

Chimie I: Chimie Générale



SCIENCES DE LA
VIE ET DE LA TERRE



Shop



- Cahiers de Biologie + Lexique
- Accessoires de Biologie



Etudier



Visiter [Biologie Maroc](http://www.biologie-maroc.com) pour étudier et passer des QUIZ et QCM en ligne et Télécharger TD, TP et Examens résolus.



Emploi



- CV • Lettres de motivation • Demandes...
- Offres d'emploi
- Offres de stage & PFE

**UNIVERSITE ABDELMALK ESSAADI
FACULTE DES SCIENCES TETOUAN
DEPARTEMENT DE CHIMIE**

***COURS D'ATOMISTIQUE
SVT - STU***

**ABDESLAM H'NAIFI
2014/2015**

CHAPITRE I: STRUCTURE DE L'ATOME

I/ INTRODUCTION.

*La matière peut être décrite à deux niveaux, macroscopique qui concerne la partie observable et mesurable à notre échelle (**Ensemble** de molécules, d'atomes ou d'ions) et microscopique qui concerne les particules réelles (molécule, atome ou ion). L'existence de ces particules donne à la matière une structure discontinue. Donc la matière n'est pas divisible à l'infinie. Le terme ultime en est la molécule. La molécule est formée par la combinaison de particules encore plus petites appelées « atome ».*

Il existe à l'heure actuelle 116 atomes ou éléments dont 92 sont naturels et les atomes restant sont artificiels c'est-à-dire créés par l'homme.

Chaque atome est désigné par son nom et son symbole.

Exemple : Oxygène : O Chlore : Cl

Les atomes diffèrent par leurs structures et leurs masses, et sont eux même fragmentés en petites particules : les électrons, les protons et les neutrons.

L'atome et la molécule sont donc des particules de très petites dimensions, leurs masses sont de l'ordre de $10^{-24}g$ à $10^{-27}g$. Ces chiffres ne sont pas pratiques, on utilise la notion de mole.

Une mole correspond à la quantité de matière contenue dans $6,02 \cdot 10^{23}$ particules (atome ou molécule). $N = 6.02 \cdot 10^{23}$ est le nombre d'Avogadro qui a été déterminé expérimentalement.

II/ LES CONSTITUANTS DE L'ATOME.

D'après DALTON la matière n'a pas une structure continue, elle est formée par un ensemble de particules « indivisibles ».

On passe donc de la matière, aux molécules formant cette matière, aux atomes formant ces molécules. Puis enfin aux particules formant ces atomes. On distingue essentiellement l'électron, le proton, et le neutron.

1. L'électron :

L'électron a été découvert par l'expérience de Joseph John Thomson (1897). Cette expérience a permis de mettre en évidence une particule élémentaire : l'électron.

Mulliken a réussi à calculer la charge élémentaire de cet électron et sa masse :

$$q_e = -e = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad , \quad m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$$

2. Le proton :

Le proton a été découvert par Ernest Rutherford en 1919. L'analyse de ses protons montre que :

$$q_p = e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} , m_p = 1,672 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$$

La masse du proton est 1836 fois supérieure à celle de l'électron.

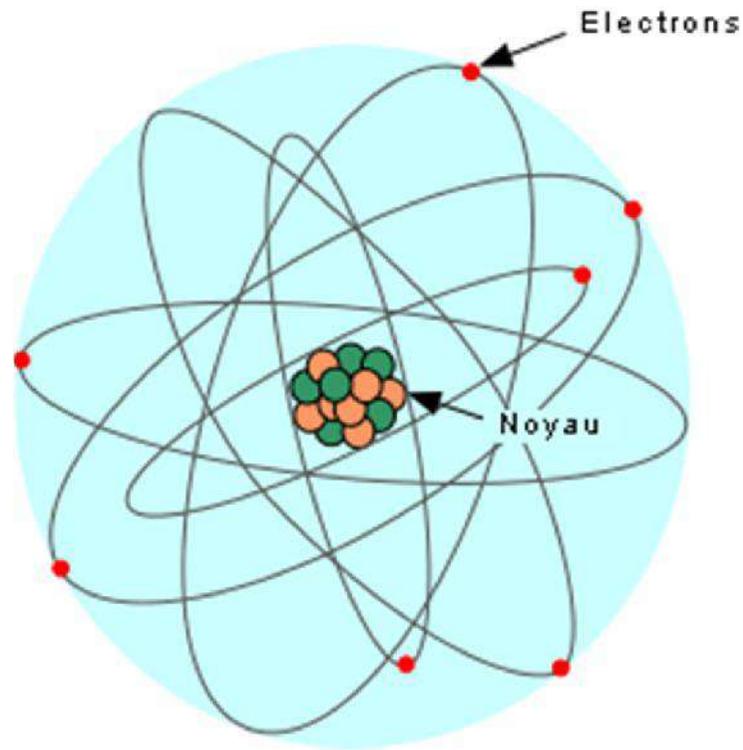
3. Le neutron :

Le neutron a été mis en évidence par James Chadwick en 1932. L'analyse des neutrons révèle que :

$$q_n = 0 \quad , \quad m_n = 1,6747 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$$

Les protons et les neutrons sont appelés « les nucléons ».

L'atome est un ensemble électriquement neutre comportant un noyau (protons + neutrons), où est centrée pratiquement toute sa masse, autour duquel se trouvent des électrons.



III/ LES CARACTERISTIQUE DE L'ATOME .

1. Représentation :

A chaque élément chimique, on a associé un symbole. Il s'écrit toujours avec une majuscule, éventuellement suivie d'une minuscule.



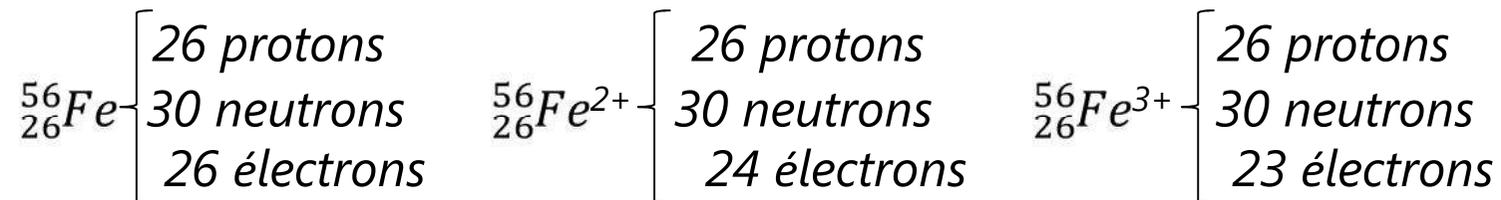
X est le symbole de l'élément.

Z est appelé numéro atomique ou nombre de charge, il désigne le nombre de protons (c'est aussi le nombre d'électrons pour un atome neutre).

Pour un élément quelconque, la charge du noyau (protons) est $+Ze$. De même la charge des électrons sera $-Ze$. A est appelé nombre de masse, il désigne le nombre de nucléons (protons + neutrons). Si N représente le nombre de neutrons, on aura la relation:

$$\mathbf{A=Z+N}$$

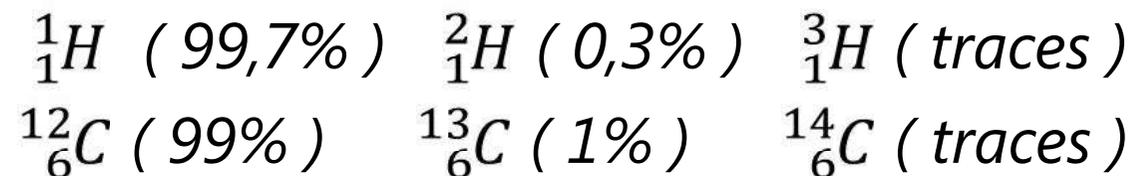
Exemple



2- Les isotopes.

On appelle isotopes d'un élément donné, des atomes ayant le même nombre de protons (même Z) mais un nombre de neutrons différent (A différent). Les isotopes ne diffèrent alors que par la composition des noyaux.

Exemple :



3- Mole et masse molaire.

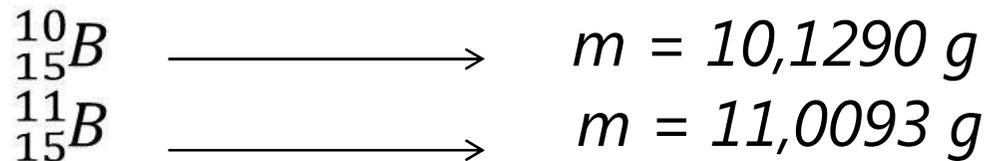
Une mole correspond à la quantité de matière contenue dans $6.02 \cdot 10^{23}$ particules élémentaires.

A l'état naturel, les éléments sont le plus souvent des mélanges d'isotopes dont les pourcentages restent constants.

La masse molaire d'un atome est la masse d'une mole d'atomes. Elle correspond à la moyenne des masses des isotopes pondérés par leurs pourcentages.

Exemple :

Le Bore existe sous forme de deux isotopes ${}^{10}_{15}\text{B}$ et ${}^{11}_{15}\text{B}$ avec les proportions respectives de 19,91 % et 80,09 %. La masse molaire donnée dans les tables est 10,83 g. Cette valeur est la moyenne des masses molaires des deux isotopes.



$$M(\text{B}) = 10,129 \times \frac{19,91}{100} + 11,0093 \times \frac{80,09}{100} = 10,83 \text{ g}$$

4- L'unité de masse atomique u.m.a.

Le Kg est mal adaptée pour les dimensions de l'atome. On prend donc une unité particulière, appelée unité de masse atomique noté u.m.a.

L'u.m.a est par définition le $\frac{1}{12}$ de la masse d'un atome de l'isotope 12 du carbone.

Par définition une masse de 12 g de carbone renferme N atomes, donc $1 \text{ u.m.a} = \frac{1}{12} \times \frac{12}{N} = \frac{1}{N} \text{ g}$.

$$N = 6,02 \cdot 10^{23} \longrightarrow \mathbf{1 \text{ u.m.a} = 1,6604 \cdot 10^{-24} \text{ g}}$$

Exemple :

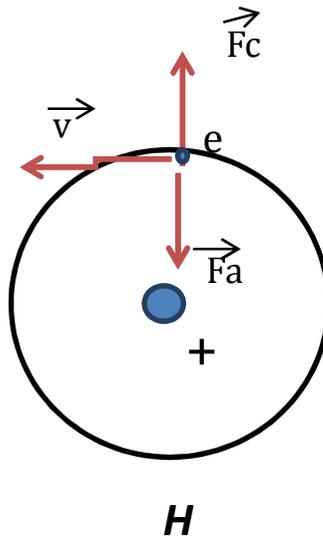
$$\text{Masse du } \mathbf{proton} = 1,6724 \cdot 10^{-24} \text{ g} = \mathbf{1,0072 \text{ u.m.a.}}$$

$$\text{Masse du } \mathbf{neutron} = 1,6747 \cdot 10^{-24} \text{ g} = \mathbf{1,0087 \text{ u.m.a.}}$$

CHAPITRE II: MODELES CLASSIQUES DE L'ATOME

I/ MODELE DE RUTHERFORD.

Ce modèle est basé sur l'existence du noyau dans lequel est pratiquement concentrée toute la masse de l'atome est autour du quel gravitent des électrons.



