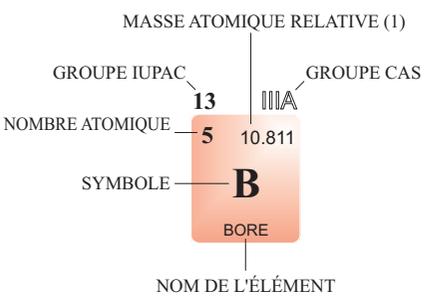


TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

<http://www.periodni.com/fr/>

PÉRIODE	GROUPE																	
	1 IA	2 IIA	GROUPE IUPAC										13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	1 1.0079 H HYDROGÈNE																	2 4.0026 He HÉLIUM
2	3 6.941 Li LITHIUM	4 9.0122 Be BÉRYLLIUM																10 20.180 Ne NÉON
3	11 22.990 Na SODIUM	12 24.305 Mg MAGNÉSIMUM																18 39.948 Ar ARGON
4	19 39.098 K POTASSIUM	20 40.078 Ca CALCIUM	21 44.956 Sc SCANDIUM	22 47.867 Ti TITANE	23 50.942 V VANADIUM	24 51.996 Cr CHROME	25 54.938 Mn MANGANÈSE	26 55.845 Fe FER	27 58.933 Co COBALT	28 58.693 Ni NICKEL	29 63.546 Cu CUIVRE	30 65.38 Zn ZINC	31 69.723 Ga GALLIUM	32 72.64 Ge GERMANIUM	33 74.922 As ARSENIC	34 78.96 Se SÉLÉNIUM	35 79.904 Br BROME	36 83.798 Kr KRYPTON
5	37 85.468 Rb RUBIDIUM	38 87.62 Sr STRONTIUM	39 88.906 Y YTTRIUM	40 91.224 Zr ZIRCONIUM	41 92.906 Nb NIOBIUM	42 95.96 Mo MOLYBDÈNE	43 (98) Tc TECHNÉTIUM	44 101.07 Ru RUTHÉNIUM	45 102.91 Rh RHODIUM	46 106.42 Pd PALLADIUM	47 107.87 Ag ARGENT	48 112.41 Cd CADMIUM	49 114.82 In INDIUM	50 118.71 Sn ETAIN	51 121.76 Sb ANTIMOINE	52 127.60 Te TELLURE	53 126.90 I IODE	54 131.29 Xe XÉNON
6	55 132.91 Cs CÉSIUM	56 137.33 Ba BARYUM	57-71 La-Lu Lanthanides	72 178.49 Hf HAFNIUM	73 180.95 Ta TANTALE	74 183.84 W TUNGSTÈNE	75 186.21 Re RHÉNIUM	76 190.23 Os OSMIUM	77 192.22 Ir IRIDIUM	78 195.08 Pt PLATINE	79 196.97 Au OR	80 200.59 Hg MERCURE	81 204.38 Tl THALLIUM	82 207.2 Pb PLOMB	83 208.98 Bi BISMUTH	84 (209) Po POLONIUM	85 (210) At ASTATE	86 (222) Rn RADON
7	87 (223) Fr FRANCIUM	88 (226) Ra RADIUM	89-103 Ac-Lr Actinides	104 (267) Rf RUTHERFORDIUM	105 (268) Db DUBNIUM	106 (271) Sg SEABORGIUM	107 (272) Bh BOHRIUM	108 (277) Hs HASSIUM	109 (276) Mt MEITNERIUM	110 (281) Ds DARMSTADTIUM	111 (280) Rg ROENTGENIUM	112 (285) Cn COPERNICIUM	113 (...) Uut UNUNTRIUM	114 (287) Ffl FLEROVIUM	115 (...) Uup UNUNPENTIUM	116 (291) Lv LIVERMORIUM	117 (...) Uus UNUNSEPTIUM	118 (...) Uuo UNUNOCTIUM



ÉTAT PHYSIQUE (25 °C; 101 kPa)

- Ne - gaz
- Fe - solide
- Hg - liquide
- Tc - synthétique

Métaux (bleu) **Métalloïdes** (orange) **Non-métaux** (vert)

- Métaux alcalins
- Métaux alcalino-terreux
- Métaux de transition
- Lanthanides
- Actinides
- Chalcogènes
- Halogènes
- Gaz nobles

LANTHANIDES

57 138.91 La LANTHANE	58 140.12 Ce CÉRIUM	59 140.91 Pr PRASÉODYME	60 144.24 Nd NÉODYME	61 (145) Pm PROMÉTHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.05 Yb YTTERBIUM	71 174.97 Lu LUTÉTIUM
------------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------

ACTINIDES

89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMÉRICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKÉLIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es EINSTEINIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MENDELÉVIUM	102 (259) No NOBÉLIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
-----------------------------------	-----------------------------------	--	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	---------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------

(1) Pure Appl. Chem., 81, No. 11, 2131-2156 (2009)
La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande. Toutefois, pour les trois éléments (Th, Pa et U) qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

Electronégativité des éléments du tableau périodique

H 2,2																	He
Li 0,98	Be 1,57											B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98	Ne
Na 0,93	Mg 1,31											Al 1,61	Si 1,9	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16	Ar
K 0,82	Ca 1	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,9	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr
Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 2,1	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,2	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,6
Cs 0,79	Ba 0,89	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2	At 2,2	Rn
Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm	Sm 1,17	Eu	Gd 1,2	Tb	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb	Lu 1		
**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,7	Np 1,3	Pu 1,3	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

RAPPELS

de Concepts d'Atomistique

Les principes et rappels évoqués dans ce document sont nécessaires à une bonne compréhension de la première séance de TD et doivent donc être étudiés avec soin.

L'ATOME ET SES CONSTITUANTS



X : élément considéré
Z : nombre de protons (et d'électrons lorsque $q = 0$) ; numéro atomique
N : nombre de neutrons
A : nombre de masse ($A = Z + N$)
q : nombre de charge

Notion d'élément : un élément est caractérisé par son nom (X) ou son numéro atomique (Z). Ainsi, l'élément C (carbone) est l'élément avec $Z = 6$.

Notion d'isotope : pour un numéro atomique donné, un isotope est caractérisé par son nombre de masse (chaque isotope est un nucléide).

^{14}C possède donc 2 neutrons de plus que ^{12}C .

Notion d'ion : un ion est une entité chargée, on distingue
les cations : chargés positivement (perte d'électron)
les anions : chargés négativement (gain d'électron)

Caractéristiques de l'électron :
masse : $m = 9,1094 \cdot 10^{-31}$ kg
charge : $-e = -1,60218 \cdot 10^{-19}$ C

Caractéristiques du proton :
masse = $1,6726 \cdot 10^{-27}$ kg
charge = $1,60218 \cdot 10^{-19}$ C

Caractéristiques du neutron :
masse = $1,6749 \cdot 10^{-27}$ kg
charge = 0 C

Définitions :

La mole : nombre d'atomes de carbone dans 12 g de ^{12}C .
1 mole regroupe $6,022 \cdot 10^{23}$ particules.

