

Université Badji Mokhtar Annaba
Faculté de médecine
Département de pharmacie



Cours de chimie organique pharmaceutique

Atome et Liaisons

Atome et structure



Présenté par

SOUDANI.W

Maitre de conférences en chimie thérapeutique

Déc 2020



Plan

Historique

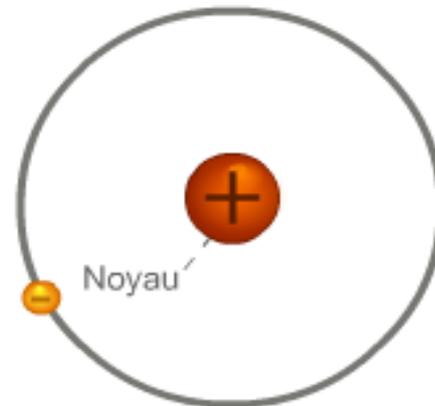
- I. Atome et constituants
- II. Etat quantique de l'atome
- III. Configuration électronique de l'atome.
- IV. Propriétés chimiques périodiques.



I. Historique

Historique

- 1910, **Rutherford** bombarde différents échantillons de matière (cuivre, or, argent) avec des particules α et il déduit de son expérience que la charge positive doit occuper un tout petit volume qu'il appelle « **noyau** ».
- Après « un petit calcul » il trouve que la majorité de la masse de l'atome est concentrée dans un noyau minuscule.
- Les dimensions du noyau sont de l'ordre de 10^{-15}m (100 000 fois moins que les dimensions de l'atome) et sa charge électrique totale est un multiple entier de la charge de l'électron.



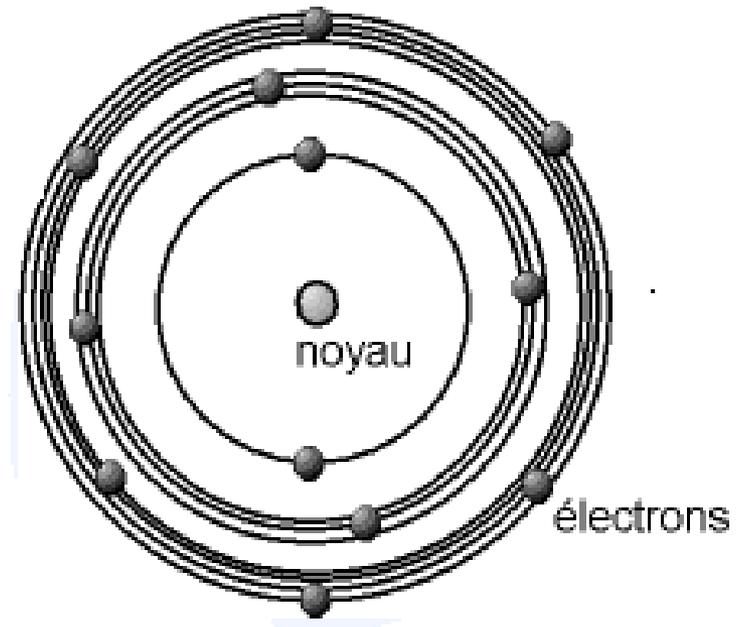
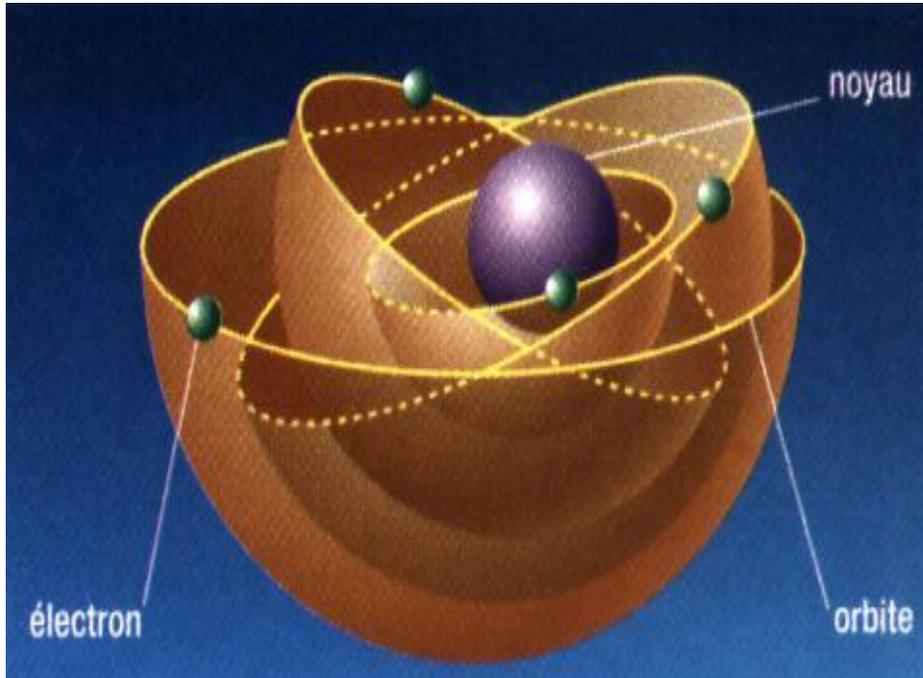


