

Atomistique

Stage de pré-rentrée 2023
Pôle Biochimie

Inspiré du cours du Professeur P-A.Jaffrès

Tous droits réservés Tutorat Santé Brestois © Toute diffusion et reproduction,
totale ou partielle, de ce document est interdite



Petit message d'avertissement avant de commencer :

Nous vous rappelons que ce diaporama, réalisé par des étudiants, est une aide et **non un support de cours officiel** et ne peut donc pas être considéré comme un ouvrage de référence lors de l'examen de PASS ou de L.AS.

Il se base sur le **cours de l'année précédente** qui peut être **amené à être modifié** dans sa forme et son contenu au bon vouloir du professeur.

Have fun ;)



Sommaire

I. Composition de l'atome

- I. Particules élémentaires
- II. Définitions

II. Modèle quantique de l'atome monoélectronique

- I. Modèle de Bohr
- II. Modèle ondulatoire
 - A. Fonction d'ondes
 - B. Équations de Schrödinger
 - C. Formes des OA

III. Atomes polyélectroniques

- I. Approximations
- II. OA de l'atome polyélectronique
- III. Règles de remplissage
 - A. Règle de Hund
 - B. Règle de Klechkowski
- IV. Configuration électronique

IV. Propriétés périodiques

- I. Tableau périodique
- II. Énergies des orbitales de valence, d'ionisation et électronégativité



Sommaire

V. Molécules

- I. Différentes liaisons existantes
- II. Représentation de Lewis
- III. Degrés d'oxydation et valence des éléments
- IV. Théorie VSEPR
- V. Quelques rappels

VI. Orbitales Moléculaires

- I. Recouvrements
- II. Diagramme d'OM
- III. Hybridation



COMPOSITION DE L'ATOME



Compositions de l'atome - Définitions

Rappels des bases scientifiques du lycée :

Particule élémentaire	Charge élémentaire (= $ 1,62 \cdot 10^{-19} $ C)	Masse (en g)
Proton	+	$1,6723 \cdot 10^{-24}$
Neutron		$1,6747 \cdot 10^{-24}$
Electron	-	$9,108 \cdot 10^{-28}$



Compositions de l'atome - Définitions

- **ISOTOPES** : Atomes du même élément (= même nombre de protons) mais ayant un nombre de neutrons différents. Peuvent être stables ou non. Propriétés chimiques identiques, mais physiques différentes.
- **NUCLÉIDE** : Combinaison possible de Z et A pour un atome ${}_Z^AX$.
- **ÉNERGIE NUCLÉAIRE (ou défaut de masse)** : Permet cohésion du noyau malgré les charges + qui repoussent les protons les uns des autres.

		A	16	17	18
		Z	8	8	8
			O	O	O
éléments ↑ nombre de protons Z	13	14	15		
	7	7	7		
	N	N	N		
	12	13	14		
	6	6	6		
	C	C	C		
	A - Z	nombre de neutrons isotopes (sosies) →			

UNITÉ ATOMIQUE ou DALTON : $1/12^{\text{ème}}$ de la masse atomique de ^{12}C
 $1 \text{ Da} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$



Compositions de l'atome - Définitions

MASSE MOLAIRES ATOMIQUES ISOTOPIQUES A_M : Masse d'une mole d'un isotope de l'élément X.

$$A(^{14}\text{C}) = 14 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$A(^{12}\text{C}) = 12 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$$

MASSE MOLAIRES ATOMIQUES MOYENNES M_x : Masse moyenne d'une mole d'un élément en prenant en compte sa répartition isotopique naturelle.

Répartition isotopique du Carbone : $^{12}\text{C} = 98,93 \%$ $^{13}\text{C} = 1,07 \%$ $^{14}\text{C} = \text{Traces}$

MASSE MOLAIRES MOLÉCULAIRES MOYENNES M_M : Masse moyenne d'une mole de molécules (somme des masses molaires atomiques de chacun des atomes).

$$\begin{aligned} M_{\text{H}} &= 1 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} & M_{\text{C}} &= 12 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} \\ \Rightarrow M_{\text{C}_2\text{H}_6} &= 6 \cdot M_{\text{H}} + 2 \cdot M_{\text{C}} \\ \Rightarrow M_{\text{C}_2\text{H}_6} &= 30 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} \end{aligned}$$



Compositions de l'atome - Définitions

Deux premières périodes du tableau à savoir !

1	¹ H 1 hydrogène 1,0							⁴ He 2 hélium 4,0
2	⁷ Li 3 lithium 6,9	⁹ Be 4 béryllium 9,0	¹¹ B 5 bore 10,8	¹² C 6 carbone 12,0	¹⁴ N 7 azote 14,0	¹⁶ O 8 oxygène 16,0	¹⁹ F 9 fluor 19,0	²⁰ Ne 10 néon 20,2

Plein de moyens mnémotechniques :

Lili **Bé**cha **B**ien **C**hez **N**otre **O**ncle **F**erdinand-**N**estor



MODÈLES QUANTIQUES DE L'ATOME MONOÉLECTRONIQUE



Atome monoélectronique - Modèle de Bohr

Le rayonnement monochromatique correspond à un flux de particules (les **photons**). Il ne peut échanger de l'énergie avec la matière que par **quanta d'énergie !**

$$E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

E : énergie

h : constante de planck $6.626 \cdot 10^{-34}$ J.s

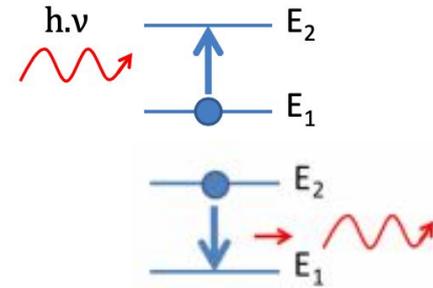
c : célérité ($2,99 \cdot 10^8$ m/s)

λ : longueur d'onde
 ν : fréquence

$h \cdot \nu$: correspond à **1 quantum d'énergie**

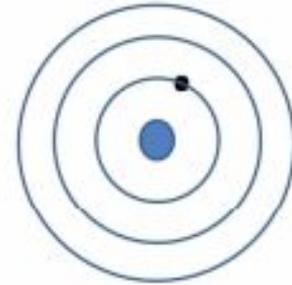
Un électron passe d'un niveau E_1 à un niveau supérieur d'énergie E_2 en **absorbant un photon d'énergie $h\nu$** .

A contrario, il redescend d'un niveau E_2 à un niveau E_1 en **émettant un même photon d'énergie $h\nu$** .



Atome monoélectronique - Modèle de Bohr

- Électrons placés sur des orbitales bien définies et le noyau est considéré comme immobile au centre de l'atome.
 - A l'état fondamental E_F les électrons sont situées sur l'orbitale la plus basse en énergie afin d'être le plus stable possible.
-



LIMITES DU MODÈLE DE BOHR :

Principe d'incertitude d'Heisenberg

Pour une particule de masse faible (électron par exemple), il est **impossible** de déterminer **simultanément** et avec précision sa **vitesse** et sa **position**

Atome monoélectronique - Modèle ondulatoire

Fonction d'ondes :

Une fonction d'onde $\Psi(x,y,z,t)$ décrit la **position** d'un électron sur son orbite à un **instant t**.

- Pour simplifier, une fonction d'onde indépendante du temps (onde dite stationnaire) est utilisée. Cela permet d'intégrer le principe d'incertitude d'Heisenberg au modèle.

**Seul le carré de la fonction d'onde a un sens physique :
probabilité de présence de l'électron.**



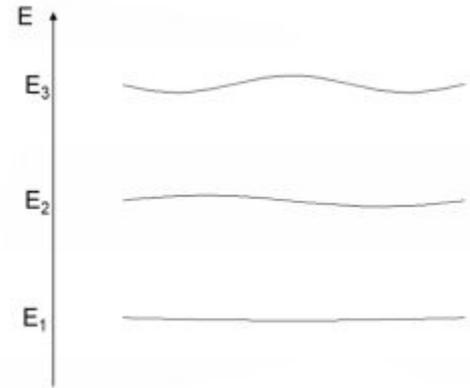
Atome monoélectronique - Modèle ondulatoire

Équations de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger **permet de relier les caractéristiques corpusculaires et ondulatoires** de l'électron au sein de l'atome.