F_a : force d'attraction électrostatique

$$F_a = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2}$$

F_c : force centrifuge dû à la rotation de l'électron autour du noyau.

$$F_c = m \times \frac{v^2}{r} \quad (\text{mouvement circulaire})$$

L'équilibre résulte de la compensation de la force d'attraction F_a par la force centrifuge F_c due à la rotation de l'électron autour du noyau .

$$F_a = F_c \longrightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} = m \times \frac{v^2}{r}$$

$$\text{D'ou : } mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r}$$

L'énergie totale de l'électron est $E_T = E_C + E_P$ on a :

$$E_C = \frac{1}{2} m v^2 \longrightarrow E_C = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r}$$

$$E_P = q V$$
$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e}{r} \longrightarrow E_P = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r}$$
$$q = -e$$

D'où :

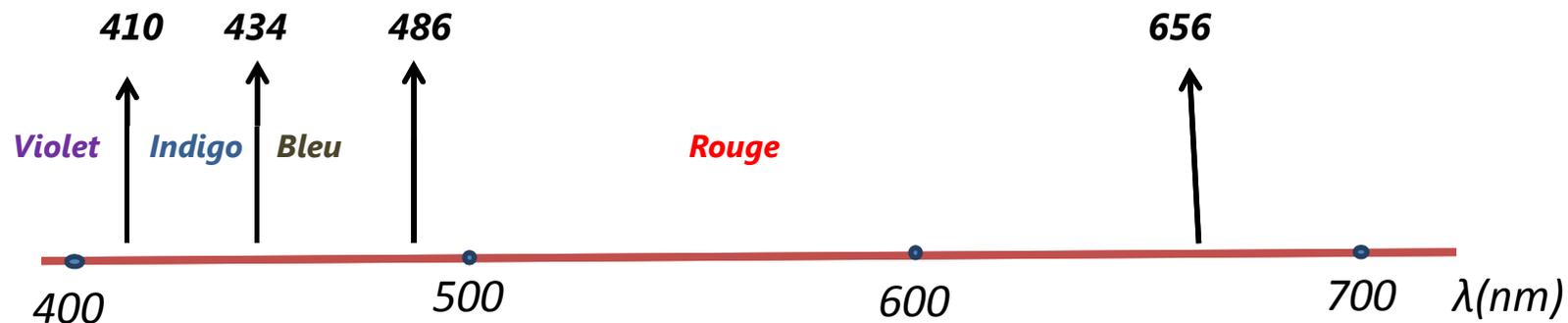
$$E_T = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \times \frac{1}{r}$$

Ce modèle présente les inconvénients suivants:

- * L'énergie E est fonction de r , donc elle est continue.*
- * D'après la théorie électromagnétique, lorsqu'une particule chargée est soumise à une accélération elle doit rayonner.*
- * Si la particule rayonne, son énergie doit diminuer et son rayon aussi d'après l'expression de E_T par la suite l'électron devrait tomber sur le noyau.*

Ces résultats sont en contradiction avec l'expérience, en effet :

- L'atome d'hydrogène dans son état fondamental ne rayonne pas.
- L'atome est stable, l'électron ne tombe jamais sur le noyau.
- Le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène est un spectre discontinu ou spectre de raies (formé de quatre raies principales dans le domaine du visible).



Conclusion :

Vu ces contradictions impliqués dans le modèle de Rutherford, BOHR avait proposé une autre théorie.

II/ MODELE DE BOHR.

1- Description (cas de l'atome d'hydrogène).

Pour lever les contradictions précédentes, Bohr propose quatre hypothèses :

** Dans l'atome, le noyau est immobile alors que l'électron de masse m se déplace autour du noyau selon une orbite circulaire de rayon r .*

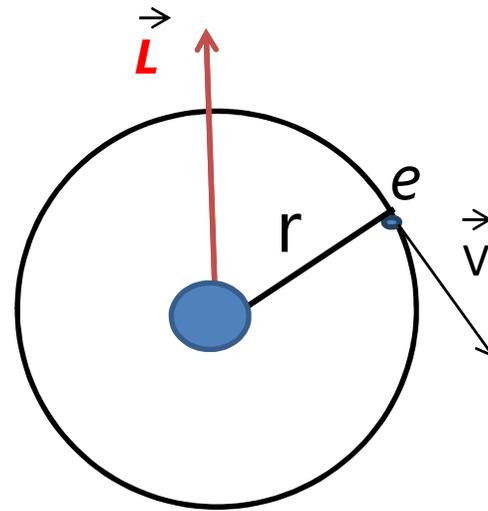
** L'électron ne peut se trouver que sur des orbites privilégiées sans émettre de l'énergie, on les appelle « orbites stationnaires ».*

** Lorsqu'un électron passe d'un niveau à un autre il émet ou absorbe de l'énergie :*

$$\Delta E = h\nu$$

** Le moment cinétique de l'électron ne peut prendre que des valeurs entières (quantification du moment cinétique).*

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge m \vec{v}$$



$$L = m v r = n \cdot \frac{h}{2\pi}$$

h : constante de Planck = $6,626 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$

n : entier naturel

3- Aspect quantitatif de l'atome de Bohr.

Le système est stable par les deux forces F_a et F_c

$$\text{Force d'attraction} \quad : \quad F_a = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2}$$

$$\text{Force centrifuge} \quad : \quad F_c = m \times \frac{v^2}{r}$$

Le système est en équilibre si : $F_a = F_c$

$$\text{C'est-à-dire :} \quad \mathbf{mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r} \quad (1)}$$

Energie totale et rayon de l'orbite:

$$\mathbf{E_T = E_C + E_P}$$

On a : $\mathbf{E_P = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r}}$ et $\mathbf{E_C = \frac{1}{2} m v^2}$

Donc : $\mathbf{E_T = - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \times \frac{1}{r}}$ (2)

On sait que : $\mathbf{m v r = n \frac{h}{2\pi}}$

D'où : $\mathbf{m v^2 = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m r^2}}$ (3)

Les relations (1) et (3) donnent :

$$r = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \cdot n^2 \quad (4)$$

C'est le rayon de l'orbite ou circule l'électron, il est quantifié.

Si on remplace (4) dans (2) on obtient :

$$E_T = - \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (5)$$

L'énergie totale de l'électron est donc **quantifiée**.

* Pour $n = 1$ (l'état fondamental : l'électron occupe l'orbite de rayon r_1 et d'énergie E_1).

$$r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA} \quad (1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m})$$

$$E_1 = -21,78 \cdot 10^{-19} \text{ J} = -13,6 \text{ eV} \quad (1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J})$$

* Pour $n = 2$ (Première état excité)

$$r_2 = 4r_1 = 2,116 \text{ \AA} \quad \text{et} \quad E_2 = \frac{E_1}{4} = -3,4 \text{ eV}$$

* Pour $n = 3$ (Deuxième état excité)

$$r_3 = 9r_1 = 4,761 \text{ \AA} \quad \text{et} \quad E_3 = \frac{E_1}{9} = -1,51 \text{ eV}$$

Définition : L'électron volt est l'énergie acquise par un électron accéléré par une d.d.p de 1 volt.

$$E = -qV = 1,602 \cdot 10^{-19} \times 1 = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1 \text{ eV}$$

Donc : **$1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$**

4- Absorption et émission d'énergie.

Un électron ne peut absorber ou libérer de l'énergie c'est à dire rayonner qu'en passant d'un niveau (orbite) à un autre.

La quantité d'énergie absorbée ou émise est égale à la différence d'énergie entre les deux niveaux (relation de Planck) :

$$\Delta E = | E_f - E_i | = h\nu$$

E_f : état final

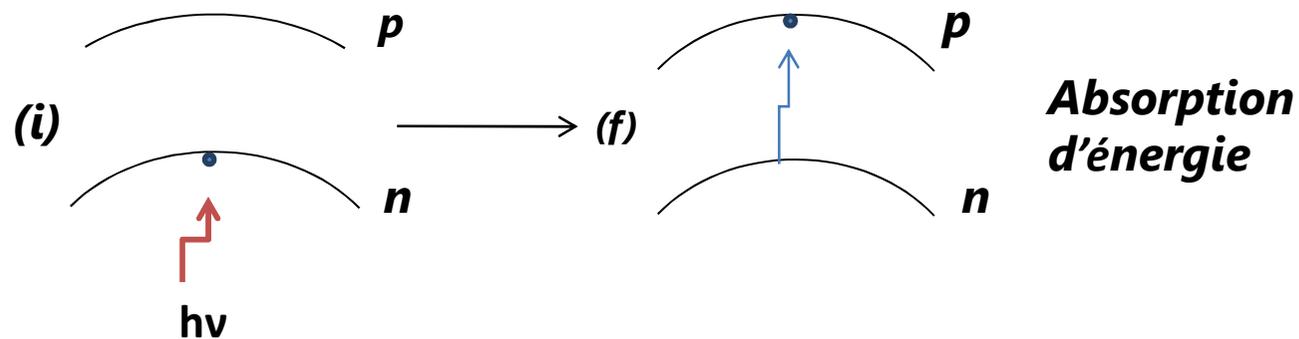
E_i : état initial

h : C^{ste} de Planck

ν : fréquence de radiation

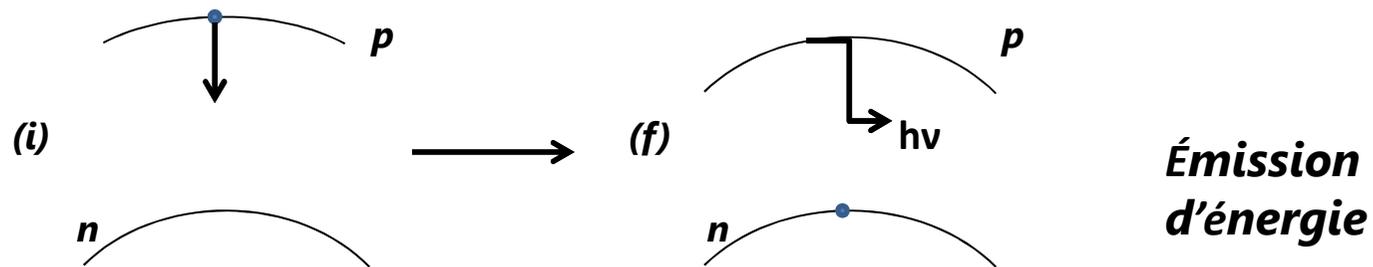
Absorption :

lorsqu'un électron passe d'un niveau n (orbite de rayon r_n) à un niveau p ($p > n$) supérieure (orbite de rayon r_p), il absorbe une radiation de fréquence ν_{n-p} .



Emission :

Lorsqu'un électron passe d'un niveau p à un niveau n ($p > n$), il émet une radiation de fréquence ν_{p-n} .



III/ SPECTRE D'EMISSION DE L'ATOME D'HYDROGENE.

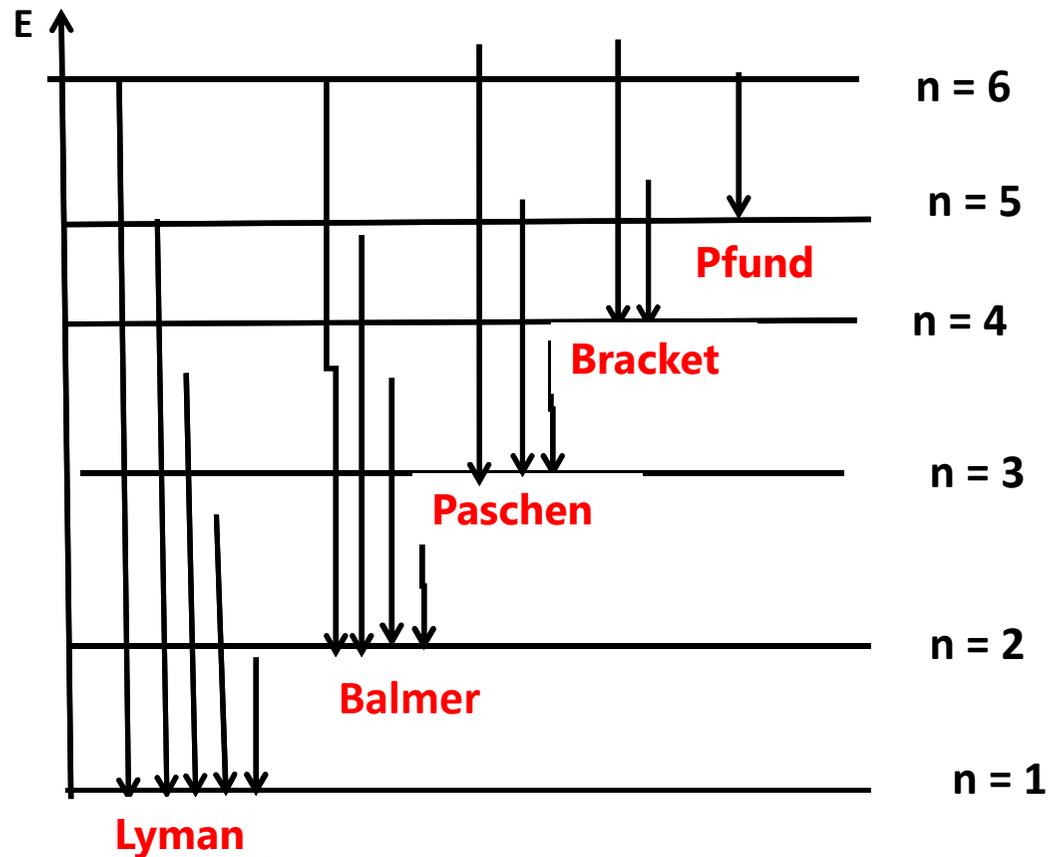
L'énergie émise ou absorbée par un électron est :

$$\Delta E = |E_p - E_n| = h\nu \quad p > n$$
$$\Delta E = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad \text{or} \quad h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$
$$\frac{1}{\lambda} = \sigma = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$$

avec $R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = C^{\text{ste}} \text{ de Rydberg.}$

$R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$, cette valeur est en bonne accord avec l'expérience.

