

Structure de la matière.

P. Ribiere

Collège Stanislas

Année Scolaire 2014/2015

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.
- 10 Les cristaux moléculaires.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
 - L'atome.
 - La classification périodique.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Les atomes sont les constituants de la matière. Ils s'associent les uns aux autres en molécules et cristaux.

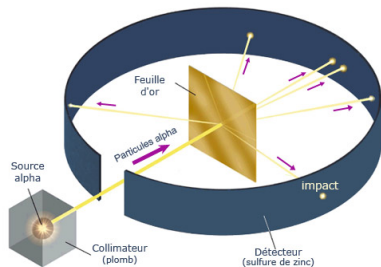


FIGURE : L'expérience de Rutherford révèle la structure lacunaire de la matière.

Des particules α bombardent une fine couche d'or et sont détectés sur un écran de sulfure de zinc scintillant.

Résultats principaux :

- Très peu de particules α sont déviées : l'atome est "lacunaire".
- Environ une sur 8000 est déviée par le noyau massif : le noyau est très petit.

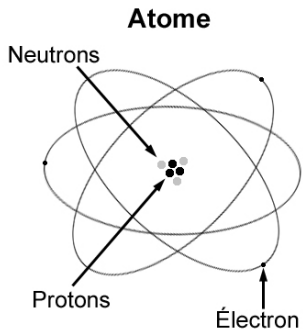


FIGURE : Modèle de l'atome.

- Les électrons $-e = -1,6 \cdot 10^{-19} C$, de masse $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} kg$ forment un nuage autour du noyau. (forte probabilité de présence). Ce nuage définit la taille de l'atome (et ses propriétés) $100 pm = 1 \text{Å} = 0,1 nm = 10^{-10} m$
- Le noyau est composé de nucléons, i.e. les neutrons (neutres) ou les protons (de charge e), de masse $m_n \simeq m_p = 1,67262178 \cdot 10^{-27} kg \simeq 2000 \cdot m_e$. Le noyau définit l'élément chimique, il est de taille $1 fm = 10^{-15} m$

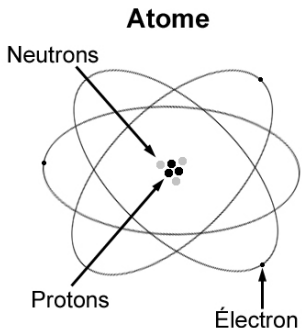


FIGURE : Modèle de l'atome.

- Les électrons $-e = -1,6 \cdot 10^{-19} C$, de masse $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} kg$ forment un nuage autour du noyau. (forte probabilité de présence). Ce nuage définit la taille de l'atome (et ses propriétés) $100 pm = 1 \text{Å} = 0,1 nm = 10^{-10} m$
- Le noyau est composé de nucléons, i.e. les neutrons (neutres) ou les protons (de charge e), de masse $m_n \simeq m_p = 1,67262178 \cdot 10^{-27} kg \simeq 2000 \cdot m_e$. Le noyau définit l'élément chimique, il est de taille $1 fm = 10^{-15} m$

Symbole de l'élément chimique.

${}^A_Z X$ désigne l'élément X, avec A nucléons et Z nombre de charge (de protons) ou numéro atomique.

Petit rappel des unités.

La mole est le nombre d'atome de carbone dans 12g de carbone 12 : ^{12}C .

Une mole contient $N_A \simeq 6,023.10^{23}$ atomes.

Une unité de masse atomique, u.m.a., est 1/12 de la masse d'un atome de carbone 12.

$$m_n \simeq m_p \simeq 1u.m.a. \simeq 2000.m_e$$

Un électron-Volt, eV, est $1,6.10^{-19} J$, soit 96,5 kJ/mol.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
 - L'atome.
 - La classification périodique.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

En 1869, Mendeleïev crée une classification qui regroupe les éléments ayant des propriétés chimiques voisines en colonne et il les classe par numéro atomique Z croissant (en laissant des cases vides).

Tableau de 18 familles (ou colonnes) ou 7 lignes (ou périodes).

CLASSIFICATION PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS																		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
K Hydrogène 1 H 1,0079	État physique, à 20 °C, de l'élément à l'état de corps pur : X : solide X : liquide X : gaz Z : élément artificiel																Hélium 2 He 4,0026	
L Lithium 3 Li 6,941	Béryllium 4 Be 9,0122	Numéro atomique \rightarrow Z \leftarrow X \leftarrow Symbole M \leftarrow Masse molaire atomique (en g.mol ⁻¹)										Colonne 1 (sauf l'hydrogène) : alcalins Colonne 2 : alcalinoterreux Colonne 16 : chalcogènes Colonne 17 : halogènes Colonne 18 : gaz nobles	Bore 5 B 10,811	Carbone 6 C 12,011	Azote 7 N 14,007	Oxygène 8 O 15,999	Fluor 9 F 18,998	Néon 10 Ne 20,180
M Sodium 11 Na 22,990	Magnésium 12 Mg 24,305											Aluminium 13 Al 26,982	Silicium 14 Si 28,086	Phosphore 15 P 30,974	Soufre 16 S 32,065	Chlore 17 Cl 35,453	Argent 18 Ar 39,948	
N Potassium 19 K 39,098	Calcium 20 Ca 40,078	Scandium 21 Sc 44,956	Titane 22 Ti 47,867	Vanadium 23 V 50,942	Chrome 24 Cr 51,996	Manganèse 25 Mn 54,938	Fer 26 Fe 55,845	Cobalt 27 Co 58,933	Nickel 28 Ni 58,693	Cuivre 29 Cu 63,546	Zinc 30 Zn 65,409	Gallium 31 Ga 69,723	Germanium 32 Ge 72,64	Arsenic 33 As 74,922	Sélénium 34 Se 78,96	Brome 35 Br 79,904	Krypton 36 Kr 83,798	
O Rubidium 37 Rb 85,468	Strontium 38 Sr 87,62	Yttrium 39 Y 88,906	Zirconium 40 Zr 91,224	Niobium 41 Nb 92,906	Molybdène 42 Mo 95,94	Technétium 43 Tc 97,9	Ruthénium 44 Ru 101,07	Rhodium 45 Rh 102,91	Palladium 46 Pd 106,42	Argent 47 Ag 107,87	Calcium 48 Cd 112,41	Indium 49 In 114,82	Étain 50 Sn 118,71	Antimoine 51 Sb 121,76	Tellure 52 Te 127,60	Iode 53 I 126,90	Xénon 54 Xe 131,29	
P Césium 55 Cs 132,91	Baryum 56 Ba 137,33	** La & Lz	Hafnium 72 Hf 178,49	Taung 73 Ta 180,95	Tungstène 74 W 183,84	Rhénium 75 Re 186,21	Osmium 76 Os 190,23	Iridium 77 Ir 192,22	Platine 78 Pt 195,08	Or 79 Au 196,97	Mercury 80 Hg 200,59	Thallium 81 Tl 204,38	Plomb 82 Pb 207,2	Bismuth 83 Bi 208,98	Poivre 84 Po (209)	Arsenic 85 At (210)	Radium 86 Ra (226)	
Q Francium 87 Fr (223)	Radium 88 Ra (226)	** Ac & Lz	Rutherfordium 104 Rf (261)	Débiérium 105 Db (262)	Seaborgium 106 Sg (266)	Réhenium 107 Bh (264)	Hassium 108 Hs (277)	Méhvérium 109 Mt (288)	Darmstadtium 110 Ds (271)	Ununseptium 111 Uus (272)	Unbibium 112 Uub (285)	Ununquadium 114 Uuq (289)						
*	Lanthane 57 La 138,91	Cérite 58 Ce 140,12	Praseodyme 59 Pr 140,91	Néodyme 60 Nd 144,24	Protactinium 61 Pa (145)	Samarium 62 Sm 150,36	Eurélium 63 Eu 151,96	Gadolinium 64 Gd 157,25	Terbium 65 Tb 158,93	Dysprosium 66 Dy 162,50	Holmium 67 Ho 164,93	Érène 68 Er 167,26	Thulium 69 Tm 168,93	Ytterbium 70 Yb 173,04	Lutétium 71 Lu 174,97			
**	Actinium 89 Ac (227)	Thorium 90 Th 232,04	Protactinium 91 Pa 231,04	Uranium 92 U 238,03	Néptunium 93 Np (237)	Plutonium 94 Pu (244)	Americium 95 Am (243)	Curium 96 Cm (247)	Berkélium 97 Bk (247)	Californium 98 Cf (251)	Einsteinium 99 Es (252)	Fermium 100 Fm (257)	Mendelevium 101 Md (288)	Nobelium 102 No (289)	Lovénium 103 Lr (262)			

FIGURE : Classification périodique.

webelement
UPS chimie

L'énergie de première ionisation correspond à l'énergie à fournir à l'atome dans son état gazeux et dans son état fondamental, pour lui arracher un électron et obtenir un ion positif dans l'état fondamental.

