculaires, comme :
Le dihydrogène (H_2) ; le dioxygène (O_2) ; le diazote (N_2).

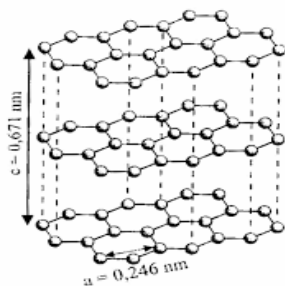
Formes allotropiques d'un corps simple : Un élément chimique peut former différents corps simples.

Pour le carbone par exemple, on compte :

Le diamant ;



le graphite ;



Les nanotubes

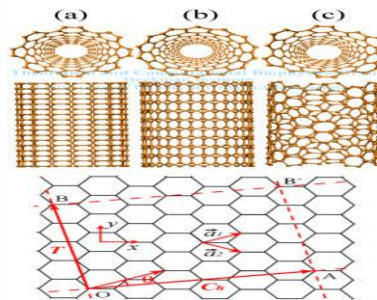


Schéma I.3.2: formes allotropiques de la matière

On parle alors des « **formes allotropiques** » de cet élément chimique. Ces corps simples ont généralement des propriétés physiques et chimiques différentes. Ainsi le dioxygène et l'ozone (O_3) ne sont pas réactifs dans les mêmes conditions.

Corps composés: Lamolécule qui constitue le corps simple est formée d'atomes différents : CH_4 , H_2O , H_2SO_4

Corps pur composé : (ou simplement corps composé) est un corps pur constitué d'atomes de différentes natures. Ces atomes peuvent être neutres ou **ionisés**, et isolés ou bien regroupés sous la forme de molécules, de **complexes** ou d'**ions polyatomiques**.

Repérage 3.1

Lequel des échantillons suivants contiennent le plus de fer ?

- 0.2 Moles de $Fe_2(SO_4)_3$.
- 20 g de fer .
- 0.3 atome- gramme de fer.
- 2.5×10^{23} atomes de fer .

Données : $M_{Fe} = 56 \text{ g.mol}^{-1}$; $M_S = 32 \text{ g.mol}^{-1}$; Nombre d'Avogadro $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$

Rappel : Dans une mole, il y a N_A particules (atomes ou molécules)

- 0.2 Moles de $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ correspond à 0,4 moles d'atomes (ou atome-gramme) de fer
- 20 g de fer correspond à $n = m / M_{\text{Fe}} = 20/56 = 0,357$ moles d'atomes de fer.
- 0.3 Atome-gramme de fer ou 0,3 mole d'atomes de fer.
- 2.5×10^{23} atomes de fer correspond à $n = \text{nombre d'atomes} / N_A = 0,415$ moles d'atomes de fer

C'est ce dernier échantillon qui contient le plus de fer

Repérage 3.2

Un échantillon d'oxyde de cuivre CuO a une masse $m = 1,59$ g. Combien y a-t-il de moles, de molécules de CuO et d'atomes de Cu et de O dans cet échantillon ?

$$M(\text{Cu}) = 63,54 \text{ g.mol}^{-1} ; M(\text{O}) = 16 \text{ g.mol}^{-1}$$

- Nombre de mole de CuO : $n = m / M(\text{CuO}) = 1,59/(63,54+16) = 0,01999$ moles
- Nombre de molécules de CuO = $(m / M_{\text{CuO}}) \cdot N_A = 0,12 \cdot 10^{23}$ molécules
- Nombre d'atomes de Cu = nombre d'atomes de O = $(m / M(\text{CuO})) \cdot N_A = 0,12 \cdot 10^{23}$ atomes

Repérage 3.3

Considérons l'élément phosphore P ($Z=15$) $^{31}_{15}\text{P}$:

1. Déterminer, en u.m.a , la masse du noyau, puis celle de l'atome de phosphore.
2. Est-il raisonnable de considérer que la masse de l'atome est localisée dans le noyau ?
3. Calculer la masse atomique molaire de cet élément.
4. La valeur réelle est de $30,9738 \text{ g. mol}^{-1}$. Que peut-on en conclure ?

Solution

- Masse du noyau = $15.m_p + 16.m_n = 15. 1,007277 + 16. 1,008665$
 $= 31,247795 \text{ uma} = 5,1880782 \cdot 10^{-23} \text{ g}$
- Masse de l'atome de phosphore : $15 m_e = 1,36643 \cdot 10^{-26} \text{ g}$

$$m_{\text{at}} = 15. M_p + 16. m_n + 15 m_e = 5,18944463 \cdot 10^{-23} \text{ g} = 31,256025 \text{ uma}$$

Oui, car : $m_e \ll m_p + m_n$

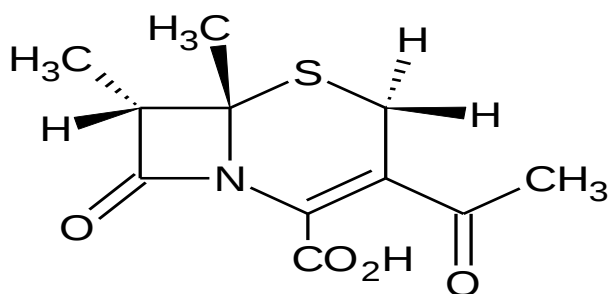
- Masse atomique molaire du phosphore : $3.M(\text{P}) = m_{\text{at.}} \cdot N_A = 31,256025 \text{ g.mol}^{-1}$

La valeur réelle est de $30,9738 \text{ g. mol}^{-1}$.

Le défaut de masse est : $\Delta m = 31,2560 - 30,9738 = 0,2822 \text{ g.mol}^{-1}$

Le système perd de la masse sous forme d'énergie lors de la formation du noyau (relation d'Einstein $\Delta E = \Delta m.c^2$)

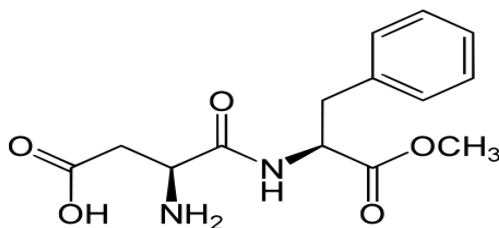
Repérage 3.4 : La céphalosporine de formule développée suivante



Céphalosporine antibiotique

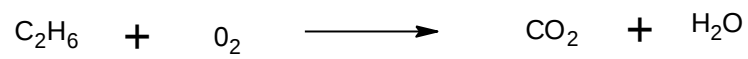
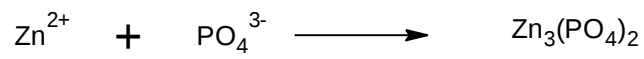
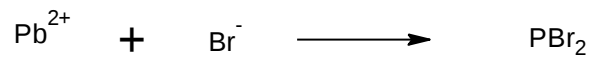
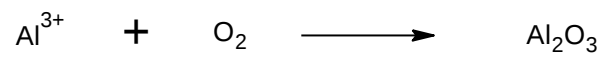
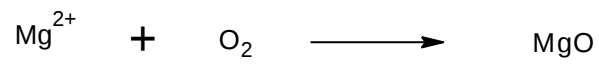
- Enumérez le type d'élément chimique (atome) et le nombre constituant la molécule.
- Ecrire la formule brute de la céphalosporine.
- Calculez la masse molaire de la céphalosporine.
- Calculez le nombre de mole dans un échantillon de masse $m = 2 \text{ g}$ de ce composé.
- La molécule est un acide ou bien une base,
- Justifiez votre réponse.

Repérage 3.5 L'Aspartame de formule développée suivante



- Ecrire la formule brute de l'aspartame.
- Calculez la masse molaire.
- Combien y a-t-il de moles dans 10 g d'aspartame ?
- Combien y a-t-il de molécules dans 10 g d'aspartame ?
- Combien y a-t-il d'atome d'azote dans 10 g d'aspartame ?

- Calculez la masse de 10^2 molécules d'aspartame.
- Equilibrer les réactions chimiques suivantes



I.4 Isotopes

I.4.1 Définition

On appelle **isotopes** (d'un certain **élément chimique**) les **nucléides** partageant le même nombre de protons (caractéristique de cet élément), mais ayant un nombre de neutrons différent.

A_ZX	Nucléides ayant le même Z, mais de A différent	${}^{A'}_ZX$
-----------	--	--------------

Isotones : Des **atomes** qui ont le même nombre de **neutrons** mais un nombre différent de **protons** .

Isotopes : Des **atomes** qui ont le même nombre de protons mais un nombre différent de **neutrons** .

Isobares : Des **atomes** qui ont le même nombre de **neutrons** et de **protons** .

Exemples :

Elément chimique Hydrogène :



Schéma I.4.1: Les trois isotopes de l'hydrogène

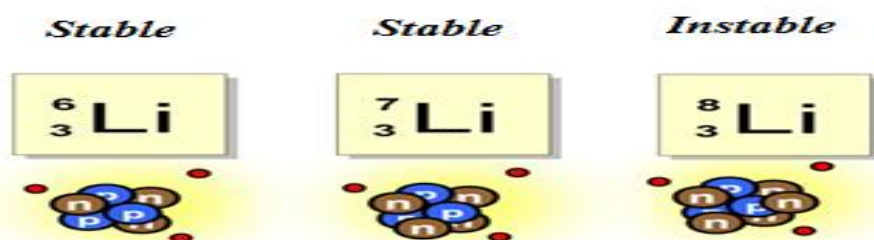


Schéma I.4.2: Les trois isotopes du Lithium

Nom	protons	neutrons	électrons
^{12}C	6	$12 - 6 = 6$	6
^{13}C	6	$13 - 6 = 7$	6
^{14}C noté C^*	6	$14 - 6 = 8$	6

Nom	protons	neutrons	électrons
^{235}U	92	$235 - 92$	92
^{238}U	92	$238 - 92$	92

Nomenclature des isotopes

Pour nommer un isotope, on dira le nom de l'élément suivi de son nombre de masse.

Un isotope de sodium (Na) possède 11 protons, 12 neutrons et 11 électrons.

Le nombre de masse de cet atome est 23 (11 protons + 12 neutrons = 23).

On nommera cet atome « **sodium 23** » et on le notera : $^{23}_{11}\text{Na}$

I.4.2 Isotopes radioactifs

Un **radionucléide** (nucléide **radioactif**, **radio - isotope** ou **isotope radioactif**) est un **nucléide** qui a un excès d'énergie nucléaire, ce qui le rend instable.

I.4.2.1 Abondance isotopique

L'**abondance isotopique** d'un élément chimique est la fraction molaire de cet **isotope** dans l'échantillon. Elle est notée ξ_i et exprimée en %.

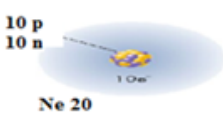
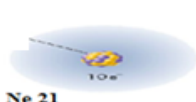
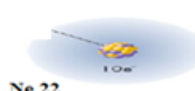
La somme des **abondances isotopiques** d'un élément chimique en % est égale à 100.

$$\sum \xi_i = 100$$

Exemple : Isotopes et abondance isotopique du carbone.

		
<i>Carbone 12</i> 6 Protons 6 Neutrons	<i>Carbone 13</i> 6 Protons 7 Neutrons	<i>Carbone 14</i> 6 Protons 8 Neutrons
Abondance atomique		
98,90 %	1,10 %	

Exemple : Isotopes et abondance isotopique du Néon

$^{20}_{10}\text{Ne}$	$^{21}_{10}\text{Ne}$	$^{22}_{10}\text{Ne}$
		
Abondance atomique		
90,98 %	0,27 %	9,25 %

I.4.2.2 La masse atomique moyenne des isotopes

La **masse atomique moyenne** est celle qui est présentée dans le tableau périodique. Elle a été calculée en tenant compte des masses relatives de chacun des isotopes d'un élément présent dans la nature ainsi que de leur abondance.

$$M_{\text{moyenne}} = \left[\sum M_i \cdot \xi_i \right] / 100$$

$$M_{\text{moyenne Ne}} = [M(^{20}_{10}\text{Ne}) \cdot 90,48 + M(^{21}_{10}\text{Ne}) \cdot 0,27 + M(^{22}_{10}\text{Ne}) \cdot 9,25] / 100$$

L'abondance relative d'un élément peut être déterminée expérimentalement par une technique d'analyse appelée *spectrométrie de masse*.

I.4.2.3 Séparation des Isotopes

Séparation électromagnétique

Cette méthode utilise le principe du *spectrographe de masse (Dempster)*.

Par exemple,

Pour séparer les deux isotopes de l'iode $^{131}\text{I}^-$ et $^{127}\text{I}^-$ utilisés en médecine, on utilise un spectrographe dont le schéma est représenté et le fonctionnement décrit ci-après.

Bien que les quantités obtenues par cette méthode soient très petites, la séparation est complète

L'iode est utilisé en médecine comme marqueur.

Le nucléide ^{131}I est utilisé en imagerie médicale (scintigraphie) pour visualiser la thyroïde car il présente une radioactivité de type β^- .

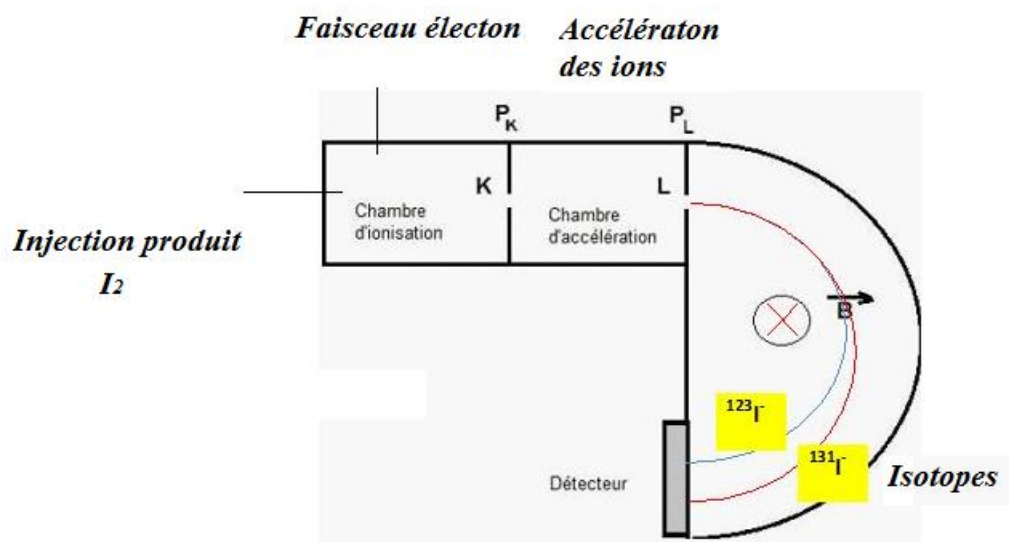


Schéma I.4.3 : Spectrographe de masse (Dempster)

Repérage 4.1 Isotope Cu

le cuivre naturel est composé de deux isotopes stables de masse atomique respectives 62,929 g et 64,924 g . Le numéro atomique $Z = 29$.

Donnez la composition des deux isotopes sachant que la masse molaire du mélange isotopique naturel est de 63, 540 g.

Solution :

Isotope 1 de masse $M_1 = 62,929 \text{ g} \Rightarrow A$ (nombre de masse) = 63 g

Isotope 2 de masse $M_2 = 64, 927 \text{ g} \Rightarrow A$ (nombre de masse) = 65 g

$$M = \sum [\xi_i \times M_i] = \xi_1 \cdot M_1 + \xi_2 \cdot M_2 \text{eq 1}$$

$$\sum [\xi_i] = 1 = \xi_1 + \xi_2 \text{eq 2}$$

$$\text{eq 2} \Rightarrow \xi_2 = 1 - \xi_1$$

$$\text{eq 1} \Rightarrow M = \xi_1 \cdot M_1 + (1 - \xi_1) \cdot M_2 = \xi_1 (M_1 - M_2) + M_2$$

$$\xi_1 = (M - M_2) / (M_1 - M_2) = (63, 540 - 64, 927) / (62,929 - 64, 927)$$

$$\xi_1 = 0,6942 = 69,42 \% \Rightarrow \xi_2 = 1 - 0,6942 = 0,3858 = 38,58 \%$$

$${}^{63}_{29}\text{Cu} = 69,42 \% {}^{65}_{29}\text{Cu} = 38,58 \%$$

Repérage 4.2 Isotope Cl

Le chlore naturel est un mélange de deux isotopes ${}^{35}_{17}\text{Cl}$ et ${}^{37}_{17}\text{Cl}$ dans les proportions relatives 75 % et 25 %.

Calculez la masse molaire atomique du Chlore naturel

Combien de molécule de di chlore existe t il dans la nature

Quelle sont leur masse molaire respective

Solution

$$M_{\text{Cl}} = 0,75 \times 35 + 0,25 \times 37 = 35,5 \text{ g}$$

Cl (35) - Cl (35)	M (Cl ₂) = 70 g	$\xi_{35} = 0,75 \times 0,75 = 0,5625$
Cl (35) - Cl (37) Cl (37) - Cl (35)	M (Cl ₂) = 72 g	$\xi_{35-37} = 2 (0,75 \times 0,25) = 0,0625$
Cl (37) - Cl (37)	M (Cl ₂) = 74 g	$\xi_{37} = 0,25 \times 0,25 = 0,0375$

Repérage 4.3: Abondance isotopique

La masse mesurée de Ga est de 69,72 g ; Calculer les abondances relatives de Ga.

L'élément naturel est composé de plusieurs isotopes radioactifs en proportion différente.

Les deux isotopes de gallium Ga (Z = 31) sont notés (1) pour ${}^{69}\text{Ga}$ et (2) pour ${}^{71}\text{Ga}$.

$$M = x_1 M_1 + x_2 M_2 \text{ avec } M_1 \approx A_1 = 69 \text{ et } M_2 \approx A_2 = 71$$

Système d'équation

$$69,72 = 69 x_1 + 71 x_2 \text{ avec}$$

$$x_1 + x_2 = 1$$

$$69,72 = 69 x_1 + 71 (1 - x_1)$$

$$x_1 = 0,64 \text{ et } x_2 = 0,36$$

$$64 \% \text{ de } {}^{69}\text{Ga} \text{ et } 36 \% \text{ de } {}^{71}\text{Ga}$$

Repérage 4.4: Abondance isotopique

Les deux isotopes stables du bore se présentent dans les proportions suivantes :

$$19,78\% \text{ de } {}^{10}_5\text{B} \text{ et } 80,22\% \text{ de } {}^{11}_5\text{B}.$$

Quelle est la masse atomique moyenne du bore ?

Solution

Isotope $^{10}_5\text{B}$: $10 \text{ u} \times 19,78 \% = 1,978 \text{ uma}$

Isotope $^{11}_5\text{B}$: $11 \text{ u} \times 80,22 \% = 8,824 \text{ uma}$

$1,978 \text{ uma} + 8,824 \text{ uma} = 10,802 \text{ uma}$

Donc, la masse atomique moyenne du bore est de 10,802 uma.

Repérage 4.5: Abondance isotopique

Le Potassium existe sous forme de deux isotopes stables ^{39}K et ^{41}K .

Les abondances relatives de ces deux isotopes sont de 93,09 % pour l'un et de 6,91 % pour l'autre.

Sachant que la masse molaire du Potassium naturel est de $39,10 \text{ g mol}^{-1}$.

Attribuer son abondance naturelle à chaque isotope.

Solution

Un isotope est très largement majoritaire et l'autre est pratiquement négligeable.

La masse molaire moyenne de $39,1 \text{ g.mol}^{-1}$ est donc très proche de celle de l'isotope le plus abondant.

Ici c'est donc l'isotope ^{39}K qui représente 93 % et l'isotope ^{41}K 7%.

On aurait pu aussi résoudre le système :

$$M = \sum x_i M_i$$

$$39,1 = x * 41 + y * 39$$

$$x + y = 1$$

$$\text{Soit } x = 0,05 \text{ et } y = 0,95$$

$$\text{Donc } 95 \% \text{ de } ^{39}\text{K} \text{ et } 5\% \text{ de } ^{41}\text{K}$$

Ces résultats approximatifs correspondent bien aux valeurs expérimentales.

Repérage: Abondance isotopique

Le Magnésium ($Z=12$) possède trois isotopes stables ^{24}Mg , ^{25}Mg et ^{26}Mg leurs abondances naturelles sont respectivement : 78,6% - 10,1 % et 11,3% . Calculer la

masse molaire atomique approchée du Magnésium et expliquer pourquoi le résultat obtenu n'est qu'approximatif.

$$M = \sum x_i M_i$$

$$X^{25}\text{Mg} = 0,101 \text{ et } M^{25}\text{Mg} = 25$$

$$X^{26}\text{Mg} = 0,113 \text{ et } M^{26}\text{Mg} = 26$$

$$X^{24}\text{Mg} = 1 - 0,101 - 0,113 = 0,786 \text{ et } M^{24}\text{Mg} = 24$$

$$M(\text{Mg}) = 0,101 \cdot 25 + 0,113 \cdot 26 + 0,786 \cdot 24 = 24,3 \text{ g.mol}^{-1}$$

Approximations:

$$* m_p = m_n = 1 \text{ u.m.a}$$

* masse des électrons **négligée**

* défaut de masse **négligé**

Repérage 4.6: Abondance isotopique

Le brome possède seulement deux isotopes stables. L'isotope le plus abondant est ^{79}Br dont l'abondance naturelle est de 50,5%. La masse molaire du Brome naturel est de $79,91 \text{ g.mol}^{-1}$. Quel est l'autre isotope stable du brome ?

Appelons x le nombre de masse de l'isotope inconnu.

Faisons les approximations habituelles :

$$m_p = m_n = 1 \text{ u.m.a}$$

Masse des électrons et défaut de masse **négligeable**

Soit $M_i \approx A_i$

$$M = \sum x_i M_i$$

$$M = \sum x_i A_i$$

$$79,91 = 0,505 \cdot 79 + (1 - 0,505) \cdot X$$

$$79,91 = 39,895 + 0,495 \cdot X$$

$$79,91 - 39,895 = 0,495 \cdot X$$

$$40,015 = 0,495 x$$

$$x = 40,015 / 0,495 = 80,838 \approx 81$$

L'isotope stable recherché est ^{81}Br .

I.5 Equivalence masse - énergie

I.5.1 Relation d'Einstein :

En 1905, Einstein postule que la masse est proportionnelle à l'énergie : Un système au repos de masse m , possède une énergie proportionnelle à la masse:

Relation d'équivalence masse - énergie

$$E = m.c^2$$

E : énergie de masse en joules (J)

m : masse en kilogrammes (kg)

C : vitesse de la lumière dans le vide ($C = 3,0.10^8 \text{ m.s}^{-1}$)

Conséquence : Si le système (au repos) échange de l'énergie avec le milieu extérieur, (par rayonnement ou par transfert thermique par exemple), sa variation d'énergie ΔE et sa variation de masse Δm sont liées par la relation :

$$\Delta E = \Delta m.c^2$$

* Si $\Delta m < 0$ alors $\Delta E < 0$, le système cède de l'énergie au milieu extérieur et sa masse diminue.

* Si $\Delta m > 0$ alors $\Delta E > 0$, le système reçoit de l'énergie du milieu extérieur et sa masse augmente.

I.5.2 Unité de masse atomique

Pour exprimer les masses, en physique nucléaire, on utilise une unité pratique : l'unité de masse atomique (symbole u) qui est, par convention, le douzième de la masse d'un atome de carbone 12

$$1 \text{ uma} = \frac{1}{12} \frac{12}{N} = \frac{1}{N} \quad 1 \text{ uma} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$$

Rappelons que : l'électronvolt (symbole eV) est définie comme étant l'énergie cinétique d'un électron accéléré depuis le repos par une différence de potentiel d'un volt.

- $1 \text{ eV} = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
- $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV} = 1,60 \cdot 10^{-13} \text{ J}$.
- $1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV}$

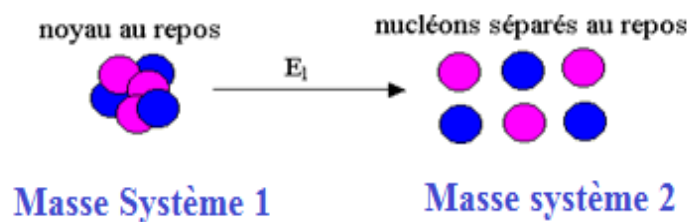
Repérage 5.1 :

- Déterminer l'énergie E en J et en MeV d'un proton de masse : $m_p = 1,67.10^{-27} \text{ kg}$
- $E = m_p \cdot c^2 = 1,67.10^{-27} \times (3,0.10^8)^2 \approx 1,50.10^{-10} \text{ J} \approx 939 \text{ MeV}$
- Complétez le Tableau

	Proton	Neutron	électron	He ²⁺
M (Kg)	$1,67252.10^{-27}$	$1,64795 \cdot 10^{-27}$	$9,1095 \cdot 10^{-31}$	
M(uma)				
Energie				

I.5.3 Énergie de cohésion du noyau (Énergie de liaison par nucléon)

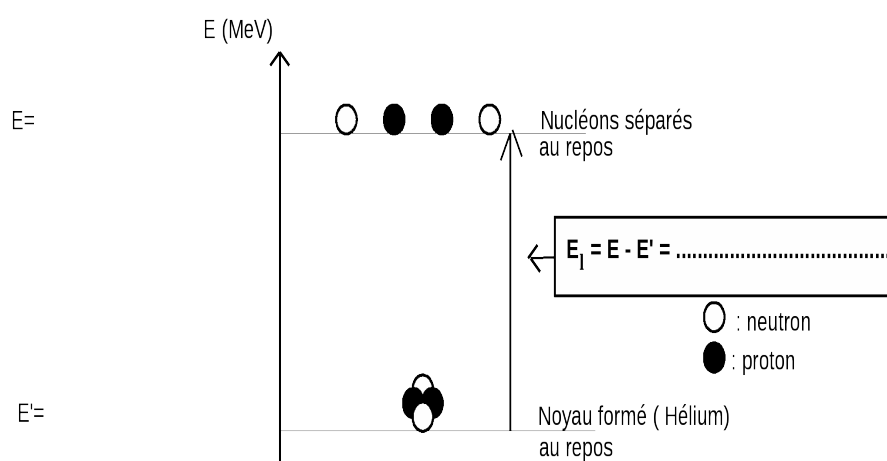
Les différentes illustrations



Δm différence de masse

ΔE différence d'Énergie

$$\Delta E = \Delta m \cdot c^2$$



Défaut de masse du noyau :

Schéma I.5.1

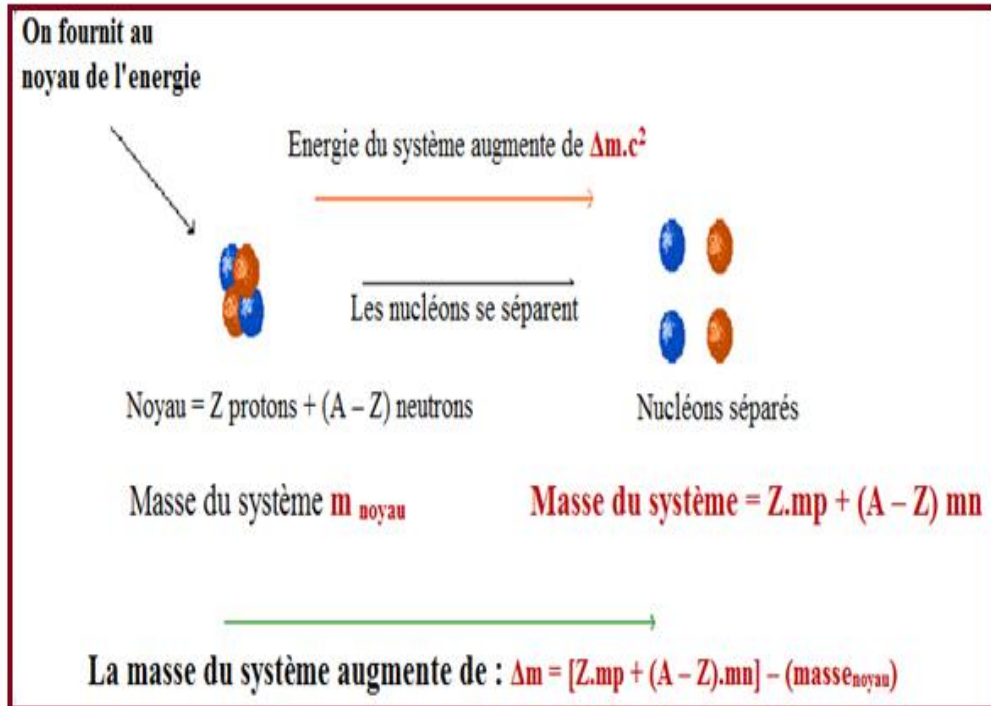


Schéma I.5.2 : Défaut de masse

On a constaté en mesurant les masses, que la masse du noyau atomique est inférieure à la somme des masses des protons m_p et des neutrons m_n qui le constituent :

$$m_{\text{noyau}} < Z.m_p + (A-Z).m_n$$

Cette différence est appelée défaut de masse Δm :

$$\Delta m = Z.m_p + (A - Z).m_n - m_{\text{noyau}} \quad (\Delta m > 0)$$

Repérage 5.2 : Calculer Δm (défaut de masse) pour un noyau d'hélium :

Données : $m_n = 1,67496.10^{-27} \text{ kg}$, $m_p = 1,67265.10^{-27} \text{ kg}$ et

$m_{\text{Mesurée}}(^4_2\text{He}) = 6,6447.10^{-27} \text{ kg}$

$$\Delta m = [2.m_p + 2.m_n] - [m(^4_2\text{He})] = [2 \times 1,67265 + 2 \times 1,67496] - [6,6447].10^{-27}$$

$$\Delta m = 5,05.10^{-29} \text{ kg}$$

I.5.4 Énergie de liaison du noyau :

Définition: On appelle énergie de liaison d'un noyau, notée E_l , l'énergie que le milieu extérieur doit fournir à un noyau au repos pour le dissocier en nucléons séparés au repos. Lorsque le noyau se dissocie, la masse augmente de Δm et l'énergie de liaison d'un noyau a pour expression :

$$E_l = \Delta m \cdot c^2$$

E_l : énergie de liaison du noyau (en J) à convertir en MeV

Δm : défaut de masse du noyau (en kg)

c : célérité de la lumière dans le vide (en m.s^{-1})

Pour un noyau d'hélium: $E_l = \Delta m \cdot c^2 = 5,05 \cdot 10^{-29} \times (3,0 \cdot 10^8)^2 = 4,54 \cdot 10^{-12} \text{ J} = 28,4 \text{ MeV}$

Remarque: Inversement, lorsque le noyau se forme à partir de ses nucléons libres, le milieu extérieur reçoit l'énergie.

$E = |\Delta m| \cdot c^2$ (la masse du système diminue et $\Delta m < 0$).

I.5.5 Énergie de liaison par nucléon

Définition: L'énergie de liaison par nucléon d'un noyau notée E_A est le quotient de son énergie de liaison par le nombre de ses nucléons.

E_A : énergie de liaison par nucléon (en J/nucléon)

$$E_A = E_l / A \quad \text{avec} \quad E_l: \text{énergie de liaison du noyau (en J)}$$

A : nombre de nucléons du noyau

Pour un noyau d'hélium : $E_A = E_l / 4 = 28,4 / 4 = 7,10 \text{ MeV / nucléon}$

Remarque: E_A permet de comparer la stabilité des noyaux entre eux. Plus l'énergie de liaison par nucléon est grande, plus le noyau est stable.

I.5.6 Courbe d'Aston

La courbe d'Aston est la courbe $E_A = f(A)$. Cette courbe permet de visualiser facilement les noyaux les plus stables puisque ceux-ci se trouvent au plus haut du graphe.

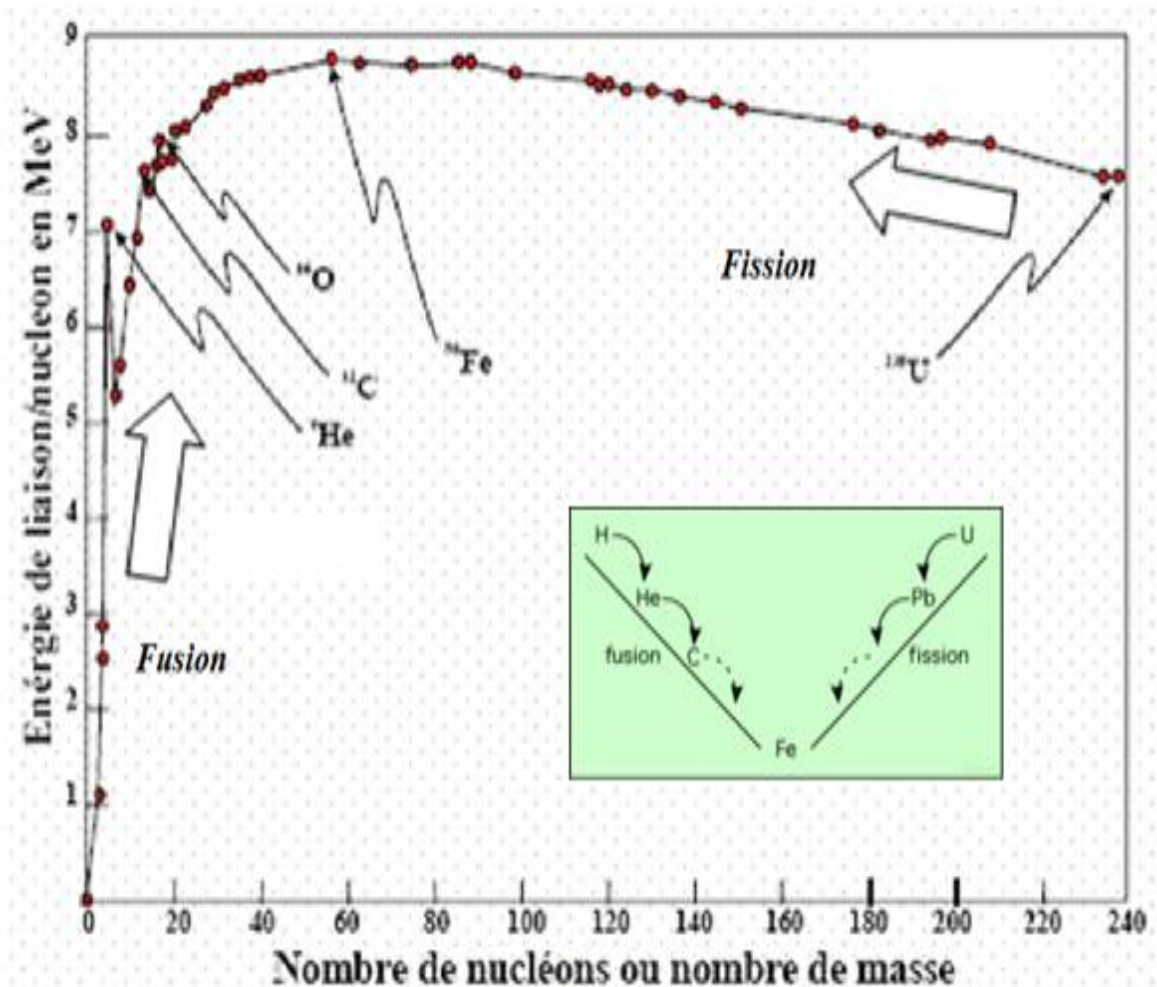


Schéma I.5.3 : Courbe d'Aston

Ref: Authors: Huang Xiaolong, Zhou Chunmei, ZhuangYouxian, Zhao Zhixiang(China Nuclear Data Center, P.O.Box 275 (41)£-Beijing 102413, P.R.China)**Contactto:** [Huang Xiaolong](#).

Pour $50 < A < 80$, la courbe présente un tronçon aplati qui correspond donc aux noyaux les plus stables.

Les extrémités de la courbe correspondent aux noyaux les plus instables :

- un noyau très lourd ($A > 100$), bombardé par une particule adéquate peut se casser en deux noyaux plus légers : c'est la fission nucléaire ;
- un noyau léger peut donner un noyau plus lourd (possédant une énergie de liaison par nucléon plus grande) : c'est la fusion nucléaire.

L'énergie de liaison par nucléons est différente suivant les noyaux. Elle est faible pour les noyaux légers, très forte pour les noyaux de masse moyenne et à nouveau plus faible pour les noyaux de masse importante.

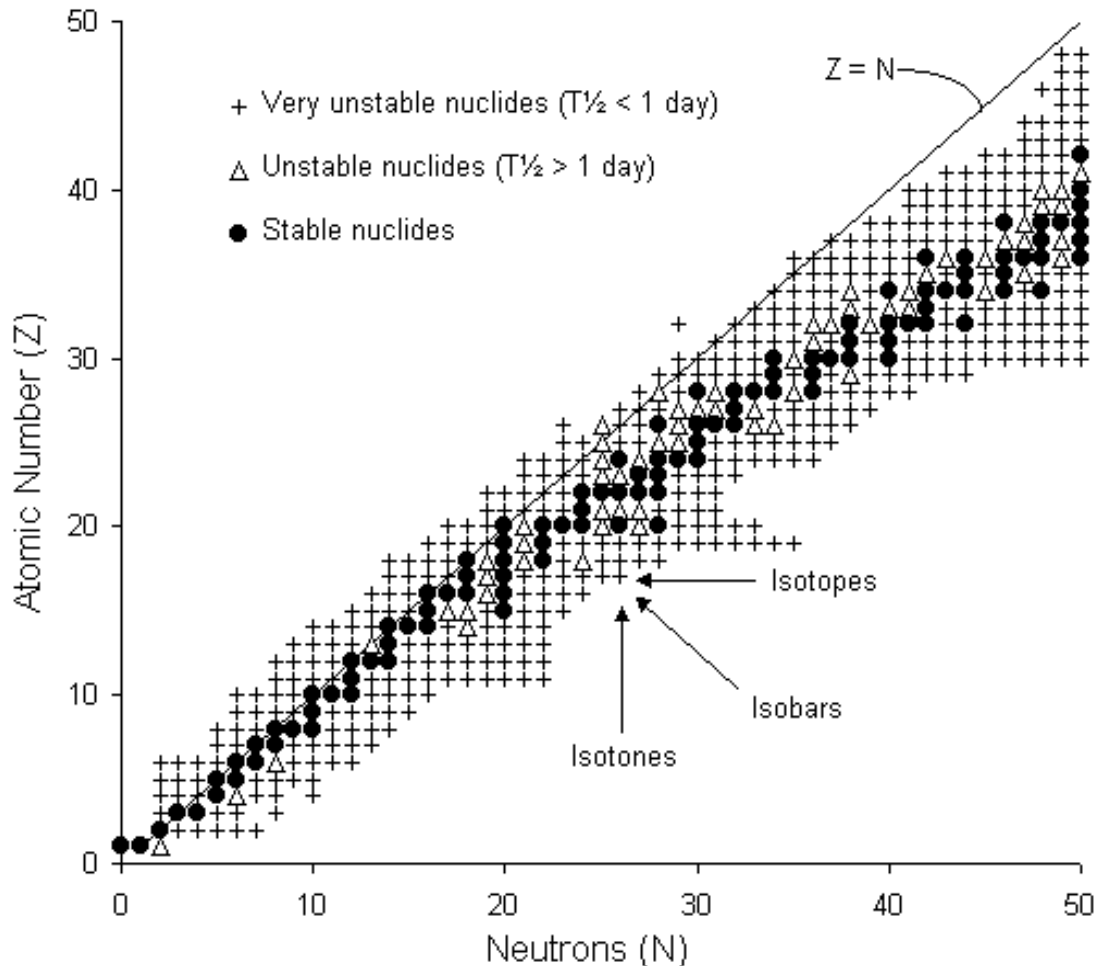


Schéma I.5.4: evolution des nucleides

*Ref: University of California Stable Isotope Laboratory Earth and Planetary Sciences 1156
High Street Santa Cruz, CA 95064*

Repérage 5.3 : Energie de liaison Uranium

Calculer l'énergie de liaison par nucléon E_l/A (en MeV/nucléon) d'un noyau d'uranium 235. Quelle est sa particularité parmi tous les noyaux naturels ? On rappelle que le numéro atomique de l'uranium est 92.

Solution : Indication : calculez d'abord le défaut de masse.

Par définition : Energie de liaison $E_l = \Delta m c^2$

$$\text{Energie de liaison par nucléon} = E_l/A = \Delta m c^2 / A$$

$$= [Z m_p + (A-Z) m_n] c^2 / A$$

$$= [92 m_p + (235 - 92) m_n] c^2 / 235$$

$$= 1,24 \cdot 10^{-2} \text{ J/nucléon}$$

Repérage 5.4 : Energie de liaison du noyau de l'atome d'azote

Soit l'atome d'azote $^{14}_7\text{N}$ de masse atomique mesurée = 14,007515 g ;

Masse théorique du noyau : $m_{\text{théo}} = 7 \cdot 1,008665 + 7 \cdot 1,007277$

$$= 14,111594 \text{ u.m.a}$$

$$1 \text{ u.m.a} = 1/N \text{ (g)} ;$$

$$m_{\text{théo}} = 14,111594/N = 2,342951021 \cdot 10^{-23} \text{ g} = 2,34295 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

La masse réelle du noyau est inférieure à sa masse théorique,

la différence Δm ou défaut de masse correspond à l'énergie de cohésion du noyau.

$$\text{Défaut de masse : } \Delta m = 14,111594 - 14,007515 = 0,104079 \text{ u.m.a/noyau}$$

$$= 1,72802589 \cdot 10^{-28} \text{ kg/noyau}$$

$$\Delta m = 0,104079 \text{ g/ mole de noyaux}$$

Energie de cohésion : $E = \Delta m c^2$ (d'après la relation d'Einstein : équivalence masse -énergie)

$$1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$E = 1,7280 \cdot 10^{-28} (3 \cdot 10^8)^2 = 15,552 \cdot 10^{-12} \text{ J/noyau} = 9,72 \cdot 10^7 \text{ eV/noyau}$$

Repérage 5.5

A) On considère les deux isotopes $^{20}_{10}\text{Ne}$ et $^{22}_{10}\text{Ne}$ de l'élément néon.

Les masses des noyaux sont respectivement :

$$M(^{20}_{10}\text{Ne}) = 19,98690 \text{ u}$$

$$M(^{22}_{10}\text{Ne}) = 21,98589 \text{ u}$$

Calculer le défaut de masse de ces noyaux en unité de masse atomique.

Evaluer l'énergie de liaison de ces noyaux en joule (J) puis en MeV.

B) Quelle énergie faudrait-il fournir à ces noyaux au repos pour les dissocier en leurs nucléons isolés ?

C) Calculer l'énergie de liaison par nucléon pour ces noyaux. Quel est le noyau le plus stable ?

Données : - u est le symbole de l'unité de masse atomique.

$$1u = 1,66054 \cdot 10^{-24} \text{ g.}$$

Elle est définie comme étant le douzième de la masse d'un atome de carbone 12 soit $\frac{1}{12} \text{ g.}$

La masse d'un atome ou d'un noyau caractérisé par son nombre de nucléons A est environ égale à A en u.

$$m_n = 1,00866 \text{ u} ; m_p = 1,00728 \text{ u} ; 1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} ; c = 3,00 \times 10^8 \text{ m.s}$$

Repérage 5.6

Le Béryllium Be ne possède qu'un seul isotope stable. Sa masse molaire atomique est $9,012 \text{ g.mol}^{-1}$.

- Calculez l'énergie de cohésion de cet isotope stable, en J mol^{-1} puis en MeV par noyau puis en MeV par nucléon.

$$\text{Charge de l'électron : } e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$\text{Nombre d'Avogadro : } N = 6,022 \cdot 10^{23}$$

$$\text{Célérité de la lumière dans le vide : } c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

Masse du proton :

$$m_p = 1,6725 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,00718 \text{ u.m.a} \quad \text{Masse du neutron : } m_n = 1,6747 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,00850 \text{ u.m.a}$$

$$M = 9,012 \text{ g mol}^{-1} \text{ à } A = 9 \text{ à } {}^9\text{Be} \text{ à } Z = 4 \text{ et } N = 5$$

Masse "théorique" du noyau :

$$M_{\text{théo}} = Z m_p + N m_n = 4 \cdot 1,00718 + 5 \cdot 1,00850 = 9,07238 \text{ u.m.a / noyau} \\ = 9,071 \text{ g mol}^{-1}$$

Défaut de masse :

$$\Delta m = \frac{1}{2} 9,012 - 9,071 \frac{1}{2} = 0,059 \text{ u.m.a} / \text{noyau} = 0,059 \text{ g mol}^{-1}$$

La masse réelle du noyau est inférieure à sa masse " théorique ", le noyau est plus stable que ses constituants séparés. Il y a donc dégagement d'énergie lors de la formation du noyau à partir de ses constituants. La masse perdue est entièrement convertie en énergie.

Energie de cohésion :

$$E = \Delta m c^2 = 0,059 \cdot 10^{-3} \cdot 9 \cdot 10^{16} = 5,31 \cdot 10^{12} \text{ J.mol}^{-1}$$

$$E = 5,31 \cdot 10^{12} / N = 8,818 \cdot 10^{-12} \text{ J/noyau}$$

$$E = 8,818 \cdot 10^{-12} / 1,6 \cdot 10^{-19} = 55,1 \cdot 10^6 \text{ eV} / \text{noyau} = 55,1 \text{ MeV} / \text{noyau}$$

$$55,1 \text{ MeV} / \text{noyau} = 55,1 / 9 = 6,12 \text{ MeV} / \text{nucléon}$$

Représenter sommairement la courbe d'Aston en indiquant les grandeurs représentées (et leurs unités !) en abscisses et en ordonnée. Placer approximativement cet isotope sur la courbe. Fait-il parti des isotopes les plus stables ? Si non, par quel type de processus peut-il se stabiliser ?

Repérage 5.7

$$^{235}\text{U} = 235,044 \text{ u.m.a} \quad ^{146}\text{La} = 145,943 \text{ u.m.a} \quad ^{87}\text{Br} = 86,912 \text{ u.m.a}$$

Calculer l'énergie de cohésion d'une mole de noyaux d'uranium (Z=92) 235 sachant que la masse du noyau est de 235,044 u.m.a

$$\text{Uranium 235} : Z = 92 \text{ et } N = 235 - 92 = 143$$

Masse "théorique" :

$$M_{\text{théorique}} = 92 \cdot 1,00718 + 143 \cdot 1,00850 = 236,876 \text{ u.m.a}$$

Défaut de masse :

$$\Delta m = 236,876 - 235,044 = 1,832 \text{ u.m.a} / \text{noyau} = 1,832 \cdot 10^{-3} \text{ Kg} / \text{mole de noyaux}$$

Energie de cohésion :

$$E = \Delta m \cdot c^2 = 1,832 \cdot 10^{-3} \cdot (3 \cdot 10^8)^2 = 1,649 \cdot 10^{14} \text{ J} / \text{mole de noyau}$$

$$E = 1,649 \cdot 10^{14} / 6,022 \cdot 10^{23} = 2,738 \cdot 10^{-10} \text{ J / noyau}$$

$$E = 2,738 \cdot 10^{-10} / 1,6 \cdot 10^{-19} = 1711 \cdot 10^6 \text{ eV / noyau} = 1711 \text{ MeV / noyau}$$

$$E = 1711 / 235 = 7,3 \text{ MeV / nucléon}$$

(Résultat cohérent avec la courbe d'Aston)

I.6 Phénomène de la Radioactivité

I.6.1 Généralités

I.6.1.1 Définition de la radioactivité

La radioactivité est un phénomène physique au cours duquel des noyaux atomiques instables se désintègrent en dégageant de l'énergie sous forme de rayonnements radioactifs. Cette activité peut être spontanée ou bien provoquée.

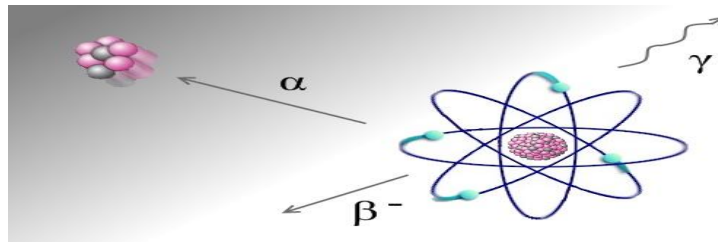


Schéma I.6.1 : α , γ , β^- , Rayonnement radioactif

Désintégration spontanée : radioactivité naturelle.

Désintégration provoquée : Radioactivité artificielle.