Cette relation permet de calculer les différentes longueurs d'onde. En général, on trouve plusieurs séries de spectre selon l'état où se trouve l'électron.



Série de Lyman $n=1$ et $p>1$

Série de Balmer $n=2$ et $p>2$

Série de Paschen $n=3$ et $p>3$

Série de Brackett $n=4$ et $p>4$

Série de Pfund $n=5$ et $p>5$

IV/ GENERALISATION AUX IONS HYDROGENOIDES.

Les hydrogenoides sont des ions qui possèdent un seul électron et Z protons.



Exemple : He ($Z=2$) \longrightarrow He⁺ (1e⁻ et 2p)

Li ($Z=3$) \longrightarrow Li²⁺ (1e⁻ et 3p)

He⁺ et Li²⁺ sont des ions hydrogénéoides. Leurs énergie totale s'écrit :

$$E_T = - \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad \text{D'où} \quad E_T = E_1 \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

Avec $E_1 = -13,6 \text{ ev}$, l'énergie de l'atome d'hydrogène à l'état fondamental.

Le rayon d'une orbite de rang n d'un ion hydrogénoïde est :

$$r = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \cdot \frac{n^2}{Z} \quad \text{d'ou} \quad r = r_1 \cdot \frac{n^2}{Z}$$

Avec $r_1 = 0,53 \text{ \AA}$ étant le rayon de l'atome d'hydrogène à l'état fondamental.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\lambda} = \sigma = Z^2 \frac{m e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \\ \frac{1}{\lambda} = Z^2 R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \end{array} \right. \quad \text{Relation de RITZ}$$

V/ ENERGIE D'IONISATION.

C'est l'énergie nécessaire pour ramener l'électron de son état fondamental vers l'infinie, c'est-à-dire arracher un électron à l'atome.



C'est l'ionisation de l'atome d'hydrogène.

Donc : **$\Delta E = E_{\infty} - E_1 = 13,6 \text{ ev}$ ($E_{\infty} = 0$)**

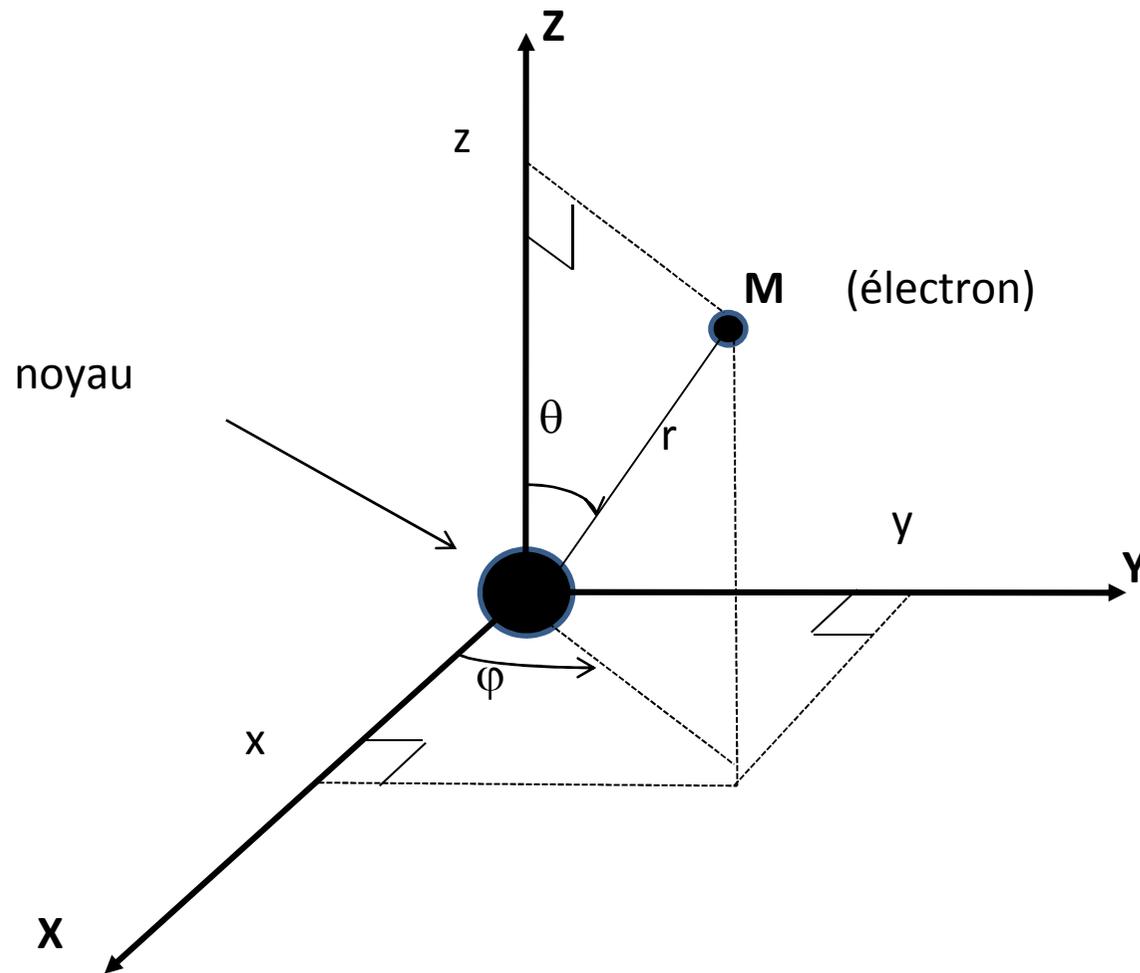
Conclusion:

Le modèle de BOHR a permis une très bonne interprétation du spectre d'émission de l'atome d'hydrogène. Mais ce modèle était incapable d'expliquer le spectre des atomes à plusieurs électrons. D'où la nécessité d'un nouveau modèle.

CHAPITRE III: MODELE QUANTIQUE DE L'ATOME

I/ PROBABILITE ET DENSITE DE PROBABILITE.

*En mécanique classique (Théorie de Bohr), l'étude du mouvement d'un électron consiste à chercher avec précision sa trajectoire. Tandis qu'en mécanique quantique on parle en terme de : **Probabilité de présence de l'électron** dans une certaine région de l'espace entourant le noyau.*



L'électron est caractérisé par:

- son état énergétique
- sa probabilité de présence à un endroit

donné

Probabilité de présence

On définit la probabilité de présence de l'électron dans l'élément de volume dV autour du point M par :

$$dP = |\Psi|^2 dV$$

La fonction d'onde Ψ doit satisfaire la condition de normalisation :

La probabilité de trouver l'électron dans tout l'espace = 1

$$P = \int_{\text{espace}} |\Psi|^2 dV = 1$$

On dit que la fonction d'onde est *normée*.

Ainsi, la notion classique de position est remplacée par la notion de :

Densité de probabilité de présence

$$\frac{dP}{dV} = |\Psi|^2 \quad : \text{densité } \underline{\text{volumique}} \text{ de probabilité de présence}$$

ou *densité électronique.*

II- L'EQUATION DE SCHRODINGER.

1- Cas général.

Cette équation représente la relation fondamentale de la mécanique quantique, elle s'écrit :

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \quad \text{ou} \quad \hat{H}\Psi = E\Psi$$

\hat{H} : est appelé operateur Hamiltonien du système.

φ ou Ψ : fonction d'onde, fonction propre du \hat{H}

E : énergie totale de l'électron, valeur propre de \hat{H}

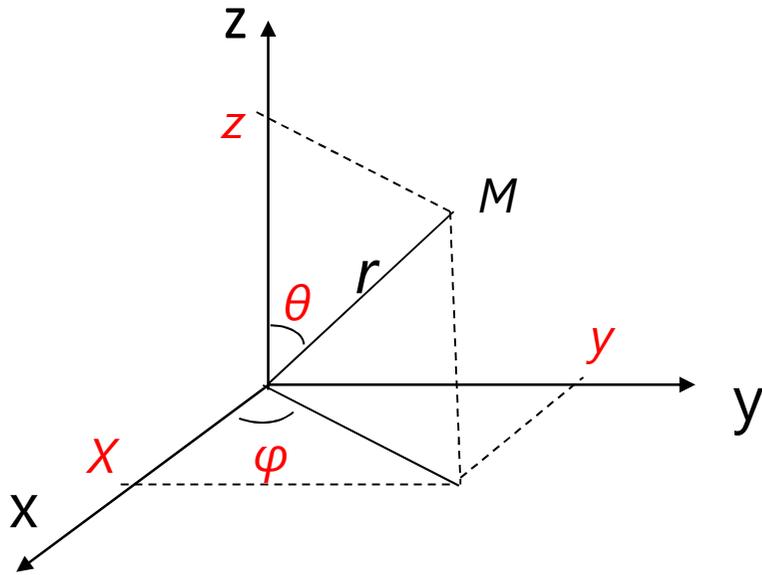
Résoudre l'équation de Schrödinger consiste à déterminer les fonctions Ψ .

2- Application à l'atome d'hydrogène .

On rappelle que nous traitons l'atome d'hydrogène constitué d'un e^- qui gravite autour d'un noyau lourd supposé fixe.

Les densités de probabilité $|\Psi|^2$ pour l'atome d'hydrogène ne dépendent pas du temps.

Le potentiel ne dépend que de r , il est préférable de représenter Ψ en coordonnées sphériques.



$$\begin{cases} X \\ Y \\ Z \end{cases} \rightarrow \begin{cases} r & 0 \leq r \leq \infty \\ \theta & 0 \leq \theta \leq \pi \\ \varphi & 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{cases}$$

$$X = r \sin\theta \cos\varphi$$

$$Y = r \sin\theta \sin\varphi$$

$$Z = r \cos\theta$$

$$dv = dx dy dz = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$$

Dans ces conditions, l'expression d'une fonction d'onde $\Psi(r,\theta,\varphi)$ peut être mise sous la forme :

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \times \Theta(\theta) \times \Phi(\varphi)$$

$R(r)$: est une fonction radiale qui nous donne l'énergie de la fonction.

$\Theta(\theta) \times \Phi(\varphi)$: est une fonction angulaire qui nous donne la forme de la fonction.

la résolution des fonctions $R(r)$, $\Theta(\theta)$ et $\Phi(\varphi)$ nécessite d'introduire des nombres entiers :

$R(r)$ nécessite l'introduction de n et l (les 2 premiers nombres quantiques).

$\Theta(\theta)$ nécessite l'introduction de l et m .

$\Phi(\varphi)$ nécessite l'introduction de m .

Donc la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

Les entiers n , l et m sont appelés nombres quantiques.

III- LES NOMBRES QUANTIQUES.

1- Le nombre quantique principal n .

n est un entiers positif ($n \geq 1$) . Il définit l'énergie de l'atome :

$$E_n = - \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -13,6 \frac{1}{n^2} \text{ (ev)}$$

n donne une idée du volume de l'espace dans lequel l'électron se meut. Ce volume est d'autant plus grand que n est grand. Il définit donc la couche ou l'électron se déplace.

n	1	2	3	4	5
Niveau de couche	K	L	M	N	O

2- Le nombre quantique secondaire ou azimutal l :

l est le nombre quantique secondaire ou azimutal, il prend toutes les valeurs comprises entre 0 et $n-1$.

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

l définit la notion de sous couche et détermine la géométrie des orbitales atomiques.

A chaque valeur de l , on lui fait correspondre une fonction d'onde que l'on désigne par une lettre.

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

3- Le nombre quantique magnétique m .

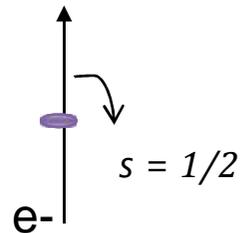
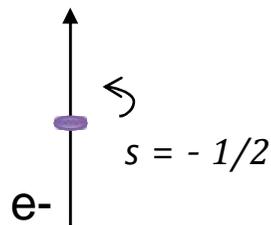
m est le nombre magnétique, il définit la case quantique. m prend toutes les valeurs comprises entre $-l$ et $+l$.

