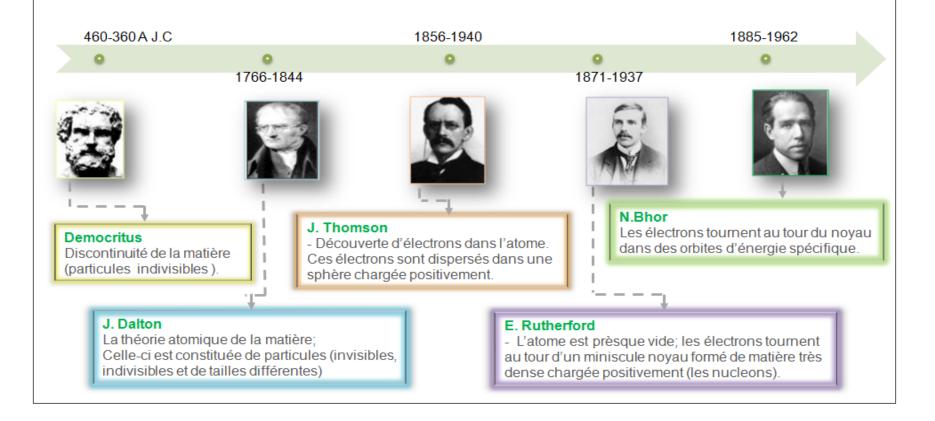
1.6 Atomes & Molécules

Objectifs

- Concepts de la matière; comprendre la théorie atomique;
- Lire et interpréter les informations disponibles sur le tableau périodique;
 - Symbole et numéro atomique
 - Configuration électronique
 - Isotopes
 - Masse molaire
 - Électronégativité
 - Classification des éléments
- Définir les différents types de liaisons chimiques;
- Comprendre comment représenter les substances chimique selon la représentation de Lewis.

- Ce cours débute dans une perspective historique, en exposant les étapes de la découverte des plus petites entités de la matière.
- John Dalton est à l'origine de la version moderne de la théorie atomique.



(électron)

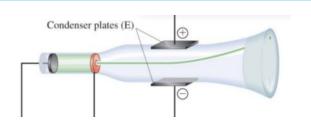
Modèle de Dalton

 Chaque élément est constitué de particules indivisibles appelées atomes; Ce modèle n'explique pas le comportement électrique de la matière.

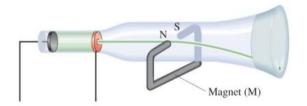


Modèle de Thomson

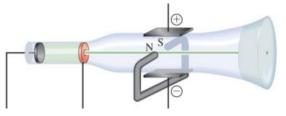
- Des études sur des rayons qui étaient émis par la cathode des tubes à rayon cathodique démontrent :
 - 1. La nature corpusculaire des ces rayons;
 - 2. Ces rayons sont déviés lorsqu'ils se trouvent dans un champs électrique ou magnétique;
 - 3. L'étude de l'étendue de la déviation des rayons cathodiques dans un champs magnétique ou électrique a permis de calculer le rapport : m/e;
 - 4. Milikan détermine par la suite la masse d'un électron grace à ses travaux sur les gouttelettes d'huile chargées électriquement;



A) Déviation en présence d'un champ électrique



B) Déviation en présence d'un champ magnétique



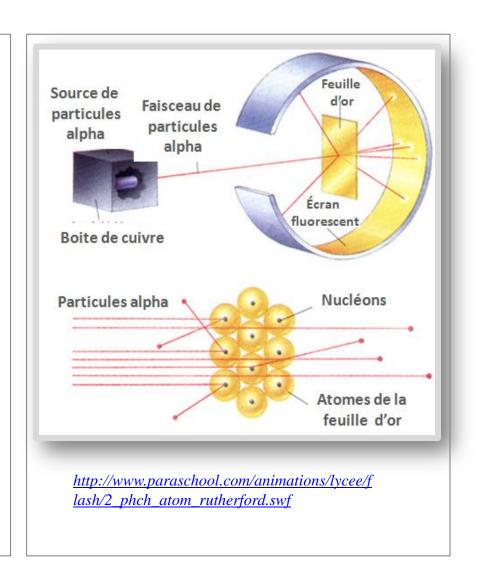
C) Détermination du rapport : m/e

General Chemistry: Principles & Modern Applications

(proton)

Modèle de Rutherford

- Un atome est de taille très petite de l'ordre de milliardième de mètre (10⁻¹⁰m);
- Il est constitué majoritairement de vide.
- Au centre de l'atome on retrouve du volume, un noyau très petit ~ 10 000 fois plus petit que l'atome (10⁻¹⁴m);
- Le noyau est très dense contient presque la masse de l'atome, mais occupe 10^{-13 ième} de son volume;
- Le **noyau** est donc **dense** et contient les particules de charge positives ; **protons**.