I.6.1.2 Type d'émission

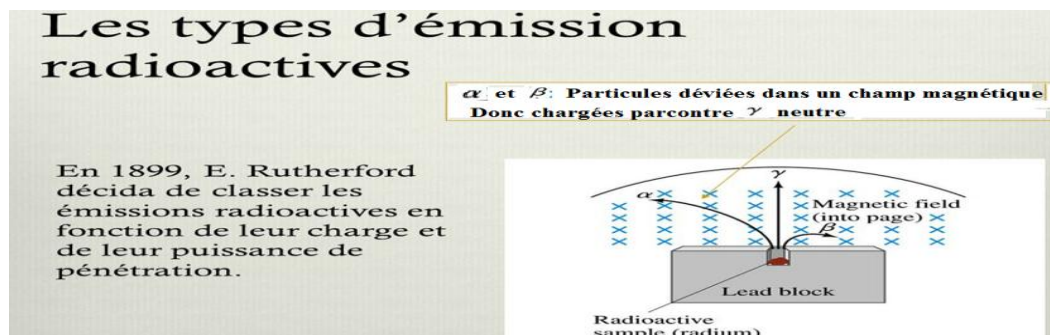


Schéma I.6.2 : Rayonnement radioactif dans un champ magnétique

I.6.1.3 Propriétés pénétratives des rayonnements

Par leur énergie, les rayonnements (dit ionisants) sont pénétrants, c'est-à-dire qu'ils peuvent traverser la matière.

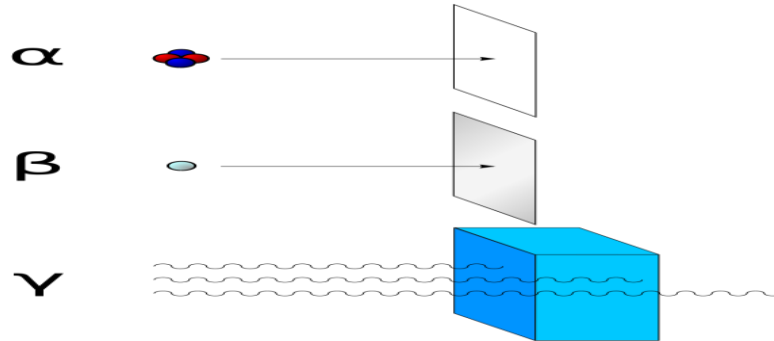


Schéma I.6.3 : Rayonnement radioactif

I.6.1.4 Unités de mesure de l'activité radioactive

Becquerels (Bq), Il correspond au nombre de désintégrations en 1 seconde

Le curie (Ci): il se définit comme l'activité d'un gramme de radium, soit 3×10^{10} désintégrations par seconde, soit $37 \text{ Bq} = 1 \text{ nCi}$ (nano Curie)

La dose absorbée : Gray (Gy) : la dose absorbée par la cible est définie comme l'énergie reçue par unité de masse, en joules par kilogramme, c'est-à-dire en Gray. Cette unité est utilisée pour les rayonnements ionisants. L'ancienne unité était le rad ($1 \text{ Gy} = 100 \text{ rad}$)

Le débit de dose : Gray par Seconde (Gy/s) : on définit le débit de dose lors d'une exposition durable, cela correspond à l'énergie absorbée par kilogramme et par unité de temps.

L'équivalent de dose : Sievert (Sv) : l'équivalent de dose s'apparente "à l'effet produit" (par rapport à la nature, force, ..., du rayonnement) par une exposition à des rayonnements.

Correspondances :

$$1 \text{ Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$$

$$1 \text{ Bq} = 0,027 \text{ nCi}$$

$$1 \text{ rad} = 0,01 \text{ Gy} = 10 \text{ mGy}$$

$$1 \text{ Gy} = 100 \text{ rad}$$

Exemple d'irradiation naturelle et artificielle

Rayonnement du corps humain :	Sv
Rayons cosmiques :	mSv/an
Matériaux terrestres :	mSv/an
Examen radiologique :	mSv/an
Cadran lumineux de montre :	mSv/an
Centrale nucléaire :	mSv/an

I.6.1.5 Étiquette des principales données de la radioactivité



Schéma I.6.4 : Signalisation du nucléaire

nom de l'isotope	Phosphore 32
symbole	$^{32}_{15}\text{P}$
type de radioactivité	β^-
énergie du rayonnement émis	1,7 MeV
équation de la désintégration	$^{32}_{15}\text{P} \rightarrow ^{32}_{16}\text{S} + ^0_{-1}\text{e}$
demi-vie	14 jours

I.6.1.6 Etat des lieux

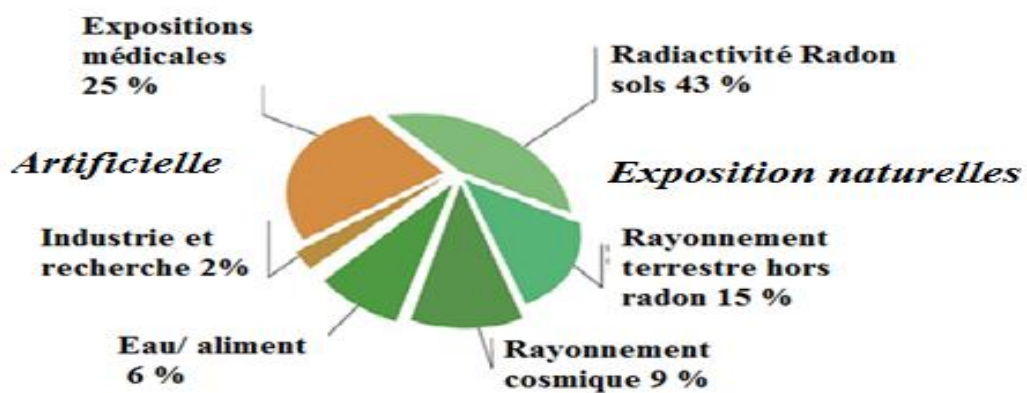


Schéma I.6.5 : Etat des lieux de la radioactivité

I.6.1.7 Radioactivité naturelle

On distingue la radioactivité naturelle (radioactivité de radioéléments qui existent dans la nature = réactions nucléaires spontanées des éléments radioactifs présents dans l'écorce terrestre, comme l'uranium et le thorium)

Uranium

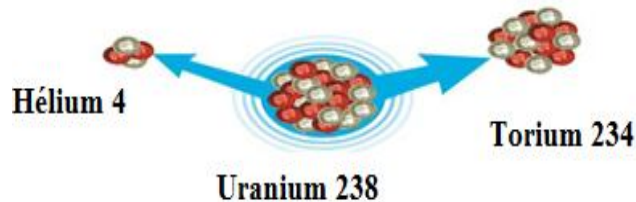


Schéma I.6.6 : Fission de l'Uranium

Radon

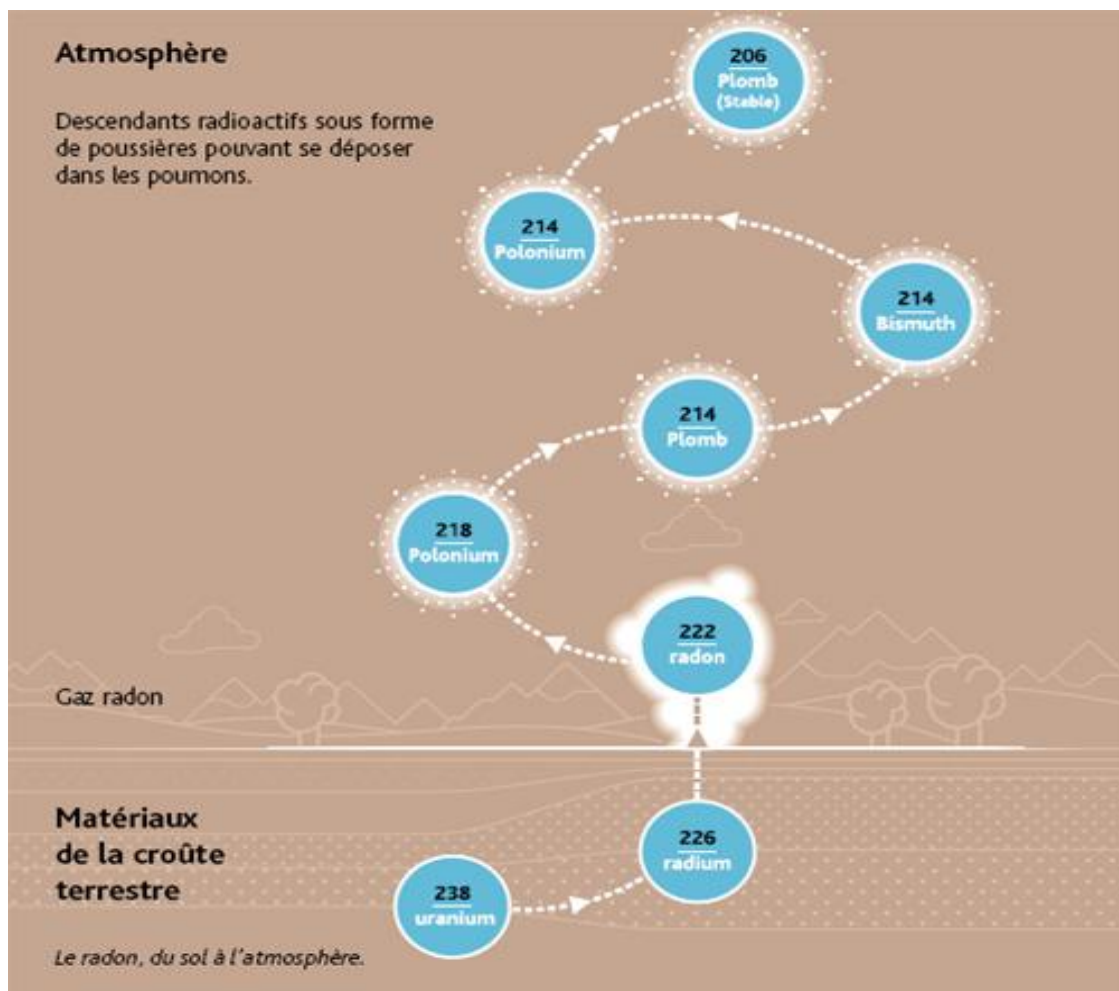


Schéma I.6.7: Désintégration de gaz Radon

Ref : UNSCEAR (2000) United Nations. Sources, Effects and Risks of Ionizing Radiation. Report to the General Assembly, with annexes, New York.

I.6.1.8 Radioactivité artificielle

La radioactivité peut également avoir une origine artificielle (examen médical, thérapie, rejets d'installations nucléaires, etc.)

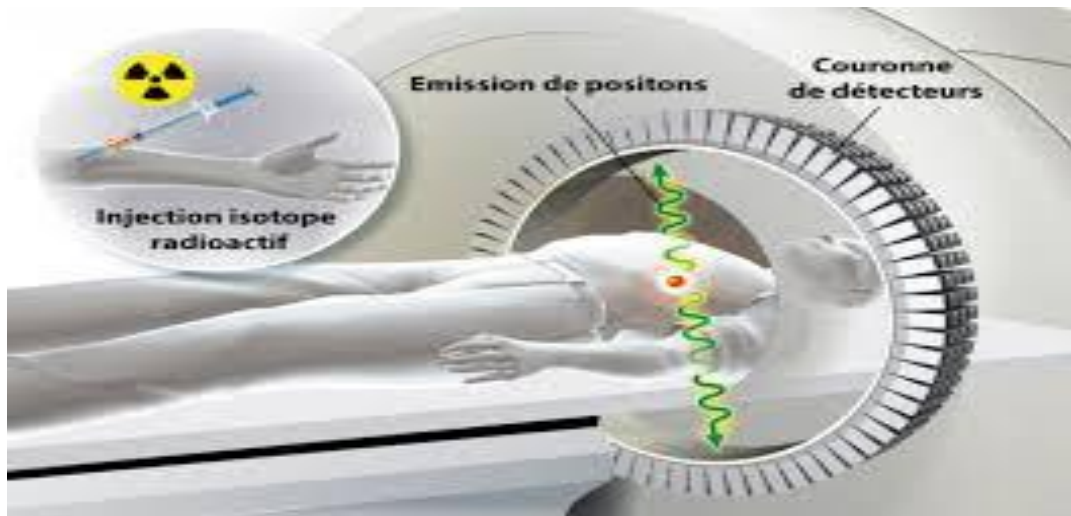


Schéma I.6.8 : La tomographie par émission de positons est un exemple intéressant à plusieurs titres

Spectroscopie Mössbauer

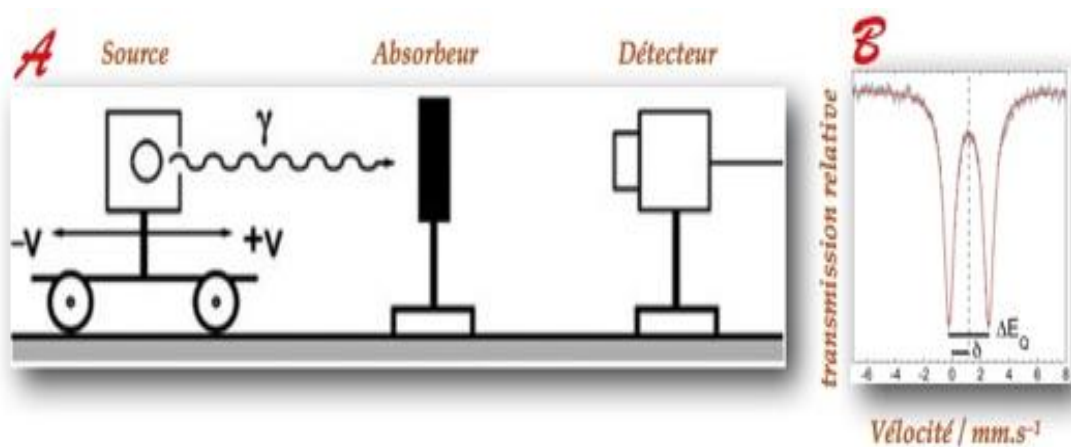


Schéma I.6.9 : Spectroscopie Mössbauer

La spectroscopie Mössbauer est utilisée avec succès en biologie pour étudier les grandes classes de protéines à fer, hémoprotéines, protéines fer-soufre, et plus récemment les protéines à fer non hémique. Jusqu'à une période récente, de telles études étaient réalisées essentiellement dans des laboratoires américains et allemands.

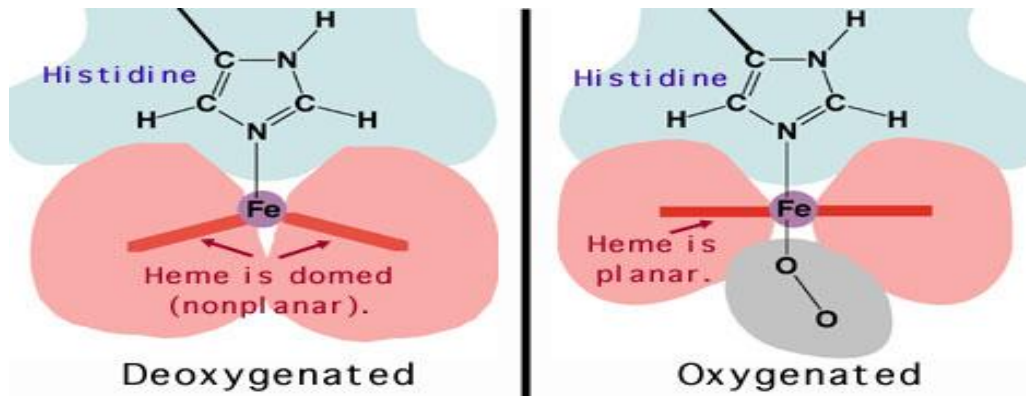
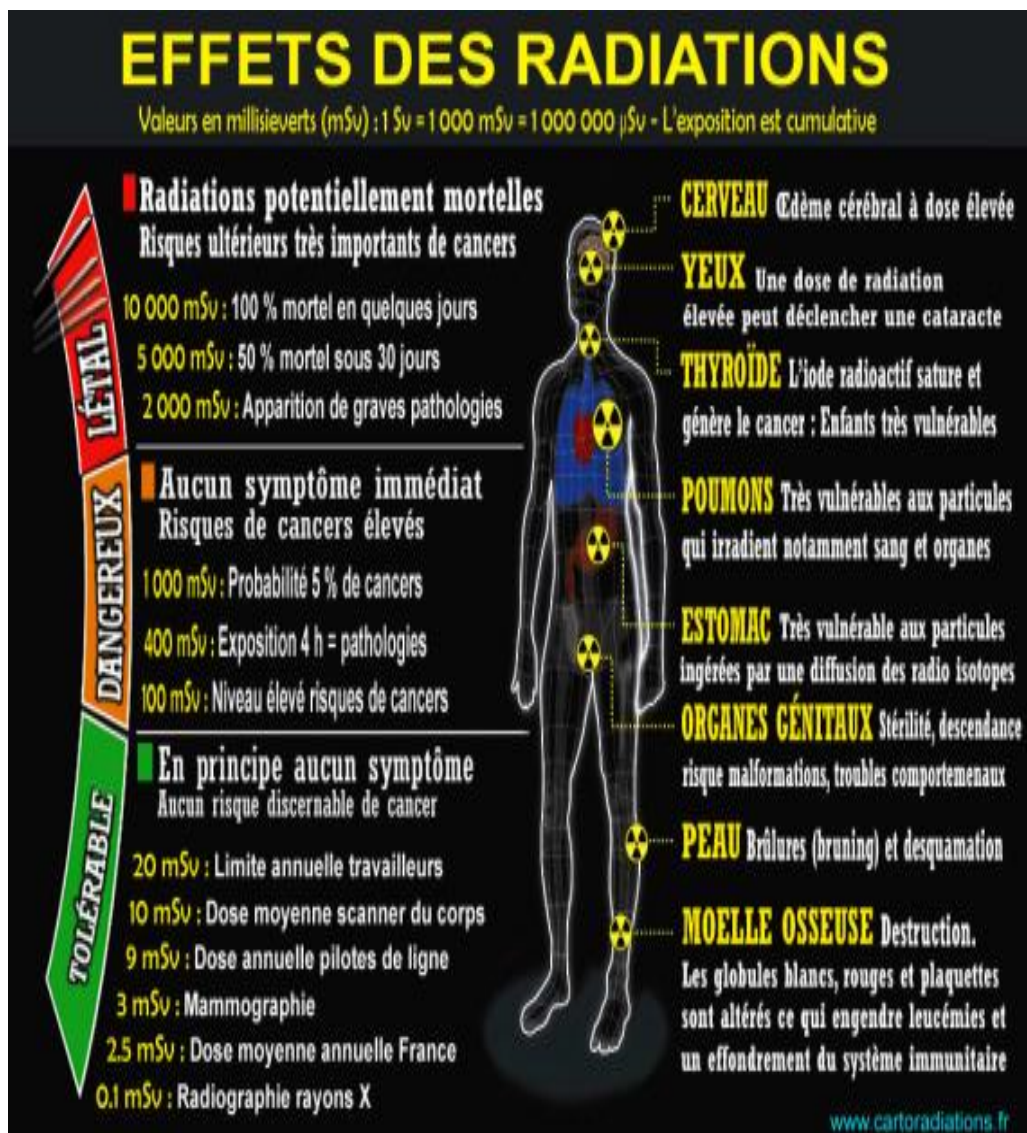


Schéma I.6.10: Atome de fer dans l'hémoglobine

M. Bouzid, Mossbauer and magnetic studies of some mononuclear carbonyl and diironhexacarbonyl complexes, *Materials Research Bulletin* Volume 25, Issue 9, September 1990, Pages 1129-1137



Nuisances de la radioactivité

I.6.2 La réaction nucléaire

I.6.2.1 La fusion nucléaire

Définition: La fusion nucléaire est une réaction au cours de laquelle deux noyaux légers s'unissent pour former un noyau plus lourd

Exemple N° 1

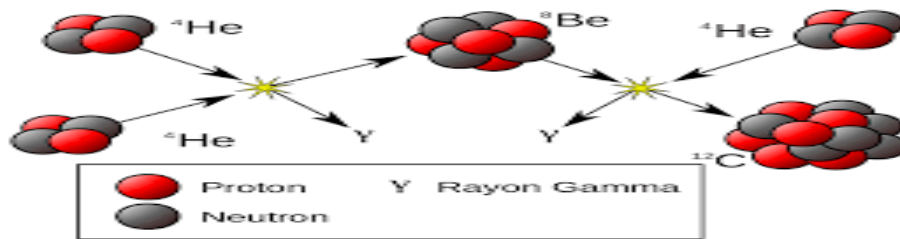


Schéma I.6.11 : fusion nucléaire atome d'Helium

Exemple N° 2 :

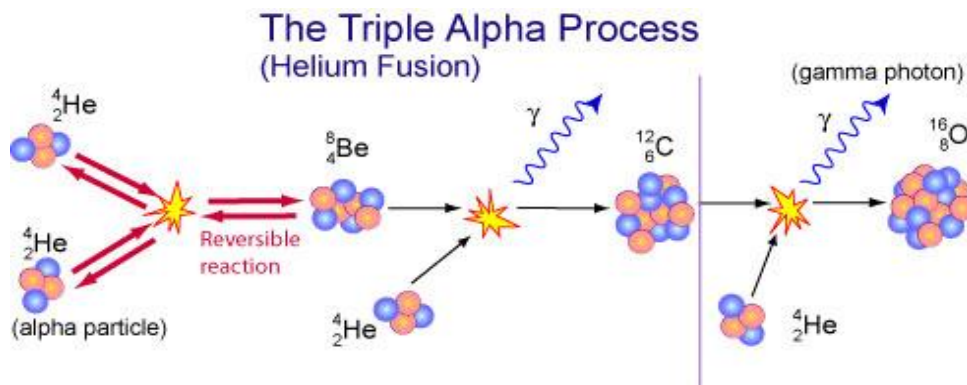
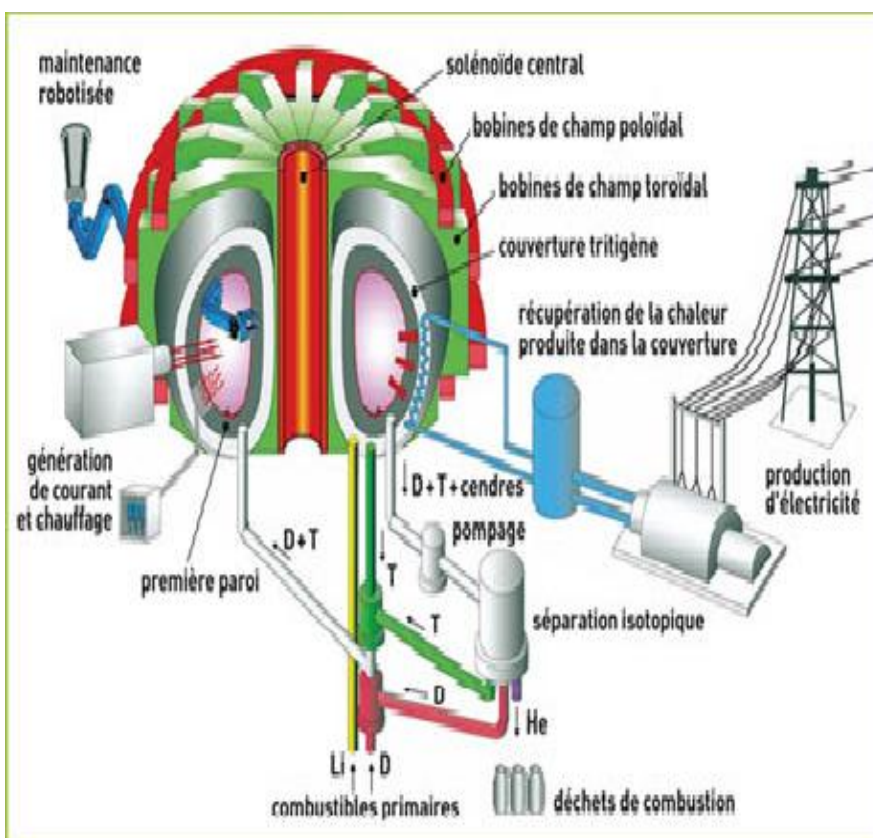


Schéma I.6.12 : fusion nucléaire dite la triple Alfa

Dossier application de la fusion : Tokamak versus stellarator

Le tokamak est le principal système de fusion étudié dans le Monde en vue de produire de l'énergie. Mais certains groupes scientifiques explorent d'autres principes pour atteindre les conditions de fusion. Ainsi, à l'Institut Max Planck de physique des plasmas (Garching, Allemagne), le montage d'un Stellarator baptisé W7X a été achevé en 2014. Dans un stellarator, la matière est également confinée dans des champs magnétiques en forme d'hélice, avec l'avantage par rapport au tokamak de ne pas nécessiter la présence d'un fort courant électrique dans le plasma.



Le stellarator est donc un dispositif intrinsèquement stationnaire ce qui n'est pas le cas du tokamak. En effet, dans le tokamak, l'effet 'transformateur' ne peut maintenir le courant dans le plasma que durant un temps limité (quelques heures dans un réacteur) et pour rendre le tokamak stationnaire, il faut faire appel à une physique complexe, celle de la génération non inductive de courant. Toutefois, la forme des aimants dans un stellarator est d'une très grande complexité et leur réalisation pour un réacteur constitue un défi technologique plus important encore que pour un tokamak.

PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT D'UNE USINE ÉLECTRIQUE À FUSION PAR CONFINEMENT MAGNÉTIQUE

Le principe de fonctionnement d'un réacteur électrogène sera proche de celui d'un réacteur expérimental. Néanmoins, comme dans une centrale thermique fonctionnant au gaz, le réacteur de fusion devra être alimenté en continu en combustible deutérium (D)-tritium (T). Le deutérium est largement présent sur Terre mais ce n'est pas le cas du tritium. Celui-ci sera produit à l'intérieur de la machine à partir d'une « couverture tritigène » constituée à base de lithium (Li). Sous l'effet des neutrons issus de la réaction de fusion, le lithium générera suffisamment de tritium pour compenser celui qui aura été « brûlé » par les réactions de fusion. Un système de pompage et de séparation isotopique permettra de récupérer le deutérium et le tritium pour les réinjecter dans le système.

Le réacteur sera ensuite couplé à un circuit alimenté par un fluide caloporteur, qui transportera la chaleur produite par la fusion jusqu'à un générateur de vapeur qui, à son tour, alimentera les turbines pour produire de l'électricité, comme c'est le cas dans les réacteurs nucléaires et les centrales électriques à gaz d'aujourd'hui.

I.6.2.2 La fission nucléaire:

I.6.2.2.1 Réaction en chaîne

Définition: La fission est une réaction nucléaire provoquée, au cours de laquelle un noyau lourd "fissile" donne naissance à deux noyaux plus légers.

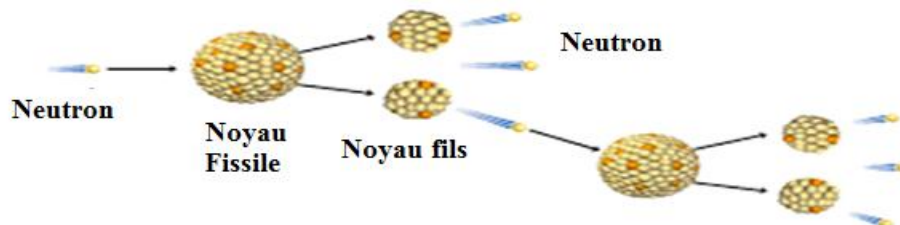


Schéma I.6.13 : Réaction nucléaire en chaîne

La fission nucléaire

Exemple de l'Uranium 235

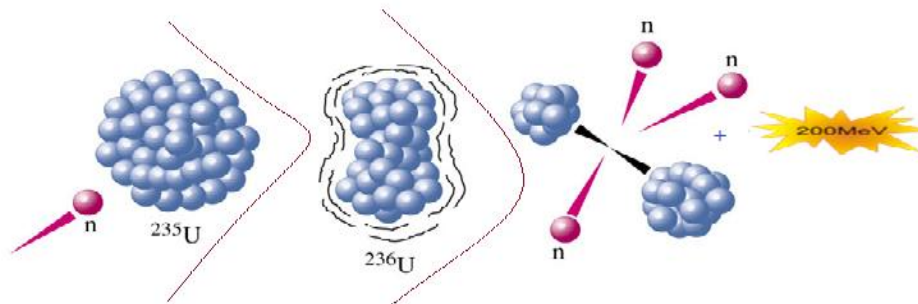


Schéma I.6.14 : Fission de l'uranium

Exemple de Bore 11

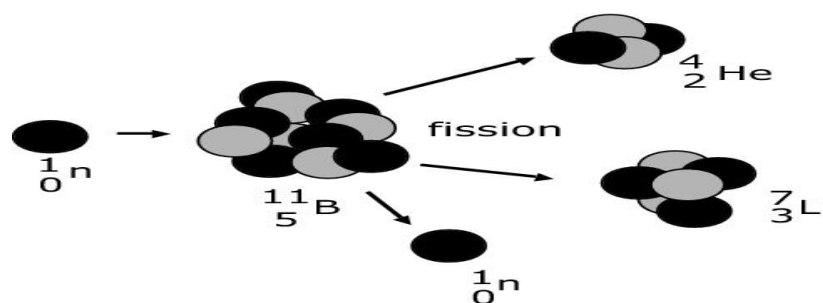
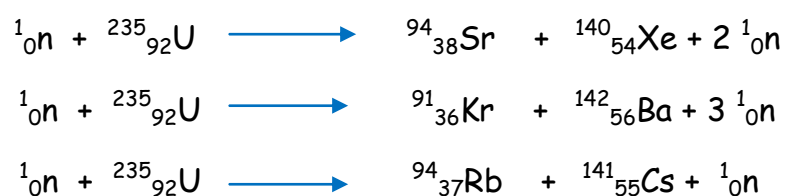


Schéma I.6.15 : Fission du bore

Possibilités de désintégration de l'uranium (235)



I.6.2.2.2 Loi de décroissance de la radioactivité

Énoncé: Loi de décroissance radioactive

« Le nombre de noyaux radioactifs $N(t)$ présents à la date (temps) t dans un échantillon est donné par la loi de décroissance radioactive ».

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

- N_0 représente le nombre de noyaux radioactifs initialement présents.
- λ Longueur d'onde : Cte radioactive
- t le temps

Relation entre $t_{1/2}$ et λ :

- Au temps t :

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

- Au temps $t + t_{1/2}$:

$$N(t + t_{1/2}) = N_0 e^{-\lambda(t + t_{1/2})}$$

En conséquence

$$[N(t + t_{1/2}) / N(t)] = [N_0 e^{-\lambda(t + t_{1/2})} / N_0 e^{-\lambda t}]$$

$$e^{-\lambda t_{1/2}} = \frac{1}{2} \Rightarrow t_{1/2} = (\ln 2) / \lambda$$

I.6.2.2.3 La demi-vie: Définition

Pour un type de noyaux radioactifs, la demi-vie « $t_{1/2}$ » est la durée au bout de laquelle la moitié des noyaux radioactifs initialement présent dans l'échantillon se sont désintégrés

I.6.2.2.3 La demi-vie: Définition

Pour un type de noyaux radioactifs, la demi-vie « $t_{1/2}$ » est la durée au bout de laquelle la moitié des noyaux radioactifs initialement présent dans l'échantillon se sont désintégrés.

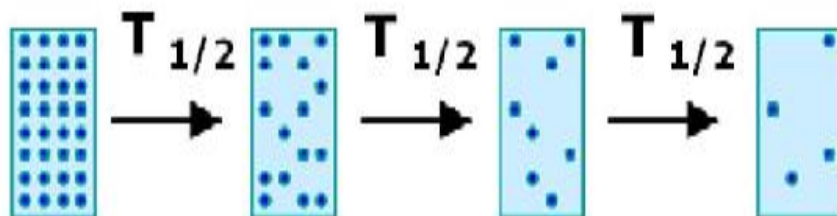


Schéma I.6.16 : Notion de demi vie

I.6.2.2.4 La constante radioactive

Chaque nucléide radioactif est caractérisé par une constante radioactive λ , qui est la probabilité de désintégration d'un noyau par unité de temps.

- Elle s'exprime en s^{-1} .
- La constante λ ne dépend que du nucléide.
- Elle est indépendante du temps, des conditions physiques et chimiques.
- Pendant la durée Δt , la probabilité pour qu'un noyau se désintègre est $\lambda \cdot \Delta t$

I.6.2.2.5 Relation entre $t_{1/2}$ et λ

- Au temps t :

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

- Au temps $(t + t_{1/2})$:

$$N(t + t_{1/2}) = N_0 e^{-\lambda(t + t_{1/2})}$$

En conséquence

$$[N(t + t_{1/2}) / N(t)] = [N_0 e^{-\lambda(t + t_{1/2})} / N_0 e^{-\lambda t}]$$

$$e^{-\lambda t_{1/2}} = \frac{1}{2} \Rightarrow t_{1/2} = (\ln 2) / \lambda$$

I.6.2.2.6 Courbe de décroissance et constante de temps

Décroissance radioactive de l'isotope Carbone 14

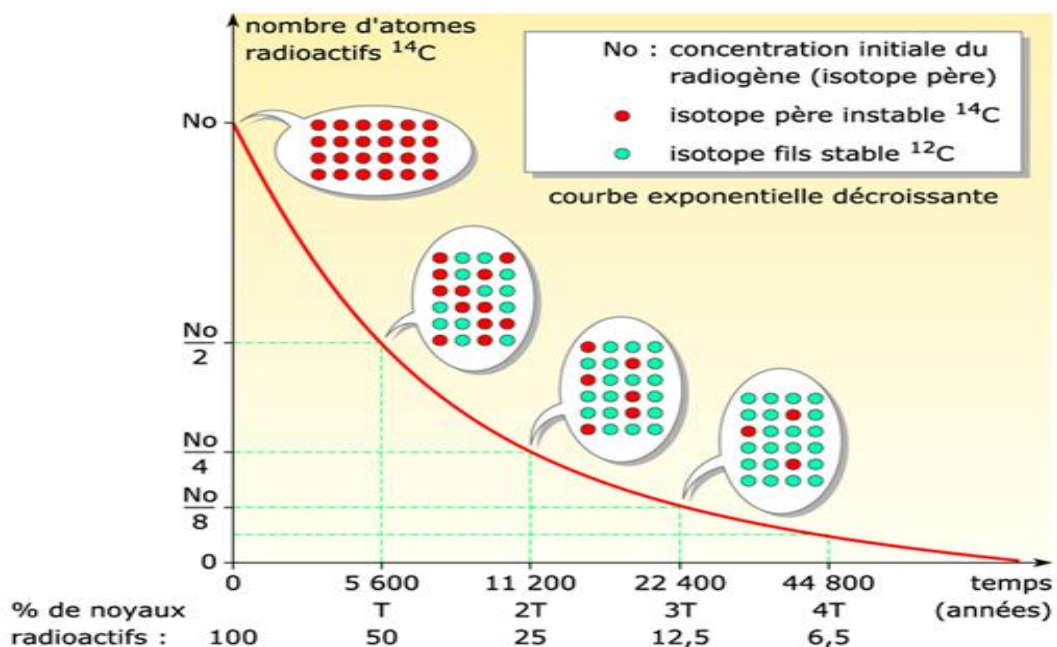


Schéma I.6.17 : Courbe de décroissance radioactivité

I.6.2.2.7 Activité radioactive d'un échantillon

L'activité $A(t)$ d'un échantillon radioactif à la date t est le nombre de désintégrations par seconde de cet échantillon.

- L'unité d'activité est le Becquerel Bq en hommage à Henri Becquerel.

1 Bq = 1 désintégration par seconde.

- Si l'on considère qu'entre t et $t + \Delta t$, le nombre de noyaux radioactif a diminué de ΔN ,

L'activité moyenne est donnée par la relation :

Si l'on pose $A_0 = \lambda \cdot N_0 \Rightarrow A(t) = A_0 e^{-\lambda t}$

$$A = -\frac{dN}{dt} = \lambda N(t)$$

I.6.2.3 Les différents types de réaction nucléaire

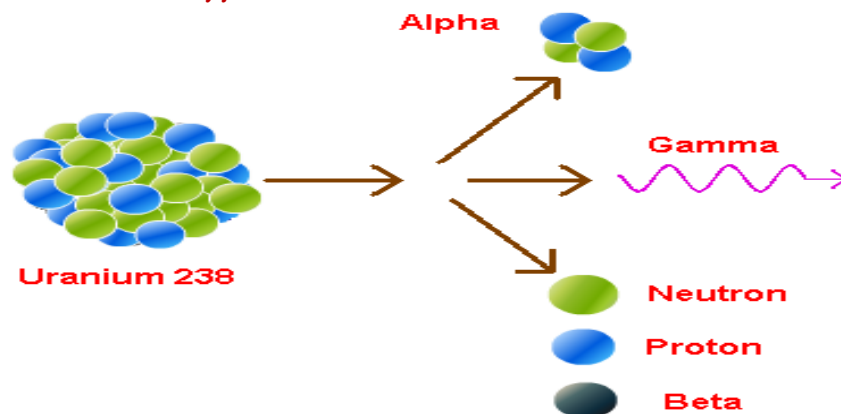


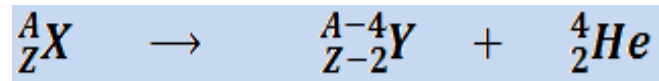
Schéma I.6.18 : Différentes désintégration

Dans la fission nucléaire il y a 3 types de « réaction nucléaire »

- **La désintégration alpha (α)** entraîne l'émission d'un rayonnement α . L'atome perd des protons et des neutrons. Il y a émission d'un noyau d'hélium. Les périodes des désintégrations α sont souvent longues.
- **La désintégration bêta (β)** entraîne l'émission d'un rayonnement β . Les périodes radioactives des désintégrations β sont plus courtes, parfois même très courtes.
- **Le rayonnement gamma (γ)** correspond à l'émission de photons énergétiques.

I.6.2.3.1 Noyau lourd

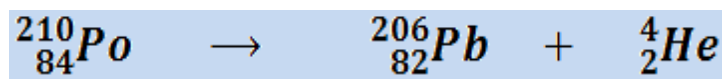
il sera radioactif a



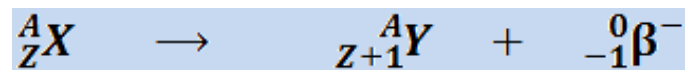
Radioactivité ou émission Alfa 4_2He



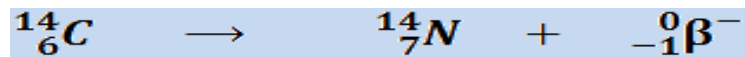
Exemple :



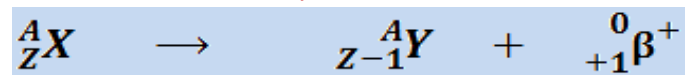
I.6.2.3.2 Nucléide avec excès de neutrons Radioactivité β^-



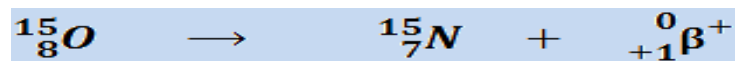
Exemple :



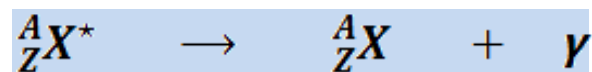
I.6.2.3.3 Nucléide avec excès de proton Radioactivité β^+



Exemple :



I.6.2.3.4 Nucléide excité Radioactivité γ



I.6.2.4 Les Lois de conservation dans la réaction nucléaire:

Loi de Soddy

Toutes les réactions nucléaires vérifient les lois de conservation suivantes :

- Conservation de la charge électrique.
- Conservation du nombre total de nucléons.
- Conservation de la quantité de mouvement.
- Conservation de l'énergie.

La loi de Soddy s'énonce ainsi :

Conservation du nombre de masse A :

« Lors d'une transformation nucléaire, il y a conservation de la charge électrique et du nombre de masse A »

$$A_1 \longrightarrow A_2 + A_3$$

Conservation de la charge électrique :

le nombre de protons ne se conserve pas forcément (exemple : radioactivité bêta).

$$Z_1 \longrightarrow Z_2 + Z_3$$

Conséquence : On peut déduire de la loi de Soddy : la formule générale d'une **désintégration**

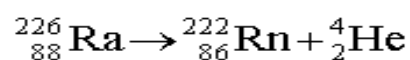
$${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A-A'}_{Z-Z'}Y + {}^{A'}_{Z'}P$$

Radioactivité	Particule émise	Equation de Soddy
Alfa α	He^{2+}	${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A-4}_{Z-2}X + {}^4_2\text{He}$
Désintégration Bêta β^+	${}^0_1e^+$	${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A}_{Z-1}Y + {}^0_{+1}\beta^+$ <i>noyau père → noyau fils + positron</i>
Désintégration Bêta β^-	${}^0_1e^-$	${}^A_ZX \longrightarrow {}^A_{Z+1}Y + {}^0_{-1}\beta^-$ <i>noyau père → noyau fils + électron</i>
Désintégration Gamma γ	γ	${}^A_ZX^* \longrightarrow {}^A_ZX^* + \gamma$

Exemples : la radioactivité

Cas d'une désintégration α .

La réaction étudiée est



Données : $m_{\text{Ra}} = 225,9771 \text{ u}$ $m_{\text{Rn}} = 221,9704 \text{ u}$ $m_{\text{He}} = 4,0015 \text{ u}$
 $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$

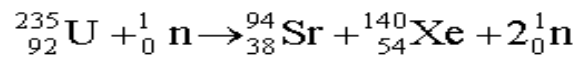
Calcul de $\Delta m = m_{\text{réactifs}} - m_{\text{produits}} = 225,9771 - (221,9704 + 4,0015) = 5,200 \times 10^{-3} \text{ u}$

La conversion appropriée est $1 \text{ u} = 931,5 \text{ MeV}/c^2$

On applique la relation d'équivalence $E = \Delta m c^2$ alors $E = 5,200 \times 10^{-3} \times 931,5 = 4,84 \text{ MeV}$

Exemple pour la fission

La réaction étudiée est :



Données : $E({}^{235}\text{U}) = 1784 \text{ MeV}$ $E({}^{94}\text{Sr}) = 808 \text{ MeV}$ $E({}^{140}\text{Xe}) = 1161 \text{ MeV}$

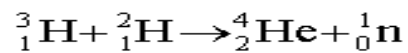
Calcul direct de l'énergie libérée :

$E = E(\text{libération d'énergie}) - E(\text{apport d'énergie})$

$E = [E({}^{94}\text{Sr}) + E({}^{140}\text{Xe})] - E({}^{235}\text{U}) = (808 + 1161) - 1784 = 185 \text{ MeV}$

Exemple pour la fusion.

La réaction étudiée est :



Données :

Réactifs $m({}^3\text{H}) = 5,0074 \times 10^{-27} \text{ kg}$

$m({}^2\text{H}) = 3,3437 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Produits $m({}^4\text{He}) = 6,6447 \times 10^{-27} \text{ kg}$

$m(\text{n}) = 1,6750 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Calcul de Δm

$\Delta m = m_{\text{réactifs}} - m_{\text{produits}}$

$\Delta m = (5,0074 \times 10^{-27} + 3,3437 \times 10^{-27}) - (6,6447 \times 10^{-27} + 1,6750 \times 10^{-27})$

$\Delta m = 3,1400 \times 10^{-29} \text{ kg}$

- On applique la relation d'équivalence :

$$E = \Delta m c^2$$

$$E = 3,1400 \times 10^{-29} \times (3,0 \times 10^8)^2 = 2,8260 \times 10^{-12} \text{ J}$$

$$E = 2,8260 \times 10^{-12} / 1,602 \times 10^{-13} = 17,6 \text{ Mev}$$

I.6.2.5 Énergie libérée par une réaction nucléaire

L'énergie libérée par une réaction nucléaire correspond à la diminution de la masse totale du système. Cette perte de masse ΔM est : $\Delta M = (\text{masse totale avant réaction}) - (\text{masse totale après réaction}) = m_{av} - m_{ap}$

D'après la relation d'Einstein, l'énergie correspondante est égale à :

$$E = \Delta M \cdot c^2 = (m_{av} - m_{ap}) \cdot c^2.$$

Cette énergie est libérée sous forme :

- d'énergie cinétique communiquée aux particules créées ;
- d'énergie de rayonnement γ (rayonnement électromagnétique de très grande fréquence et donc de grande énergie).

Repérage 6.1

Radioactivité

a) Donner l'expression de la loi de décroissance radioactive d'un nucléide en précisant la signification de tous les termes.

b) En déduire l'expression du temps de demi-vie $t_{1/2}$.

On considère un échantillon contenant initialement N_0 noyaux de polonium $^{210}_{84}\text{Po}$

La constante de décroissance radioactive λ du polonium 210 est : $\lambda = 5,8 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$.

c) Calculer son temps de demi-vie $t_{1/2}$ en seconde et en jour.

d) Combien reste-t-il de noyaux radioactifs aux instants $t_{1/2}$, $2 t_{1/2}$, $3 t_{1/2}$?
Donner l'allure de la courbe de décroissance

a)- Donner l'expression de la loi de décroissance radioactive d'un nucléide en précisant la signification de tous les termes.

- Loi de décroissance radioactive.

- Le nombre de noyaux radioactifs $N(t)$ présents à la date t dans un échantillon est donné par la loi de décroissance radioactive.
- $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$
- N_0 représente le nombre de noyaux radioactifs présents à la date $t_0 = 0$
- $N(t)$ représente le nombre de noyaux radioactifs présents à la date t
- λ est la constante de désintégration radioactive s^{-1} .
- Chaque nucléide radioactif est caractérisé par une constante de désintégration radioactive λ , qui est la probabilité de désintégration d'un noyau par unité de temps.
- Elle s'exprime en s^{-1} .
- La constante λ ne dépend que du nucléide.
- Elle est indépendante du temps, des conditions physiques et chimiques.

a) Donner l'expression de la loi de décroissance radioactive d'un nucléide en précisant la signification de tous les termes.

- Loi de décroissance radioactive.
- Le nombre de noyaux radioactifs $N(t)$ présents à la date t dans un échantillon est donné par la loi de décroissance radioactive
- $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$
- N_0 représente le nombre de noyaux radioactifs présents à la date $t_0 = 0$
- $N(t)$ représente le nombre de noyaux radioactifs présents à la date t
- λ est la constante de désintégration radioactive s^{-1} .
- Chaque nucléide radioactif est caractérisé par une constante de désintégration radioactive λ , qui est la probabilité de désintégration d'un noyau par unité de temps.
- Elle s'exprime en s^{-1} .
- La constante λ ne dépend que du nucléide.
- Elle est indépendante du temps, des conditions physiques et chimiques.
- b) En déduire l'expression du temps de demi-vie $t_{1/2}$.

- Temps de demi-vie $t_{1/2}$.
- Pour un type de noyaux radioactifs, la demi-vie $t_{1/2}$ est la durée au bout de laquelle la moitié des noyaux radioactifs initialement présent dans l'échantillon se sont désintégrés.
- Relation entre $t_{1/2}$ et λ :
- Au temps t : $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$
- Au temps $t + t_{1/2}$: $N(t + t_{1/2}) = N_0 e^{-\lambda(t + t_{1/2})}$
- En conséquence :

$$\frac{N(t + t_{1/2})}{N(t)} = \frac{N_0 e^{-\lambda(t + t_{1/2})}}{N_0 e^{-\lambda t}} = \frac{1}{2}$$

$$e^{-\lambda(t_{1/2})} = \frac{1}{2}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

- La demi-vie n'a qu'une valeur statistique.
- Elle indique qu'un noyau radioactif a une chance sur deux de disparaître au bout d'une demi-vie.
- On considère un échantillon contenant initialement N_0 noyaux de polonium $^{210}_{84}\text{Po}$.
- La constante de décroissance radioactive λ du polonium 210 est :
- $\lambda = 5,8 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$.

c) Calculer son temps de demi-vie $t_{1/2}$ en seconde et en jour.

- Temps de demi-vie $t_{1/2}$:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

$$t_{1/2} \approx \frac{\ln 2}{(5,8 \times 10^{-8})}$$

$$t_{1/2} \approx 1,195 \times 10^7 \text{ s}$$

$$t_{1/2} \approx 138 \text{ j}$$

d) Combien reste-t-il de noyaux radioactifs aux instants $t_{1/2}$, $2 t_{1/2}$, $3 t_{1/2}$?
Donner l'allure de la courbe de décroissance.

- Nombre de noyaux radioactifs aux différentes dates.