Sa résolution conduit à un ensemble de solutions (ensemble de fonctions d'onde) appelées **fonctions propres** ou **orbitales atomiques (OA)**.

Chaque fonction propre, ou OA, a une énergie : c'est la valeur propre. Si plusieurs OA ont la même valeur propre, elles sont dites **dégénérées**.



Analogie avec la corde vibrante

Atome monoélectronique - Modèle ondulatoire

Équations de Schrödinger :

Les solutions de cette équation dépendent de **3 nombres quantiques**

On note $\Psi(n,l,m)$:

n : nb quantique **principal**
avec n entier > 0

l : nb quantique **secondaire** ou **azimutal**
avec $0 \leq l \leq n-1$

m : nb quantique **tertiaire** ou **magnétique**
avec $-l \leq m \leq l$.

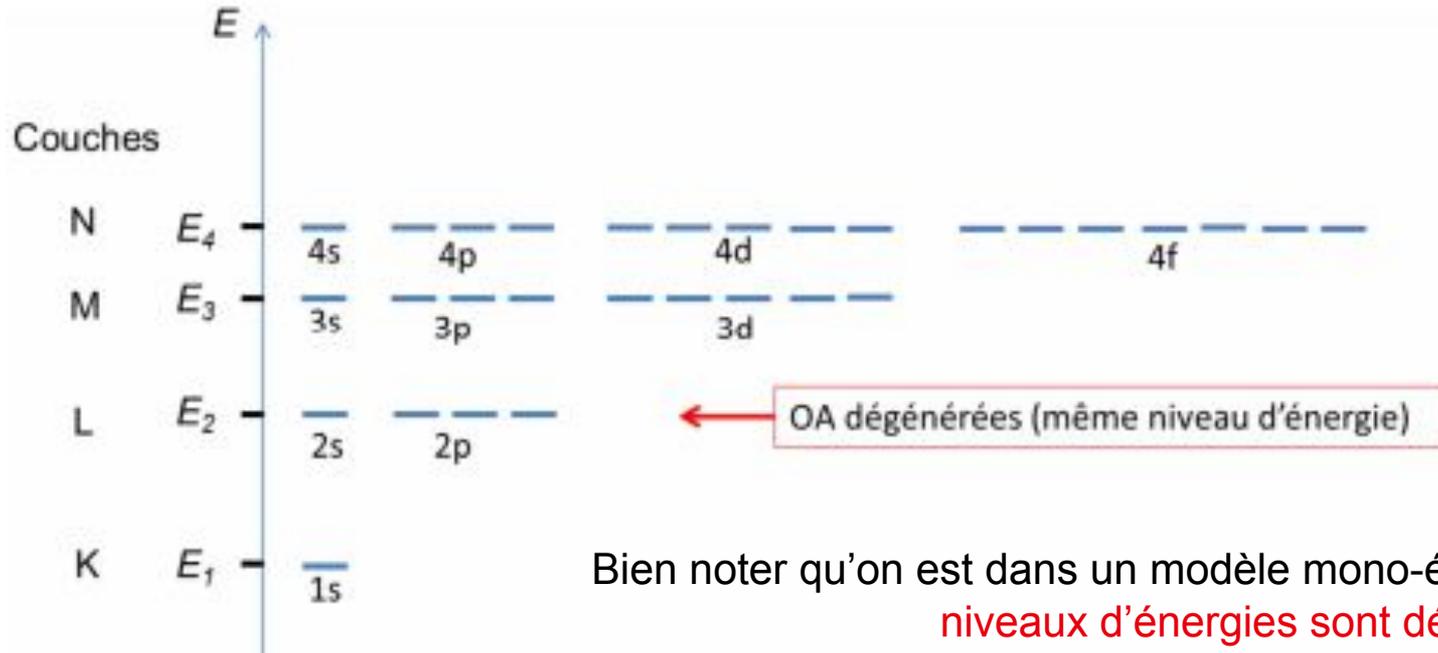
l	0	1	2	3
lettre	s	p	d	f

Couche	n	l	m	E_n	$\Psi_{n,l,m}$	O.A.
K	1	0	0	E_1	$\Psi_{1,0,0}$	1s
	2	0	0		E_2	$\Psi_{2,0,0}$
L	2	1	-1	$\Psi_{2,1,-1}$		2p
	2	1	0	$\Psi_{2,1,0}$		2p
	2	1	1	$\Psi_{2,1,1}$		2p
M	3	0	0	E_3	$\Psi_{3,0,0}$	3s
	3	1	-1		$\Psi_{3,1,-1}$	3p
	3	1	0		$\Psi_{3,1,0}$	3p
	3	1	1		$\Psi_{3,1,1}$	3p
	3	2	-2		$\Psi_{3,2,-2}$	3d
	3	2	-1		$\Psi_{3,2,-1}$	3d
	3	2	0		$\Psi_{3,2,0}$	3d
	3	2	1		$\Psi_{3,2,1}$	3d
	3	2	2		$\Psi_{3,2,2}$	3d

Il existe un quatrième nombre quantique, le **spin (s)** qui distingue 2 électrons placés sur une même OA. Il prend la valeur de $+\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$.

Atome monoélectronique - Modèle ondulatoire

Équations de Schrödinger :

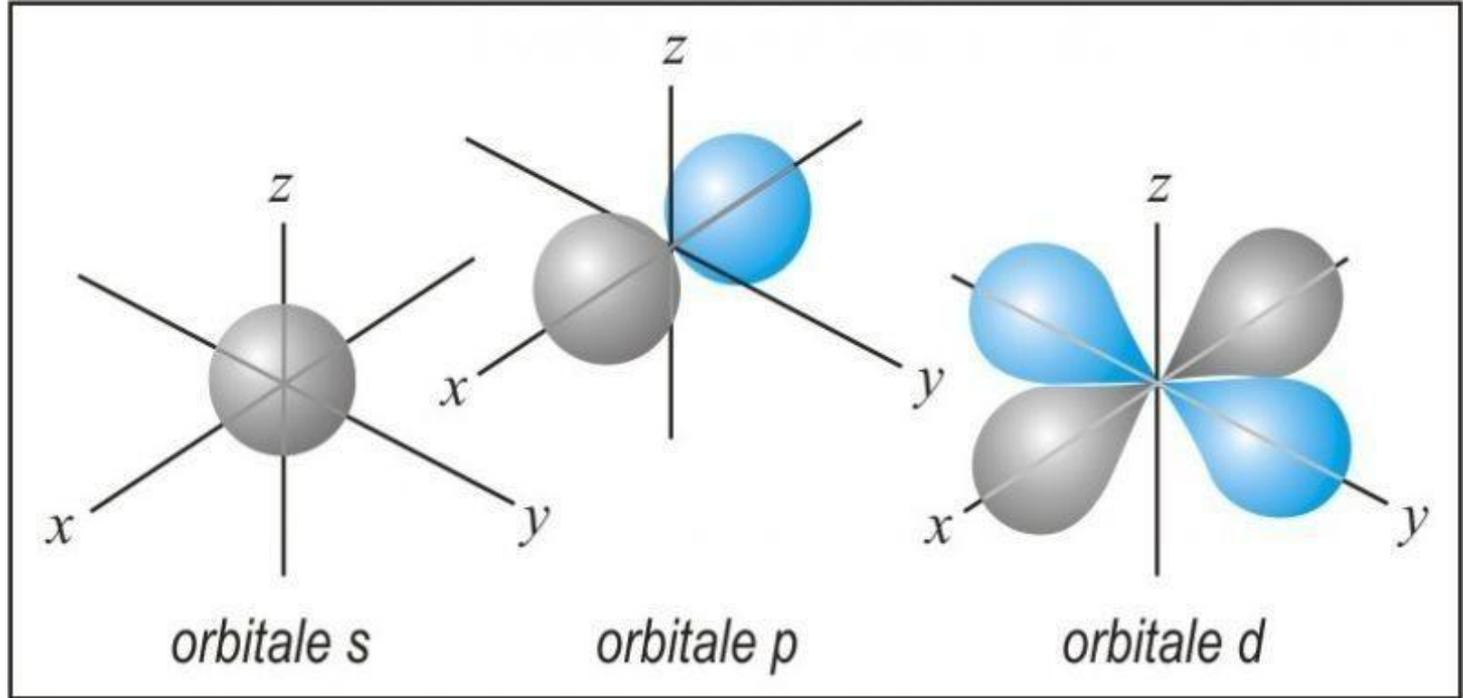


Bien noter qu'on est dans un modèle mono-électronique, les niveaux d'énergies sont dépendants de n .