Unité de masse atomique : la masse atomique relative de ^{12}C vaut 12 uma.
La valeur absolue de l'uma est $1,660 \cdot 10^{-24}$ g

Unité de charge atomique : on considère que la référence est la charge de l'électron.
Un cation monovalent aura une charge de +1.

L'ORGANISATION ELECTRONIQUE DANS L'ATOME

Il n'est pas possible de déterminer la trajectoire des électrons autour d'un noyau. On définit alors des zones dans l'espace où la probabilité de rencontrer ces électrons est grande : les orbitales atomiques. 3 nombres quantiques (n, l, m) sont nécessaires pour définir les caractéristiques de ces orbitales et 1 nombre quantique supplémentaire (m_s ou s) permet de déterminer une caractéristique supplémentaire de l'électron au sein de l'orbitale considérée. Ainsi, un électron est caractérisé par la valeur de ces 4 nombres quantiques : n, l, m, m_s (ou s).

Chacune de ces orbitales est associée à une énergie. Plus l'énergie est basse, plus le système est stable. Les règles de remplissage des orbitales atomiques (voir ci-dessous) tiennent compte de ce fait.

Nombres quantiques : valeurs permises.

n : nombre quantique principal $n \in \mathbb{N}^*$

l : nombre quantique secondaire $0 \leq l < n ; l \in \mathbb{N}$

m : nombre quantique magnétique $-l \leq m \leq l ; m \in \mathbb{Z}$

m_s ou s : spin $m_s = \pm 1/2$

Nomenclature et nombres des orbitales atomiques

Le nombre d'orbitales associées aux valeurs de l correspond à une dégénérescence des états énergétiques permis ($= 2l+1$).

Exemples de notation : $n = 1; l = 0 \Rightarrow 1s$ ($2l+1 = 1 \Rightarrow 1$ OA associée)
 $n = 3; l = 2 \Rightarrow 3d$ ($2l+1 = 5 \Rightarrow 5$ OA associées)
 $n = 5; l = 3 \Rightarrow 5f$ ($2l+1 = 7 \Rightarrow 7$ OA associées)

		$l = 0$				$l = 1$					$l = 2$						$l = 3$						
		$m = 0$				$m = -1, 0, +1$					$m = -2, -1, 0, +1, +2$						$m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$						
K	$n = 1$	□																					
L	$n = 2$	□	□ □ □ □ □																				
M	$n = 3$	□	□ □ □ □ □					□ □ □ □ □ □ □															
N	$n = 4$	□	□ □ □ □ □					□ □ □ □ □ □ □						□ □ □ □ □ □ □ □ □									
		s				p					d						f						

Règles de remplissage

Règle de Pauli : dans un atome, deux électrons doivent différer par au moins la valeur d'un nombre quantique.

Règle de Hund : pour des états de même énergie, les électrons se placent à raison de 1 par case, avec la même valeur de spin et ne s'apparient en doublet que s'ils sont plus nombreux que les états (voir l'exemple ci-dessous).

Règle du $n+l$ minimal (ou de Klechkowski) : parmi les couches encore vides, la première à se remplir est celle pour laquelle la valeur de $(n+l)$ est la plus petite. Dans le cas d'une indétermination, celle qui a le n le plus petit se remplit la première.

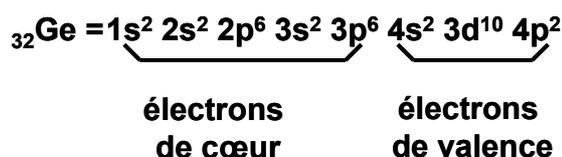
Exemple : application de la règle du (n+l) minimal :

n	1	2	2	3	3	3	4	4	4	4	5	...
l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	...
n+l	1	2	3	3	4	5	4	5	6	7	5	...
orbitale	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	...

Ainsi l'enchaînement des orbitales devient : **1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s**

Pour l'atome tel que Z = 32, on écrit : ${}_{32}\text{Ge} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^2$
Ce résultat correspond à la structure électronique de Ge

Notations : en chimie, les électrons des couches les plus externes sont ceux les plus réactifs (et permettent la création de liaison) et sont appelés « électrons de valence » :



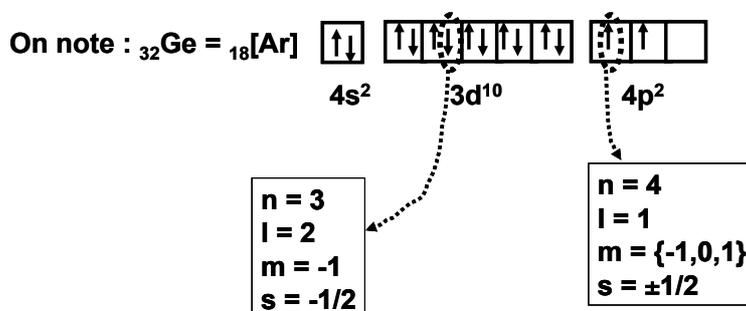
Tenant compte de l'atome correspondant à la structure électronique des électrons de cœur :

On a : ${}_{18}\text{Ar} = 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

On note : ${}_{32}\text{Ge} = {}_{18}[\text{Ar}] 4s^2 3d^{10} 4p^2$

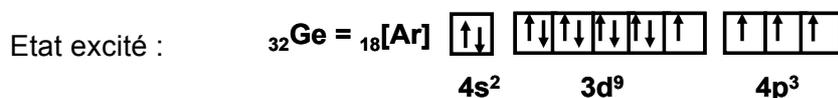
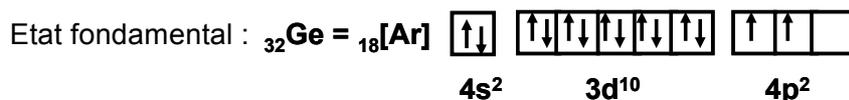
Formalisme des cases quantiques :

Chaque état décrit par les trois nombres quantiques n, l et m est représenté par une case. Suivant les règles énoncées ci-dessus, on peut alors proposer une nouvelle écriture de la structure électronique d'un atome. Apparaissent alors clairement les états de spin des électrons au sein des cases quantiques (+1/2 ou -1/2).



Etat fondamental / état excité :

L'état fondamental correspond à un atome dans son état le plus stable (énergie la plus basse), en l'absence de toute perturbation extérieure. Il s'agit donc d'un atome neutre, possédant autant d'électrons que de protons. Dans l'état excité, une quantité d'énergie provenant de l'extérieur est utilisée pour promouvoir un électron dans un niveau d'énergie (orbitale atomique) supérieur. Cet état n'est pas stable et le système a tendance à revenir à l'état fondamental en libérant de l'énergie (généralement un photon) vers le milieu extérieur.



Recommandations pour tous les TDs d'Atomistique :

Toutes les réponses doivent être justifiées.