Représentation graphique :

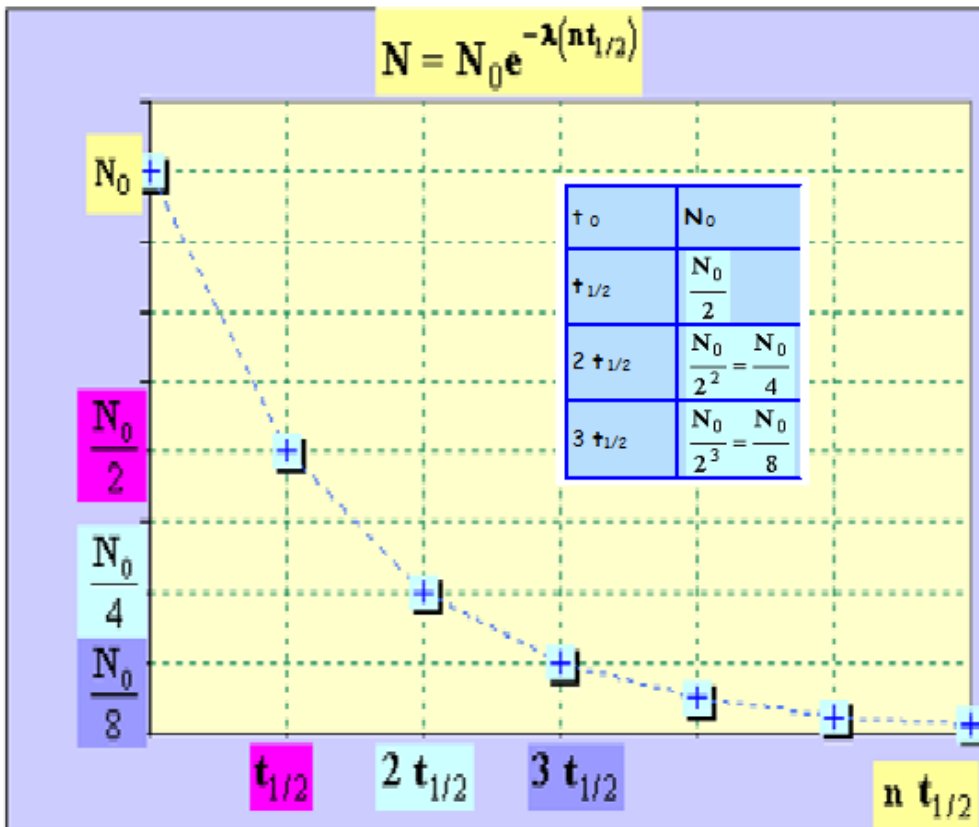


Schéma I.6.19 : Décroissance radiographique

I.7 Configuration électronique des atomes

On appelle configuration électronique d'un atome à l'état fondamental, la répartition des électrons de l'atome sur les niveaux d'énergie (orbitales atomiques) obtenu en appliquant les principes et règles de construction de l'atome.

I.7.1 : Atome de BOHR

I.7.1.1 Le modèle atomique simplifié

Pour représenter le modèle atomique simplifié, il faut représenter les trois particules atomiques de l'atome à leur position respective et en respectant le nombre de chacune des particules.

Le nombre de protons est déterminé par le numéro atomique (Z) de l'atome à représenter.

Le nombre d'électrons, dans un atome neutre, est égal au nombre de protons. Il est donc également équivalent au numéro atomique.

Le nombre de neutrons est calculé en déterminant la différence entre le nombre de masse (A) et le numéro atomique (Z)

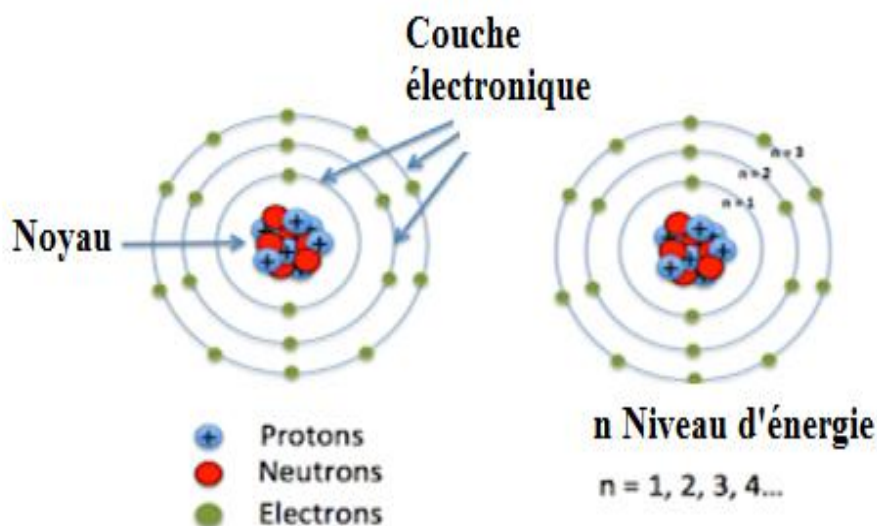


Schéma I.7.1 : Chaque couche électronique est relative à un niveau d'énergie

$$\begin{aligned} r_2 &= 4 r_1 \\ r_3 &= 9 r_1 \\ r_4 &= 16 r_1 \\ r_5 &= 25 r_1 \end{aligned}$$

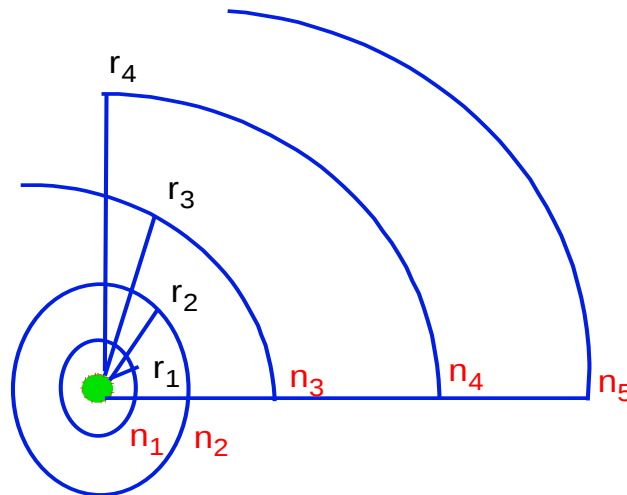


Schéma I.7.2 : Rayon de Bohr

Pour représenter le modèle atomique simplifié du lithium:

Le numéro atomique du lithium est 3, ce qui signifie que le lithium possède trois protons et trois électrons.

Le nombre de neutrons est déterminé par la formule:

Neutrons = $A - Z = 7 - 3 = 4$. Il y a 4 neutrons dans le noyau.

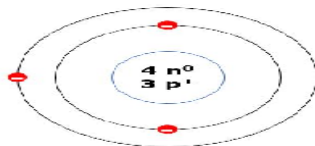


Schéma I.7.3 : Atome planétaire

Si l'atome possède plusieurs d'électrons, on peut utiliser la même technique, mais au lieu de dessiner chacun des atomes, on indique le nombre d'électrons que l'on trouve sur chacune des couches électroniques.

Pour représenter le modèle atomique simplifié du Brome:

Le numéro atomique **Z** du brome est **35**, ce qui signifie que le brome possède **35** protons et **35** électrons. Le nombre de neutrons est déterminé par la formule:

Neutrons = $Z - A = 80 - 35 = 45$ Neutrons = $Z - A = 80 - 35 = 45$. Il y aura 45 neutrons dans le noyau.



Schéma I.7.4 : Les couches électroniques : remplissage

I.7.1.2 Conséquences de la quantification : les Postulats de Bohr

Le premier postulat suppose qu'il existe des orbites circulaires stables (stationnaires) pour les électrons,

Deuxième postulat: postulat des orbites

Sans émission de rayonnement, les électrons ne peuvent graviter autour du noyau que sur certaines orbites permises. Celles-ci sont déterminées par la condition de quantification suivante :

$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi}$$

n = nombre quantique principal, entier

m = masse de l'électron

r_n = rayon de l'orbite de l'électron autour du noyau

v_n = vitesse linéaire de l'électron sur son orbite

h = constante de Planck

Postulat 3 : des émissions et absorptions d'énergie

A chaque orbite permise correspond un niveau énergétique déterminé. Les transitions électroniques d'une orbite vers une autre se font par sauts (Quantum) et sont accompagnées de l'émission ou de l'absorption d'un photon d'énergie :

$$E_f - E_i = h\nu$$

Avec :

E_i = énergie correspondant à l'orbite de départ

E_f = énergie correspondant à l'orbite d'arrivée

f = fréquence du rayonnement émis ou absorbé

Les rayons des différentes couches K, L, M, ..., sont proportionnels au carré du nombre **n** quantique principal.

Tableau des énergies des premiers états énergétiques de l'atome H en (Le rayon de Bohr :

$$r_n = r_1 n^2$$

Energie de la couche :

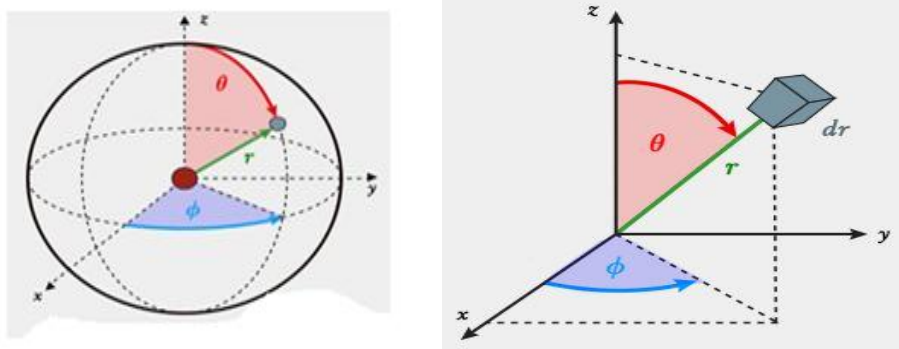
$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

Couche	N	Rayon Å	Energies eV
K	1	0,0529	- 13,6
L	2	0,2116	-3,40
M	3	0,4761	-1,51
N	4	0,8467	-0,85

I.7.2 Nombres quantiques

I.7.2.1 Fonction mathématique et probabilité de présence de l'électron

L'électron gravite autour du noyau à une distance r du noyau. Les coordonnées radiales sont gérées par une fonction associée, dite fonction d'onde, notée : $\Psi [r(n), \theta, \Phi]$.



$$\Psi(r, \theta, \Phi) = R(r) P(\theta) F(\Phi)$$

$\underbrace{\hspace{1cm}}_{f(n)} \quad \underbrace{\hspace{1cm}}_{f(l)} \quad \underbrace{\hspace{1cm}}_{f(\Phi)}$

Schéma I.7.5 : L'orbitale sphérique

Les nombres quantiques sont définis de la façon suivante :

n , nombre quantique principal, est un entier strictement positif : $n = 1, 2, 3, 4, \dots$
 n définit la taille et l'énergie de l'orbitale.

l , nombre quantique secondaire ou azimutal (qui définit ou mesure des angles),
est un entier positif qui ne peut prendre que des valeurs strictement inférieures
à n

$$0 \leq l \leq n - 1.$$

défini une sous-couche d'énergie et caractérise la géométrie de l'orbitale.

m, nombre quantique magnétique, peut prendre que les valeurs entières comprises entre $-l$ et $+l$:

$$-l \leq m \leq +l$$

Pour une valeur de l donnée, il y a donc $(2l+1)$ valeurs de m possibles. m traduit l'orientation de ces orbitales.

Pour chaque jeu de paramètres n, l, m , on a une solution à l'équation de Schrödinger, donc une fonction d'onde (une orbitale) $\psi_{n,l,m}$, et une valeur propre de l'énergie E

Remarque : Plutôt que de désigner une orbitale par la triplet (n, l, m) , l'usage veut qu'on utilise les notations $s, p, d, f, g, h, \dots$, précédées du nombre quantique principal n . Ces lettres correspondent donc aux différentes valeurs de l .

Le tableau ci-dessous présente les premières fonctions d'onde.

Tableau récapitulatif

n	l	m	désignation et (nb) d'OA (sous-couches)	couche	nb maxi d' e^- par couche ($2n^2$)
1	0	0	1s (1)	K	2
2	0	0	2s (1)	L	8
	1	-1, 0, +1	2p (3)		
3	0	0	3s (1)	M	18
	1	-1, 0, +1	3p (3)		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d (5)		
4	0	0	4s (1)	N	32
	1	-1, 0, +1	4p (3)		
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d (5)		
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f (7)		

Représentation en cases quantiques (accolées)

$l =$	0	1	2	3
$m =$	0	-1 0 +1	-2 -1 0 +1 +2	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3
$n = 1$	☐			
$n = 2$	☐	☐ ☐ ☐		
$n = 3$	☐	☐ ☐ ☐	☐ ☐ ☐ ☐ ☐	
$n = 4$	☐	☐ ☐ ☐	☐ ☐ ☐ ☐ ☐	☐ ☐ ☐ ☐ ☐ ☐ ☐ ☐
	s	p	d	f

I.7.2.1.1 Le nombre quantique principal « n »

Ce nombre quantique correspond dans le modèle de Bohr au numéro de la couche électronique.

C'est donc un entier $n \geq 1$ et c'est aussi le numéro de chaque période (ligne) de la classification des éléments (Tableau périodique).

On notera que n n'intervient que dans la composante radiale de la fonction d'onde.

n	1	2	3	4	5	6	7
Niveau ou couche	K	L	M	N	O	P	Q

I.7.2.1.2 Nombre quantique secondaire : l

Appelé aussi nombre quantique azimutal, il se définit par rapport à n : l est un nombre entier positif qui peut prendre les valeurs comprises en 0 et $(n - 1)$:

$$(n - 1) \geq l \geq 0$$

$$\text{Pour } n = 1 \Rightarrow l = 0,$$

$$\text{Pour } n = 2 \Rightarrow l = 0 \quad \text{et} \quad l = 1 \quad (2 \text{ solutions})$$

$$\text{Pour } n = 3 \Rightarrow l = 0 ; l = 1 \quad \text{et} \quad l = 2 \quad (3 \text{ Solutions})$$

A chaque valeur de l correspond une "orbitale atomique", Cette orbitale atomique porte un nom :

l	0	1	2	3	4
Orbitale atomique	s	p	d	f	g
Ou					
Sous couche					

I.7.2.1.3 Nombre quantique magnétique : m

Il se définit par rapport à l : m est un nombre entier qui peut prendre $(2.l + 1)$ valeurs encadrées en l et $-l$:

$$+l \geq m \geq -l$$

Pour $l = 0$: $m = 0$,

Pour $l = 1$: $m = -1$ ou $m = 0$ ou $m = 1$,

Pour $l = 2$: $m = -2$ ou $m = -1$ ou $m = 0$ ou $m = 1$ ou $m = 2$,

etc.

A chaque valeur de (n, l, m) correspond une orbitale atomique (O.A):

n	1	2					3									
l	0	0	1	1	1	0	1	1	1	2	2	2	2	2		
m	0	0	1	0	-1	0	1	0	-1	2	1	0	-1	-2		
O.A.	1s	2s	2p _x	2p _z	2p _y	3s	3p _x	3p _z	3p _y	3d _{x²-y²}	3d _{zx}	3d _{z²}	3d _{yz}	3d _{xy}		

7.2.1.4 Nombre quantique magnétique de spin: s

Sa valeur pour l'électron est $s = 1/2$. Le moment cinétique de spin m_s peut prendre deux valeurs : $m_s = +1/2$; $m_s = -1/2$

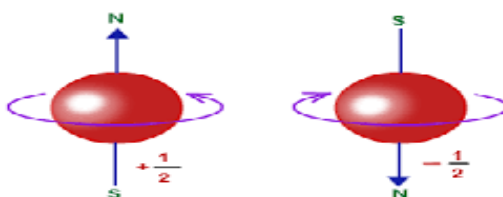


Schéma I.7.6 : Spin de l'électron

Si $m_s = 1/2$, on a coutume de représenter l'électron par une flèche verticale orientée vers le haut : $\uparrow$.

Si $m_s = -1/2$, l'électron est représenté par une flèche verticale orientée vers le bas : $\downarrow$.

I.7.2.1.5 Représentation des orbitales atomiques

Couche électronique $n = 1$

Les orbitales **1s** sont caractérisées par $n = 1$, d'où $\ell = 0$ et $m = 0$. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,\ell,m} = \Psi_{1,0,0}$$

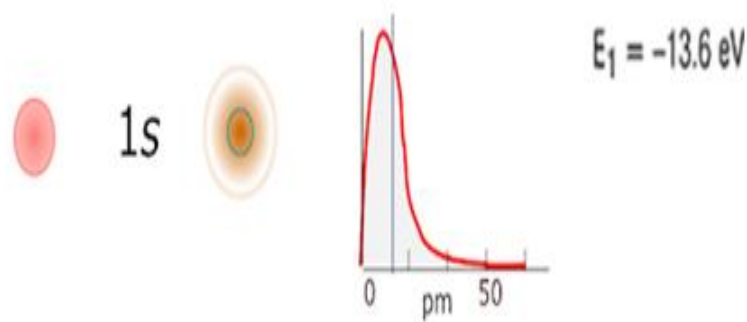


Schéma I.7.7 : Orbitale atomique 1S

Couche électronique $n = 2$

L'orbitales **2s** sont caractérisées par $n = 2$, d'où $\ell = 0$ et $m = 0$. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,\ell,m} = \Psi_{2,0,0}$$

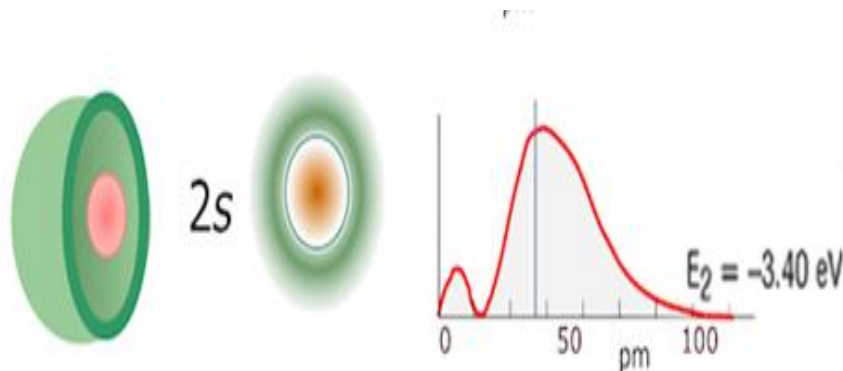


Schéma I.7.8 : Orbitale atomique 2S

Les orbitales **2P** sont caractérisées par :

n = 2, d'où **ℓ = 1** et **m = 0**. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,l,m} = \Psi_{2,1,0} = P_z$$

n = 2, d'où **ℓ = 1** et **m = -1**. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,l,m} = \Psi_{2,1,-1} = P_x$$

n = 2, d'où **ℓ = 1** et **m = +1**. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,l,m} = \Psi_{2,1,+1} = P_y$$

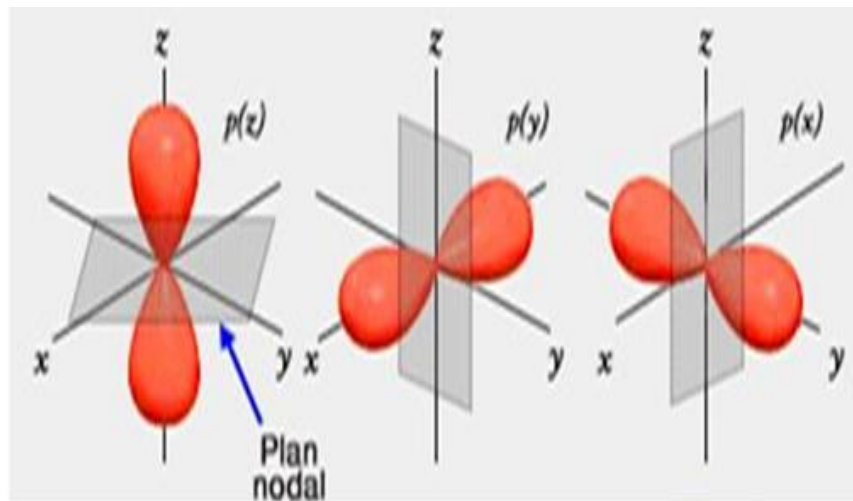


Schéma I.7.9 : Orbitale atomique Pi

Couche électronique **n = 3**

L'orbitales **3s** sont caractérisées par **n = 3**, d'où **ℓ = 0** et **m = 0**. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,l,m} = \Psi_{3,0,0}$$

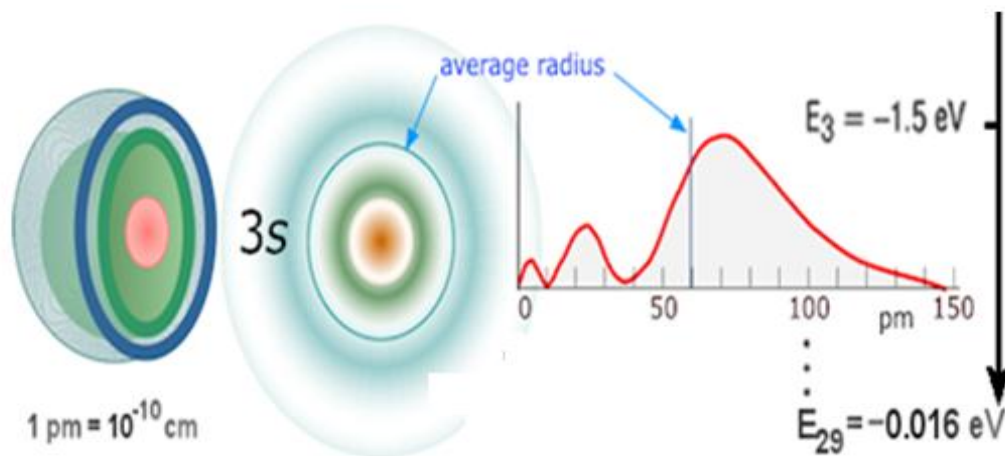


Schéma I.7.10 : Orbitale atomique 3S

Les orbitales **3P** sont caractérisées par :

$n = 3$, d'où $\ell = 1$ et $m = 0$. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,\ell,m} = \Psi_{3,1,0} = P_z$$

$n = 3$, d'où $\ell = 1$ et $m = -1$. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,\ell,m} = \Psi_{3,1,-1} = P_x$$

$n = 3$, d'où $\ell = 1$ et $m = +1$. La fonction d'onde est :

$$\Psi_{n,\ell,m} = \Psi_{3,1,+1} = P_y$$

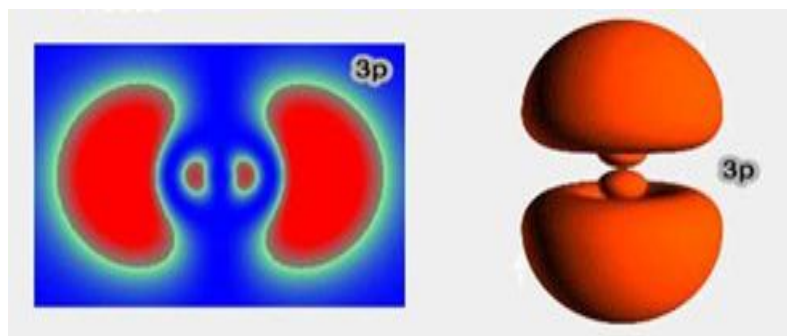


Schéma I.7.11 : Les orbitales **p** ont $\ell = 1$ et $m = -1, 0, +1$

Les orbitales **3d** sont caractérisées par :

$n = 3$, d'où $\ell = 2$ et $m = -2$. La fonction d'onde est :

$$\psi_{n,\ell,m} = \psi_{3,2,-2}$$

$n = 3$, d'où $\ell = 2$ et $m = -1$. La fonction d'onde est :

$$\psi_{n,\ell,m} = \psi_{3,2,-1}$$

$n = 3$, d'où $\ell = 2$ et $m = 0$. La fonction d'onde est :

$$\psi_{n,\ell,m} = \psi_{3,2,0}$$

$n = 3$, d'où $\ell = 2$ et $m = 1$. La fonction d'onde est :

$$\psi_{n,\ell,m} = \psi_{3,2,1}$$

$n = 3$, d'où $\ell = 2$ et $m = 2$. La fonction d'onde est :

$$\psi_{n,\ell,m} = \psi_{3,2,2}$$

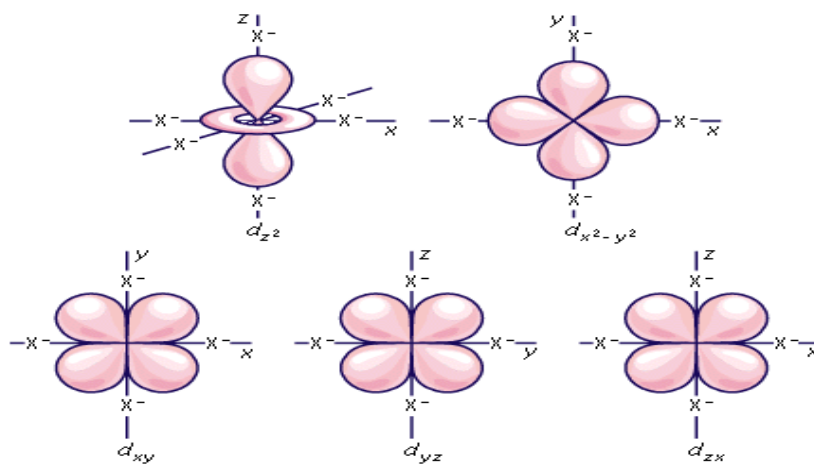
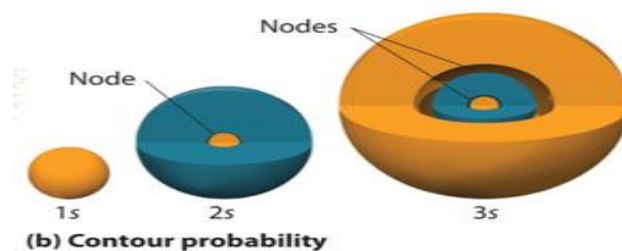
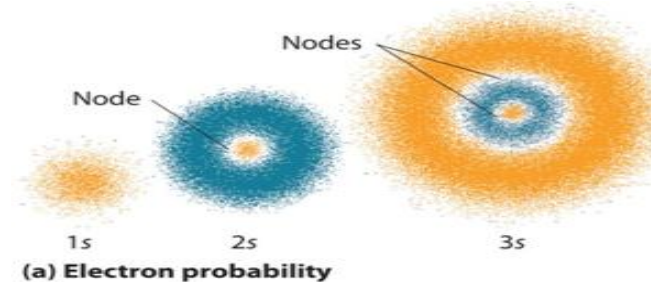
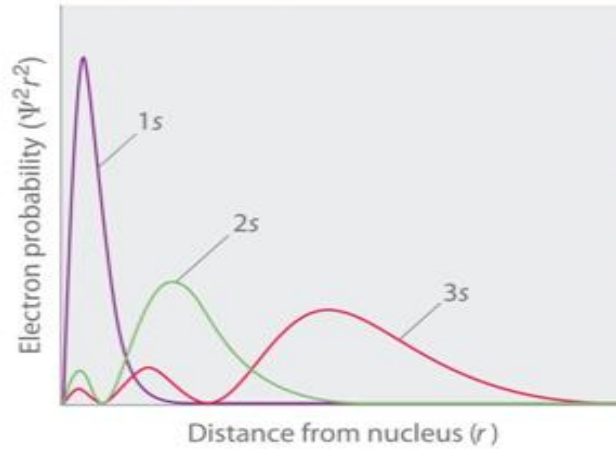


Schéma I.7.12: Les 5 Orbitales atomiques d

Représentation des nuages de probabilité de présence de l'électron





(c) Radial probability

Schéma I.7.13: Représentation des nuages de probabilité de présence de l'électron

Pour un atome de nombre de charge Z

$$r_n = \frac{r_1}{Z} \cdot n^2 E_n = \frac{E_1}{n^2} \cdot Z^2$$

n	=	1	2	3	4	5	6	7
n ²	=	1	4	9	16	25	36	49
r _n	= n ² (0,528) Å	0,528	2,11	4,75	8,40	13,28	19,0	25,87
E _x	= - 13,6 / n ² eV	- 13,6	- 3,4	- 1,5	- 0,85	- 0,54	- 0,37	- 0,27

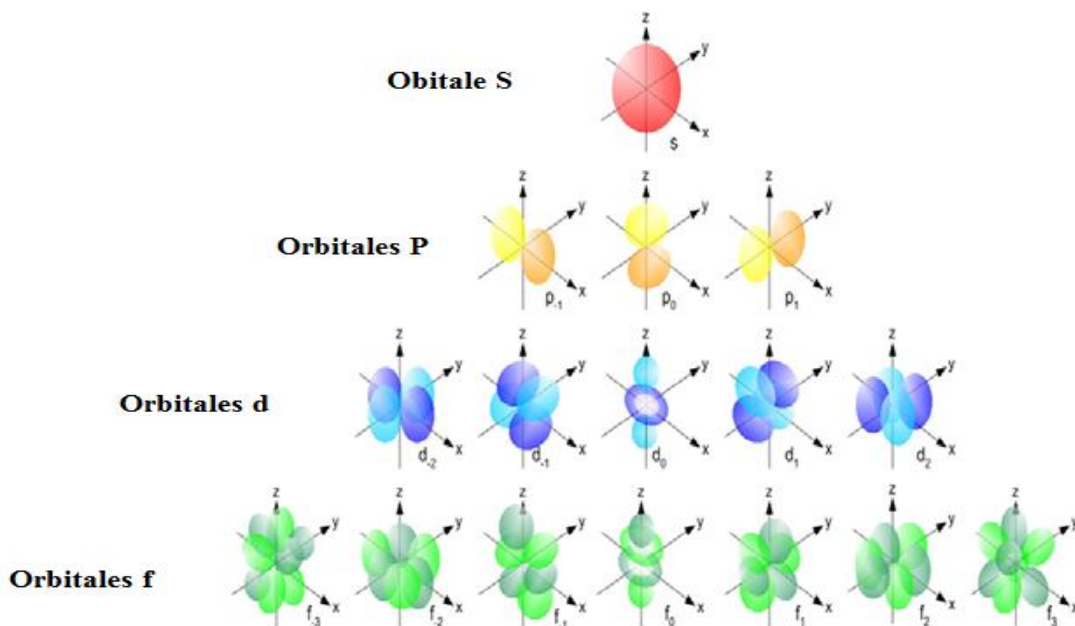


Schéma I.7.14 : Orbitales atomiques

	s ($\ell=0$)	p ($\ell=1$)			d ($\ell=2$)					f ($\ell=3$)						
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=\pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_{z(x^2-y^2)}$	$f_{x(x^2-3y^2)}$	$f_{y(3x^2-y^2)}$
$n=1$																
$n=2$																
$n=3$																
$n=4$																
$n=5$										...	...	...	...	...	...	...
$n=6$					...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$n=7$		...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

Schéma I.7.14 : Orbitales atomiques

I.7.3 Configuration électronique de l'atome

I.7.3.1 Couches principales

Chaque valeur du nombre quantique principal n définit une couche électronique, de sorte que tous les électrons possédant le même nombre n appartiennent à la même couche. Chaque couche est désignée par une lettre

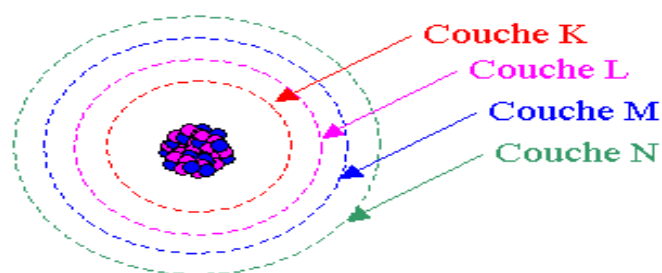


Schéma I.7.15: Nomenclature des couches électroniques

I.7.3.2 Sous couches

n=1	1 s
n=2	2 s 2 p
n=3	3 s 3 p 3 d
n=4	4 s 4 p 4 d 4 f
n=5	5 s 5 p 5 d 5 f 5 g
n=6	6 s 6 p 6 d 6 f 6 g
n=7	7 s 7 p 7 d 7 f 7 g

Chaque valeur du **nombre quantique azimutal « l »** définit une sous-couche électronique. Ces sous-couches sont appelées orbitales atomiques et sont également désignées par des lettres

I.7.3.3 Les Principes de remplissage

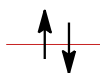
I.7.3.3.1 Principe d'exclusion de Pauli

Deux électrons d'une même Orbitale atomique ont des nombres de spin différents
ou Remarquons que deux électrons appariés sont forcément de spin contraire.

Représentation symbolique des OA et des électrons

Chaque OA est représentée par :

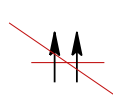
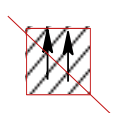
—			
Niveau d'énergie	Case quantique	Spin + 1/2	Spin - 1/2



Niveau d'énergie avec deux électrons Case quantique avec deux électrons



Case quantique avec un électron Niveau d'énergie avec un électron



Case quantique avec un électrons

Niveau d'énergie avec un électron

Schéma I.7.16 : Représentation symbolique des OA

I.7.3.3.2 La règle de Klechkowski

(Ordre de remplissage des orbitales atomiques)

La règle de **Klechkowski** permet de retrouver facilement l'ordre de remplissage des orbitales. Il suffit de tracer le tableau suivant :

Couche-K		1s			
Couche-L		2s	2p		
Couche-M		3s	3p	3d	
Couche-N		4s	4p	4d	4f
Couche-O		5s	5p	5d	5f
Couche-P		6s	6p	6d	

Le remplissage des sous couches se fait dans l'ordre de $(n + l)$ croissant. Si, pour deux sous couches, cette somme est la même, celle qui a la plus petite valeur de n se remplit la première.

Exemple : Pour l'orbitale **2p** ; $(n + l) = 2 + 1 = 3$ Pour l'orbitale **3s** ; $(n + l) = 3 + 0 = 3$ Dans ce cas, l'orbitale **2p** se remplit avant l'orbitale **3s**.

L'ordre de remplissage en fonction de l'énergie croissante: **1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s.....** La règle de **Klechkowski** est aussi appelée « règles des diagonales » : l'ordre de remplissage est celui qu'indiquent les flèches en commençant par le haut.

Méthode des cases quantiques

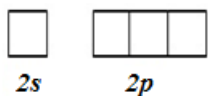
Cette technique consiste à représenter les orbitales d'une même couche par des cases regroupées par types d'orbitales (1 case pour l'orbitale s, 3 cases pour les orbitales p, 5 cases pour les orbitales d, ..

Exemple :

Couche K pour laquelle il existe les orbitales 1s,



Couche L pour laquelle il existe les orbitales 2s, 2p.



Couche M pour laquelle il existe les orbitales 3s, 3p et 3d.



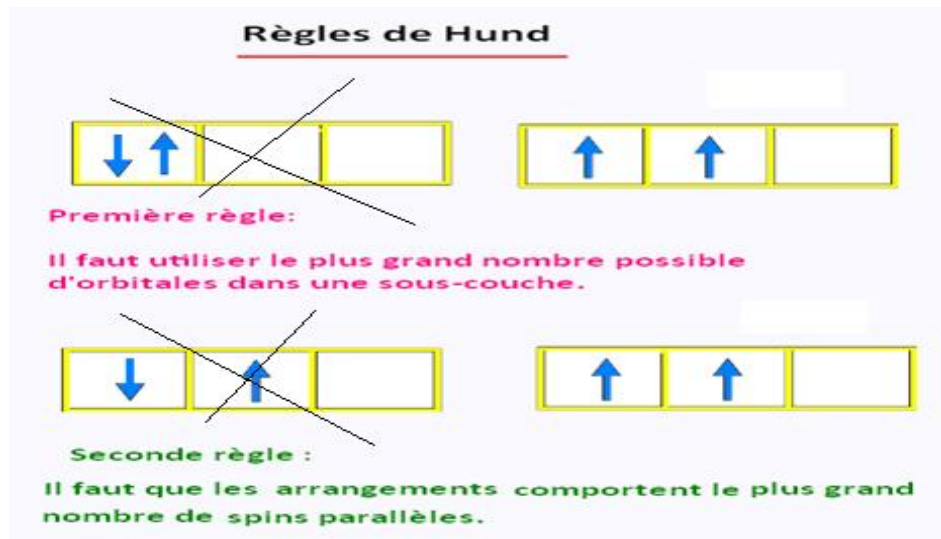
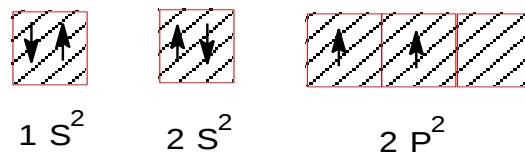
Les électrons sont représentés par des flèches (vers le haut ou vers le bas suivant leur valeur de spin +1/2 ou -1/2).

Un électron seul dans une orbitale est appelé électron célibataire tandis que lorsque deux électrons sont contenus dans une même orbitale, on parle d'électrons appariés, de paire électronique ou encore de doublet.

I.7.3.3.3 La règle de Hund

Les électrons se placent d'abord à raison de 1 par orbitale de même type et ne s'associent en doublet que s'ils sont plus nombreux que le nombre d'orbitales.

Structure électronique: Atome de Carbone Z =



I.7.3.3.4 Règle de stabilité

Les électrons occupent les niveaux d'énergie les plus bas.

Résumons-nous : Les règles de remplissage électronique

Orbitales électroniques

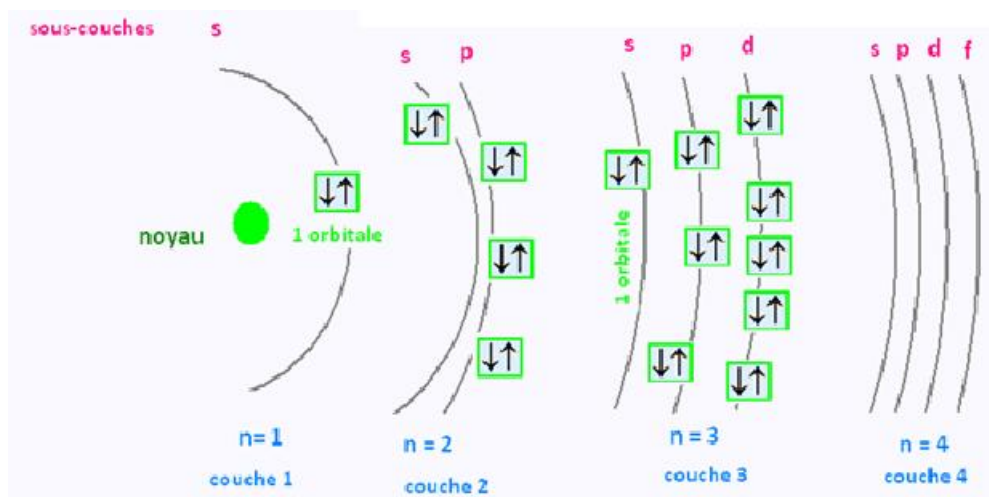


Schéma I.7.17: Les règles de remplissage électronique

- **Règle de stabilité** : les électrons occupent les niveaux d'énergie les plus bas.
- **Règle de Pauli** : principe d'exclusion : Deux électrons d'un même atome ne peuvent pas avoir leurs quatre nombres quantiques tous identiques. Autrement dit, dans une case quantique, les électrons doivent avoir des spins anti parallèles.
- **Règle de Hund** : L'état électronique fondamental correspond à un maximum de spins parallèles. La multiplicité des spins est maximale.
- **Règle de Klechkowski** : Le remplissage des sous couches se fait dans l'ordre de $(n + l)$ croissant. Si, pour deux sous couches, cette somme est la même, celle qui a la plus petite valeur de n se remplit la première.

Exemple : Pour l'orbitale 2p ; $(n + l) = 2 + 1 = 3$ Pour l'orbitale 3s ; $(n + l) = 3 + 0 = 3$
 Dans ce cas, l'orbitale 2p se remplit avant l'orbitale 3s.

L'ordre de remplissage en fonction de l'énergie croissante: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s..... La règle de Klechkowski est aussi appelée « règles des diagonales » : l'ordre de remplissage est celui qu'indiquent les flèches en commençant par le haut.

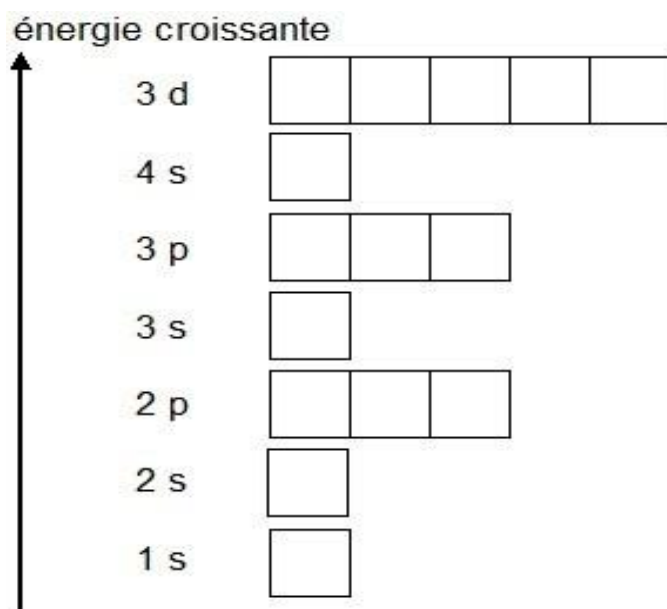


Schéma I.7.18: Schéma énergétique

I.7.3.4 Application et cas d'exceptions

Il existe cependant **2 exceptions** à cette règle : **le Cr** et **le Cu**. En effet, ceux-ci acquièrent une énergie électronique plus basse si leur orbitale 3d est remplie entièrement ou à moitié.

Cr (Z = 24) : la règle donne $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$

or il est plus stable d'avoir $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$

Cu (Z = 29) : la règle donne $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$

or il est plus stable d'avoir $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

Cu : $[Ar] 4s^1 3d^{10}$

Au lieu de:

Cu : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

Les exceptions à la règle de Klechkowski sont listées dans le tableau suivant, où les distributions d'électrons irrégulières sont indiquées en gras :

<u>Élément chimique</u>			<u>Famille</u>	<u>Configuration électronique</u>
24	Cr	Chrome	<u>Métal de transition</u>	<u>[Ar]</u> $4s^1 3d^5$
28	Ni	Nickel	<u>Métal de transition</u>	<u>[Ar]</u> $4s^1 3d^9$ (*)
29	Cu	Cuivre	<u>Métal de transition</u>	<u>[Ar]</u> $4s^1 3d^{10}$
41	Nb	Niobium	<u>Métal de transition</u>	<u>[Kr]</u> $5s^1 4d^4$
42	Mo	Molybdène	<u>Métal de transition</u>	<u>[Kr]</u> $5s^1 4d^5$
44	Ru	Ruthénium	<u>Métal de transition</u>	<u>[Kr]</u> $5s^1 4d^7$
45	Rh	Rhodium	<u>Métal de transition</u>	<u>[Kr]</u> $5s^1 4d^8$
46	Pd	Palladium	<u>Métal de transition</u>	<u>[Kr]</u> $4d^{10}$
47	Ag	Argent	<u>Métal de transition</u>	<u>[Kr]</u> $5s^1 4d^{10}$
57	La	Lanthane	<u>Lanthanide</u>	<u>[Xe]</u> $6s^2 5d^1$
58	Ce	Cérium	<u>Lanthanide</u>	<u>[Xe]</u> $6s^2 4f^1 5d^1$
64	Gd	Gadolinium	<u>Lanthanide</u>	<u>[Xe]</u> $6s^2 4f^7 5d^1$

78	Pt	<u>Platine</u>	<u>Métal de transition</u>	<u>[Xe]</u> $6s^1 4f^{14} 5d^9$
79	Au	<u>Or</u>	<u>Métal de transition</u>	<u>[Xe]</u> $6s^1 4f^{14} 5d^{10}$
89	Ac	<u>Actinium</u>	<u>Actinide</u>	<u>[Rn]</u> $7s^2 6d^1$
90	Th	<u>Thorium</u>	<u>Actinide</u>	<u>[Rn]</u> $7s^2 6d^2$
91	Pa	<u>Protactinium</u>	<u>Actinide</u>	<u>[Rn]</u> $7s^2 5f^2 6d^1$
92	U	<u>Uranium</u>	<u>Actinide</u>	<u>[Rn]</u> $7s^2 5f^3 6d^1$
96	Cm	<u>Curium</u>	<u>Actinide</u>	<u>[Rn]</u> $7s^2 5f^7 6d^1$
103	Lr	<u>Lawrencium</u>	<u>Actinide</u>	<u>[Rn]</u> $7s^2 5f^{14} 7p^1$

Repérage 1 : Etablir les configurations électroniques des atomes ou ions suivants puis décrire leur couche de valence. On supposera qu'ils suivent tous la règle de Klechkowski. (Entre parenthèses Valeur de Z)

Na(11) - K(19) - Ca^{2+} (20) - Sr(38) - V(23) - Fe^{2+} (26) - Pb(82) - Co^{3+} (27) - Br(35) - S^{2-} (16) - Al^{3+} (13) - Cs(55)

Règle de Klechkowski:

A quelques exceptions près, le remplissage des couches et des sous-couches se fait dans l'ordre des valeurs de $(n + l)$ croissant. Si plusieurs combinaisons possibles conduisent à la même valeur, on choisit celle possédant la plus petite valeur de n.

Soit la représentation mnémotechnique suivante :

		$l=0$ 2e ⁻	$l=1$ 6e ⁻	$l=2$ 10e ⁻	$l=3$ 14e ⁻	
$n=0$	K	1s				[He] Z=2
$n=1$	L	2s	2p			[Ne] Z=10
$n=2$	M	3s	3p	3d		[Ar] Z=18
$n=3$	N	4s	4p	4d	4f	[Kr] Z=36
$n=4$	O	5s	5p	5d	5f	[Xe] Z=54
$n=5$	P	6s	6p	6d		[Rn] Z=86
$n=6$	Q	7s				

Schéma I.7.19: Remplissage électronique

Na(11) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ou (Ne) $3s^1$ ou $K^2 L^8 M^1$

K(19) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$ ou (Ar) $4s^1$ ou $K^2 L^8 M^8 N^1$

Ca²⁺(20) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ ou (Ar) $4s^1$ ou $K^2 L^8 M^8$

Fe²⁺(26) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ ou (Ar) $3d^6 4s^2$ ou $K^2 L^8 M^{14} N^2$

Pb(82) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$

Sr(38): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2$ ou (Kr) $5s^2$ ou $K^2 L^8 M^{18} N^8 O^2$

V(23) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$ ou (Ar) $3d^3 4s^2$ ou $K^2 L^8 M^{11} N^2$

Ou (Xe) $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2$ ou $K^2 L^8 M^{18} N^{32} O^{18} p^4$

Co³⁺(27) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$ ou (Ar) $3d^6$ ou $K^2 L^8 M^{14}$

Br(35) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$ ou (Ar) $3d^{10} 4s^2 4p^5$ ou $K^2 L^8 M^{18} N^7$

S²⁻(16) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ ou (Ar) ou $K^2 L^8 M^8$

Al³⁺(13) $1s^2 2s^2 2p^6$ ou (Ne) ou $K^2 L^8$

Cs(55) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^1$ ou (Xe) $6s^1$

ou $K^2 L^8 M^{18} N^{18} O^8 p^1$

I.8 Classification périodique des éléments chimiques

Le **tableau périodique des éléments** est un répertoire organisé de tous les éléments chimiques, ordonnés par numéro atomique croissant et organisés en fonction de leur configuration électronique et de leurs propriétés chimiques.