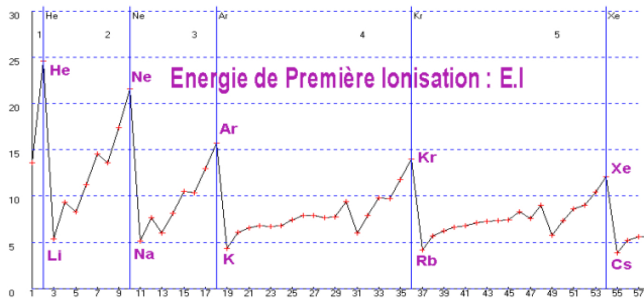
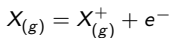


FIGURE : Evolution de l'Energie de première Ionisation.

L'énergie d'affinité électronique correspond à l'énergie libérée par l'atome dans l'état gazeux à l'état fondamental lorsqu'il capture un électron et devient un ion négatif dans l'état fondamental.

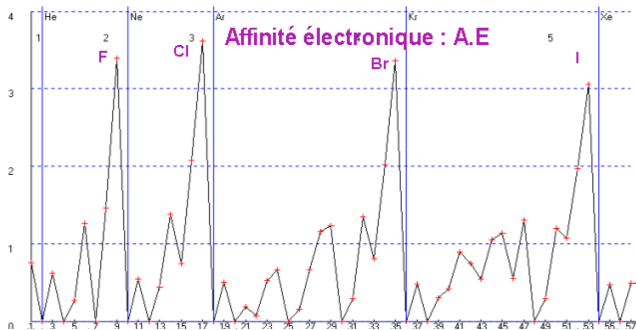
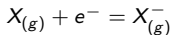


FIGURE : Evolution de l'Affinité Electronique.

L'électronégativité de Mulliken est définie par

$$\chi = k \cdot \frac{E.I._1 + A.E.}{2}$$

avec $k = 0,317\text{eV}^{-1}$

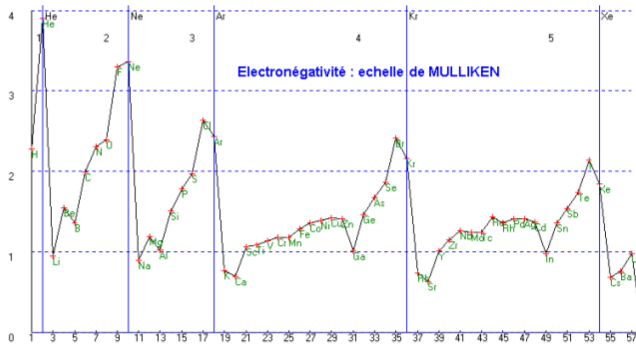


FIGURE : Evolution de l'électronégativité de Mulliken.

L'électronégativité de Mulliken est définie par

$$\chi = k \cdot \frac{E.I.1 + A.E.}{2}$$

avec $k = 0,317\text{eV}^{-1}$

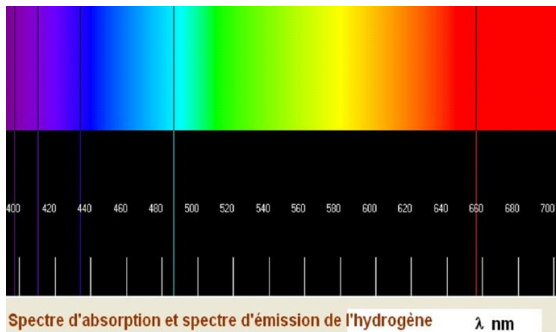
Evolution de l'électronégativité au sein de la classification périodique.

Les éléments chimiques en haut à gauche de la classification sont très peu électronégatifs : ils cèdent, de manière générale, facilement un électron.

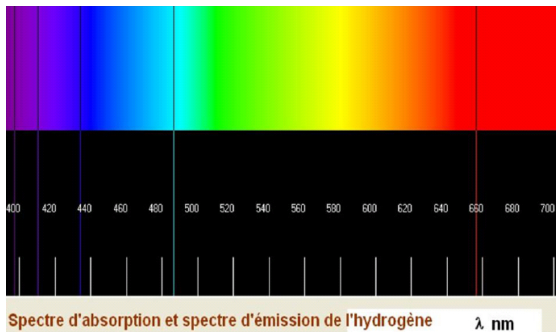
Les éléments en bas à droite de la classification sont très électronégatifs : ils récupèrent de manière générale facilement un électron.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.**
 - Spectre de l'atome d'hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.
- 10 Les cristaux moléculaires.

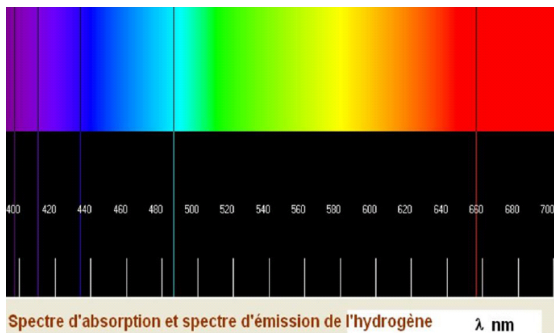


Le spectre est **discret**, l'énergie des photons (émis ou absorbés) est quantifiée, donc l'énergie de l'atome est quantifiée.



Le spectre est **discret**, l'énergie des photons (émis ou absorbés) est quantifiée, donc l'énergie de l'atome est quantifiée.

Formule de Ritz : $\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$ avec $n < n'$ et R_H constante de Rydberg = $1,09677 \cdot 10^7 \text{S.I.}$



Le spectre est **discret**, l'énergie des photons (émis ou absorbés) est quantifiée, donc l'énergie de l'atome est quantifiée.

Formule de Ritz : $\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$ avec $n < n'$ et R_H constante de Rydberg = $1,09677 \cdot 10^7 \text{S.I.}$

Avec $\epsilon_{\text{photon}} = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = E_{n'} - E_n$

L'énergie de l'atome est donc $E_n = -\frac{hcR_H}{n^2}$

Quantification de l'énergie de l'atome d'hydrogène.

L'énergie de l'atome d'hydrogène dépend d'un seul nombre quantique n : $E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{eV}$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

$$\epsilon_{\text{photon } n' \rightarrow n} = h\nu_{n,n'} = E_{n'} - E_n$$

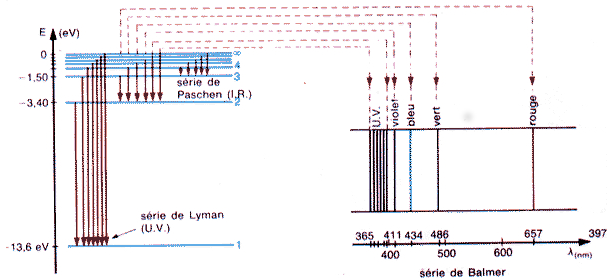


FIGURE : Séries de raies de l'hydrogène.

L'énergie de l'atome d'hydrogène ne dépend que d'un seul nombre quantique n : dégénérescence totale de l'énergie.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 **Structure quantique des (autres) atomes.**
 - **Observation de spectres.**
 - Description des nombres quantiques
 - Détermination de la configuration électronique
 - Conclusion
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

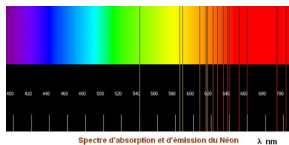


FIGURE : Séries de raies du Ne.