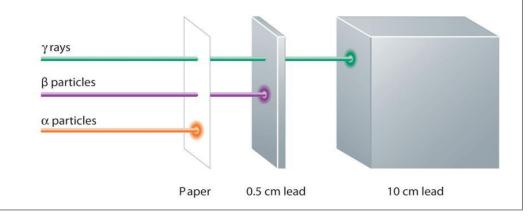
(radioactivité)



Le1 ^{er} cliché de radiographie aux Rayons X

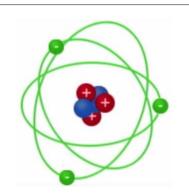
Propriétés de la matière (la radioactivité)

- Des rayons émis spontanément par certains atomes radioactifs (la penchblende), Polonium...;
- **Rayons X** est un rayonnement électromagnétique qui est absorbé par la matière dépendamment de la masse atomique des atomes absorbants;
- D'autres rayonnements sont ensuite observés : rayons
 α : noyau de He et rayons γ;
- Les trois types de rayonnements sont facilement distingués dans un champs électrique et également par leur pénétration dans la matière;



(Neutron)

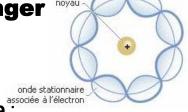
- En se basant sur les travaux de Rutherford, Chadwick 1932 découvre la présence de particules aussi massives que les protons mais sans charge électrique; il s'agit des **neutrons**
- Le noyau est positif contient des protons positifs et des <u>neutrons</u> neutres qui assurent la cohésion du noyau.



Modèle de Bohr

 Les électrons négatifs, très légers, gravitent autour du noyau et se distribuent sur des niveaux d'énergie bien définis appelés <u>couches</u> <u>électroniques</u>

Modèle de Schrödinger

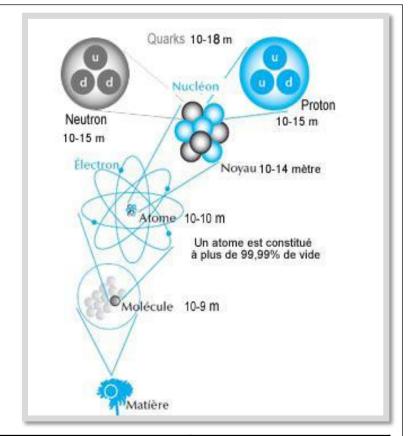


- L'électron est *une onde* ;
- Chaque onde lui est associée une une orbitale (fonction d'onde) ;
- Le carré du module représente la densité de probabilité de présence d'un électron (ou densité électronique) de l'atome en un point de l'espace à un instant donné.

Récapitulons

- Le noyau de l'atome contient les protons et les neutrons; il possède la presque totalité de la masse de l'atome
- Les électrons forment le nuage électronique; ils occupent la presque totalité du volume de l'atome;
- La <u>version moderne</u> de l'atome est illustrées sur la *figure ci-contre;*

Propriétés des particules subatomiques



Particule	Symbole	Charge électrique (C)	Masse (g)
Électron	e ⁻	- 1,6×10 ⁻¹⁹	9.109 × 10 ⁻²⁸
Proton	Р	+1,6×10 ⁻¹⁹	1,6727 ×10 ⁻²⁴
Neutron	n	0	1,6749 ×10 ⁻²⁴

Notation: Symbole de l'atome dans le tableau périodique

- La masse des électrons est très faible comparativement à celle des neutrons et protons;
- Les protons et les neutrons sont des particules du noyau de **l'atome à l'exception de l'atome H** qui ne possède pas de neutron ;
- > Dans un atome neutre, le nombre d'électrons est égal au nombre de protons;
- Le nombre de protons d'un atome est appelé **le numéro atomique ``Z``** et représente l'identité de l'atome;
- Le nombre de neutrons d'un élément n'est pas toujours le même (isotopes);
- Les **électrons** sont responsables de **la réactivité chimique** des éléments et de la formation de liens chimiques;