La classification utilisée aujourd'hui a été conçue par le russe Dimitri Ivanovich Mendeleïev. Premièrement, les éléments sont classés selon leur **numéro atomique**. On a donné le numéro 1 à l'atome qui a un proton, le numéro 2 à l'atome qui a deux protons et ainsi de suite.

colonnes périodes	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	¹ ₁ H hydrogène 1,0																	⁴ ₂ He hélium 4,0
2	⁷ ₃ Li lithium 6,9	⁹ ₄ Be béryllium 9,0											¹¹ ₅ B bore 10,8	¹² ₆ C carbone 12,0	¹⁴ ₇ N azote 14,0	¹⁶ ₈ O oxygène 16,0	¹⁹ ₉ F fluor 19,0	²⁰ ₁₀ Ne néon 20,2
3	²³ ₁₁ Na sodium 23,0	²⁴ ₁₂ Mg magnésium 24,3											²⁷ ₁₃ Al aluminium 27,0	²⁸ ₁₄ Si silicium 28,1	³¹ ₁₅ P phosphore 31,0	³² ₁₆ S soufre 32,1	³⁵ ₁₇ Cl chlore 35,5	⁴⁰ ₁₈ Ar argon 39,9
4	³⁹ ₁₉ K potassium 39,1	⁴⁰ ₂₀ Ca calcium 40,1	⁴⁵ ₂₁ Sc scandium 45,0	⁴⁸ ₂₂ Ti titane 47,9	⁵¹ ₂₃ V vanadium 50,9	⁵² ₂₄ Cr chrome 52,0	⁵⁵ ₂₅ Mn manganèse 54,9	⁵⁶ ₂₆ Fe fer 55,8	⁵⁹ ₂₇ Co cobalt 58,9	⁵⁸ ₂₈ Ni nickel 58,7	⁶³ ₂₉ Cu cuivre 63,5	⁶⁴ ₃₀ Zn zinc 65,4	⁶⁹ ₃₁ Ga gallium 69,7	⁷⁴ ₃₂ Ge germanium 72,6	⁷⁵ ₃₃ As arsenic 74,9	⁸⁰ ₃₄ Se sélénium 79,0	⁷⁹ ₃₅ Br brome 79,9	⁸⁴ ₃₆ Kr krypton 83,8
5	⁸⁵ ₃₇ Rb rubidium 85,5	⁸⁸ ₃₈ Sr strontium 87,6	⁸⁹ ₃₉ Y yttrium 88,9	⁹⁰ ₄₀ Zr zirconium 91,2	⁹³ ₄₁ Nb niobium 92,9	⁹⁸ ₄₂ Mo molybdène 95,9	⁹⁸ ₄₃ Tc technétium 98,9	¹⁰² ₄₄ Ru ruthénium 101,1	¹⁰³ ₄₅ Rh rhodium 102,9	¹⁰⁶ ₄₆ Pd palladium 106,4	¹⁰⁷ ₄₇ Ag argent 107,9	¹¹⁴ ₄₈ Cd cadmium 112,4	¹¹⁵ ₄₉ In indium 114,8	¹²⁰ ₅₀ Sn étain 118,7	¹²¹ ₅₁ Sb antimoine 121,7	¹³⁰ ₅₂ Te tellure 127,6	¹²⁷ ₅₃ I iode 126,9	¹²⁹ ₅₄ Xe xénon 131,3
6	¹³³ ₅₅ Cs césium 132,9	¹³⁸ ₅₆ Ba baryum 137,3	L	¹⁸⁰ ₇₂ Hf hafnium 178,5	¹⁸¹ ₇₃ Ta tantalé 180,9	¹⁸⁴ ₇₄ W tungstène 183,9	¹⁸⁷ ₇₅ Re rhénium 186,2	¹⁹² ₇₆ Os osmium 190,2	¹⁹³ ₇₇ Ir iridium 192,2	¹⁹⁵ ₇₈ Pt platine 195,1	¹⁹⁷ ₇₉ Au or 197,0	²⁰² ₈₀ Hg mercure 200,6	²⁰⁵ ₈₁ Tl thallium 204,4	²⁰⁸ ₈₂ Pb plomb 207,2	²⁰⁹ ₈₃ Bi bismuth 209,0	²¹⁰ ₈₄ Po polonium ≈ 209	²¹⁰ ₈₅ At astate ≈ 210	²²² ₈₆ Rn radon ≈ 222
7	²²³ ₈₇ Fr francium ≈ 223	²²⁶ ₈₈ Ra radium 226,0	A	²⁶¹ ₁₀₄ Ku kurchatovium ≈ 261	²⁶² ₁₀₅ Ha hahnium ≈ 262	¹⁰⁶ ₁₀₆ Sg seaborgium —	¹⁰⁷ ₁₀₇ Ns nielsbohrium —	¹⁰⁸ ₁₀₈ Hs hassium —	¹⁰⁹ ₁₀₉ Mt meitnerium —	¹¹⁰ ₁₁₀ X —	¹¹¹ ₁₁₁ X —	¹¹² ₁₁₂ X —	¹¹⁴ ₁₁₄ X —	¹¹⁶ ₁₁₆ X —	¹¹⁸ ₁₁₈ X —	¹¹⁸ ₁₁₈ X —	¹¹⁸ ₁₁₈ X —	¹¹⁸ ₁₁₈ X —

L = Lanthanides : 57 à 71

¹³⁹ ₅₇ La lanthane 138,9	¹⁴⁰ ₅₈ Ce cérium 140,1	¹⁴¹ ₅₉ Pr praseodyme 140,9	¹⁴² ₆₀ Nd néodyme 144,2	¹⁴⁶ ₆₁ Pm prométhium ≈ 145	¹⁵² ₆₂ Sm samarium 150,4	¹⁵³ ₆₃ Eu europium 152,0	¹⁵⁸ ₆₄ Gd gadolinium 157,2	¹⁵⁹ ₆₅ Tb terbium 158,9	¹⁶⁴ ₆₆ Dy dysprosium 162,5	¹⁶⁵ ₆₇ Ho holmium 164,9	¹⁶⁶ ₆₈ Er erbium 167,3	¹⁶⁹ ₆₉ Tm thulium 168,9	¹⁷⁴ ₇₀ Yb ytterbium 173,0	¹⁷⁵ ₇₁ Lu lutétium 175,0
--	--	--	---	--	--	--	--	---	--	---	--	---	---	--

A = Actinides : 89 à 103

²²⁷ ₈₉ Ac actinium ≈ 227	²³² ₉₀ Th thorium 232,0	²³¹ ₉₁ Pa protactinium 231,0	²³⁸ ₉₂ U uranium 238,0	²³⁷ ₉₃ Np neptunium ≈ 237	²⁴⁴ ₉₄ Pu plutonium ≈ 244	²⁴³ ₉₅ Am américium ≈ 243	²⁴⁷ ₉₆ Cm curium ≈ 247	²⁴⁷ ₉₇ Bk berkélium ≈ 247	²⁵¹ ₉₈ Cf californium ≈ 251	²⁵⁴ ₉₉ Es einsteinium ≈ 254	²⁵⁷ ₁₀₀ Fm fermium ≈ 257	²⁵⁸ ₁₀₁ Md mendélévium ≈ 258	²⁵⁹ ₁₀₂ No nobélium ≈ 259	²⁶⁰ ₁₀₃ Lr lawrencium ≈ 260
--	---	--	--	---	---	---	--	---	---	---	--	--	---	---

Schéma I.8.1 : Tableau périodique

I.8.1 Groupes (colonnes), Périodes (ligne)

- La classification périodique comporte 18 colonnes et 7 lignes ou périodes.
- Les éléments sont classés par numéro atomique Z croissant.
- On retrouve dans la classification périodique le remplissage progressif des couches électroniques.
- Les éléments dont les atomes ont le même nombre d'électrons sur la couche électronique externe sont disposés dans une même colonne et constituent une famille.

Une **famille chimique** correspond à une colonne dans le tableau périodique.

hydrogen 1 H 1.0079											helium 2 He 4.0026																								
lithium 3 Li 6.941		beryllium 4 Be 9.0122																				boron 5 B 10.811		carbon 6 C 12.011		nitrogen 7 N 14.007		oxygen 8 O 15.999		fluorine 9 F 18.998		neon 10 Ne 20.180			
sodium 11 Na 22.990		magnesium 12 Mg 24.305																				aluminium 13 Al 26.982		silicon 14 Si 28.086		phosphorus 15 P 30.974		sulfur 16 S 32.065		chlorine 17 Cl 35.453		argon 18 Ar 39.948			
potassium 19 K 39.098		calcium 20 Ca 40.078		scandium 21 Sc 44.956	titanium 22 Ti 47.867		vanadium 23 V 50.942		chromium 24 Cr 51.996		manganese 25 Mn 54.938		iron 26 Fe 55.845		cobalt 27 Co 58.933		nickel 28 Ni 58.693		copper 29 Cu 63.546		zinc 30 Zn 65.38		gallium 31 Ga 69.723		germanium 32 Ge 72.64		arsenic 33 As 74.922		selenium 34 Se 78.96		bromine 35 Br 79.904		krypton 36 Kr 83.798		
rubidium 37 Rb 85.468		strontium 38 Sr 87.62		yttrium 39 Y 88.906	zirconium 40 Zr 91.224		niobium 41 Nb 92.906		molybdenum 42 Mo 95.96		technetium 43 Tc [98]		ruthenium 44 Ru 101.07		rhodium 45 Rh 102.91		palladium 46 Pd 106.42		silver 47 Ag 107.87		cadmium 48 Cd 112.41		indium 49 In 114.82		tin 50 Sn 118.71		antimony 51 Sb 121.76		tellurium 52 Te 127.60		iodine 53 I 126.90		xenon 54 Xe 131.29		
caesium 55 Cs 132.91		barium 56 Ba 137.33				hafnium 72 Hf 178.49		tantalum 73 Ta 180.95		tungsten 74 W 183.84		rhenium 75 Re 186.21		osmium 76 Os 190.23		iridium 77 Ir 192.22		platinum 78 Pt 195.08		gold 79 Au 196.97		mercury 80 Hg 200.59		thallium 81 Tl 204.38		lead 82 Pb 207.2		bismuth 83 Bi 208.98		polonium 84 Po [209]		astatine 85 At [210]		radon 86 Rn [222]	
francium 87 Fr [223]		radium 88 Ra [226]				rutherfordium 104 Rf [261]		dubnium 105 Db [262]		seaborgium 106 Sg [266]		bohrium 107 Bh [264]		hassium 108 Hs [277]		meitnerium 109 Mt [268]		darmstadtium 110 Ds [271]		roentgenium 111 Rg [272]															

lanthanum 57 La 138.91	cerium 58 Ce 140.12	praseodymium 59 Pr 140.91	neodymium 60 Nd 144.24	promethium 61 Pm [145]	samarium 62 Sm 150.36	europium 63 Eu 151.96	gadolinium 64 Gd 157.25	terbium 65 Tb 158.93	dysprosium 66 Dy 162.50	holmium 67 Ho 164.93	erbium 68 Er 167.26	thulium 69 Tm 168.93	ytterbium 70 Yb 173.05	lutetium 71 Lu 174.97
actinium 89 Ac [227]	thorium 90 Th 232.04	protactinium 91 Pa 231.04	uranium 92 U 238.03	neptunium 93 Np [237]	plutonium 94 Pu [244]	americium 95 Am [243]	curium 96 Cm [247]	berkelium 97 Bk [247]	californium 98 Cf [251]	einsteinium 99 Es [252]	fermium 100 Fm [257]	mendelevium 101 Md [258]	nobelium 102 No [259]	lawrencium 103 Lr [262]

I.8.2 Blocs S, P, d et f

Bloc s		Bloc d										Bloc p					
1 H 1.008																2 He 4.0026	
3 Li 6.94	4 Be 9.0122											5 B 10.81	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305											13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.887	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.63	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc 97.907	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57 Lu 174.967	58 Hf 178.49	59 Ta 180.948	60 W 183.84	61 Re 186.21	62 Os 190.23	63 Ir 192.22	64 Pt 195.08	65 Au 196.967	66 Hg 200.59	67 Tl 204.38	68 Pb 207.2	69 Bi 208.98	70 Po [209]	71 At [209]	72 Rn [222]
87 Fr [223]	88 Ra [226]	89 Lr [262]	90 Rf [261]	91 Db [262]	92 Sg [266]	93 Bh [264]	94 Hs [277]	95 Mt [276]	96 Ds [281]	97 Rg [289]	98 Cn [285]	99 Uut [284]	100 Fl [289]	101 Uup [294]	102 Lv [293]	103 Uus [294]	104 Uuo [294]
		Bloc f															
		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [144.91]	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.05		
		89 Ac [227.03]	90 Th 232.04	91 Pa [231.04]	92 U 238.03	93 Np [237.05]	94 Pu [244.06]	95 Am [243.06]	96 Cm [247.07]	97 Bk [247.07]	98 Cf [251.08]	99 Es [252.08]	100 Fm [257.10]	101 Md [258.10]	102 No [259.10]		

Schéma I.8.2 : de blocs

Remarque: Cas de l'Hélium: Bien qu'appartenant au bloc S, celui-ci est placé dans le bloc P.

I.8.3 Les trois premières périodes

La première période est formée de l'élément hydrogène et de l'élément hélium.

- Elle correspond au remplissage de la **couche K**.
- Elle comprend deux éléments.

La deuxième période est constituée de huit éléments (lithium, béryllium, bore, carbone, azote, oxygène, fluor et néon). Elle correspond au remplissage de la couche **L**.

La troisième période commence par le sodium et le magnésium- puis continue avec l'aluminium, le silicium, le phosphore, le soufre, le chlore et l'argon.

Elle correspond au remplissage de la *couche M*. Elle est constituée de huit éléments chimiques.

La quatrième période et la cinquième période comportent 18 éléments.

Similitude de propriétés	Les éléments sont classés selon leurs similitudes de propriétés, dans 18 FAMILLES : 8 familles " a " et 10 familles " b ".
Familles "a"	Les familles "a" dites "principales", sont numérotées de Ia à VIIIa et portent les noms repris ci-dessous.
Familles "b"	Les familles " b " sont situées entre les familles IIa et IIIa et portent le nom de métaux de transition .

Les éléments d'une même famille ont le *même nombre d'électrons de valence*.

Le numéro de la famille correspond
au nombre d'électrons de valence.

Les éléments de la famille **Ia** ont **un électron** de valence

Les éléments de la famille **IIa** ont **deux électrons** de valence

Les éléments de la famille **IIIa** ont **trois électron** de valence

I.8.4 Nomenclature des colonnes

Certaines familles ont reçues des noms particuliers à connaître

The diagram shows a standard periodic table with handwritten labels in French pointing to specific columns or groups of elements:

- Alcalins**: Points to Group 1 (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr).
- Alcalino-terreux**: Points to Group 2 (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra).
- Terreux**: Points to the d-block transition metals (Groups 3-10).
- Carbonides**: Points to Group 14 (C, Si, Ge, Sn, Pb).
- Azotides**: Points to Group 15 (N, P, As, Sb, Bi).
- Sulfurides**: Points to Group 16 (O, S, Se, Te, Po).
- Halogènes**: Points to Group 17 (F, Cl, Br, I, At).
- Gaz rares**: Points to Group 18 (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn).
- métaux de transition**: A label placed over the central d-block of the table.

The periodic table includes elements from Hydrogen (H) to Oganesson (Og), with the lanthanide and actinide series shown at the bottom.

Schéma I.8.3 : Nomenclature des familles (colonnes)

I.8.5 Evolution des propriétés physiques dans le tableau periodique

I.8.5.1 Electronegativité

Définition : Tendance qu'a un atome à attirer les électrons dans la liaison

L'électronégativité des éléments dans le tableau périodique

Le chimiste américain **L. PAULING** a calculé l'électronégativité des différents atomes. Le tableau ci-contre montre la variation de l'électronégativité des atomes qui augmentent de gauche à droite dans les périodes et de bas en haut

dans les familles. L'atome le plus électronégatif est donc l'atome de F (4.0) et les atomes les moins électronégatifs sont les atomes césium et francium (0.7).

Echelle d'électronégativité : accueil

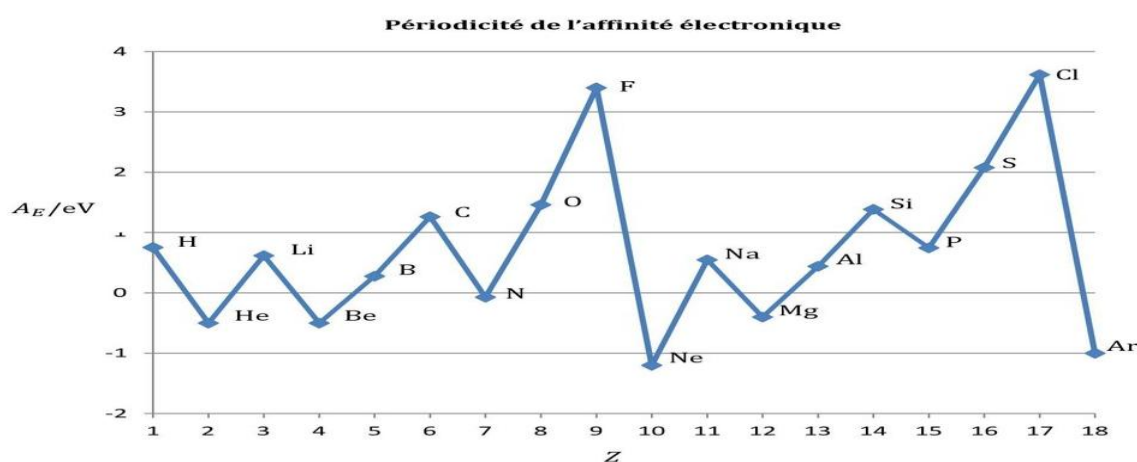


Schéma 8.4: Affinité électronique

2,1 H 1,0 1,5 Li Be 0,9 1,2 Na Mg 0,8 1,0 1,3 1,6 1,6 1,6 1,5 1,8 1,8 1,8 1,9 1,6 K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn 0,8 1,0 1,2 1,4 1,6 1,8 1,9 2,2 2,2 2,2 1,9 1,7 Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd 0,7 0,9 1,1 1,3 1,5 1,7 1,9 2,2 2,2 2,2 2,4 1,9 Cs Ba La Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg 0,7 0,9 1,1 Fr Ra Ac tableau des ELECTONEGATIVITES selon PAULING 2,0 2,5 3,0 3,5 4,0 B C N O F 1,5 1,8 2,1 2,5 3,0 Al Si P S Cl 1,6 1,8 2,0 2,4 2,8 Ga Ge As Se Br 1,7 1,8 1,9 2,1 2,5 In Sn Sb Te I 1,8 1,8 1,9 2,0 2,2 Tl Pb Bi Po At He Ne Ar Kr Xe Rn																	
140 Ce 141 Pr 144 Nd 145 Pm 150 Sm 152 Eu 157 Gd 159 Tb 162 Dy 165 Ho 167 Er 169 Tm 173 Yb 175 Lu 232 Th 231 Pa 238 U 237 Np 239 Pu 243 Am 247 Cm 247 Bk 252 Cf 254 Es 257 Fm 258 Md 259 No 260 Lr																	

Guy Vielh 16/9/2004

Schéma 8.5: Tableau Affinité électronique

I.8.5.2 Energie d'ionisation

Définition : Le potentiel d'ionisation ou énergie d'ionisation d'un atome ou d'une molécule est l'énergie qu'il faut fournir à un atome neutre pour arracher un électron (le moins lié) à l'état gazeux.

Exemples Le tableau suivant donne les valeurs des premières énergies d'ionisation des éléments en eV:

H 13,6																	He 24,59
Li 5,39	Be 9,32											B 8,3	C 11,26	N 14,53	O 13,62	F 17,42	Ne 21,56
Na 5,14	Mg 7,65											Al 5,99	Si 8,15	P 10,49	S 10,36	Cl 12,97	Ar 15,76
K 4,34	Ca 6,11	Sc 6,56	Ti 6,83	V 6,75	Cr 6,77	Mn 7,43	Fe 7,9	Co 7,88	Ni 7,64	Cu 7,73	Zn 9,39	Ga 6	Ge 7,9	As 9,79	Se 9,75	Br 11,81	Kr 14
Rb 4,18	Sr 5,69	Y 6,22	Zr 6,63	Nb 6,76	Mo 7,09	Tc 7,28	Ru 7,36	Rh 7,46	Pd 8,34	Ag 7,58	Cd 8,99	In 5,79	Sn 7,34	Sb 8,61	Te 9,01	I 10,45	Xe 12,13
Cs 3,89	Ba 5,21	*	Hf 6,83	Ta 7,55	W 7,86	Re 7,83	Os 8,44	Ir 8,97	Pt 8,96	Au 9,23	Hg 10,44	Tl 6,11	Pb 7,42	Bi 7,29	Po 8,41	At	Rn 10,75
Fr 4,07	Ra 5,28	**	Rf 6	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
*	La 5,58	Ce 5,54	Pr 5,47	Nd 5,53	Pm 5,58	Sm 5,64	Eu 5,67	Gd 6,15	Tb 5,86	Dy 5,94	Ho 6,02	Er 6,11	Tm 6,18	Yb 6,25	Lu 5,43		
**	Ac 5,17	Th 6,31	Pa 5,89	U 6,19	Np 6,27	Pu 6,03	Am 5,97	Cm 5,99	Bk 6,2	Cf 6,28	Es 6,42	Fm 6,5	Md 6,58	No 6,65	Lr 4,9		

Tableau : Energie de première ionisation des éléments chimiques

Elle diminue quand le rayon atomique augmente et elle augmente quand le rayon diminue.

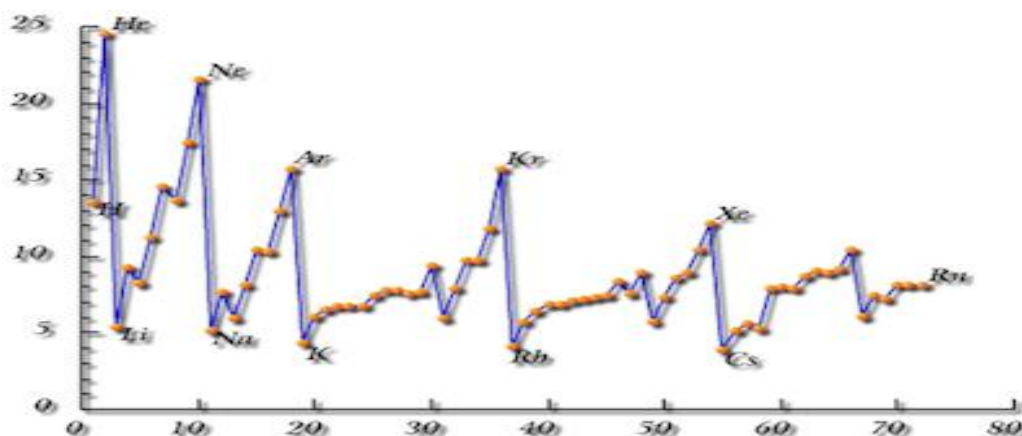


Schéma 8.6: évolution de l'énergie d'ionisation dans le tableau périodique

I.8.5.3 Evolution du rayon atomique

Dans une colonne du tableau périodique, quand le numéro de la période(n) augmente, le rayon atomique croît.

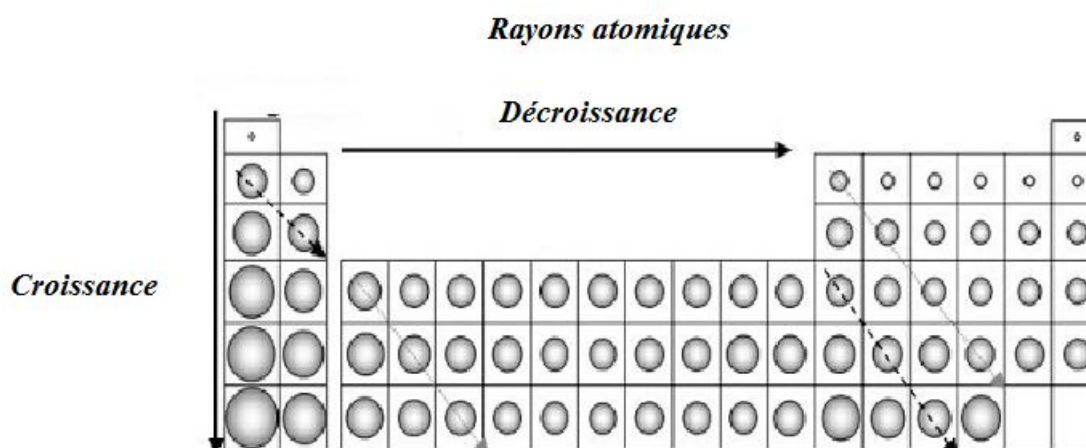


Tableau : Comparatif des rayons atomiques

I.8.5.4 L'affinité électronique

Electronégativité L'électronégativité d'un atome traduit sa capacité à attirer le doublet d'électrons d'une liaison dans laquelle il est engagé.

I.8.5.5 Electrons de valence et symboles de Lewis

Pour faciliter la représentation des liaisons chimiques, on utilisera donc des symboles reprenant uniquement les électrons de valence (**symboles de Lewis**).

Ceux-ci sont identiques pour tous les éléments d'une même famille verticale de la classification périodique.

Symboles de Lewis des familles principales de la classification périodique

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
s ¹	s ²	s ² p	s ² p ²	s ² p ³	s ² p ⁴	s ² p ⁵	s ² p ⁶
•Li	•Be•	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
•Na	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•

Repérage 8.1:

Soient les atomes suivants : N (Z=7), K (Z=19), Sc (Z=21), Cr (Z=24), Mn (Z=25), Fe (Z=26), Cu (Z=29), Zn (Z=30), Ag (Z=47), Au (Z=79)

Donner les configurations électroniques des atomes.

Schéma de LEWIS.

En déduire le nombre d'électrons de valence.

2. Situer ces atomes dans la classification périodique et les grouper si possible par famille ou par période.

3. Le césium (Cs) appartient à la même famille que le potassium (K) et à la même période que l'or (Au). Donner sa configuration électronique et son numéro atomique.

Solution

La règle de Klechkowski la disposition spatiale Nombre d'électrons

N (7) : 1s ² 2s ² 2p ³	[He]2s ² 2p ³	5
K (19): 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹	[Ar] 4s ¹	1
Sc (21) 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ¹	[Ar] 3d ¹ 4s ²	3
Cr (24) 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹ 3d ⁵	[Ar] 3d ⁵ 4s ¹	6
Mn (25)1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁵	[Ar]3d ⁵ 4s ²	7
Fe (26) 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁶	[Ar]3d ⁶ 4s ²	8
Cu (29) 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹ 3d ¹⁰	[Ar]3d ¹⁰ 4s ¹	11
Zn (30) 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ¹⁰	[Ar]3d ¹⁰ 4s ²	2
Ag (47) 1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶ 5s ¹ 4d ¹⁰ [Kr]4d ¹⁰ 5s ¹		11

Remarque : Dans le cas du chrome Cr ($Z = 24$), la structure de la couche de valence doit être selon la règle de Klechkowski : $4s^2 3d^4$. Cette structure est instable. La structure la plus stable est donc $4s^1 3d^5$. La structure électronique de la sous couche 3d est à demi remplie.

Dans le cas du cuivre Cu ($Z=29$), la structure de la couche de valence doit être selon la règle de Klechkowski : $4s^2 3d^9$. Cette structure est instable. La structure la plus stable est donc $4s^1 3d^{10}$. La structure électronique de la sous couche 3d est totalement remplie.

«Les orbitales d à demi remplies ou totalement remplies sont plus stables» 2. Un seul élément appartient à la période $n = 2$: N ($Z = 7$) (groupe VA)

Les éléments qui appartiennent à la période $n = 4$ sont : K (groupe IA), Sc (groupe IIIB), Cr (groupe VIB), Mn (groupe VIIB), Fe (groupe VIIIB), Cu (groupe IB), Zn (groupe IIB)

Les éléments qui appartiennent à la famille IB sont: Cu (4ème période) Ag (5ème période), Au (6ème période)

Les éléments qui appartiennent à la famille de métaux de transition (leur couche de valence est de type $(n-1) dy ns x$ où $1 \leq x \leq 2$. et $1 \leq y \leq 10$)

sont: Sc (groupe IIIB), Cr (groupe VIB), Mn (groupe VIIB), Fe (groupe VIIIB), Cu (groupe IB), Zn (groupe IIB)

Cs : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^1 4f^{14}$

Selon la règle de Klechkowski

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} .5s^2 .5p^6 6s^1$

Selon la disposition spatiale La structure électronique de l'atome de césium est : [Xe] $6s^1$ et son numéro atomique est égal à 55 ($Z = 55$)

CONCLUSION La classification périodique est l'outil principal du chimiste. Elle contient un très grand nombre d'informations sous un « volume » très réduit. Elle constitue en quelque sorte un « concentré » de la chimie La variation de nombreuses propriétés atomiques pourront être prévues à partir de cette classification périodique des éléments.

Repérage 8.2 :

Le molybdène (Mo) appartient à la famille du chrome Cr ($Z = 24$) et à la cinquième période.

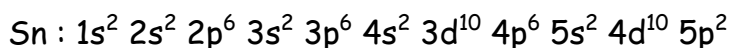
Donner sa configuration électronique et son numéro atomique.

Repérage 3 :

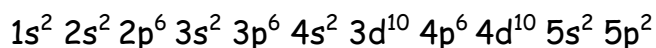
L'atome d'étain (Sn) possède dans son état fondamental deux électrons sur la sous-couche 5p. 1. Donner sa structure électronique, son numéro atomique ainsi que le nombre d'électrons de valence.

2. Fait-il partie des métaux de transition ? Pourquoi ?

Solution:



D'après la règle de Klechkowski



D'après la disposition spatiale

L'atome de l'étain possède quatre électrons de valence et son numéro atomique est égal à 50. 2) Non, il ne fait pas partie des métaux de transition car la sous-couche 4d est remplie.

Repérage 8.4 :

Définir l'énergie d'ionisation, l'affinité électronique et l'électronégativité d'un atome.

Rayon atomique : Dans une colonne du tableau périodique, quand le numéro de la période (n) augmente, le rayon atomique croît. Dans une période, n est constant, Z augmente.

L'effet d'écran variant peu, les électrons ont tendance à être plus attiré par le noyau et par conséquent le rayon diminue.

L'énergie d'ionisation : c'est l'énergie nécessaire qu'il faut fournir à un atome dans son état fondamental (première ionisation) ou à un ion (deuxième ou troisième ionisation) pour lui arracher un électron.

Repérage 8.5 :

On donne les énergies d'ionisation des atomes suivants :

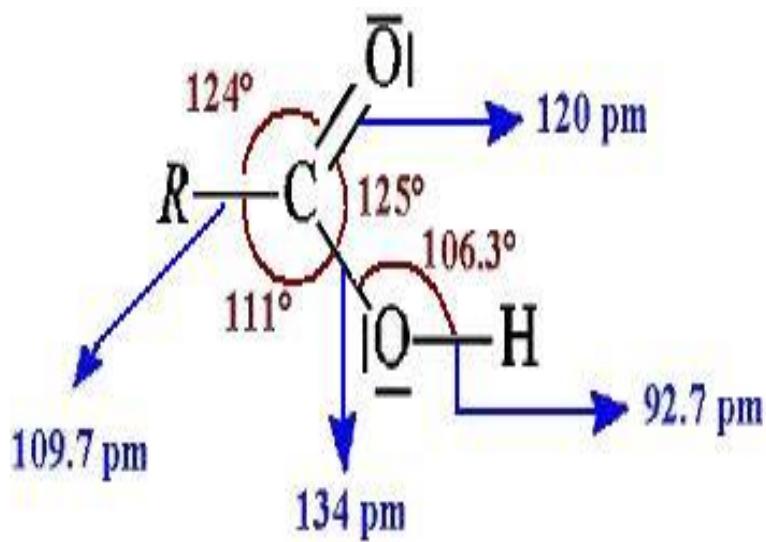
Elts	H	He	Li	Be	C	F	Na	K
Z	1	2	3	4	6	9	11	19
E(e.V)	13,53	22,46	5,36	9,28	11,21	17,34	5,12	4,32

Comment expliquer l'évolution des premières énergies d'ionisation de H à He, de Li à F et entre Li, Na, K.

2. En déduire le sens de variation des rayons atomiques lorsque le nombre de protons (Z) augmente.

CHAPITRE II :

LIAISON CHIMIQUE ET STRUCTURE MOLECULAIRE



II.1 Exemples d'édifices atomiques et / ou moléculaires

II.2 Liaisons chimiques

II.3 La théorie de LEWIS

II.4 Théorie des orbitale moléculaires

II.5 Interprétation physique des différentes Liaisons chimiques

II.6. Théorie de l'hybridation moléculaire

II.7 Moments dipolaires permanents

II.8 Délocalisation électronique / Mésonérie

Liaison chimique et structure moléculaire

Introduction

Plusieurs approches scientifiques se conjuguent et se complètent par conséquence. La théorie de Lewis qui interprète la liaison covalente s'avère insuffisante. Quelques exceptions s'expliquent par la théorie des orbitales atomiques et la théorie des paires répulsives qui esquisse la géométrie des molécules. Les deux théories apportent le complément appréciable qui consiste à voir la géométrie dans l'espace des molécules. Elles mettent en évidence l'indice de liaison, le paramagnétisme et le diades molécules.

II.1 Exemples d'édifices atomiques et / ou moléculaires

La liaison chimique est à la base des édifices atomiques et moléculaires. Plusieurs types de liaison expliquent l'étendue des structures des édifices moléculaires.

Edifice sur la base de la **liaison covalente** (liaison dite **simple**)

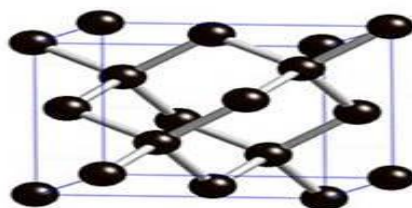


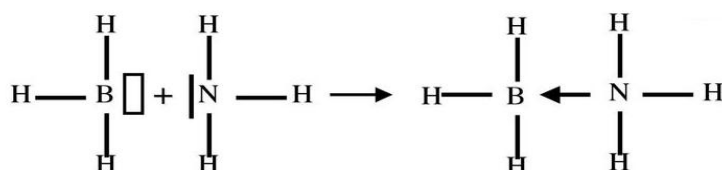
Schéma II.1.1: Le graphite

Edifice sur la base de la **liaison ionique**



Schéma II.1.2: Chlorure de sodium

Edifice moléculaire sur la base de la **liaison Dative ou de coordination**



Edifice moléculaire sur la base de la liaison π (Pi) (Liaison double)

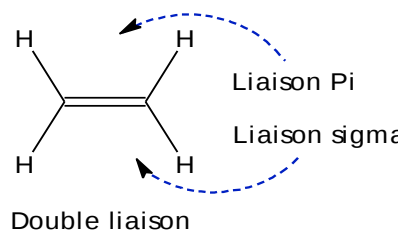


Schéma II.1.3 : Double liaison

Edifice moléculaire sur la base de la liaison π (Liaison Triple)

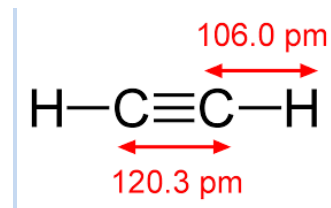


Schéma II.1.4 : Triple liaison

Edifice moléculaire sur la base de la liaison métallique (Interaction électrostatique forte)



Schéma II.1.5 : Configuration métallique

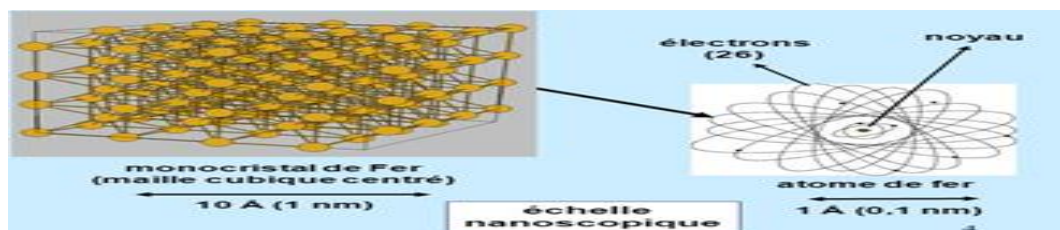


Schéma II.1.6 : Liaison métallique

Edifice moléculaire sur la base de liaison hydrogène

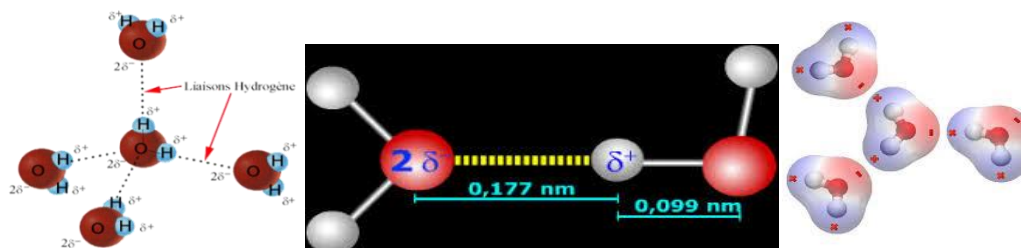


Schéma II.1.7: Liaison hydrogène

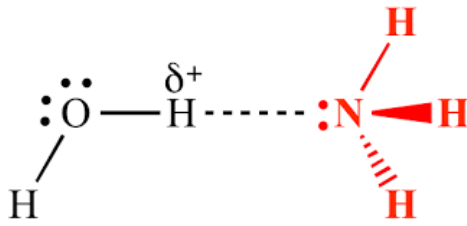


Schéma II.1.8 : Liaison Hydrogène

Exemple - Solution d'ions Na^+ et Cl^- dans l'eau

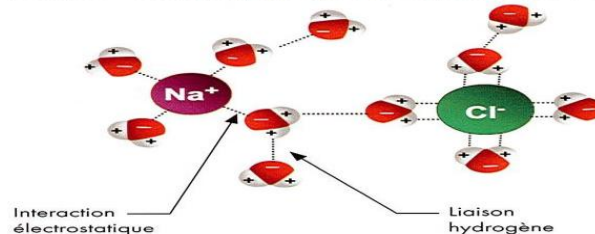


Schéma II.1.9 : Solvatation de NaCl

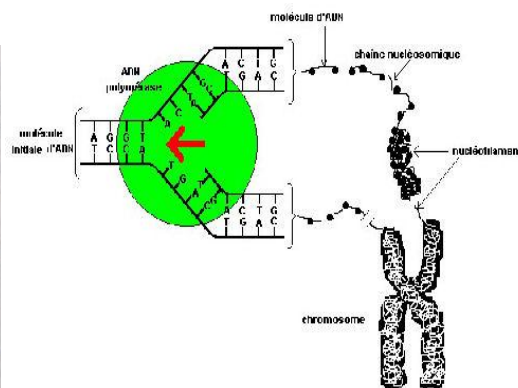
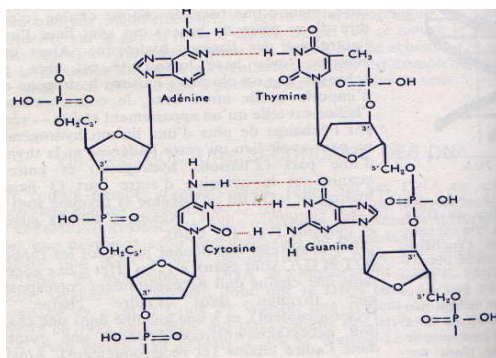
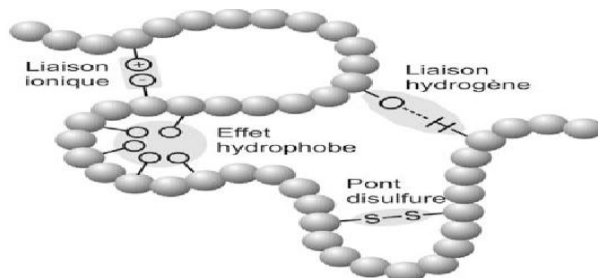


Schéma II.1.10 : Liaison hydrogène dans l'ADN

Edifice moléculaire configuration secondaire de protéine (plusieurs types de liaisons chimiques)



Représentation d'une chaîne d'acides aminés où sont montrés les différents types d'interactions intervenant dans le repliement de la chaîne.

Schéma II.1.11 : Différents types d'interaction

Edifice moléculaire sur la base de la liaison délocalisée

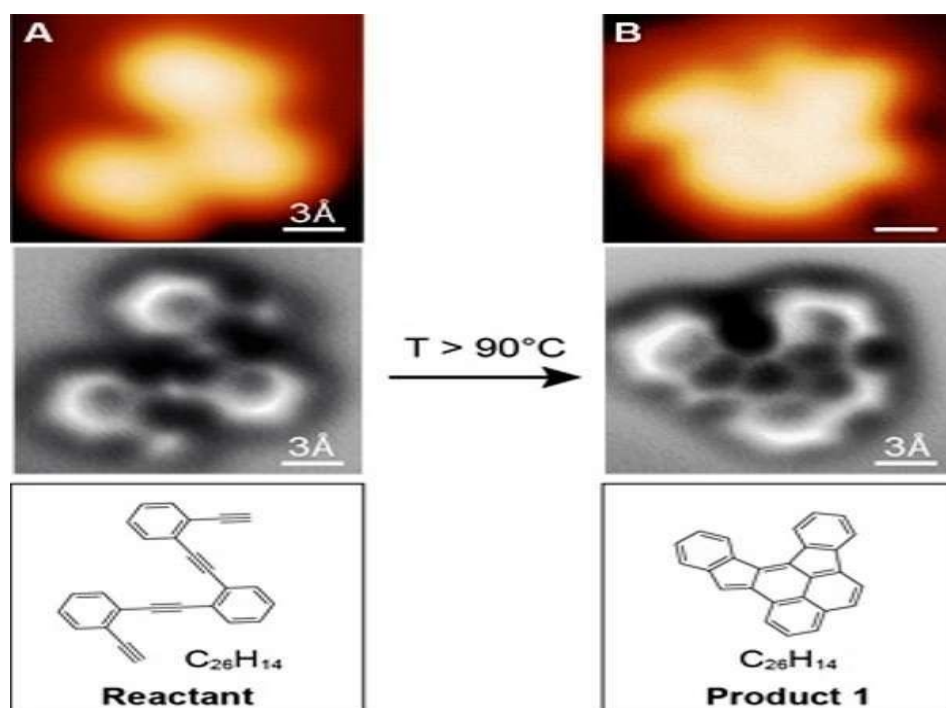


Schéma II.1.12

Edifice moléculaire sur la base de plusieurs types de liaison chimique

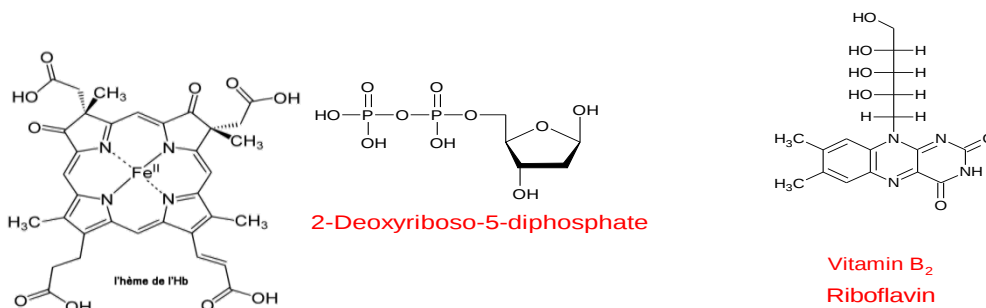


Schéma II.1.13

Force de Van der waals (Liaison dipôle - dipôle)

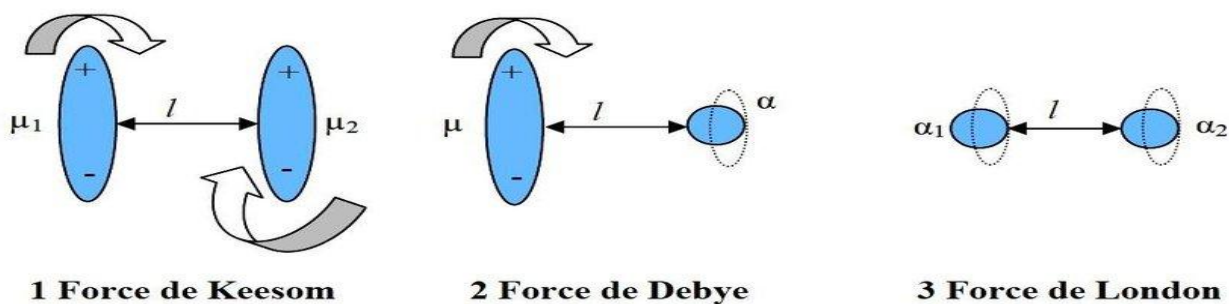


Schéma II.1.13

II.2 Liaisons chimiques

II.2.1. Définition liaison chimique

On appelle **liaison chimique** toute **interaction** qui maintient des atomes sous forme d'édifice atomique ou d'édifice moléculaire:

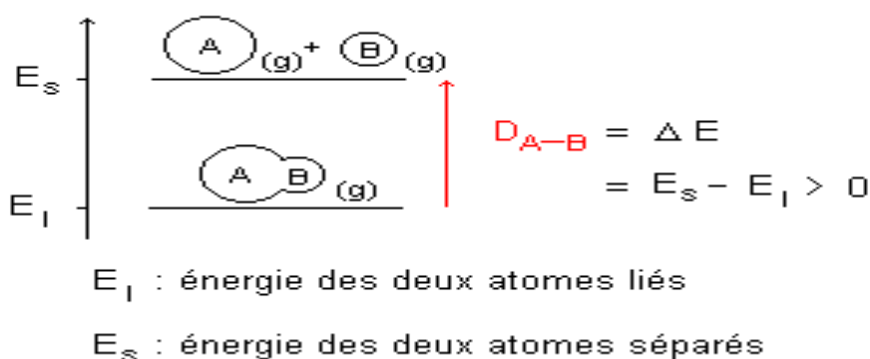
II.2.2 Energie de liaison

II.2.2.1 Cas des molécules monoatomiques

Un système évolue spontanément vers un état de moindre énergie (énergie plus faible). Ce qui correspond à un état plus stable.

Donc si deux atomes A et B s'unissent pour former une molécule A—B c'est que cette molécule possède moins d'énergie que les atomes isolés et représente donc un système plus stable que celui formé par les deux atomes isolés.

Inversement, pour dissocier la molécule A—B (casser la liaison A—B) en ses différents atomes A et B il faut lui fournir de l'énergie.



L'énergie de la liaison A—B est l'énergie qu'il faut fournir à une mole de molécules A—B, prise à l'état gazeux, pour les dissocier en leurs atomes constitutifs A et B à l'état gazeux.

L'énergie de liaison est une grandeur positive et s'exprime en $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ (ou $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$). On la note en général D_{A-B} .

Cette énergie correspond à la transformation modélisée par l'équation:



$D_E = D_{A-B}$	pour une mole de molécules de AB
-----------------	----------------------------------

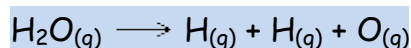
II.2.2.2 Cas des molécules polyatomiques

Cas de l'eau

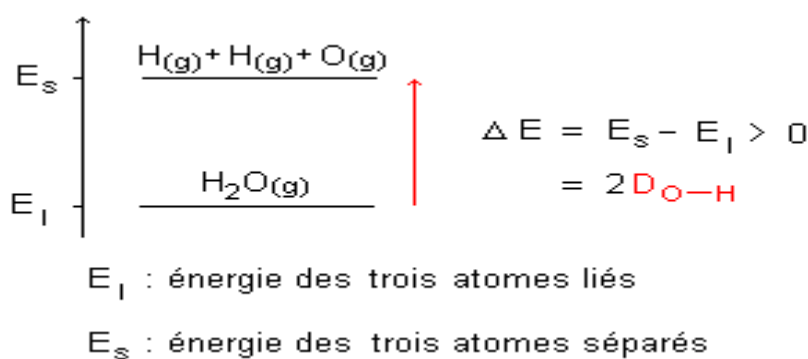
L'énergie moyenne de la liaison O—H est définie comme la moitié de l'énergie à apporter à une mole de molécules d'eau, prises à l'état gazeux, pour la dissocier en ses atomes constitutifs O, H et H à l'état gazeux.

On admet en effet que pour passer de $\text{H}_2\text{O}_{(g)}$ à $\text{H}_{(g)} + \text{H}_{(g)} + \text{O}_{(g)}$ il y a deux liaisons O—H à rompre et qu'elles ont la même énergie de liaison.

Cette énergie correspond à la transformation modélisée par l'équation:



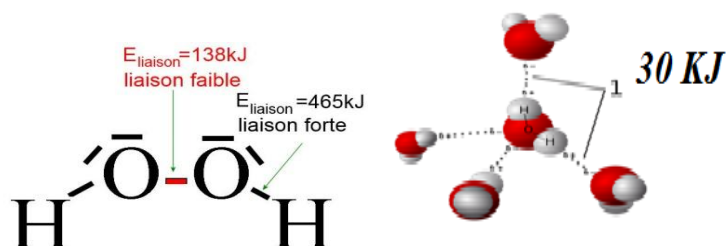
$\Delta E = 2D_{\text{O-H}}$ pour une mole de molécules d'eau



II.2.2.3 Généralisation

L'énergie de cohésion d'une molécule est égale à la somme des énergies moyennes de chacune de ses liaisons.

Ces énergies moyennes de liaisons sont données dans des tables.



