

COURS DE CHIMIE N°1

ATOMISTIQUE ET LIAISON CHIMIQUE

L'atome, les molécules et les ions

I/ Constituants de la matière

La matière est de nature discontinue.

L'atome est composé d'un nuage électronique de 100 pm (c'est à dire 10^{-10} m) ainsi que d'un noyau de 10^{-3} pm (soit 10^{-15} m) qui correspond à la masse de l'atome.

1/ Le noyau

Le noyau renferme deux types de particules massives (ou **baryons**) :

- Le **proton** qui a une charge de **$+1,60.10^{-19}$ C** (coulombs) ce qui correspond à la charge élémentaire pour une masse de $1,673.10^{-27}$ kg .
- Le **neutron** qui a quant à lui une charge nulle pour une masse de $1,675.10^{-27}$ kg

On remarque donc que protons et neutrons ont une masse proche mais une charge totalement différente.

Le noyau a donc une charge positive.

Le neutron et le proton constituent l'ensemble des nucléons qui sont maintenus ensemble par l'interaction forte.

2/ Le nuage électronique

Il correspond à l'ensemble des électrons.

Un électron a une charge de $-1,60.10^{-19}$ C et a une masse de $0,911.10^{-30}$ kg. Il est donc

1800 fois moins lourd que le proton.

Sa charge est négative et juste opposée à celle du proton.

Un atome comporte autant d'électrons que de protons (sa charge globale est donc nulle). L'univers renferme exactement le même nombre de protons que d'électrons.

Les électrons occupent tout l'espace de la matière. Le noyau contient l'essentiel de la masse de l'atome.

3/ Représentations

Le nombre de protons du noyau est le **numéro atomique** : **Z**

Le nombre de neutrons : **N**

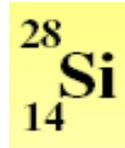
Le **nombre de masse** : **A**. Le nombre de masse correspond à la somme du nombre de protons et du nombre de neutrons d'où **$A = Z+N$** .

On prend comme approximation qu'1 uma (unité de masse atomique) correspond à la masse du proton et à celle du neutron (**ATTENTION il s'agit d'une approximation**).

Représentation symbolique d'un atome



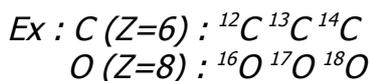
Exemple : le Silicium



Dans cet exemple : le nombre de masse $A = 28$, le numéro atomique $Z = 14$. Par le calcul $N = A - Z$ on en déduit donc que $N = 28 - 14 = 14$.
Le noyau de Silicium contient 14 protons et 14 neutrons. Le nuage électronique comporte lui 14 électrons.

4/ Isotopes

Deux isotopes sont deux atomes qui ont une **même valeur de Z** (même numéro atomique = même nombre de protons) **MAIS** un **nombre de masse A différent**.
Deux isotopes ne varient donc que par le nombre de neutrons N.



5/ Masse atomique

Définition : $1 \text{ uma} = m_{12\text{C}} / 12$

1 mole d'atome de l'isotope de ${}^{12}\text{C} = 12,000000... \text{ g}$

La masse d'un atome de C est donnée par $m_{\text{C}} = 12/N \text{ g}$ avec $N = 6,025 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

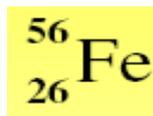
Donc $1 \text{ uma} = 1/N \text{ g}$ ou $1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

Le proton a donc une masse de **1,0073 uma**, le neutron a une masse de **1,0087 uma** alors que l'électron a une masse plus faible qui est de **$0,548 \cdot 10^{-3} \text{ uma}$** .

Les masses s'expriment par le même nombre mais avec des unités différentes selon que l'on se trouve **à l'échelle des moles** ou **à l'échelle des particules**.

Pour les particules on utilise l'unité de masse atomique (uma) alors qu'on utilise le gramme (g) pour les moles.

Prenons l'exemple du Fer



A l'échelle d'un atome $55,934942 \leq 56 \text{ uma}$

A l'échelle d'une mole $55,934942 \leq 56 \text{ g.mol}^{-1}$

Pour ${}^1\text{H}$: $1,007825032 \text{ uma} (\geq 1)$

Pour ${}^{238}\text{U}$: $238,050783 \text{ uma} (\geq 238)$

On note pour le fer une masse plus petite que le nombre de masse, alors qu'elle est plus

grande pour U et H.

II/ Modèle atomique

Mécanique quantique : modèle probabiliste de Schrödinger.

$$H\Psi = E\Psi$$

On voit dans cette équation qu'il y a deux inconnues E qui correspond à l'**énergie de l'électron** et Ψ qui est une fonction de l'électron pris dans l'espace.

$E = E_c$ (énergie cinétique) + E_p (énergie potentielle)

$E_c = 1/2m_e v^2$ et $E_p = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$

H est l'opérateur hamiltonien

1/ L'opérateur hamiltonien

$$H = -\hbar^2/2\mu \Delta + V$$

avec :

- \hbar = constante de Planck = $h/2\pi \approx 1.10^{-34}$ J.s
- V : potentiel électrostatique = $-Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$
- μ : masse réduite de l'électron

$$1/\mu = 1/m_e + 1/m_{\text{noyau}} \approx 1/m_e$$

- Δ : opérateur laplacien $d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2$

2/ Solutions de l'équation

L'énergie E ne peut prendre que des valeurs **discrètes** (c'est à dire finies). L'ensemble des valeurs de E s'appelle l'ensemble des **valeurs propres de l'équation de Schrödinger**. A chaque valeur de E (c'est à dire à chaque valeur d'énergie de l'électron) correspond une ou plusieurs fonctions Ψ (ou fonctions propres) qui représentent des états quantiques de l'électron.

Si à E correspond plusieurs états différents, on dit alors que le niveau d'énergie est **dégénéré**.

Il existe un état correspondant à la valeur minimale de E, on parle d'**état fondamental**.

Solutions stationnaires $\Psi = f(x,y,z)$ indépendantes du temps.

Le carré de l'amplitude de l'onde associée mesure la **densité de probabilité de présence de l'électron dans l'espace**.

On désigne par p la probabilité

$$p = dP/dv = \Psi^2 = \Psi \cdot \Psi^*$$

a/ Conditions de normalisation :

$$\iiint \Psi(x,y,z) \cdot \Psi^*(x,y,z) \cdot dv = 1$$

En une phrase cette équation signifie que la probabilité de trouver l'électron n'importe où dans l'espace doit être de 1 (l'électron est forcément quelque part dans l'espace)

b/ L'équation de Schrödinger est résolue pour H et les ions hydrogénoïdes (proche du modèle de l'hydrogène) : He⁺, Li²⁺, Be³⁺

La résolution de l'équation introduit **trois nombres quantiques (entiers)** :

- n : nombre quantique **principal** avec $n \geq 1$
- l : nombre quantique **azimutal** avec $0 \leq l \leq n-1$ (il existe donc n valeurs possibles)
- m : nombre quantique **magnétique** avec $-l \leq m \leq +l$ (il existe donc 2l+1 valeurs possibles)

L'énergie est quantifiée

$$E_T = -K/n^2$$

avec $K = 13,6 \text{ eV}$

D'où $K=E_0$ est l'énergie minimale du système.