X : Symbol de l'élement chimique;

A: Nombre de masse correspond au nombre de nucléons (composition du noyau) et représente aussi la masse atomique;

Z: **Numéro atomique** correspondant au nombre de protons;

N: correspond au nombre de **neutrons**

A = Z + N

Exemples

- Le noyau contient les protons et les neutrons, particules appelées conséquemment nucléons;
- Le nombre de protons détermine le numéro atomique (**Z**) de l'élément. C'est ce qui détermine l'espèce chimique;
 - Déterminez le nombre de protons, neutrons et électrons de baryum ?
 - En utilisant le tableau périodique, on obtient : 135 Ba
 - Le symbole : Ba;
 - **A** = 135; **Z** = 56 protons;
 - N = A Z = N = 135 56 = 79 neutrons
 - Nombre d'électrons e = Z = 56 car, l'atome est neutre
 - Déterminez le nombre de protons, neutrons et électrons des éléments?

¹²C:
$$Z=6$$
, $N=6$; ²³⁸U: $Z=92$, $N=146$

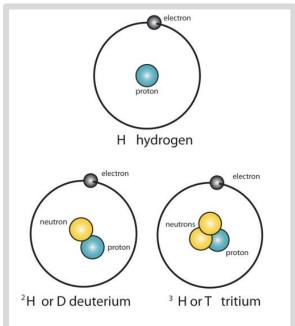
Qu'est ce qu'un isotope?

- Les isotopes sont des atomes qui possèdent le même nombre d'électrons, et protons pour rester neutres, mais un nombre différent de neutrons;
- Les isotopes d'un même élément ont des propriétés chimiques identiques mais des *propriétés physiques différentes* (stables ou radioactifs);

La masse atomique indiquée dans le tableau périodique pour un élément donnée est <u>la moyenne pondérée de la masse des</u> **isotopes** selon leurs **abondance** naturelle;

$$m{M}_{\it el\'ement} = \sum_i \%_{\it massique-isotpei} imes m{M}_{\it isotopei}$$

https://fr.wikipedia.org/wiki/Table_des_isotopes



Masse atomique dans le tableau périodique

- La masse atomique est exprimée en *unités de masse atomique (uma)*, (1 uma = 1,6605 x 10⁻²⁷ kg); elle correspond à 1/12 de la masse d'un atome de ¹²C.
- Le nombre de <u>neutrons</u> influence la masse de l'atome, plus il y a de neutrons, plus <u>l'atome est lourd</u>.
- Un échantillon « normal » d'une substance élémentaire, tel que manipulé dans un laboratoire de chimie, contient un mélange de ses isotopes naturels.

Exemple:

Le spectre de masse de carbone montre 98.892 % de carbone sont des atomes de ¹²C avec une masse atomique de **12 u** et 1.108 % sont des atomes de ¹³C avec une masse de **13.00335 u** calculez la masse atomique du carbone?

$$\boldsymbol{M}_{carbone} = \left(\%_{massique(\boldsymbol{C}^{12})} \times \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{C}^{12}}\right) + \left(\%_{massique(\boldsymbol{C}^{13})} \times \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{C}^{13}}\right)$$

•
$$M_{carbone} = (98.992\% \times 12 u) + (1.108\% \times 13.00335 u)$$

•
$$M_{carbone} = 11.879 \ u + 0.1441 \ u = 12.011 \ u = 12.011 \ (g / mol)$$

(la masse molaire indiquée pour le carbone dans le tableau périodique)

Configuration électronique

- > Par leur mouvement, les électrons définissent le volume de l'atome;
- Il n'est pas possible de <u>décrire précisément</u> le mouvement des électrons;
- Il est basé sur la description de la nature ondulatoire de l'électron (qui se comporte à la fois comme une particule et une onde);
- Les électrons se distribuent sur divers niveaux d'énergie (*couches*). Ces niveaux sont notés par le nombre quantique : **n= 1,2,3,...,7**;
- Les couches d'énergie se subdivisent en sous couches représentées par un autre nombre quantique secondaire noté : `` ℓ `` tel que : $0 \le \ell \le n-1$;
- ➤ Le nombre détermine la forme générale de l'orbitale tel que :

```
\ell=0 correspond à l'orbitale s; \ell=1 correspond à l'orbitale p

\ell=2 correspond à l'orbitale d; \ell=3 correspond à l'orbitale f
```