Atome monoélectronique - Modèle ondulatoire

s = **s**phérique

p = évolue dans
un **p**lan nodal



ATOME POLYÉLECTRONIQUE

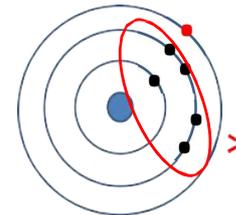


Atome polyélectronique - Approximations

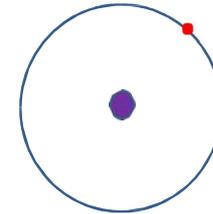
- Pour les atomes **monoélectroniques**, la résolution de l'équation de Schrödinger se faisait **sans approximation**, ce qui est impossible pour l'atome polyélectronique.

On utilise alors **l'approximation monoélectronique ou orbitale**.

- On considère les électrons mobiles les uns après les autres.
On définit ainsi une **constante d'écran** et un **noyau fictif**.



Ces électrons forment un écran entre l'électron rouge et le noyau.



On définit un noyau fictif de N° atomique Z^* tel que

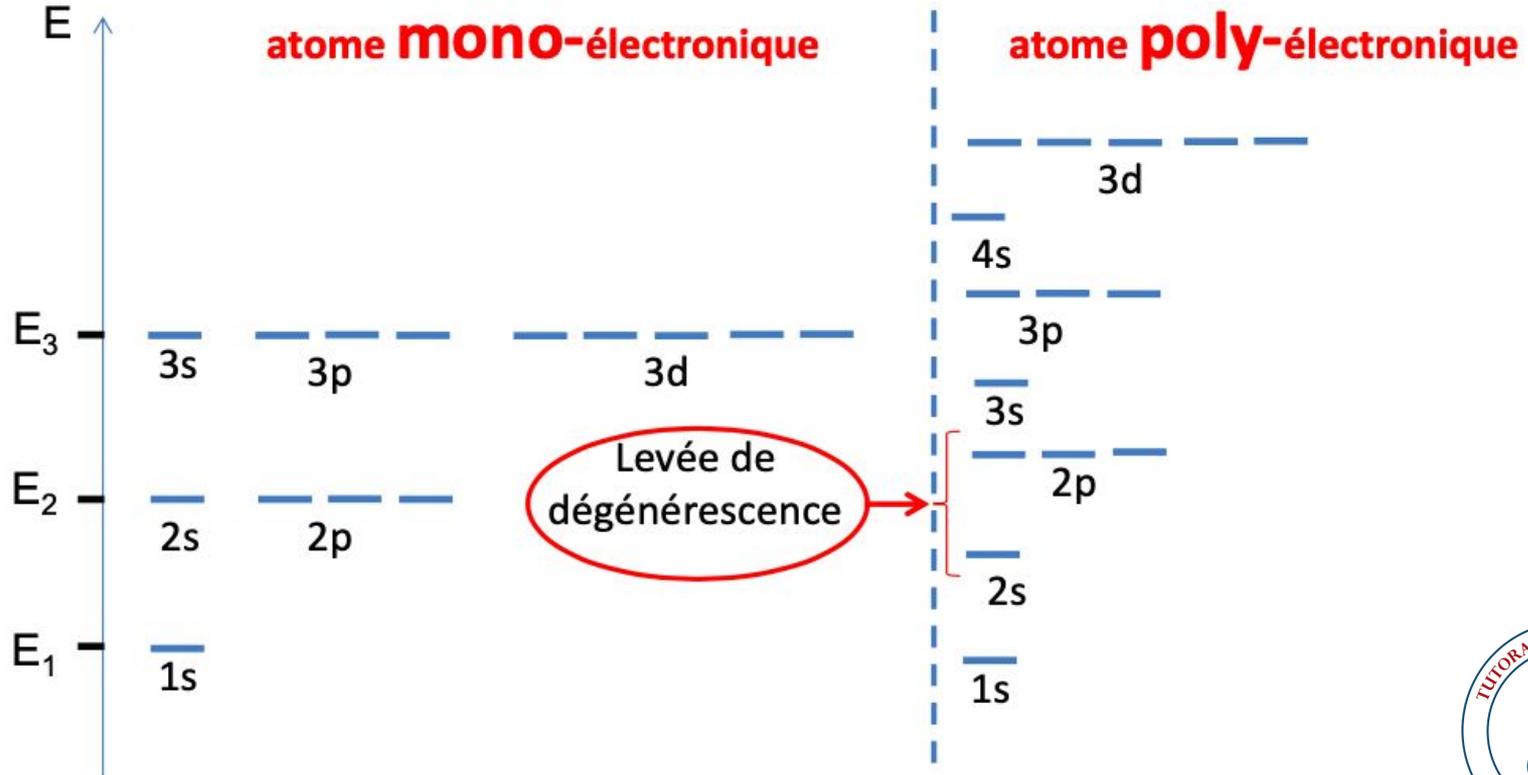
$$Z^* = Z - \sigma$$



Constante d'écran

Rmq : L'énergie des OA dépendra de **n** et de **l**.
La forme des OA est conservée.

Atome polyélectronique - OA

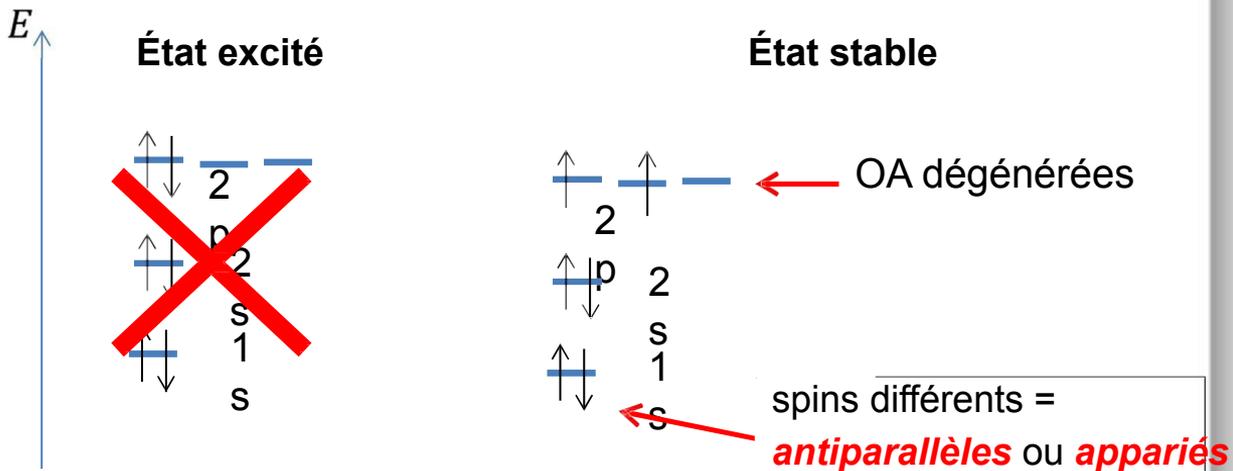


Atome polyélectronique - Remplissage

Principe de stabilité : A l' E_F (*État Fondamental*), l'état le plus stable, il y a remplissage par **ordre croissant des OA** (énergies données par les règles de Klechkowski).

→ 1 OA peut accueillir **2 électrons de spin différents** car les électrons ne peuvent pas avoir 4 nombres quantiques identiques (n, l, m et s) = principe d'exclusion de Pauli.

Règle de Hund : Pour les OA dégénérées, la configuration électronique la plus stable est celle où les e^- de même spin occupent le maximum d'OA.



Atome polyélectronique - Remplissage

Règle de Klechkowski :

- Elle donne l'ordre croissant d'énergie.
- A l'état fondamental, on classe par **(n+l) croissant**.
- Si égalité entre **(n + l)**, on remplit par **n croissant**.