A chaque valeur de n, l et m correspond une solution de l'équation qui est une fonction d'onde

n représente le **niveau d'énergie ou la couche électronique**. Pour n donné, l et m définissent les **sous couches**.

ATTENTION : $E = -E_0$ pour $n=1$ (toujours être attentif dans les applications au fait que n « démarre à 1 et non à 0 comme l ou m)

3/ Classification des solutions

A chaque valeur de n correspond n^2 fonctions d'onde $\Psi(x,y,z)$ ou « **état quantique** »
Chaque fonction d'onde représente un domaine d'espace où l'électron a une certaine probabilité de se trouver

n = 1	1s	1 état (fondamental)
puis DEGENERESCENCE		
n = 2	2s 2p _x 2p _y 2p _z (3orbitales)	4 états
n = 3	3s 3p(3 orbitales) 3d(5 orbitales)	9 états
n = 4	4s 4p 4d 4f (7 orbitales)	16 états

Quand on a l=0, on parle d'orbitale s. Quand on a l=1, on parle d'orbitale p. Quand on a l=2, on parle d'orbitale d.

ATTENTION le nombre quantique principal (n) commence à 1 alors que le nombre quantique azimutal (l) commence à 0.

a/ Prennons quelques cas pratiques.

1er cas : n=1

$$n=1 \quad l=0 \quad m=0$$

=> 1 orbitale 1s

Soit 1 orbitale pour n=1

2ème cas : n=2

$$n=2 \quad l=0 \quad m=0$$

=> 1 orbitale 2s

$$n=2 \quad l=1 \quad m=-1$$

$n=2$ $l=1$ $m=0$
 $n=2$ $l=1$ $m=1$
 \Rightarrow 3 orbitales 2p

Soit 4 orbitales pour $n=2$

3ème cas : $n=3$
 $n=3$ $l=0$ $m=0$
 \Rightarrow 1 orbitale 3s

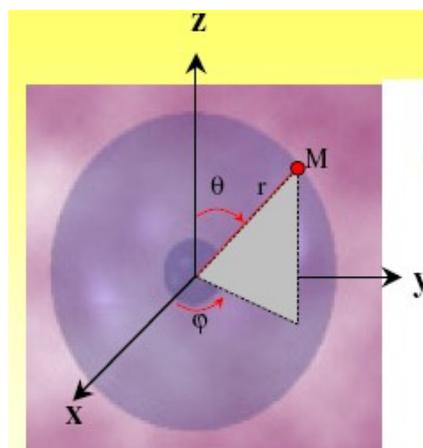
$n=3$ $l=1$ $m=-1$
 $n=3$ $l=1$ $m=0$
 $n=3$ $l=1$ $m=1$
 \Rightarrow 3 orbitales 3p

$n=3$ $l=2$ $m=-2$
 $n=3$ $l=2$ $m=-1$
 $n=3$ $l=2$ $m=0$
 $n=3$ $l=2$ $m=1$
 $n=3$ $l=2$ $m=2$
 \Rightarrow 5 orbitales 3d

Soit 9 orbitales pour $n=3$

b/ Représentation visuelle des solutions

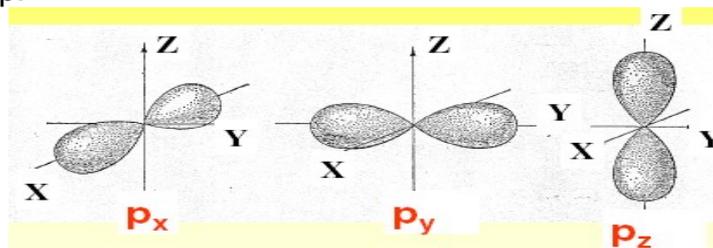
Orbitale s



On observe sur cette orbitale une symétrie sphérique

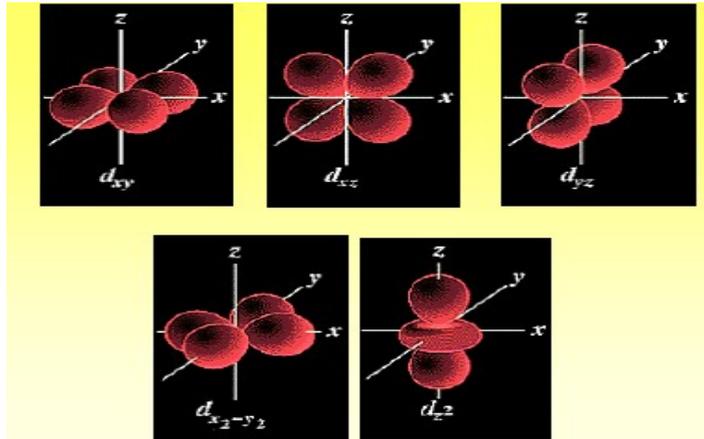
Orbitales p

Il existe 3 orbitales p.



Orbitales d

Il existe 5 orbitales d.



c/ Spectre de l'atome d'hydrogène

Les atomes interagissent avec la lumière **en absorbant ou émettant un photon d'une énergie égale à la différence d'énergie entre deux niveaux E_i et E_j .**

On obtient $h\nu = |E_i - E_j| = E_c |1/i^2 - 1/j^2|$

Il existe une série appelée série de Balmer dans le Soleil aux longueurs d'onde suivantes : 656;486;434;410;397;389;384;...365nm



d/ Le nombre quantique de spin

Les nombres quantiques n , l et m sont insuffisants.

Il existe en effet des raies spectrales doubles. C'est par exemple le cas pour le doublet jaune du sodium : on voit en effet deux raies : une 589nm et une à 589,6nm.

Il existe donc un moment magnétique propre de l'électron que l'on nomme nombre de spin s qui est de plus ou moins $1/2$. Sur un schéma (voir plus loin) cela sera représenté par une flèche dans un sens ou dans l'autre.

e/ Résumé pour l'atome d'hydrogène (et hydrogénoïde)

Un atome est formé d'un **noyau très petit, massif et chargé positivement**, entouré d'**électrons qui occupent tout l'espace disponible**.

La position des électrons dans l'espace est décrite par des orbitales qui dépendent de 3 nombres quantiques entiers : **n , l et m** .