Impossible généralisation de la formule de Ritz :
 Levée partielle de la dégénérescence.



FIGURE : Séries de raies du Calcium.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 **Structure quantique des (autres) atomes.**
 - Observation de spectres.
 - **Description des nombres quantiques**
 - Détermination de la configuration électronique
 - Conclusion
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.



Les quatre nombres quantiques.

n : nombre quantique principale, qui définit **la couche**.

$n = 1 \rightarrow K, n = 2 \rightarrow L, n = 3 \rightarrow M, \dots$

l nombre quantique secondaire (ou azimutal) qui définit **la sous couche** et $l \in [0; n - 1]$.

$l = 0 \rightarrow s, l = 1 \rightarrow p, l = 2 \rightarrow d, l = 3 \rightarrow f$

(il détermine la forme du nuage électronique= orbitale atomique)

m_l nombre quantique magnétique, $m_l \in [-l; l]$.

(il détermine la direction du nuage électronique= orbitale atomique)

m_s nombre quantique de spin $m_s = 1/2, \text{top}, \uparrow$ ou $-1/2, \text{down}, \downarrow$.

(Propriété intrinsèque de l'électron)

Les quatre nombres quantiques.

Une orbitale atomique est caractérisée par un triplet de nombres quantiques (n, l, m_l)

L'état d'un électron est caractérisé par le quadruplet de nombres quantiques (n, l, m_l, m_s)

Exemple :

couche n	sous couche l	m_l	orbitale atomique	état électronique possible
$n = 2$ (L)	$l = 0 \rightarrow s$	$m_l = 0$	$(2, 0, 0)$	$(2, 0, 0, \uparrow)$
				$(2, 0, 0, \downarrow)$
	$l = 1 \rightarrow p$	$m_l = 1$	$(2, 1, 1)$	$(2, 1, 1, \uparrow)$
				$(2, 1, 1, \downarrow)$
		$m_l = 0$	$(2, 1, 0)$	$(2, 1, 0, \uparrow)$
				$(2, 1, 0, \downarrow)$
$m_l = -1$	$(2, 1, -1)$	$(2, 1, -1, \uparrow)$		
		$(2, 1, -1, \downarrow)$		

















	$s (l=0)$	$p (l=1)$	$d (l=2)$	$f (l=3)$
$n=1$	 $m=0$			
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$		
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$	 $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	
$n=4$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$	 $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	 $m=-3$ $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$ $m=3$
$n=5$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$	 $m=-2$ $m=-1$ $m=0$ $m=1$ $m=2$	
$n=6$	 $m=0$	 $m=-1$ $m=0$ $m=1$		
$n=7$	 $m=0$			

FIGURE : Représentation du nuage électronique (forte probabilité de présence de e^- des différentes O.A.)

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 **Structure quantique des (autres) atomes.**
 - Observation de spectres.
 - Description des nombres quantiques
 - **Détermination de la configuration électronique**
 - Conclusion
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Règle d'exclusion de Pauli.

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques identiques (n, l, m_l)

Conséquence : une Orbitale Atomique est occupée par au maximum deux électrons.

Règle d'exclusion de Pauli.

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques identiques (n, l, m_l)

Conséquence : une Orbitale Atomique est occupée par au maximum deux électrons.

Règle de stabilité de Klechkowsky.

L'énergie d'un atome dépend de deux nombres quantiques n et l .

L'énergie est une fonction croissante de $(n + l)$

Pour une même valeur de $n + l$, l'énergie augmente avec n .

Règle d'exclusion de Pauli.

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques identiques (n, l, m_l)

Conséquence : une Orbitale Atomique est occupée par au maximum deux électrons.

Règle de stabilité de Klechkowsky.

L'énergie d'un atome dépend de deux nombres quantiques n et l .

L'énergie est une fonction croissante de $(n + l)$

Pour une même valeur de $n + l$, l'énergie augmente avec n .

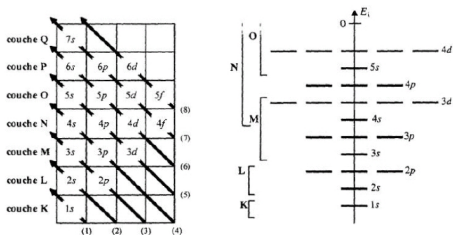


FIGURE : Tableau de Klechkowsky.

Règle d'exclusion de Pauli.

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir leur quatre nombres quantiques identiques (n, l, m_l, m_s)
(Car les électrons sont des fermions, particules de spin demi-entier.)

Conséquence : une Orbitale Atomique est occupée par au maximum deux électrons.

Règle de stabilité de Klechkowsky.

L'énergie d'un atome dépend de deux nombre quantiques n et l .
L'énergie est une fonction croissante de $(n + l)$
Pour une même valeur de $n + l$, l'énergie augmente avec n .

Règle de remplissage de Hünd.

Pour trouver l'état de plus basse énergie, les électrons doivent être placés en remplissant d'abord les orbitales atomiques de plus basse énergie.
Pour les orbitales atomiques dégénérées (de même énergie), la stabilité est obtenue en remplissant le maximum d'O.A. avec des électrons non appariés de spin parallèle (\uparrow par convention)

Application : Structure électronique de l'oxygène

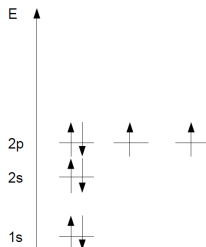
 $[O] 1s^2 2s^2 2p^4$ 

FIGURE : Structure électronique de l'oxygène.

Cas particulier :

Etude du Cr ($Z = 25$) et Cu ($Z = 30$)

Cas particulier :

Etude du Cr ($Z = 25$) et Cu ($Z = 30$)

$[Cr] : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$

$[Cu] : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

Stabilité particulière.

Une sous couche à demi remplie ou complètement remplie confère à l'atome une plus grande stabilité.

Formation des anions.

Il suffit d'ajouter un électron à la configuration électronique.

Formation des cations.

Il faut arracher les électrons **de n le plus grand** à la configuration électronique.

Exemple : Li^+ , F^- , Fe^{3+}

Formation des anions.

Il suffit d'ajouter un électron à la configuration électronique.

Formation des cations.

Il faut arracher les électrons **de n le plus grand** à la configuration électronique.

Exemple : Li^+ , F^- , Fe^{3+}

Electrons de valence.

Les électrons de valence sont les électrons de **la couche n** le plus grand et ceux **des sous couches incomplètes**.

Ils sont responsables de propriétés physicochimiques de l'atome.

Tous les éléments d'une même famille ont même configuration de valence.

Electrons de coeur.

Les électrons de coeur sont les électrons des sous couches complètes.

Ils sont très liés au noyau et ne participent donc pas aux interactions avec les autres atomes.

Tous les éléments d'une même période ont même configuration de coeur.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 **Structure quantique des (autres) atomes.**
 - Observation de spectres.
 - Description des nombres quantiques
 - Détermination de la configuration électronique
 - **Conclusion**
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Prédictions et structure même de la classification de Mendeleïev expliquée par théorie plus générale.

Les propriétés physicochimiques de la matière (capacité à gagner ou perdre un e^- , caractère acide base, caractère oxydant réducteur) sont expliquées par les propriétés de l'atome.

Mais il ne s'agit que d'une première approche car si la structure des spectres est expliquée, l'interprétation quantitative n'est pas faite.

Rappel : l'hydrogène est un cas particulier, dont l'étude quantitative est possible.

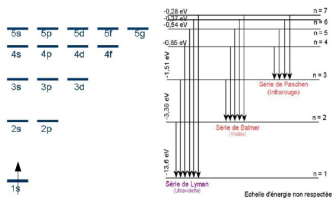


FIGURE : Structure électronique de l'hydrogène $E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$.