Vous devez vous servir des tableaux périodiques (pages 1&2 du fascicule) pour retrouver les numéros atomiques et les autres données qui sont nécessaires pour résoudre les différents exercices. Evidemment, vous pouvez rechercher dans les livres ou sur internet les données qui vous manquent.

Pré-requis : connaître les constituants des atomes, savoir écrire une configuration électronique

Via notre page Facebook :



L1SV Atomistique

Vous pouvez à la fois échanger vos points de vue avec vos collègues de promo et nous faire part de vos questions. Nous essayerons d'y répondre dans les meilleurs délais. Cette page est en open-access, vous n'avez pas besoin de nous accepter en tant qu'amis. Ne vous inquiétez pas, nous n'avons pas accès à vos pages personnelles !!!

Via notre site internet :



<http://sondesfluorescentes.unice.fr/etudiants/L1SV/atomistique.html>

Vous trouverez toutes les diapositives correspondantes au cours de Serge Antonczak. Vous pourrez également télécharger au format pdf, ce fascicule, les annales corrigées depuis 2004 et chaque week-end, la correction des exercices supplémentaires du TD de la semaine en cours.

TD1 d'Atomistique**Nombres quantiques, Configurations électroniques,
Propriétés du tableau périodique**

Exercice I-1 (Exam Nov 2012) : Soit l'atome de fluor $^{19}_9\text{F}$

- 1 – Donner les particules constituant cet atome.
- 2 – A quelle famille chimique appartient-il ?
- 3 – A l'aide du formalisme des cases quantiques, écrire sa configuration électronique de valence.
- 4 – Quel ion stable est susceptible de former cet atome ? Ecrire la structure électronique de cet ion.
- 5 – Où se situe le fluor dans l'échelle des électronégativités ?
- 6 – Comment varie l'électronégativité en descendant dans la famille du fluor ?

Exercice I-2 : *Configurations électroniques*

- 1 – Écrire les configurations électroniques des espèces suivantes et déterminer dans chaque cas quelles sont les orbitales de la couche de valence : ${}_8\text{O}$; ${}_{10}\text{Ne}$; ${}_{11}\text{Na}$; ${}_{12}\text{Mg}$; ${}_{30}\text{Zn}$
- 2 – A partir de la représentation par les cases quantiques de la couche de valence de ces différents atomes, indiquer dans chaque cas le nombre d'électrons célibataires, les valeurs des 4 nombres quantiques de chaque électron célibataire et le spin total sous forme d'un tableau.

Exercice I-3 :

Quels sont les éléments de la 4^{ème} période qui possèdent dans leur état fondamental :

- 1 – 2 électrons célibataires ? Donner sous forme d'un tableau les nombres quantiques de ces électrons.
- 2 – Quels sont ceux qui en possèdent 3 ?
- 3 – Quels sont ceux qui en possèdent 5 ?

Exercice I-4 :

Le vanadium, sous forme de V^{5+} , inhibe partiellement le transfert des ions Na^+ et K^+ à travers les membranes cellulaires. On étudie quelques propriétés du vanadium $Z = 23$.

- 1 – Ecrire la structure électronique de l'atome de vanadium dans son état fondamental.
- 2 – A partir de la représentation par les cases quantiques des électrons, donner sous forme d'un tableau les nombres quantiques des électrons de la couche de valence.
- 3 – Le vanadium naturel ne contient que deux isotopes. Par quoi se différencient ces deux isotopes du vanadium ?

*Exercices supplémentaires***Exercice I-5 : Nombres quantiques**

- 1 – Rappeler les valeurs possibles des différents nombres quantiques.
- 2 – Considérons un électron caractérisé par une fonction d'onde 4f.
 - a) Quels sont les nombres quantiques qui lui sont imposés ? Donner leurs valeurs.
 - b) Quels sont les nombres quantiques qui ne sont pas fixés et quelles valeurs peuvent-ils prendre?
- 3 – A un nombre quantique secondaire $l = 2$:
 - a) Quel est le nom de la sous-couche associée ?
 - b) Quelle est la valeur minimale du nombre quantique principal qui peut être associée à $l = 2$?
 - c) Quelles sont les valeurs des nombres quantiques magnétiques qui peuvent être associées à $l = 2$?
 - d) Quelle est la population électronique maximale envisageable dans une sous-couche $l = 2$?

Exercice I-6 : Pourcentage isotopique

- 1 – Le Chlore existe naturellement sous deux formes isotopiques : ^{35}Cl et ^{37}Cl . Sachant que la masse molaire du chlore naturel est de 35,45 g/mol, quel est le pourcentage de chacun dans la nature ?

Exercice I-7 : Soit l'atome de fluor $^{19}_9\text{F}$

- 1 – Calculer la masse de l'atome et la masse du noyau.
- 2 – Calculer en pourcentage la fraction de la masse atomique contenue dans le noyau.
- 3 – Calculer en pourcentage la fraction du volume atomique contenue dans le noyau.
- 4 – Calculer la masse volumique du noyau.

Données :

Rayon de l'atome de fluor : $r_F = 0,710 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Rayon du noyau d'un élément de nombre de masse A : $r_n = 1,2 \cdot 10^{-15} \cdot A^{1/3} \text{ m}$

Caractéristiques de l'électron : masse : $m = 9,1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

Caractéristiques du proton : masse = $1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Caractéristiques du neutron : masse = $1,6749 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Exercice I-8 :

- 1 – Un élément du tableau périodique possède 28 électrons dans les couches K, L, M plus deux électrons dans une sous couche s et quatre dans une sous couche p; écrire sa configuration électronique complète avec le formalisme des cases quantiques.
- 2 – Quel est la valeur de son spin, son type de magnétisme ?
- 3 – A quelle colonne du tableau périodique cet élément appartient-il ?
- 4 – A quel type d'ion peut-il conduire par perte ou gain d'électrons ?

TD2 d'Atomistique

Propriétés du tableau périodique - Modèle de Lewis

Exercice II-1 (Exam Nov 2014) : Soit l'atome de soufre ${}^{32}_{16}\text{S}$

- 1 – Donner les particules constituant cet atome.
- 2 – A l'aide du formalisme des cases quantiques, écrire la configuration électronique de l'atome de soufre dans ses différents états de valence.

Exercice II-2 (Exam Nov 2013) : Soit l'atome de chlore ${}^{35}_{17}\text{Cl}$

- 1 – A quelle famille chimique appartient l'atome de chlore ?
- 2 – A l'aide du formalisme des cases quantiques, écrire la configuration électronique de l'atome de chlore dans ses différents états de valence.
- 3 – Quel ion stable est-il susceptible de former ? Donner sa représentation de Lewis ?

Exercice II-3 : *Structure de Lewis*

- 1 – Donner la représentation de Lewis des atomes et des ions suivants :



- 2 – A partir de la configuration électronique de la couche de valence des atomes, proposer une formule pour les composés formés de C et un O, C et deux O, C et un O et 2 O⁻, N et un O et 1 O⁻, N et un O et 2 O⁻.