On rajoute un nombre quantique propre à l'électron qui est $1/2$ entier, le **nombre de spin** s peut prendre comme valeur $\pm 1/2$

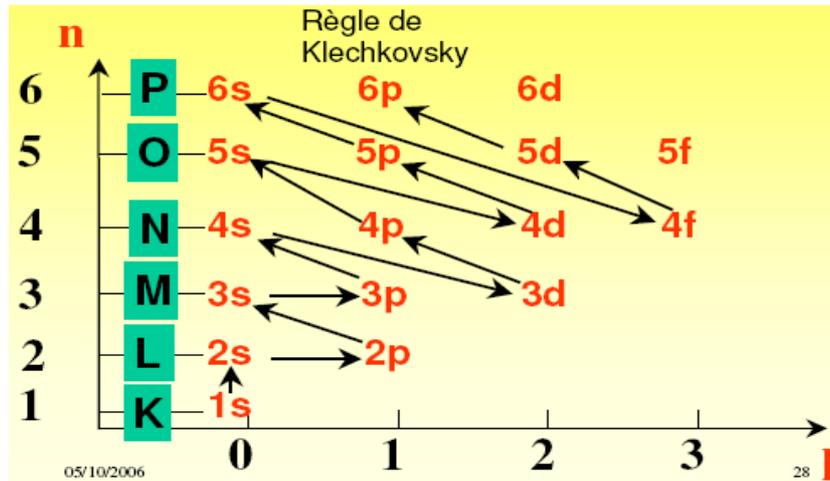
4/ Les atomes polyélectroniques

On se base sur le modèle hydrogénoïde.

On remplit les cases quantiques suivant **la règle de Klechkovsky**, qui connaît cependant des exceptions, et le **principe de Pauli**.

On garde en mémoire le phénomène de répulsion interélectronique

a/ Ordre de remplissage



On remarque que la **règle de Klechkovsky connaît des exceptions** notamment au niveau de 4s-3d, 5s-4d, 6s-4f, etc.

b/ Règles de « remplissage »

Principe d'exclusion de Pauli

Deux électrons d'un atome **diffèrent au moins par un de leurs 4 nombres quantiques**. Par conséquent, une orbitale donnée contient **au maximum 2** électrons de spin opposé

n, l et m seront identique pour une orbitale donnée mais s sera de + 1/2 ou de - 1/2

Un niveau est saturé pour **2n²** électrons

c/ Population électronique

n=1 : saturée pour 2 électrons => Z=2 soit l'He

n=2 : saturée pour 8 électrons => Z=8 soit le Ne

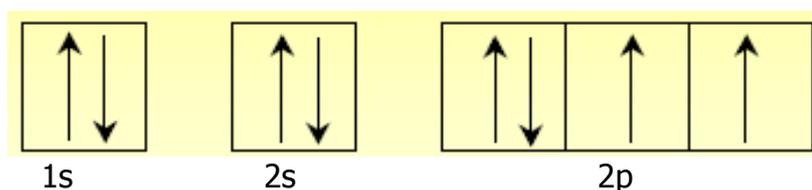
n=3 : saturée pour 18 électrons MAIS 3d se remplit après 4s donc cela fait 8 électrons en pratique => Z=18 soit l'Ar

n=4 : saturée pour 18 électrons [3d(10)4s(2)4p(6)] => Z = 36 soit Kr.

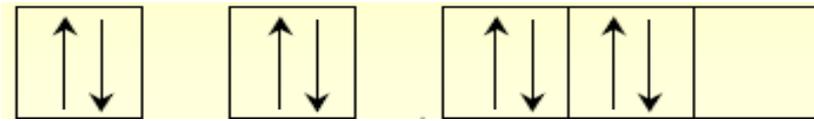
Règle de Hund :

Dans un niveau d'énergie **dégénéré**, on occupe d'abord **tous les sous-niveaux** par des électrons de **spin parallèle**.

Exemple : O : Z=8 1s²2s²2p⁴



Etat fondamental.
L'orbitale p n'est pas « complète ».



Etat excité d'énergie supérieure à l'état fondamental.

Remarque : Dans une sous couche s on met au maximum 2 électrons (spins opposés) soit **1 case**. Dans une sous couche p, on met au maximum 6 électrons soit **3 cases**. Dans une sous couche d, on met 10 électrons soit **5 cases**, etc. Entre chaque sous couche on ajoute 4 électrons à chaque fois soit 2 cases.

III/ Classification périodique des éléments

CLASSIFICATION PERIODIQUE DES ELEMENTS

- Métaux
- Semi-conducteurs
- Non-métaux
- Gaz nobles
- Lanthanides et actinides

Li : Solide à 25°C, sous 1 bar

He : Gaz à 25°C, sous 1 bar

Br : Liquide à 25°C, sous 1 bar

Tc : Obtenu par synthèse

	I																II										III										IV										V										VI										VII										VIII									
1	H																																																																						He															
2	Li		Be																		B		C		N		O		F		Ne																																																							
3	Na		Mg																		Al		Si		P		S		Cl		Ar																																																							
4	K		Ca		Sc		Ti		V		Cr		Mn		Fe		Co		Ni		Cu		Zn		Ga		Ge		As		Se		Br		Kr																																																			
5	Rb		Sr		Y		Zr		Nb		Mo		Tc		Ru		Rh		Pd		Ag		Cd		In		Sn		Sb		Te		I		Xe																																																			
6	Cs		Ba		Lu		Hf		Ta		W		Re		Os		Ir		Pt		Au		Hg		Tl		Pb		Bi		Po		At		Rn																																																			
7	Fr		Ra		Lw		Rf		Db		Sg		Bh		Hs		Mt		Uun		Uuu		Uub																																																															

Série des Lanthanides

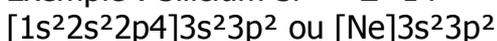
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70

Série des Actinides

Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102

Les lignes de cette classification correspondent aux **couches** (1,2,3...) alors que les colonnes correspondent aux **sous couches** (p¹,p²,s¹...). Dans une même ligne (ou période), les éléments possèdent le même nombre d'électrons de coeur (sur une/des couches complète(s)) alors que dans une même colonne, les éléments possèdent le même nombre d'**électrons externes** (sur une couche non complète), ils ont donc des propriétés chimiques proches.

Exemple : Silicium Si Z=14



Ne est le gaz rare le plus proche (les éléments cherchent à ressembler au gaz rare le plus proche car ce dernier a toutes ses couches complètes), 3s²3p² sont les électrons de

Exemple : Structure électronique du Titane

$Z=22 \Rightarrow$ Période=4. Il appartient à la 1ère série de transition.

Le niveau 4s se remplit avant le niveau 3d.

Donc Ti a pour structure $[Ar]3d^24s^2$. On l'écrit parfois $[Ar]4s^23d^2$.