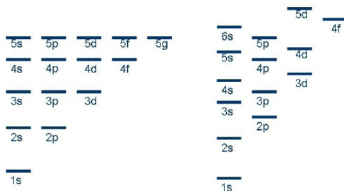


FIGURE : Diagramme des sous couches (et non des O.A.) de l'hydrogène à gauche avec dégénérescence totale $E(n)$ et d'un autre élément à droite avec dégénérescence partielle $E(n, l)$.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 **La liaison chimique : les molécules.**
 - **Présentation de la liaison chimique covalente.**
 - La règle de stabilité.
 - Les charges sur la molécule.
 - Au delà du modèle simple.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

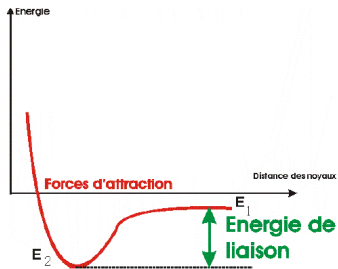


FIGURE : Présentation énergétique de la liaison chimique.

La liaison chimique covalente.

La liaison chimique covalente correspond à la mise en commun de deux électrons de valence par deux atomes aux orbitales atomiques incomplètes pour minimiser leur énergie électronique. Les atomes forment alors une molécule stable.

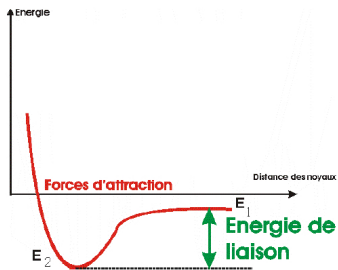


FIGURE : Présentation énergétique de la liaison chimique.

La liaison chimique covalente.

La liaison chimique covalente correspond à la mise en commun de deux électrons de valence par deux atomes aux orbitales atomiques incomplètes pour minimiser leur énergie électronique. Les atomes forment alors une molécule stable.

La liaison chimique covalente localisée de Lewis.

Les deux électrons mis en commun par les atomes forment alors un doublet localisé, représenté schématiquement entre les deux atomes.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 **La liaison chimique : les molécules.**
 - Présentation de la liaison chimique covalente.
 - **La règle de stabilité.**
 - Les charges sur la molécule.
 - Au delà du modèle simple.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Règle de stabilité pour la formation des molécules.

Chaque atome tend vers la configuration électronique la plus stable, celle du gaz noble qui le suit dans la classification périodique.

L'hydrogène tend à acquérir la configuration de l'Hélium, donc une structure à 2 électrons de valence **en tout** : (règle du duet).

Les atomes de la deuxième et de la troisième période tendent à acquérir une structure $ns^2 np^6$ donc une structure à 8 électrons de valence **en tout** : règle de l'octet.

Exemple H_2O et CO_2 .

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 **La liaison chimique : les molécules.**
 - Présentation de la liaison chimique covalente.
 - La règle de stabilité.
 - **Les charges sur la molécule.**
 - Au delà du modèle simple.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Règle de calcul des charges formelles.

Pour déterminer la charge formelle, il faut comparer le nombre d'électron de valence que l'atome a, en propre, dans la molécule au nombre d'électron de l'atome seul.

Si l'atome possède un excédant d'électron, il porte une charge formelle $-$.

Si l'atome possède un déficit d'électron, il porte une charge formelle $+$.

La somme des charges formelles est la charge globale de la molécule.

Exemple CO_3^{2-} .

Règle de calcul des charges formelles.

Pour déterminer la charge formelle, il faut comparer le nombre d'électron de valence que l'atome a, en propre, dans la molécule au nombre d'électron de l'atome seul.

Si l'atome possède un excédant d'électron, il porte une charge formelle $-$.

Si l'atome possède un déficit d'électron, il porte une charge formelle $+$.

La somme des charges formelles est la charge globale de la molécule.

Exemple CO_3^{2-} .

Règle d'évaluation des charges partielles.

Lorsque les deux éléments engagés dans la liaison covalente n'ont pas la même électronégativité, le nuage électronique se trouve déplacé vers l'élément le plus électronégatif et il apparaît alors une charge partielle $\pm\delta e$ avec $\delta \in [0, 1]$

La somme des charges partielles est nulle.

Exemple H_2O .

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.**
 - Présentation de la liaison chimique covalente.
 - La règle de stabilité.
 - Les charges sur la molécule.
 - **Au delà du modèle simple.**
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Les éléments de la troisième période peuvent faire de l'**hypervalence**, i.e. avoir plus de 8 e⁻ de valence en tout.

Exemple SF_6 .

Les éléments de la troisième période peuvent faire de l'**hypervalence**, i.e. avoir plus de 8 e⁻ de valence en tout.

Exemple SF_6 .

Certaines molécules présentent des **formes mésomères**. Les doubles liaisons peuvent se délocaliser entre plusieurs atomes. La molécule réelle est une "moyenne" (pondérée) des différentes représentations de Lewis possibles.

Exemple NO_2^- .

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 **Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.**
 - **Molécules à doublets liants uniquement.**
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Influence de quelques paramètres sur la géométrie de la molécule
 - Moment dipolaire des molécules.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Théorie VSEPR : Valence Shell Electron Pairs Repulsion.






Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair
2	 <p>Linear</p>
3	 <p>Trigonal Planar</p>
4	 <p>Tetrahedral</p>
5	 <p>Trigonal Bipyramid</p>
6	 <p>Octahedral</p>

FIGURE : Molécules à doublets liants AX_n .

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 **Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.**
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - **Molécules à doublets liants uniquement.**
 - Influence de quelques paramètres sur la géométrie de la molécule
 - Moment dipolaire des molécules.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.
















VSEPR Geometries					
Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 Linear				
3	 Trigonal Planar	 Bent or Angular			
4	 Tetrahedral	 Trigonal Pyramidal	 Bent or Angular		
5	 Trigonal Bipyramid	 Sawhorse or Seesaw	 T-shape	 Linear	
6	 Octahedral	 Square Pyramidal	 Square Planar	 T-shape	 Linear

FIGURE : Molécules à doublets liants AX_nE_m .

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.**
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Influence de quelques paramètres sur la géométrie de la molécule**
 - Moment dipolaire des molécules.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Ré pulsion doublet non liant > Ré pulsion doublet liant

Ré pulsion double liaison > Ré pulsion simple liaison > Ré pulsion électron seul

Exemple : La molécule d'eau H_2O est coudée avec un angle d'environ $104,5^\circ < 109^\circ 28'$

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.**
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Influence de quelques paramètres sur la géométrie de la molécule
 - **Moment dipolaire des molécules.**
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Moment dipolaire.

Connaissant les charges formelles δe et la distance entre les atomes, il est possible de calculer le moment dipolaire de liaison $A - B$:

$$\vec{p}_i = (\delta_i \cdot e) \cdot \overrightarrow{A_i^- B_i^+}$$

Le moment dipolaire de la molécule est la somme vectorielle des moments dipolaires de chacune de ses liaisons :

$$\vec{p}_{mol} = \sum_i \vec{p}_i$$

Rappel : Les moments dipolaires élémentaires se mesurent en Debye $1D = \frac{1}{3} 10^{-26} C.m$

Exemple : Calcul du moment dipolaire de la molécule d'eau H_2O

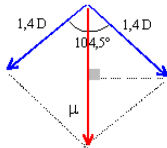


FIGURE : Moment dipolaire de la molécule d'eau.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.**
 - **Modèle du cristal parfait.**
 - Définition d'un cristal.
 - Grandeurs caractéristiques du cristal.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Présentation du modèle du cristal parfait.

Un cristal est un agencement géométrique régulier d'entités (atomes, ions, molécules) dans l'espace.

Si l'agencement est sans défaut et infini, le cristal est parfait.

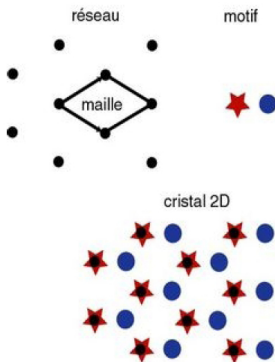


FIGURE : Le cristal est la donnée du réseau et du motif.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.**
 - Modèle du cristal parfait.
 - **Définition d'un cristal.**
 - Grandeurs caractéristiques du cristal.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Le réseau est un ensemble infini et périodique dans les trois directions de l'espace de points appelés noeuds.