Liaison	F_2	Cl_2	Br_2	I_2	HF	HCl	HB	HI
Energie	155	240	190	150	565	428		295

liaison	énergie	liaison	énergie
H—H	432	C—H	410
F—F	155	C—C	348
Cl—Cl	240	C=C	612
Br—Br	190	C—O	356
I—I	150	C=O	795
H—F	565	C=O	708
H—Cl	428	C—Cl	327
H—I	295	N≡N	940
H—O	460	N=O	628
H—N	388	O=O	494

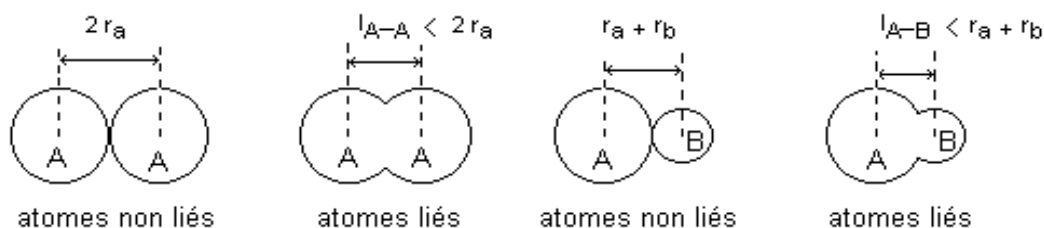
Énergies de liaison (en kJ/mol)

II.2.2.4 Longueur des liaisons chimiques

La longueur d'une liaison dans une molécule est la distance entre les centres des deux atomes liés dans cette molécule.

Remarque:

- Les longueurs des liaisons sont de l'ordre d'une centaine de pico mètres ($1\text{pm} = 10^{-12}\text{m}$).
- La longueur d'une liaison dans une molécule diatomique A—A est inférieure à la somme des rayons r_a des atomes liés. Ce qui signifie que les nuages électroniques des atomes liés s'interpénètrent. Il en est de même dans une molécule de type A—B (voir schémas ci-dessous).

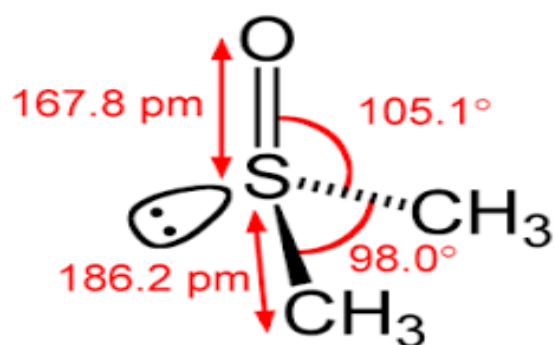


Liaison	C - C	C = C	HC≡CH	N - N	N = N	N≡N
D (nm)	0,154	0,134	0,120	0,140	0,125	0,110

Le rayon de covalence $r = \frac{1}{2} d(a-a)$

Liaison	F ₂	Cl ₂	Br ₂	I ₂	HF	HCl	HB	HI
D (nm)	0,128	0,198	0,228	0,266	0,092	0,128	0,141	0,141

Liaison	C - C	C = C	HC≡CH	N - N	N = N	N≡N
D (nm)	348	612			0,125	940



II.3 La théorie de LEWIS

En 1916, **G.N Lewis** proposa une représentation de la liaison chimique

Ref :[1] **N. G. Lewis**, "The atom and the molecule", *Journal of American Chemical Society*, 38, pp. 762-786, 1916.

Cependant, l'historique du développement de ce modèle commence avec les constatations de **Dimitri Mendeleïev** qui, en 1871, énonce dans son ouvrage Les principes de chimie deux règles concernant la valence des éléments dans lesquelles le nombre 8 joue un rôle clé.

« La première règle affirme que la valence maximale de n'importe quel élément ne peut dépasser huit ($8 e^-$ de valence) dans une molécule ».

II.3.1 électron de valence

électron de valence : électrons qui se trouvent sur la couche de valence et qui sont susceptibles d'intervenir dans l'établissement des liaisons chimiques entre différents atomes pour former une molécule.

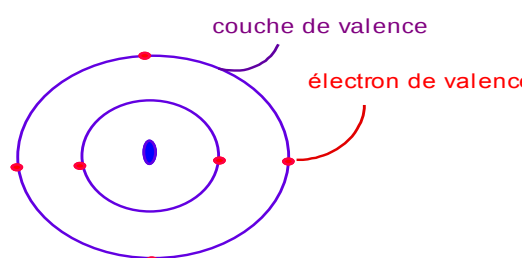


Schéma II.3.1: Atome de carbone

II.3.2 Représentation de LEWIS des atomes

Le modèle de Lewis des atomes ne représente que la couche externe

Atome	Formule électronique	Modèle de Lewis
${}_1\text{H}$	$(K)^1$	$\text{H}\cdot$
${}_6\text{C}$	$(K)^2 (L)^4$	$\cdot\ddot{\text{C}}\cdot$
${}_7\text{N}$	$(K)^2 (L)^5$	$\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$ ou $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$
${}_8\text{O}$	$(K)^2 (L)^6$	$\cdot\ddot{\text{O}}\cdot$ ou $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot$
${}_{17}\text{Cl}$	$(K)^2 (L)^8 (M)^7$	$\cdot\ddot{\text{Cl}}\cdot$ ou $ \ddot{\text{Cl}}\cdot$

1A ns^1	2A ns^2	3A ns^2np^1	4A ns^2np^2	5A ns^2np^3	6A ns^2np^4	7A ns^2np^5	8A ns^2np^6
Li·	·Be·	·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	·Ne·
Na·	·Mg·	·Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	·Ar·

La couche n (entier) contient au maximum $2 \times n^2$ électrons

La couche $n = 1$ Contient $2 \times 1^2 = 2$ électrons

La couche $n = 2$ Contient $2 \times 2^2 = 8$ électrons

La couche $n = 3$ Contient $2 \times 3^2 = 18$ électrons

La couche contient au maximum 18 électrons

II.3.3 Représentation de LEWIS des molécules

- L'idée de la liaison covalente remonte à Lewis, qui en 1916 décrit le partage de paires d'électrons entre atomes.
- Il présenta la « notation de Lewis » dans laquelle les électrons de valence (de la couche électronique externe) sont représentés comme des points autour des symboles atomiques.
- *Les paires d'électrons* situés entre les atomes représentent les liaisons covalentes et les paires multiples représentent des liaisons doubles ou triples.

II.3.3.1 Règle de duet et l'octet

Les atomes de la dernière colonne de la classification périodique possèdent huit électrons (un octet) sur leur couche externe, l'exception de l'atome d'Hélium He qui possède deux électrons (un duet) sur sa couche K :

He (K^2) ;

Ne (K^2) (L^8) ;

Ar (K^2) (L^8) (M^8) ;

Kr (K^2) (L^8) (M^{18}) (N^8)

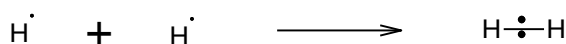
Ces gaz nobles sont stables.

1^{er} couche électronique

- La règle de duet : Les atomes proches d'He évoluent vers la configuration d'He

Atome d'Hydrogène

Duet



$2 e^- = \text{un due}$

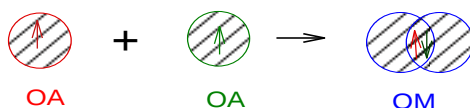
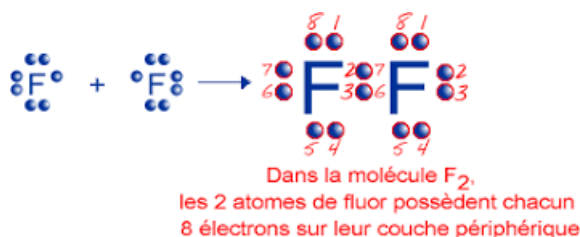


Schéma II.3.2 : Le duet

2^{ème} couche électronique

La règle de l'octet : Les autres atomes évoluent vers huit électrons sur la dernière couche

La **règle de l'octet** est une **règle** chimique simple qui énonce que les atomes avec un numéro atomique $Z \geq 4$ tendent à se combiner de façon à avoir huit électrons dans leur couche de valence, ce qui leur donne la même structure électronique qu'un gaz noble.



II.3.3.2 Représentation de Lewis des molécules types

- Schéma de Lewis de la molécule H_2O

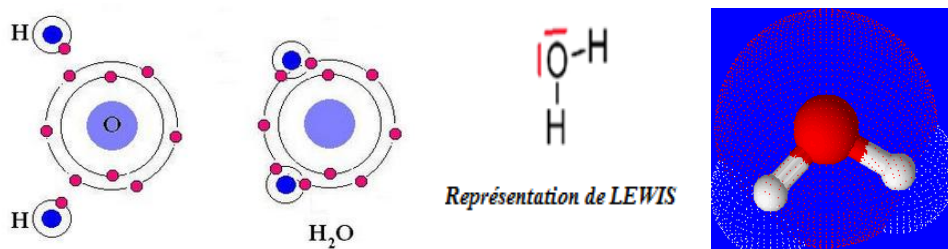


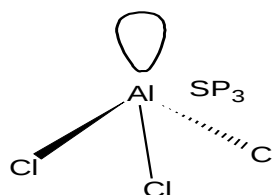
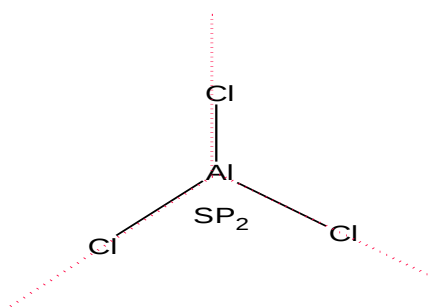
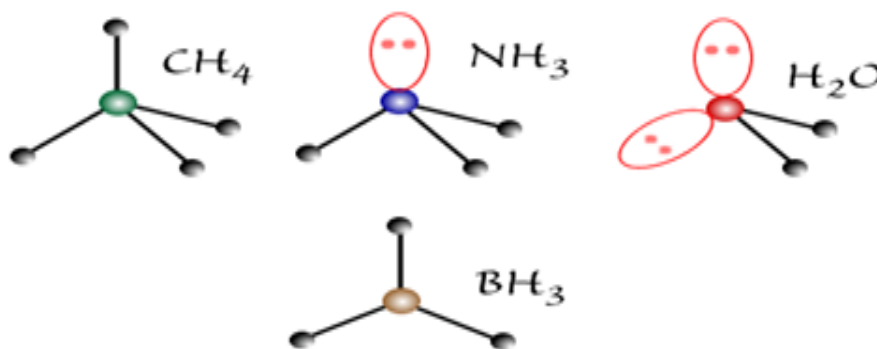
Schéma II.3.3 : Representation de Lewis de la molécule d'eau

H : $1 e^-$ de valence $\times 2$ (2 atomes) = $2 e^-$ de valence

O : $6 e^-$ de valence

Total de $8 e^-$ de valence pour la molécule = **4 doublets** au total (liants et non liants)

Exemples similaires



• Schéma de Lewis de la molécule HCN



H : $1 e^-$ de valence

C : $4 e^-$ de valence

N : $5 e^-$ de valence

Total de $10 e^-$ de valence pour la molécule = **5 doublets** au total (liants et non liants)

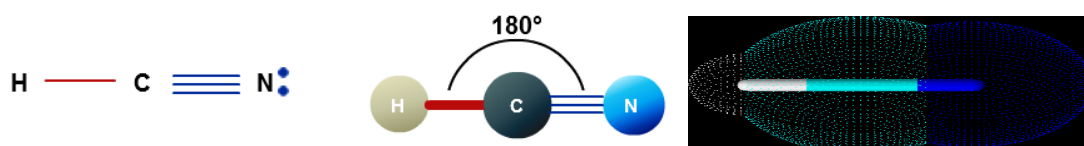
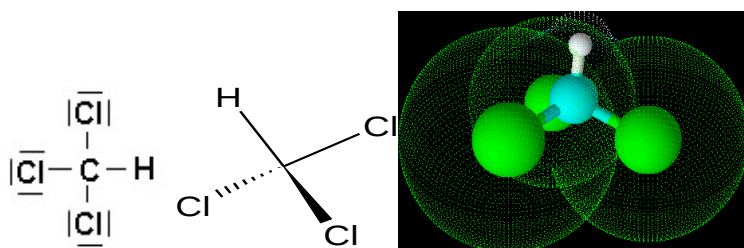


Schéma II.3.4 : Representation de Lewis de la molécule HCN

- Schéma de Lewis de la molécule tri chloro méthane CHCl_3



C : $4 e^-$ de valence

H : $1 e^-$ de valence

Cl : $7 e^-$ de valence $\times 3 = 21 e^-$ de valence

Total de $26 e^-$ de valence pour la molécule = **13 doublets** au total (liants et non liants)

Schéma II.3.5 : Representation de Lewis de la molécule CHCl_3

II.3.3.2.4 Liaisons multiples

- ✓ Molécule de méthane de formule brute CH_4 , éthane, et propane:

Atome centrale le carbone C : 4 électrons de valence

Atome d'hydrogène H : 1 électron de valence

Exemples :

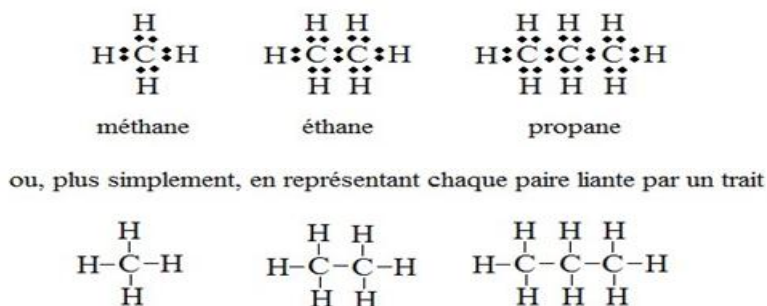
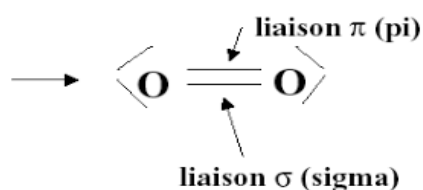


Schéma 2.3 : Representation de Lewis à titre d'exemple

Liaisons multiples (double ou triple) pour arriver à satisfaire à la **règle de l'octet**.

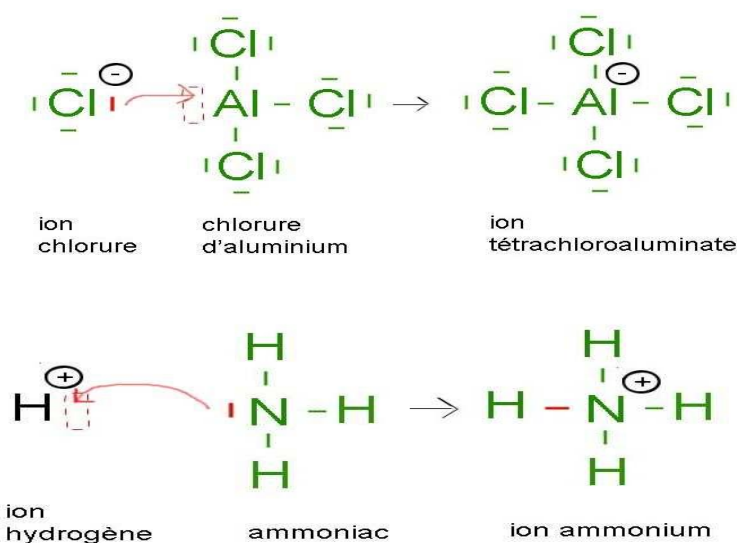
C'est le cas du dioxygène, du di-azote et du dioxyde de carbone par exemple.



Rappelons qu'une **liaison double** est plus courte et plus forte qu'une liaison simple. De même qu'une **liaison triple** est plus courte et plus forte qu'une liaison double

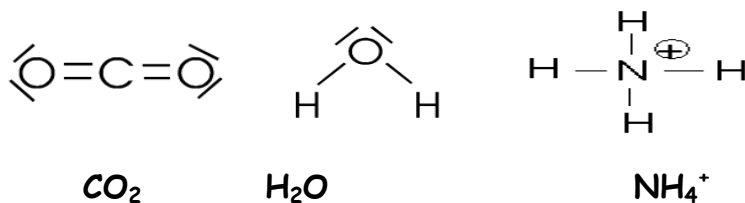
II.3.3.3 Liaison covalente DATIVE.

C'est une mise en commun d'électrons entre un atome B qui possède un doublet libre (non liant) et un autre atome A qui comporte une lacune électronique



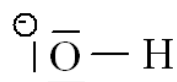
II.3.3.4 formule développée selon Lewis

- Si il y a un atome "central" c'est généralement le plus gros.
 - H se lie de préférence à O.
 - les atomes ne se lient pas avec eux-mêmes s'ils ont le choix, sauf le carbone (et parfois S et P).
- Compléter l'octet de chaque atome lié à l'atome central (H n'a besoin que de deux électrons).
 - Placer ensuite tous les électrons restants sur l'atome central même si l'octet est dépassé.
 - S'il n'y a pas assez d'électrons pour donner 8 électrons à l'atome central, utiliser les liaisons multiples.



Si un groupe d'atomes porte une charge, c'est qu'il a donné ou reçu un ou plusieurs électrons.

Exemple OH⁻:

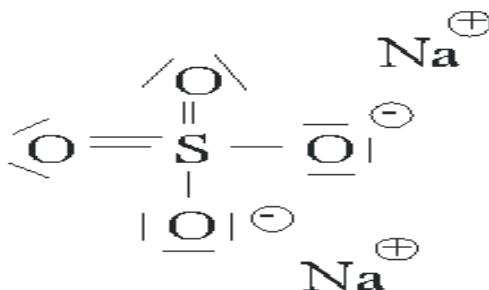


L'électron supplémentaire est attribué à l'atome le plus électronégatif.

Dans le cas d'un ion positif, on enlève un électron à l'atome le moins électronégatif.

II.3.3.5 Représentation de Lewis des ions polyatomiques

Si le composé contient un ion polyatomique, on a en présence des liaisons ioniques et des liaisons covalentes. On établit la charge de l'ion polyatomique à partir de la charge du métal et on représente la structure avec des ions.



Repérage :

Représentez les molécules avec l'ensemble des électrons de valence selon Lewis
 CH_4O ; COH_2 ; HCN ; NH_3 ; N_2O_3 ; OH_2

II.3.4. Limites de la de la théorie de LEWIS

La règle de l'octet pour l'atome central est une règle simple mais qui ne reflète pas totalement la réalité.

Seul un traitement par la mécanique quantique permet d'expliquer véritablement la liaison chimique. De ce fait, il y a des exceptions à cette règle, qui sont loin d'être isolées.

Exemples : 1. On connaît les molécules suivantes :

BeH₂ : Or Be (Z=4) (config. électronique 1s², 2s²) possède 2 électrons de valence



BeF₂ :



BH₃B(Z=5) (config. 1s, 2s², 2p¹) possède 3 électrons de valence.



B(OH)₃ :



Il manque donc 2 paires d'électrons pour que l'octet de **Be** soit complet et 1 paire pour que celui de **B** soit complet : on parle de doublets manquants et on les symbolise par un rectangle, ce qui donne :

Exemples : 2

On a découvert la molécule PCl₅ dont l'atome central est P. Le nombre total d'électrons de valence de cette molécule est Ne = 5 + 5 × 7 = 40, ce qui donne 20 doublets disponibles.

Son schéma de Lewis est alors :



P est donc entouré de 10 électrons ! On dit qu'il est **hyper valent**.

Exemples : 3

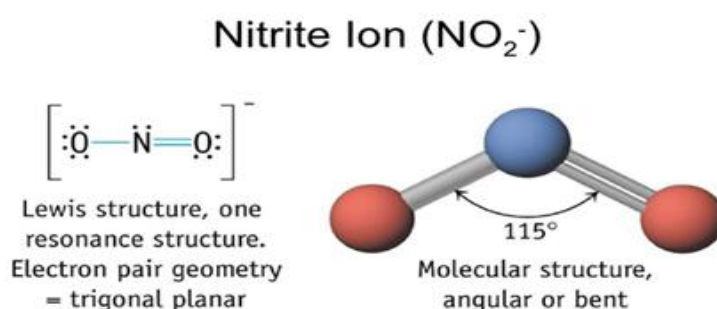
Cas de NO_2 : $\text{Ne} = 5 + 2 \times 6 = 17$, ce qui donne 8 doublets et 1 électron célibataire que l'on doit reporter sur l'atome centra

NO_2 :



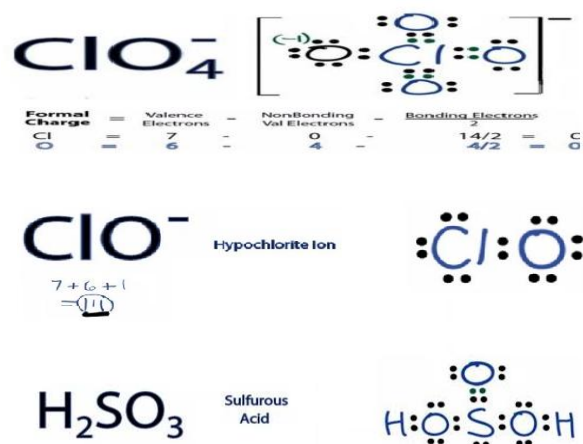
Selon l'étape 4. du protocole. La règle de l'octet ne pourra donc jamais être satisfaite pour N. Les étapes 1. à 4. Conduisent donc à :

$(\text{NO}_2)^-$:



Que faire alors ?

De façon générale, seuls les atomes de la fin de la deuxième période du tableau périodique, c'est à dire C, N, O doivent satisfaire au mieux à la règle de l'octet (et encore, ce n'est pas toujours possible : cas de l'électron célibataire de NO_2).



Repérage : Donnez la représentation de Lewis des molécules et ions suivants

H_2SO_4	H_3PO_4	NH_3	PCl_3
SO_4^{2-}	PO_4^{3-}	NH_4^+	PCl_5
C_6H_6	H_2CO		

II.4 Théorie des orbitales moléculaires

II.4.1 Notion de recouvrement orbitalaire

- Comme pour les atomes isolés on peut écrire, pour les molécules une équation de Schrödinger moléculaire. Ψ
- La résolution de cette équation conduira à des fonctions d'onde moléculaire (ou orbitales moléculaires) dont le carré représente la probabilité de présence des électrons $||\Psi||^2$.
- Cette résolution n'est rigoureusement possible que dans le cas le plus simple, celui de l'ion moléculaire H_2^+ . Pour les molécules plus complexes, on a recours à des approximations.

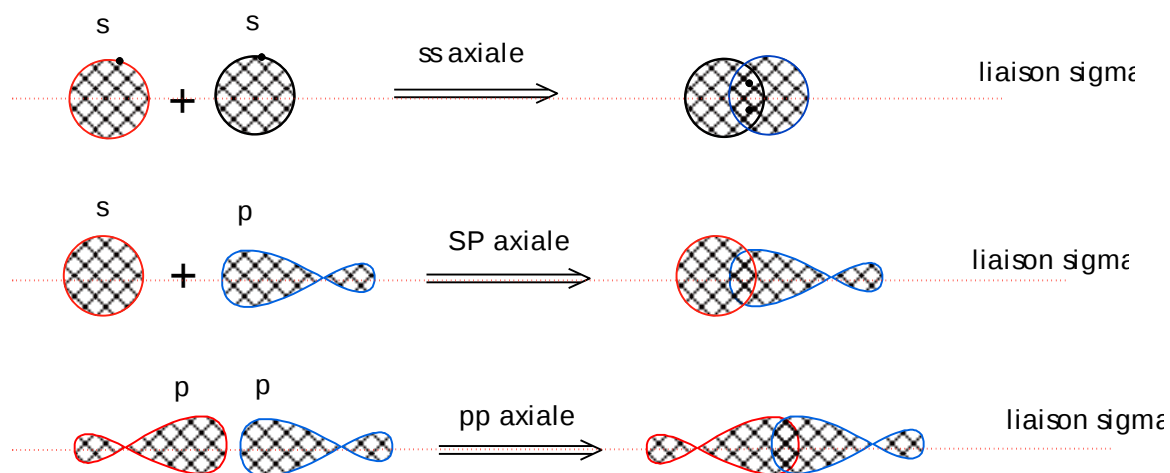
Dans le modèle de Lewis, la liaison résulte de la mise en commun d'un doublet électronique entre deux atomes, cette idée simple reste grossièrement valable.

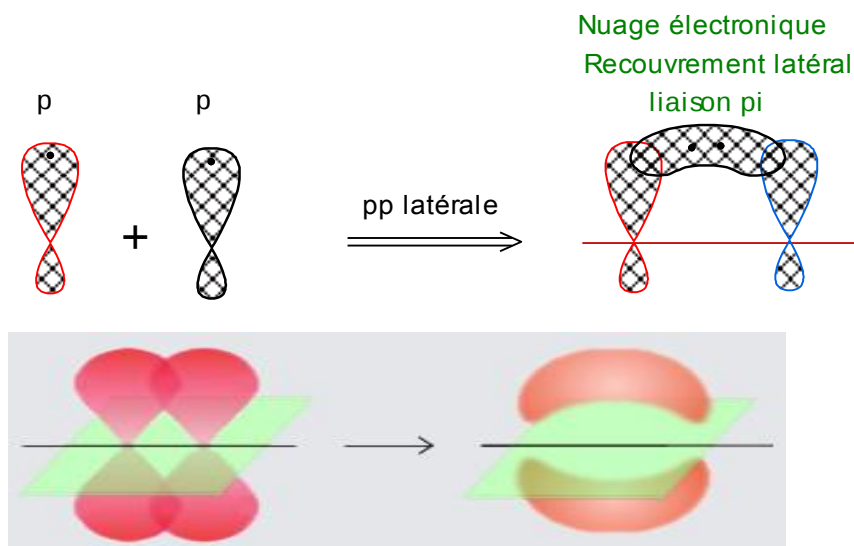
Dans le modèle quantique : la liaison chimique résultera du **recouvrement** de deux **orbitales atomiques** pour donner deux **orbitales moléculaires**.

Il existe deux types de recouvrements qui conduiront à deux types de liaison différente.

II.4.1.1. Recouvrement axial conduisant à des liaisons différentes

- Ce type de recouvrement concerne les orbitales atomiques de type s et p





Remarque

Les liaisons s et p sont deux types de liaisons différentes, en générale les liaisons de type s sont plus fortes que les liaisons type pi, car elles correspondent à un meilleur recouvrement.

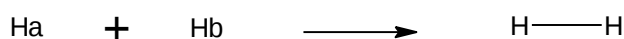
II.4.1.2 Aspect mathématique : La méthode C.L.O.A

Cette méthode consiste à considérer que la fonction d'onde moléculaire est une

« Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques ».

Nous allons utiliser cette méthode pour décrire la molécule de dihydrogène H_2 .

Les orbitales atomiques à considérer sont les deux orbitales $1s_A$ et $1s_B$ des atomes d'hydrogène A et B. Le fonctions d'onde sont Ψ_a et Ψ_b .



$$\Psi_a \quad + \quad \Psi_b \quad \Psi_{ab} = a \Psi_a + b \Psi_b$$

Dans la méthode C.L.O.A on considère que l'orbitale moléculaire Ψ_{AB} est une combinaison linéaire de ces deux orbitales atomiques Ψ_a et Ψ_b .

$$\Psi_{AB} = a \Psi_A + b \Psi_B$$

En réalité seul le carré de la fonction d'onde possède un sens physique (probabilité de présence).

$$\Psi_{AB}^2 = (a \Psi_A + b \Psi_B)^2 = a^2 \Psi_A^2 + 2 ab \Psi_A \Psi_B + b^2 \Psi_B^2$$

Cette expression contient un terme où n'apparaît que l'atome A ($a^2 \Psi_A^2$), un terme où n'apparaissent que l'atome B ($b^2 \Psi_B^2$) et un terme mixte où apparaissent les deux atomes A et B ($2 ab \Psi_A \Psi_B$).

Le terme $a^2 \Psi_A^2$ correspond à la probabilité de trouver l'électron très près du noyau A.

Le terme $b^2 \Psi_B^2$ correspond à la probabilité de trouver l'électron très près du noyau B.

Le terme $2 ab \Psi_A \Psi_B$ correspond à la probabilité de trouver l'électron entre les deux atomes A et B ce qui correspond à la formation de la liaison chimique entre ces deux atomes comme dans le modèle de Lewis.

Pour des raisons de symétrie les atomes A et B jouent le même rôle et il n'y a donc pas de raison que l'électron soit plus près de A que de B ou inversement. La probabilité de trouver l'électron près de A est donc égale à la probabilité de le trouver près de B.

$$a^2 \Psi_A^2 = b^2 \Psi_B^2$$

De plus dans ce cas les orbitales Ψ_A et Ψ_B sont totalement identiques et il n'y a pas lieu de les distinguer, on a donc $a^2 = b^2$ soit $b = \pm a$. On aura donc deux solutions pour Ψ_{AB} :

$$\Psi_{AB} = a \Psi_A + a \Psi_B = a (\Psi_A + \Psi_B)$$

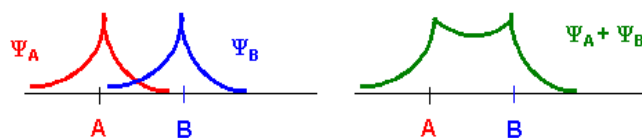
$$\text{Ou } \Psi_{AB} = a \Psi_A - a \Psi_B = a (\Psi_A - \Psi_B)$$

Ces deux expressions seront simultanément solutions de l'équation de Schrödinger.

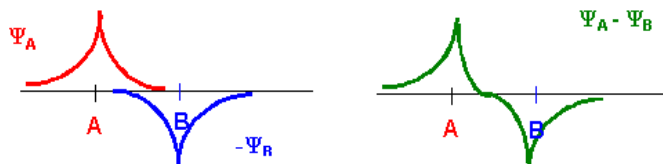
On obtient donc deux orbitales moléculaires à partir des deux orbitales atomiques.

Ces deux orbitales moléculaires sont différentes :

- la fonction $(\Psi_A + \Psi_B)$ est appelée liante car elle correspond à un renforcement de la probabilité de présence de l'électron entre les atomes A et B ce qui correspond à la création de la liaison.
- inversement la fonction $(\Psi_A - \Psi_B)$ est appelée anti-liante car elle correspond à une diminution de la probabilité de présence de l'électron entre les atomes A et B ce qui correspond à la destruction de la



Formation de l'orbitale moléculaire liante

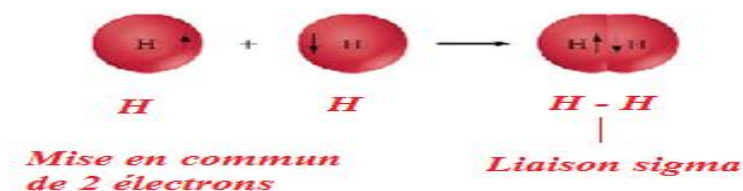


Formation de l'orbitale moléculaire anti-liante

II.4.1.3. Cas de la molécule H_2

Etude de la molécule d'Hydrogène H_2 : La liaison chimique covalente pure (apolaire).

✓ **La liaison chimique covalente:** Mise en commun de deux électrons



Présence d'un doublet d'électrons dans une orbitale moléculaire liante de la molécule.

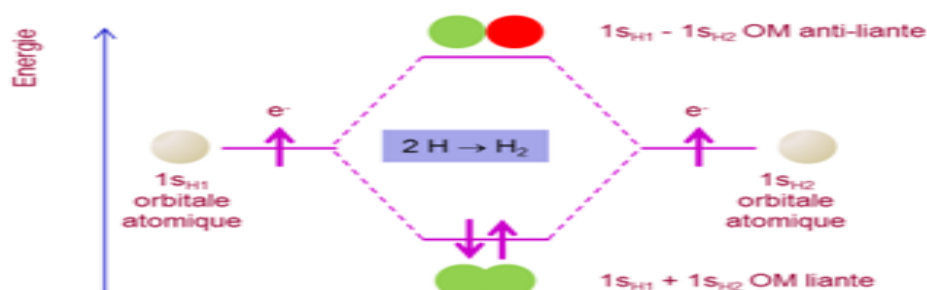
La règle de HUND et le Principe de PAULI restent de rigueur dans le remplissage des OM.

La description mathématique de l'état des deux électrons est donnée par une fonction d'onde Ψ , (ou une fonction d'état), qui spécifie l'amplitude de l'électron en tout point de l'espace et du temps. Les fonctions d'onde sont la solution de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi$$

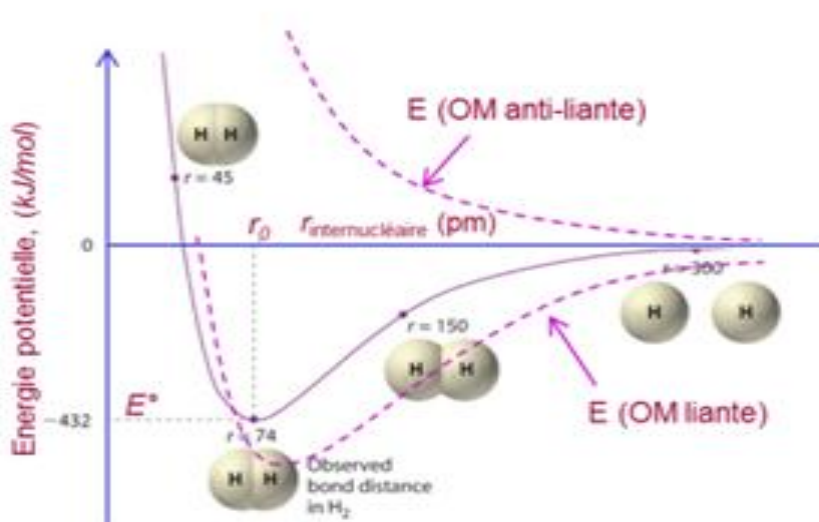
Pour un système de deux orbitales type 1S la résolution de l'équation donne deux solutions (Orbitale moléculaire liante et anti liante)

Le schéma ci-contre montre la forme de l'énergie potentielle en fonction de la distance entre les centres des noyaux de deux atomes d'hydrogène.



SchémaII.4.1 : Diagramme (représentation) de remplissage des OM de H_2

D'après les règles de remplissage, la configuration électronique du dihydrogène est alors : $(1\sigma)^2$, et son indice de liaison vaut 1.



SchémaII.4.2 : Énergie minimale E^* = système stable et correspond généralement à l'état fondamental.

II.4.1.4. Cas du di oxygène O_2

Dans l'exemple de la molécule de dioxygène, chaque atome d'oxygène apporte 8 électrons. Les 16 électrons du dioxygène sont placés dans les orbitales moléculaires en respectant les règles de remplissage énoncées précédemment :

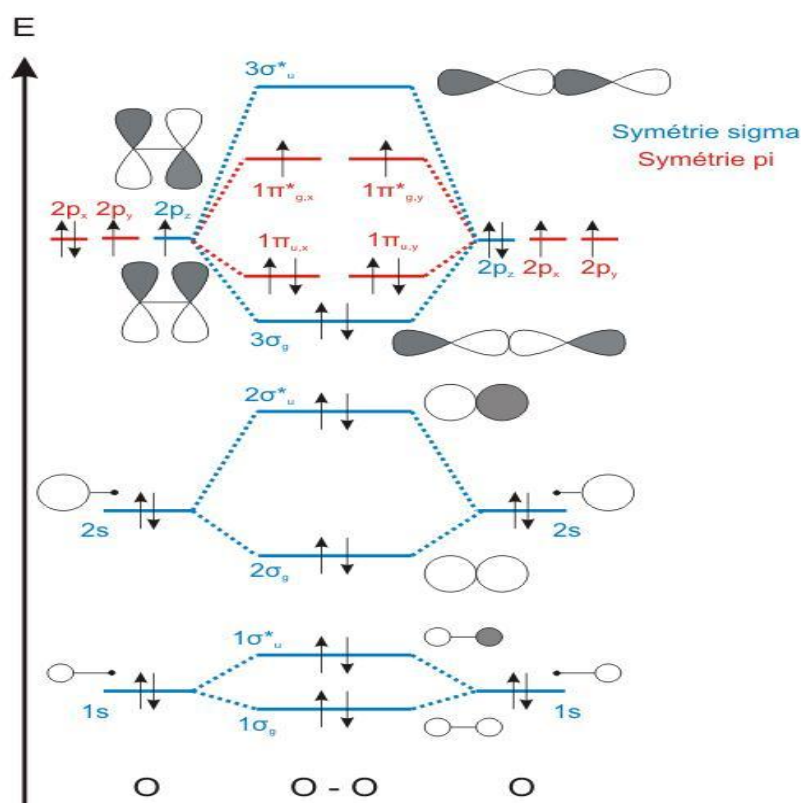


Schéma II.4.3 : Diagramme d'OM simple : cas d'O₂

$$(1\sigma)^2(1\sigma^*)^2 (2\sigma)^2(2\sigma^*)^2 (3\sigma)^2(1\pi_x)^2 (1\pi_y)^2(1\pi_x^*)^1 (1\pi_y^*)^1.$$

Remarque

Cette configuration électronique fait apparaître des électrons célibataires dans les orbitales $1\pi_x^*$ et $1\pi_y^*$ et permet de justifier le [paramagnétisme](#) de la molécule de dioxygène observé expérimentalement.

Dans le schéma de Lewis les doublets libres paraissent identiques. Ils sont bien en réalité différents, de plus le schéma de Lewis ne fait pas apparaître le paramagnétisme réel de la molécule de dioxygène.

Les résultats obtenus par la méthode C.L.O.A sont donc meilleurs que ceux obtenus avec le schéma simple de Lewis.

II.4.3 Indice de liaison :

Indice de liaison permet de chiffrer rapidement la solidité d'une liaison

L'ordre de liaison (ou indice de liaison) est le nombre de liaisons chimiques entre une paire d'atomes.

Par exemple, dans le diazote $\text{N}\equiv\text{N}$, l'ordre de liaison entre les atomes d'azote est 3,

de même pour les atomes de carbone de l'acétylène $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ alors que pour les liaisons C-H il est de 1.

Indice de liaison = [Nombre des électrons des OM Liantes - Nombre des électrons des OM Liantes] / 2

Exemples

N_2		O_2		
OM		OM		atome 2 OA
942	494	énergie kJ/mol		
110	121	Longueur liaison		
	oui	Propriétés magnétiques		
3	2	Ordre de liaison		

Pour l'[Azote](#)

Indice de liaison = $(8 - 2) / 2 = 3$ Par exemple, on observe 8 électrons dans les OM liantes 2 électrons dans les OM non liantes ; On observe bien une triple liaison $\text{N}\equiv\text{N}$

Pour l'[Oxygène](#)

Par exemple, on observe :

8 électrons dans les OM liantes

4 électrons dans les OM non liantes

Indice de liaison = $(8 - 4) / 2 = 2$

On observe bien une double liaison $\text{O}=\text{O}$

Repérage 1

Énoncé

Prédire si les espèces diatomiques homonucléaires suivantes sont stables. Pour une série donnée, prédire le classement des espèces par ordre d'énergie de liaison croissante:

- a) H_2^+ , H_2^- , H_2^{2-} b) O_2^+ , O

Réponse

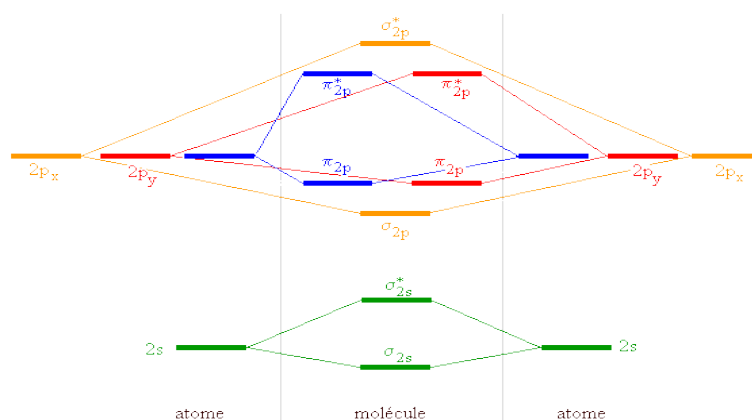
Pour prédire qu'une molécule diatomique est stable, il faut démontrer que son énergie est inférieure à la somme des énergies des deux atomes séparés. On utilise pour cela le diagramme des énergies des orbitales atomiques et moléculaires, duquel on déduit l'**ordre de liaison**, O.L.:

$$O.L. = \frac{n_e(\text{liante}) - n_e(\text{antiliante})}{2}$$

où $n_e(\text{liant})$ et $n_e(\text{anti liant})$ représentent le nombre d'électrons dans des orbitales moléculaires liantes et anti liantes, respectivement. Une molécule diatomique est stable si $O.L. > 0$. L'énergie de la liaison est d'autant plus grande que O.L. est grand.

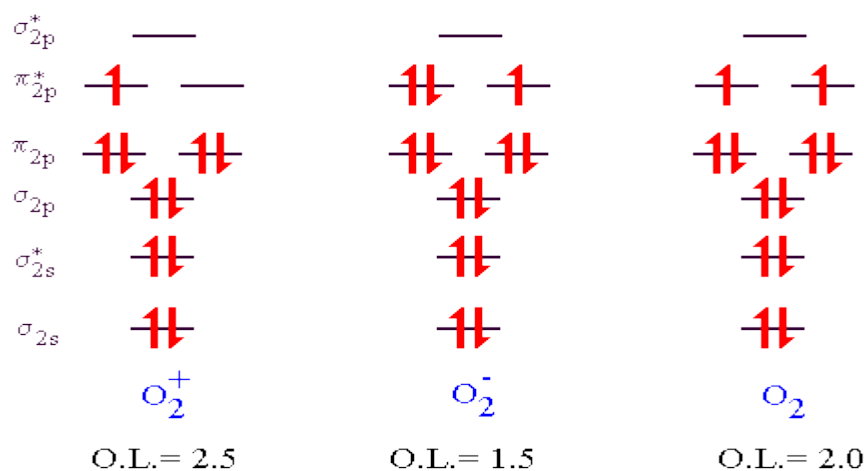
Repérage :

Le diagramme des énergies orbitales des espèces O_2^+ , O_2^- et O_2 fait intervenir les orbitales moléculaires σ et π selon:



Atomiques $2s$ et $2p$ dont le recouvrement donne des orbitales

Cela conduit aux diagrammes d'énergie suivants pour les espèces considérées ici:



On prédit que ces trois espèces moléculaires sont stables. Leur classement par ordre croissant d'énergie de liaison (prédit à partir d'O.L.) est O_2^- O_2 O_2^+ .

II.4.4 Comparaison Schéma OM avec les schémas de Lewis :

- Un certain parallélisme peut être fait entre les schémas de corrélations des orbitales moléculaires et les schémas de Lewis.
- On retrouve en particulier le nombre de liaisons des schémas de Lewis par le calcul de l'indice de liaison.
- Les schémas de Lewis comportent des doublets libres n'intervenant pas dans la formation des liaisons, on peut retrouver ces doublets libres en considérant qu'ils correspondent aux doublets liants et anti-liants qui en quelque sorte s'annulent mutuellement dans les schémas de corrélation des orbitales moléculaires.

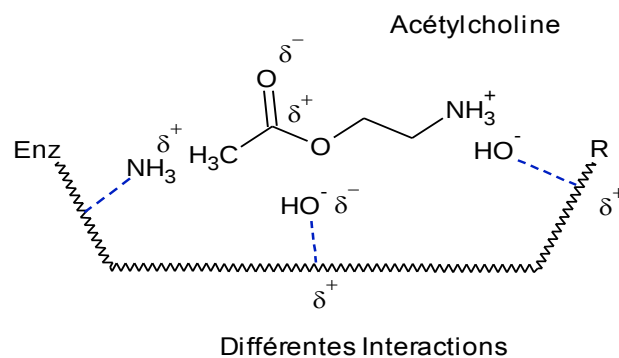
II.5 Interprétation physique des différentes Liaisons chimiques

II.5.1 La liaison faible:

Les liaisons faibles sont d'ordre attractions électrostatique

$$F = K \frac{qq_1}{r^2}$$

- ✓ **Interactions Ion-Dipôle et Dipôle-Dipôle** $\Rightarrow \Delta G^\circ = -1$ à -7 kcal/mol; ce type d'interaction s'établit lorsque les charges de signes opposés sont adéquatement alignés. Les charge d'un dipôle étant plus faible que celle d'un ion, une interaction dipôle-dipôle est plus faible qu'une interaction ion-dipôle, elle même plus faible qu'une interaction ionique.

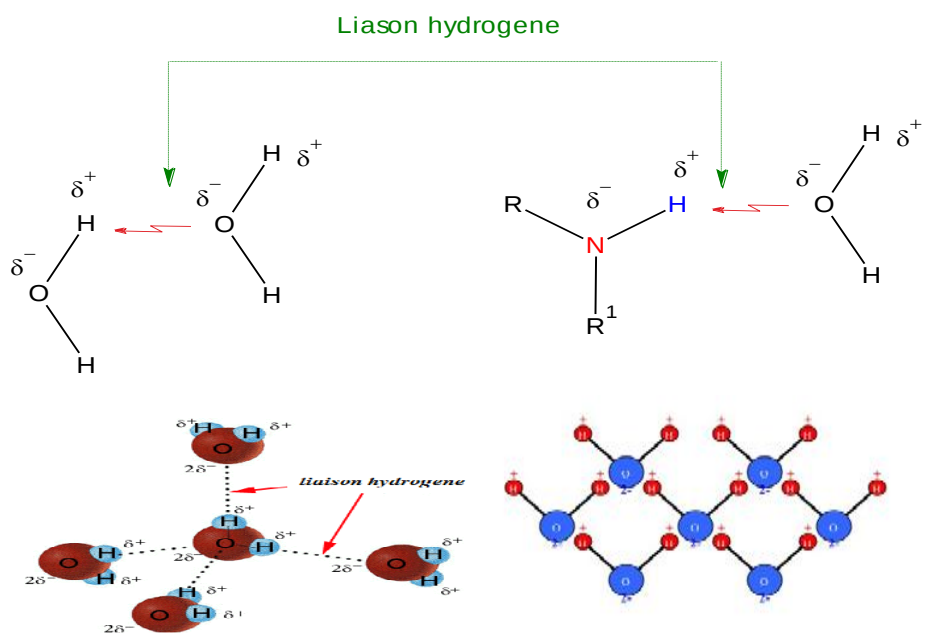
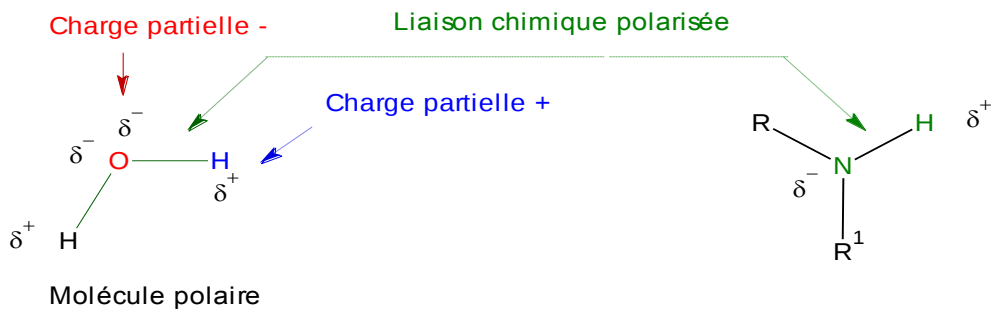


✓ **Liaison hydrogène**

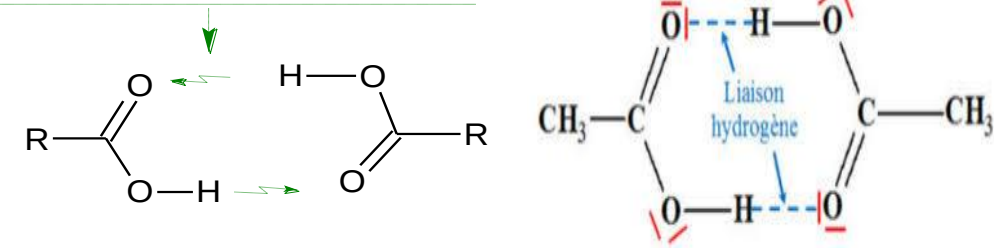
Très importantes en biologie les liaisons hydrogène assurent la stabilité de nombreux bio-polymères, protéines, acides nucléiques.

La liaison hydrogène est une liaison chimique **non covalente** de type **dipôle-dipôle** entre 2 molécules ou entre 2 groupements d'une molécule.

Liaisons Hydrogène $\Rightarrow \Delta G^\circ = -3$ à -5 kcal/mol; les liaisons hydrogène sont des cas particuliers d'interactions dipôle-dipôle entre un atome d'hydrogène attaché à un atome électronégatif X et un autre atome électronégatif Y pourvu d'un doublet électronique non-liant.