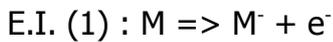
ATTENTION

Pour les ions on retire de la couche la plus périphérique c'est à dire 4. De sorte que Ti^{2+} est de la forme $[Ar]3d^2(4s^0)$

3/ Energie de première ionisation- Affinité électronique

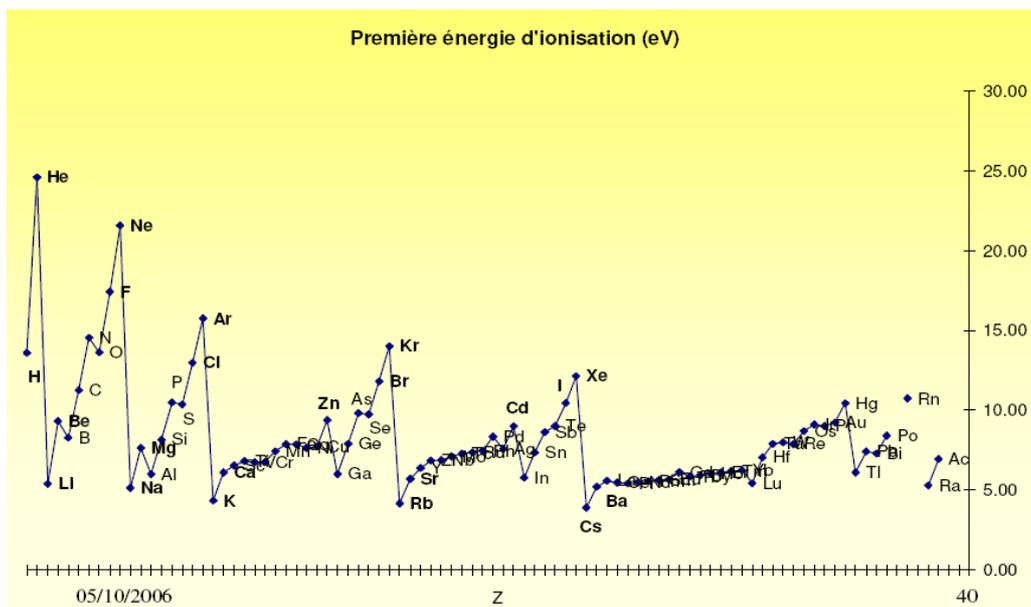
a/ L'énergie de 1ère ionisation

L'**énergie de 1ère ionisation** est l'énergie **fournie** pour arracher un électron.

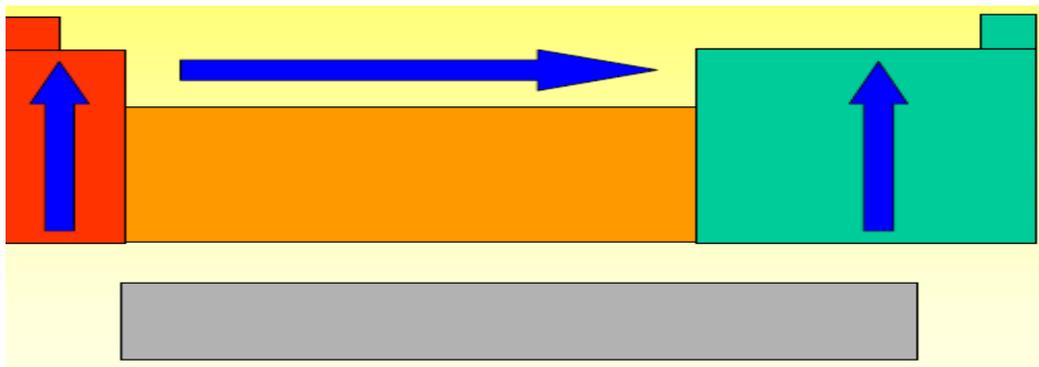


$$\Delta H > 0$$

$$I_1 = \Delta H$$

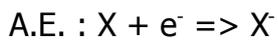


L'énergie de première ionisation décroît toujours sur une colonne. Sur une ligne l'énergie de 1ère ionisation croît



b/ L'affinité électronique

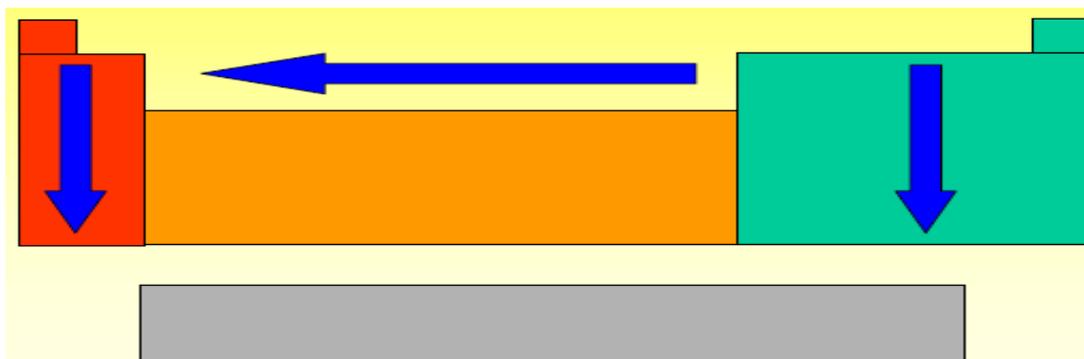
L'**affinité électronique** est l'énergie **libérée** pour capturer un électron.



$\Delta H < 0$ en général.

$$A = -\Delta H'$$

4/ Variation du rayon atomique



5/ Électronégativité

Basée sur les énergies de liaisons, on définit $X_A - X_B$ à partir de l'**influence de la polarité de la liaison** sur son énergie :

$$X_A - X_B = 0.102 \Delta^{1/2}$$

Δ est la contribution énergétique ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) due à la polarité de la liaison.