Moyen mnémotechnique :

	l			
	0	1	2	3
1	1s			
2	2s	2p		
3	3s	3p	3d	
4	4s	4p	4d	4f
5	5s	5p	5d	5f
6	6s	6p	6d	6f



Atome polyélectronique - Configuration e^- nique

Objectif : placer les e^- des OA de l'atome à l' E_F

- **Etape 1 :** Savoir **combien d'électrons** comporte notre atome ou ion (les 2 premières périodes du tableau périodiques seront à connaître)
- **Etape 2 :** Classer les OA par ordre croissant d'énergie
- **Etape 3 :** Les compléter avec les électrons en respectant les règles suivantes
 - ❖ **OA s :** 2 électrons max
 - ❖ **OA p :** 6 électrons max
 - ❖ **OA d :** 10 électrons max
 - ❖ **OA f :** 14 électrons max

Facultatif : **Etape 4 :** Retrier par n croissant (permet de déterminer la couche d' e^- de valence)



Atome polyélectronique - Configuration e^- nique

Configuration électronique *spdf*



Remplissage selon
Klechkowski

Peut s'écrire aussi :

puis



Classement par
n croissant



Atome polyélectronique - Configuration e⁻ nique

Exercice : Faire les configurations électroniques des atomes suivants

¹⁶S



³⁰Zn



³⁸Sr



PROPRIÉTÉS PÉRIODIQUES



Propriétés périodiques - Familles tableau

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H 1.00794																	2 He 4.0026
2	3 Li 6.941	4 Be 9.01218											5 B 10.811	6 C 12.0107	7 N 14.0067	8 O 15.9994	9 F 18.9984	10 Ne 20.1797
3	11 Na 22.9898	12 Mg 24.305											13 Al 26.9815	14 Si 28.0855	15 P 30.9738	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
4	19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.867	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.9332	28 Ni 58.6934	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.63	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
5	37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9059	40 Zr 91.224	41 Nb 92.9064	42 Mo 95.96	43 Tc [98]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.906	46 Pd 106.42	47 Ag 107.868	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.6	53 I 126.904	54 Xe 131.293
6	55 Cs 132.905	56 Ba 137.327	57-71	72 Hf 178.49	73 Ta 180.948	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.217	78 Pt 195.084	79 Au 196.967	80 Hg 200.59	81 Tl 204.383	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [210]	85 At [210]	86 Rn [222]
7	87 Fr [223]	88 Ra [226]	89-103	104 Rf [267]	105 Db [268]	106 Sg [269]	107 Bh [270]	108 Hs [269]	109 Mt [278]	110 Ds [281]	111 Rg [281]	112 Cn [285]	113 Uut [286]	114 Fl [289]	115 Uup [288]	116 Lv [293]	117 Uus [294]	118 Uuo [294]

Propriétés périodiques - Familles tableau

Alcalins (ex : Li)	1 ^{ère} colonne (sauf H !!) -> réducteurs
	<u>Configuration électronique</u> : ns^1
Alcalino-terreux (ex : Be)	2 ^{ème} colonne -> réducteurs
	<u>Configuration électronique</u> : ns^2
Halogènes (ex : F)	17 ^{ème} colonne -> oxydants
	<u>Configuration électronique</u> : ns^2np^5
Gaz rares (ex : He, Ne)	18 ^{ème} colonne -> peu réactifs
	<u>Configuration électronique</u> : ns^2np^6 (sauf ${}_2\text{He} : ns^2$)

Pourquoi certaines familles ont-elles un caractère réducteur ou oxydant? C'est pour avoir une couche électronique externe complète comme les gaz rares.



Propriétés périodiques - Evolution énergies

${}^1_1\text{H}$ 1s -13,6	$E \nearrow$						${}^2_2\text{He}$ 1s -39 eV
${}^3_3\text{Li}$ 2s -6 eV	${}^4_4\text{Be}$ 2s -13 eV	${}^5_5\text{B}$ 2p -23 eV	${}^6_6\text{C}$ 2p -36 eV	${}^7_7\text{N}$ 2p -52 eV	${}^8_8\text{O}$ 2p -70 eV	${}^9_9\text{F}$ 2p -92 eV	${}^{10}_{10}\text{Ne}$ 2p -116 eV
${}^{11}_{11}\text{Na}$ 3s -7 eV	${}^{12}_{12}\text{Mg}$ 3s -12 eV	${}^{13}_{13}\text{Al}$ 3p -18 eV	${}^{14}_{14}\text{Si}$ 3p -26 eV	${}^{15}_{15}\text{P}$ 3p -35 eV	${}^{16}_{16}\text{S}$ 3p -45 eV	${}^{17}_{17}\text{Cl}$ 3p -56 eV	${}^{18}_{18}\text{Ar}$ 3p -69 eV
${}^{19}_{19}\text{K}$ 4s -4 eV	${}^{20}_{20}\text{Ca}$ 4s -7 eV	${}^{31}_{31}\text{Ga}$ 4p -21 eV	${}^{32}_{32}\text{Ge}$ 4p -27 eV	${}^{33}_{33}\text{As}$ 4p -34 eV	${}^{34}_{34}\text{Se}$ 4p -41 eV	${}^{35}_{35}\text{Br}$ 4p -49 eV	${}^{36}_{36}\text{Kr}$ 4p -58 eV

$E \nearrow$

Evolution de
l'énergie des OA de
valence

- **Énergie des OA de valence** : + l'énergie est \nearrow , + l'attraction des e^- par le noyau



Ainsi, on arrachera plus facilement un e^- pour avoir un K^+ que pour avoir un F^+ .
Représente l'attractivité du noyau pour son e^- le plus distant.

Propriétés périodiques - Evolution énergies

${}^1_1\text{H}$ 13,6								${}^2_2\text{He}$ 24,6 eV
${}^3_3\text{Li}$ 5,4 eV	${}^4_4\text{Be}$ 9,3 eV	${}^5_5\text{B}$ 8,3 eV	${}^6_6\text{C}$ 11,3 eV	${}^7_7\text{N}$ 14,5 eV	${}^8_8\text{O}$ 13,6 eV	${}^9_9\text{F}$ 17,4 eV	${}^{10}_{10}\text{Ne}$ 21,6 eV	
${}^{11}_{11}\text{Na}$ 5,1 eV	${}^{12}_{12}\text{Mg}$ 7,6 eV	${}^{13}_{13}\text{Al}$ 6,0 eV	${}^{14}_{14}\text{Si}$ 8,2 eV	${}^{15}_{15}\text{P}$ 10,5 eV	${}^{16}_{16}\text{S}$ 10,4 eV	${}^{17}_{17}\text{Cl}$ 13,0 eV	${}^{18}_{18}\text{Ar}$ 15,8 eV	
${}^{19}_{19}\text{K}$ 4,2 eV	${}^{20}_{20}\text{Ca}$ 6,1 eV	${}^{31}_{31}\text{Ga}$ 6,0 eV	${}^{32}_{32}\text{Ge}$ 7,9 eV	${}^{33}_{33}\text{As}$ 9,8 eV	${}^{34}_{34}\text{Se}$ 9,8 eV	${}^{35}_{35}\text{Br}$ 11,8 eV	${}^{36}_{36}\text{Kr}$ 14,0 eV	

Diagram illustrating the periodic table with ionization energy values (EI) in eV. A red arrow points from H to He, and another red arrow points upwards from the bottom row to the top row, indicating the direction of increasing ionization energy.

Evolution de l'énergie d'ionisation

- **Énergie d'ionisation** = Représente la facilité / difficulté pour former le premier cation de l'élément (K^+ pour K).