Les vecteurs de base du réseau sont trois vecteurs $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ indépendants tels que deux noeuds du réseau sont reliés par une translation de vecteur \vec{t} de la forme :

$$\vec{t} = u.\vec{a} + v.\vec{b} + w.\vec{c} \text{ avec } u, v, w \text{ des entiers relatifs.}$$

Remarque : Une symétrie du réseau est une opération géométrique laissant invariante le réseau.

Définition de la maille.

La maille du réseau est un parallélépipède permettant de paver tout l'espace à partir des translations du réseau.

Définition du motif.

Le motif est la plus petite entité discernable qui peut engendrer le cristal.
Le motif peut être un ou plusieurs atomes, ions ou molécules.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.**
 - Modèle du cristal parfait.
 - Définition d'un cristal.
 - **Grandeurs caractéristiques du cristal.**
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.

La maille cristalline.

La maille cristalline est l'association de la maille (du réseau) et du motif.

La multiplicité de la maille (notée généralement z) est le nombre d'entités **en propre** dans la maille (cristalline).

La coordinence d'un atome (ou ion) A_i par rapport aux atomes (ou ions) B_j est le nombre de plus proches voisins de type B_j que A_i possède : $A_i/B_j = [\text{coordinence}]$

La compacité est le rapport entre le volume effectivement occupé par les entités de la maille (assimilé à des sphères) sur le volume de la maille. $C = \frac{\text{volume des entités de la maille}}{\text{volume de la maille}}$
La compacité $C < 1$, chaque structure présente donc des sites interstitiels.

La masse volumique est la masse des entités de la maille divisée par le volume de la maille.

$$\rho = \frac{z \cdot m}{V} = \frac{z \cdot M}{N_A \cdot V}$$

La densité d'un solide est la masse volumique du solide divisée par la masse volumique de l'eau liquide. $d = \frac{\rho}{\rho_{eau}}$ avec $\rho_{eau} = 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} = 1 \text{ kg/l}$.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 **Les cristaux métalliques.**
 - **La liaison métallique.**
 - Recherche de structures compactes.
 - Structure compacte Cubique Faces Centrées
 - Site interstitiel octaédrique d'une structure compacte.
 - Site interstitiel tétraédrique d'une structure compacte.
 - Notion sur les alliages.
 - Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée

Présentation de la liaison métallique.

Dans un métal, le réseau cristallin est constitué de cations métalliques tandis que les électrons de valence arrachés sont délocalisés sur l'ensemble du cristal et forment alors un gaz d'électrons qui assure la cohésion du métal.

Propriétés des métaux :

- Bon conducteurs.
- Durs à casser, énergie de liaison aisée.
- Maléables.

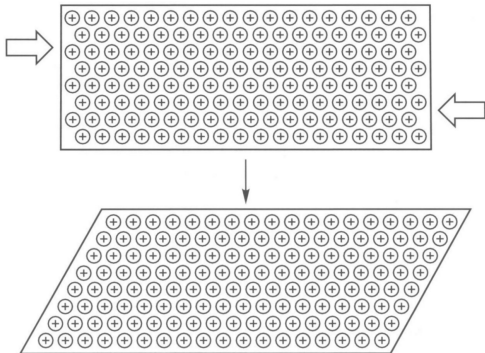


FIGURE : Déformation "aisée" de la liaison métallique.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 **Les cristaux métalliques.**
 - La liaison métallique.
 - **Recherche de structures compactes.**
 - Structure compacte Cubique Faces Centrées
 - Site interstitiel octaédrique d'une structure compacte.
 - Site interstitiel tétraédrique d'une structure compacte.
 - Notion sur les alliages.
 - Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée

Empilements compacts de sphères dures.

Plan A

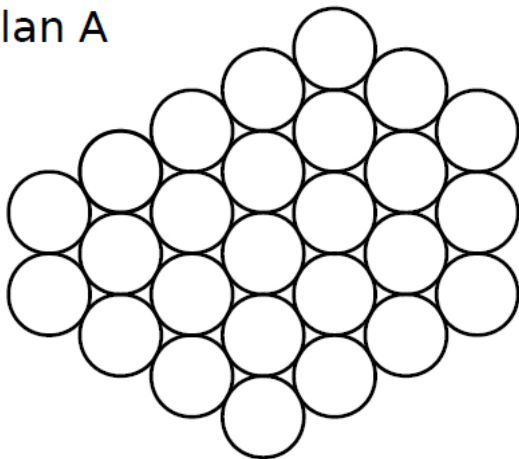


FIGURE : Plan A.

Empilements compacts de sphères dures.

Plan A
Plan B

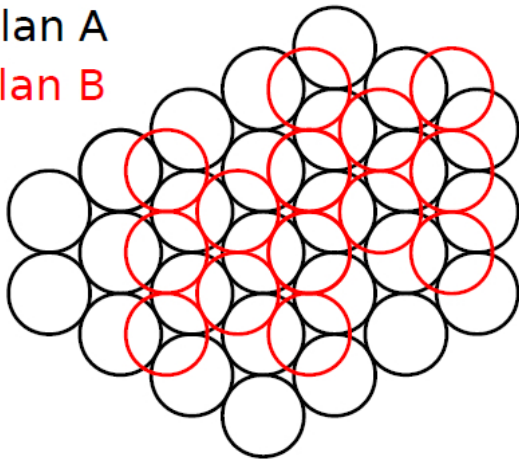


FIGURE : Plan AB.

Empilements compacts de sphères dures.

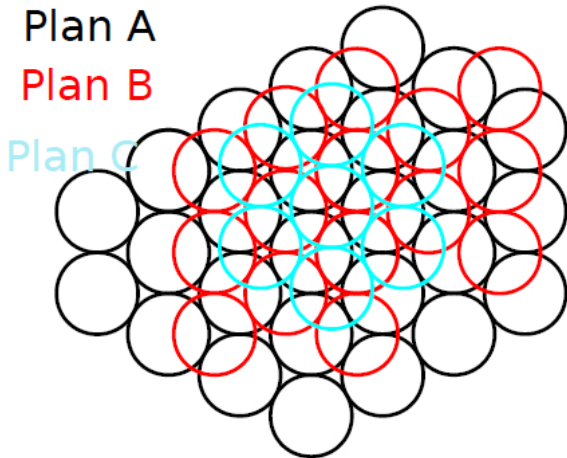


FIGURE : Première possibilité : Plan ABC.

Empilements compacts de sphères dures.

Plan A

Plan B

Plan A

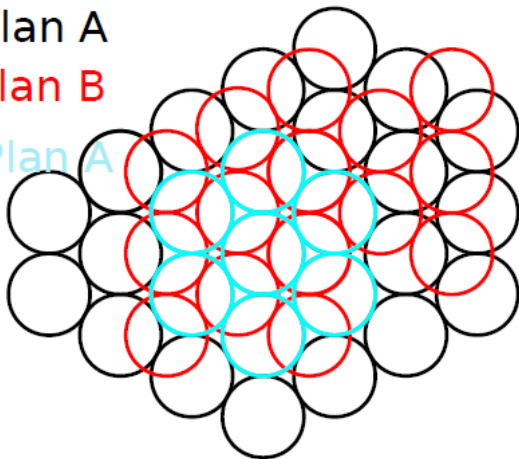


FIGURE : Seconde possibilité : Plan ABA.

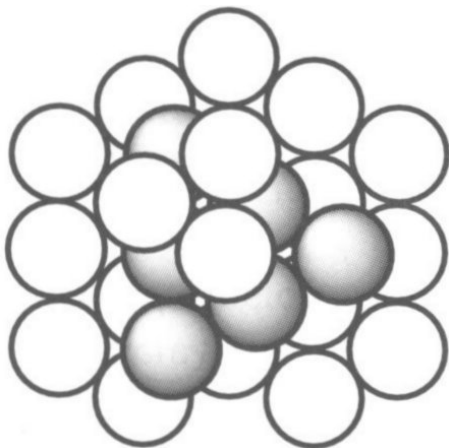


FIGURE : Empilement ABA.