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

Il y a $2l+1$ valeurs de m , donc $2l+1$ orbitales. Chaque orbitale atomique est donc caractérisée par une combinaison des trois nombres quantiques n , l et m .

4- Le nombre quantique de spin :

Pour décrire totalement l'électron d'un atome, il faut lui attribuer un quatrième nombre quantique (noté s) lié à la rotation autour de lui-même. Ce nombre ne peut prendre que deux valeurs $\pm \frac{1}{2}$.



Conclusion :

L'état de l'électron c'est-à-dire son niveau énergétique est caractérisé par quatre nombres quantiques n , l , m , et s . Pour n donnée on aura donc n sous couches, n^2 orbitales et $2n^2$ électrons au maximum.

III – LES ORBITALES ATOMIQUES : O.A.

Une fonction d'onde dépend des nombres quantiques n, l, m , elle est notée $\Psi_{n, l, m}$.

La fonction $\Psi_{n, l, m}$, solution de l'équation de Schrödinger, permet de calculer la probabilité de présence de l'électron dans un certain volume à la distance r du noyau.

$\Psi_{n, l, m}^2$ mesure la *densité électronique* dans un volume donné de l'espace. La forme de cette région de l'espace décrite par l'électron est appelée : *orbitale atomique*

Exemple : Les expressions analytiques de quelques fonctions, dans le cas des hydrogéoïdes.

couche	n	l	m	O. A.
K	1	0	0	1s, ψ_{100} ou ψ_{1s}
L	2 2 2 2	0 1 1 1	0 0 1 -1	2s, ψ_{200} ou ψ_{2s} 2p _z , ψ_{210} ou ψ_{2pz} 2p _x , ψ_{211} ou ψ_{2px} 2p _y , ψ_{21-1} ou ψ_{2py}
M	3 3 3 3 3 3 3 3 3	0 1 1 1 2 2 2 2 2	0 0 1 -1 0 1 -1 2 -2	3s, ψ_{300} ou ψ_{3s} 3p _z , ψ_{310} ou ψ_{3pz} 3p _x , ψ_{311} ou ψ_{3px} 3p _y , ψ_{31-1} ou ψ_{3py} 3d _{xy} 3d _{xz} 3d _{yz} 3d _{x²-y²} 3d _{z²}

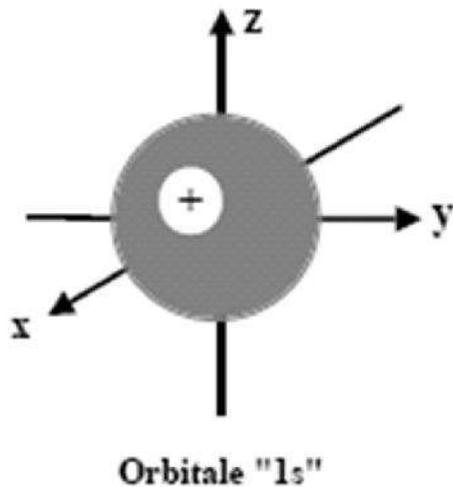
1) Description de l'orbitale « s »

La condition $l=0$ implique $m=0$

Ces fonctions d'onde s'écrivent : $\psi_{n,0,0}$ ou ψ_{ns}

Pour les orbitales **s**, la densité de probabilité de présence ψ^2 de l'électron à la surface d'une sphère de rayon r est la même dans toutes les directions de l'espace, mais elle varie avec r .

L'orbitale est dite de **symétrie sphérique**.

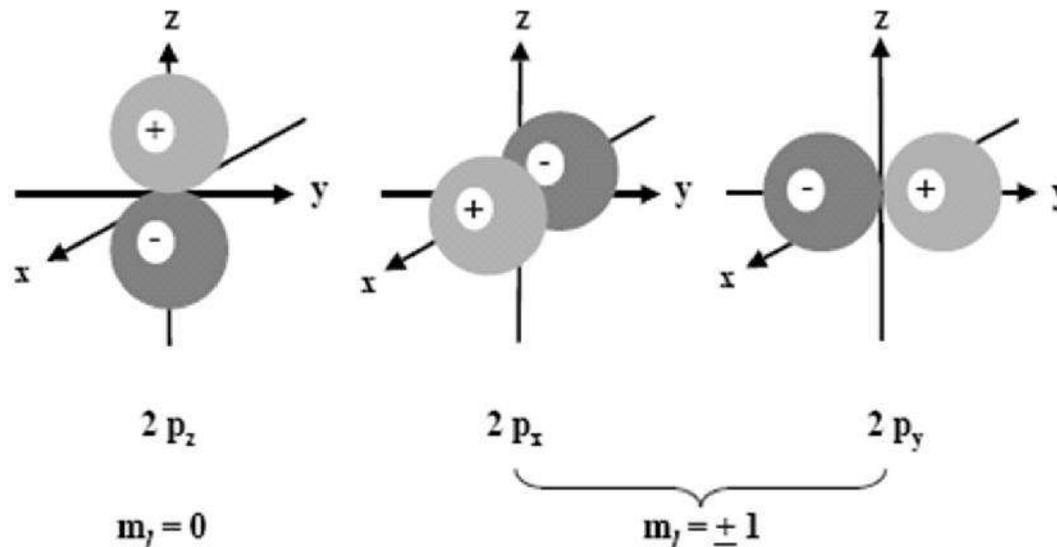


Le signe + indiqué à l'intérieur de la sphère est le signe de la Fonction d'onde ψ_{1s}

2) Description des orbitales « p »

Les orbitales p ($l=1$) peuvent être représentées par deux lobes à peu près sphériques, accolés, ayant pour axes de symétrie les axes x , y et z du trièdre de référence.

On les appelle donc « np_x », « np_y » et « np_z » ($n \geq 2$)



Remarque : le signe + ou – indiqué dans chaque lobe est le signe de ψ .

Plan nodal : Les orbitales p possèdent un "plan nodal", dans lequel la probabilité de trouver l'électron est nulle.

3) Description des orbitales « d »

$$l = 2 \quad \text{et} \quad m = -2, -1, 0, 1, 2 \quad (n \geq 3)$$

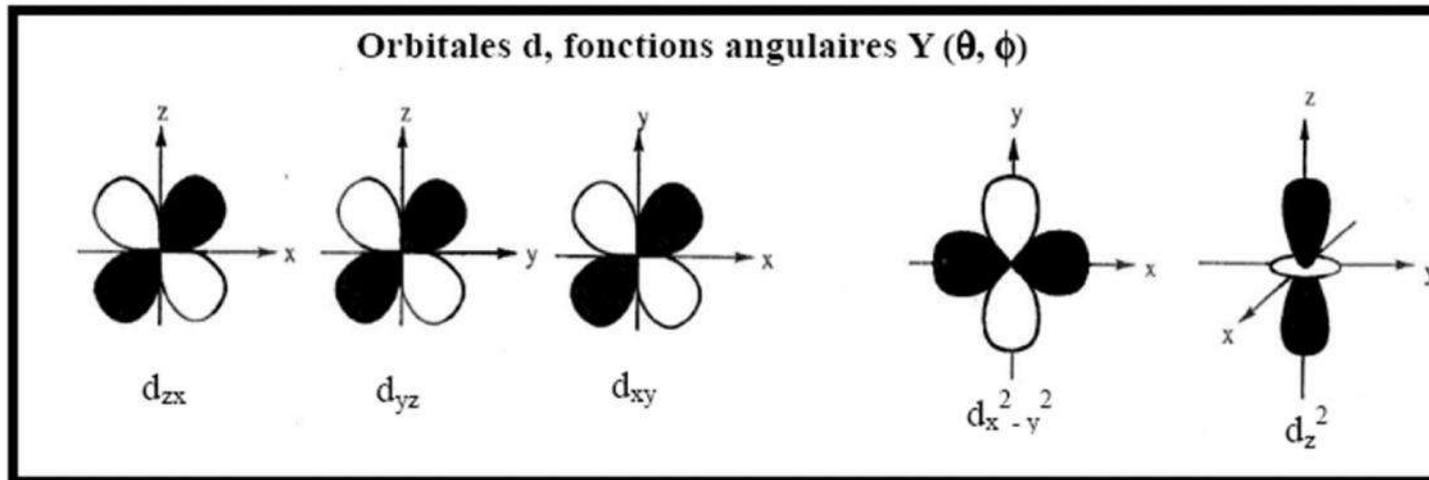


Fig. 33 : représentation des fonctions angulaires des orbitales d

CHAPITRE IV: LES ATOMES POLYELECTRONIQUES

I/ CONFIGURATIONS ELECTRONIQUE DES ATOMES.

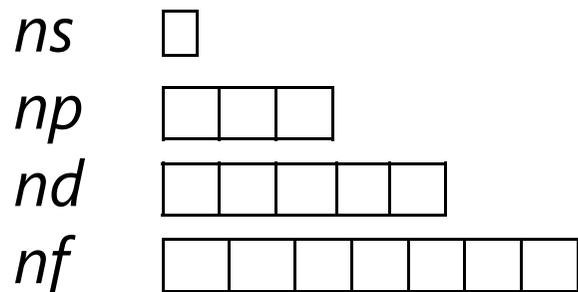
La configuration électronique d'un atome est la répartition de Z électrons de l'atome dans un état fondamental sur les orbitales atomiques. L'atome est constitué de plusieurs niveaux énergétiques définies par les nombres quantiques n , l , m . Chaque orbitale atomique est représentée par une case quantique, elle peut alors contenir :

0 électron : c'est une lacune électronique.

1 électron : c'est un électron célibataire.

2 électrons : c'est un doublet (ou paire).

Une orbitale est définie par les trois nombres n , l , et m . Il est commode de représenter les orbitales à l'aide des cases quantiques.



Dans chaque sous couche définie par la valeur de l , le nombre d'orbitale est égal au nombre de valeurs possible de m .

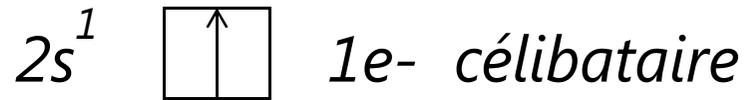
- | | |
|--|-------------------------------|
| $l = 0$, $m = 0$ | → 1 orbitale s |
| $l = 1$, $m = -1, 0, 1$ | → 3 orbitales p |
| $l = 2$, $m = -2, -1, 0, 1, 2$ | → 5 orbitales d |
| $l = 3$, $m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ | → 7 orbitales f |

Le remplissage des orbitales atomiques s'effectue à l'aide des quatre règles générales.

1- Principe d'exclusion de PAULI.

Dans un atome, deux électrons ne peuvent pas avoir leurs quatre nombres quantiques identiques. Si deux électrons d'un atome occupent la même orbitale (même valeur de n , l , et m), ils diffèrent forcément par le nombre quantique de spin.

Exemple :



$$\begin{array}{lllll} (1) & n=2 & l=0 & m=0 & s = \frac{1}{2} \\ (2) & n=2 & l=0 & m=0 & s = -\frac{1}{2} \end{array}$$

Pour une couche n , le nombre de cases est n^2 et le nombre d'électrons est $2n^2$. Une case quantique ne peut contenir au maximum que deux électrons de spins opposés

2- Principe de stabilité. Règle de KLECHOVSKI.

- *Les électrons occupent les orbitales atomiques les plus stables c'est à dire celles de plus basse énergie.*
- *L'ordre des énergies croissantes est l'ordre des valeurs croissantes de la somme $(n+l)$.*
- *Si deux sous couches correspondent à la même valeur de $(n+l)$, la sous couche avec la plus petite valeur de n a l'énergie la plus basse.*
- *Les orbitales d'une même sous couche ont la même énergie.*

Règle de Klechkowski

(représentation mnémotechnique)

K	1s ²				
L	2s	2p ⁶			
M	3s	3p	3d ¹⁰		
N	4s	4p	4d	4f ¹⁴	
O	5s	5p	5d	5f	5g ¹⁸
P	6s	6p	6d	6f	6g
Q	7s	7p	7d	7f	7g
R	8s				

On écrit les diverses couches et sous-couches dans un tableau, chaque ligne correspondant à une valeur de n.

Le remplissage se fait selon les diagonales.

Le nombre placé en exposant est le nombre maximal d'électrons que peut contenir la sous-couche correspondante : soit $2 \cdot (2l+1) = 4l+2$

3- Règle de HUND.