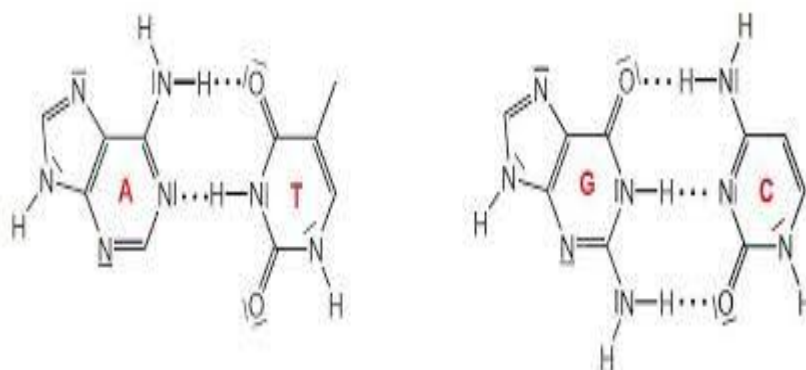
Liaison chimique intramoléculaire
 $2,67 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2,67 \text{ Angstroms}$



Dimérisation de l'acide organique

✓ Bases azotées des acides nucléiques

Toutes ces molécules sont planes, et leur géométrie est telle que l'adénine peut se lier à la thymine par deux liaisons hydrogènes, alors que la guanine peut se lier à la cytosine par trois liaisons hydrogènes. De ce fait, les molécules se « reconnaissent » l'une l'autre (l'association par exemple de l'adénine avec la cytosine se fera de manière beaucoup plus faible, voire pas du tout).



Le modèle de la liaison hydrogène trouve une application remarquable en chimie du vivant, par l'établissement de liaisons hydrogènes entre les bases azotées des acides nucléiques.

Ces cinq bases sont construites à partir du squelette de base de la purine et de la pyrimidine (tableau 5) : l'adénine (A) et la guanine (G), la cytosine (C), la thymine (T) à laquelle se substitue l'uracile (U) dans la molécule d'ARN.

C'est cette reconnaissance moléculaire qui permet à la molécule d'ADN d'exister sous forme de deux brins complémentaires l'un de l'autre.

✓ Effet hydrophobe

Il consiste à expliquer pourquoi des molécules, le plus souvent organiques, ne se dissolvent pas dans l'eau.

Interactions Hydrophobes ⇒ Ces interactions correspondent à la diminution d'énergie libre qui résulte du rapprochement de régions non-polaires d'une drogue et de son récepteur en conséquence de l'augmentation d'entropie des molécules d'eau avoisinantes.

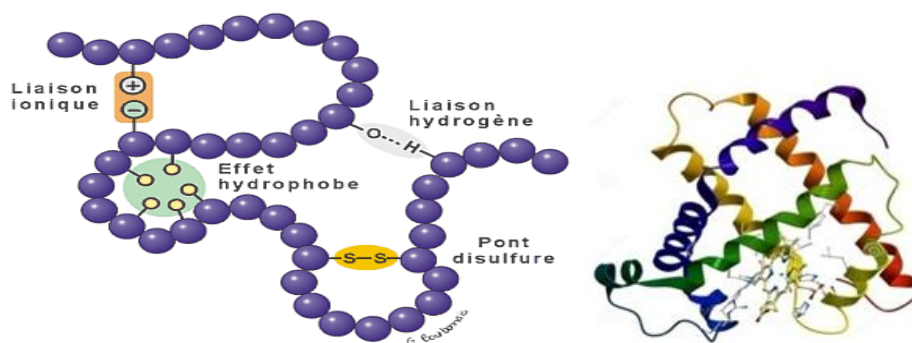


Schéma II.5.1 : Repli des protéines

Interactions de van der Waals ou **Forces de London** $\Rightarrow \Delta G^\circ = -0.5$ kcal/mol; ces interactions s'établissent lorsque les dipôles temporaires entre atomes d'un groupe non polaire induisent des dipôles opposés au sein du groupe d'une autre molécule duquel ils se rapprochent.

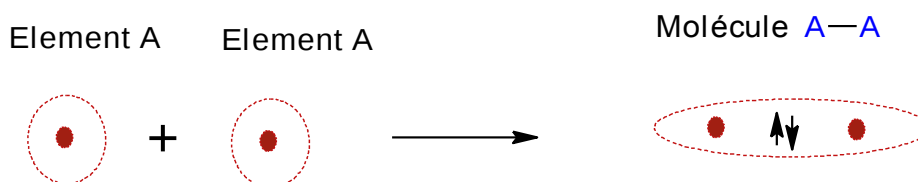
L'attraction qui en résulte peut contribuer de façon significative à l'affinité entre la drogue et son récepteur si la surface de contact entre les atomes des deux molécules est grande, c'est-à-dire lorsque la complémentarité des deux molécules permet la combinaison de nombreuses interactions atomiques contribuant chacune environ -0.5 kcal/mol à l'énergie libre du complexe drogue-récepteur.

II.5.2 Liaisons chimiques fortes

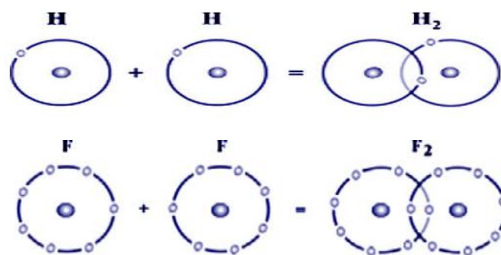
II.5.2.1 Les différents types de liaisons covalentes

La liaison covalente entre 2 atomes A et B non métalliques est la mise en commun de deux électrons. Chaque atome fournit un électron de valence.

Liaison Covalente apolaire : Dite aussi **covalente pure** concerne presque exclusivement les molécules homonucléaires (même type d'atome).

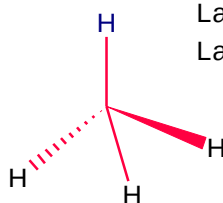


La probabilité de présence des électrons est à égale distance entre les noy



L'affinité électronique étant la même ou presque entre les deux atomes: la molécule est apolaire: dite covalente pure

Affinité électronique de C = 2,5
Affinité électronique de H = 2,1



La liaison C - H est covalente
La liaison C - H est apolaire

$$\Delta\xi = \xi_C - \xi_H = 2,5 - 2,1 = 0,4$$

Affinité électronique de H = 2,1

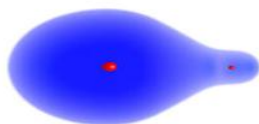


La liaison H - H est apolaire

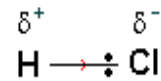
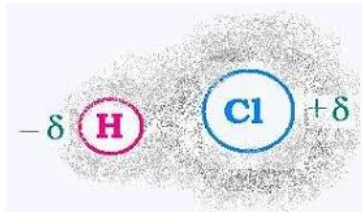
$$\Delta\xi = \xi_H - \xi_H = 2,1 - 2,1 = 0$$

La liaison covalente apolaire s'observe par exemple pour les molécules diatomiques homo-nucléaire aussi tels que Cl_2 ou O_2 .

Liaison covalente polaire entre A et B est toujours la mise en commun de deux électrons.

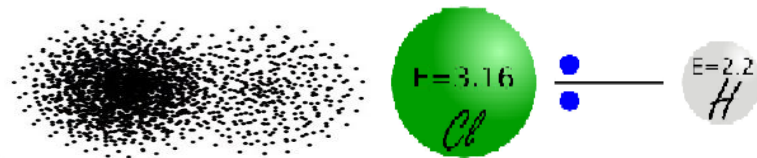


L'électronégativité de A est différente de celle de B. Le nuage électronique sera plus dense du côté de l'atome le plus électronégatif. Par conséquent, l'atome le plus électronégatif aura une charge partielle négative et l'autre atome aura une charge partielle positive.



polarisation de la liaison de la liaison HCl

Le doublet de liaison est attiré par le chlore plus électronégatif que l'hydrogène



$$\Delta\xi = \xi_{\text{Cl}} - \xi_{\text{H}} = 3,2 - 2,1 = 1,1$$

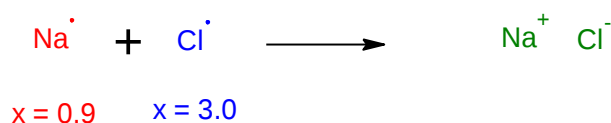
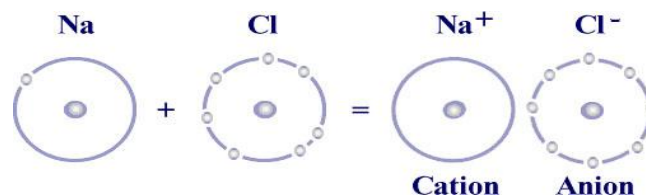
La liaison HCl est polaire

- **Liaison ionique** : La liaison ionique par attraction électrostatique des ions de signes contraires.

Ce type de liaison s'établit lorsque la différence d'électronégativité est grande entre les atomes. On considère alors qu'il y a **transfert d'électron** d'un atome vers l'autre.

En pratique, elle apparaît essentiellement entre métaux et non-métaux, ce qui correspond généralement à une différence **d'électronégativité supérieur à 1,7**.

Un exemple type est le sel de cuisine NaCl: Les atomes Na et Cl échangent un électron pour atteindre, tous deux, la structure du gaz rare le plus proche.



Les ions Na^+ et Cl^- ainsi formés s'attirent mutuellement.

Il n'y a pas vraiment de molécule de NaCl mais autour des Na^+ se trouvent des Cl^- et inversement. A l'état solide cela donne une structure bien définie appelée **cristal** (voir annexes).

La combinaison ionique se réalise de manière à obtenir la neutralité électrique du **cristal**.

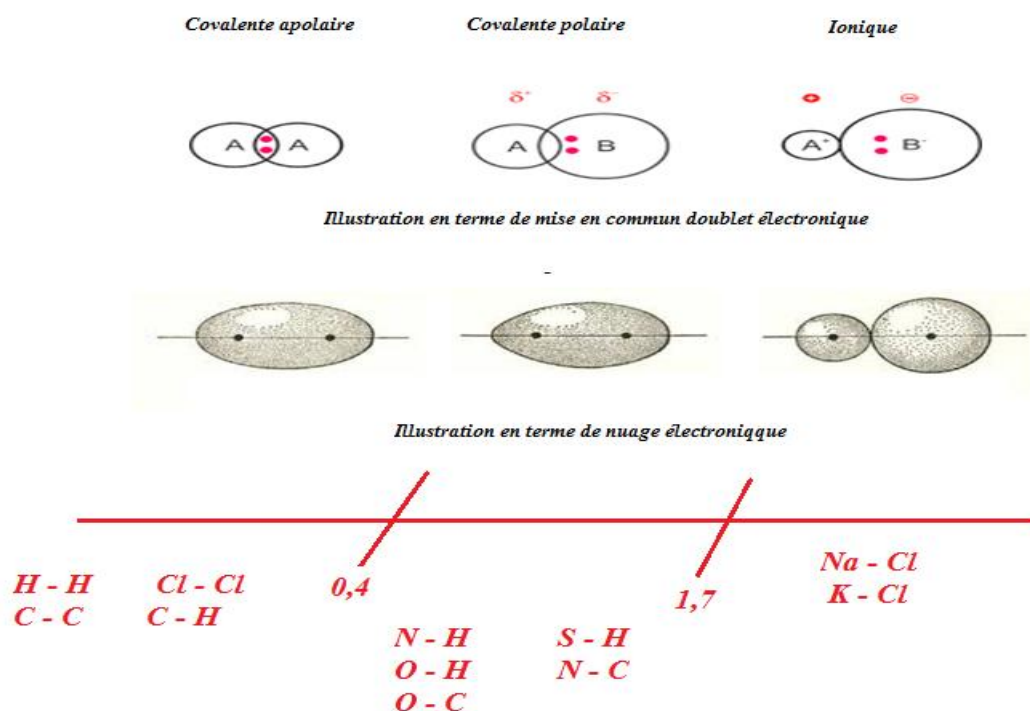
Ici la différence d'électronégativité entre les deux ions est de 2.2, le caractère ionique de la liaison est donc important.

Dans une liaison covalente polaire, L'atome le plus électronégatif possède une charge partielle négative (δ^-) alors que le second, moins électronégatif, possède une charge partielle positive (δ^+).

Récapitulons

Lorsque la différence d'électronégativité entre deux atomes est supérieure à 1,7, alors la liaison est considérée comme ionique. Si cette différence est inférieure à 1,7 la liaison est considérée comme covalente à caractère polaire.

Si la différence est exactement de 1,7 alors la liaison est considérée comme ayant 50 % de caractère ionique et 50 % de caractère covalent.



H 2.1																	He
Li 1.0	Be 1.5											B 1.9	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	Ne
Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	Ar
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.5	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.7	Cd 1.4	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	Xe
Cs 0.7	Ba 0.9	Ln 1.1-1.2	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.8	Po 2.0	At 2.2	Rn
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.7	Np-Lr 1.3											

Repérage : Donnez la nature de la liaison en considérant les valeurs de l'affinité électronique de chaque élément.

Si - Cl

Cl - F

O - H

P - Cl

Na - Cl

S - H

S - Cl

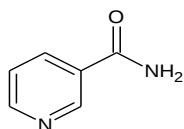
C - H

N - H

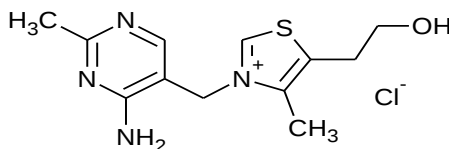
Cl - Cl C - O

C - N

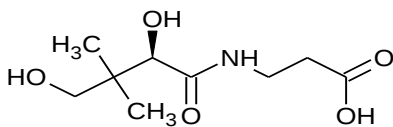
Repérage : Dans chaque molécule proposez la nature de la liaison



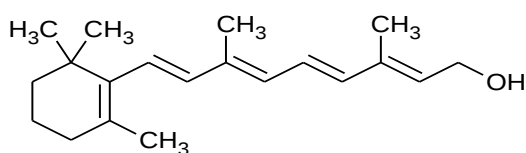
Niacinamide
Vitamin B₃



Thiamine chloride
Vitamin B₁

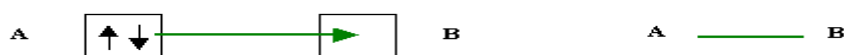


Vitamin B₅
Pantothenic acid



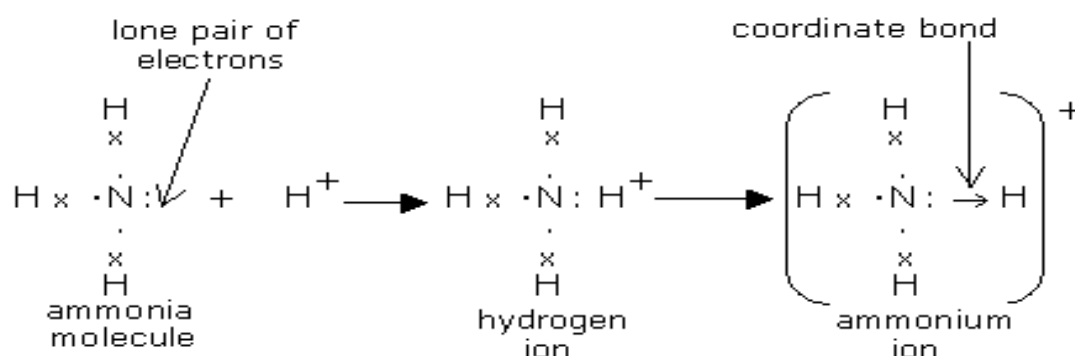
Vitamin A
Retinol

II.5.2.2 La liaison de coordination ou liaison Dative ou donneur- accepteur

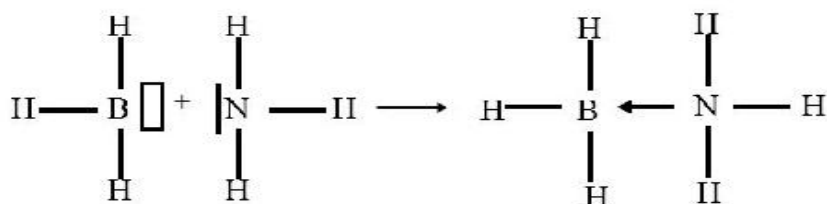


Le monoxyde de carbone (CO) peut être considéré comme présentant une liaison de coordination et deux liaisons covalentes entre les atomes de carbone et d'oxygène. Cette description très inhabituelle illustre la flexibilité de ce type de description. Ainsi dans le CO, le carbone est l'accepteur d'électron et l'oxygène le donneur d'électron.

L'ion **ammonium** de formule brute NH_4^+ est un ion polyatomique de charge électrique positive. Ce cation polyatomique possède une structure tétraédrique, l'atome d'azote N occupant le centre et les quatre atomes d'hydrogène occupant les sommets équivalents du tétraèdre. Il est obtenu par protonation de l'ammoniac (NH_3) ; il est parfois présenté comme une molécule d'ammoniac ionisée.



Lorsqu'un atome d'une molécule ne satisfait pas l'octet, il peut se lier à une autre molécule et former une nouvelle liaison qui l'amènera à respecter l'octet.

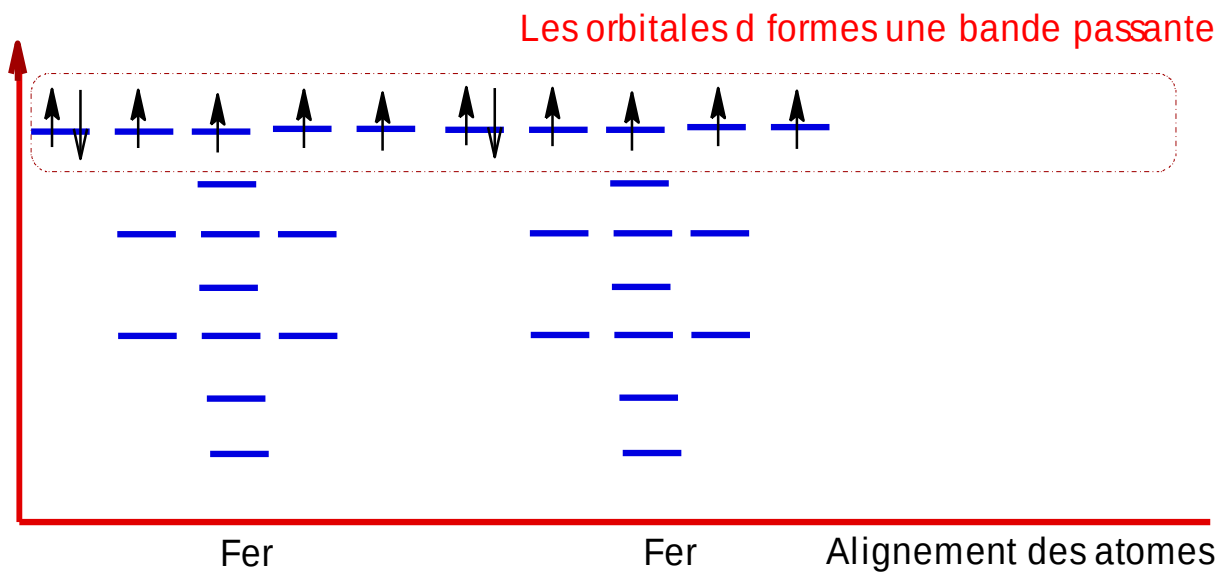
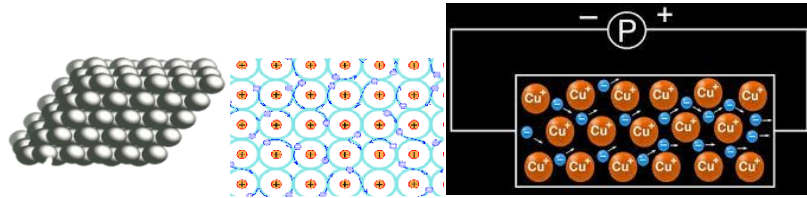


Liaison covalente dative : la paire électronique (ou doublet) assurant la liaison appartient à l'atome « donneur », l'atome « accepteur » doit alors avoir une orbitale atomique vide.

Cette liaison est représentée par une flèche dans le sens donneur $\rightarrow$ accepteur

II.5.2.3 La liaison métallique

C'est la mise en commun dans le métal de tous les électrons de valence. On obtient alors une bande de conduction. C'est la raison pour laquelle, un métal est capable de transporter de l'énergie électrique.



La bande passante permet la circulation des électrons dans les édifices métalliques (Propriété de conduction de courant électrique).

II.6. Théorie de l'hybridation moléculaire

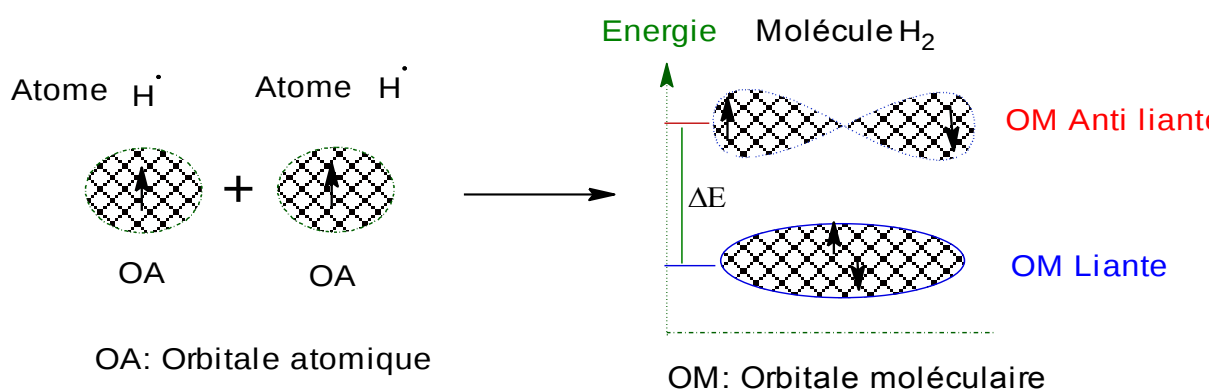
La théorie de l'**hybridation des orbitales atomiques** a été développée par Linus Pauling pour expliquer la géométrie des molécules.

La théorie de l'hybridation va de paire avec le **modèle de la VSEPR**.

II.6.1 Notion d'hybridation :

II.6.1.1 Étude de la molécule d'hydrogène

L'addition de deux espaces orbitales atomiques donne deux espaces moléculaires : une configuration spéciale liante (énergie minimale) et une configuration spatiale anti liante énergie maximale) (Schéma) :



SchémaII.6.1 :OM hydrogène

✚ Un état d'hybridation se traduit par un réajustement spatial des orbitales atomiques d'énergie minimale solution de l'équation de Schrödinger

✚ L'addition de deux OA donne deux OM :

-Orb
itale liante (état fondamentale) Ψ

-Orb
itale anti liante (état excité) Ψ^*

- $E\Psi$

< $E\Psi^*$

✚ L'état d'énergie de l'orbitale moléculaire est inférieur à l'état d'énergie des orbitales atomiques schéma.

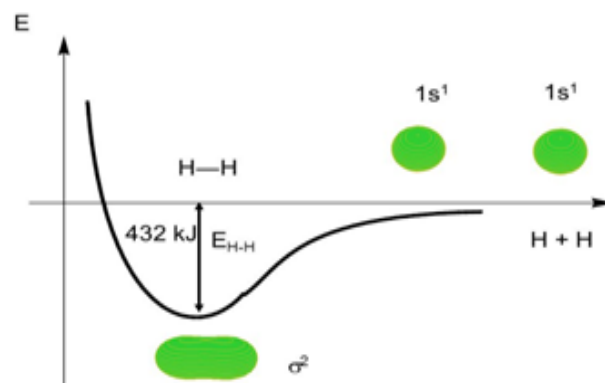


Schéma II.6.2 : Energie OM Hydrogène

- Application

- La molécule de H₂

La théorie LCAO-MO combine les O.A 1s des 2H pour obtenir 2 O.M σ_{1s} et σ_{1s}^*

- Structure électronique de ${}_1\text{H} : 1s^1$

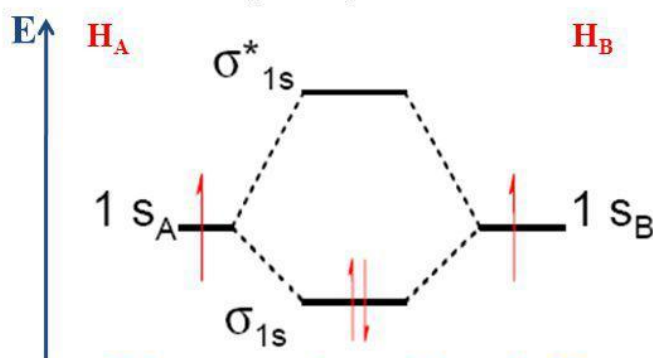


Diagramme énergétique de H₂

- Configuration électronique de H₂: σ_s^2

- Indice de liaison: $l = 1$; type de liaison: σ

- Propriétés magnétiques : molécule diamagnétique (tous les électrons sont appariés)

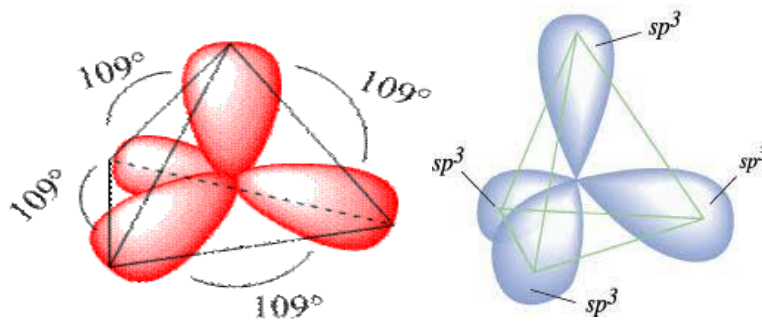
64

II.6.1.2. Hybridation sp^3 :

II.6.1.2.1 Etude de la molécule de méthane CH₄

La configuration électronique du carbone type **LEWIS** ne permet pas d'expliquer la tétravalence du carbone dans le méthane (tétraèdre).

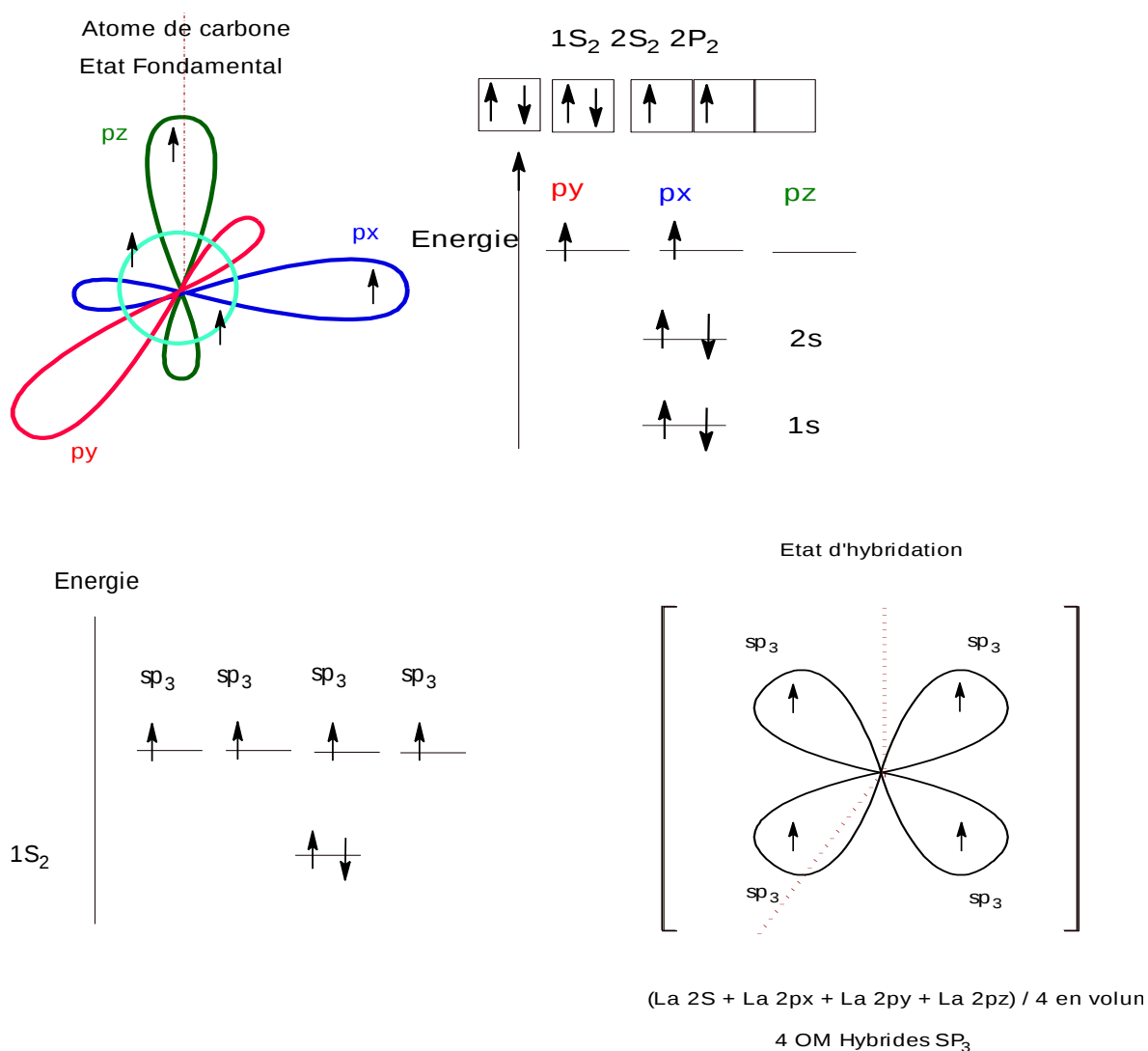
L'expérience montre une géométrie spatiale de la molécule de méthane est un tétraédrique

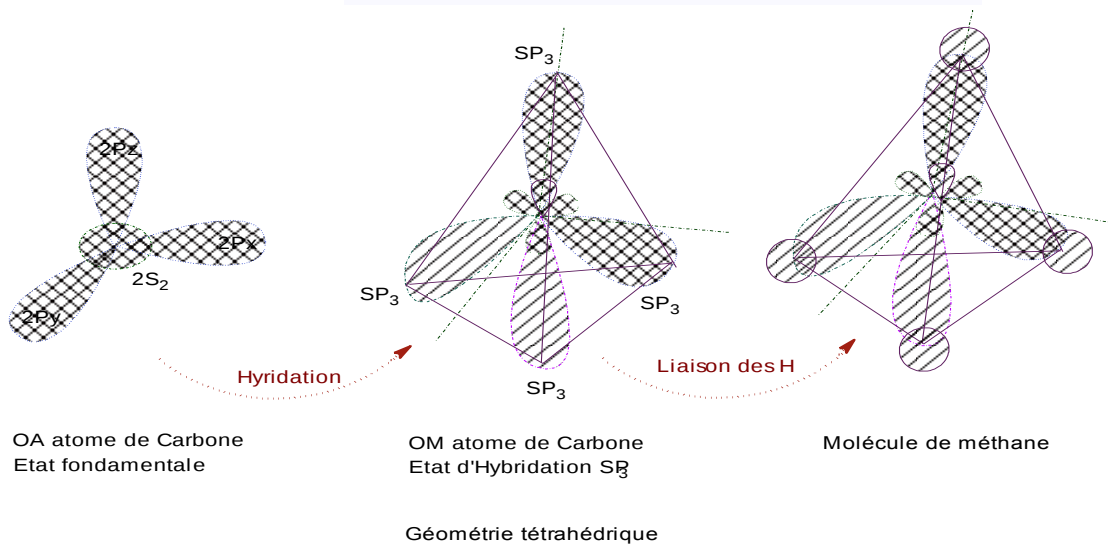
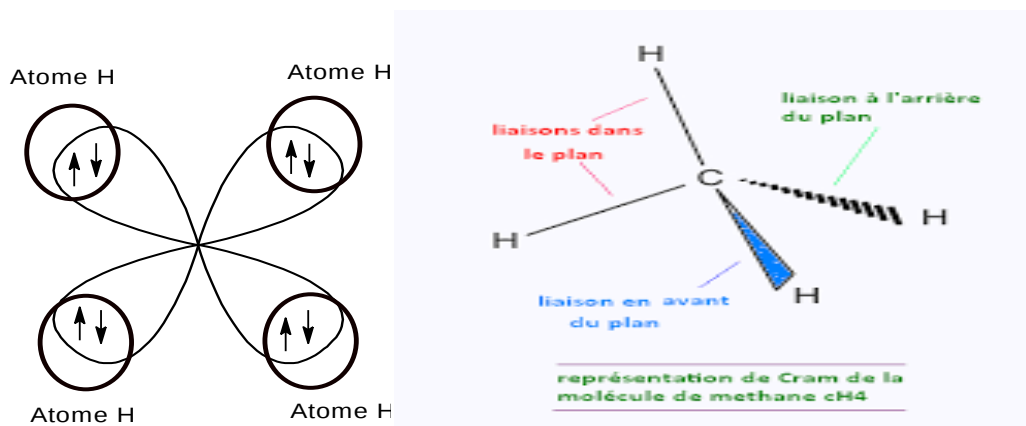


SchémaII.6.3 : Géométrie tétraédrique

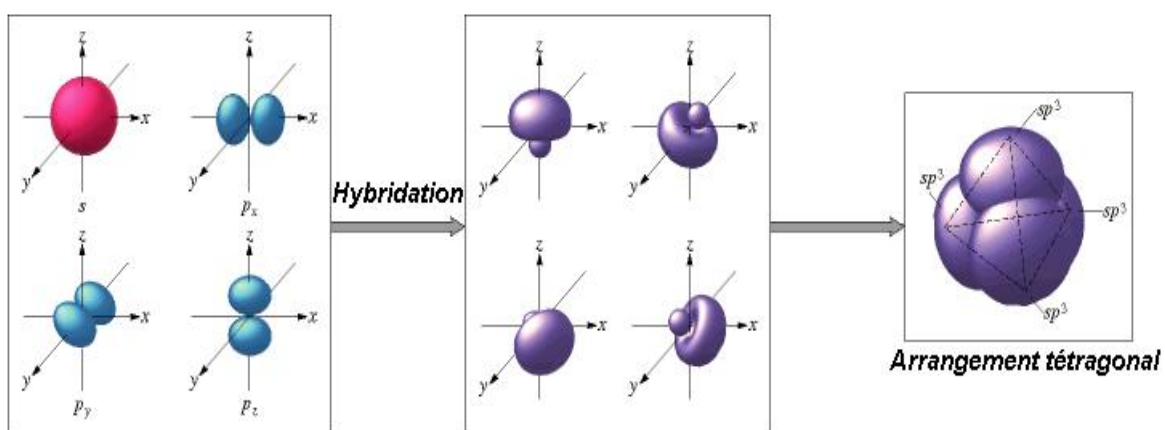
Cette géométrie peut s'expliquer par l'hybridation sp^3 des orbitales atomiques du carbone.

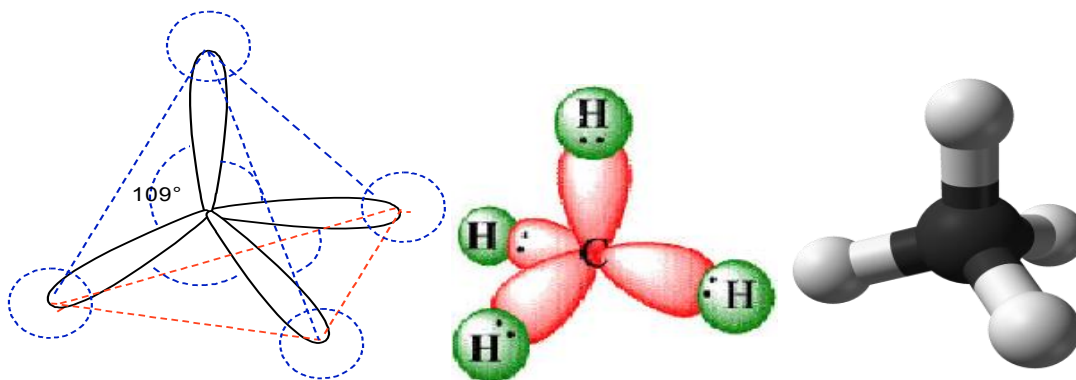
Les quatre électrons qui se trouvaient dans les sous-couches 2s et 2p se retrouvent répartis de façon uniforme dans chacune des quatre orbitales atomiques hybrides sp^3 . Ils se positionnent alors dans 4 directions faisant entre elles, deux à deux, des angles de $109^\circ 28'$.





Plusieurs illustrations se présentent dans la littérature

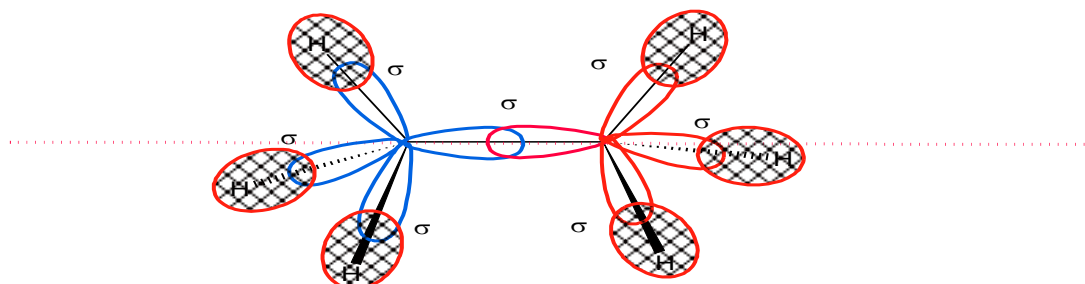




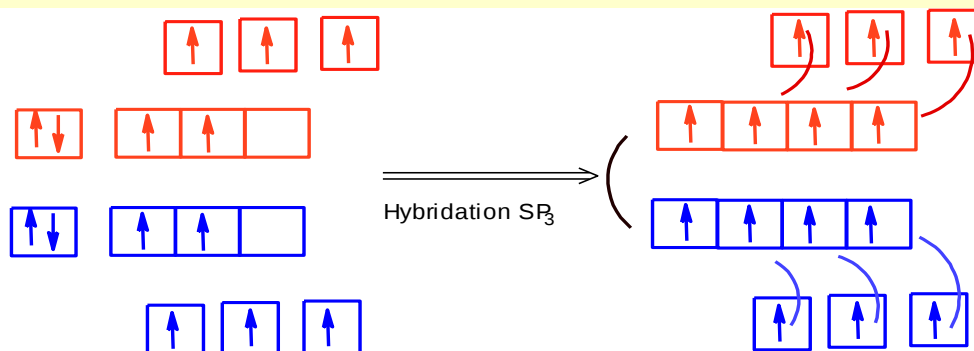
SchémaII.6.4 : Mécanisme d'hybridation SP_3

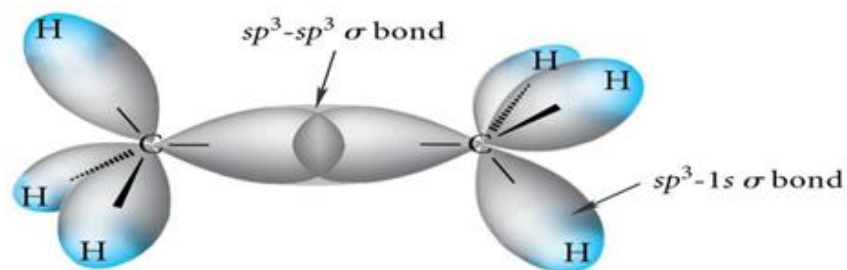
La structure du méthane (et celle de nombreuses molécules) ne peut être expliquée que par la combinaison de certaines OA (hybridation) qui conduit à des OA hybrides équivalentes (de même énergie et de même géométrie) d'orientation différente des OA de départ.

II.6.1.2.2 Etude de la molécule d'éthane C_2H_6



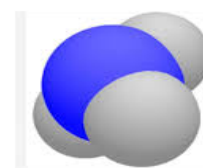
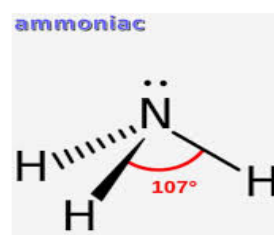
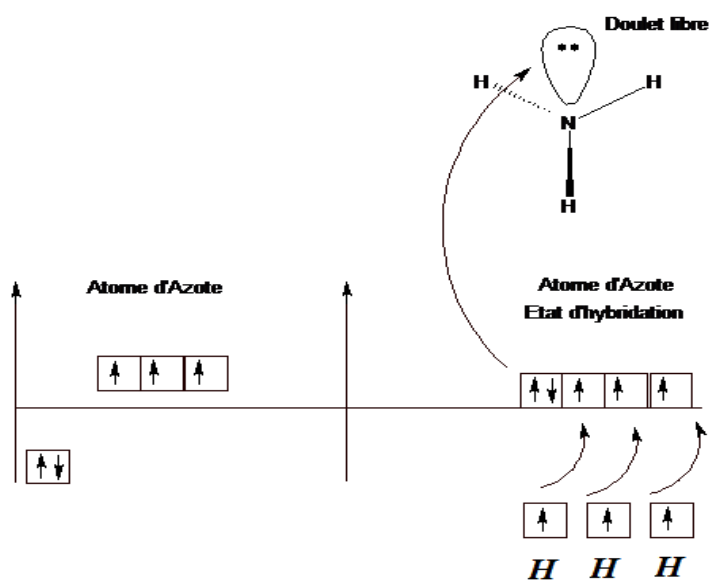
Chaque atome de carbone dans l'éthane favorise un électron et forme ensuite des hybrides sp^3 exactement comme nous l'avons décrit dans le méthane. Donc, juste avant liaison, les atomes ressemblent à ceci:





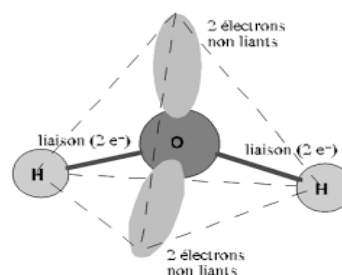
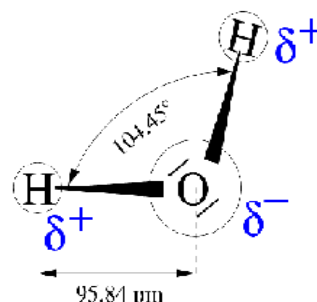
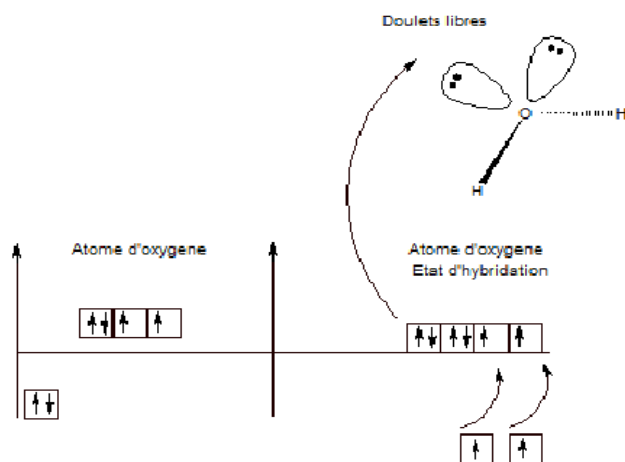
Hybridation SP_2

II.6.1.2.3 Etude de la molécule NH_3



Géométrie tétraédrique

II.6.1.2.4 Etude de la molécule H_2O



II.6.1.3 Hybridations sp^2

II.6.1.3.1 Etude de la molécule d'éthène C_2H_4

Ce type d'hybridation implique le mélange d'une orbitale du sous-niveau s et de deux orbitales du sous-niveau p de l'enveloppe de valence pour former trois orbitales hybrides sp^2 . Ces orbitales hybrides sp^2 se trouvent dans un plan et sont dirigées vers les coins du triangle équilatéral (figure).

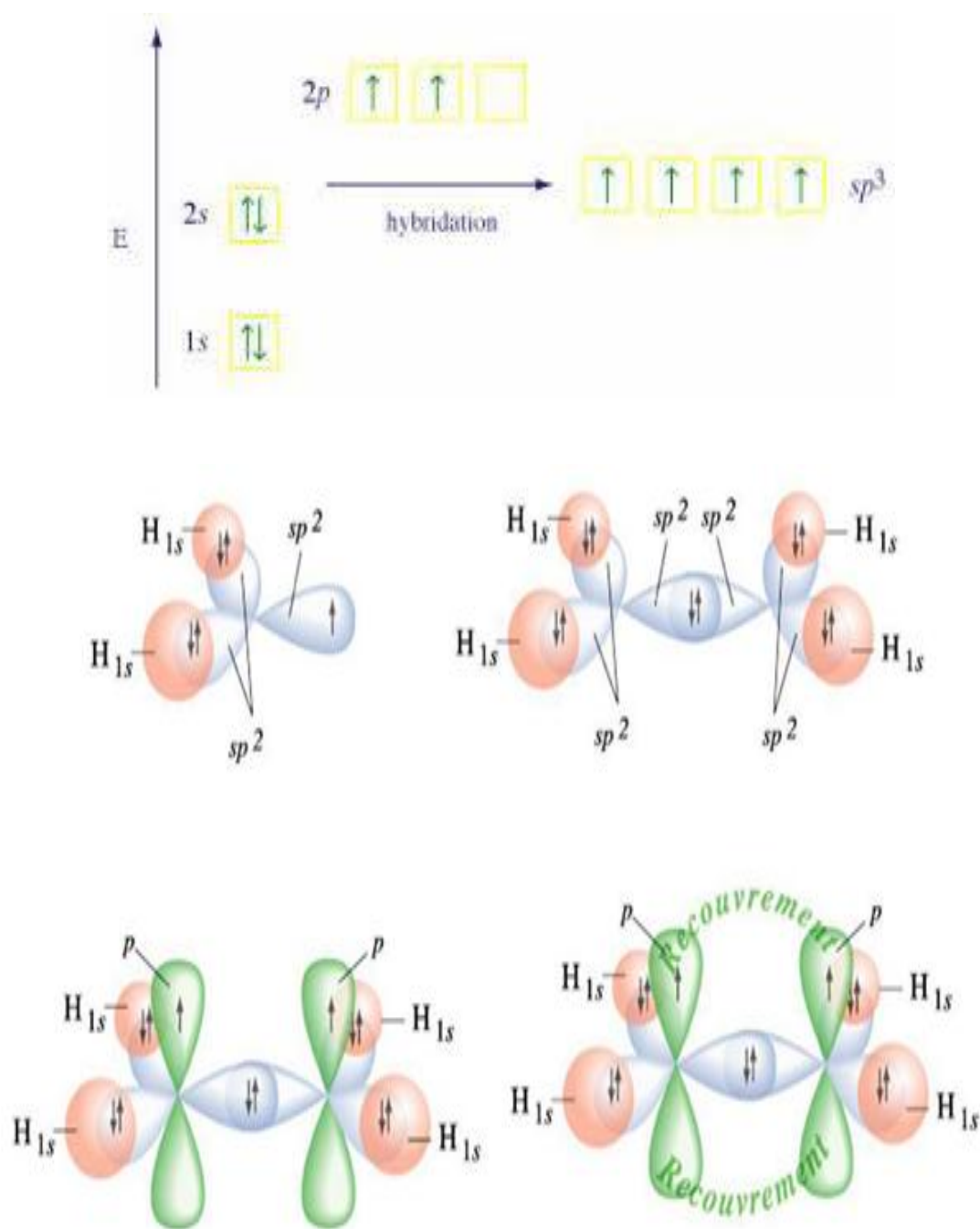


Schéma II.6.5 Hybridation nsp

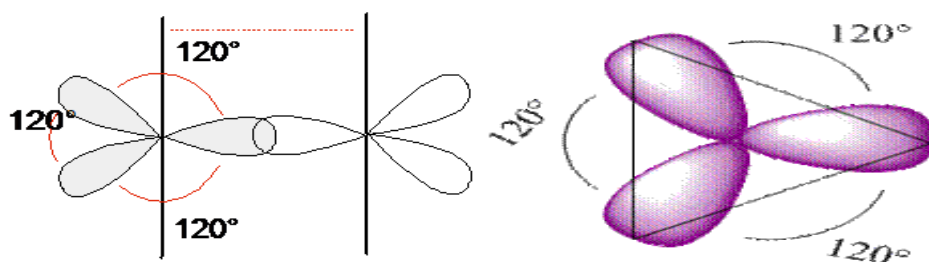
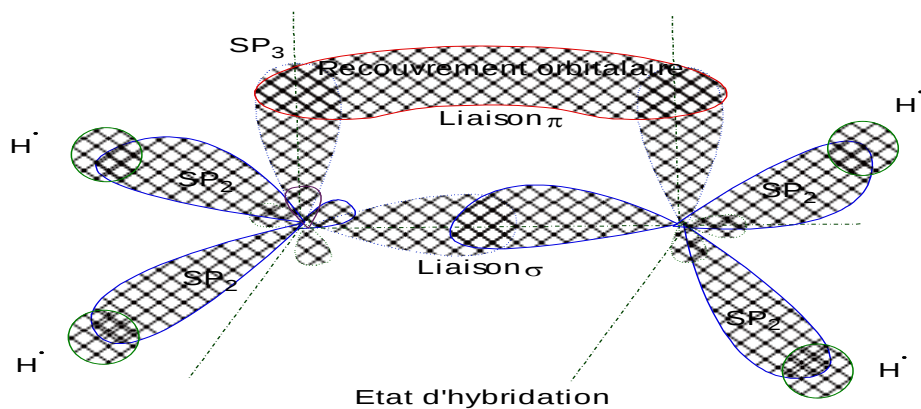


Schéma II.6.6 : Diagramme orbitalaire de la molécule d'éthylène

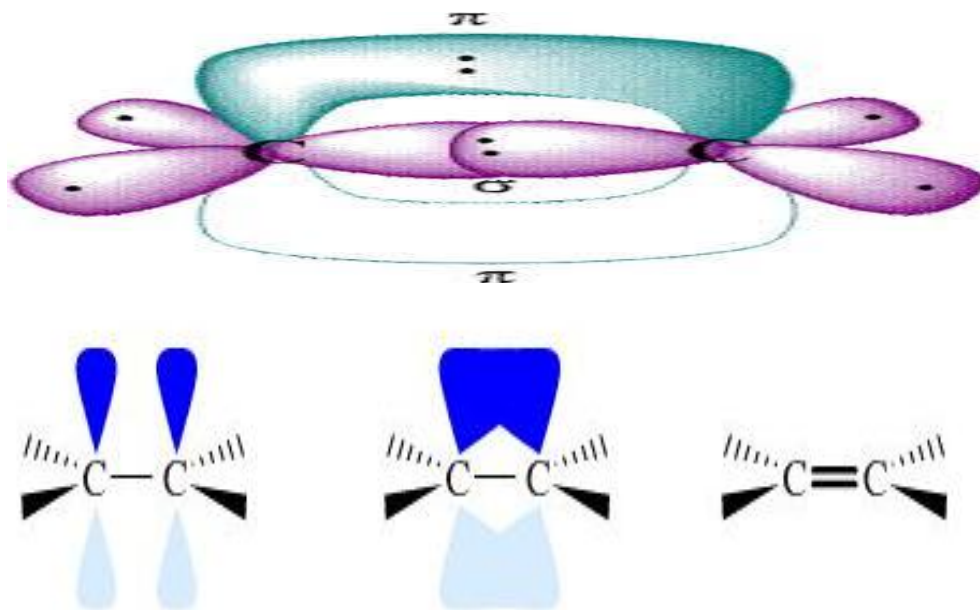
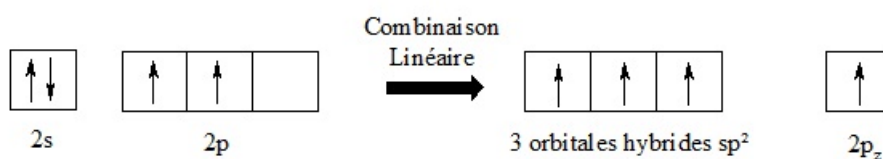


Schéma II.6.7 : Hybridation SP2

Par exemple le cas dans la molécule d'éthylène ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$). Il s'agit d'une molécule plane, avec une double liaison résultant de la mise en commun de quatre électrons.