Chaque orbitale peut contenir au maximum deux électrons de spin différents, le nombre de spin est désigné par le nombre quantique m designe les deux sens possibles de rotation pour un électron tel que :

```
m = + 1/2, simbolisé par : \uparrow et : m = - 1/2, simbolisé par : \downarrow
```

Configuration électronique

➤ En résumé on peut se fier au tableau ci-dessous :

Couche	Sous-couche					
n	6	?	Nombre d'électrons	Cases guantiques		
1	0	1s	2	$\uparrow\downarrow$		
	0	2s	2	$\uparrow\downarrow$		
2	1	2 p	6	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$		
	0	3s	2	$\uparrow\downarrow$		
	1	3р	6	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$		
3	2	3d	10	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow\uparrow$		

La **configuration électronique** d'un atome est la répartition des électrons sur les niveaux d'énergie différents, en utilisant les nombres quantiques et suivre les règles de remplissage des électrons dans les niveaux d'énergie;

Règles de remplissage

Règle numéro 1 : - Deux électrons d'un même atome ne peuvent avoir leurs nombres quantiques identiques;

Règle Numéro 2: - Le remplissage des orbitales se fait selon l'ordre croissant des valeurs n +ℓ

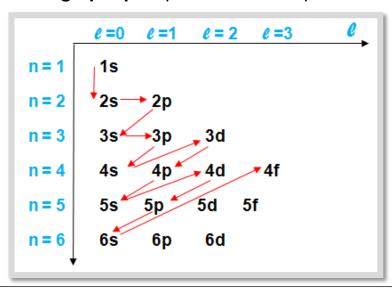
- Quand on trouve deux valeurs **n**+ ℓ identiques, on choisira l'orbital ayant le nombre principal **n** le plus petit;

Règle Numéro 3 : - Dans une même orbitale, la stabilité est assurée lorsque la somme des spins des électrons est plus grande;

Pour appliquer aisément ces règles, il existe des méthodes graphiques pour retrouver rapidement

l'ordre de remplissage qu'elle engendre.

Toutes ces méthodes mènent au même remplissage. En voici une:



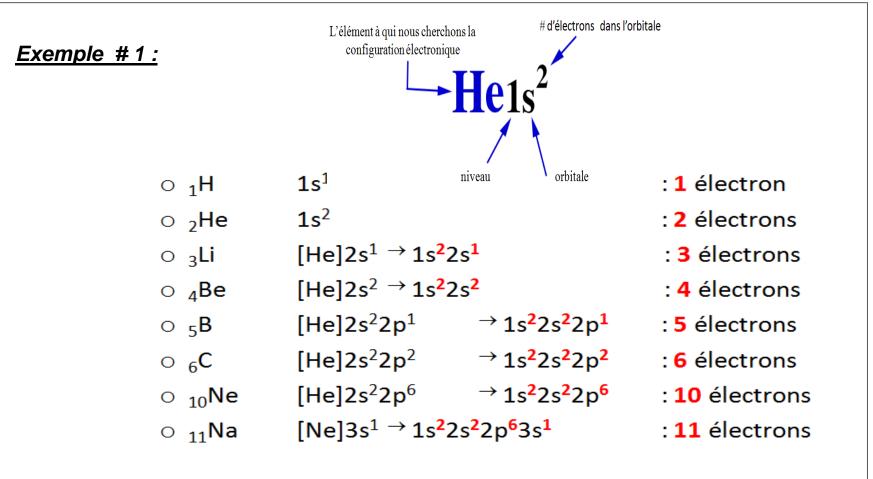
Notation spectroscopique

➤ Le nombre maximal d'électrons par niveau d'énergie est donné dans le tableau cidessous, pour les niveaux : n=1; 2; 3; 4; 5; 6 et 7.