Propriétés périodiques - Evolution énergies

${}^1_1\text{H}$ 2,1	$\chi \nearrow$						${}^2_2\text{He}$
${}^3_3\text{Li}$ 1,0	${}^4_4\text{Be}$ 1,5	${}^5_5\text{B}$ 2,0	${}^6_6\text{C}$ 2,5	${}^7_7\text{N}$ 3	${}^8_8\text{O}$ 3,5	${}^9_9\text{F}$ 4	${}^{10}_{10}\text{Ne}$
${}^{11}_{11}\text{Na}$ 0,9	${}^{12}_{12}\text{Mg}$ 1,2	${}^{13}_{13}\text{Al}$ 1,5	${}^{14}_{14}\text{Si}$ 1,8	${}^{15}_{15}\text{P}$ 2,1	${}^{16}_{16}\text{S}$ 2,5	${}^{17}_{17}\text{Cl}$ 3,0	${}^{18}_{18}\text{Ar}$
${}^{19}_{19}\text{K}$ 0,8	${}^{20}_{20}\text{Ca}$ 1,0	${}^{31}_{31}\text{Ga}$ 1,6	${}^{32}_{32}\text{Ge}$ 1,8	${}^{33}_{33}\text{As}$ 2,0	${}^{34}_{34}\text{Se}$ 2,4	${}^{35}_{35}\text{Br}$ 2,8	${}^{36}_{36}\text{Kr}$

Electronegativité de Pauling en $\text{eV}^{1/2}$

Evolution de l'
électronégativité

- **Electronegativité** = capacité d'un atome à **attirer les e^- de ses liaisons**
(F est le + électronégatif de tous les éléments)



Propriétés périodiques - Evolution énergies

Définitions

- **Rayon atomique** = rayon de l'OA de valence
- **Rayon ionique** = rayon anion > neutre > cation

${}^1_1\text{H}$ 0,53 $Z^*=1$								${}^2_2\text{He}$ 0,31 $Z^*=1,7$
${}^3_3\text{Li}$ 1,63 $Z^*=1,3$	${}^4_4\text{Be}$ 1,09 $Z^*=1,95$	${}^5_5\text{B}$ 0,82 $Z^*=2,6$	${}^6_6\text{C}$ 0,65 $Z^*=3,25$	${}^7_7\text{N}$ 0,55 $Z^*=3,9$	${}^8_8\text{O}$ 0,45 $Z^*=4,55$	${}^9_9\text{F}$ 0,41 $Z^*=5,2$	${}^{10}_{10}\text{Ne}$ 0,36 $Z^*=5,85$	
${}^{11}_{11}\text{Na}$ 2,17 $Z^*=2,2$	${}^{12}_{12}\text{Mg}$ 1,68 $Z^*=2,85$	${}^{13}_{13}\text{Al}$ 1,37 $Z^*=3,5$	${}^{14}_{14}\text{Si}$ 1,15 $Z^*=4,15$	${}^{15}_{15}\text{P}$ 1,00 $Z^*=4,8$	${}^{16}_{16}\text{S}$ 0,88 $Z^*=5,45$	${}^{17}_{17}\text{Cl}$ 0,78 $Z^*=6,1$	${}^{18}_{18}\text{Ar}$ 0,71 $Z^*=6,75$	
${}^{19}_{19}\text{K}$ 3,32 $Z^*=2,2$	${}^{20}_{20}\text{Ca}$ 2,56 $Z^*=2,85$	${}^{31}_{31}\text{Ga}$ 1,46 $Z^*=5$	${}^{32}_{32}\text{Ge}$ 1,29 $Z^*=5,65$	${}^{33}_{33}\text{As}$ 1,16 $Z^*=6,3$	${}^{34}_{34}\text{Se}$ 1,05 $Z^*=6,9$	${}^{35}_{35}\text{Br}$ 0,96 $Z^*=7,6$	${}^{36}_{36}\text{Kr}$ 0,88 $Z^*=8,25$	

MOLÉCULES



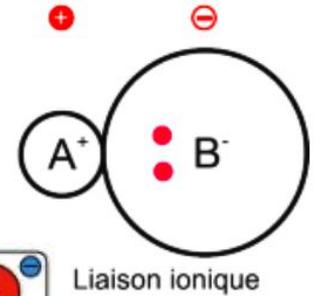
Molécules - Liaisons existantes

Liaisons fortes

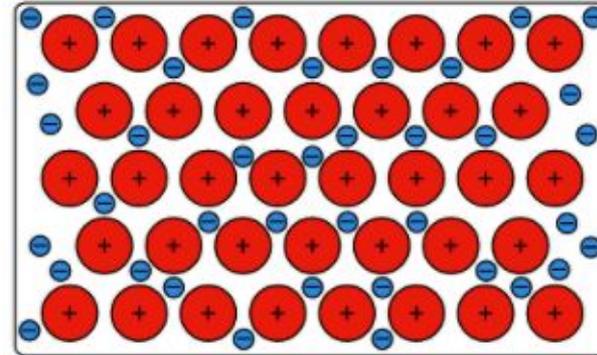
Liaisons covalentes : partage d'e- de valence entre 2 atomes



Liaisons ioniques : interactions coulombiennes entre ions de charges opposées



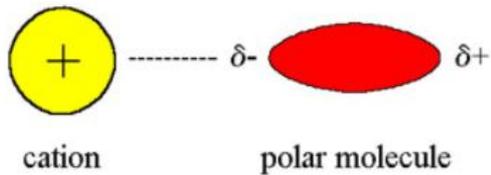
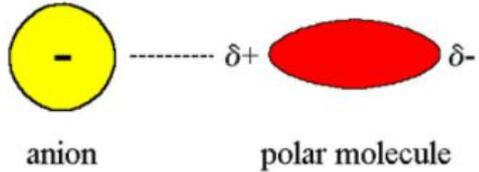
Liaisons métalliques : Noyaux chargés + qui "baignent" dans une "mer" d'e-.
Nécessite d'avoir une multitude d'atomes



Molécules - Liaisons existantes

Liaisons faibles

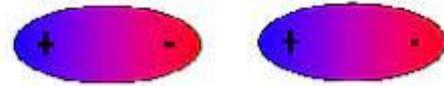
Interactions ion-dipôle



Interactions de Van der Waals :

interactions dipôle-dipôle + forces de London

Attraction



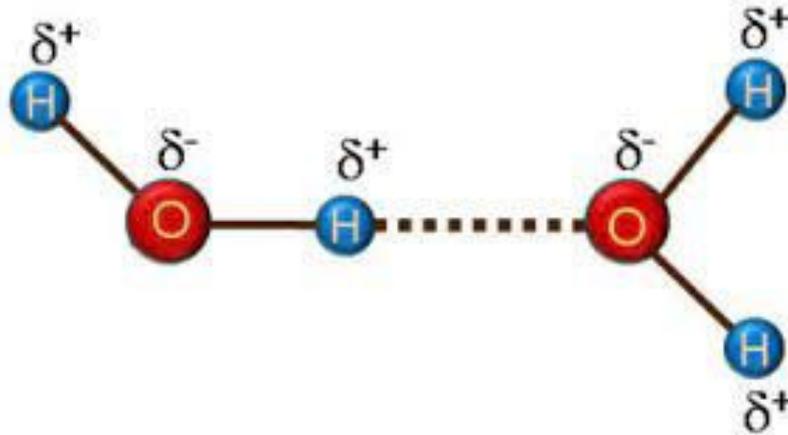
Repulsion



Molécules - Liaisons existantes

Liaisons faibles

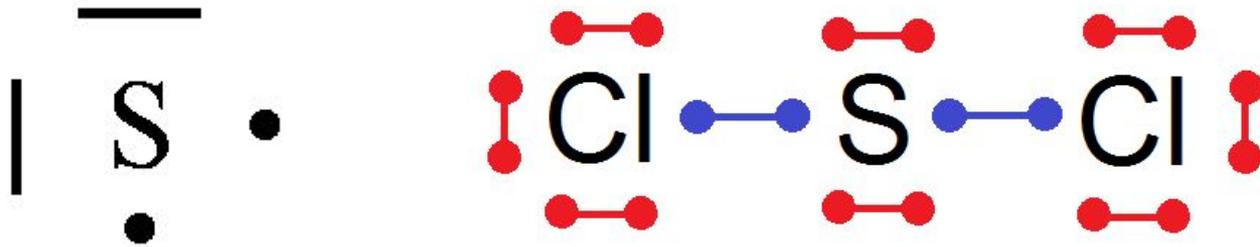
Liaisons hydrogènes : cas particulier de l'interaction dipôle-dipôle dans laquelle la liaison polarisée est principalement O-H ou N-H. C'est la + forte des interactions faibles.



Molécules - Représentation de Lewis

Consiste à faire figurer le (ou les) atome(s) et ses/leurs e- de valence.

- **Règle du duet** (pour H) : l'atome cherche à s'entourer de 2 e- pour compléter sa couche de valence
- **Règle de l'octet** : l'atome cherche à s'entourer de 8e-...



Rq : impossible d'avoir + de 2 et 8 e- de valence pour la 1^{ère} et la 2^{ème} période, contrairement à la 3^{ème} et les suivantes.