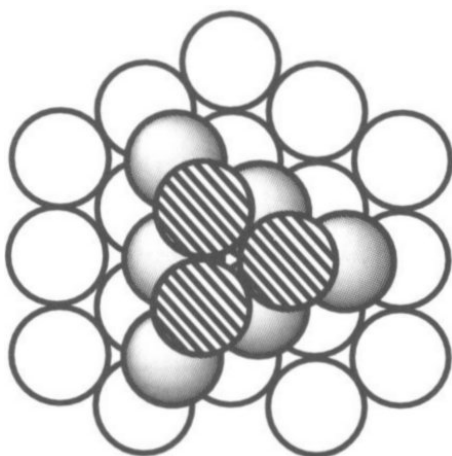


FIGURE : Empilement ABC.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 **Les cristaux métalliques.**
 - La liaison métallique.
 - Recherche de structures compactes.
 - **Structure compacte Cubique Faces Centrées**
 - Site interstitiel octaédrique d'une structure compacte.
 - Site interstitiel tétraédrique d'une structure compacte.
 - Notion sur les alliages.
 - Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée

Empilements compacts ABC de sphères dures : structure Cubique Faces Centrées

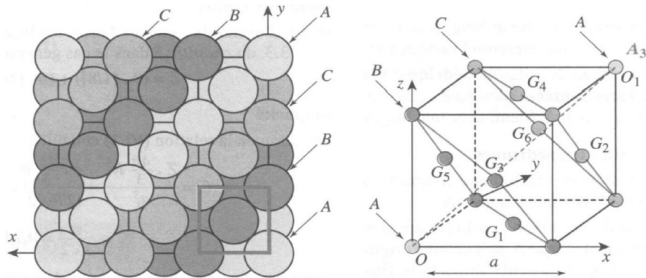


FIGURE : Visualisation des plans ABC dans la structure Cubique Faces Centrées.

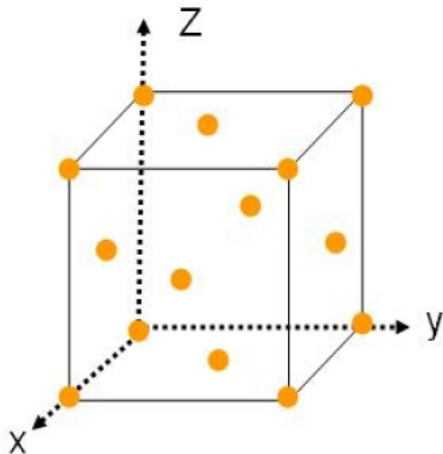


FIGURE : Structure compacte Cubique Faces Centrées.

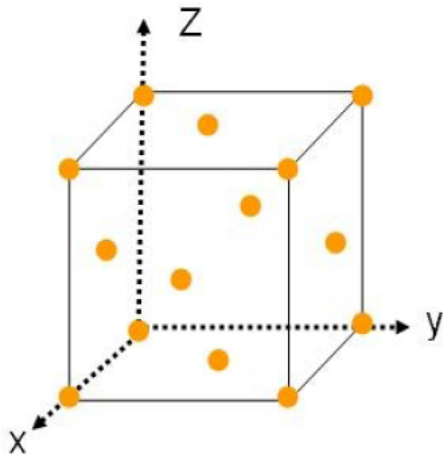


FIGURE : Structure compacte Cubique Faces Centrées.

- Cette maille est quadruple :

$$z = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$$

- La coordinnce d'un atome dans cette structure compacte est 12 :

$$M/M_{CFC} = [12]$$

- Les sphères sont tangentes entre elles le long des diagonales des faces du cube

$$4R = a\sqrt{2}$$

- La compacité de cette structure compacte est de 74%

$$C_{CFC} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 0,74$$

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 **Les cristaux métalliques.**
 - La liaison métallique.
 - Recherche de structures compactes.
 - Structure compacte Cubique Faces Centrées
 - **Site intersticiel octaédrique d'une structure compacte.**
 - Site intersticiel tétraédrique d'une structure compacte.
 - Notion sur les alliages.
 - Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée

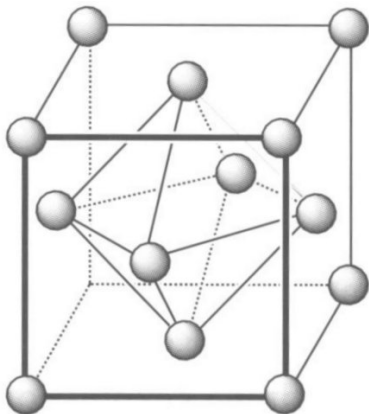
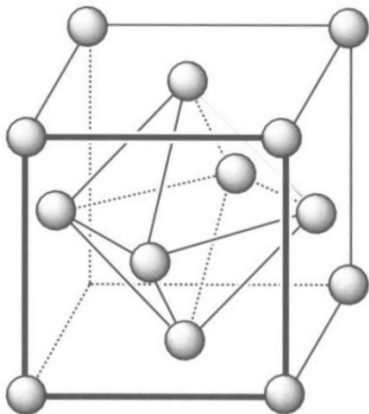


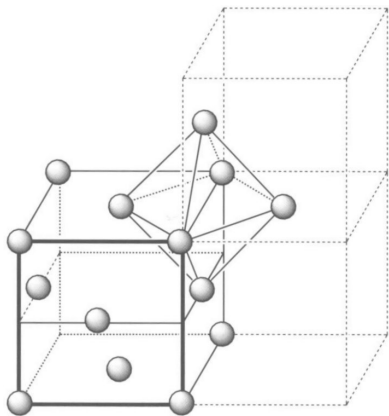
FIGURE : Site octaédrique d'une structure Cubique Faces Centrées.



Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

FIGURE : Site octaédrique d'une structure Cubique Faces Centrées.



Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

FIGURE : Nombre de sites octaédriques d'une structure Cubique Faces Centrées.

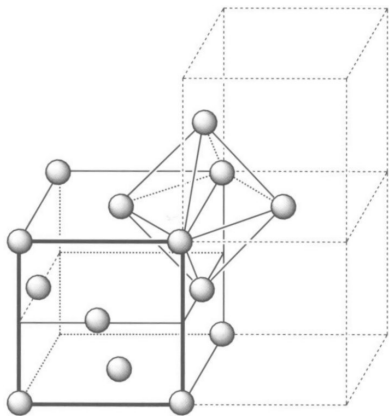


FIGURE : Nombre de sites octaédriques d'une structure Cubique Faces Centrées.

Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

La maille contient $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$ sites octaédriques en propre (comme sa multiplicité)

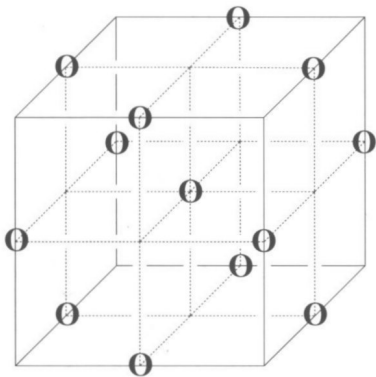


FIGURE : Position des sites octaédriques d'une structure Cubique Faces Centrées.

Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

La maille contient $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$ sites octaédriques en propre (comme sa multiplicité)

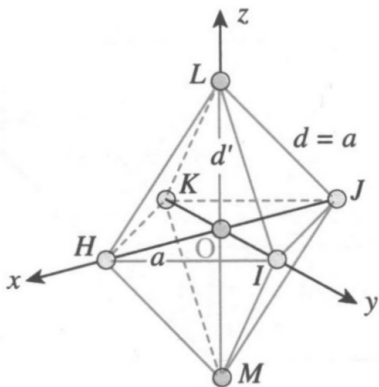


FIGURE : Habitabilité des sites octaédriques.

Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

La maille contient $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$ sites octaédriques en propre (comme sa multiplicité).

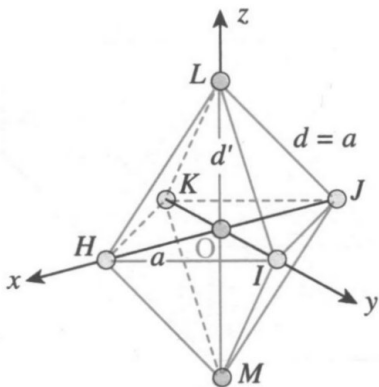


FIGURE : Habitabilité des sites octaédriques.