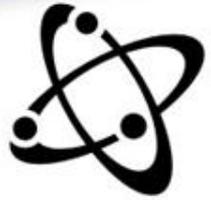
Historique

- 1922, **Niels Bohr** pense alors au **modèle planétaire** pour décrire un atome. En effet, la masse du système solaire est essentiellement concentrée dans le Soleil tout comme celle de l'atome est concentrée dans le noyau.
- Il propose comme modèle un tout petit noyau chargé positivement et comportant l'essentiel de la masse de l'atome, autour duquel les électrons décrivent des orbites.

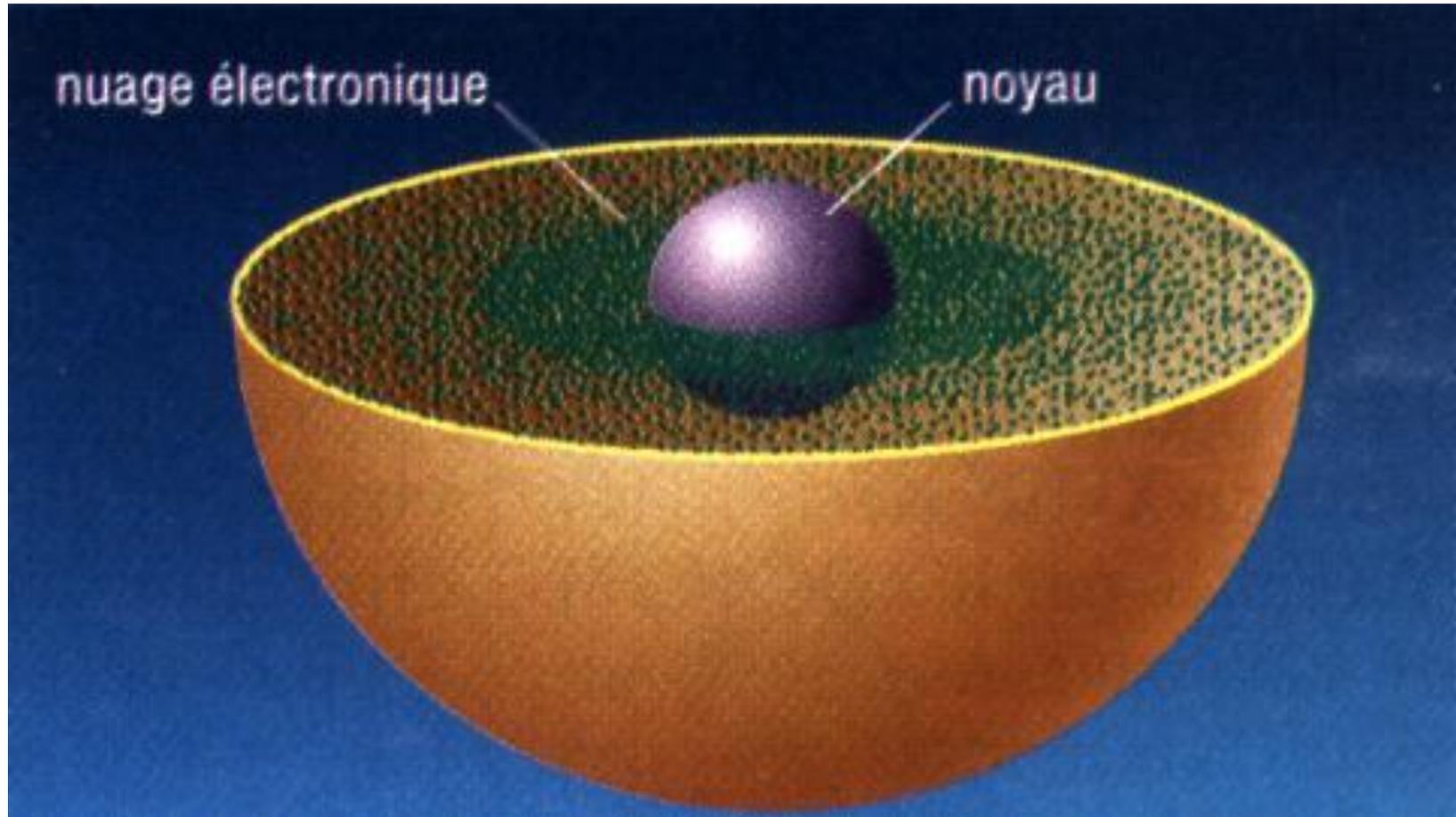


Modèle de Bohr





Le modèle actuel



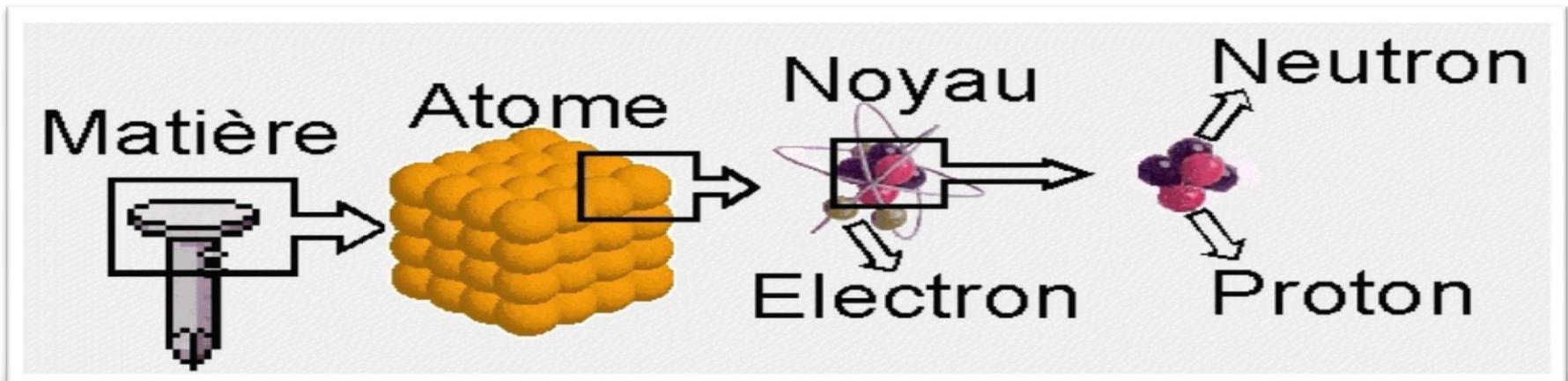


II. ATOME ET CONSTITUANTS



Définition

- ✓ Du grec « *atomos* »: que l'on ne peut diviser .
- ✓ Atome: La plus petite partie d'un corps simple pouvant se combiner chimiquement avec un autre.



