



























## CHIMIE UNIVERSITE

### FICHE N°1 : ATOMISTIQUE ET LIAISONS CHIMIQUES

1. L'atome .....	1
2. Structure électronique de l'atome .....	1
2.1. Du Modèle de Bohr à l'approche ondulatoire.....	1
2.2. Orbitales atomiques et nombres quantiques.....	2
2.3. Configuration électronique    .....	4
2.4. Classification périodique .....	5
2.5. Propriétés au sein du tableau périodique .....	5
3. Modèle de Lewis .....	6
3.1. Liaison covalente simple, double ou triple .....	6
3.2. Schéma de Lewis d'un atome .....	6
3.3. Charges formelles .....	6
3.4. Règle de l'octet.....	7
3.5. Théorie V.S.E.P.R (Gillepsie)    .....	8
4. Orbitales moléculaires (OM).....	9
4.1. Généralités .....	9
4.2. Molécules diatomiques .....	9
4.3. Molécules polyatomiques : Hybridation des OA : sp, sp <sup>2</sup> , sp <sup>3</sup> .....	10
5. Molécules conjuguées et aromatiques.....	12
5.1. Conjugaison et mésomérie.....	12
5.2. Aromaticité    .....	13
6. Polarisation des liaisons .....	13
6.1. Origine de la polarisation des liaisons .....	13
6.2. Moment dipolaire $\mu$   .....	13
6.3. Interaction entre solvant et soluté.....	14
6.4. Effet inductif I    .....	14
6.5. Effet mésomère M    .....	14
6.6. Effet électronique global    .....	14
7. Fiche méthode : Comment déterminer un effet mésomère ?.....	16
8. L'essentiel du concours.....	17

#### LÉGENDES

#### Fréquences au concours depuis 2011

 1 fois	  2 fois	   3 fois ou plus
--	--	--

## 1. L'atome

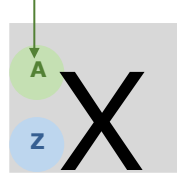
Un **atome** est constitué d'un noyau formé de **protons** et **neutrons** autour duquel gravitent des **électrons**.

**Noyau = A nucléons : Z protons + A-Z neutrons**

**Nombre de masse A ou masse molaire moyenne M**

- définissant le symbole **X**
- présentant un certain nombre d'**isotopes** stables ou radioactifs, naturels ou artificiels

**Nuage électronique = (Z-charge) électrons**



« classé » dans le **tableau périodique** des éléments :  
Quelques **familles** à connaître.

**Configuration électronique de l'atome / ion**

- respectant 3 règles :
  - règle de remplissage de Klechkowsky
  - principe de Pauli
  - règle de Hund
- responsable de l'**énergie** de l'atome / ion

**Isotopes** : 2 noyaux avec le même Z (donc le même symbole et les mêmes propriétés chimiques) mais un A différent.

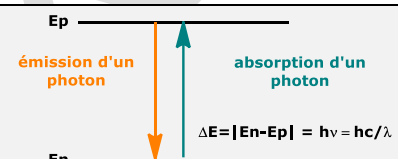
Particule	<b>Z-Protons</b>	+	<b>(A-Z)-Neutrons</b>	=	<b>Noyau</b>
Charge	+e = +1,60219 x 10 <sup>-19</sup> C		<b>Nulle</b>		<b>Positive</b>
Masse	≈ 1 u = 1,66056 x 10 <sup>-24</sup> g		≈ 1 u = 1,66056 x 10 <sup>-24</sup> g		≈ A u
Masse molaire	-		-		A g·mol <sup>-1</sup>

Particule	<b>Z-Electrons</b>	Remarques
Charge	-1,60 x 10 <sup>-19</sup> C	<b>Négative et opposée à celle du proton</b>
Masse	5,5 x 10 <sup>-4</sup> u	1836 fois moins lourd : Négligeable devant les protons et neutrons

NB. Le volume de l'atome est 10<sup>12</sup> fois celui du volume du noyau. C'est donc un édifice quasi-vide ! (L'électron est environ 1800 fois moins lourd que le proton).

## 2. Structure électronique de l'atome

### 2.1. Du Modèle de Bohr à l'approche ondulatoire

<b>Modèle de Bohr</b>	 <p><math>\Delta E =  E_n - E_p  = h\nu = hc/\lambda</math></p>	Mécanique classique + théorie des quanta = trajectoire circulaire de e <sup>-</sup> ⇒ Energie de e <sup>-</sup> est négative (attiré par le noyau) ⇒ Energie de l' e <sup>-</sup> est associée à une trajectoire circulaire plus ou moins proche du noyau
<b>Modèle de Bohr pour l'hydrogène et les ions hydrogénoïdes (ions avec 1 unique e<sup>-</sup>)</b>	$E_n = \frac{E_1}{n^2} \cdot Z^2 = -\frac{13,6 \cdot Z^2}{n^2}$	E <sub>n</sub> , énergie du niveau électronique (eV) E <sub>1</sub> , énergie du 1 <sup>er</sup> niveau électronique (E <sub>1</sub> = -13,6 eV) n, entier naturel (1, 2, ..., ∞) nommé nombre quantique Z, numéro atomique de l'ion hydrogénoïde
<b>Dualité onde - corpuscule</b>	A toute particule en mouvement (de masse m) est associée une onde (de longueur d'onde λ)	
<b>Principe d'incertitude d'Heisenberg</b>	$\Delta x \cdot \Delta(m \cdot v_x) \geq \frac{h}{2\pi}$	Δx, incertitude sur la position Δ(m·v <sub>x</sub> ), incertitude sur la quantité de mouvement (vitesse) h, constante de Planck (h = 6,63 x 10 <sup>-34</sup> J.s) ⇒ Impossible de localiser e <sup>-</sup> = probabilité de présence de e <sup>-</sup>