L'orbitale s se combine avec deux orbitales p, pour conduire à trois orbitales hybrides sp^2 . Il reste une orbitale p_z inchangée.

La façon de répartir dans l'espace trois électrons de manière à minimiser les répulsions inter-électroniques obéit à une géométrie plane, avec un angle de 120° entre chacune des directions.

L'orbitale p_z n'étant pas touchée par l'hybridation, elle occupe une direction perpendiculaire au plan contenant les trois orbitales hybrides sp^2 . Cette orbitale contient également un électron et pourra intervenir dans la formation de liaisons.

Lorsque deux carbones hybridés sp^2 se rapprochent, ils peuvent former une liaison σ forte par recouvrement orbitalaire sp^2-sp^2 (**recouvrement axial**).

Parallèlement, les orbitales p_z non hybridées peuvent se recouvrir latéralement, en formant une liaison π (**recouvrement latéral**). Il en résulte une double liaison.

II.6.1.3.2 Hybridation sp^2 : Cas de la molécule BCl_3

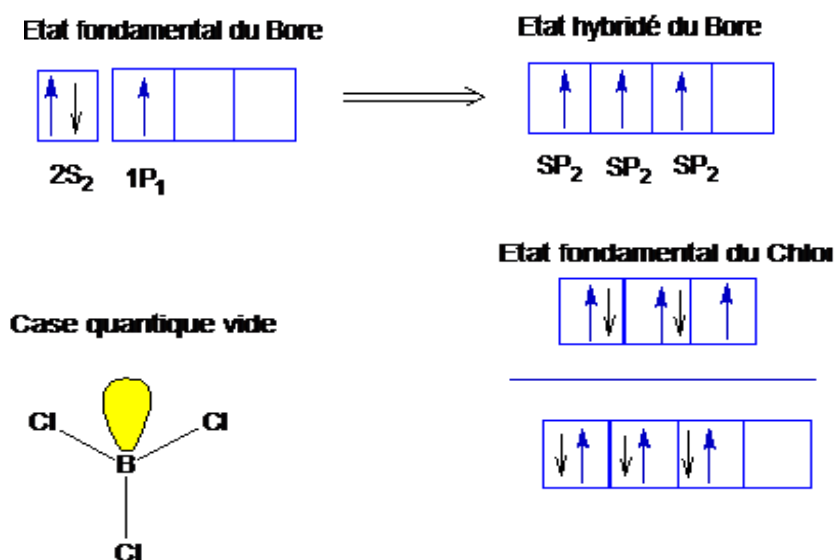
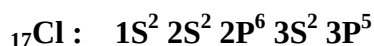
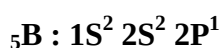


Schéma II.6.8 : Hybridation SP^2

Comme déjà indiqué, les trois orbitales hybrides sp^2 se trouvent dans un plan et sont orientées dans l'espace selon un angle de 120° l'une par rapport à l'autre.

L'orbitale 2p non hybridée est perpendiculaire au plan des orbitales hybrides sp^2 comme le montre la figure.

II.6.1.4 Hybridations sp :

II.6.1.4.1 Cas de la molécule de C_2H_2

Les deux orbitales sp -hybrides de l'atome de carbone sont linéaires et orientées selon un angle de 180° tandis que les orbitales p non hybridées sont perpendiculaires aux orbitales sp hybrides et perpendiculaires l'une à l'autre, comme le montre la figure

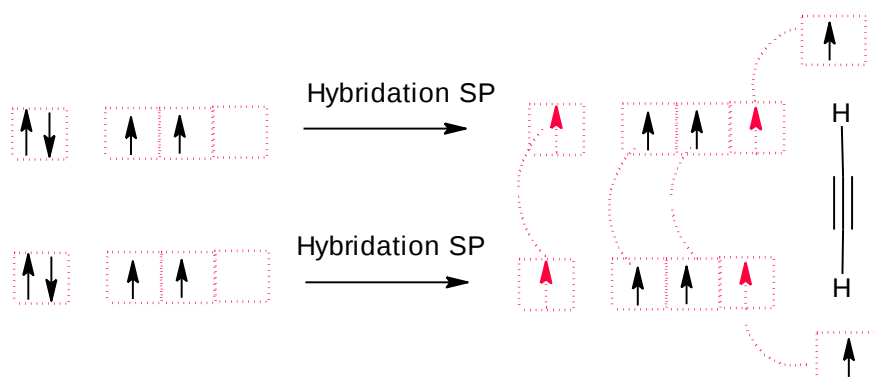


Schéma II.6.9 : Hybridation sp^2

Le carbone peut également former des triples liaisons par la mise en commun de six électrons. C'est notamment le cas de la molécule d'acétylène, molécule linéaire qui possède une triple liaison.

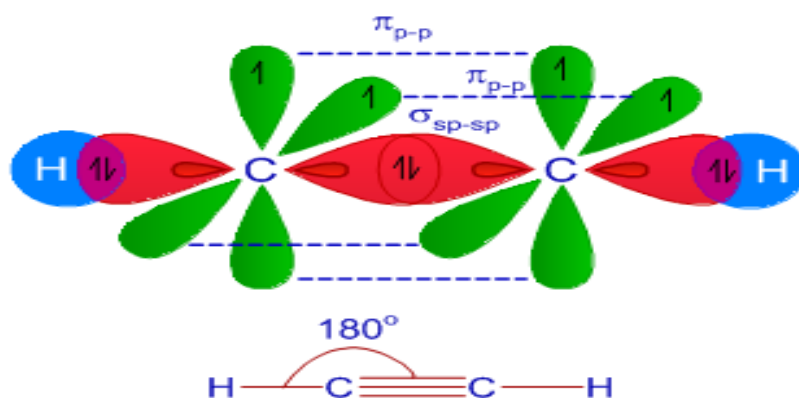


Schéma II.6.10 : Hybridation sp

Dans ce cas d'hybridation, l'orbitale s se combine avec une seule orbitale p . Il en résulte deux orbitales hybrides sp et deux orbitales p_y et p_z inchangées. Chaque orbitale hybride contenant un électron, la seule façon de minimiser les répulsions

électroniques est l'alignement de ces deux orbitales, formant entre elles un angle plat de 180° .



Lorsque deux carbones hybridés sp se rapprochent, ils peuvent former une liaison σ forte par recouvrement orbitalaire sp (axial). De plus, les orbitales p_y et p_z non hybridées peuvent se recouvrir latéralement, en formant deux liaisons π . Il en résulte une triple liaison

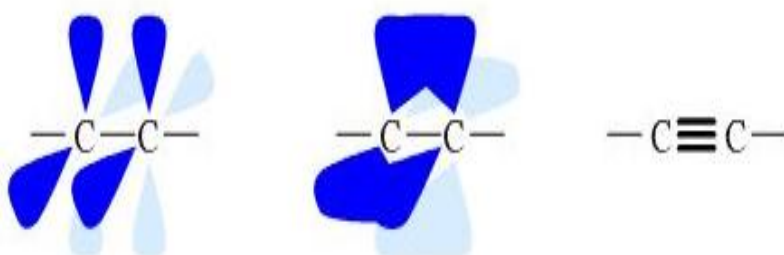


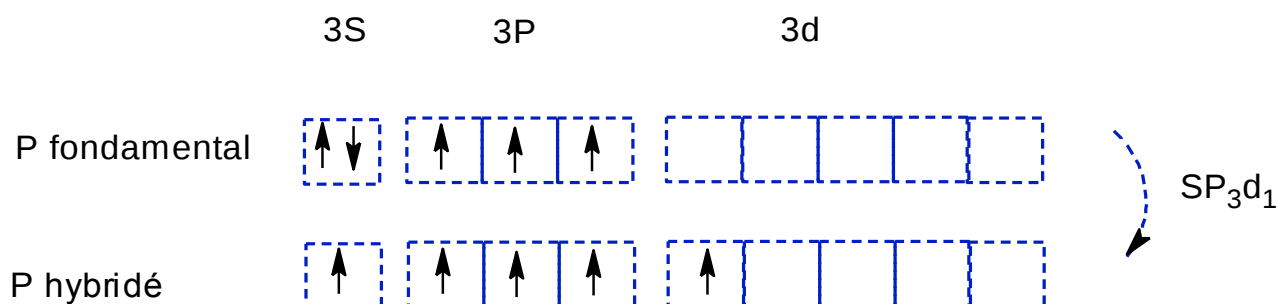
Schéma II.6.11: Hybridation SP

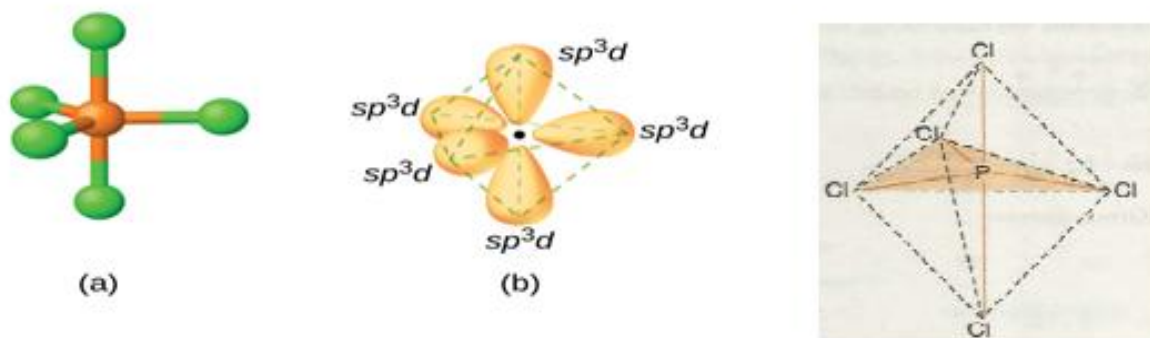
II.6.1.5 L'hybridation dsp^3

II.6.1.5.1 Formation de PCl_5

La configuration électronique de l'état fondamental du phosphore est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

Dans les conditions de la formation de la liaison, les électrons $3s$: l'un des électrons est promu à l'orbitale $3d^2$ vacante. Les configurations de l'état fondamental et de l'état excité du phosphore sont illustrées à la Fig.





SchemaII.6.12 :Trigonal bi pyramidal geometry of PCl_5 molecule.

L'exemple sera illustré par la molécule de pentachlorure de phosphore, de formule PCl_5 .

Voilà une molécule qui, au contraire des trois précédentes, n'existe pas si l'on s'en tient au modèle de LEWIS: la règle de l'octet n'est pas satisfaite puisque le phosphore est entouré de 10 électrons de valence, et non pas de huit.

Le phosphore P ($Z = 15$) a la structure électronique suivante, pris dans son état fondamental: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$

Le chlore Cl ($Z = 17$) a la structure électronique suivante, pris dans son état fondamental: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$

Afin d'expliquer la valence 5 du phosphore il est alors imaginé de réarranger les électrons des sous-couches 3s et 3p du phosphore, en les combinant, le plus arbitrairement qui soit, mais en tenant compte d'énergies voisines de ces différentes sous-couches, avec une partie de la sous-couche 3d.

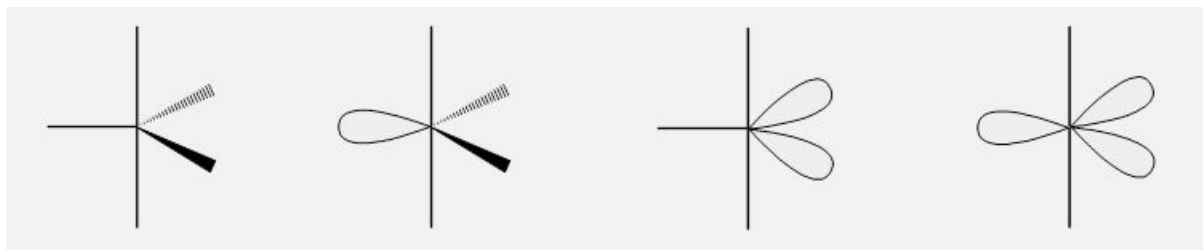
On aura alors comme structure électronique de l'atome de phosphore la structure suivante: $[\text{Ne}] 3s^1 3p^3 3d^1$

On aura alors :

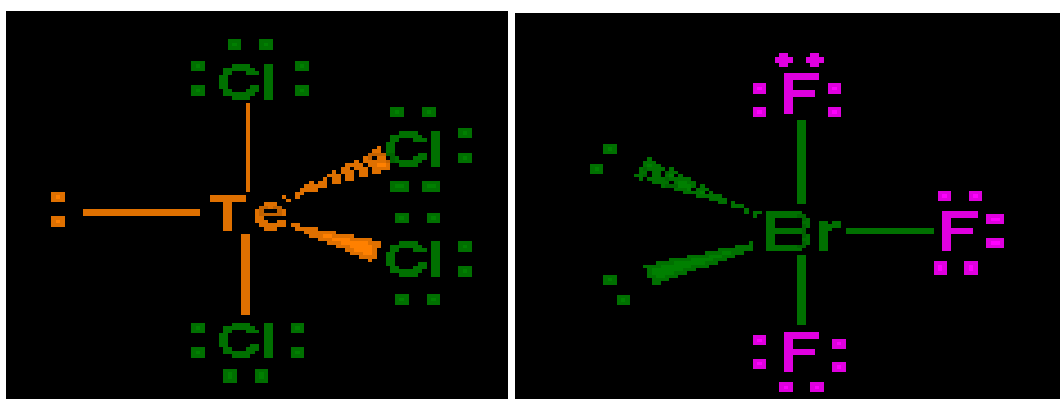
1 orbitale (3s) + 3 orbitales (3p) + 1 orbitale (3d) $\rightarrow$ 5 orbitales atomiques hybrides " dsp^3 ".

Chacune de ces cinq orbitales atomiques hybrides contiendra un électron, puisque le phosphore contient cinq électrons sur sa couche externe.

La façon qui minimise au maximum les répulsions inter-électroniques entre cinq électrons est la disposition géométrique en forme de bipyramide à base triangulaire (cad imaginer deux tétraèdres qui seraient collés par une face commune). On obtient donc une figure géométrique à six faces.



La construction de la molécule de penta chlorure de phosphore se poursuit en créant, entre chaque orbitale atomique hybride dsp^3 de l'atome de phosphore et l'orbitale atomique 3p de l'atome de chlore possédant un électron célibataire, une orbitale moléculaire de type s, résultant d'une fusion axiale.



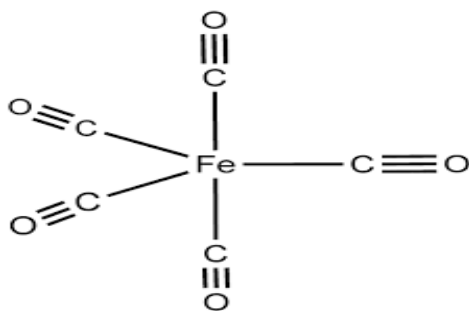
SchemaII.6.13 :Trigonal bi pyramidal geometry of $TeCl_5$ et BrF_3 molecule.

Bien entendu le principe d'exclusion de PAULI s'applique lors de la création de chacune des cinq liaisons chimiques.

On remarque l'apport de la théorie de la liaison de valence à la description de la liaison chimique: pour arbitraire qu'elle soit, cette théorie apporte, là aussi, des compléments que la théorie de LEWIS se trouvait incapable d'expliquer.

Penta carbonyle de fer

La structure du penta carbonyle de fer est largement reconnue comme étant bipyramidale trigonale, avec trois ligands CO occupant des positions équatoriales et deux ligands CO occupant des positions axiales.

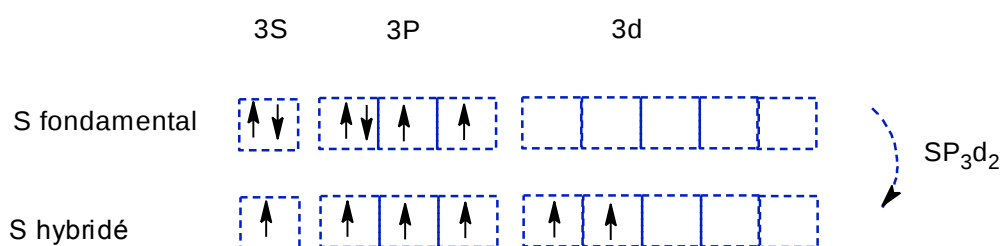


Structure bipyramidale trigonale du penta carbonyle de fer

Braga, D. ; Grepioni, F.; Orpen, AG *Organometallics* **1993** , 12 (4), 1481-1483.

II.6.1.6. L'hybridation d^2sp^3 :

II.6.1.6.1 Formation de SF_6 :



Schéma

Dans la formation de SF_6 , ces six orbitales hybrides sp^3d^2 se chevauchent avec des orbitales à moitié remplies d'atomes de fluor pour former six liaisons sigma S-F.

En raison de l'hybridation sp^3d^2 du soufre, le SF_6 a une géométrie octaédrique régulière comme le montre la figure 9.27. Toutes les six liaisons S-F dans SF_6 ont la même longueur de liaison.

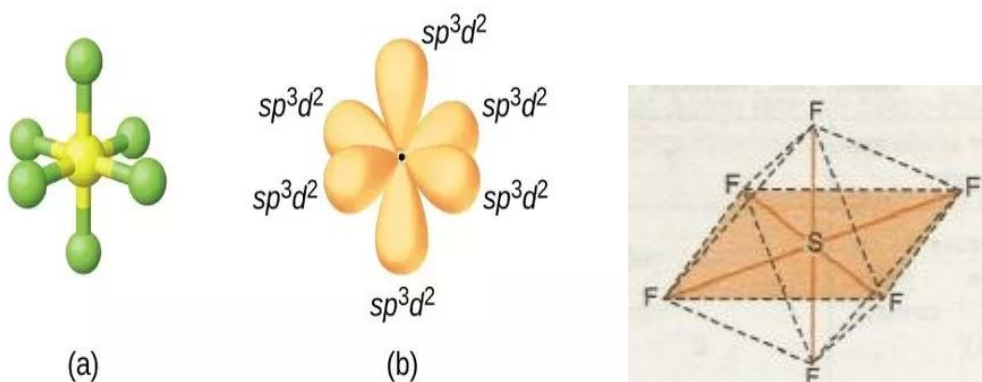
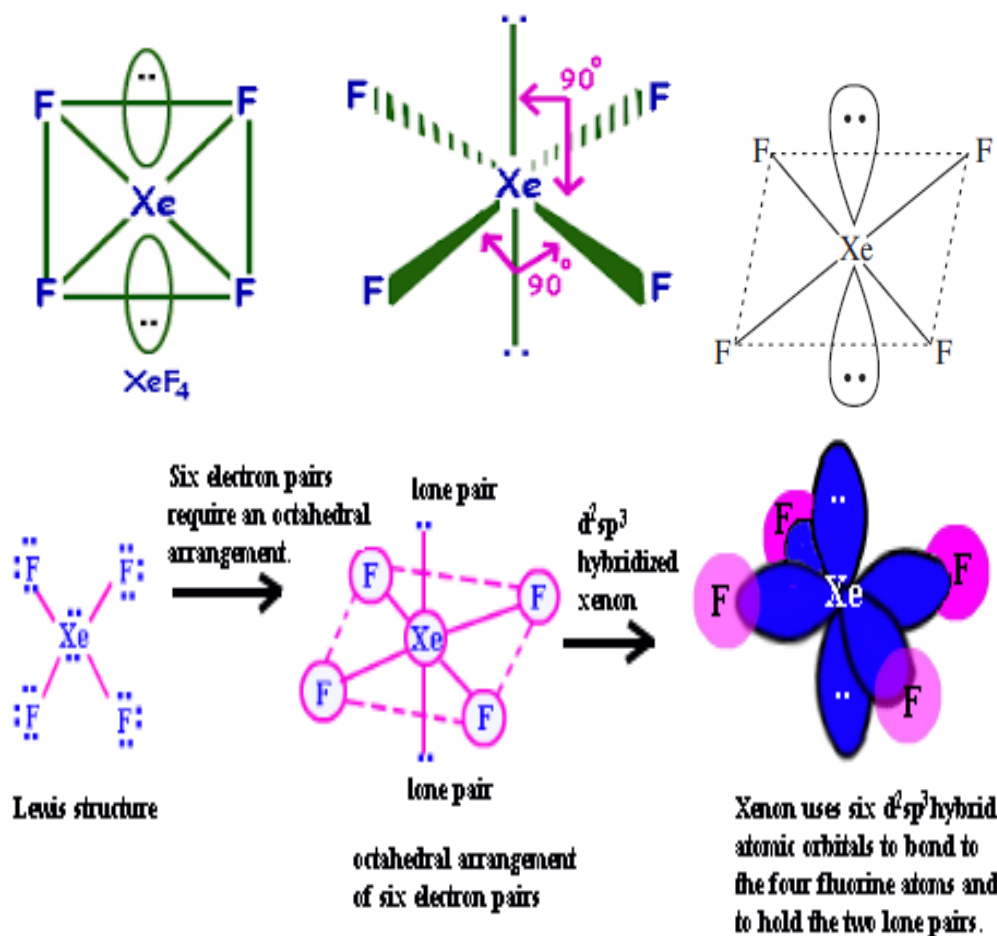


Schéma II.6.14 : L'hybridation d^2sp^3 :

Respect du principe d'exclusion de PAULI à chaque fois, bien entendu.

Hybridation XeF_4

L'hybridation des orbitales a lieu dans l'atome central Xénon. La coquille de valence de Xe contient deux électrons en orbite 5s et six électrons en orbite 5p. Dans la 5e orbite, il y a une place pour d orbitale et f orbitale, les deux étant vides.

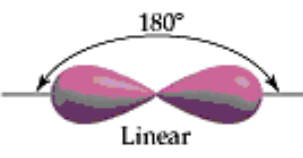
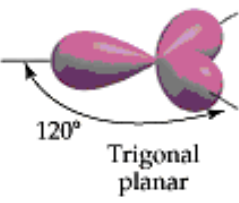
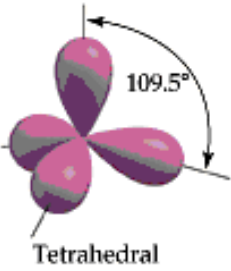
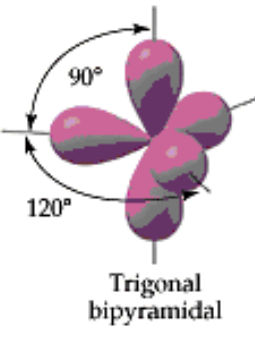
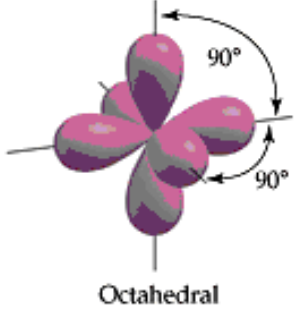


Parmi les électrons 5s et 5p dans l'orbite la plus à l'extérieur de Xe, deux des électrons orbitaux 5p sont excités par l'orbitale 5d vacante, ce qui donne 4 électrons hybrides non appariés, 2 en 5p et 2 en orbitales 5d.

Quatre atomes de fluor se lient à ces quatre électrons. Les deux paires d'électrons non hybridés restantes sont libres de chaque côté de l'atome central.

Forme de XeF_4

Nombre total de paires d'électrons dans la coquille de valence du centre Atome
 $Xe = (8 + 4) / 2 = 6$ Nombre de paires de liaisons = 4 Nombre de paires isolées = 2
 Par conséquent, la forme de la molécule serait carrée et plane.

TABLE 9.4 Geometric Arrangements Characteristic of Hybrid Orbital Sets			
Atomic Orbital Set	Hybrid Orbital Set	Geometry	Examples
s, p	Two sp	 Linear	BeF_2 , $HgCl_2$
s, p, p	Three sp^2	 Trigonal planar	BF_3 , SO_3
s, p, p, p	Four sp^3	 Tetrahedral	CH_4 , NH_3 , H_2O , NH_4^+
s, p, p, p, d	Five sp^3d	 Trigonal bipyramidal	PF_5 , SF_4 , BrF_3
s, p, p, p, d, d	Six sp^3d^2	 Octahedral	SF_6 , ClF_5 , XeF_4 , PF_6^-

Repérage

IB Question

State the type of hybridization shaded in red

CO₂ sp	SO₃ sp ²	SO₂ sp ²	NH₃ sp ³	CH₃COOH sp ²	H₂O sp ³	H₂CO sp ²
CO₃²⁻ sp ²	NO₂⁻ sp ²	BrF₅ d ² sp ³	XeF₂ dsp ³	ClF₃ dsp ³	XeF₄ d ² sp ³	CH₄ sp ³

State the hybridization shaded in red and number of sigma and pi bonds

5 sigma bonds
1 pi bond

19 sigma bonds
2 pi bonds

12 sigma bonds
2 pi bonds

II.6.2. Théorie de la répulsion des paires électroniques de la couche de valence

Valence Shell Pair Electron Repulsion.

Ce sont les Britanniques Nevil Sidgwick et **Herbert Powell** de l'Université d'Oxford qui ont proposé en 1940 une corrélation entre la géométrie moléculaire et le nombre des électrons de valence.

En 1957 à University College de Londres, Ronald Gillespie et Ronald Sydney Nyholm se sont appuyés sur cette idée pour proposer une théorie plus détaillée.

En 1958 Gillespie déménage à Université McMaster en Ontario et continue à développer et raffiner la théorie, de sorte qu'il est considéré comme le véritable instaurateur de cette théorie. La méthode **VSEPR** s'inscrit dans la poursuite des idées sur les liaisons chimiques de G.N Lewis (1916).

C'est une méthode simple et efficace permettant de prédire la géométrie des molécules en se basant sur la théorie de la répulsion des électrons de la couche de valence. Elle est aussi connue sous le nom de « théorie de Gillespie »

II.6.2. 1. Pré requis et supposition

La méthode **VSEPR** est fondée sur un certain nombre de suppositions, notamment concernant la nature des liaisons entre atomes :

- les atomes dans une molécule sont liés par des paires d'électrons ;
- deux atomes peuvent être liés par plus d'une paire d'électrons. On parle alors de liaisons multiples ;
- certains atomes peuvent aussi posséder des paires d'électrons qui ne sont pas impliqués dans une liaison. On parle de **doublets non liants** ;
- les électrons composant ces doublets liants ou non liants exercent les uns sur les autres des forces électriques répulsives. Les doublets sont donc disposés autour de chaque atome de façon à minimiser les valeurs de ces forces ;
- les doublets non liants occupent plus de place que les doublets liants ;
- les liaisons multiples prennent plus de place que les liaisons simples.

II.6.2. 2. Notations

Dans la suite de cet article, et suivant les usages de la méthode VSEPR, on notera l'atome central de la molécule étudiée **A**.

Les doublets non-liants, c'est-à-dire les paires d'électrons appartenant à l'atome central **A** et n'étant pas impliqués dans les liaisons seront notés **E** et **m** leur nombre.

Les doublets liants, c'est-à-dire les paires d'électrons étant impliqués dans des liaisons entre l'atome central **A** et un autre atome seront notés **X**. Le nombre de doublets liants sera noté **n**.

N.B: En ce qui concerne la géométrie de la molécule une liaison multiple est assimilable à une liaison simple c'est-à-dire que **n** est plus simplement égal au nombre d'atomes liés à **A**.

Les molécules simples, dont la géométrie est facilement définissable grâce à la méthode VSEPR sont donc de la forme : **AX_mE_n**

$AX_M E_N$

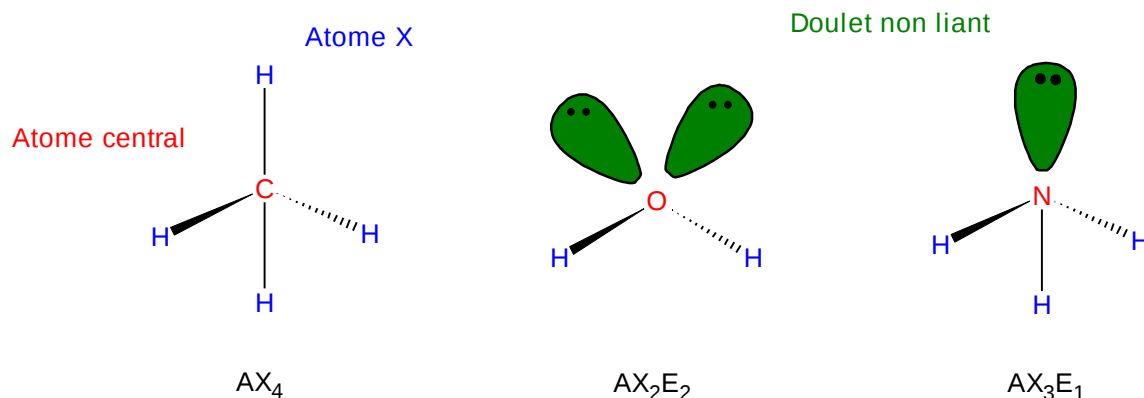
A: Atome central

X: Atome lié à A

M: Nombre d'atomes x

E: Doublet non liant

N: Nombre de doublets non liants



II.6.2.3 Méthode AX_mEn

La méthode AXE permet de définir les figures suivantes :

Type	Géométrie	Exemples
AX₁E₀ (AX₁)	<u>Linéaire</u>	<u>HF</u>
AX₁E₁	Linéaire	<u>CN⁻</u>
AX₁E₂	Linéaire	<u>O₂</u>
AX₁E₃	Linéaire	<u>HCl</u>
AX₂E₀ (AX₂)	Linéaire	BeCl ₂ , HgCl ₂
AX₂E₁	Coudée	<u>SO₂</u> , <u>O₃</u>
AX₂E₂	Coudée	<u>H₂O</u>
AX₂E₃	Linéaire	<u>KrF₂</u> , <u>XeF₂</u>
AX₃E₀ (AX₃)	<u>Trigonale plan</u>	<u>BF₃</u>
AX₃E₁	Pyramide trigonale	<u>NH₃</u>
AX₃E₂	Forme en T	<u>ClF₃</u> , BrF ₃
AX₄E₀ (AX₄)	Tétraèdre	<u>CH₄</u>
AX₄E₁	Balançoire	<u>SF₄</u>
AX₄E₂	Carré (plan)	<u>XeF₄</u>
AX₅E₀ (AX₅)	<u>Bipyramide trigonale</u>	<u>PCl₅</u>
AX₅E₁	<u>Pyramide à base carrée</u>	<u>BrF₅</u>
AX₆E₀ (AX₆)	Octaèdre	<u>SF₆</u>
AX₆E₁	Pyramide pentagonale	<u>XeF₆</u>
AX₇E₀ (AX₇)	<u>Bipyramide pentagonale</u>	<u>IF₇</u>
AX₆E₁	Pyramide pentagonale	XeOF ₅ ⁻
AX₅E₂	Pentagone (plan)	XeF ₅ ⁻
AX₈E₀ (AX₈)	Carré antiprismatique	XeF ₈ ²⁻

II.6.2.4. Géométrie des molécules

Molécules bidimensionnelles

Cette méthode considère que tous les doublets liants (notés X) et non liants (notés E) se repoussent mutuellement afin de minimiser l'énergie de répulsion entre les paires électroniques. Le schéma de répulsion se visualise aisément en plaçant les paires électroniques les plus éloignées possibles les unes des autres à la surface d'une sphère et dont le centre est l'atome centrale (A).

Les figures de répulsions sont notées AX_mE_n où m et n représentent respectivement le nombre de doublets liants et non-liants (méthode AXE) de répulsion montrant la répartition des doublets de la couche de valence d'un atome avec exemples de molécules. La figure de répulsion est différente de la géométrie de la molécule s'il existe des doublets non-liants.

Les molécules d'eau et d'ammoniac présentent une figure de répulsion tétraédrique, alors H_2O a une forme coudée et l'ammoniac une forme de pyramide trigonale.

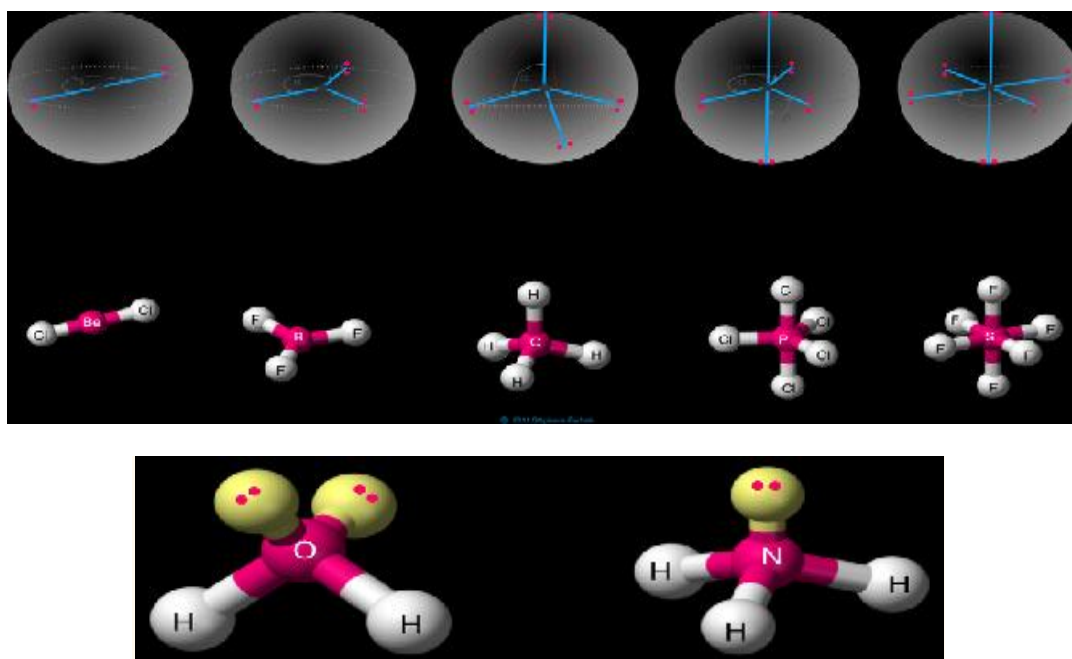


Schéma II.6.15 : Géométrie des molécules

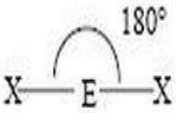
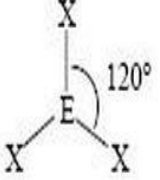
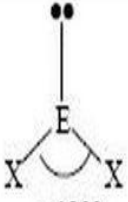
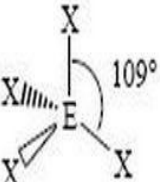
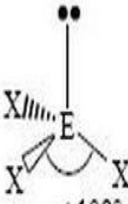
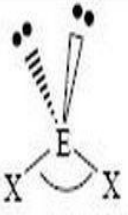
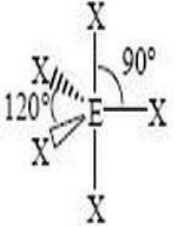
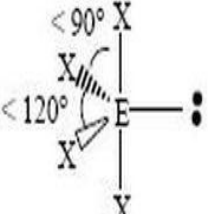
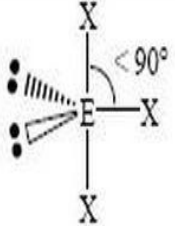
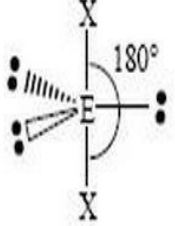
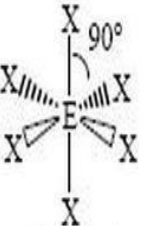
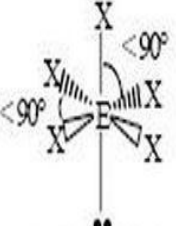
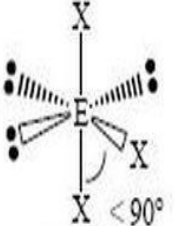
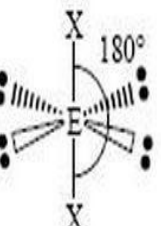
 Linear				
 Trigonal Planar	 Bent or Angular			
 Tetrahedral	 Trigonal Pyramid	 Bent or Angular		
 Trigonal Bipyramid	 Sawhorse or Seesaw	 T-shape	 Linear	
 Octahedral	 Square Pyramid	 Square Planar	 T-shape	 Linear

Schéma II.6.17 : Géométrie des molécules

II.7 Moments dipolaires permanents

II.7.1 Définition

Il s'agit d'une grandeur vectorielle que l'on peut associer à toute liaison polarisée. Il est notée p (parfois μ) et ses caractéristiques sont les suivantes :

- sa direction est celle joignant les deux atomes liés.
- il est orienté de la charge partielle négative vers la charge partielle positive
- sa valeur s'exprime en Debye (symbole D), elle est proportionnelle à la valeur des charges partielles ainsi qu'à distance les séparant.

Exemple

Vecteurs moment dipolaire de la molécule de chlorure d'hydrogène

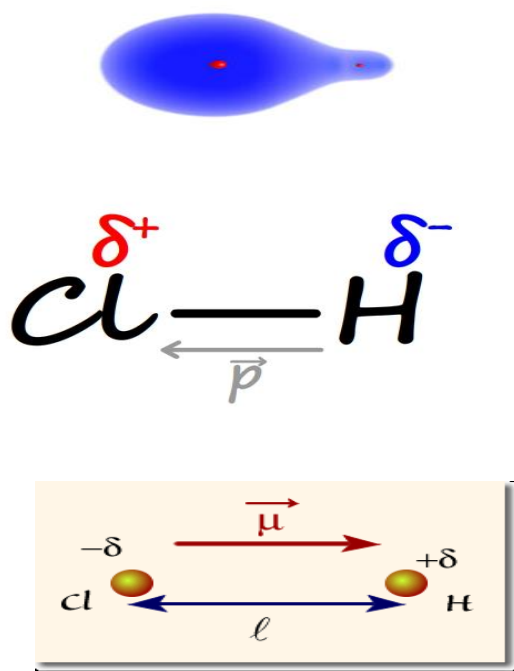


Schéma II.7.1 : La molécule est toujours globalement neutre, puisque le nombre d'électrons n'a pas varié.

$$\mu = \|\delta\| \times l$$

μ en $C.m$;

δ en Coulomb (C) ;

l en mètre (m)

II.7.2 Caractère ionique

Le caractère ionique d'une liaison est obtenu par :

$$\% \text{ de caractère ionique} = 100 \times \mu (\text{expérimental}) / \mu (\text{calculé})$$

μ (expérimental) se mesure aussi il est proposé dans les tables.

μ (calculé) ou μ (théorique) ou μ (maximum) il correspond au moment ou la charge est de $\delta = +e$ il en résulte que μ (théorique) = $e.d$

L'unité du moment dipolaire est le Debye $1D = 3,33564 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$

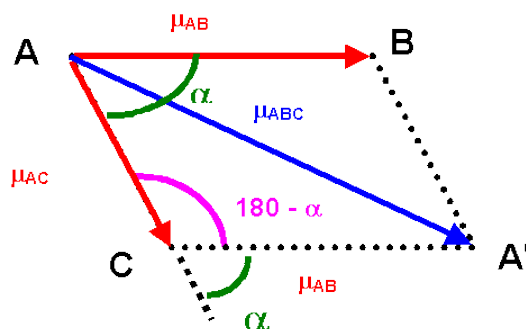
Repérages

Repérage 1 : La molécule d'eau possède un moment dipolaire global

$$\mu (\text{H}_2\text{O}) = 1,845 \text{ D.}$$

L'angle des liaisons O-H dans la molécule d'eau étant de $104,5^\circ$ et la longueur de la liaison O - H de $0,95 \text{ \AA}$.

- calculer le caractère ionique partiel de la liaison O - H.
- Ce fort moment dipolaire fait de l'eau un solvant très polaire.
- Il a pour autre conséquence que les points d'ébullition et de fusion de l'eau sont anormalement élevés. Justifier ce fait expérimental.



SchemaII.7.2 :moment dipolaire global

$$m_{ABC}^2 = m_{AB}^2 + m_{AC}^2 + 2 m_{AB} m_{AC} \cos \alpha$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}}^2 = m_{\text{OH}}^2 + m_{\text{OH}}^2 + 2 m_{\text{OH}} m_{\text{OH}} \cos \alpha$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}}^2 = 2 m_{\text{OH}}^2 (1 + \cos \alpha)$$

$$m_{\text{OH}}^2 = m_{\text{H}_2\text{O}}^2 / 2 (1 + \cos \alpha)$$

$$m_{\text{OH}}^2 = 1,845^2 / 2 (1 + \cos 104,5) = 2,27$$

$$m_{\text{OH}} = 1,51 \text{ D} = 5,018 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$$

$$m = d \cdot \delta$$

$$d = m / d = 5,018 \cdot 10^{-30} / 0,95 \cdot 10^{-10} = 5,28 \cdot 10^{-20} \text{ C} = 0,33 \text{ e}$$

La liaison OH est ionique à 33%

Il a pour autre conséquence que les points d'ébullition et de fusion de l'eau sont anormalement élevés. Justifier ce fait expérimental.

Dans l'eau, il existe des liaisons Hydrogène inter moléculaires qui unissent les molécules entre elles. Les points d'ébullition et de fusion sont donc fortement augmentés.

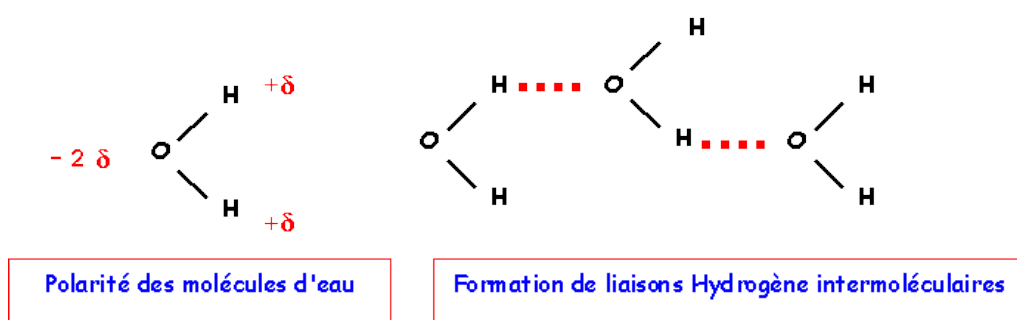


Schéma II.7.3 : La liaison OH

Repérage 2 :

La molécule SO_2 a une géométrie en V ; l'angle des deux liaisons S-O est de 119° . Son moment dipolaire mesuré est de 1,65 D ($1 \text{ D} = 0,333 \cdot 10^{-29} \text{ C. m}$).

- Donner la structure de Lewis de cette molécule.
- Montrer qu'on peut la décrire par deux structures mésomères obtenues soit en "excitant" S, soit en "excitant" O. La longueur de liaison expérimentale est de $1,43 \text{ \AA}$.
- Comparer à la valeur calculée. Conclusion ? Calculer le pourcentage d'ionicté de ces liaisons. Calculer les charges partielles portées par chaque atome.

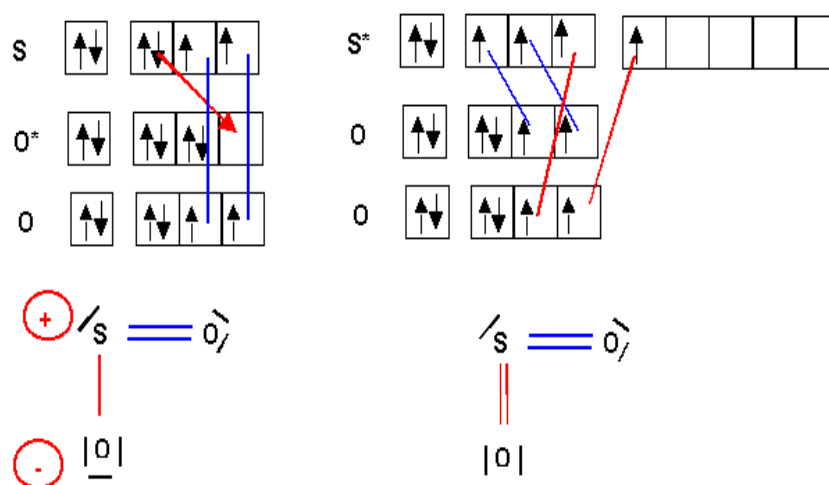


Schéma II.7.4 : molécule SO_2 géométrie en V

La géométrie de la molécule est bien du type AX_2E en forme de V avec un angle proche de 120° .

La valeur expérimentale de l'angle 119° est justifiée par la présence du doublet libre qui est pratiquement compensée par celles des deux doubles liaisons, l'effet du doublet libre l'emporte tout de même et l'angle est très légèrement inférieur à 120° .

Si on examine les deux formes mésomères on accordera un poids statistique plus important à la forme à deux doubles liaisons et non chargée puisqu'elle possède à la fois d'avantage de liaisons et moins de charges que l'autre forme.

Remarque : la règle de l'octet n'est pas respectée pour cette forme alors qu'elle l'est pour l'autre, mais cette règle ne s'applique strictement qu'aux éléments de la deuxième période ce qui n'est pas le cas du soufre.

On peut aussi s'intéresser à la longueur expérimentale des liaisons.