Les électrons se placent d'abords à raison de un par case, et ne s'apparient en doublet que s'ils sont plus nombreux que les cases. Les électrons célibataires doivent être maximal dans une même sous couche.

Exemple : $2p^3$

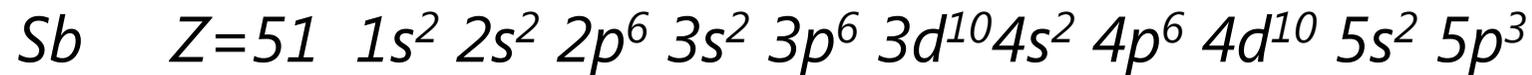


Correcte

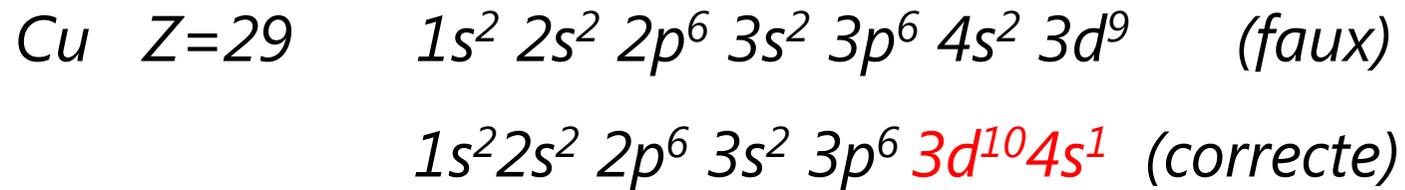
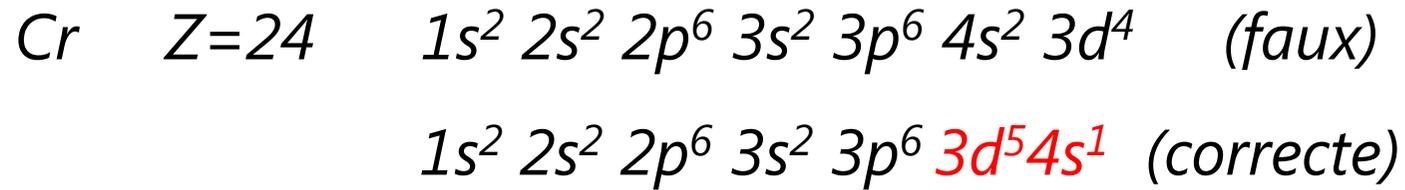


Faux

4- Exemples et exceptions.



Il existe des exceptions ou ces règles ne sont pas respectées, en raison essentiellement du voisinage en énergie des niveaux 4s 3d et 5s 4d.



Cette irrégularité est due au fait que l'atome gagne en stabilité lorsque la sous couche d est à moitié remplie ou totalement remplie.

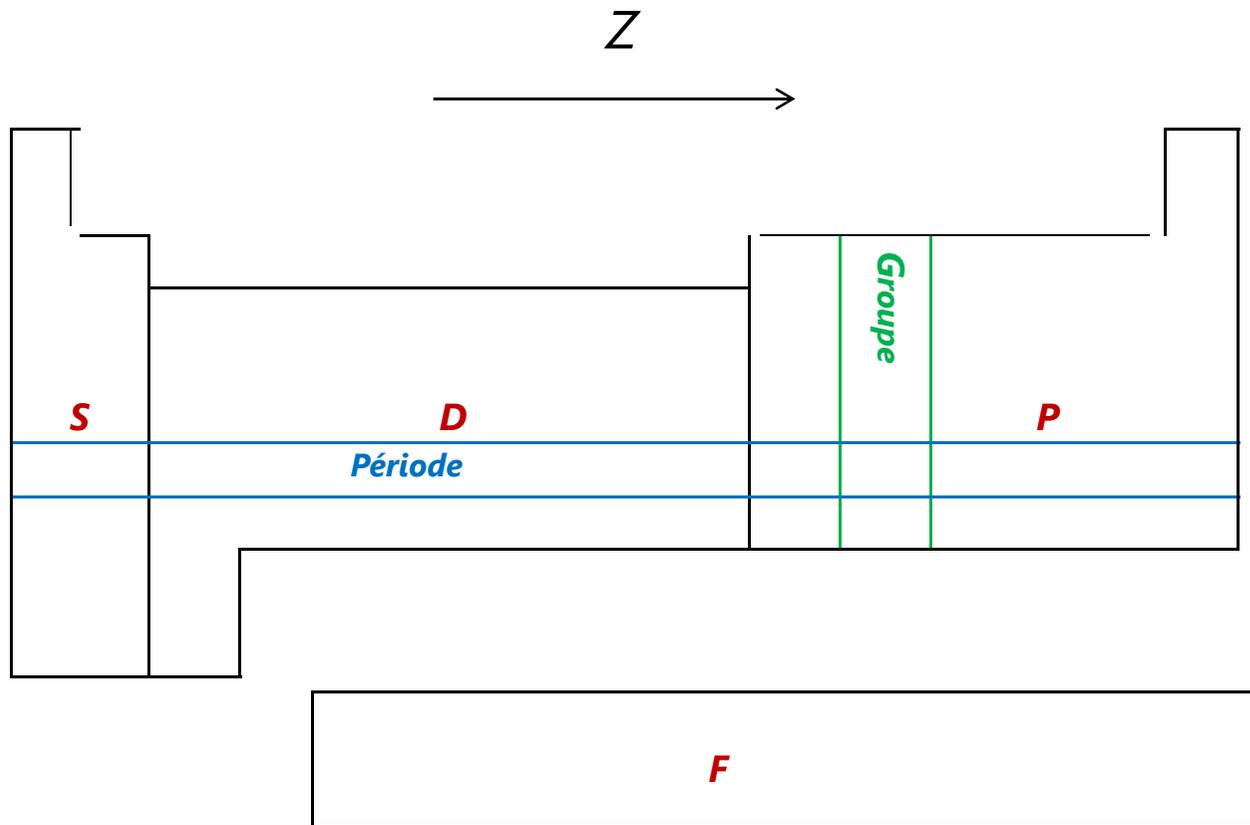
II/ LA CLASSIFICATION PERIODIQUE DES ELEMENTS

*Les éléments chimiques sont classés dans un tableau périodique (tableau de **Mendeleïev**), constitué de lignes et de colonnes. Ils sont rangés de gauche à droite dans le tableau par ordre croissant de leur numéro atomique Z .*

Le tableau périodique contient 116 éléments. Il est séparé en quatre blocs S, P, D et F.

Les éléments d'une même ligne horizontale du tableau périodique constituent une période.

Les éléments d'une même colonne ayant la même configuration électronique de la couche externe constituent une famille ou groupe.

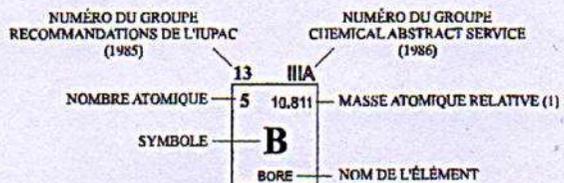


Les éléments chimiques ne sont pas entièrement différents les uns des autres, Il existe des analogies entre les propriétés de certains d'entre eux.

Les propriétés physiques et chimiques d'un élément découlent de la configuration électronique de la couche externe de cet élément.

TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

PÉRIODE	GROUPE																	
	1 IA	2 IIA		3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII B	9 VIII B	10 VIII B	11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA
1	1 1.0079 H HYDROGÈNE																	2 4.0026 He HÉLIUM
2	3 6.941 Li LITHIUM	4 9.0122 Be BÉRYLLIUM											5 10.811 B BORE	6 12.011 C CARBONE	7 14.007 N AZOTE	8 15.999 O OXYGÈNE	9 18.998 F FLUOR	10 20.180 Ne NÉON
3	11 22.990 Na SODIUM	12 24.305 Mg MAGNÉSIMUM											13 26.982 Al ALUMINIUM	14 28.086 Si SILICIUM	15 30.974 P PHOSPHORE	16 32.065 S SOUFRE	17 35.453 Cl CHLORE	18 39.948 Ar ARGON
4	19 39.098 K POTASSIUM	20 40.078 Ca CALCIUM	21 44.956 Sc SCANDIUM	22 47.867 Ti TITANE	23 50.942 V VANADIUM	24 51.996 Cr CHROME	25 54.938 Mn MANGANÈSE	26 55.845 Fe FER	27 58.933 Co COBALT	28 58.693 Ni NICKEL	29 63.546 Cu CUIVRE	30 65.39 Zn ZINC	31 69.723 Ga GALLIUM	32 72.64 Ge GERMANIUM	33 74.922 As ARSENIC	34 78.96 Se SÉLÉNIUM	35 79.904 Br BROME	36 83.80 Kr KRYPTON
5	37 85.468 Rb RUBIDIUM	38 87.62 Sr STRONTIUM	39 88.906 Y YTRIUM	40 91.224 Zr ZIRCONIUM	41 92.906 Nb NIOBIUM	42 95.94 Mo MOLYBDÈNE	43 (98) Tc TECHNÉTIUM	44 101.07 Ru RUTHÉNIUM	45 102.91 Rh RHODIUM	46 106.42 Pd PALLADIUM	47 107.87 Ag ARGENT	48 112.41 Cd CADMIUM	49 114.82 In INDIUM	50 118.71 Sn ETAIN	51 121.76 Sb ANTIMOINE	52 127.60 Te TELLURE	53 126.90 I IODE	54 131.29 Xe XÉNON
6	55 132.91 Cs CÉSIMUM	56 137.33 Ba BARYUM	57-71 La-Lu Lanthanides	72 178.49 Hf HAFNIUM	73 180.85 Ta TANTALE	74 183.84 W TUNGSTÈNE	75 186.21 Re RHÉNIUM	76 190.23 Os OSMIUM	77 192.22 Ir IRIDIUM	78 195.08 Pt PLATINE	79 196.87 Au OR	80 200.59 Hg MERCURE	81 204.38 Tl THALLIUM	82 207.2 Pb PLOMB	83 208.98 Bi BISMUTH	84 (209) Po POLONIUM	85 (210) At ASTATE	86 (222) Rn RADON
7	87 (223) Fr FRANCIUM	88 (226) Ra RADIUM	89-103 Ac-Lr Actinides	104 (261) Rf RUTHERFORDIUM	105 (262) Db DUBNIUM	106 (266) Sg SEABORGIUM	107 (264) Bh BOHRRIUM	108 (277) Hs HASSIUM	109 (268) Mt MEITNERIUM	110 (281) Uun UNUNUNIUM	111 (272) Uuu UNUNUNIUM	112 (285) Uub UNUNBIUM	114 (289) Uuq UNUNQUADIUM					



La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande.

Toutefois, pour les trois éléments Th, Pa et U qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

Lanthanides

57 138.91 La LANTHANE	58 140.12 Ce CÉRIUM	59 140.91 Pr PRASÉODYME	60 144.24 Nd NÉODYME	61 (145) Pm PROMÉTHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.04 Yb YTTÉRIUM	71 174.97 Lu LUTÉTIUM
------------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------

Actinides

89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMÉRICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKÉLIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es EINSTEINIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MENDELÉVIUM	102 (259) No NOBÉLIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
-----------------------------------	-----------------------------------	--	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------

1- Les périodes.

Une période correspond à une valeur fixe du nombre quantique n .

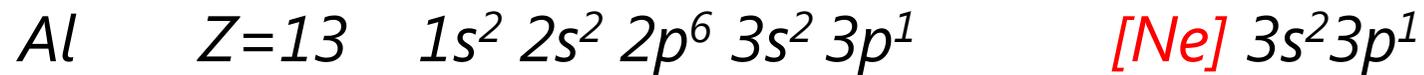
Exemple: $n = 3 \longrightarrow 3^{\text{ème}} \text{ période}$

Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl	Ar
↓											↓	↓				↓
$3s^1$											$3s^23p^2$					$3s^23p^6$

La première période contient deux éléments, la seconde période en contient huit, tout comme la troisième. Cependant la quatrième est la cinquième en contiennent dix-huit et enfin la sixième et la septième en contiennent trente-deux.

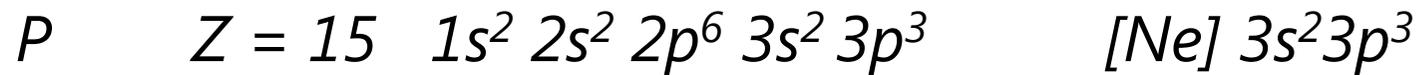
Tous les éléments d'une même période n , ont même configuration du cœur.