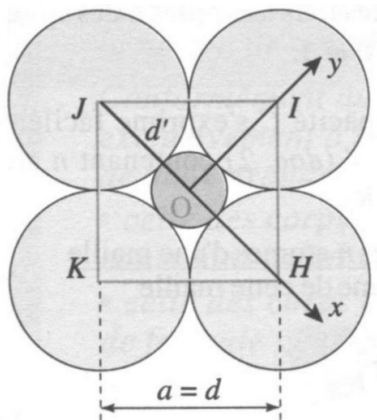
Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

La maille contient $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$ sites octaédriques en propre (comme sa multiplicité).

L'habitabilité d'un site octaédrique est

$$\frac{r}{R} \leq \sqrt{2} - 1 = 41\%$$



Caractéristiques d'un site octaédrique.

L'atome central a 6 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à huit côtés appelé octaèdre.

La maille contient $1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$ sites octaédriques en propre (comme sa multiplicité).

L'habitabilité d'un site octaédrique est

$$\frac{r}{R} \leq \sqrt{2} - 1 = 41\%$$

FIGURE : Habitabilité des sites octaédriques (vue en coupe).

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 **Les cristaux métalliques.**
 - La liaison métallique.
 - Recherche de structures compactes.
 - Structure compacte Cubique Faces Centrées
 - Site interstitiel octaédrique d'une structure compacte.
 - **Site interstitiel tétraédrique d'une structure compacte.**
 - Notion sur les alliages.
 - Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée

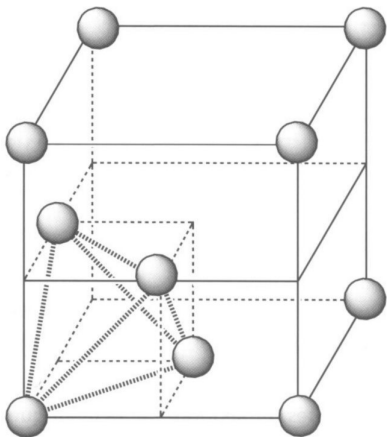
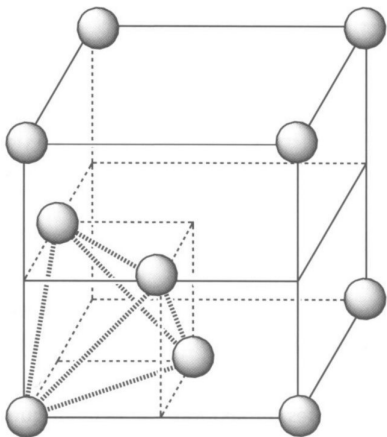


FIGURE : Site tétraédrique d'une structure Cubique Faces Centrées.



Caractéristiques d'un site tétraédrique.

L'atome central a 4 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à quatre côtés appelé tétraèdre.

FIGURE : Site tétraédrique d'une structure Cubique Faces Centrées.

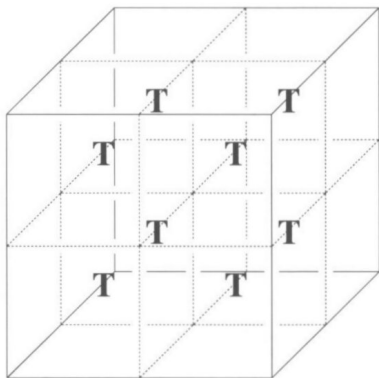


FIGURE : Position des sites tétraédriques d'une structure Cubique Faces Centrées.

Caractéristiques d'un site tétraédrique.

L'atome central a 4 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à quatre côtés appelé tétraèdre.

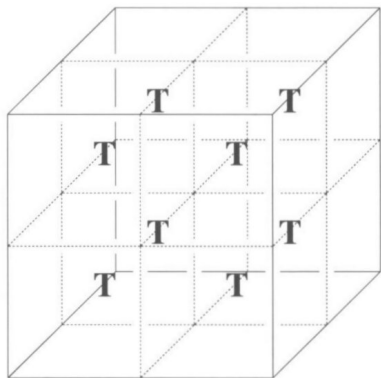


FIGURE : Position des sites tétraédriques d'une structure Cubique Faces Centrées.

Caractéristiques d'un site tétraédrique.

L'atome central a 4 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à quatre côtés appelé tétraèdre.

La maille contient 8 sites tétraédriques en propre (le double de sa multiplicité)

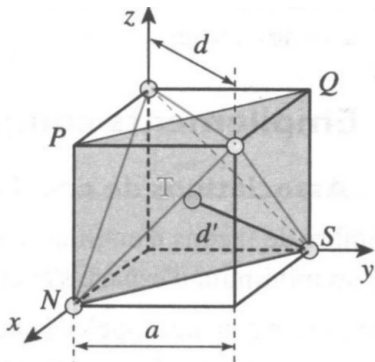


FIGURE : Habitabilité des sites tétraédriques.

Caractéristiques d'un site tétraédrique.

L'atome central a 4 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à quatre côtés appelé tétraèdre.

La maille contient 8 sites tétraédriques en propre (le double de sa multiplicité)

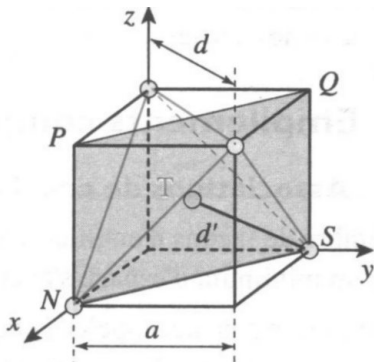


FIGURE : Habitabilité des sites tétraédriques.

Caractéristiques d'un site tétraédrique.

L'atome central a 4 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à quatre côtés appelé tétraèdre.

La maille contient 8 sites tétraédriques en propre (le double de sa multiplicité)

L'habitabilité d'un site octaédrique est

$$\frac{r}{R} \leq \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 = 23\%$$

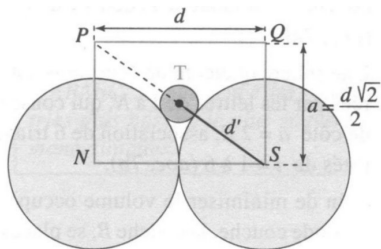


FIGURE : Habitabilité des sites tétraédriques (vue en coupe).

Caractéristiques d'un site tétraédrique.

L'atome central a 4 plus proches voisins qui forment un polyèdre régulier à quatre côtés appelé tétraèdre.

La maille contient 8 sites tétraédriques en propre (le double de sa multiplicité)

L'habitabilité d'un site octaédrique est

$$\frac{r}{R} \leq \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 = 23\%$$

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.**
 - La liaison métallique.
 - Recherche de structures compactes.
 - Structure compacte Cubique Faces Centrées
 - Site interstitiel octaédrique d'une structure compacte.
 - Site interstitiel tétraédrique d'une structure compacte.
 - Notion sur les alliages.**
 - Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée

Pour modifier certaines propriétés mécaniques ou chimique (résistance à la corrosion) il est ajouté dans un métal d'autres éléments chimiques : alliage.

Selon la taille de l'atome "introduit" dans le métal, l'alliage peut être un **alliage de substitution** ou un **alliage d'insertion**.

Exemple Laiton : alliages Cuivre Zinc

Bronze (airain) : alliage Cuivre Etain

Acier et fonte : alliages Fer Carbone

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.**
 - La liaison métallique.
 - Recherche de structures compactes.
 - Structure compacte Cubique Faces Centrées
 - Site interstitiel octaédrique d'une structure compacte.
 - Site interstitiel tétraédrique d'une structure compacte.
 - Notion sur les alliages.
 - **Exemple d'une structure non compacte Cubique Centrée**

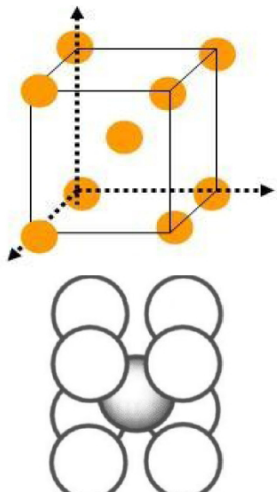
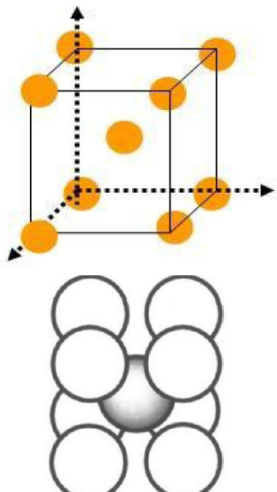


FIGURE : Structure non compacte Cubique Centrée.