Exercice II-4 : *Réactivité des familles d'éléments*

- 1 – Expliquer la grande inertie chimique des gaz rares, la grande réactivité des métaux alcalins, le caractère acide des halogénures d'hydrogène (HF, HCl,...) F (Z = 9), Cl (Z = 17), Br (Z = 35), I (Z = 53).

- 2 – a) Quels sont les éléments dont l'énergie de première ionisation est la plus élevée dans leur période ? Quels sont ceux dont l'énergie de deuxième ionisation est la plus élevée dans leur période ?

b) Expliquer pourquoi le potentiel de première ionisation du bore est inférieur à celui du béryllium, pourquoi celui de l'azote est supérieur à celui de l'oxygène. ${}_{4}\text{Be}$, ${}_{5}\text{B}$, ${}_{7}\text{N}$, ${}_{8}\text{O}$.

- 3 – Bien que les ions He^+ , Li^{+2} et Be^{+3} soient isoélectroniques, on observe une grande différence entre les valeurs des potentiels d'ionisation conduisant à la formation de ces ions. Justifier.

On donne : le potentiel de première ionisation (PI_1) de l'hélium ${}_{2}\text{He}$ est égal à 24,5 eV.
 le potentiel de deuxième ionisation (PI_2) du lithium ${}_{3}\text{Li}$ est égal à 75,6 eV.
 le potentiel de troisième ionisation (PI_3) du béryllium ${}_{4}\text{Be}$ est égal à 153,8 eV.

<i>Exercices supplémentaires</i>

Exercice II-5 :

Pour des éléments A-F, on dispose de données expérimentales qui correspondent aux potentiels de première ionisation et de deuxième ionisation (en eV) des éléments alcalins (${}_{3}\text{Li}$, ${}_{11}\text{Na}$, ${}_{19}\text{K}$) et alcalino-terreux (${}_{4}\text{Be}$, ${}_{12}\text{Mg}$, ${}_{20}\text{Ca}$) :

	PI_1	PI_2
A	5,39	75,62
B	9,32	18,21
C	5,14	47,29

	PI_1	PI_2
D	7,64	15,03
E	6,11	11,87
F	4,34	31,81

- 1 – Rappeler comment varie le potentiel de première ionisation (PI_1) de gauche à droite et de haut en bas dans le tableau périodique?
- 2 – Préciser lesquels sont alcalins et lesquels sont alcalinoterreux et, classez-les dans leurs colonnes respectives.

Exercice II-6 : *Valence principale et valences secondaires*

Soient les atomes suivants : aluminium (${}_{13}\text{Al}$), phosphore (${}_{15}\text{P}$), soufre (${}_{16}\text{S}$), chlore (${}_{17}\text{Cl}$).

- 1 – Ecrire les configurations électroniques de ces atomes dans leurs états fondamentaux.
- 2 – Que peut-on prévoir concernant les valences principales de ces éléments par rapport à leurs homologues correspondants de la seconde période : bore ${}_{5}\text{B}$, azote ${}_{7}\text{N}$, l'oxygène ${}_{8}\text{O}$ et fluor ${}_{9}\text{F}$?
- 3 – Quelles sont les valences secondaires de ces atomes ?
- 4 – Donner des exemples de molécules impliquant chacun de ces atomes pris dans leurs différentes valences.

Exercice II-7 :

- 1 – Ecrire sous forme de Lewis la formule des molécules H_2O et NH_3 ,
- 2 – H_2O et NH_3 sont les bases conjuguées des acides H_3O^+ et NH_4^+ respectivement. Proposer un schéma de liaison pour ces deux acides.

TD3 d'Atomistique

Modèle VSEPR - Théorie de l'Hybridation

Exercice III-1 : *Modèle VSEPR, Moment Dipolaire*

Soient les molécules suivantes : CO₂, BF₃, PCl₃, SCl₂, SeF₄, IF₃, SF₆, BrF₅, XeF₄.

1 – En utilisant la méthode V.S.E.P.R., déterminer la figure de répulsion puis la géométrie autour de l'atome central souligné dans ces molécules. Dessiner ces molécules *en représentation de Cram*, en précisant sur le dessin la valeur des différents angles et la position des doublets libres. Donner la direction et le sens de leur moment dipolaire.

Exercice III-2 : *Hybridation, Doublets Libres, Atomes Coplanaires*

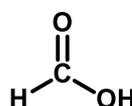
Soient les molécules suivantes : H₂NCHCl(OH), CH₃COCH₂F, C₂H₂, CH₃CN.

- 1 – Écrire la formule de Lewis correspondante.
- 2 – Rappeler à quoi correspond une hybridation d'orbitales atomiques.
- 3 – Définir l'état d'hybridation de **tous** les atomes de chaque molécule.
- 4 – Dans quels types d'orbitales se trouvent les différents doublets libres.
- 5 – Quels sont les nombres d'électrons de type σ et d'électrons π dans chaque molécule.
- 6 – Dessiner une représentation spatiale de chaque molécule, en mettant en évidence :
 - les électrons σ
 - les électrons π
 - les doublets non liants (s'il y a lieu)
 - les angles de liaisons caractéristiques et les axes des orbitales pures
- 7 – Quel est le nombre d'atomes coplanaires dans chaque molécule ?

Exercices supplémentaires

Exercice III-3 : *Hybridation, Doublets Libres, Atomes Coplanaires*

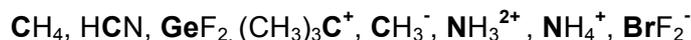
Soit l'acide méthanoïque (formique) HCOOH qui a pour formule développée plane :



- 1 – Quels sont les états d'hybridation des atomes ?
- 2 – Où sont situés les doublets libres des atomes d'oxygène ?
- 3 – Dessiner une représentation spatiale de la molécule, en mettant en évidence les électrons σ , les électrons π , les doublets non liants (s'il y a lieu), les angles de liaisons et les axes des orbitales pures.
- 4 – Quel est le nombre d'atomes coplanaires ?
- 5 – Combien d'électrons participent à la délocalisation ?
- 6 – La rotation entre l'atome de carbone et l'atome d'oxygène du groupement hydroxyle est-elle libre ou empêchée ?

Exercice III-4 : Modèle VSEPR, Moment Dipolaire

Soient les molécules ou ions suivants :



- 1 – En utilisant la méthode V.S.E.P.R., déterminer leur figure de répulsion puis la géométrie autour de l'atome central souligné dans ces molécules.
- 2 – Dessiner ces molécules ou ions en utilisant la *représentation de Cram*.
- 3 – Si ces molécules ou ions sont polaires, donner la direction et le sens de leur moment dipolaire.