Exemple:



$1s^2 2s^2 2p^6 = [Ne] =$ configuration du Ne

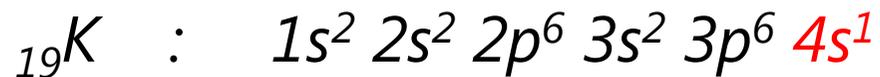
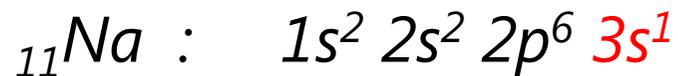
$3s^2 3p^1 =$ couche de valence



2- Les groupes (ou familles).

Chaque colonne du tableau périodique contient un groupe d'éléments qui possèdent des couches de valences identiques, donc même configuration électronique externe.

Exemple : Groupe I_A : H, Li, Na, K, ...



3- Les principales familles du tableau périodique.

- Famille des **alcalins** : Groupe I_A (sauf l'hydrogène).
Leurs configurations électroniques externes sont de type ns^1 .
- Famille des **alcalino-terreux** : Groupe II_A
Leurs configurations électroniques externes sont de type ns^2 .
- Famille des **halogènes** : Groupe VII_A
Leurs configurations électroniques externes sont de type ns^2np^5 .

- Famille des **gaz rares** : Groupe VIII_A ou 0.
Leurs configurations électroniques sont de type ns^2np^6 .

- Famille des **éléments de transitions** : Bloc D.
Ce sont des éléments qui possèdent les orbitales *d* incomplètement remplis. Leurs configurations électroniques sont de type:
 $ns^2(n-1)d^x$ avec $0 < x \leq 10$

- *Éléments des **triades**.*

Ces éléments constituent le groupe VIII. On distingue trois types de triades : Triade du Fer (Fe, Co et Ni), Triade du palladium (Ru, Rh et Pd) et Triade du Platine (Os, Ir et Pt).

- *Éléments des **terres rares**.*

*Ces éléments possèdent les orbitales f en cours de remplissage. Les éléments qui correspondent au remplissage de l'orbitale 4f, sont les **lanthanides**. Ceux qui correspondent au remplissage de l'orbitale 5f appelés les **actinides**.*

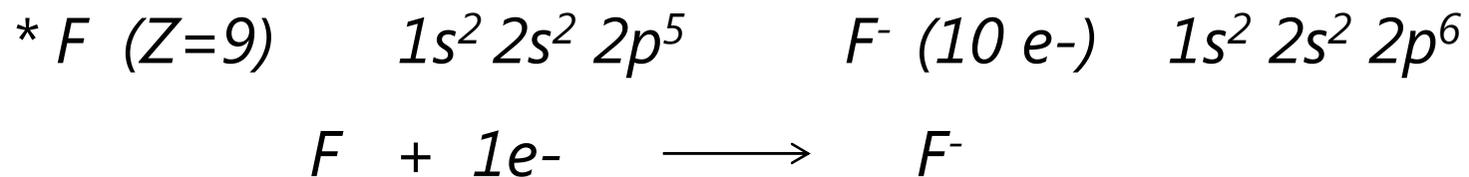
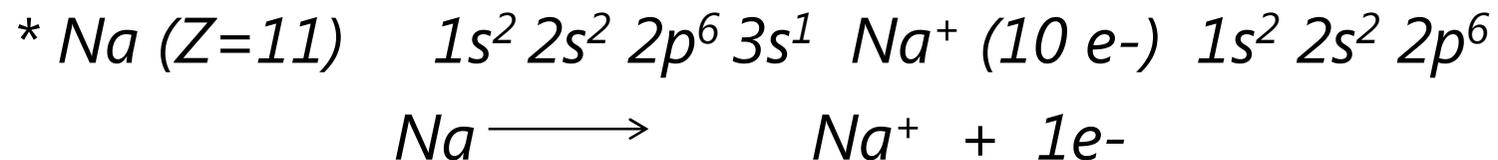
		<ul style="list-style-type: none"> <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: red; margin-bottom: 5px;"> Métaux alcalins <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: orange; margin-bottom: 5px;"> Mét. alcalino-terreux <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: pink; margin-bottom: 5px;"> Lanthanides <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: magenta; margin-bottom: 5px;"> Actinides <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: lightcoral; margin-bottom: 5px;"> Métaux de transition <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: white; border: 1px solid black; margin-bottom: 5px;"> Métaux <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: yellow; margin-bottom: 5px;"> Métalloïdes <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: lightgreen; margin-bottom: 5px;"> Non-métaux <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: gold; margin-bottom: 5px;"> Halogènes <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: cyan; margin-bottom: 5px;"> Gazes nobles <li style="display: inline-block; width: 40px; height: 15px; background-color: white; border: 1px solid black; margin-bottom: 5px;"> Inconnu 																
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb			
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No			

II- LES PROPRIETES DES ELEMENTS.

1- Les ions.

Ce sont des atomes qui ont perdu ou gagné des électrons. Un atome ayant perdu des électrons donne un ion positif appelé cation et un atome ayant gagné des électrons donne un ion négatif appelé anion.

Exemple:

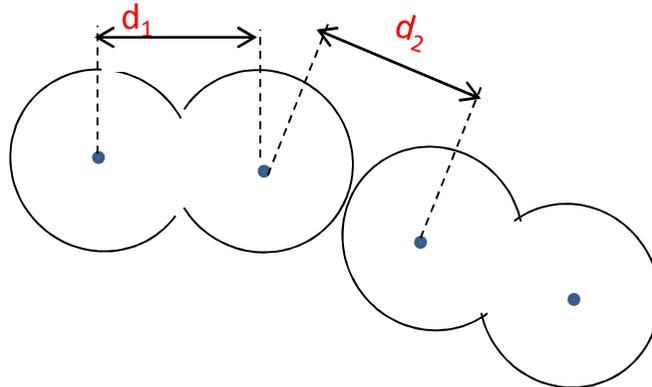


2- Le rayon atomique.

Un rayon atomique ne peut être défini que si l'atome est engagé dans une liaison chimique. Le rayon atomique dépend donc de la nature de la liaison. Un même atome peut avoir donc plusieurs rayons.

* **Rayon de Van der waals.**

Il correspond à la moitié de la distance minimale à laquelle peuvent s'approcher deux atomes de cet élément quand ils ne se lient pas : $\frac{d_2}{2}$.

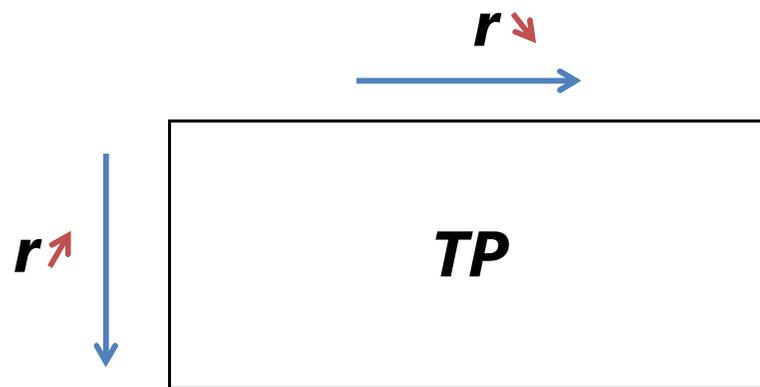


- **Rayon covalent ou de covalence.**

On appelle rayon covalent d'un élément la moitié de la distance entre les noyaux de deux atomes $\frac{d_1}{2}$ de cet élément, liés dans la molécule du corps simple correspondant.

Lorsque deux atomes se lient pour former une molécule, la distance entre leurs noyaux devient inférieure à la somme de leurs rayons de Van der waals c'est-à-dire $d_1 < d_2$.

Le rayon atomique diminue de gauche à droite dans une période de la classification (la charge nucléaire Z_e augmente) et augmente quand on descend dans un groupe (lorsque les dimensions de l'orbitale de valence augmente).



3- Le rayon ionique.

D'une manière générale :

- Les cations sont plus petits que leurs atomes parents :

$$r_i(\text{cation}) < r_a \quad r(\text{K}^+) < r(\text{K})$$

- Les anions sont plus gros que leurs atomes parents :

$$r_i(\text{anions}) > r_a \quad r(\text{S}^{2-}) > r(\text{S})$$

- Pour les ions ayant la même configuration (S^{2-} , Cl^- , K^+ , Ca^{2+}) si Z augmente r_i diminue.

$$Z(\text{S})=16 \text{ et } Z(\text{K})=19 \text{ donc } r(\text{S}^{2-}) > r(\text{K}^+)$$

- A charge égales, le rayon ionique varie dans le même sens que le rayon atomique (si Z augmente alors r_i diminue). $r(\text{Na}) < r(\text{K})$ donc $r(\text{Na}^+) < r(\text{K}^+)$

4- L'énergie d'ionisation.

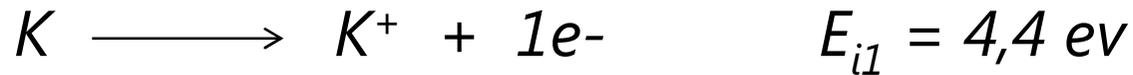
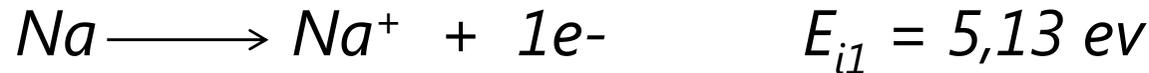
C'est l'énergie minimale qu'il faut fournir pour arracher un électron à un atome (ou à un ion) à l'état gazeux.



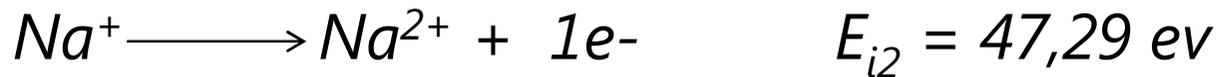
Il s'agit d'une énergie donnée à l'atome donc $E_i > 0$. On peut avoir les énergies de première, seconde, troisième ...ionisation correspondant au départ successif de un, deux, trois...électrons.

Exemple :

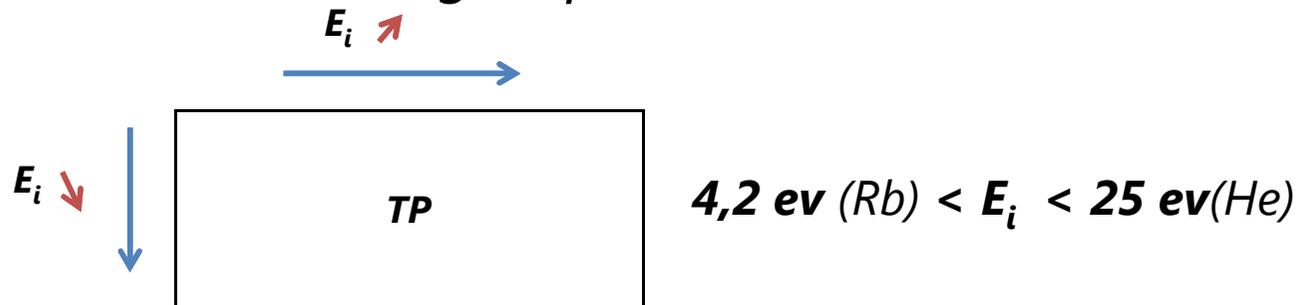
- *Energie d'une première ionisation.*



- *Energie d'une deuxième ionization.*



L'énergie d'ionisation varie en sens inverse du rayon atomique, c'est à dire qu'il augmente de gauche à droite dans une période et diminue lorsqu'on descend un groupe.



5- L'affinité électronique.

L'affinité électronique ou l'électroaffinité d'un atome X est l'énergie mise en jeu pour retourner de l'ion négative à l'atome neutre, c'est l'enthalpie de la réaction:



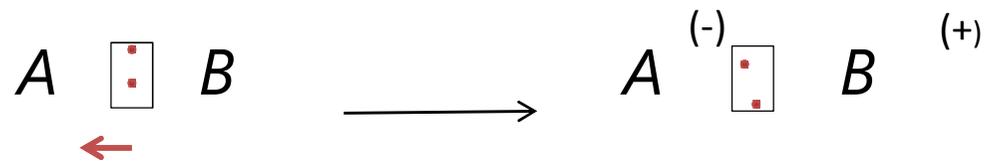
Exemple :



Les affinités électroniques les plus élevées sont celles des halogènes et les plus faibles sont celles des alcalins.