Exemples

Niveau d'énergie	Nombre d'e	Orbitales atomiques
1	2	1s ²
2	8	2s ² 2p ⁶
3	18	$3s^2 3p^6 3d^{10}$
4	32	$4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$
5	50	$5s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 5g^{18}$
6	72	$6s^2 6p^6 6d^{10} 6f^{14} 6g^{18} 6h^{22}$
7	98	$7s^{2} 7p^{6} 7d^{10} 7f^{14} 7g^{18} 7h^{22}$ $7i^{26}$

Notation spectroscopique

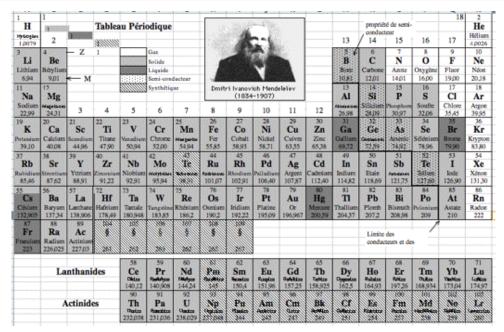


Exemple #2: Donnez la configuration électronique de l'atome de Fer (Z=26)

Fe: $1S^2$ $2S^2$ $2P^6$ $3S^2$ $3P^6$ $4S^2$ $3d^6$ ou: Fe: $1S^2$ $2S^2$ $2P^6$ $3S^2$ $3P^6$ $3d^6$ $4S^2$

Tableau périodique

- **Dimitri Mendeleïev** (1843-1907) qui a proposé le premier tableau périodique regroupant 63 éléments chimiques connus à son époque;
- La classification périodique actuelle, classe les éléments chimiques par numéro atomique croissant;
- Les éléments chimiques ayant Z < 93 sont naturels et ceux ayant Z ≥ 93 sont artificiels



http://feux-artifices-tpe-merleau-ponty.e-monsite.com/pages/la-couleur.html

- Dans une ligne: les éléments sont classés par ordre de numéro atomique (Z) croissant.
- Les lignes appelées **périodes** correspondent au dernier niveau d'énergie occupé par les électrons de l'atome.
- Les éléments d'une même colonne caractéristique, qui ont la même « terminaison » de configuration électronique, ont des propriétés chimiques similaires
- Les colonnes correspondent au remplissage des orbitales du dernier niveau d'énergie;

La périodicité

- La disposition en lignes et colonnes du tableau périodique a été créée en étudiant ces propriétés: elle est en fait antérieure à la formulation du modèle atomique
- On sait maintenant qu'il y a un lien entre le comportement (propriétés) et la configuration électronique.
- Pour les colonnes caractéristiques, la configuration se termine

```
1ère colonne (groupe IA): s¹
2e colonne (groupe IIA): s²
13e colonne (groupe IIIA): s²p¹
14e colonne (groupe IVA): s²p²...
18e colonne (groupe VIIIA): s²p6 (sauf He)
```

Électrons de valence

- Les électrons de valence sont ceux qui occupent le dernier niveau d'énergie de l'atome;
- Pour les éléments des colonnes caractéristiques, les électrons de valence sont ceux qui se trouvent dans les orbitales s et p du dernier niveau d'énergie: il sont écrits de manière explicite dans la notation spectroscopique du tableau périodique;
- Ce sont les électrons de valence qui sont impliqués dans les liaisons chimiques;

Exemple:

- **a** Donnez la configuration électronique de l'atome du manganèse (Z = 25)?
- **b** A Quelle periode appartiet-il?
- c Déterminez le nombre d'électrons de valence?
- d A quell colonne apartiet-il?

Réponses:

- a: Mn: 1S2 2S2 2P6 3S2 3P6 4S2 3d5
- **b**: La période est représentée par le dernier niveau d'énergie = **4**ème période;
- c: le nombre électrons de valence 2+ 5 = 7 électrons ;
- **d** : la dernière sous-couche est la **d**, le manganèse appartient au **bloc d** et se trouve dans la **7**ème **colonne**;

