

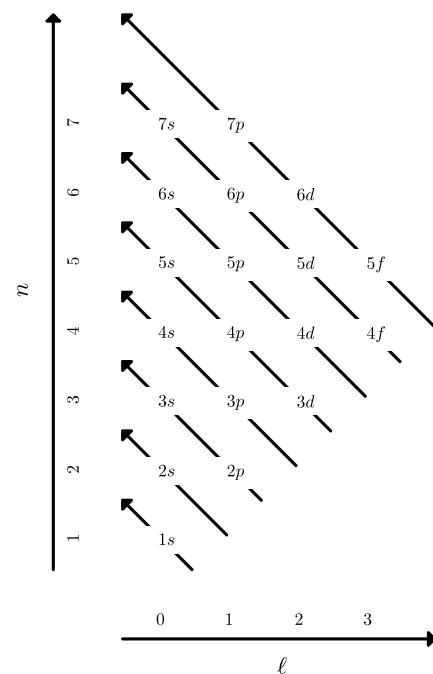
## Structure de l'atome

- Atome : constitué d'un noyau (protons et neutrons) autour duquel gravitent des électrons, il est électriquement neutre.
- Notation symbolique :  ${}^A_Z X$  avec  $Z$ , le numéro atomique (nombre de protons) et  $A$ , le nombre de masse (protons + neutrons = nucléons).
- Le proton porte la charge élémentaire  $e = 1,60 \times 10^{-19}$  C, l'électron la charge opposée  $-e$ . La charge du noyau est donc  $Q = Z \cdot e$ .
- La masse des électrons est négligeable devant celle des nucléons.
- Un élément chimique regroupe tous les atomes ou les ions ayant le même nombre de protons  $Z$ . C'est cette valeur qui définit la nature chimique de l'atome (sa place dans le tableau périodique).
- Un nucléide désigne un atome ou un ion caractérisé par un nombre donné de protons  $Z$  et de neutrons  $A - Z$ .  
Par exemple le cobalt-60 et le cobalt-59 sont des nucléides différents.
- Les isotopes d'un élément sont l'ensemble des nucléides qui appartiennent au même élément chimique (c'est-à-dire qui ont le même nombre de protons), mais qui possèdent un nombre de neutrons différent. Par exemple le carbone-12 et le carbone-14 sont des isotopes du carbone ( $Z = 6$ ), avec respectivement 6 et 8 neutrons.

## Nombres quantiques et configurations électroniques

- Un électron dans un atome est décrit par un ensemble unique de quatre nombres quantiques :
    - principal  $n \in \mathbb{N}^*$  : définit la couche électronique ;
    - secondaire  $\ell \in [0, n - 1]$  : définit la sous-couche :

$\ell$	0	1	2	3	4
Lettre	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$
Capacité	$2e^-$	$6e^-$	$10e^-$	$14e^-$	$18e^-$
  - magnétique  $m_\ell \in [-\ell, \ell]$  : orientation de la sous-couche ;
  - de spin  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  : orientation du spin de l'électron.
  - Le remplissage des orbitales suit l'ordre donné par la règle de Klechkowski (Diagramme ci-contre).
  - Pour certains métaux de transition, la configuration électronique adopte une structure plus stable en dérogant à la règle de Klechkowski. La très grande stabilité des sous-couches  $d$  et  $f$  pleines ou demi-pleines (remplissage habituel en dehors de ces situations) favorise des configurations comme  $s^1d^{10}$  (au lieu de  $s^2d^9$ ) ou  $s^1d^5$  (au lieu de  $s^2d^4$ ).
- Exemples : Cr (Z=24) : [Ar]  $4s^13d^5$  et Cu (Z=29) : [Ar]  $4s^13d^{10}$ .



- Électrons de valence : électrons des couches les plus externes pouvant participer aux liaisons chimiques. Pour les éléments des familles principales (*s* et *p*), ce sont les électrons de la dernière couche. Pour les éléments de transition interne (*d* et *f*), ce sont les électrons de la couche *s* externe et des sous-couches *d* ou *f* partiellement remplies.
- Électrons de cœur : électrons des couches internes complètement remplies, qui ne participent pas aux liaisons chimiques.

## Tableau périodique

- La ligne (période) d'un élément correspond à sa couche de valence (*n*). La colonne (famille) est liée au nombre d'électrons de valence, ce qui confère des propriétés chimiques similaires.
- Electronégativité  $\chi$  : tendance d'un atome à attirer les électrons d'une liaison. Plus  $\chi$  est grand, plus les électrons auront tendance à se rapprocher de l'élément. Elle augmente de gauche à droite sur une période et de bas en haut dans une famille, reflétant la diminution du rayon atomique.