6- L'électronégativité.

C'est la tendance d'un élément à attirer les électrons dans un doublet de liaison. Elle est notée χ .



A : attire les e- donc A est électronégatif.

B : donne les e- donc B est électropositif.

L'électronégativité est une grandeur qui n'est pas mesurable. Il existe plusieurs définitions pour l'évaluer.

- **Echelle de Mulliken.**

D'après Mulliken, l'électronégativité est donnée par :

$$\chi = \left(\frac{A+E_i}{2} \right) \times \frac{1}{3,15} \quad (A \text{ et } E_i \text{ en ev)}$$

$$\chi = \left(\frac{A+E_i}{2} \right) \times \frac{1}{65} \quad (A \text{ et } E_i \text{ en kcal/mole)}$$

A c'est l'affinité électronique et E_i c'est l'énergie d'ionisation.

Le terme $\frac{1}{3,15}$ ou $\frac{1}{65}$ permet d'ajuster cette échelle à celle de Pauling.

Cette échelle est peu utilisée parce que l'affinité électronique de tous les éléments n'est pas connue.

- ***Echelle de Pauling.***

C'est l'échelle la plus utilisée. Pauling a exprimé l'électronégativité à partir des propriétés énergétiques des molécules diatomiques. Sa méthode repose sur la connaissance de leurs énergies de liaison.

Soit la molécule diatomique AB, d'après Pauling on a :

$$\chi_A - \chi_B = [E_{AB} - (E_{AA} \cdot E_{BB})^{1/2}]^{1/2} \quad E \text{ en ev}$$

$$\chi_A - \chi_B = 0,208[E_{AB} - (E_{AA} \cdot E_{BB})^{1/2}]^{1/2} \quad E \text{ en kcal/mole}$$

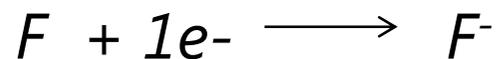
$$\chi_A - \chi_B = 0,102[E_{AB} - (E_{AA} \cdot E_{BB})^{1/2}]^{1/2} \quad E \text{ en kj/mol}$$

En appliquant cette formule à un grand nombre de composés, en choisissant le fluor (atome le plus électronégatif) comme élément de référence en lui attribuant la valeur 4, Pauling a établi une échelle des électronégativités des atomes.

$$0,7 \leq \chi \leq 4$$

Exemple :

- $\chi(F)=4$, χ élevée, donc F est un élément électronégatif:



il capte facilement un électron.

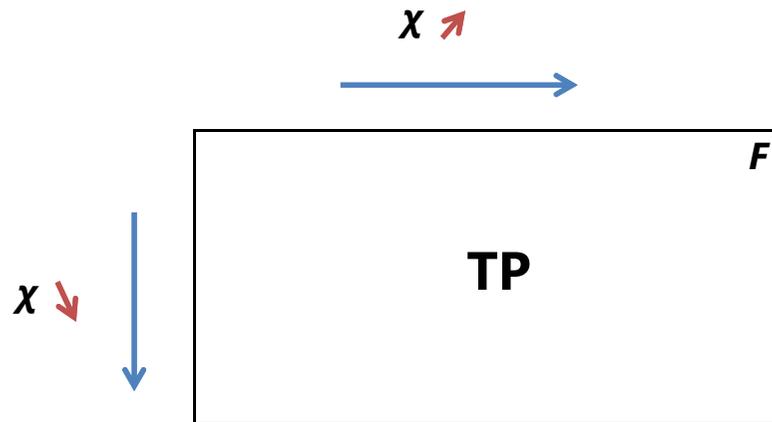
- $\chi(K)=0,8$, χ faible, donc K est un élément électropositif:



il cède facilement un électron.

Conclusion :

Pour la variation de l'électronégativité dans le tableau périodique il diminue lorsqu'on descend un groupe et augmente de gauche à droite dans une période. Le fluor est l'atome le plus électro-négatif du tableau périodique.



CHAPITRE V: LA LIAISON CHIMIQUE

I/ DEFINITIONS

a- La molécule

L'assemblage de deux ou plusieurs atomes est appelé molécule:



La liaison entre A et B ne pourra se former que si l'énergie de la molécule AB est plus faible que l'énergie des deux atomes séparés.

b- La liaison covalente

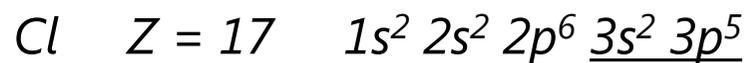
C'est une liaison qui s'obtient par mise en commun des électrons de valence de deux atomes en contact. Les deux électrons qui forment la liaison se trouvent à mi-distance de chaque noyau atomique.



C- La liaison ionique

Lorsque la différence d'électronégativité entre les atomes A et B est très importante, les électrons se trouvent attirés par l'atome le plus électronégatif et la liaison est dite du type ionique. La différence d'électronégativité entre A et B doit être supérieure à 1,6 sur l'échelle de Paulling.

Exemple: MX , $M = Na$ et $X = Cl$



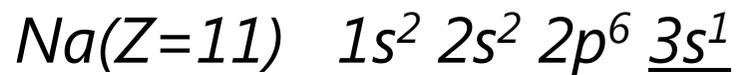
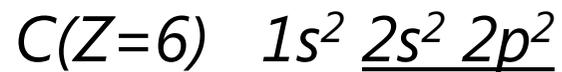
$$\Delta\chi = \chi(Cl) - \chi(Na) = 3 - 0,9 = 2,1 > 1,6$$

II/ THEORIE DE LEWIS

Cette théorie est fondée sur les principes suivants:

- *Seuls les électrons de la couche électronique externe participent à la formation de la liaison.*

Exemple:



- *Lorsqu'un atome s'associe pour donner une molécule il a tendance à saturer sa couche externe et à prendre la configuration électronique du gaz rare le plus proche ($ns^2 np^6$) c'est **la règle de l'octet**.*

- *Il y a deux types de liaisons covalentes:*
 - *Liaison covalente normale: chaque atome fournit un électron pour la mise en commun d'un doublet électronique.*
 - *Liaison covalente dative: L'un des atome, le donneur B, fournit les 2 électrons de la liaison. L'autre atome A (accepteur) met en jeu une orbitale atomique de valence libre.*



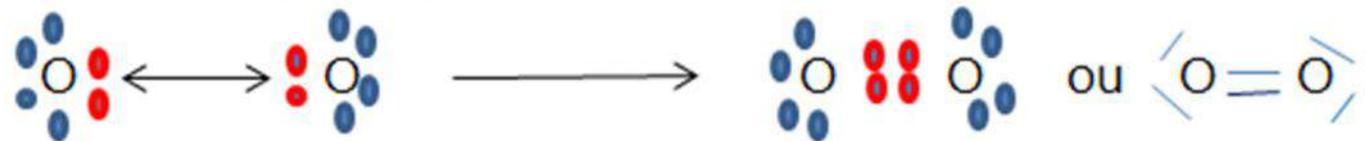
Cas des molécules diatomiques

- H_2 , H (Z=1) $1s^1$



Simple liaison

- O_2 , O (Z=8) $1s^2 \underline{2s^2} 2p^4$



double liaison

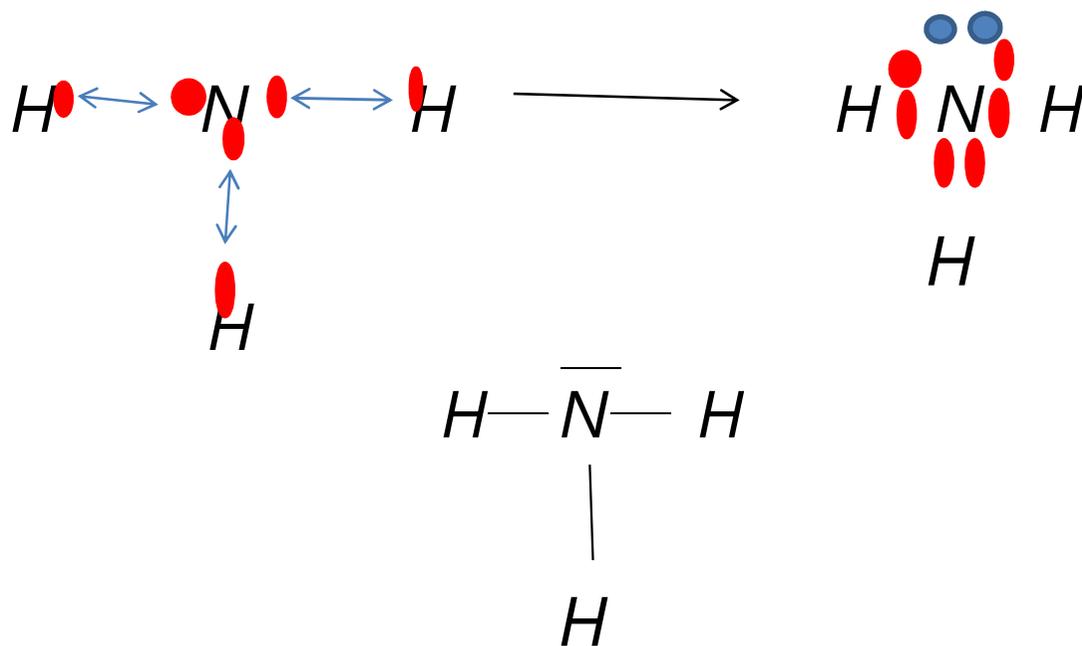
- N_2 , N (Z = 7) $1s^2 \underline{2s^2} 2p^3$



Triple liaison

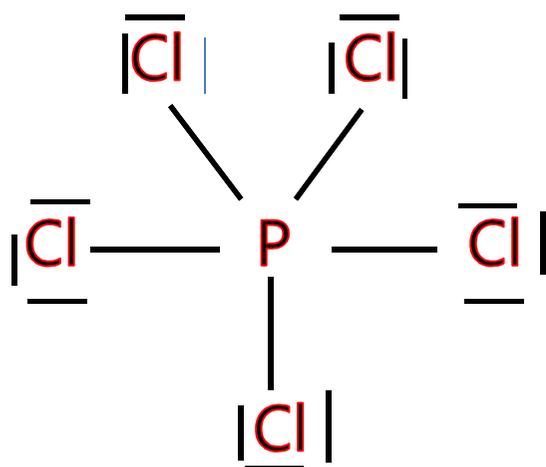
- *Cas des molécules polyatomiques*

- NH_3 , N ($Z = 7$) $1s^2 2s^2 2p^3$, H ($Z=1$) $1s^1$



- PCl_5

P(Z=15)



La règle de l'octet n'est pas vérifiée: 10 e^- entoure P > 8

Le diagramme de Lewis permet d'expliquer la formation d'une simple liaison, double ou triple liaison mais il ne peut pas nous renseigner sur le type de liaison ni sur la géométrie de la molécule.

III/ L'HYBRIDATION

La théorie de l'hybridation permet d'expliquer la géométrie de certaines molécules. Elle donne aussi les valeurs des angles que font entre elles les directions des liaisons dans une molécule polyatomique.

Dans cette théorie on remplace les O.A par des O.A hybrides résultant des combinaisons linéaires des O.A pures.

Soit un élément de la 2^{ème} période du tableau périodique, dont les O.A de valence sont: $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$

Les quatre O.A hybrides seront donc:

$$h_1 = a_1s + b_1p_x + c_1p_y + d_1p_z$$

$$h_2 = a_2s + b_2p_x + c_2p_y + d_2p_z$$

$$h_3 = a_3s + b_3p_x + c_3p_y + d_3p_z$$

$$h_4 = a_4s + b_4p_x + c_4p_y + d_4p_z$$

h_1, h_2, h_3 et h_4 : O.A hybrides équivalentes

a_i, b_i, c_i et d_i : coefficients des combinaisons linéaires

Hybridation sp : diagonale ou linéaire

L'hybridation sp consiste à combiner linéairement une O.A s et une O.A p pour obtenir deux O.H sp équivalentes et orientées à 180° l'une de l'autre.

Exemple: Be Cl_2 $\text{Be} : 1s^2 2s^2$

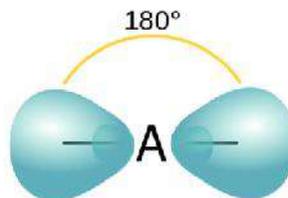
Pour expliquer la divalence de l'atome de Be , il faut passer par un état excité de l'atome:



$$h_1 = a_1s + b_1p_x$$

$$h_2 = a_2s + b_2p_x$$

La molécule est linéaire, les deux liaisons Be-Cl sont identiques et font un angle de 180° entre elles.