Molécules - Représentation de Lewis

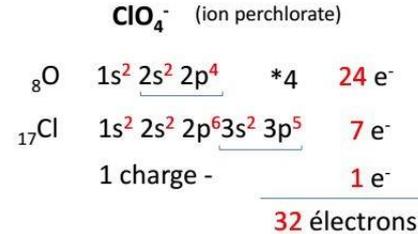
Etapes :

1. Faire la Σ des e^- de valence en tenant compte de la charge de la molécule.
2. Placer l'atome le - électronégatif au centre.
3. Placer les e^- de valence restant.
4. Vérifier le respect de la règle de l'octet pour les atomes de la 2^{ème} période.
5. Déterminer les charges formelles* et proposer la structure avec le moins de charges formelles.

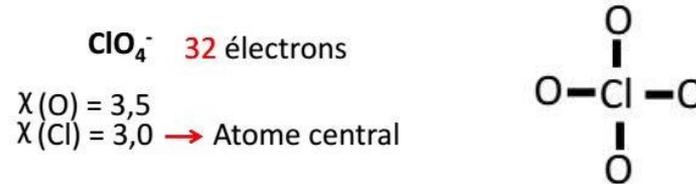
**Charge formelle = nb e^- de valence – nb e^- appartenant à l'élément*

Molécules - Représentation de Lewis

1) Faire la Σ des e- de valence en tenant compte de la charge de la molécule.

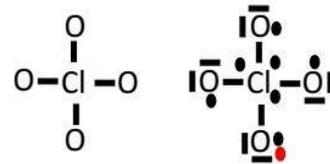


2) Placer l'atome le - électronégatif au centre.



- 4e⁻ du Cl sont utilisés pour former les 4 liaisons Cl-O
- 1e⁻ de chaque O pour former les 4 liaisons Cl-O

3) Placer les e- de valence restant.

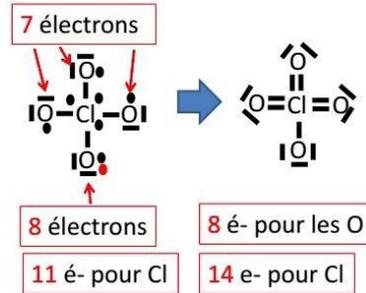


On ajoute un e⁻ en rouge à cause de la charge négative du ClO_4^-

Molécules - Représentation de Lewis

4) Vérifier le respect de la règle de l'octet pour les atomes de la 2^{ème} période.

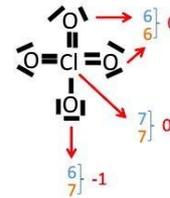
Ces 3 O ne respectent pas la règle de l'octet car liés à seulement 7e-.



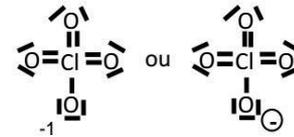
La règle de l'octet est respectée par tous les atomes. (Cl est lié à 14 e- mais ce n'est pas grave car il appartient à la 3^{ème} période).

5) Déterminer les charges formelles et proposer la structure avec le moins de charges formelles.

ClO_4^- 32 électrons

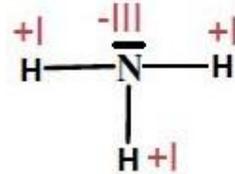


Notations



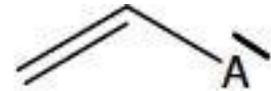
Molécules - Degré d'oxydation et valence

- **Nb d'oxydation** : charge formelle de l'atome en attribuant tous les e^- de liaison à l'atome le + électronégatif

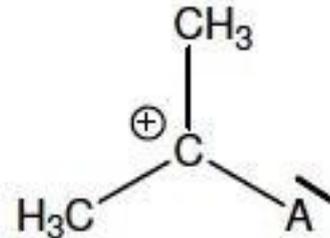


$$\chi(\text{N}) > \chi(\text{H})$$

- **Valence** : nb de liaisons que peut former un élément (au-delà de la 2^{ème} période, un élément peut avoir plusieurs valences possibles). Ci-dessus, le N a une valence de 3.



- **Système conjugué** : doublet non-liant séparé par une simple liaison d'une double liaison ou d'une lacune électronique (la présence d'un système conjugué permet la délocalisation des charges formelles sur plusieurs atomes)



Molécules - Théorie VSEPR

Géométrie VSEPR = géométrie la plus stable des molécules ou des ions possédant un atome central

Notation **A**X_mE_n avec :

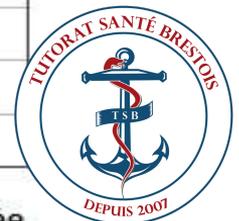
- **A** = atome central
- **m** = nb d'atomes liés à A
- **n** = nb de doublets libres portés par A



Molécules - Théorie VSEPR

m + n	m	n	géométrie	angle
2	2	0	linéaire	180°
3	3	0	triangulaire	120°
3	2	1	coudée ou en V	120°
4	4	0	tétraédrique	109,5°
4	3	1	pyramide à base triangulaire	109,5°
4	2	2	coudée	109,5°
5	5	0	bipyramide trigonale	90° et 120°
5	4	1	bascule	90° et 120°
5	3	2	en T	90°
5	2	3	linéaire	180°
6	6	0	hexagonale	90°
6	5	1	pyramide	90°
6	4	2	carré	90°

Retenir que le CO_2 (AX_2E_0) a une géométrie linéaire et que l' H_2O (AX_2E_2) a une géométrie coudée

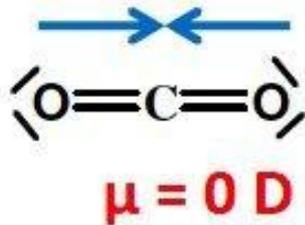


Molécules - Quelques rappels

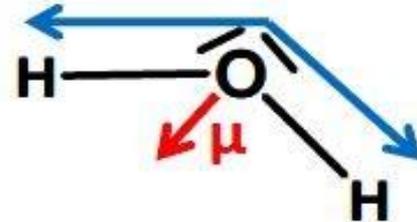
Polarité des molécules

Une différence d'électronégativité des éléments entraîne une **répartition inégale** des électrons et l'apparition de **charges partielles**. Le **moment dipolaire** de la liaison est caractérisé par un vecteur.

molécules apolaires



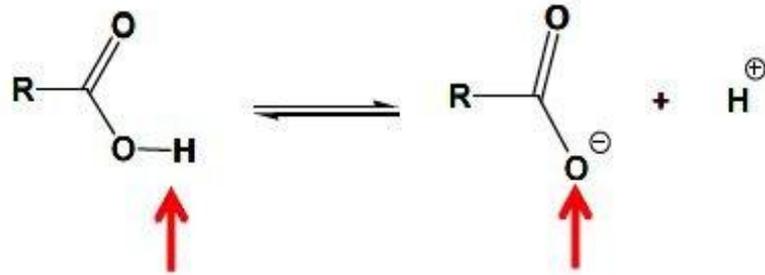
molécules polaires



Molécules - Quelques rappels

Acides et bases

- Selon Brönsted : l'acide cède un H^+ / la base accepte un H^+

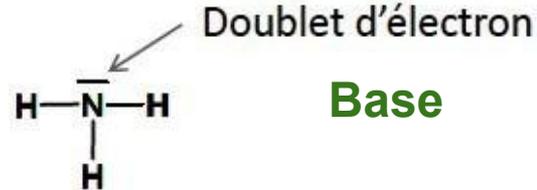
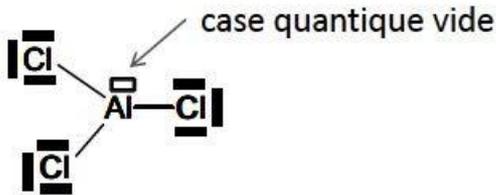


Acide de Brönsted

Base de Brönsted

- Selon Lewis : l'**acide** accepte un doublet d' e^- / la **base** donne un doublet d' e^-

Acide



Base



ORBITALES MOLÉCULAIRES



OM - Recouvrements

Les **OM** résultent du recouvrement d'**OA** provenant de 2 atomes.