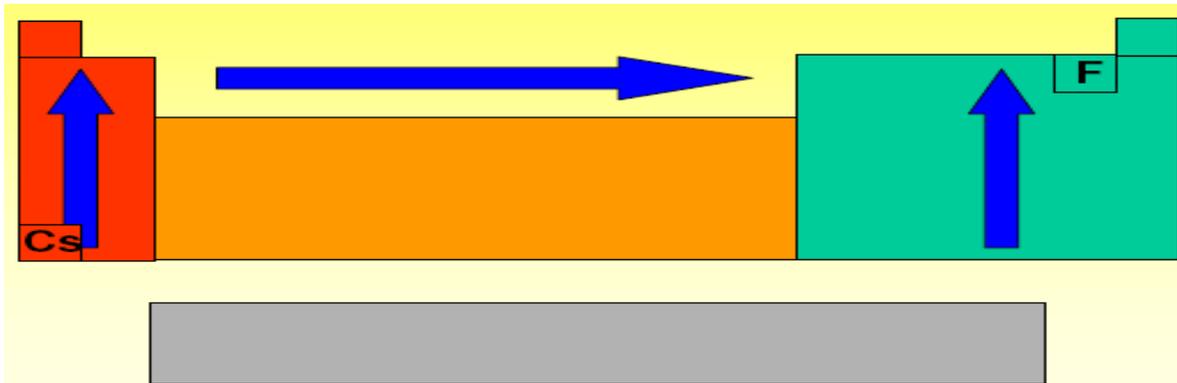
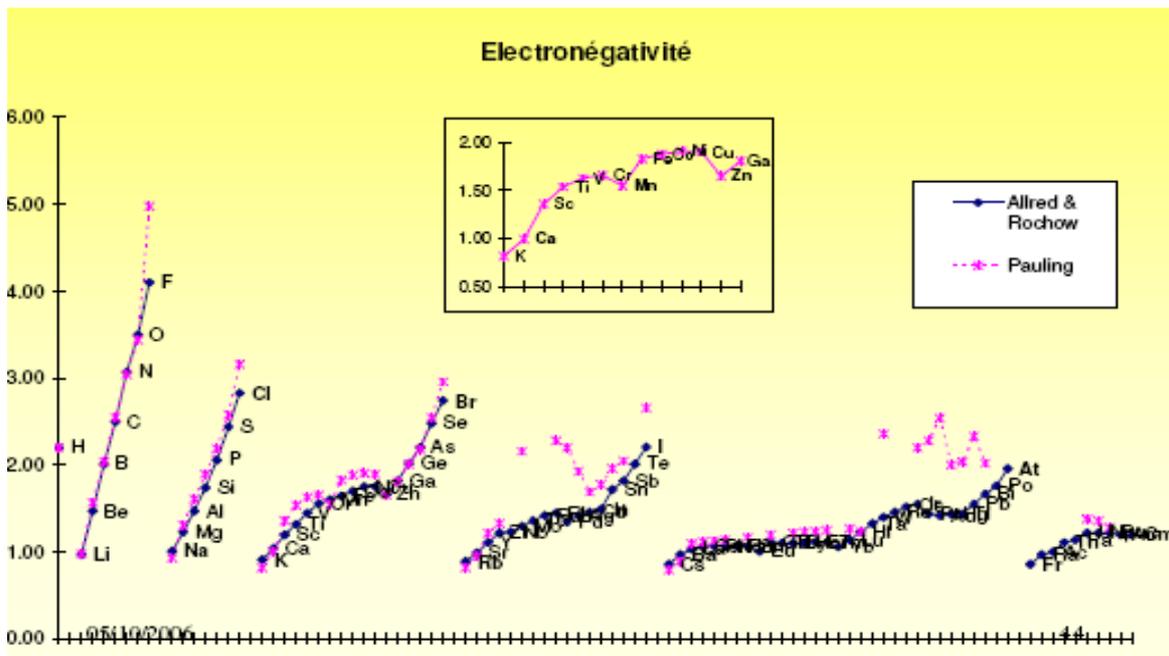
Base arbitraire : Fluor $X_F = 4.00$

$$X_{\text{Cs}} = 0.7 \quad X_{\text{H}} = 2.20$$

$$X = 0.336 \left((I + A) / 2 - 0.615 \right) \text{ (Mulliken)}$$

$$X = 0.359 Z^* / r^2 + 0.744 \text{ (Allred-Rochow)}$$

Variations de l'électronégativité

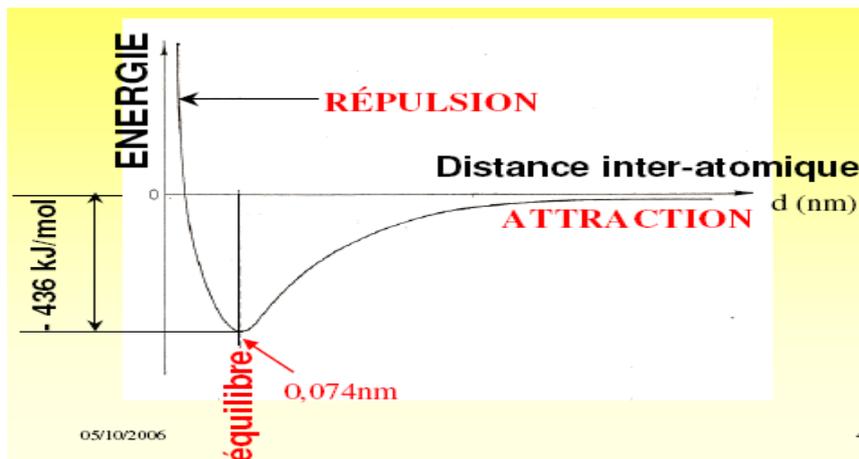


X forte : groupe VI A et VII A => ions négatifs : O^{2-} , S^{2-} , Cl^-
 X faible : groupe I A , II A et III A => ions positifs : Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Al^{3+}

IV/ La liaison chimique

Atomes isolés => Molécule + énergie
 L'énergie dégagée correspond à une stabilisation.
 C'est la somme de toutes les énergies des liaisons formées.

Exemple : liaison dans la molécule d' H_2



La liaison chimique est toujours négative.

	Liaison chimique	Distance internucléaire
H-H	- 436 kJ/mol	74 pm
C-C	- 347 kJ/mol	154 pm
N=N	- 946 kJ/mol	109 pm

1/ La règle de l'octet

Une **liaison de covalence** correspond à un **doublet électronique**.

La stabilité maximum correspond au fait que chaque atome de la molécule possède **8 électrons** (2 pour H et He) sur sa couche externe soit **4 doublets** (1 pour H et He). C'est le cas des gaz nobles de structure ns^2np^6 .

2/ Représentation de Lewis

On représente un électron par un point.



On représente un doublet par un trait.

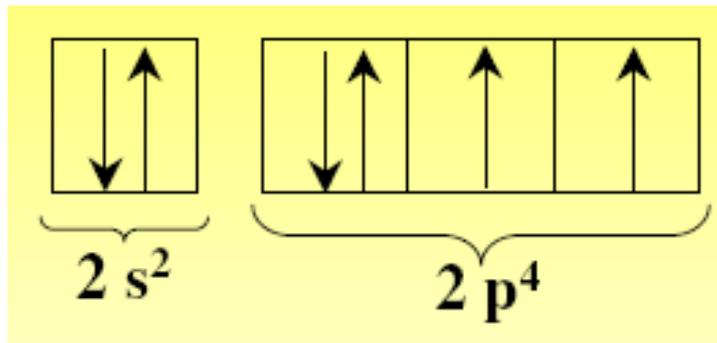


On recherche les électrons de Valence. Ce sont les électrons **en excès par rapport au gaz noble** qui précède l'élément.

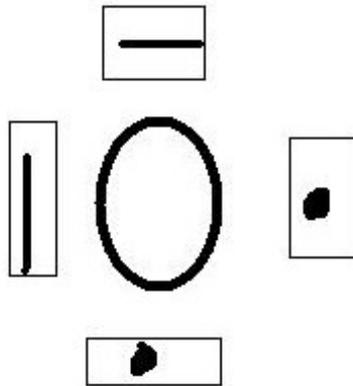
3/ Electrons de Valence

Z = 8 O Niveau L : n =2

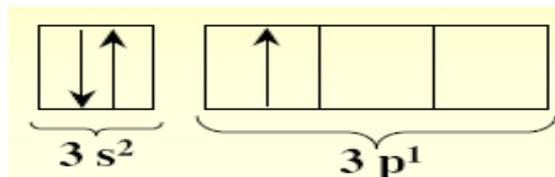
Groupe VI : 8 électrons



Ce qui donne en représentant les doublets

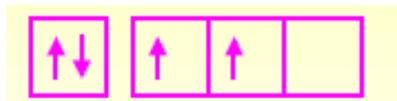


Z = 13 Al Niveau M : n = 3
Groupe III : 3 électrons



4/ Notion de Valence

C'est le **nombre de liaisons** que fait un atome dans une molécule. Elle correspond en général au nombre d'électrons qui peuvent être **célibataires** pour l'atome considéré. La valence normale d'un élément se déduit du schéma de Lewis atomique et donc de sa configuration électronique.