$Z^*_S = 5,45$, $n^*_S = 3$, $Z^*_O = 4,55$, $n^*_O = 2$ soit pour les longueurs des liaisons S - O :

Simple $1,72 \text{ \AA}$ - Double : $1,48 \text{ \AA}$ - Triple $1,34 \text{ \AA}$

La longueur réelle de la liaison de $1,43 \text{ \AA}$ est légèrement plus courte que la valeur approchée calculée pour la liaison double SO. Cela est en accord avec l'hypothèse que la forme mésomère à doubles liaisons est bien la forme la plus représentative de la molécule réelle. Nous verrons que le raccourcissement observé peut être attribué à la forte polarité de la liaison SO.

II.7.3 Calcul des charges partielles et du pourcentage d'ionicté :

Les moments dipolaires des liaisons s'ajoutent vectoriellement, leur résultante est le moment dipolaire global de la molécule. Ici le moment dipolaire global est connu et nous cherchons le moment dipolaire partiel d'une liaison SO qui nous permettra ensuite de déterminer le pourcentage d'ionicté de la liaison.

Nous négligerons le moment dipolaire partiel du au doublet libre qu'il est impossible d'évaluer.

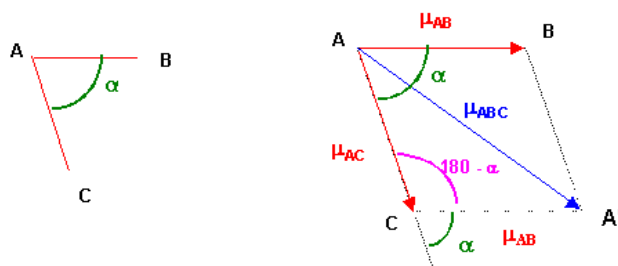


Schéma II.7.

Théorème de Pythagore généralisé : Triangle ACA'

$$m_{ABC}^2 = m_{AB}^2 + m_{AC}^2 - 2 m_{AB} m_{AC} \cos (180 - a)$$

$$m_{ABC}^2 = m_{AB}^2 + m_{AC}^2 + 2 m_{AB} m_{AC} \cos a$$

Ici on a de plus $m_{AB} = m_{AC} = m_{SO}$

$$m_{SO_2}^2 = m_{SO}^2 + m_{SO}^2 + 2 m_{SO} m_{SO} \cos a$$

$$m_{SO_2}^2 = 2 m_{SO}^2 + 2 m_{SO}^2 \cos a$$

$$m_{SO_2}^2 = 2 m_{SO}^2 (1 + \cos a)$$

$$\text{Soit } m_{SO}^2 = m_{SO_2}^2 / 2 (1 + \cos a)$$

Application numérique :

$$m_{SO}^2 = 1,65^2 / 2 (1 + \cos 119) = 2,64$$

$$m_{SO} = 1,625 \text{ D}$$

$$\%I_{SO} = 20,8 * 1,625 / 1,43 = 23,6 \%$$

$$\text{Soit } d = 0,24 \text{ e} = 3,68 \cdot 10^{-20} \text{ C}$$

Cette liaison 24 % ionique est plus polarisée que la liaison H-Cl pour laquelle le pourcentage d'ionicté n'est que de 17 %, cette forte ionicté justifie le raccourcissement de la liaison observé.

Repérage 3 :

Sachant que le moment dipolaire partiel de liaison m_{N-O} est de 0,15 D :

a) calculer le moment dipolaire global de l'ion NO_3^- .

b) calculer le moment dipolaire global de la molécule NO_2 ($a = 134^\circ$).

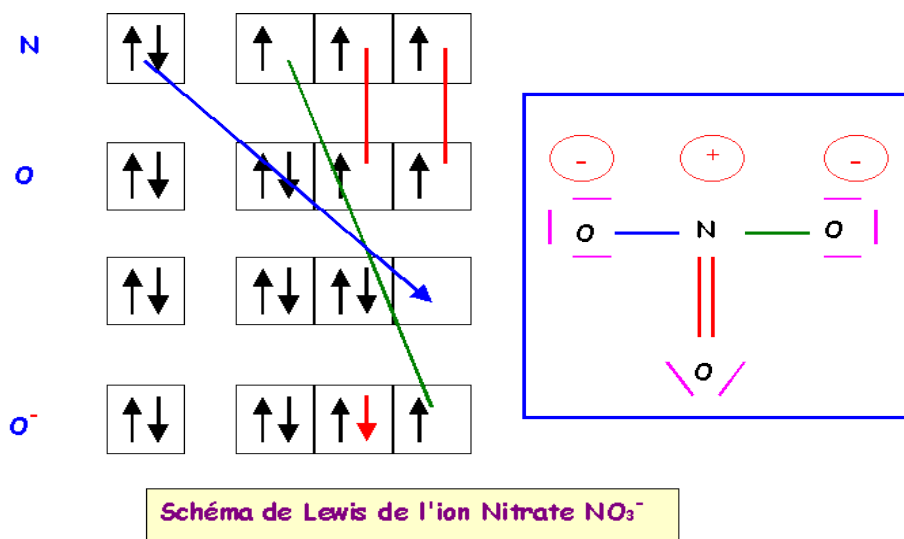


Schéma : de Lewis



Schéma : De Lewis

La géométrie de cet ion est du type AX_3 parfaitement symétrique, triangle équilatéral parfait avec trois angles de 120° exactement.

En raison de cette symétrie parfaite le moment dipolaire global de NO_3^- sera nul, en effet la résultante de deux des vecteurs μ_{NO} donne un vecteur exactement opposé au troisième vecteur μ_{NO} et il y a donc annulation du moment dipolaire global. Cela se voit facilement graphiquement mais on peut aussi le vérifier par le calcul.



Schéma : Moment dipolaire

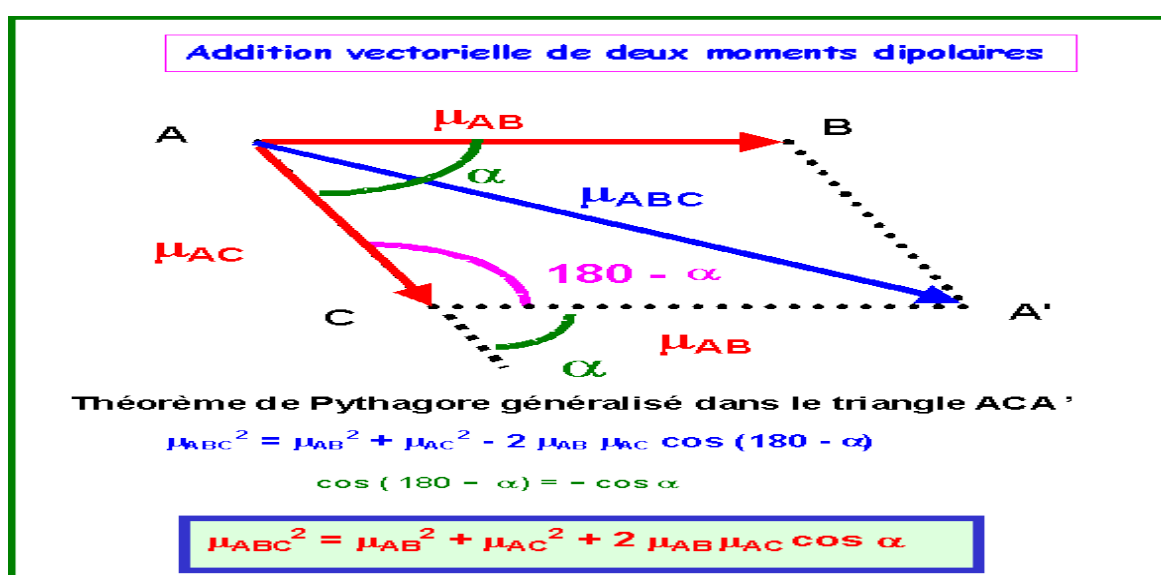


Schéma : Moment dipolaire

Dans notre cas : $a = 120^\circ$ et $\cos a = -0,5$, de plus, $m_{AB} = m_{AC}$

$$m_{ABC}^2 = m_{AB}^2 + m_{AC}^2 + 2 m_{AB} m_{AC} \cos a$$

$$m_{ABC}^2 = 2 m_{AB}^2 + 2 m_{AB}^2 * -0,5$$

$$m_{ABC}^2 = 2 m_{AB}^2 - m_{AB}^2 = m_{AB}^2$$

$$m_{ABC} = m_{AB}$$

On obtient bien un vecteur opposé au troisième à Résultante totale nulle.

b) calculer le moment dipolaire global de la molécule NO_2 ($a = 134^\circ$).

Dans ce cas : $a = 134^\circ$ et $\cos a = -0,695$, de plus, $m_{AB} = m_{AC}$

$$m_{ABC}^2 = m_{AB}^2 + m_{AC}^2 + 2 m_{AB} m_{AC} \cos a$$

$$m_{ABC}^2 = 2 m_{AB}^2 + 2 m_{AB}^2 \cos a = 2 m_{AB}^2 (1 - \cos a)$$

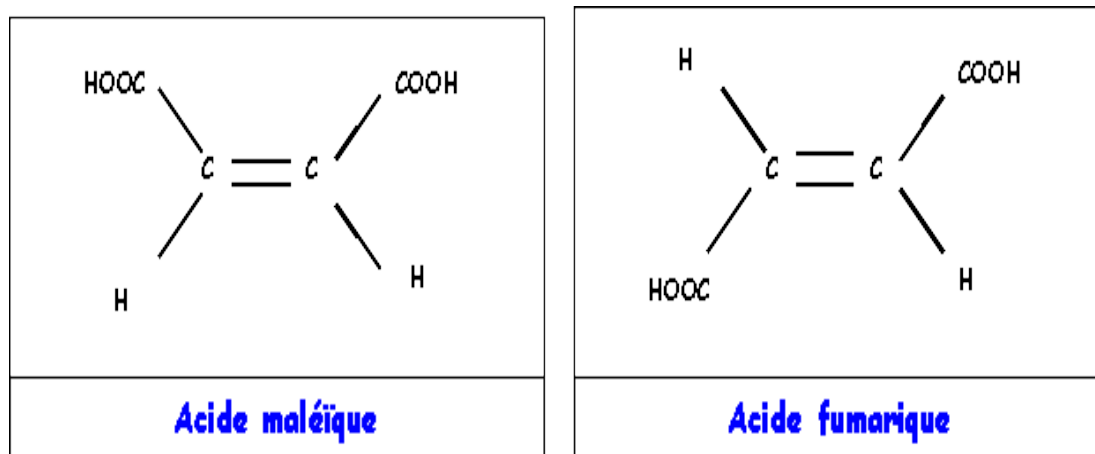
$$m_{ABC}^2 = 2 * 0,15 * (1 + 0,695) = 0,5085$$

$$m_{ABC} = 0,713 \text{ D}$$

$$m_{\text{NO}_2} = 0,713 \text{ D}$$

Repérage 4 : Acide maléique et acide fumarique

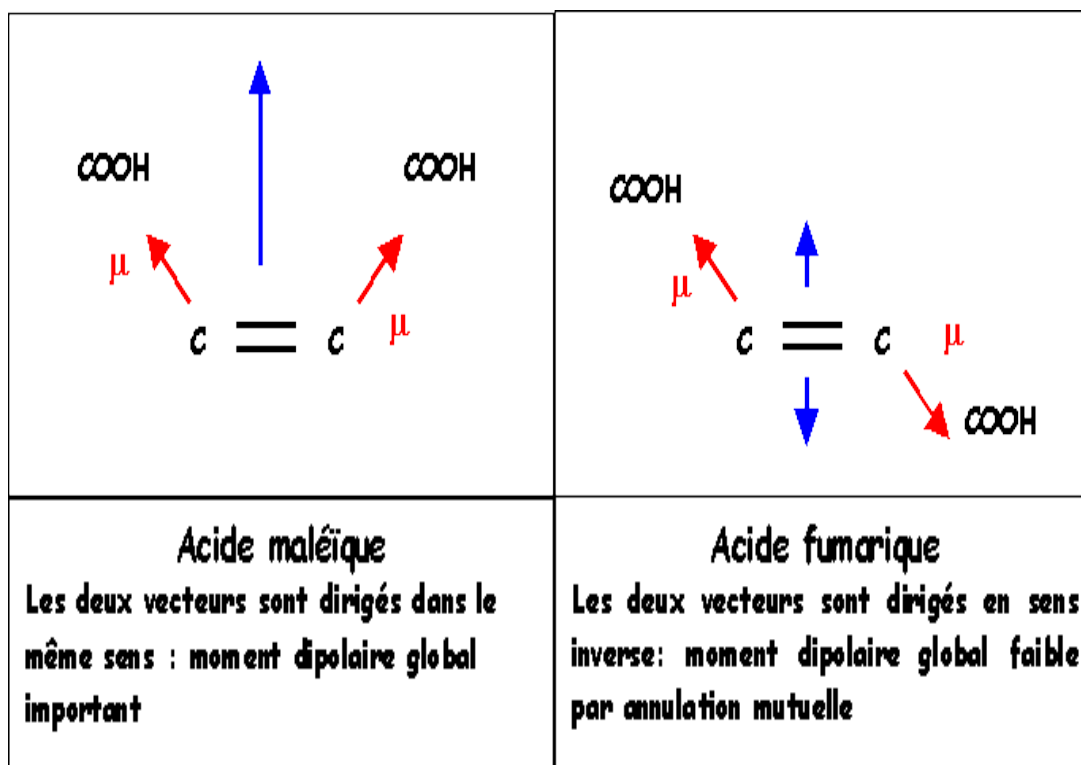
Ces deux composés isomères ont la même formule brute $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4$ et présentent les structures suivantes :



Schéma

1. En supposant que le groupement COOH soit très électronégatif (et donc plus électronégatif que C) et en négligeant la polarité des liaisons $\text{C} - \text{H}$, montrer

qualitativement que les moments dipolaires globaux des deux isomères doivent être très différents l'un de l'autre. Quel est l'isomère possédant le moment dipolaire le plus élevé? Quel est l'isomère possédant le moment dipolaire le plus faible?



Schéma

2) Solubilité dans l'eau des acides maléique et fumarique

Sachant que les molécules polaires sont très solubles dans les solvants polaires alors que les substances peu polaires le sont beaucoup moins, prévoir lequel des deux acides maléique ou fumarique est le plus soluble dans l'eau.

L'acide maléique polaire sera le plus soluble dans l'eau.

1) Point de fusion des acides maléique et fumarique

L'un de ces deux acides possède un point de fusion de 130°C et l'autre un point de fusion de 226°C. Justifiez cette forte différence et attribuez son point de fusion à chaque isomère.

Il existe ici des liaisons Hydrogène intramoléculaires dans l'acide maléique qui n'existent pas pour l'acide fumarique. Ces liaisons intramoléculaires provoquent un fort abaissement des températures de changement d'état. Les liaisons se

faisant à l'intérieur de la même molécule, les molécules sont plus individualisées. Inversement l'existence de liaison intermoléculaire (entre molécules différentes) dans l'acide fumarique augmente ses températures de changement d'état.

Acide maléique : liaisons H intramoléculaires à Point de Fusion abaissé $T_f = 130^\circ\text{C}$

Acide fumarique : liaisons H intermoléculaires à Point de Fusion élevé $T_f = 226^\circ\text{C}$

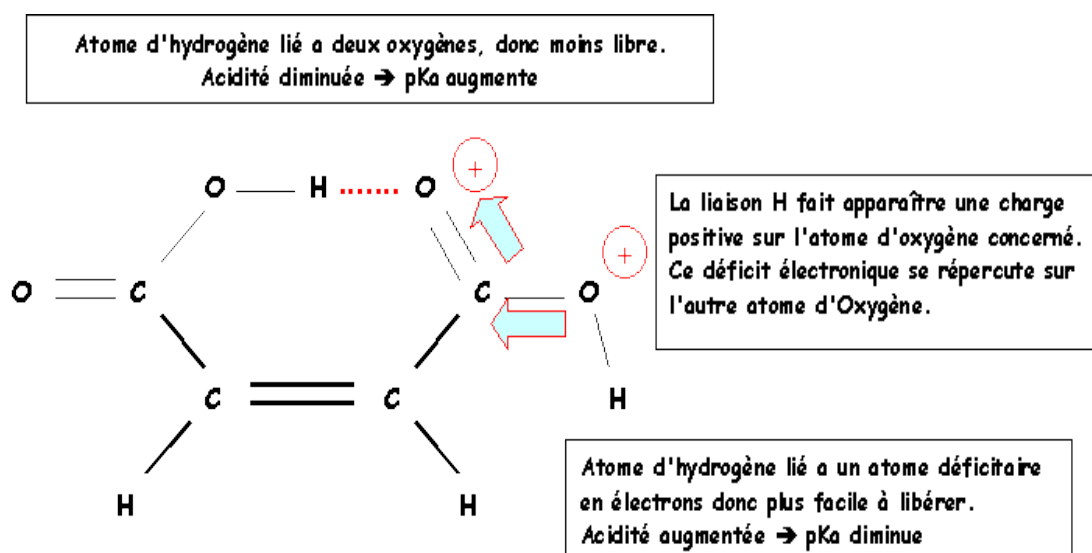
2) Constantes d'acidité des acides maléique et fumarique

L'un des deux isomères possède les pK_a suivants : $pK_1 = 3$ et $pK_2 = 4,4$

L'autre isomère possède les pK_a suivants : $pK_1 = 1,9$ et $pK_2 = 6,2$

On voit que l'un des deux composés possède simultanément le pK_1 le plus petit et le pK_2 le plus grand. Justifier ce fait expérimental par un/des schéma(s).

Attribuer à chaque isomère les valeurs de ces deux pK_a .

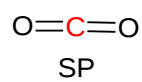
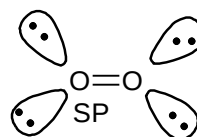
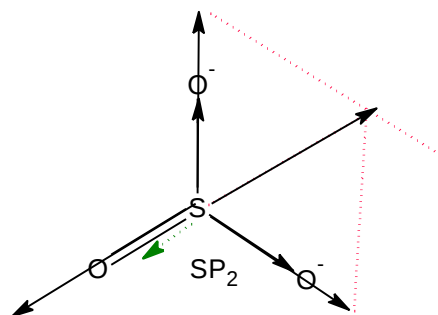
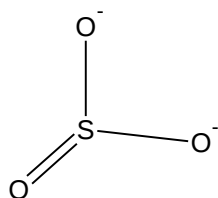
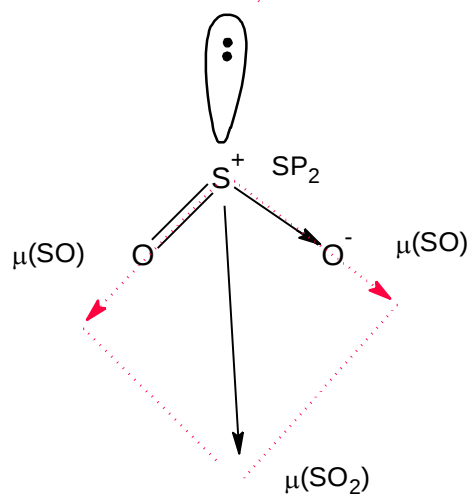
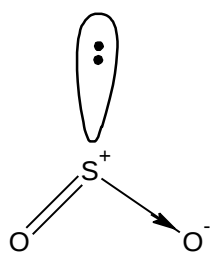
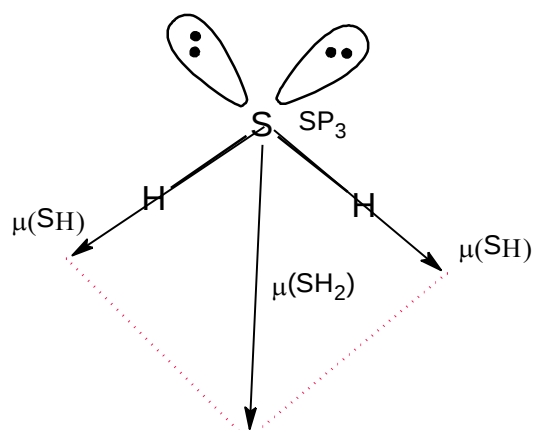
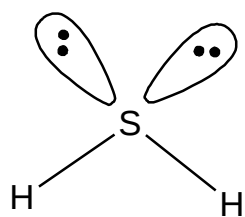


L'acide maléique à liaison Hydrogène intramoléculaire possède à la fois le pK_1 le plus petit et le pK_2 le plus élevé.

Acide maléique : $pK_1 = 1,9$ et $pK_2 = 6,2$

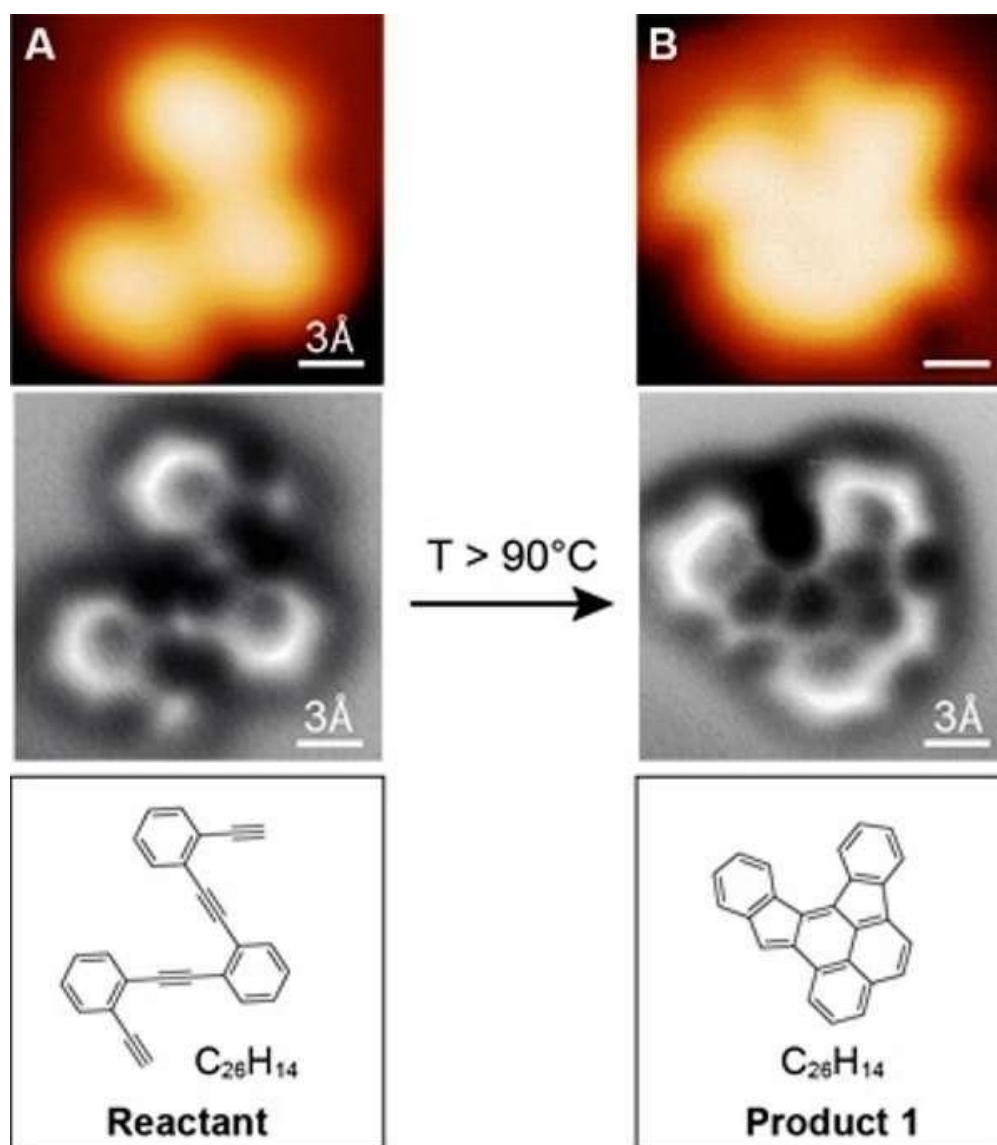
Acide fumarique : $pK_1 = 3$ et $pK_2 = 4,4$

Repérage



II.8 Délocalisation électronique / Mésonérie

II.8.1 Mise en évidence de la mésonérie ; formes résonantes.

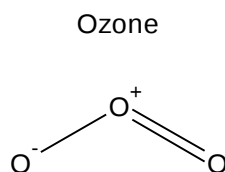


Ces images montrent les effets de réactions de cyclisation observées dans une molécule organique déposée sur une surface en argent.

En haut, des images de la molécule avant (A) et après (B) la réaction, obtenues avec un microscope à effet tunnel. Au milieu, les images réalisées avec un microscope à force atomique en mode sans contact. L'amélioration de la résolution qui montre maintenant clairement et directement des liaisons covalentes est impressionnante. La barre d'échelle matérialise 0,3 nanomètre.
Ref : *UC Regents*, 2013

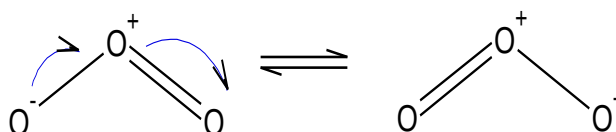
II.8.2 Mise en évidence de la mésomérie ; formes résonantes.

La molécule d'ozone O_3 a pour formule de Lewis :



Dans cette description, une des liaisons O-O est plus courte et plus énergétique que l'autre (la liaison double) ; de même, un atome d'oxygène terminal est chargé alors que l'autre est neutre. Or, des mesures expérimentales montrent que les deux liaisons sont équivalentes, et que les atomes d'oxygène terminaux sont également équivalents. Ces faits sont inexplicables avec la formule de Lewis proposée.

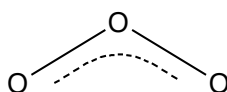
On peut remarquer qu'il est possible d'écrire deux formules de Lewis équivalentes, dans lesquelles les rôles des atomes d'oxygène terminaux et les rôles des liaisons sont échangés :



Les formes limites

Ces deux formules ne diffèrent que par la localisation de certains électrons : les deux électrons de la liaison π et les deux électrons d'un doublet non liant. Elles sont appelées des formes mésomères ou des formes résonantes ou des formes limites de l'ozone.

Les quatre électrons sont délocalisés sur les deux atomes d'oxygène terminaux et les deux liaisons ; c'est le phénomène de mésomérie. On peut schématiser la délocalisation électronique sur l'hybride de résonance, dans lequel les pointillés représentent l'ensemble des sites sur lesquels les électrons sont délocalisés.



La forme résonante

C'est la considération de l'ensemble des formes résonantes qui permet de décrire la réalité de la répartition électronique au sein de la molécule

Règles d'écriture des formules mésomères. La délocalisation électronique concerne exclusivement les électrons π , c'est-à-dire :

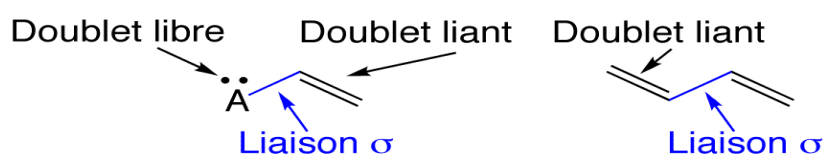
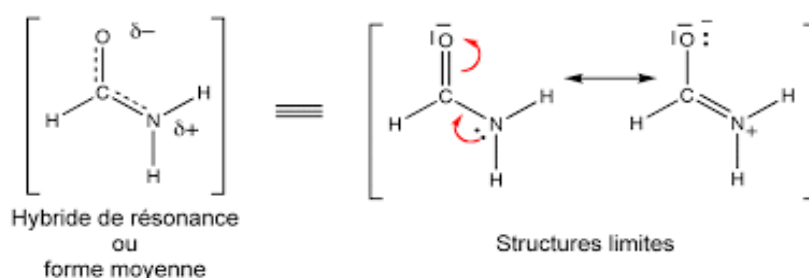
- les électrons des liaisons π ,
- les électrons non liants, qu'il s'agisse de doublets ou d'électrons célibataires.

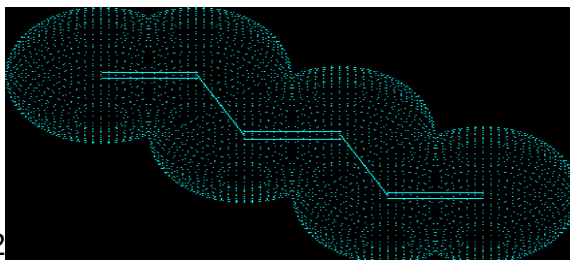
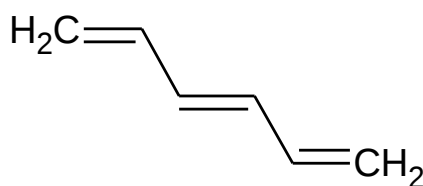
Étant donné que seuls les électrons π sont répartis différemment d'une forme limite à l'autre, l'écriture des formes mésomères d'une même molécule obéit à certaines règles :

- toutes les formes résonantes ont le même squelette, car les électrons σ ne sont pas affectés par la délocalisation électronique ;
- toutes les formes résonantes ont le même nombre d'électrons de valence ;
- toutes les formes résonantes ont la même charge globale.

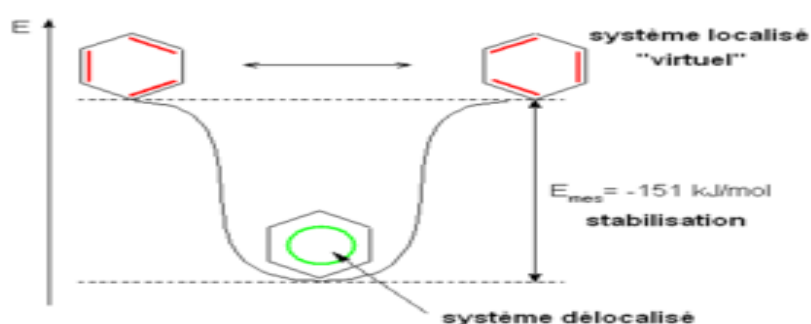
Pour une molécule donnée, toutes les formes résonantes ne contribuent pas nécessairement autant à la description de la molécule. Certaines sont plus probables que d'autres, c'est-à-dire qu'elles apportent plus d'informations pertinentes sur la localisation des électrons. Une forme limite a d'autant plus de poids dans la description de la répartition électronique que :

- Les atomes respectent la règle de l'octet ou ont une hyper valence compatible avec leur configuration électronique ;
- Les charges formelles sont en accord avec les électronégativités des atomes (cette règle n'étant pas prioritaire sur la précédente) ;
- les charges formelles sont les plus petites possibles ;
- les charges formelles, surtout de même signe, sont les plus éloignées possibles.





II.8.3 Etude de la molécule de benzène



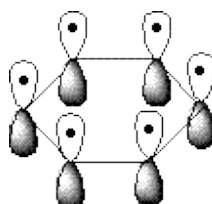
Aromaticité des molécules

Règle de Huckel :

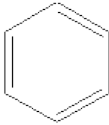
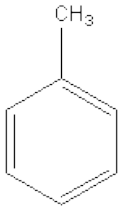
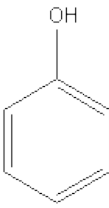
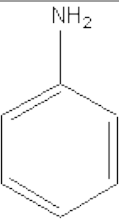
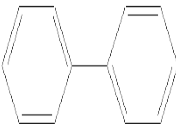
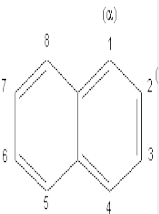
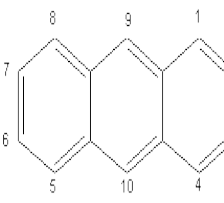
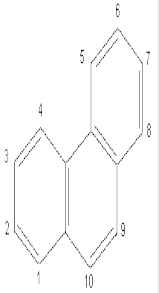
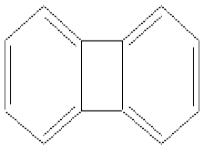
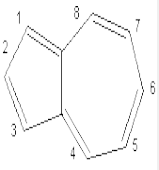
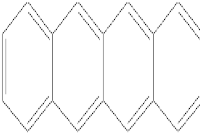
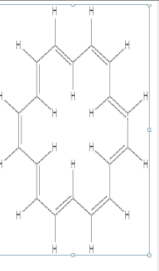
Un composé est aromatique si :

- il est cyclique.
- tous les atomes du cycle possèdent une orbitale p.
- il est plan (ou quasiment plan) de façon à permettre un recouvrement des orbitales p (celles-ci sont donc perpendiculaires au plan du cycle).
- il possède **4n+2 électrons** p , avec n entier, valant 1,2,3,..... engagés dans le recouvrement des orbitales , ainsi le benzène (6 électrons p donc n=1); le [18] annulène * (18 électrons p donc n=4)...
- de la délocalisation des électrons p résulte une diminution de l'énergie électronique.

Exemple du benzène

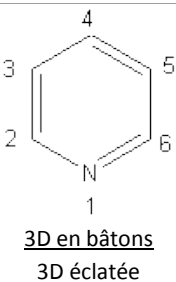
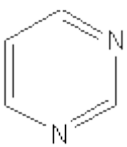
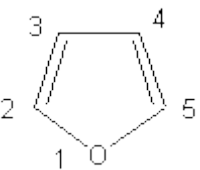
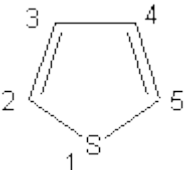
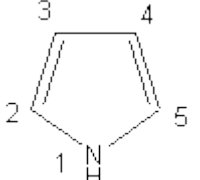
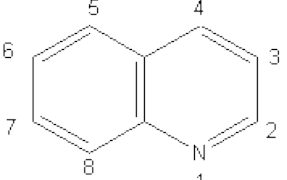
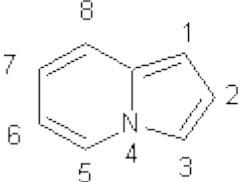


2) Exemples d'hydrocarbures aromatiques:

BENZENE (C_6H_6)		TOLUENE (C_7H_8)	
PHENOL (ou Benzénol (IUPAC) ou Benzoph énol) (C_6H_6O)		ANILINE (C_6H_7N)	
DIPHENYLE ($C_{12}H_{10}$)		NAPHTALENE ($C_{10}H_8$)	
ANTHRACENE ($C_{14}H_{10}$)		PHENANTHRENE ($C_{14}H_{10}$)	
DIPHENYLENE ($C_{12}H_8$)		AZULENE ($C_{10}H_8$) <u>3D éclaté</u> <u>3D en bâtons</u>	
TETRACENE (ou Naphtacène) ($C_{18}H_{12}$)		[18]ANNULENE ou cyclooctadéca- 1,3,5,7,9,11,13,15,17 7-nonaène ($C_{18}H_{18}$)	

3) Exemples d'hétérocycles aromatiques:

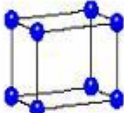
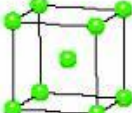
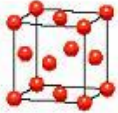
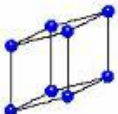
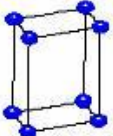
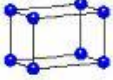
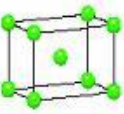
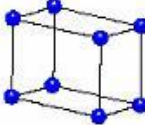
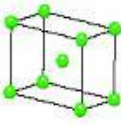
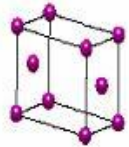
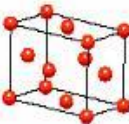
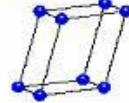
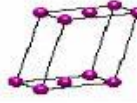
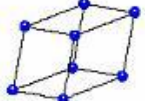
La règle de Hückel peut être étendue à des hétérocycles :

PYRIDINE (C_5H_5N)		PYRIMIDINE ($C_4H_4N_2$)	
FURANNE (C_4H_4O)		THIOPHENE (C_4H_4S)	
PYRROLE (C_4H_5N)		QUINOLEINE (C_9H_7N)	
INDOLIZINE (C_8H_7N)			

Annexes

Energie de dissociation de quelques molécules

Liaison	ΔH (kJ/mol)	Liaison	ΔH (kJ/mol)
$H_3C - I$	234	$C_6H_5CH_2 - H$	368
$H_3C - OH$	380	$CH_2=CHCH_2 - H$	361
$H_3C - OCH_3$	335	$CH_2=CH - H$	444
$CH_3CH_2 - H$	420	$C_6H_5 - H$	464
$CH_3CH_2 - F$	444	$HC\equiv C - H$	552
$CH_3CH_2 - Cl$	338	$H_3C - CH_3$	376
$CH_3CH_2 - Br$	285	$CH_3CH_2 - CH_3$	355
$CH_3CH_2 - I$	222	$CH_3CH_2CH_2 - CH_3$	355
$CH_3CH_2 - OH$	380	$CH_3CH_2 - CH_2CH_3$	343
$CH_3CH_2 - OCH_3$	335	$(CH_3)_2CH - CH_3$	351
$CH_3CH_2CH_2 - H$	410	$(CH_3)_3C - CH_3$	339
$CH_3CH_2CH_2 - F$	444	$HO - H$	498
$CH_3CH_2CH_2 - Cl$	338	$HOO - H$	377
$CH_3CH_2CH_2 - Br$	285	$HO - OH$	213
$CH_3CH_2CH_2 - I$	222	$CH_3CH_2O - OCH_3$	184
$CH_3CH_2CH_2 - OH$	380	$CH_3CH_2O - H$	436
$CH_3CH_2CH_2 - OCH_3$	335		

Mode de réseau Système	Primitif P	centré I	Bases centrées C	Faces centrées F	Éléments de symétrie
Cubique $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$					$3C_4, 4C_3, 6C_2$ $i, 9\sigma$
Rhomboédrique $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$					$1C_3, 3C_2, i$ 3σ
Hexagonal $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ \neq \gamma=120^\circ$					$1C_6, 6C_2, i$ 7σ
Quadratique $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$					$1C_4, 4C_2, i$ 5σ
Orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$					$3C_2, i$ 3σ
Monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$					$1C_2, i$ 1σ
Triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$					i

Les 14 réseaux de Bravais

Préfixe	Symbole	Facteur multiplicatif	Puissance
Yotta	Y	1 000 000 000 000 000 000 000 000	10^{24}
Zetta	Z	1 000 000 000 000 000 000 000	10^{21}
Exa	E	1 000 000 000 000 000 000	10^{18}
Péta	P	1 000 000 000 000 000	10^{15}
Téra	T	1 000 000 000 000	10^{12}
Giga	G	1 000 000 000	10^9
Méga	M	1 000 000	10^6
kilo	k	1 000	10^3
hecto	h	100	10^2
déca	da	10	10^1
		1	10^0
déci	d	0,1	10^{-1}
centi	c	0,01	10^{-2}
milli	m	0,001	10^{-3}
micro	μ	0,000 001	10^{-6}
nano	n	0,000 000 001	10^{-9}
pico	p	0,000 000 000 001	10^{-12}
femto	f	0,000 000 000 000 001	10^{-15}
atto	a	0,000 000 000 000 000 001	10^{-18}
zepto	z	0,000 000 000 000 000 000 001	10^{-21}
yocto	y	0,000 000 000 000 000 000 000 001	10^{-24}

Bibliographie

1. Pierre Gréças, Agrégé des universités, Descriptive organique - minérale, Math sup et Spé P.P Deug A. (Lavoisier) 1988, Paris. ISBN 2-85206-480-4.
2. J.Fisher et J.R.P Arnold, Chimie pour biologistes, Ecole de chimie et Ecole de biologie, university of Leeds, Leeds, UK. Berti éditions, ISBN : 2-911808-16-9.
3. N. LUMBROSO - BRADER, J.FICINI, J.C. DEPEZAY ; Elément de physique - chimie, Premier cycle médicales, Hermann collection 1977 Paris. ISBN 2 7056 5875 0.
4. Carol Mc.Quarrie. Donald McQuarrie. Peter A.Rock; Chimie générale, University of California,Davis, de Boeck Université, ISBN 2-8041-3703-1.

5. J. Mathieu, R. Panico, J.WELL-Raynal ; Introduction à la synthèse organique; Hermann, Paris 1985, ISBN 2 7056 5966 8.
6. Mourad AMARA ; Chimie générale et organique ; Office des publications universitaires ; Edition 1.03.5773; ISBN 978.99610.2032.6, 2017.
7. G. Ouahes ; Sciences Biomédicales; Sciences de la nature, codification 1.03.268, OPU Alger.
8. Vollhardt .Schore ; Traité de chimie organique ; de Boeck Université, 2-8041 3153 X.
9. A. Michel et J. Bénard ; Chimie minérale; cours de chimie, Licence es sciences; Masson et Cie éditeur 1964.
10. J. Wiemann, Y.Pascal, J.Chuche; Relation entre la structure et les relations physiques; 1965, Masson et Cie, 1965 Paris VI.
11. G.M-L. Dumas, M.Gros, L. Shrever, Chimie générale TD, Etude mediales et pharmaceutiques, 196 Hermann, 75015 Paris ISBN 1986 2 7056 6020 8.
12. J.Mathieu, R. Panico, J. weill-raynal ; Introduction à la chimie organique, 1985 Hermann, 75015 Paris ISBN 2 7056 5966 8.
13. Etienne Lévy-Lambert; Techniques de base pour le laboratoire médical, Organisation Mondiale de la santé; 1973 Genève.
14. Nadia Boulekras ; Atomistique ; Recueil d'exercices corrigés ; Office des publications universitaires ; Edition n° 5023 ; ISBN 978-9961.0.1244.4 Dépôt légal 3705/2009.

Table des matières

PARTIE I : ATOMISTIQUE

Introduction.....	2
I.1 L'évolution des idées en atomistique	4
I.1.1 Le modèle atomique de Dalton	4
I.1.2 La découverte de l'électron par J.J. Thomson	Erreur ! Signet non défini.
I.1.3 Ernest Rutherford et l'expérience de la feuille d'or	7
I.1.4 Le modèle nucléaire (planétaire) de l'atome.....	9
I.1.5 Postulat de Bohr	10
I.1.6 Louis de Broglie postula	10
I.1.7 Mécanique quantique Probabiliste.....	11
I.2 Le modèle atomique planétaire.....	14
I.2.1 L'ordre de grandeur des éléments de l'atome.....	14
I.2.2 Représentation symbolique de l'élément chimique	15
I.2.3 Numéro atomique	16
I.2.4 Particules élémentaires: propriétés	16
I.2.6 Masse de l'atome.....	17
I.2.7 Le nombre d'Avogadro	17
I.2.8 La masse atomique (Atome gramme).....	17
I.3 Notion de molécule et notion de mole	18
I.3.1 Molécule.....	18
I.3.2 Ecriture des formules moléculaires	18
I.3.3 La masse de la molécule (masse moléculaire)	19
I.3.4 Notion de mole de molécule.....	19
I.3.5 Notion d'ion.....	19
I.3.6 Notion d'élément chimique.....	21
I.3.7 Notion de corps simple et de corps composés	21
I.4 Isotopes.....	26
I.4.1 Définition.....	26
I.4.2 Isotopes radioactifs	27
I.4.2.1 Abondance isotopique	27
I.4.2.2 La masse atomique moyenne des isotopes	28
I.4.2.3 Séparation des Isotopes	28
I.5 Equivalence masse - énergie	33
I.5.1 Relation d'Einstein :	33
I.5.2 Unité de masse atomique	33
I.5.3 Énergie de cohésion du noyau (Énergie de liaison par nucléon)	34
I.5.4 Energie de liaison du noyau :	36
I.5.5 Energie de liaison par nucléon.....	36
I.5.6 Courbe d'Aston	36
I.6 Phénomène de la Radioactivité	42

I.6.1 Généralités.....	42
I.6.1.1 Définition de la radioactivité.....	42
I.6.1.2 Type d'émission.....	42
I.6.1.3 Propriétés pénétratives des rayonnements.....	43
I.6.1.4 Unités de mesure de l'activité radioactive.....	43
I.6.1.5 Étiquette des principales données de la radioactivité.....	44
I.6.1.6 Etat des lieux.....	44
I.6.1.7 Radioactivité naturelle.....	45
I.6.1.8 Radioactivité artificielle.....	46
I.6.2 La réaction nucléaire.....	48
I.6.2.1 La fusion nucléaire.....	48
I.6.2.2 La fission nucléaire:.....	50
I.6.2.2.1 Réaction en chaîne.....	50
I.7 Configuration électronique des atomes.....	61
I.7.1.1 Le modèle atomique simplifié.....	61
I.7.1.2 Conséquences de la quantification : les Postulats de Bohr.....	63
I.7.2 Nombres quantiques.....	64
I.7.2.1 Fonction mathématique et probabilité de présence de l'électron.....	64
I.7.3 Configuration électronique de l'atome.....	73
I.7.3.1 Couches principales.....	73
I.7.3.2 Sous couches.....	74
I.7.3.3 Les Principes de remplissage.....	74
I.7.3.4 Application et cas d'exceptions.....	79
I.8 Classification périodique des éléments chimiques.....	82
I.8.1 Groupes (colonnes), Périodes (ligne).....	83
I.8.2 Blocs S, P, d et f.....	84
I.8.3 Les trois premières périodes.....	84
<i>La quatrième période et la cinquième période comportent 18 éléments.....</i>	<i>85</i>
I.8.4 Nomenclature des colonnes.....	86
I.8.5 Evolution des propriétés physiques dans le tableau périodique.....	86
I.8.5.1 Électronégativité.....	86
I.8.5.2 Énergie d'ionisation.....	88
I.8.5.4 L'affinité électronique.....	89
I.8.5.5 Électrons de valence et symboles de Lewis.....	89

PARTIE II : LIAISON CHIMIQUE ET STRUCTURE MOLECULAIRE

Introduction.....	97
II.1 Exemples d'édifices atomiques et / ou moléculaires.....	97
II.2 Liaisons chimiques.....	101
II.2.1. Définition liaison chimique.....	101
II.2.2 Énergie de liaison.....	101

II.2.2.1 Cas des molécules monoatomiques	101
II.2.2.2 Cas des molécules polyatomiques.....	102
II.2.2.3 Généralisation	102
II.2.2.4 Longueur des liaisons chimiques.....	103
II.3 La théorie de LEWIS.....	105
II.3.1 électron de valence	105
II.3.2 Représentation de LEWIS des atomes	105
II.3.3 Représentation de LEWIS des molécules.....	106
II.3.3.1 Règle de duet et l'octet.....	106
II.3.3.2 Représentation de Lewis des molécules types	107
II.3.3.3 Liaison covalente DATIVE.....	110
II.3.3.4 formule développée selon Lewis.....	110
II.3.3.5 Représentation de Lewis des ions polyatomiques	111
II.3.4. Limites de la de la théorie de LEWIS	111
II.4 Théorie des orbitale moléculaires.....	114
II.4.1 Notion de recouvrement orbitalaire.....	114
II.4.1.1. Recouvrement axial conduisant à des liaisons différentes	114
II.4.1.2 Aspect mathématique : La méthode C.L.O.A	115
II.4.1.3. Cas de la molécule H ₂	117
II.4.1.4. Cas du di oxygène O ₂	118
II.4.3 Indice de liaison :.....	119
II.4.4 Comparaison Schéma OM avec les schémas de Lewis :.....	122
II.5 Interprétation physique des différentes Liaisons chimiques	123
II.5.1 La liaison faible:.....	123
II.5.2 Liaisons chimiques fortes	126
II.5.2.1 Les différents types de liaisons covalentes.....	126
II.5.2.2 La liaison de coordination ou liaison Dative ou donneur- accepteur	131
II.5.2.3 La liaison métallique	132
II.6. Théorie de l'hybridation moléculaire	133
II.6.1 Notion d'hybridation :.....	133
II.6.1.1 Étude de la molécule d'hydrogène	133
II.6.1.2. Hybridation sp ³ :	134
II.6.1.3 Hybridation sp ²	139
II.6.1.4 Hybridation sp :.....	142
II.6.1.5 L'hybridation dsp ³	143
II.6.1.6. L'hybridation d ² sp ³ :	146
II.6.2. Théorie de la répulsion des paires électroniques de la couche de valence.....	149
II.6.2. 1. Pré requis et supposition.....	150
II.6.2. 2. Notations	150
II.6.2.3 Méthode AX _m En.....	151

II.6.2.4. Géométrie des molécules	152
II.7 Moments dipolaires permanents	154
II.7.1 Définition	154
II.7.2 Caractère ionique.....	155
II.7.3 Calcul des charges partielles et du pourcentage d'ionité :	157
II.8 Délocalisation électronique / Mésonérie	164
II.8.1 Mise en évidence de la mésonérie ; formes résonantes.....	164
II.8.2 Mise en évidence de la mésonérie ; formes résonantes.....	165
II.8.3 Etude de la molécule de benzène	167
Bibliographie.....	171
Table des matières	173