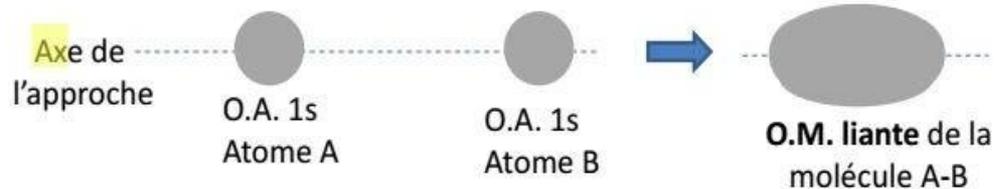
Recouvrement en phase	Recouvrement en anti-phase
<ul style="list-style-type: none">• signe des OA identiques• formation d'OM liantes (+ stables donc + basses en énergie)• pour OA non-sphérique : soit approche frontale σ, soit approche tangentielle π	<ul style="list-style-type: none">• signe des OA différents• Formation d'OM anti-liantes (- stables donc + hautes en énergie)• pour OA non-sphérique : soit approche frontale σ^*, soit approche tangentielle π^*)

OM - Recouvrements

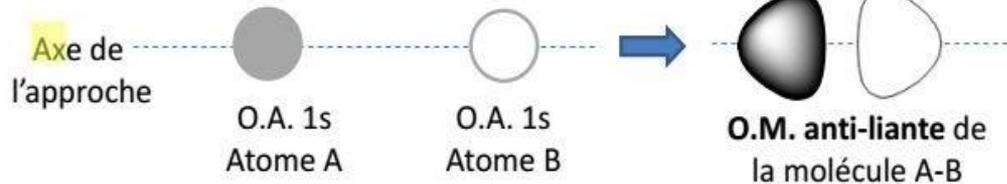
R_g : approche frontale possible entre OAs et OAp, mais pas d'approche tangentielle.

Pour 2 orbitales de **type s** :

Approche en phase



Approche en antiphase

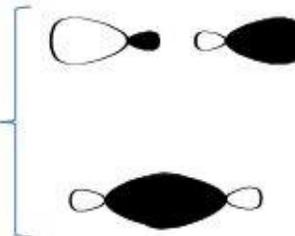
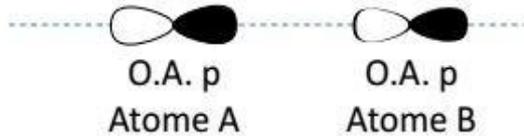


OM - Recouvrements

Pour 2 orbitales de **type p** en approche frontale :

→ Approche frontale de 2 O.A. de type p

Approche en
anti-phase



En antiphase
O.M. anti-liante : σ^*

Approche en
phase



En phase
O.M. liante : σ

Approche frontale
(**fort** recouvrement)



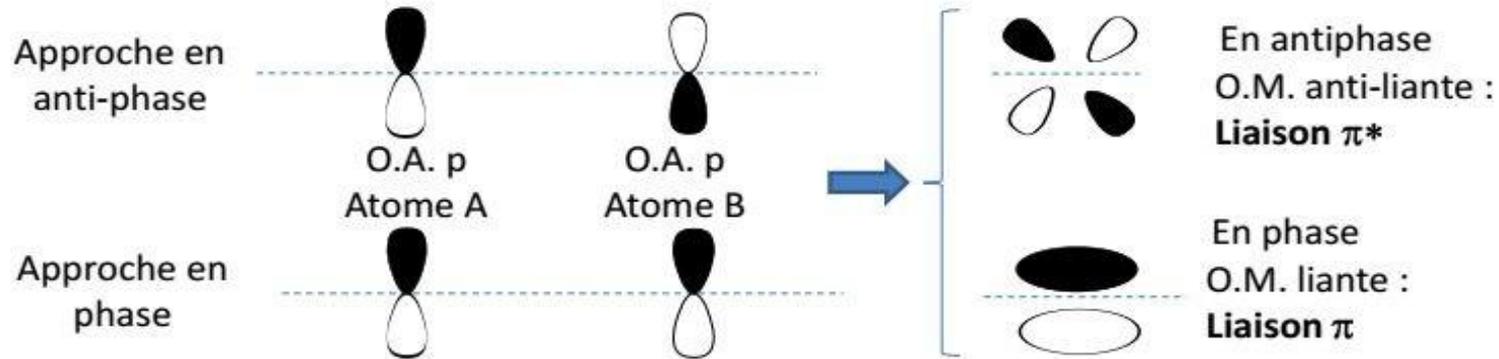
Liaison de type σ ou σ^*



OM - Recouvrements

Pour 2 orbitales de **type p** en approche tangentielle :

→ **Approche tangentielle** de deux O.A. de type p



Approche tangentielle
(faible recouvrement)

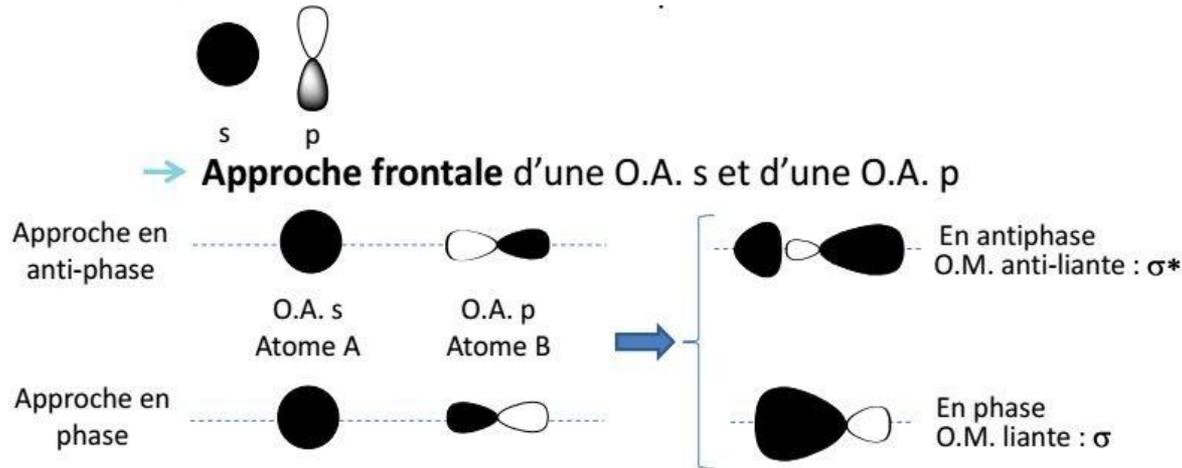


Liaison de type π ou π^*



OM - Recouvrements

Pour 1 orbitale de **type s** et 1 orbitale de **type p** en approche frontale : 2 possibilités



Approche frontale
(fort recouvrement)



Liaison de type σ ou σ^*

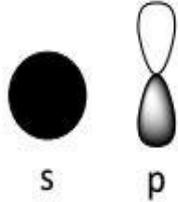
158



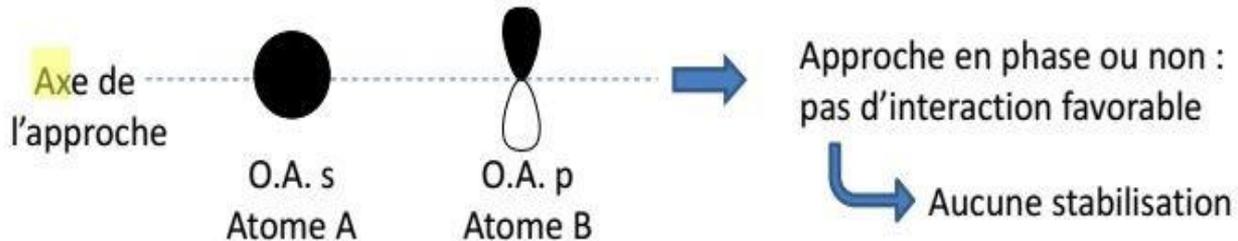
OM - Recouvrements

Pour 1 OA **type s** et 1 OA de **type p** en approche tangentielle : **impossibilité**