- Cette maille est double :

$$z = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

- La coordinnence d'un atome dans cette structure compacte est 8 :

$$M/M_{CC} = [8]$$

- Les sphères sont tangentes entre elles le long de la grande diagonale du cube

$$4R = a\sqrt{3}$$

- La compacité de cette structure compacte est de 68%

$$C_{CFC} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\pi \cdot \sqrt{3}}{8} \simeq 0,68$$

FIGURE : Structure non compacte Cubique Centrée.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.**
 - **La liaison ionique.**
 - Exemple : le Chlorure de Sodium NaCl (6,6)
- 9 Les cristaux macro-covalents.

Présentation de la liaison ionique.

Les anions (plus gros) s'entourent de cations (plus petits) ce qui assure la cohésion du système par interaction coulombienne attractive.

La formule brute d'un cristal ionique donne la composition du motif.

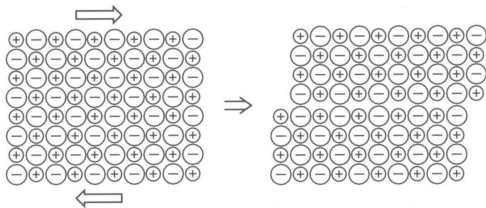


FIGURE : Les cristaux ioniques sont cassants.

Propriétés des métaux :

- Cristaux fragiles, cassants
- Ils se dissocient dans un solvant polaire comme l'eau qui affaiblit l'interaction coulombienne ($\epsilon_r \simeq 80$)

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.**
 - La liaison ionique.
 - Exemple : le Chlorure de Sodium NaCl (6,6)
- 9 Les cristaux macro-covalents.

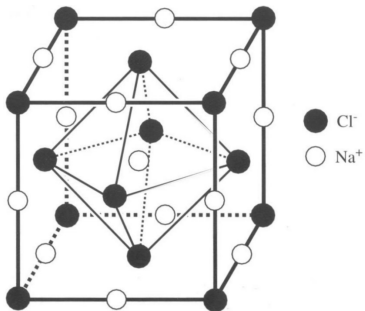


FIGURE : Maille NaCl.

- Première description :
Les anions forment un réseau CFC et les cations se placent dans les sites octaédriques.
- Seconde description :
Réseau CFC avec motif NaCl (à orienter...)
- Maille quadruple : 4 motifs NaCl dans la maille.
- Le contact Anion Cation se fait suivant l'arête du cube de côté a

$$R_+ + R_- = \frac{a}{2}$$

- Coordinence 6 – 6

$$Na^+ / Cl^- = [6] \quad Cl^- / Na^+ = [6]$$

- La compacité est

$$C = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R_+^3 + 4 \cdot \frac{4}{3} \pi R_-^3}{a^3}$$

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 **Les cristaux macro-covalents.**
 - **La liaison covalente.**
 - Le diamant.
 - Le graphite.

Présentation de la liaison covalente.

La liaison covalente est une liaison très forte et directionnelle.

Si une espèce peut cristalliser de plusieurs manières (réseaux différents), chaque espèce est appelée variété allotropique.

Exemple : le carbone possède deux variétés allotropiques : le carbone diamant et le carbone graphite.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 **Les cristaux macro-covalents.**
 - La liaison covalente.
 - **Le diamant.**
 - Le graphite.

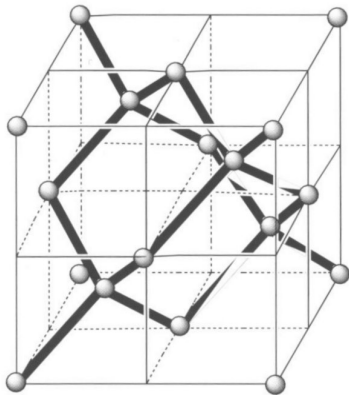


FIGURE : Maille du diamant (forme instable).

- Les atomes de carbone occupent un réseau CFC et un site tétraédrique sur 2.
- Coordinence 4

$$C/C = [4]$$

- La compacité est

$$C = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \simeq 34\%$$

(très faible)

- Le diamant est un cristal très rigide (il ne casse pas et ne se déforme pas).
- Le diamant est un isolant.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.**
 - La liaison covalente.
 - Le diamant.
 - **Le graphite.**

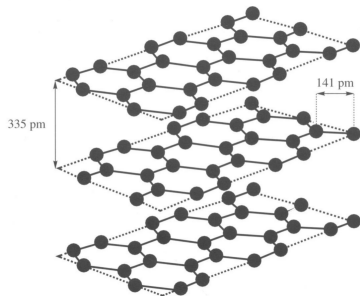


FIGURE : La structure du graphite (forme stable).

- Les atomes de carbone occupent un réseau hexagonal plan.
- Coordinence 3

$$C/C = [3]$$

- Le graphite est un cristal très friable.
- Le graphite (parfait) est un isolant ou un conducteur selon la direction du cristal.

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.
- 10 **Les cristaux moléculaires.**
 - **Les interactions de Van der Walls.**

Présentation des interactions de Van der Walls.

Les interactions de Van der Walls sont des interactions dipôle-dipôle.

- dipôle permanent - dipôle permanent : liaison hydrogène de l'eau.
- dipôle permanent - dipôle induit : interaction molécules avec l'eau.
- dipôle induit - dipôle induit : la plus importante et fréquente.

L'interaction est de courte portée, attractive à grande distance (souvent modélisée par un potentiel en $\frac{1}{r^6}$) et répulsive à très courte distance (non interpénétration des molécules, souvent modélisée par un potentiel en $\frac{1}{r^{12}}$).

Plan

- 1 Classification périodique de la matière.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
- 4 La liaison chimique : les molécules.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
- 6 Introduction aux cristaux.
- 7 Les cristaux métalliques.
- 8 Les cristaux ioniques.
- 9 Les cristaux macro-covalents.
- 10 **Les cristaux moléculaires.**
 - Les interactions de Van der Waals.

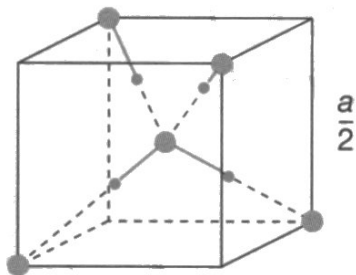


FIGURE : $\frac{1}{8}$ de la maille de glace III.

- ① Structure de type diamant :
les oxygènes forment un réseau CFC
et occupent un site tétraédrique sur 2.
Les hydrogènes pointent vers les
oxygènes (liaison hydrogène).
- ② $\frac{1}{2} \frac{a}{2} \sqrt{3} = d_{OH} + d_{\text{liaison hydrogène}}$

- 1 Classification périodique de la matière.
 - L'atome.
 - La classification périodique.
- 2 Structure quantique de l'atome d'Hydrogène.
 - Spectre de l'atome d'hydrogène.
- 3 Structure quantique des (autres) atomes.
 - Observation de spectres.
 - Description des nombres quantiques
 - Détermination de la configuration électronique
 - Conclusion
- 4 La liaison chimique : les molécules.
 - Présentation de la liaison chimique covalente.
 - La règle de stabilité.
 - Les charges sur la molécule.
 - Au delà du modèle simple.
- 5 Modèle géométrie des molécules dans l'espace. Méthode VSEPR ou de Gillespie.
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Molécules à doublets liants uniquement.
 - Influence de quelques paramètres sur la géométrie de la molécule
 - Moment dipolaire des molécules.
- 6 Introduction aux cristaux.
 - Modèle du cristal parfait.
 - Définition d'un cristal.
 - Grandeurs caractéristiques du cristal.
- 7 Les cristaux métalliques.
 - La liaison métallique.
 - Recherche de structures compactes