Pour le cas ci-dessus, la valence est de 4.



Pour le cas ci-dessus, la valence est de 2.

5/ La liaison de covalence normale

Un atome lorsqu'il est lié tend à s'entourer de **8 électrons** car c'est une structure électronique **stable**.

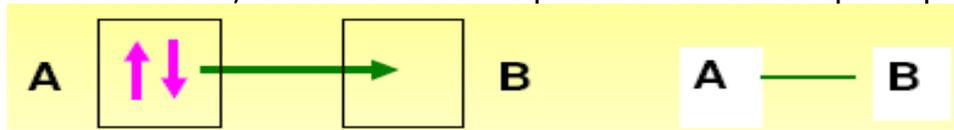
On rappelle la structure d'un gaz noble : ns^2np^6

Chaque atome fournit un électron célibataire pour former la liaison.



6/ La liaison de covalence dative (ou liaison de coordination ou liaison de coordinance)

Un atome fournit le doublet, le deuxième atome possédant une case quantique vide.



V/ Géométrie moléculaire

1/ Construction des représentations de Lewis

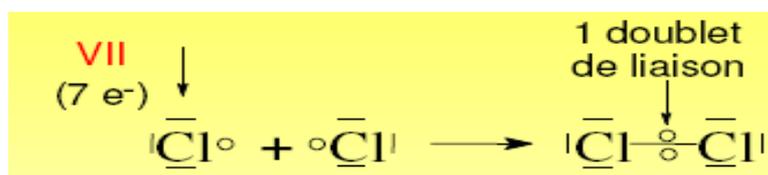
La règle de l'octet entraîne l'existence de liaisons **simples, doubles ou triples**.

On utilise l'électronégativité pour calculer les **charges formelles**.

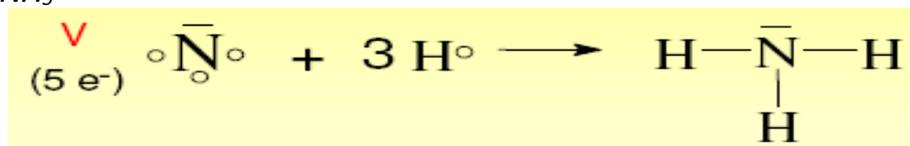
En repérant la colonne de chaque atome on connaît ses électrons de Valence. Concernant les ions $n+$ ou $n-$, on retranche ou on ajoute n électrons. On connaît ainsi le nombre de doublets.

a/Exemples

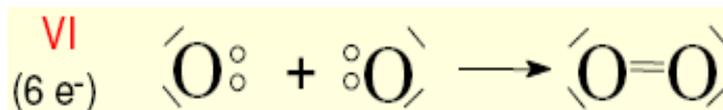
Exemple 1 : Cl_2



Exemple 2 : NH_3



Exemple 3 : O_2



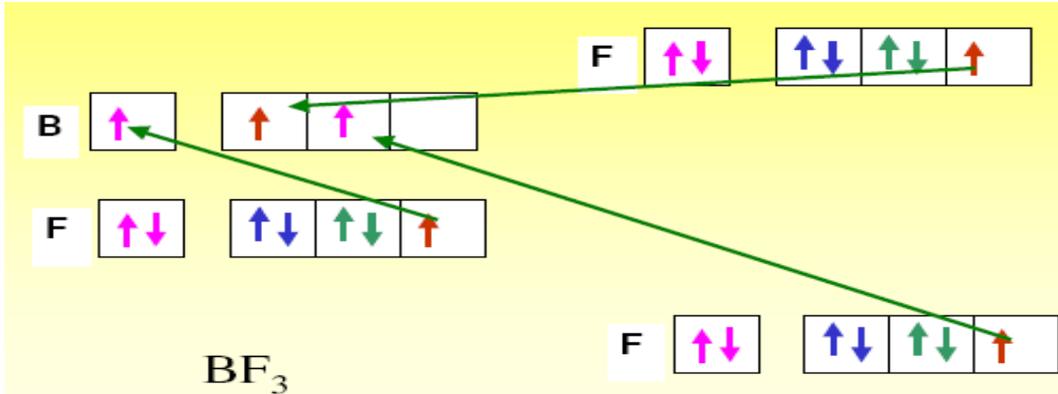
b/ Construction du modèle de Lewis moléculaire

A partir du bore et du fluor, on construit le trifluore de bore ainsi que le tétrafluore de

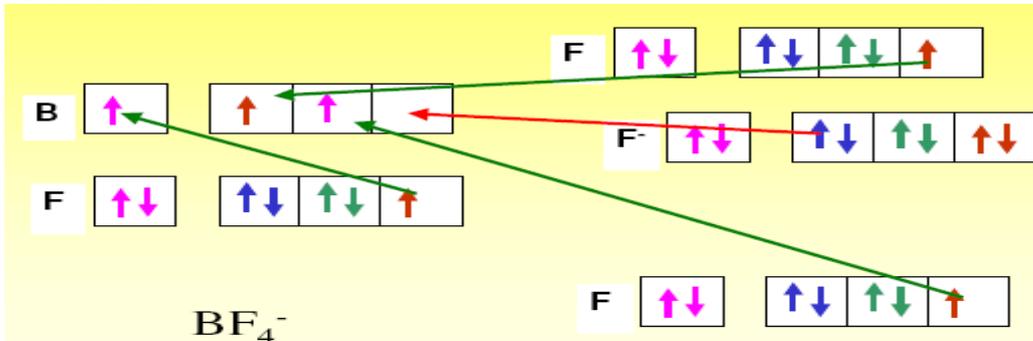
bore.



Trifluore de bore



Tétrafluore de bore



Concernant le tétrafluore de bore, la règle de l'octet n'est pas respectée. On peut donc approcher un ion fluorure à proximité afin que se forme une liaison dative entre eux.

2/ Nombre d'oxydation

On considère la **différence d'électronégativité** des deux éléments liés. On considère que tous les électrons de la liaison vont sur **l'atome le plus électronégatif**.

Dans l'exemple, BF_3 est décrit comme B^{3+} et 3 F^- . Le nombre d'oxydation de B est donc de +3 et celui de F est donc de -1.

Exemple : schéma de Lewis pour le CO_2

Carbone C : groupe IV A => 4 électrons de Valence
Oxygène O : groupe VI A => 6 électrons de Valence

1C + 2O => 16 électrons de Valence soit 8 **doublets**

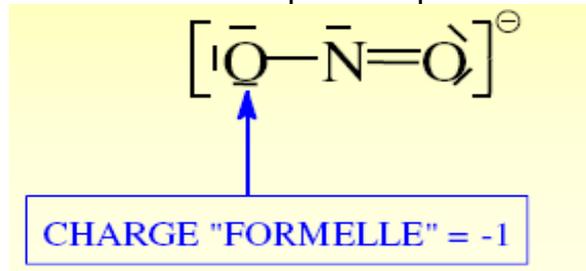


La règle de l'octet est satisfaite pour chaque atome. Le n.o. de C est de +4, le n.o. de O est de -2.