Exercice III-5 : Influence de l'électronégativité des atomes sur la valeur réelle des angles

Ecrire la représentation de Lewis puis utiliser la méthode V.S.E.P.R. pour donner la forme géométrique des molécules suivantes :

- 1 – $\underline{\text{P}}\text{OF}_3$. Expliquer la différence observée entre la valeur théorique de l'angle F-P-F dans $\underline{\text{P}}\text{OF}_3$, que vous aurez déterminée, à la valeur expérimentale 102° .
- 2 – $\text{H}_2\underline{\text{O}}$, $\text{H}_2\underline{\text{S}}$. De ces deux molécules, quelle est celle qui possède l'angle réel entre les liaisons le plus grand ?

Exercice III-6 : Modèle VSEPR, Moment Dipolaire

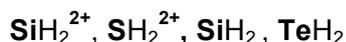
- 1 – En utilisant la méthode V.S.E.P.R., donner la représentation spatiale en *représentation de Cram* des molécules ou ions suivants :



- 2 – Indiquer celles qui possèdent un moment dipolaire permanent, justifier.

Exercice III-7 : Modèle VSEPR, Moment Dipolaire

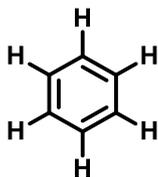
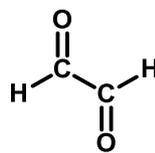
- 1 – Donner la structure de Lewis des espèces suivantes :



- 2 – A l'aide de la théorie de la V.S.E.P.R., prévoir si la géométrie de ces espèces est linéaire ou coudée. Donner la valeur de l'angle H-Si-H pour les espèces coudées.
- 3 – En supposant que les moments dipolaires soient rigoureusement additifs, montrer que le fluorure de méthyle CH_3F et le trifluorure de méthyle CHF_3 devraient avoir le même moment dipolaire.

TD4 d'Atomistique**Hybridation - Influence de l'environnement - Formes mésomères****Exercice IV-1 :**

Soient le benzène C_6H_6 , le glyoxal $H_2C_2O_2$ qui ont respectivement pour formule développée plane :

Benzène (C_6H_6)Glyoxal ($H_2C_2O_2$)

Dans chaque cas :

- 1 – Quels sont les états d'hybridation des atomes ?
- 2 – Dessiner une représentation spatiale des molécules de *type Cram*, en mettant en évidence les électrons σ , les électrons π , les doublets non liants (s'il y a lieu), les angles de liaisons et les axes des orbitales pures.
- 3 – Quel est le nombre d'atomes coplanaires ?
- 4 – Combien d'électrons participent à la délocalisation ?
- 5 – Dans le cas du glyoxal :
 - a) Où sont situés les doublets libres et la rotation entre les atomes de carbone est-elle libre ou empêchée ?
 - b) La molécule de glyoxal présente-elle le phénomène d'isomérisation ? De quel type ?
- 6 – Ces molécules sont-elles aromatiques ?

Exercice IV-2 :

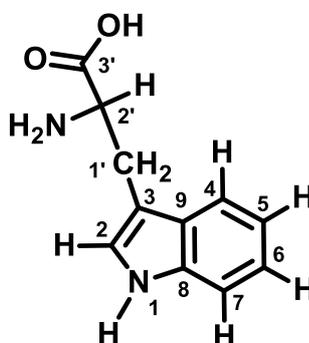
Soient trois hétérocycles à un cycle : le pyrrole (formule brute C_4H_5N), la pyridine (formule brute C_5H_5N) et le furane (formule brute C_4H_4O).

- 1 – Déterminer le nombre de centres d'insaturation.
- 2 – Dessiner une représentation spatiale de ces molécules en mettant en évidence pour chacune de ces trois molécules :
 - l'hybridation des atomes
 - le nombre d'atomes coplanaires
 - les différentes valeurs des angles
 - le nombre d'électrons σ
 - les doublets non liants
 - le nombre d'électrons π , et parmi ces électrons spécifier ceux qui sont délocalisés
- 3 – Ces molécules sont-elles aromatiques ?
- 4 – Le pyrrole et la pyridine sont-ils basiques ? Justifier.

Exercices supplémentaires
Exercice IV-3 :

Le tryptophane est un acide aminé dont la formule semi-développée est représentée ci-dessous : Sachant que l'hydrogène porté par l'atome d'azote N1 est coplanaire aux atomes C2, C8 et N1.

- 1 – Déterminer l'hybridation des onze atomes de carbone de la molécule.
- 2 – Déterminer l'hybridation de l'atome d'azote N1 et celle de l'atome d'azote de la fonction amine primaire portée par C'2.
- 3 – En déduire la nature des orbitales "contenant" les paires d'électrons non liants des atomes d'azote.
- 4 – Comparer la basicité de Brønsted (aptitude à capter un proton) des deux fonctions azotées considérées aux b) et c).
- 5 – Quel est le nombre d'électrons π ? Certains de ces électrons π sont-ils délocalisés ?
- 6 – Cette molécule a-t-elle un caractère aromatique ?


Exercice IV-4 : Formes mésomères et hybride de résonance

Soit l'ion carbonate CO_3^{2-} :

- 1 – Écrire la structure de Lewis de cet ion sachant que chaque atome d'oxygène est exclusivement lié au carbone. Combien de structures différentes peut-on écrire ?
- 2 – Quelle est l'hybridation de chaque atome de cet ion ?
- 3 – Dessiner pour chaque atome, les orbitales atomiques hybridées et non hybridées (on considérera pour la représentation le cas où tous les atomes d'oxygène sont sp^2). Construire l'ion en mettant en évidence les recouvrements des orbitales atomiques.
- 4 – Que peut-on en déduire concernant les distances carbone-oxygène dans l'ion CO_3^{2-} ? Ce résultat était-il prévisible à partir de la structure de Lewis ?

Exercice IV-5 : Mésomérie

- 1 – Ecrire les formes limites de résonance des molécules suivantes après avoir déterminé l'hybridation des différents atomes : chlorobenzène $\text{C}_6\text{H}_5\text{-Cl}$; benzaldéhyde $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CHO}$.

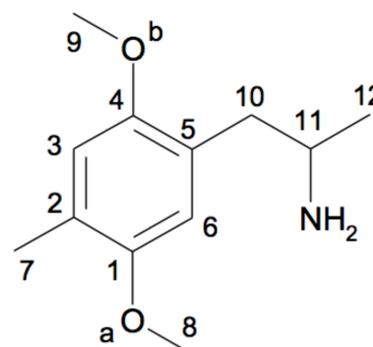
TD5 d'Atomistique**Annales, Effets inductifs, Formes mésomères****Exercice V-1 (Exam Session 2 Juin 2017) :**

STP pour Sérénité-Tranquillité-Paix (2,5-Diméthoxy-4-méthylamphétamine) est une drogue hallucinogène psychédélique de la classe des phényléthylamines, parfois utilisé comme enthéogène. (psychotrope induisant un état modifié de conscience utilisée à des fins religieuses, spirituelles ou chamanique).

Données.

Numéro atomique : ${}_6\text{C}$, ${}_7\text{N}$, ${}_8\text{O}$;

Electronégativité : $\chi_{\text{H}} = 2,2$, $\chi_{\text{C}} = 2,5$, $\chi_{\text{N}} = 3,1$, $\chi_{\text{O}} = 3,5$.



molécule STP

Questions de cours :

1 – Pour les atomes de carbone, d'azote et d'oxygène.