Atome	H	C	N	O
$\chi$	2,20	2,55	3,04	3,44

- Familles remarquables :
  - Alcalins (colonne 1) :  $ns^1$ . Forment facilement l'ion  $M^+$ .
  - Halogènes (colonne 17) :  $ns^2 np^5$ . Forment facilement l'ion  $X^-$ .
  - Gaz nobles (colonne 18) :  $ns^2 np^6$ . Couche de valence saturée. Très stables.

## Cristaux et liaisons

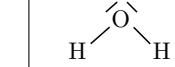
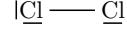
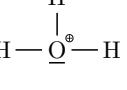
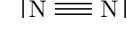
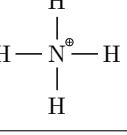
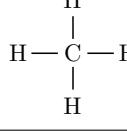
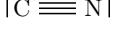
- Solides moléculaires : constitués de molécules régulièrement disposées dans l'espace. La cohésion est assurée par des interactions intermoléculaires : forces de Van der Waals ou liaisons hydrogène.
- Cristaux ioniques : formés de réseaux d'anions et de cations, dont la cohésion résulte de l'interaction électrostatique entre charges opposées.
- Cristaux covalents : atomes liés entre eux par des liaisons covalentes correspondant à la mise en commun de deux électrons entre atomes voisins.
- Cristaux métalliques : atomes métalliques liés par des liaisons métalliques, caractérisées par un nuage d'électrons délocalisés entourant les noyaux positifs. Ils sont opaques, bons conducteurs de chaleur et d'électricité, et possèdent un fort pouvoir réflecteur.

## Schéma de Lewis

- Liaison covalente : partage d'un doublet d'électrons entre deux atomes. Elle est représentée par une barre entre les atomes. Si l'atome est isolé, on inscrit un point pour chaque électron susceptible de se lier.
- Doublet non liant : paire d'électrons de valence appartenant uniquement à un atome et ne participant pas à une liaison avec un autre atome. On représente une barre autour de l'atome pour chaque doublet.
- Éléments à connaître :

Élément	Z	Config. électronique	Rep. de Lewis
Hydrogène	1	$1s^1$	H·
Carbone	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	·C·
Azote	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	N·
Oxygène	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	O·

- Règle de stabilité : pour gagner en stabilité, les atomes tendent à acquérir la configuration électronique du gaz noble le plus proche.
- On distingue la règle du duet (pour H, qui vise 2 électrons) et la règle de l'octet (pour les éléments des lignes 2 et 3, qui visent 8 électrons de valence).  
Au-delà, dès l'apparition des orbitales d et f, ces règles ne s'appliquent plus strictement.
- Molécules et ions courants :

Molécule	Formule	Schéma	Ion	Formule	Schéma
Eau	$H_2O$		Ion hydroxyde	$HO^-$	
Dichlore	$Cl_2$		Ion oxonium	$H_3O^+$	
Diazote	$N_2$		Ion ammonium	$NH_4^+$	
Méthane	$CH_4$		Ion cyanure	$CN^-$	

- Lorsque plusieurs positions sont possibles, la charge négative se place sur l'atome le plus électronégatif, et la charge positive sur le moins électronégatif. Rappelons que l'hydrogène ne porte jamais de charge et que  $\chi(C) < \chi(N) < \chi(O)$ .

## Géométrie spatiale des molécules

- Les doublets électroniques (liants et non liants) autour d'un atome central se repoussent et s'orientent dans l'espace pour minimiser cette répulsion, ce qui impose la géométrie de la molécule.
- On note une espèce selon le modèle  $AX_nE_m$  où A est l'atome central, X un atome voisin ( $n$  liaisons (peu importe simple, double ou triple)) et E un doublet non liant ( $m$  doublets).

$n + m$	2	3	4
Figure de répulsion	Linéaire	Plane triangulaire	Tétradaédrlique
Représentation spatiale			