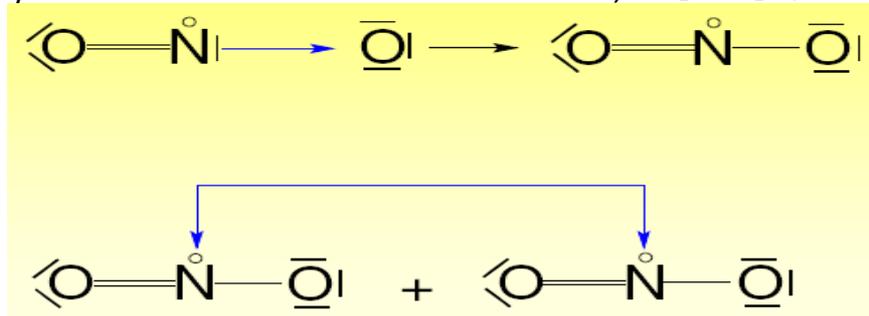
3/ Charge formelle

Considérons l'ion NO_2^-

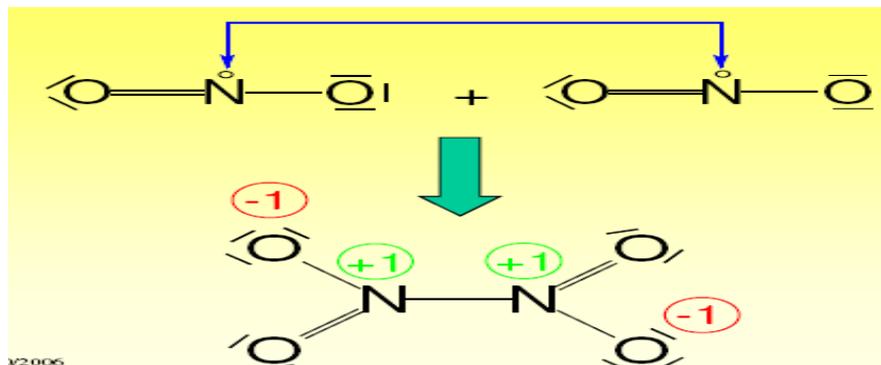
O est du groupe VI A, il a donc 6 électrons de Valence. N est du groupe V A, il a donc 5 électrons de Valence. On ajoute une charge négative c'est à dire un électrons supplémentaire afin d'avoir 18 électrons ce qui correspond à 9 doublets.



Quelques exemples de liaisons datives : les molécules NO , NO_2 et N_2O_4

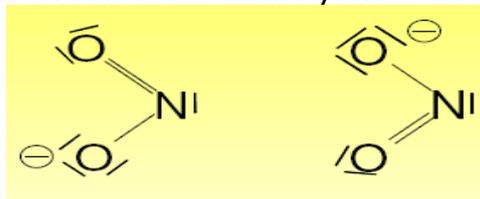


Dimérisation de NO_2



4/ Les hybrides de résonance

Prenons le cas de NO_2^- dont on voit ici les deux hybrides de résonance.



Il arrive que pour une molécule ou un ion, on ne puisse **pas concevoir une seule structure** électronique comme ici pour NO_2^- . On dit parfois que la molécule ou l'ion existe sous différentes formes (en chimie organique on parle de mésomérie).

On peut alors se demander quelle est la bonne description de la molécule, laquelle de ces formes on peut/ doit considérer comme bonne.

Avant cela, il faut savoir comment l'on passe d'une forme à l'autre.

Ces diverses formes ont été obtenues en **associant les électrons** de deux éléments A et B de **diverses façons** (on place les électrons tantot plus près de A tantot plus près de B). Des **déplacements de doublets** peuvent permettre le passage d'une forme à l'autre

a/ Quelques règles de base

Il faut envisager que le déplacement d'électrons va **modifier le schéma de Lewis** et les liaisons entre atomes.

Ces déplacements ne doivent **JAMAIS** détruire la molécule. Pour cette raison certains déplacements seront **interdits**.

Une liaison correspondant à la mise en commun d'un doublet d'électrons doit par définition « **contenir** » **au moins 2 électrons**.

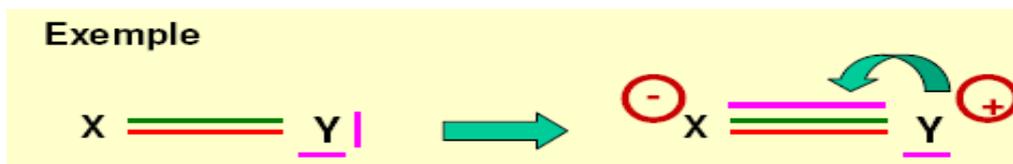
Seuls des **doublets libres** E ou des doublets de **liaisons multiples** peuvent se déplacer librement sans casser totalement une liaison et donc la molécule.

Un doublet de liaison simple ne pourra se déplacer (sans que la liaison ne casse) que si un autre doublet vient **simultanément le remplacer**.

Lors du déplacement des doublets électroniques :

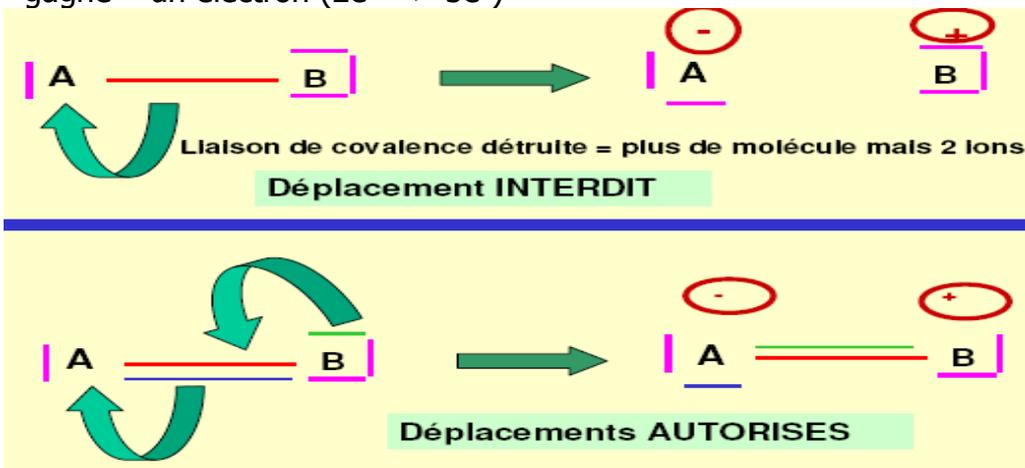
- La multiplicité des liaisons est bien entendu modifiée
- Les charges formelles se modifient simultanément

Remarque : si la charge n'est pas la même, ce ne sont pas des hybrides de résonance.