- écrire la structure électronique associée sous forme de cases quantiques en faisant apparaître les électrons de cœur et les électrons de valence.
- écrire leur(s) formule(s) de Lewis
- quand ces atomes sont les atomes centraux d'un ensemble de liaisons, quelles sont les différentes formes VSEPR qui peuvent leur être associées?

Justifiez vos réponses.

Question sur la structure moléculaire de la molécule STP (voir schéma ci-dessus) :

2 – **Sur votre copie**, compléter, si possible avec un crayon d'une autre couleur, la formule semi-développée de cette molécule afin d'obtenir sa formule de Lewis complète.

3 – Définir ce qu'est une liaison polarisée. En vous appuyant sur les données, indiquez quelles liaisons sont polarisées dans cette molécule. Quels atomes sont susceptibles de créer des liaisons hydrogène **intermoléculaires** ? Justifier.

Pour la suite du sujet, on tiendra compte de la délocalisation maximale possible pour cette molécule:

4 – Dans un tableau de la forme :

Type VSEPR	Liste d'atomes associés au type VSEPR	Hybridation	Doublet « libre » dans orbitale de type :
...

classer les atomes de carbone, d'oxygène et d'azote présents dans la molécule STP en différentes familles VSEPR distinctes et déterminer leur hybridation. Pour les atomes présentant des doublets libres, préciser la nature de l'orbitale dans laquelle ces doublets se situent.

5 – Combien existe-t-il de systèmes π dans cette molécule? Sur quels atomes se délocalise(nt) le(s) système(s) π ? Décompter le nombre d'électrons présents dans ce(s) système(s) π délocalisé(s). Quels sont les atomes qui sont coplanaires ? Justifiez vos réponses.

Exercice V-2 : Effets inductifs

1 – Classer par ordre croissant de -I (inductif attracteur), les groupements Y dans les acides YCH_2COOH en utilisant les valeurs des pKa correspondants :

Y	-H	-OH	-OCH ₃	-F	-CH=CH ₂	-NO ₂	-CH ₃	-C ₆ H ₅	-I	-Cl
pKa	4,70	3,83	3,48	2,66	4,35	1,70	4,90	4,31	3,13	2,80

2 – Classer les acides suivants par ordre de force décroissante dans l'eau en justifiant :

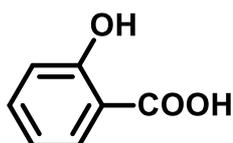
CH_3COOH , $CH_2ClCOOH$, Cl_3CCOOH , $HCOOH$, CH_3CH_2COOH , $(CH_3)_3CCOOH$.

Attribuer à chaque acide carboxylique la bonne valeur de son pKa dans l'eau à 25 °C parmi les valeurs numériques données suivantes : 2,87 ; 3,75 ; 4,76 ; 4,87 ; 5,03 et 0,7.

Exercice supplémentaire

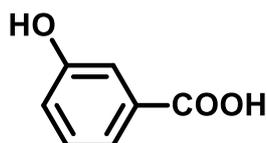
Exercice V-3 : Influence des effets inductifs et mésomères et de la formation de liaisons hydrogène

On donne les points de fusion P des acides hydroxybenzoïques suivants :



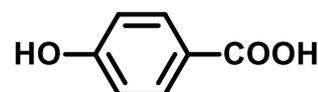
acide *o*-hydroxybenzoïque

P = 159 °C



acide *m*-hydroxybenzoïque

P = 202,5 °C



acide *p*-hydroxybenzoïque

P = 214,5 °C

1) Représenter dans l'espace l'une de ces trois molécules en indiquant :

- l'hybridation des atomes de carbone et d'oxygène.
- le nombre d'électrons σ et le nombre d'électrons π (y a-t-il délocalisation?).
- les doublets non liants en précisant s'ils sont dans le plan σ ou non.
- le nombre d'atomes coplanaires.

2) Expliquer la différence si nette entre le point de fusion du composé *ortho* et ceux des deux autres.

3) Attribuer à l'acide benzoïque (C_6H_5COOH) et au phénol (C_6H_5OH) la valeur exacte de son pKa dans l'eau à 25 °C parmi les valeurs numériques données : 4,19; 9,89.

4) Par comparaison avec ces deux composés et en faisant appel aux effets inductifs et mésomères et à la formation de liaisons hydrogène, attribuer à chaque acide hydroxybenzoïque la bonne valeur de pKa dans l'eau à 25 °C parmi les valeurs numériques des trois couples de pKa suivants : 9,46 et 4,57; 9,92 et 4,08; 2,98 et 13,6.

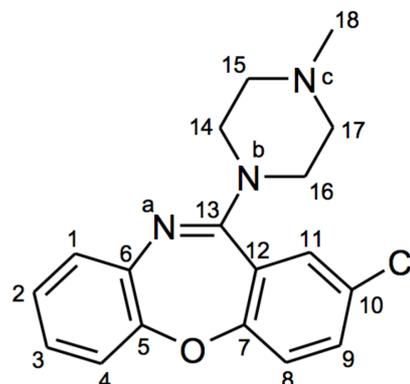
TD6 d'Atomistique

Annales

Examen Novembre 2016 :

La **loxapine** est un antipsychotique typique utilisé principalement dans le traitement des états psychotiques aigus et chroniques. Cet antipsychotique peut servir d'hypnotique grâce à ses puissantes propriétés sédatives ; et est utilisé comme tel par les personnes suivant un traitement psychostimulant ou ceux qui en font un mésusage pour éviter les nuits blanches.

Données (numéros atomiques) : ${}_1\text{H}$, ${}_6\text{C}$, ${}_7\text{N}$, ${}_8\text{O}$, ${}_{17}\text{Cl}$



1 – **Sur votre copie**, compléter, si possible avec un crayon d'une autre couleur, la formule semi-développée de cette molécule afin d'obtenir sa formule de Lewis complète.

2 – A quelle famille chimique appartient l'atome de Chlore ? Donner les particules constituant le ${}^{35}_{17}\text{Cl}$. Ecrire sa structure électronique à l'aide du formalisme des cases quantiques. Quel ion stable est-il susceptible de former ? Préciser quelles sont les différentes valences que le chlore peut présenter et dans quelle valence se trouve-t-il dans la molécule de Loxapine ?

Pour la suite du sujet, on tiendra compte de **la délocalisation maximale possible pour cette molécule** :

3 - Dans un tableau de la forme :

Type VSEPR	Liste d'atomes associés au type VSEPR	Hybridation	Doublet « libre » dans orbitale de type :
...

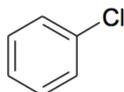
classer les atomes de carbone, d'oxygène, d'azote et de chlore présents dans la Loxapine en différentes familles VSEPR distinctes et déterminer leur hybridation. Pour les atomes présentant des doublets libres, préciser la nature de l'orbitale dans laquelle ces doublets se situent.