Règle de l'octet

- La stabilité chimique d'un atome est plus grande lorsque les orbitales s et p du dernier niveau d'énergie sont complètes, i.e. lorsqu'il a huit électrons de valence (sauf les éléments de la première ligne);
- Ainsi, la configuration électronique de l'atome ressemble à celle d'un élément de la dernière colonne (18°) du tableau périodique (les gaz rares);
- L'atome tend vers cet état de stabilité en interagissant avec d'autres atomes pour gagner ou perdre des électrons;
 - L'atome qui possède peu d'électrons de valence tendra à les perdre
 - L'atome qui possède beaucoup d'électrons de valence tendra à en gagner
 - Ces interactions constituent les liaisons chimiques;

Exemples:

- * $_8O: [He]2s^22p^4 \rightarrow 6$ électrons de valence ; et le dernier niveau énergétique occupé est : n=2 (2 eme période)
- ❖ $_{12}$ Mg: $1s^22s^22p^63s^2 \rightarrow [\text{Ne}] \ 3s^2 \rightarrow 2 \text{ électrons de valence}$ dernier niveau énergétique occupé (n=3)
- ❖ ₃₄Se: [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^4 \rightarrow 6$ électrons de valence; dernier niveau énergétique occupé n=4 (4ème période)
- ❖ 29Cu: 1s²2s²2p⁶3s²3p⁶4s²3d⁰ (11 électrons de valence);
 dernier niveau occupé n= 4 (4ème colonne)

Les types d'éléments

Les métaux

- Côté gauche du tableau périodique;
- Tendance à perdre leurs électrons de valence;

Les non-métaux

- Côté droit du tableau périodique;
- Comprennent des éléments qui sont chimiquement très stables (gaz rares) et des éléments qui ont tendance à gagner des électrons;

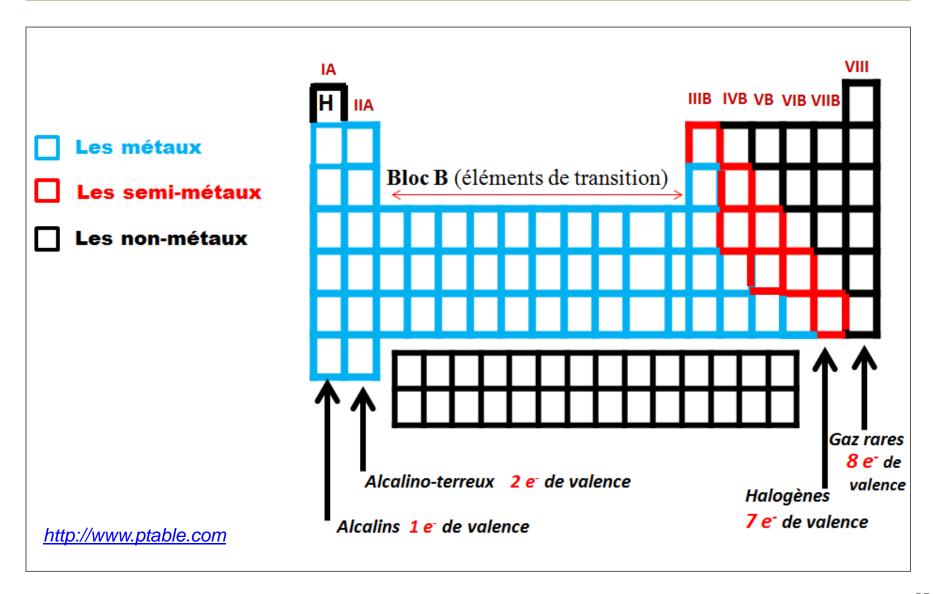
Les semi-métaux (métalloïdes)

- Entre les deux autres groupes;
- Possèdent des propriétés des métaux et des non-métaux;
 http://www.ptable.com

Caractéristiques des groupes

- > 1 (IA) métaux alcalins
 - 1 électron de valence
 - Très réactifs
- > 2 (IIA) métaux alcalinoterreux
 - 2 électrons de valence
- > 17 (VIIA) halogènes
 - 7 électrons de valence
- ➤ 18 (VIIIA) gaz rares
 - 8 électrons de valence (2 pour He)
 - Très stables chimiquement (ne forment pas de liaisons chimiques)
- > L'hydrogène (non-métal) forme un groupe à part