Hybridation sp^2 : trigonale

L'hybridation sp^2 consiste à combiner linéairement une O.A s avec deux O.A p pour obtenir trois O.H sp^2 équivalentes, coplanaires et orientées à 120° l'une de l'autre.

$$h_1 = a_1s + b_1p_x + c_1p_y$$

$$h_2 = a_2s + b_2p_x + c_2p_y$$

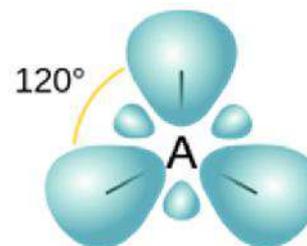
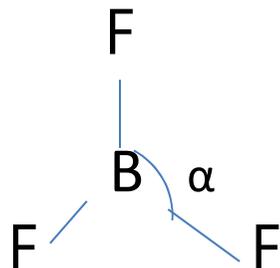
$$h_3 = a_3s + b_3p_x + c_3p_y$$

Exemple: BF_3 B: ($Z=5$) $1s^2 2s^2 2p^1$

Pour expliquer la trivalence de l'atome de bore il faut passer par un état excité de l'atome:



La molécule est plane. Les trois liaisons B—F sont identiques sur le même plan et font un angle de 120° entre elles.



Hybridation sp^3 : tétragonale

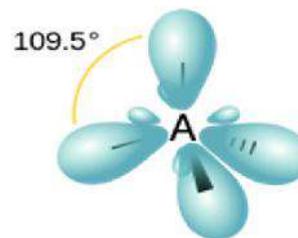
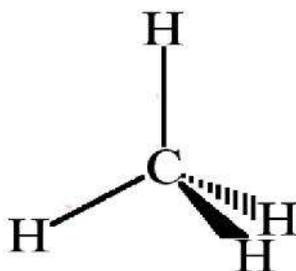
L'hybridation sp^3 consiste à combiner une O.A s avec 3 O.A p pour obtenir trois O.H sp^3 équivalentes et orienté à $109^\circ 28'$ l'une de l'autre.

Exemple: CH_4 C ($Z=6$) $1s^2 2s^2 2p^2$

Pour expliquer la tétravalence du carbone, il faut passer par un état excité de l'atome.



La molécule adopte une structure tétraédrique avec le carbone au centre du polyèdre et les hydrogènes aux sommets. Les 4 liaisons C—H sont identiques et font un angle de $109^\circ 28'$.



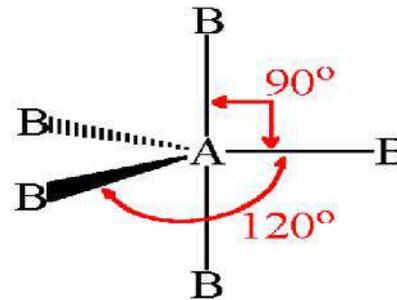
Hybridation sp^3d : Bipyramidale

L'hybridation sp^3d correspond à la combinaison d'une O.A s , de trois O.A p et d'une O.A d , en donnant naissance à cinq O.H notées sp^3d .

Exemple: PCl_5

P: $3s^2 3p^3 3d^0$ E.F

P: $3s^1 3p^3 3d^1$ E.E



La molécule PCl_5 renferme 2 types de liaisons:

- 3 liaisons P—Cl équatoriales faisant entre elles des angles de 120° .
- 2 liaisons P—Cl situées dans le plan axial faisant entre elles un angle de 180° .

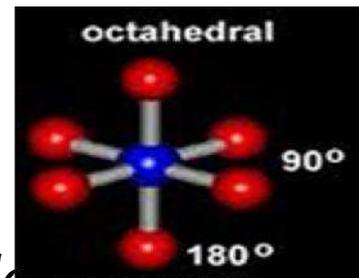
Hybridation sp^3d^2 : octaédrique

Au moyen de l'hybridation sp^3d^2 on explique la géométrie octaédrique des molécules de formes AX_6 . Il y a formation de 6 O.H obtenues par combinaison linéaires d'une O.A s , de 3 O.A p et de deux O.A d .

Exemple: SF_6

S: $3s^2 3p^4 3d^0$ E.F

S: $3s^1 3p^3 3d^2$ E.E



La molécule SF_6 renferme 2 types de liaisons.

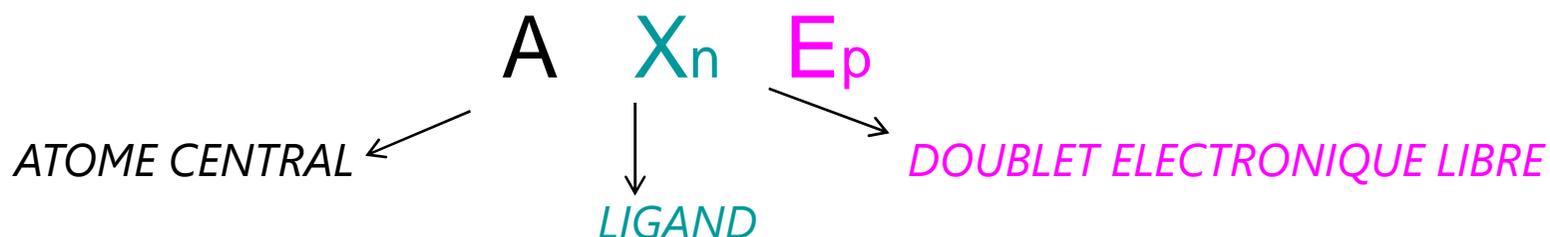
- 4 liaisons $S-F$ équatoriales faisant entre elles des angles de 90° .
- 2 liaisons $S-F$ situées dans le plan axial faisant entre elles un angle de 180° .

IV/ THEORIE DE GILLESPIE (METHODE VSEPR)

En 1957, le chimiste canadien R.J Gillespie a développé la théorie appelée VSEPR: **V**alence **S**hell **E**lectron **P**aire **R**epulsion = Répartition des paires électroniques de valence autour de l'atome central

a- Principe – Intérêt de la méthode

La molécule est symbolisée par:

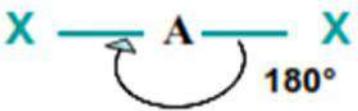
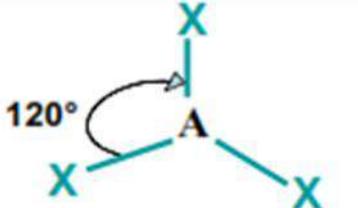
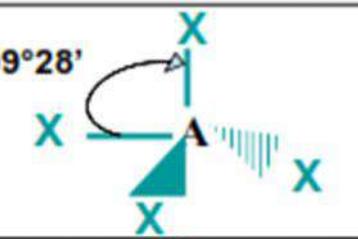
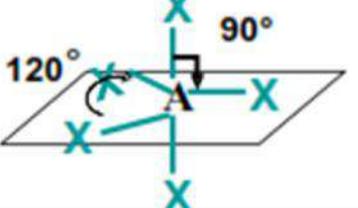
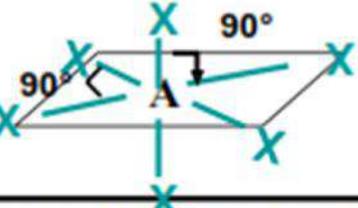


Sachant que les doublets électroniques de la couche de valence se repoussent entre eux, la géométrie de l'ensemble sera celle pour laquelle les **répulsions** sont **minimales**, soit, **les doublets électroniques sont les plus éloignés possibles**

On peut alors prévoir, à partir d'un schéma de Lewis, la **géométrie** de la molécule

b- Géométrie

Molécule type AX_n

Molécule type	Représentation	Géométrie
AX_2		Molécule linéaire ou digonale
AX_3		Molécule triangulaire (ou trigonale) plane
AX_4		Molécule tétraédrique ou tétragonale
AX_5		Molécule bipyramide à base triangulaire (≡bipyramide trigonale)
AX_6		Molécule octaédrique (≡bipyramide à base carrée)

c- Présence de paires non liantes

Molécule symbolisée par AX_nE_p

A est entouré par $n + p$ doublets non équivalents: les règles précédentes s'appliquent mais **les angles idéaux sont modifiés**.

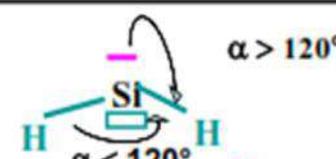
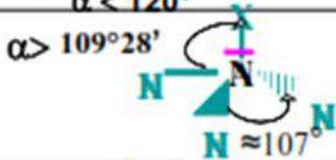
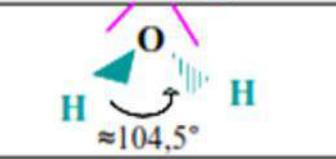
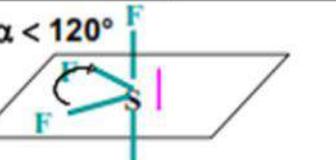
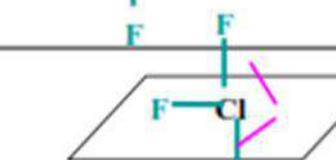
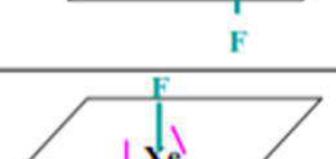
Exemple: Si molécule de type AX_2E_2

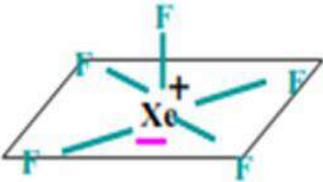
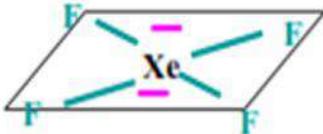
→ Géométrie équivalente à AX_4

→ Angle différent de $109^\circ 28'$

Du fait qu'un doublet non liant est **plus volumineux** qu'un doublet liant partagé entre 2 atomes.

c- Présence de paires non liantes

Exemple	Type	n + p	Géométrie	Représentation
SiH ₂ (Si: Z = 14)	AX ₂ E	3	≡ AX ₃ Molécule triangulaire déformée	
NH ₃	AX ₃ E	4	≡ AX ₄ Molécule tétraédrique déformée	
H ₂ O	AX ₂ E ₂			
SF ₄	AX ₄ E	5	≡ AX ₅ Molécule bipyramide à base triangulaire déformée	
ClF ₃	AX ₃ E ₂		Molécule plane (forme T)	
XeF ₂ (Xe: Z = 54)	AX ₂ E ₃		Molécule linéaire	

Exemple	Type	n + p	Géométrie	Représentation
XeF_5^+	AX_5E	6	$\equiv \text{AX}_6$ <p>Molécule octaédrique déformée</p> <p>= pyramide à base carrée</p>	
XeF_4	AX_4E_2		<p>= molécule plan carré</p>	

d- Présence de liaisons multiples Molécule symbolisée par AY_n

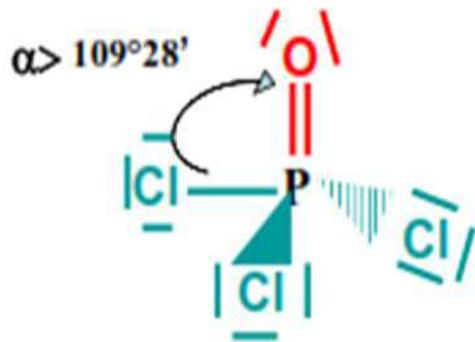
On assimile les liaisons multiples à des liaisons simples plus volumineuses:

triple liaison > double liaison > simple liaison

Exemple: $POCl_3$: type AX_3Y

→ Géométrie équivalente à AX_4

→ Angles différents de $109^\circ 28'$



**Merci pour l'intérêt que vous
avez donné à ce cours.**

Bonne chance

Bon courage



LIENS UTILES 🙌

Visiter :

1. <https://biologie-maroc.com>

- Télécharger des cours, TD, TP et examens résolus (PDF Gratuit)

2. <https://biologie-maroc.com/shop/>

- Acheter des cahiers personnalisés + Lexiques et notions.
- Trouver des cadeaux et accessoires pour biologistes et géologues.
- Trouver des bourses et des écoles privées

3. <https://biologie-maroc.com/emploi/>

- Télécharger des exemples des CV, lettres de motivation, demandes de ...
- Trouver des offres d'emploi et de stage