4 – A l'aide du formalisme des cases quantiques, établir le schéma de liaison autour de l'atome de carbone C_{13} (à savoir $\text{N}-\text{C}_{13}(\text{Nb})-\text{C}_{12}$)

5 – Définir ce qu'est une « liaison hydrogène ». Lister, en justifiant, les atomes de cette molécule qui sont susceptibles de former des liaisons hydrogène intermoléculaires ? Utiliser des schémas pour expliciter vos réponses.

6 – Combien existe-t-il de systèmes π dans cette molécule et sur quels atomes se délocalise(nt)-il(s) ? Décompter le nombre d'électrons présents dans ce(s) système(s) π délocalisé(s). Quels sont les atomes qui sont coplanaires ? Justifiez vos réponses.

7 - Ecrire les formes mésomères du fragment :

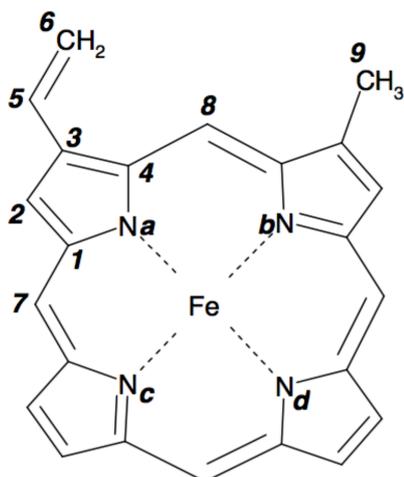


8 - La Loxapine interagit avec les récepteurs dopaminergiques qui sont constitués d'une partie transmembranaire à 7 hélices et d'une partie globulaire. Imaginer quelles pourraient être les caractéristiques de cette protéine pour que son interaction avec la Loxapine soit forte.

Exercice supplémentaire

Examen Octobre 2008 :

Données : numéro atomique du carbone : 6 ; de l'azote : 7 ; du fer : 26



Un **hème** est un cofacteur contenant un atome de fer servant à accueillir un gaz diatomique (souvent le dioxygène O₂) au centre d'un large anneau organique appelé porphyrine.

Il y a trois sortes d'hèmes biologiquement importants. Le type le plus commun est appelé hème b.

L'hémoglobine et la myoglobine sont des exemples de protéines qui contiennent l'hème b.

Le schéma représenté ici correspond à un modèle simplifié de structure **hème**.

Le centre métallique :

1 - Ecrire la configuration électronique de l'atome de ²⁶Fe.

2 - Au sein de la porphyrine, l'atome de fer peut se trouver sous ses formes oxydées Fe²⁺ et Fe³⁺. Ecrire les configurations électroniques de ces deux cations en faisant apparaître par chacun la couche de valence et les électrons de cœur.

3 - L'atome de Fer peut accueillir au maximum 6 ligands. A quelle forme VSEPR l'atome de Fer est-il associé? Précisez les angles idéaux associés à cette forme VSEPR.

4 - Le modèle représenté ci-dessus, dans sa forme non totalement oxydée, possède une charge globale nulle alors que le Fer est chargé +2. Indiquez où sont formellement localisées les deux charges négatives sur la porphyrine. Justifier clairement votre réponse.

Le noyau organique :

En tenant compte de **la délocalisation maximale possible dans cette molécule :**

5 – **Sur votre copie**, compléter la formule semi développée de cette molécule afin d'obtenir sa formule de Lewis complète. Pour cela, rajouter les atomes d'hydrogène et les doublets libres manquants, si possible avec un crayon d'une autre couleur.

6 – Donner les formes VSEPR des atomes de carbones de C1 à C9.

7 - Déterminer l'hybridation de chacun des atomes de carbone numérotés (de C1 à C9). Justifier.

8 – Donner la forme VSEPR des atomes d'azote de Na à Nd ainsi que leurs états d'hybridation.

9 – Précisez dans quels types orbitales sont localisées les paires libres d'électron des atomes d'azote. Votre réponse devra être clairement justifiée.

10 - Donner le nombre d'atomes coplanaires dans cette molécule en justifiant votre réponse. Précisez lesquels ne sont pas inclus dans ce plan que vous venez de définir.

11 - Combien de systèmes π délocalisés pouvez-vous dénombrer? Combien d'électrons π participent à la délocalisation?

12 – En plus de l'**hème**, une molécule de dioxygène et une petite protéine sont liées au métal. A votre avis, quel est le type d'acide-aminé parmi les suivants qui assurerait une meilleure interaction métal-protéine ? Justifier votre réponse.

Types d'acides aminés

- non-polaire

- polaires chargés positivement

- polaires non chargés

- polaires chargés négativement

Résolution type d'un problème

- 1 – déterminer la structure électronique des atomes**
- 2 – séparer couche de cœur et couche de valence**
- 3 – écrire en utilisant le formalisme des cases quantiques la description des couches de valence**
- 4 – valence principale ou secondaire ?**
- 5 – écrire la formule de Lewis des différents atomes**
- 6 – établir les liaisons**
- 7 – déterminer le sous-type et le grand type VSEPR pour chaque atome**
- 8 – à partir des types VSEPR, déterminer les hybridations**
- 9 – rechercher les systèmes π délocalisés (compter les électrons)**
- 10 – rechercher la délocalisation maximale**
- 11 – rechercher les doublets accessibles (liaisons H, basicité...)**

PRÉVISION DE LA GÉOMÉTRIE DES MOLÉCULES ET DES IONS

par les règles de Gillespie dans son modèle VSEPR *Valence Shell Electron-Pair Repulsion*

L'orientation des liaisons autour de l'atome central est prévisible en appliquant les règles de Gillespie fondées, dans son modèle sur la répulsion des doublets électroniques de la couche de valence. Les électrons de la couche de valence sont associés par paires d'électrons à spins opposés pour former des doublets. Ce modèle ne constitue pas une théorie, il s'agit d'un **processus de raisonnement**, simple et efficace, reposant sur l'hypothèse que **tous les doublets associés ou non** (paires liantes ou libres) de la couche externe, contribuent à la structure et se trouvent statistiquement à la même distance du noyau, comme s'ils se déplaçaient à la surface d'une sphère dont le noyau occuperait le centre. Ces doublets se repoussent mutuellement, ils adoptent les positions les plus éloignées les unes des autres sur la surface d'une sphère imaginaire entourant l'atome central A afin d'avoir **une répulsion minimale**. À partir des structures de LEWIS, nous allons expliquer la forme des molécules et les angles entre leurs liaisons.