Récapitulons



Électronégativité

- Propriété qui caractérise la tendance d'un atome à attirer les électrons d'une liaison chimique;
- Cette tendance est d'autant plus forte (maximum d'attraction électrostatique) que :
 - Le nombre de protons (numéro atomique) est élevé
 - Le rayon de l'atome est petit
- Le long d'une ligne, le numéro atomique augmente; l'électronégativité augmente
- ➤ Le long d'une colonne, le rayon atomique augmente, l'électronégativité diminue
- Échelle arbitraire (selon le tableau périodique); symbole X

											N	л-шец	tux					
	1	2	3'	4'	5'	6'	7'	₽	8'	${\bf A}$	1'	2'	3	4	5	6	7	8/0
	blo	c s				blo	oc d								bloc p			
1												7		2,1				X
2	1,0	1,5]										2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	X
3	0,9	1,2											1,5	1,8	2,1	2,5	3,0	X
4	0,8	1,0	1,3	1,5	1,6	1,6	1,5	1,8	1,8	1,8	1,9	1,6	1,6	1,8	2,0	2,4	2,8	X
5	0,8	1,0	1,3	1,4	1,6	1,8	1,9	2,2	2,2	2,2	1,9	1,7	1,7	1,8	1,9	2,1	2,5	X
6	0,7	0,9	1,1	1,3	1,5	1,7	1,9	2,2	2,2	2,2	2,4	1,9	1,8	1,8	1,9	2,0	2,2	X
7	0,7	0,9	1,1	1,3	1,5	1,7			•		•				•	•		K
	Méta	ux					_											

Non mótany

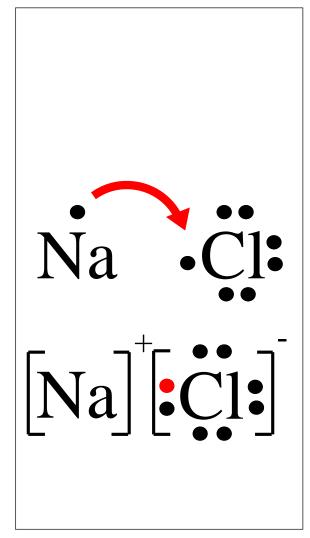
Nature des éléments en fonction de l'électronégativité X

- Il y a une **règle générale** pour le classement des éléments en fonction de leur nature chimique. Cette règle est à la fois de nature topologique et de nature numérique : c'est la valeurs de l'électronégativité :
- Les éléments situés à gauche et en dessous de la diagonale descendante qui est définie dans la zone de remplissage **p**, (colonnes 3 à 8) sont tous des <u>métaux</u>, leur électronégativité est, sauf exceptions, <u>inférieure à 2</u>.
- Les éléments qui constituent cette diagonale, ou qui en sont très proches, sont appelés **semi-métaux**, leur électronégativité est <u>voisine</u> de 2.
- Les autres éléments, situés à droite et au dessus de cette diagonale sont des <u>non-métaux</u>, leur électronégativité est <u>supérieure à 2</u>.

Liaisons chimiques

- Les liaisons chimiques permettent la formation de composés ioniques et de molécules;
- Elles font intervenir les électrons de valence des atomes; les noyaux ne sont pas modifiés;
- Ces interactions entre atomes permettent à ceux-ci d'acquérir une plus grande stabilité chimique;
- ➢ On décrit 3 types de liaisons qui se distinguent par la différence d'électronégativité (∆X) entre les 2 atomes impliqués;

Liaison ionique



- Échange d'électrons entre atomes de tendance très opposée (ΔX≥2.0)
- Chaque atome a alors une dernière couche électronique complète
- Crée des solides ioniques

Liaison ionique

- Un ion est un atome ayant perdu (cation) ou gagné (anion) un ou plusieurs électrons;
- Les métaux, peu électronégatifs, forment des cations (ions positifs)
- Les atomes des familles de l'oxygène et du fluor (halogènes),
 très électronégatifs, forment des anions (ions négatifs)

Cation

C'est un atome de calcium ayant perdu deux électrons

CL-

Anion

C'est un atome de chlore ayant gagné un électron

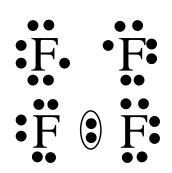
Liaison covalente

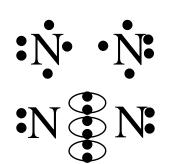
- La liaison de covalence résulte de la mise en commun, par 2 atomes, d'une paire d'électrons (doublet). Elle est représentée par un tiret;
- Cette mise en commun d'une paire d'électrons résulte d'un recouvrement d'O.A., la liaison de covalence est donc une liaison dirigée;