→ Interaction entre O.A. s avec O.A. p



→ Approche tangentielle d'une O.A. s et d'une O.A. p



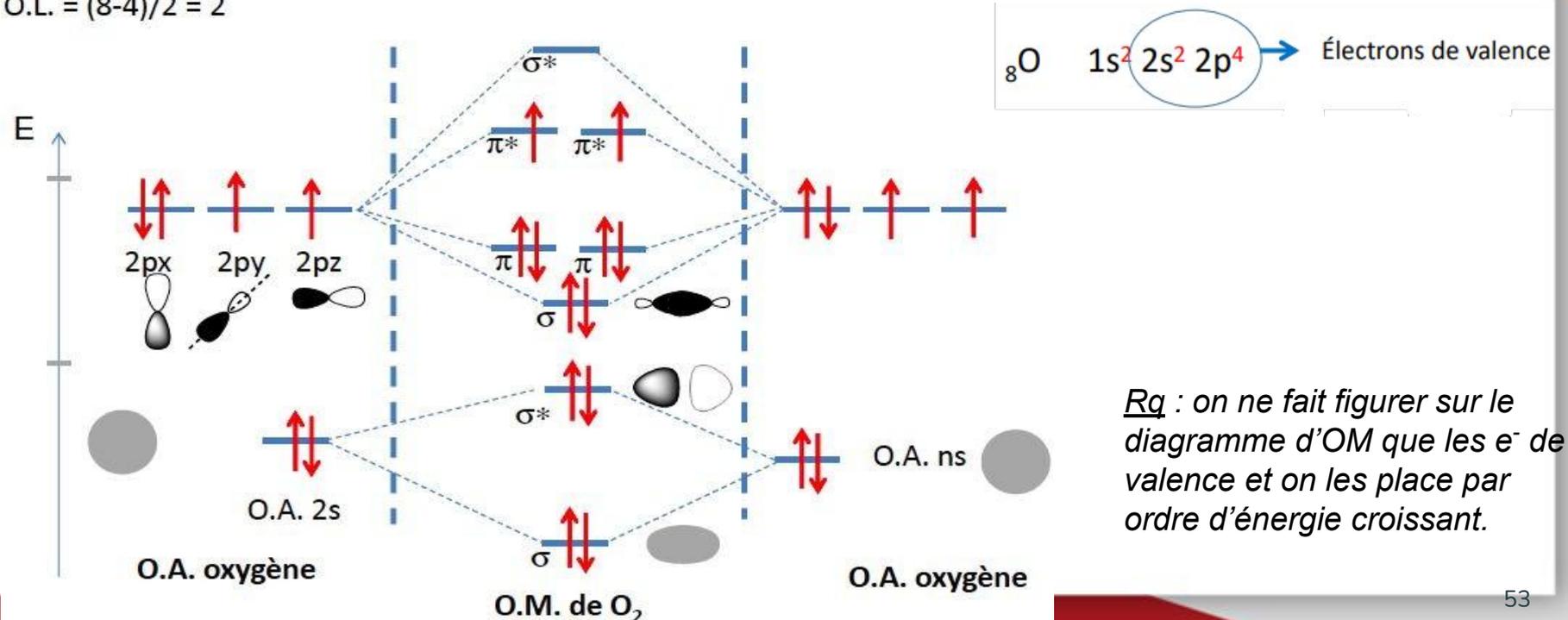
OM - Diagramme d'OM

diagramme O.M. du dioxygène.

Ordre de liaison :

(Nbre d'électron dans OM liante – nombre d'électron dans OM antiliante)/2

$$\text{O.L.} = (8-4)/2 = 2$$



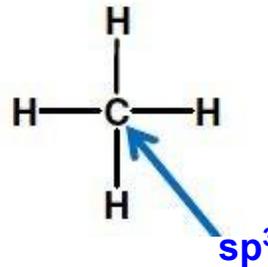
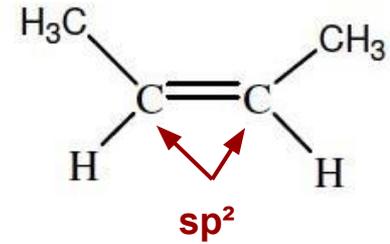
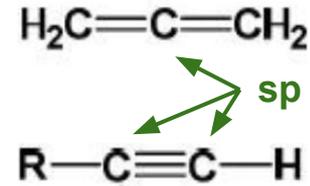
OM - Diagramme d'OM

Hybridation

Consiste en une redistribution des e^- au sein même de l'atome.

Exemple pour le carbone C :

- **Hybridation sp** = 1 OAs + 1 OAp (2 doubles liaisons OU 1 triple et 1 simple)
Géométrie linéaire
- **Hybridation sp^2** = 1 OAs + 2 OAp (1 double liaison ET 2 liaisons simples)
Géométrie linéaire
- **Hybridation sp^3**



OM - Diagramme d'OM

Rappels :

Simple liaison	1 liaison σ
Double liaison	1 liaison σ + 1 liaison π
Triple liaison	1 liaison σ + 2 liaisons π

Hybridation	Géométrie
sp	Linéaire
sp²	Plan
sp³	3D

Rq : l'hybridation ne concerne pas que l'atome de C



Un petit entraînement !

QCM 1 - A propos de l'atome, cochez la (les) proposition(s) exacte(s) :

- A) Le proton, qui porte une charge +, et l'électron, qui porte une charge -, forment à eux deux ce que l'on appelle les nucléons.
- B) La masse du proton est environ 1800x supérieure à celle de l'électron.
- C) Un élément chimique se caractérise par son nombre d'électrons.
- D) L'atome d'azote possède 7 électrons.
- E) Toutes les propositions précédentes sont fausses.



Un petit entraînement !

QCM 1 :

- A) **FAUX**. Ce sont les protons et les NEUTRONS (non chargés), qui forment les nucléons. Ils se situent dans le noyau, contrairement aux électrons qui, eux, gravitent autour du noyau.
- B) **VRAI**. Elles sont respectivement de $1,6723 \cdot 10^{-24}$ g pour le proton et de $9,108 \cdot 10^{-28}$ g pour l'électron (seuls les ordres de grandeur sont à connaître).
- C) **FAUX**. Il se caractérise par son nombre de protons (= numéro atomique), le nombre d'électrons pouvant varier selon s'il s'agit d'un atome ou d'un ion.
- D) **VRAI**. L'ATOME d'azote, 7^{ème} élément du tableau périodique, possède bien autant d'électrons que de protons, c'est à dire 7.
- E) **FAUX**.



Un petit entraînement !

QCM 2 - A propos de la configuration électronique des atomes polyélectroniques, cochez la (les) proposition(s) exacte(s) :

- A) Le nombre quantique principal le plus grand correspond au numéro de la colonne dans laquelle se trouve l'atome dans le tableau périodique.
- B) Dans le tableau périodique, le $_{20}\text{Ca}$ appartient à la 4ème période et se trouve dans la même colonne que le béryllium.
- C) Dans le tableau périodique, le $_{12}\text{Mg}$ appartient au même bloc que le $_{19}\text{K}$.
- D) Dans le cas des anions, il faut retirer autant d'électrons dans la configuration électronique de l'atome qu'il y a de charges négatives dans sa formule.
- E) Toutes les propositions précédentes sont fausses.



Un petit entraînement !

QCM 2 -

A) **FAUX**. Le nombre quantique principal le plus grand (n) correspond au numéro de la ligne (=période) dans laquelle se trouve l'atome dans le tableau périodique.

B) **VRAI**. Le numéro atomique du Ca est de 20. Selon la règle de Klechkowski, on trouve la configuration spdf suivante : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Dans le tableau périodique :

- La ligne = période dans laquelle se situe l'atome est déterminée par le nombre quantique principal le plus grand n .
- La colonne dans laquelle se situe l'atome est déterminée par le dernier type d'OA remplie. Il s'agit pour le calcium de " s^2 ".

La configuration électronique de ${}_4\text{Be}$ est : $1s^2 2s^2$: la terminaison est " s^2 "

→ Le calcium et le Béryllium se trouve bien dans la même colonne



Un petit entraînement !

QCM 2 -

C) **VRAI.**

- la configuration électronique du $_{12}\text{Mg}$ est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
- la configuration électronique du $_{19}\text{K}$ est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

Les deux éléments ont pour terminaison une OA s, ils appartiennent donc tous les deux au bloc s du tableau périodique.

D) **FAUX.** Dans le cas des anions, il faut **ajouter** autant d'électrons dans la configuration électronique de l'atome qu'il y a de charges négatives dans sa formule .

Dans le cas des cations, il faut **retirer** autant d'électrons dans la configuration électronique de l'atome qu'il y a de charges positives dans sa formule.

E) **FAUX.**



C'est fini <3

BON COURAGE A TOUS