## Polarité des molécules

- Moment dipolaire électrique ( $\vec{\mu}$ ) : grandeur vectorielle qui quantifie la séparation des charges électriques dans un système. Il mesure l'asymétrie de la distribution des charges, en coulomb-mètre ( $C \cdot m$ ) ou en debyes ( $1 D = 3,336 \cdot 10^{-30} C \cdot m$ ).  
Pour un système composé de deux charges opposées  $+q$  placée au point  $P$  et  $-q$  placée au point  $N$ , le moment dipolaire vérifie  $\vec{\mu} = q \cdot NP$ .
- Polarisation d'une liaison : Une liaison A—B est polarisée si les électronégativités sont différentes ( $\Delta\chi = \chi(B) - \chi(A) \neq 0$ ). La densité électronique est alors décentrée vers l'atome le plus électronégatif.
- Le coefficient  $\delta$  (compris entre 0 et 1), appelé pourcentage ionique, caractérise le caractère ionique de la liaison.
- La séparation des charges engendre un moment dipolaire, vecteur colinéaire à la liaison A—B, orienté du pôle négatif vers le pôle positif du dipôle :  $\vec{\mu} = \delta \cdot e \cdot BA$ .
- La liaison est purement ionique pour  $\delta = 1$  (lorsque  $\Delta\chi > 2$ ) et purement covalente lorsque  $\delta = 0$  (lorsque  $\Delta\chi < 0,5$ ).
- Le moment dipolaire de la molécule est obtenu en sommant vectoriellement les moments dipolaires de chacune des liaisons.  
Si le moment dipolaire total est nul, la molécule est dite apolaire. Sinon la molécule est polaire.

## Modèle du cristal parfait

- Cristal parfait : structure ordonnée et périodique résultant de la répétition dans l'espace d'une maille élémentaire.
- Empilement compact : chaque atome est en contact avec le maximum d'atomes voisins.
- Empilement compact : chaque atome est en contact avec le maximum d'atomes voisins.
- Cristal parfait : structure ordonnée et périodique résultant de la répétition dans l'espace d'une maille élémentaire.
- Empilement compact : chaque atome est en contact avec le maximum d'atomes voisins.

Nom	Population	Représentation
Hexagonal Compact (HC)	$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$	
Cubique à Faces Centrées (CFC)	$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$	

- Empilement non compact : l'espace n'est pas optimisé, il y a plus de trous.

Cubique Centré (CC)	$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$	
---------------------	-------------------------------	--

- Paramètres de maille cubique : longueur  $a$  d'une arête.  
Il y a donc des relations (sur une arête, une diagonale, ou une diagonale du cube) entre les rayons des atomes et  $a$ .

- Population : nombre de motifs appartenant en propre à une maille.

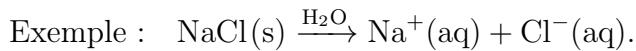
$$n = n_{\text{intérieur}} + \frac{n_{\text{faces}}}{2} + \frac{n_{\text{arêtes}}}{4} + \frac{n_{\text{sommets}}}{8}.$$

- Sites interstitiels : espaces vides entre les atomes dans un empilement compact, pouvant accueillir des atomes plus petits.
- Les structures cristalines permettent de retrouver la masse volumique du cristal :

$$\rho = \frac{m_{\text{maille}}}{V_{\text{maille}}} = \frac{n \cdot m_{\text{motif}}}{V_{\text{maille}}}.$$

## Dissolution d'un solide ionique

- Dissolution : processus en 3 étapes : dissociation, solvatation (hydratation), dispersion.
- Équation de dissolution :



- Concentration molaire : quantité de matière de soluté dissout par litre de solution :

$$c = \frac{n}{V}.$$

La formule est analogue pour la concentration d'un ion, en prenant pour  $n$  la quantité de matière de cet ion.

- Puisqu'il est difficile de connaître la masse d'un seul atome, mais plus courant de connaître celle d'une mole d'atomes, on utilise le nombre d'Avogadro :  $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ .
- Tableau d'avancement : il permet de suivre l'évolution des quantités de matière.

<b>Éq. réaction</b>	$\text{BeF}_2(\text{s}) \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{Be}^{2+}(\text{aq}) + 2 \text{F}^-(\text{aq})$
<b>État initial</b>	$n_0$ 0      0
<b>État interm.</b>	$n_0 - \xi(t)$ $\xi(t)$ $2\xi(t)$
<b>État final</b>	$n_0 - \xi_{\max} = 0$ $\xi_{\max}$ $2\xi_{\max}$

- La conductivité électrique  $\sigma$  (en  $\text{S}\cdot\text{m}^{-1}$ ) d'une solution ionique est donnée par la loi de Kohlrausch :

$$\sigma = \sum_i \lambda_i \cdot [X_i]$$

avec  $\lambda_i$  la conductivité molaire ionique de l'ion  $i$  en  $\text{S}\cdot\text{m}^2\cdot\text{mol}^{-1}$  et  $[X_i]$  sa concentration en  $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$  !

## Ions et molécules à retenir

Catégorie	Formule	Nom
Molécule neutre	$\text{NH}_3$	Ammoniac
Cation (positif)	$\text{H}_3\text{O}^+$ $\text{NH}_4^+$	Oxonium Ammonium
Anion (négatif)	$\text{HO}^-$ $\text{SO}_4^{2-}$ $\text{NO}_3^-$ $\text{MnO}_4^-$	Hydroxyde Sulfate Nitrate Permanganate