

UE 1 CHIMIE

<p>FICHE DE COURS 1 : DE L'ATOME A LA MOLECULE</p>

Table des matières

I.	Structure de l'atome.....	3
1)	Le noyau.....	3
2)	Les électrons.....	3
3)	L'atome.....	3
II.	Les liaisons chimiques.....	4
1)	Représentation de Lewis.....	4
2)	La liaison covalente.....	4
3)	La liaison covalente dative.....	5
4)	Les liaisons faibles.....	5
III.	Structure des molécules.....	6

I- Structure de l'atome

1) Le noyau

- constitué de **nucléons**, 2 types de particules :
- chargé **positivement**

	proton	neutron
charge	$+1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	0
masse	$1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$	$1,675 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ $\simeq m_{\text{proton}}$

2) Les électrons

- gravitent **autour du noyau** en décrivant une **orbite circulaire**
- chargés **négativement** ($-1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$)
- masse = $9,110 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$ près de 2000 x moins qu'un proton (ou un neutron)

3) L'atome

Elément ou Nucléide A = Nombre de masse (nombre de **nucléons** = protons + neutrons)
 Z = Numéro atomique (nombre de **protons**)

${}^A_Z X$ L'atome est neutre : autant d'**électrons** que de protons : Z électrons
Pour un ion : $Z - \text{charge} = \text{Nombre d'électron}$
 $A - Z = \text{Nombre de neutrons}$

- rayon **1 Å** (10^{-10} m)
- isotope** = même élément (**même Z**) MAIS nombre de masse (**A**) \neq .
2 isotopes = même nombre d'électrons
même nombre de protons
MAIS nombre de **neutrons** \neq Ex : ${}^1_1\text{H}$; ${}^2_1\text{H}$; ${}^3_1\text{H}$

Stable (naturel) ou radioactif (naturel ou non)

masse molaire moyenne : $M = \sum(x_i M_i)$ (vu en ED)

avec x_i : abondance isotopique de l'isotope i et M_i : Masse molaire de l'isotope i

- nombre de mole : $n = \frac{N}{N_A}$ avec N_A , nombre d'Avogadro ($6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$), correspond au nombre d'atomes de carbone dans 12 grammes de carbone 12.
- masse d'un atome ${}^A X$ (vu en ED)
en kg : masse de l'atome ${}^A X \simeq \text{masse du noyau} = A \times 1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
car $m_p \simeq m_n \gg m_e$ (négligeable) et $A > Z$
en u.m.a. : 1 u.m.a. = $1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ donc la masse d'un élément ${}^A X$ est : $A \text{ u.m.a.}$
en g.mol⁻¹ : la masse molaire d'un élément ${}^A X$ est : $A \text{ g.mol}^{-1}$

- **Electronégativité (EN)** : capacité d'un élément d'**attirer les électrons** : un halogène (F, Cl, Br, I) situé à droite de la classification est considéré comme étant très EN, tandis qu'un alcalin (à gauche : Li, Na, K...) est considéré comme très peu EN, on parle même d'éléments électropositifs

$$\text{Echelle de Mulliken : EN (Mulliken)} = \frac{E_{I_1} + AE}{2} \text{ en eV}$$

L'électronégativité est mesurée selon une autre échelle : celle **de Pauling**

EN (F) > EN (O) > EN (Cl) \approx EN (N) > EN (C) \approx EN (H)

II- Les liaisons chimiques

Mise en commun de **2 électrons** pour former une entité A-B **plus stable** (à 8 électrons **comme les gaz rares**) que les deux atomes A et B pris séparément.

1) Représentation de LEWIS

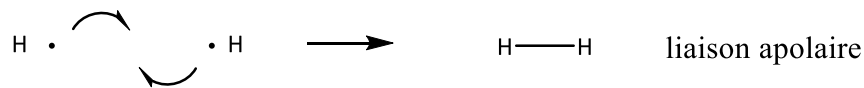
On retiendra les structures de Lewis des éléments suivants :

H ·	· B · □	· C ·	· N	O O □	F
			· P · P :	S	Cl

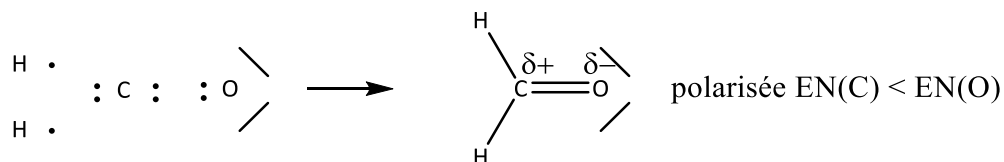
2) La liaison covalente (forte 100-500 kJ.mol⁻¹)

- A et B possèdent **chacun** au moins **un électron célibataire** et sont d'**électronégativité similaire** ($\Delta EN_{A-B} \leq 2$)

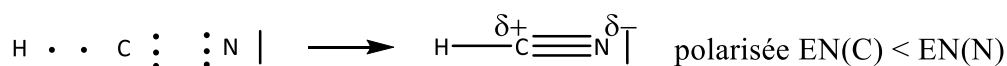
- La liaison **simple**



- La liaison **double**



- La liaison **triple**



- Dans les 3 exemples précédents, on constate que C, N et O, qui appartiennent à la deuxième période, respectent bien la règle de **l'octet** (8 électrons **maximum**).