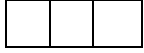

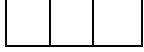
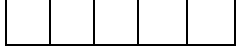
<b>Equation de Schrödinger</b>	$\hat{H} \cdot \Psi = E \cdot \Psi$	$\hat{H}$ , opérateur mathématique (hamiltonien) $\Psi$ , fonction d'onde stationnaire (ou orbitale atomique OA de l'électron) dépendante des coordonnées $x, y, z$ $E$ , énergie associée à $\Psi$ $\Rightarrow$ relie l'énergie du système à ses propriétés ondulatoires
<b>Pour les atomes polyélectroniques</b>	$\Rightarrow$ La résolution analytique exacte de l'équation de Schrödinger est impossible $\Rightarrow$ 1 $e^-$ est décrit par une orbitale atomique dont l'énergie dépend de $n$ et $l$ (et non plus seulement de $n$ comme pour les hydrogénoïdes)	

**Que représentent les orbitales atomiques ?** C'est la représentation du volume à l'intérieur duquel il y a 95% de chance de trouver l'électron à laquelle on associe les changements de signe de la fonction d'onde correspondante  $\Psi$ . C'est donc une probabilité  $P$  que l'on calcule par :  $P = \int_V |\Psi|^2 \cdot dV = 0,95$  avec  $\Psi^2$  représente une probabilité de présence de l'électron dans un volume  $V$ .

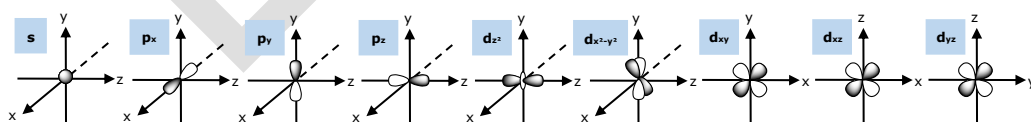
## 2.2. Orbitales atomiques et nombres quantiques

**Une orbitale atomique (OA)** est le volume de l'espace dans lequel il y a 95% chances de trouver un électron considéré. Une orbitale atomique est caractérisée par trois nombres quantiques :

- nombre quantique principal  $n$**  :  $n \geq 1$  (valeurs entières strictement positives) définit la COUCHE et le volume de l'OA
- nombre quantique secondaire  $l$**  :  $0 \leq l \leq n - 1$  (valeurs entières positives définit la SOUS-COUCHE et la forme de l'OA)
- nombre quantique magnétique  $m$**  :  $-l \leq m \leq +l$  (valeurs entières relatives), donnant l'orientation (dans repère  $x, y, z$ ) de l'orbitale. (Le nombre de valeurs de  $m$  détermine le nombre d'OA dans une sous-couche donnée)

Couche	Sous-couche	Caractéristiques de la sous-couche	Représentation des OA
$n = 1 \Rightarrow$ <b>K</b>	$l = 0 \Rightarrow$ <b>s</b>	$m = 0 \Rightarrow$ <b>1 case</b>	1s $\Rightarrow$  m = 0
$n = 2 \Rightarrow$ <b>L</b>	$l = 0 \Rightarrow$ <b>s</b>	$m = 0 \Rightarrow$ <b>1 case</b>	2s $\Rightarrow$  m = 0
	$l = 1 \Rightarrow$ <b>p</b>	$m = -1, 0 \text{ et } +1 \Rightarrow$ <b>3 cases</b>	2p $\Rightarrow$  m = -1 0 +1
$n = 3 \Rightarrow$ <b>M</b>	$l = 0 \Rightarrow$ <b>s</b>	$m = 0 \Rightarrow$ <b>1 case</b>	3s $\Rightarrow$  m = 0
	$l = 1 \Rightarrow$ <b>p</b>	$m = -1, 0 \text{ et } +1 \Rightarrow$ <b>3 cases</b>	3p $\Rightarrow$  m = -1 0 +1
	$l = 2 \Rightarrow$ <b>d</b>	$m = -2, -1, 0, +1 \text{ et } +2 \Rightarrow$ <b>5 cases</b>	3d $\Rightarrow$  m = -2 -1 0 +1 +2

### Représentation des orbitales atomiques (OA):



**NB.** Le changement de couleur correspond à un changement de signe de la densité de probabilité dont est issue la représentation de l'OA.