Liaison covalente



H © H





- Mise en commun d'une paire d'électrons entre atomes de tendance semblable
- > La paire d'électrons peut être représentée par un trait
- Forme une entité appelée « molécule »
- peut être
 - > Simple (CI-CI ou H-H)
 - Double (O=O)
 - ➤ Triple (N=N)
- Le nombre de liaisons covalentes que forme un atome est égal au nombre d'électrons de valence manquants (pour atteindre 8).
 - Carbone: 4 électrons de valence, il lui manque donc 4 pour satisfaire la règle de l'Octet. Le carbone fera généralement 4 liaisons covalentes.

Liaison covalente polaire

Mise en commun d'une paire d'électrons



Partage inégal des électrons, car les atomes n'ont pas une électronégativité semblable



- Crée une molécule
- Le partage inégal provoque un dipôle électrique (charges partielles sur les atomes impliqués)

Classification des liaisons chimiques

Différence d'électronégativité	Type de liens	Description	Exemples		
$\Delta X \leq 0.7$	Covalent	Partage symétrique d'une paire d'électrons	H ₂ , Cl ₂ , O ₂		
$0.7 \le \Delta X \le 1.4$ ou plus	Covalent - polaire	Partage asymétrique d'une paire d'électrons	HCI, H ₂ O		
∆ X ≥ 2	Ionique	Transfert d'électrons	NaCl, MgO		

Représentation de Lewis

- La notation de Lewis est une représentation d'un élément par son symbole entouré de points qui représentent les électrons de valence.
- La représentation de Lewis d'un atome fait apparaître la dernière couche électronique de l'atome.

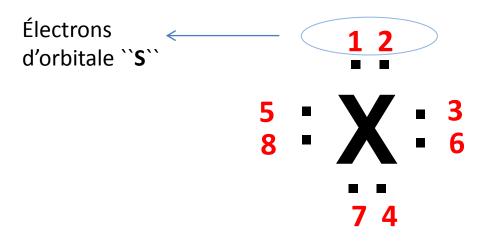
Représentation de Lewis - règles -

- 1. Écrire écrira la **formule brute** de la molécule et éventuellement son nom.
- 2. Écrire le nom et le symbole de chaque atome présent dans la molécule puis leur configuration électronique;
- 3. Repérer le nombre d'électrons de valence sur la couche externe de chaque atome;
- Une paire d'électrons est représentée par un tiret;
- 5. Un électron célibataire est représenté par un point;
- 6. Regarder le **gaz rare le plus proche** à l'atome de l'élément considéré ainsi que **sa configuration électronique**;
- 7. Répartir **les doublets liants** et **non liants** de l'atome considéré;
- 8. Quand une paire d'électrons constitue une liaison chimique covalente, c'est un doublet liant, sinon, c'est un doublet non liant;

Représentation de Lewis - règles -

Récapitulons

- De manière générale, voici comment répartir les électrons de valence d'un élément chimique (X);
- Deux électrons d'un coté sont remplacés par un tiret (<u>non liant</u>);
- Un seul électron est appelé électron <u>célibataire</u>;
- Parfois des exceptions au niveau de molécules complexes



Représentation de Lewis - règles -

Composé	Nombre d'électrons externes	Modèle de Lewis
H ₂ O Eau	O: 6 électrons externes H: 1 électron externe (1)2 +6 = 8 électrons 2 doublets liants 2 doublets non liants	н — <u>о</u> — н
NH ₃ Ammoniac	N : 5 électrons externes H : 1 électron externe 5 + (1)3 = \$ électrons 3 doublets liants 1 doublet non liant	H – N – H H
CH ₄ Méthane	C : 4 électrons externes H : 1 électron externe 4 + (1)4 = 8 électrons 4 doublets liants	H - C - H

Représentation de Lewis

Double liaison
$$O_2: |O \rightarrow O| \rightarrow |O = O|$$

Dioxyde de carbone
$$CO_2$$
 \bigcirc $C=\bigcirc$

> Triple liaison

$$N_2: |N + N| \longrightarrow |N = N|$$