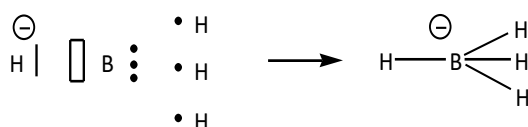
Rq : certains atomes peuvent donc atteindre MOINS de 8 électrons (cas de BH₃, B est entouré de 6 électrons seulement)

3) La liaison covalente dative

- Une liaison chimique peut être formée entre un atome A (ou une molécule) possédant une **lacune électronique** (OA vacante) et un atome B (ou une molécule) possédant un **doublet non liant**. A et B sont **d'électronégativité similaire** ($\Delta EN_{A-B} \leq 2$)

Charges formelles sur A et B : + pour l'atome qui cède son **doublet** et – pour l'atome qui possédait la **lacune électronique**

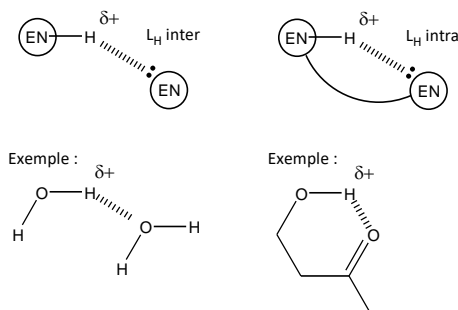
Exemple : BH₄[–] *Rq ici pas de charge + visible sur H car celui-ci était initialement –*



4) Les liaisons faibles

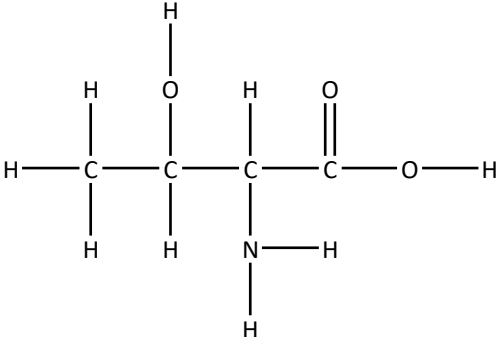
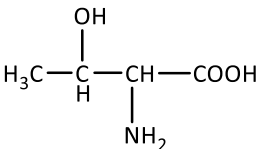
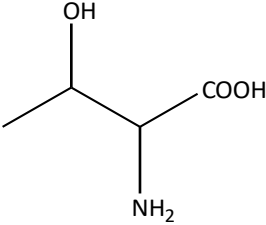
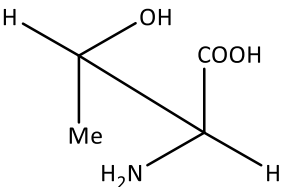
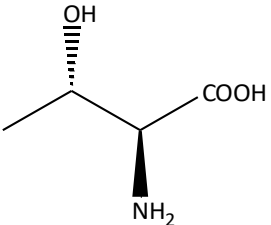
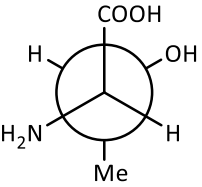
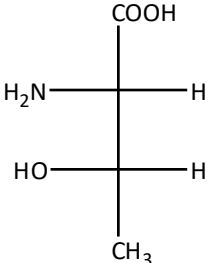
- Les liaisons **ioniques** ($\Delta EN_{A-B} > 2$) 40 kJ.mol⁻¹ (exemple : NaCl) facilement dissociable dans l'eau
- La liaison **hydrogène** 10 - 40 kJ.mol⁻¹

Nécessite la présence **d'un H acide** ($\delta+$) donc lié à un atome électronégatif (EN) et d'un atome possédant obligatoirement au minimum **un doublet non liant** :



- Les interactions **de Van der Waals** 4 kJ.mol⁻¹ (entre 2 dipôles)
- Les interactions **hydrophobes** 4-10 kJ.mol⁻¹ (chaînes apolaires C-H)

III- Structure des molécules

KEKULE		SEMI-DEVELOPPEE	TOPOLOGIQUE
			
PERSEPECTIVE	CRAM	NEWMAN	FISCHER
			

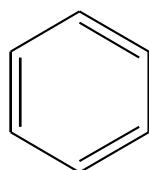
- Calcul d'une insaturation :

a- A partir **de la formule brute** : $I = \frac{1}{2} (2n_{IV} + 2 - n_I + n_{III})$