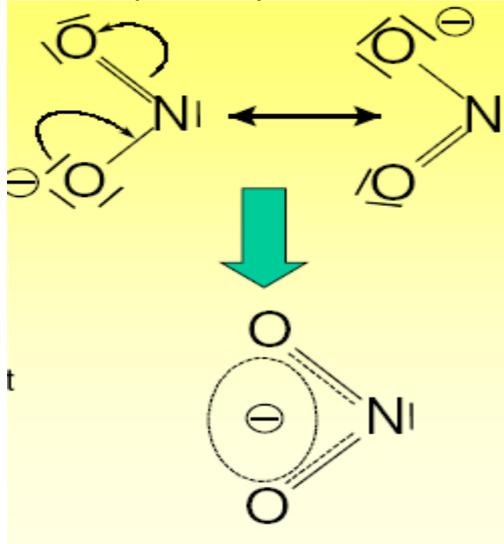
Relevé des modifications :

- Un des doublets libres de Y « disparaît »
- La liaison double devient triple
- Y « perd » un électron ($6e^- \Rightarrow 5e^-$)
- X « gagne » un électron ($2e^- \Rightarrow 3e^-$)



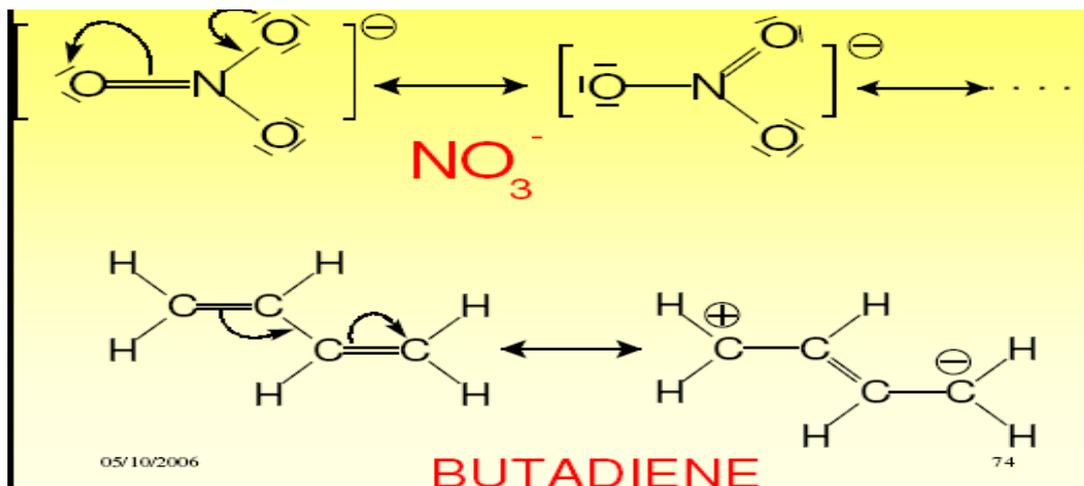
b/ L'hybride

La structure réelle est mieux décrite par un hybride.



Les formes limites sont n'ont **pas de réalité physique** et le composé qu'elles décrivent n'est pas le mélange de molécules différentes.

Les formes limites peuvent mettre en évidence des **caractères particuliers** correspondant à des aspects différents de la réactivité de la molécule



c/ Exceptions à la règle de l'octet

La règle est respectée en général pour les éléments des deux premières périodes. Au delà, il existe des exceptions et on ne respecte pas toujours cette règle.

Exemples :

$PCl_5 \Rightarrow 10 \text{ électrons}$

$SF_6 \Rightarrow 12 \text{ électrons}$

5/ Théorie VSEPR(ou théorie de répulsion des paires électroniques de la couche de Valence)

a/ Géométrie moléculaire

Cela concerne les molécules au moins **triatomiques** formées d'un **atome central** A lié à m

atomes X et comportant n paires non liantes E.

On transcrit cela sous la forme



b/ Théorie VSEPR

La règle de base est la suivante : les m et n paires électroniques entourant l'atome A se comportent chacune comme une **charge négative** susceptible de se déplacer à la **surface d'une sphère de centre A**.

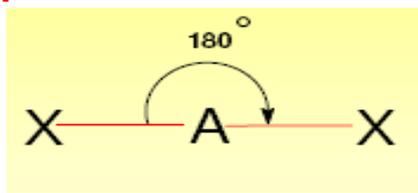
Ces charges adoptent la **position qui minimise leurs répulsions**, donc qui les **éloigne au maximum** les unes des autres.

AX₂ (exemple : BeCl₂)

Dans la molécule de BeCl₂, l'atome central Be est entouré de 2 paires électroniques de liaison et ne possèdent pas de paire non liante.

C'est une molécule de type AX₂. La géométrie adoptée est celle qui éloigne au maximum les deux doublets liants soit un angle de **180°**.

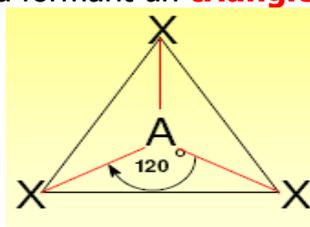
La molécule est donc **linéaire**.



AX₃ (exemple BCl₃, CH₃)

Pour AX₃, la géométrie adoptée par la molécule est celle éloignant les 3 paires de liaison. Les 4 atomes sont coplanaires avec des angles de Valence de **120°**.

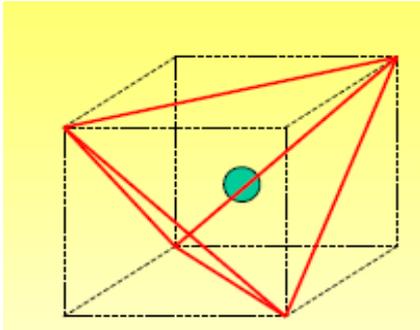
La molécule est plane, trigonale ou formant un **triangle équilatéral**.



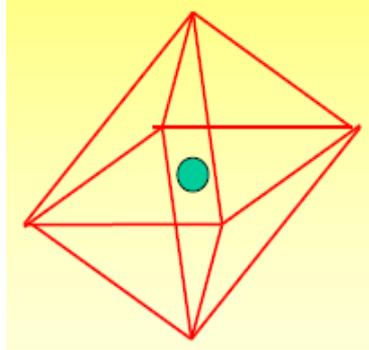
	Forme	Angle	Exemple
AX ₂ ou AXE	Linéaire	180°	CO ₂
AX ₃ ou AX ₂ E	Plane en triangle	120°	NO ₂ ou NO ₃ ⁻
AX ₄ ou AX ₃ E ou AX ₂ E ₂ ...	Tétraèdre	109°28'	CH ₄
AX ₅ ...	Bipyramide trigonale	120°/90°	PCl ₅
AX ₆	Octaèdre	90°	SF ₆

Quelques exemples de formes

Tétraèdre



Octaèdre



Ce document, ainsi que l'intégralité des cours de P1, sont disponibles gratuitement à l'adresse suivante : <http://cours1bichat-larib.weebly.com>"