Géométrie et angles théoriques

a) La géométrie autour de l'atome central A n'est pas imposée par le nombre de liaisons mais par le nombre p de paires électroniques, donné par la structure électronique de la couche externe de l'atome A.

p = n nombre de doublets libres (ou non liants) E + m nombre de doublets de liaisons (ou doublets liants) X
La formulation du composé s'exprimera par une expression du type **AX_nE_m**

b) En un premier temps, on ne fait pas de différence entre les paires libres E et les paires liantes X. De plus, les liaisons multiples sont considérées comme des liaisons simples ; **seule la paire d'électrons σ impose la direction de liaison**. Exemples de type AX₂ : H - C \equiv N et O = C = O

La géométrie (ici pour des nombres variables p de paires électroniques $2 \leq p \leq 6$) permet de trouver les arrangements des paires, p = 2 doublets : linéaire, p = 3 doublets : triangulaire, p = 4 doublets : tétraédrique, p = 5 doublets : en bipyramide trigonale (à base triangulaire), p = 6 doublets : octaédrique (bipyramide à base carrée), p = 7 doublets : en bipyramide à base pentagonale.

Puis l'on déduit la géométrie de la molécule à partir de cette géométrie de base en ne tenant compte que des doublets de liaison. (cf tableau), un doublet libre occupant une direction sans cependant être matérialisé.

Variation de la valeur des angles

a) Influence des doublets libres sur la géométrie de la molécule

- La valeur trouvée des angles par application des règles (*tableau*) est la valeur théorique.
- La théorie de la V.S.E.P.R. inclut une hiérarchie des répulsions mutuelles des paires (rép) d'après l'ordre suivant :

rép (doublet libre E - doublet libre E) sont plus fortes que rép (doublet libre E - doublet liaison X) qui sont plus fortes que (rép doublet liaison X - doublet liaison X). Soit en résumé et en abrégé : **rep (E, E) > rep (E, X) > rep (X, X)**
Pour cela, les paires liantes doivent se rapprocher des autres paires liantes permettant l'écartement par exemple des paires libres E.

Exemple Cas de la molécule d'eau de type AX₂E₂ E A X > X A X X A X < 109°28' en fait, H O H_{exp} = 104°

b) Influence d'une liaison double sur la géométrie de la molécule

- La présence d'un doublet π volumineux oblige les paires électroniques des liaisons simples à se rapprocher.

Exemple Cas du méthanal H₂CO de type AX₃ XAX théorique = 120°, en réalité HCH = 116° et HCO = 122°

Il suffit de faire la somme p = m+n (compris généralement entre 2 et 6) pour avoir dans l'espace les directions des paires électroniques (libres ou liantes). Selon la valeur de p, on a les arrangements suivants :

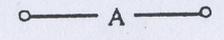
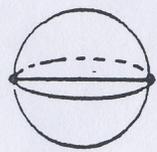
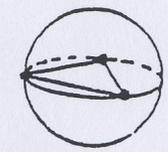
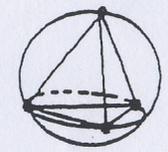
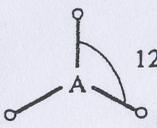
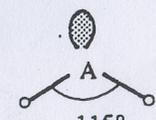
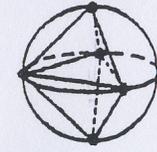
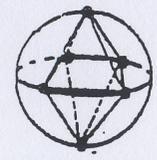
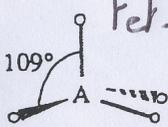
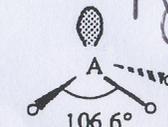
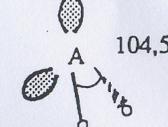
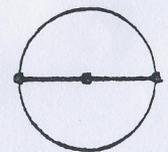
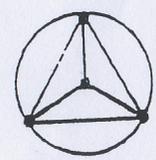
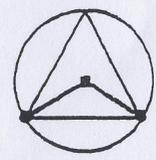
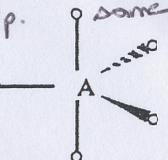
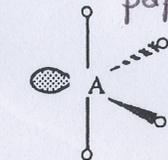
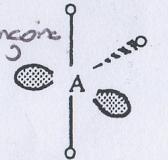
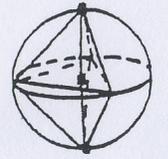
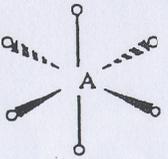
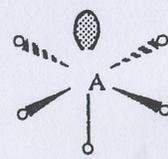
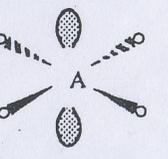
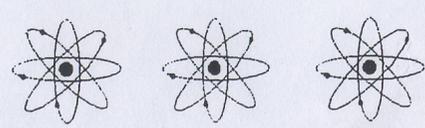
p = m + n	Arrangement spatial	angle théorique (XAX ou AXE ou EXE)
2	linéaire	180°
3	triangle plan	120°
4	tétraédrique	109°28'
5	bipyramide trigonale	120° et 90°
6	octaédrique	90°

Tableau : Géométrie moléculaire autour de l'atome central pour AX_nE_m

CHAPITRE 6

LES REGLES DE GILLESPIE OU METHODE V.S.E.P.R.

EXEMPLES DE STRUCTURES INTERPRETEES AVEC LES REGLES DE GILLESPIE

<p>$n=2$ structure digonale (ou linéaire)</p>	 <p>AX₂ (BeH₂) (BeCl₂)</p>	<p>linéaire</p>		<p>Linéaire</p>		<p>Triangle équilatéral</p>		<p>Tétraèdre</p>				
<p>$n=3$ structure triangulaire (ou trigonale)</p>	 <p>120° AX₃ (NO₃⁻) (BF₃)</p>  <p>115° AX₂E (NO₂⁻)</p>	<p>trigonale plane</p>		<p>Bipyramide trigonale</p>		<p>Octaèdre</p>	<p>AX₂E₂</p>					
<p>$n=4$ structure tétraédrique</p>	 <p>109° AX₄ (CH₄)</p> <p>tet.</p>  <p>106,6° AX₃E (NH₃)</p> <p>pyramidale</p>  <p>104,5° AX₂E₂ (H₂O)</p> <p>coudée</p>	<p>linéaire</p>		<p>AX₂</p>		<p>AX₃</p>		<p>AX₂E</p>		<p>AX₄</p>		<p>AX₃E</p>
<p>$n=5$ structure de bipyramide à base triangulaire</p>	 <p>AX₅ (PCl₅)</p> <p>bip.</p>  <p>AX₄E (IO₂F₂⁻)</p> <p>pyr. à base carrée</p>  <p>AX₃E₂ (ClF₃)</p> <p>balancée</p>	<p>en forme de T / linéaire</p>		<p>AX₅</p>		<p>AX₄E</p>		<p>AX₃E₂</p>		<p>AX₂E₃</p>		
<p>$n=6$ structure octaédrique</p>	 <p>AX₆ Cr(CO)₆ SF₆</p> <p>octaédrique</p>  <p>AX₅E (IF₅)</p> <p>pyr. à base carrée</p>  <p>AX₄E₂ (ICl₄)</p> <p>plan carré</p> <p>AX₃E₃</p> 	<p>plan carré</p>		<p>AX₆</p>		<p>AX₅E</p>		<p>AX₄E₂</p>				