$C_4H_9NO_2$: $I = \frac{1}{2} (2 \times 4 + 2 - 9 + 1) = 1$ (la double liaison C=O de l'acide)

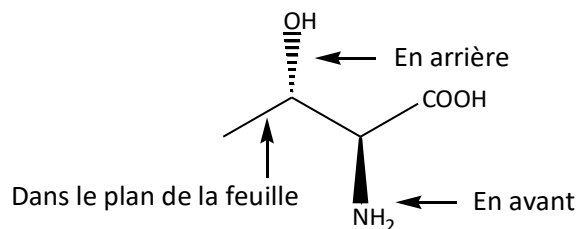
b- A partir **de la structure** : Double liaison Cycle Triple liaison
 $I = \quad \quad \quad 1 \quad \quad \quad 1 \quad \quad \quad 2$

exemple :

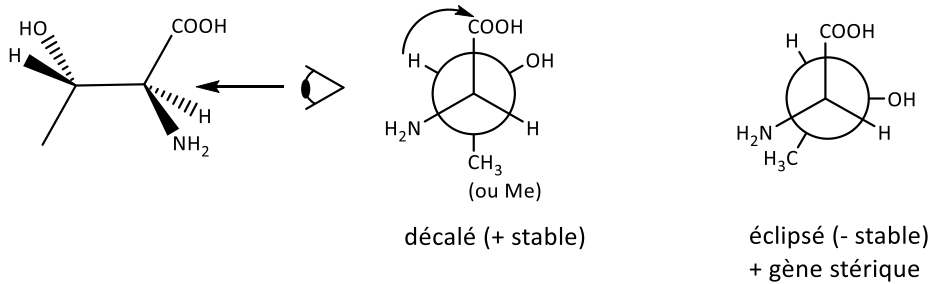


$I = 4$, 1 cycle + 3 C=C

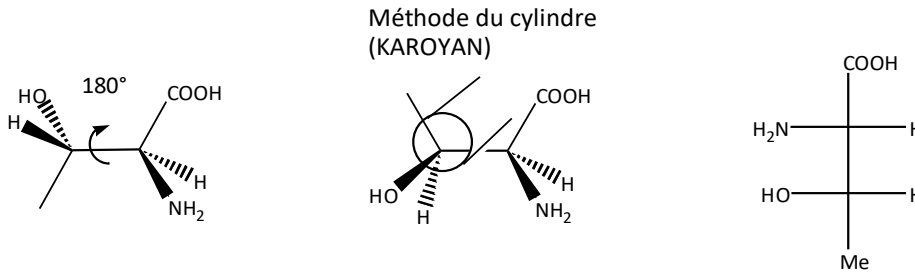
- CRAM :



- **NEWMAN** : pour discuter de la stabilité des conformères



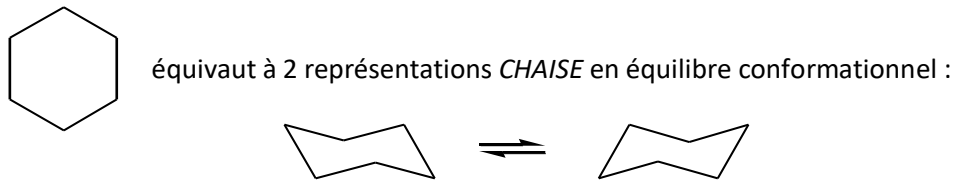
- **FISCHER** : surtout pour les oses et les acides aminés



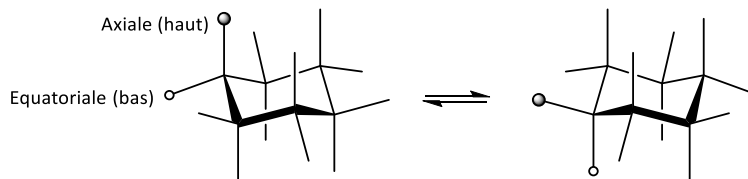
On verra en séance une autre méthode (petit bonhomme de FISCHER)

A RETENIR : toute **verticale** est une liaison en **arrière** du plan
toute **horizontale** est une liaison en **avant** du plan

- **CHAISE** (perspective) :



Chaque carbone possède 1 liaison **axiale (verticale)** et 1 liaison **équatoriale (oblique)**.
Pour 1 liaison axiale vers le **haut**, l'équatoriale sera orientée vers le **bas** et vis versa :



Le conformère CHAISE le plus stable est celui qui possède le moins de substituants en position axiale (interaction 1-3 diaxiale ou de type butane gauche déstabilisante supplémentaire)

Le conformère CHAISE le plus stable est celui qui possède le moins de substituants en position axiale (interaction 1-3 diaxiale ou de type butane gauche déstabilisante supplémentaire)

En Newman :