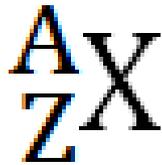


Structure de l'atome

- Atome = Noyau entouré d'électrons

Noyau : nucléons (protons+neutrons)

- un atome:



$$A = Z + N$$

X: l'élément chimique

A: nombre de masse

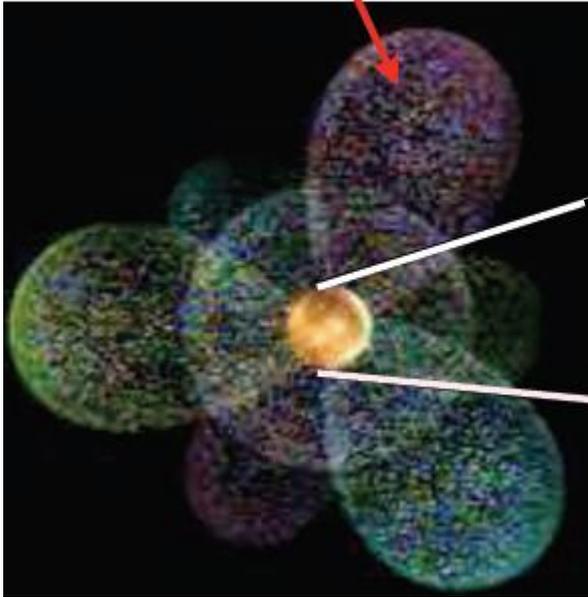
Z: numéro atomique

N: nombre de neutrons

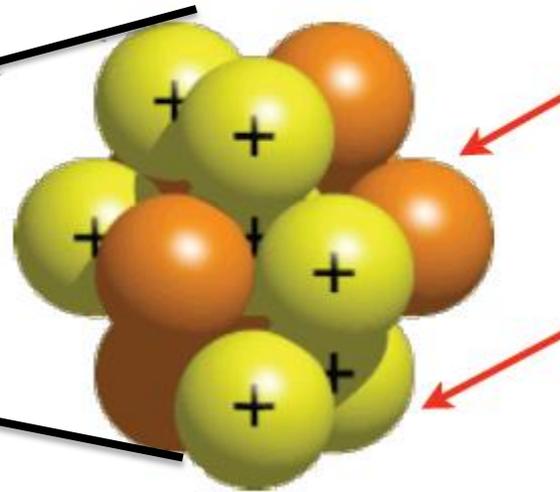


Structure de l'atome

électrons



noyau



nucléons



neutrons

protons



Structure de l'atome

- L'électron:

Masse : $m_e = 9,110 \cdot 10^{-31} \text{kg}$.

Charge : $q_e = -e = - 1,602 \cdot 10^{-19} \text{Coulomb}$.

- Le noyau:

- ✓ Le proton:

Masse: $m_p = 1,672 \cdot 10^{-27} \text{kg}$.

Charge: $q_p = + 1,602 \cdot 10^{-19} \text{Coulomb}$.

- ✓ Le neutron:

Masse: $m_n = 1,675 \cdot 10^{-27} \text{kg}$ $m_n \cong m_p$.

Charge: $q_n = 0 \text{Coulomb}$.



Structure de l'atome

- Diamètre: Atome = 10^{-10} m
 Noyau = 10^{-14} m

Le volume moyen d'un atome = 10^{12} x Volume moyen d'un noyau



Structure de l'atome

- L'atome est constitué majoritairement du **vide**;
- Sa masse est concentrée au niveau du noyau;
- L'atome est électriquement **neutre** (nombre égal de protons et d'électrons).
- **Les ions** (cations et anions) ont un nombre d'électrons différent de celui des protons.



Isotopes

- Un élément \longrightarrow plusieurs isotopes

Isotopes = particules possédant: Le même Z et un A différent.

✓ se différencie par le nombre de neutrons N

\hookleftarrow confère à quelques isotopes un certain niveau d'instabilité.

certains isotopes peuvent modifier leur structure nucléaire pour atteindre un état de plus grande stabilité, c.a.d retrouver un nombre normal de neutrons. Cette transformation s'accompagne d'émission de rayons.

\Rightarrow **isotopes radioactifs** (radio-isotopes)



III. Etat quantique d'un atome



Principe d'incertitude d'Heisenberg

Pour une particule donnée, on ne peut connaître simultanément sa position et sa vitesse de façon exacte

⇒ **probabilité de présence.**

Cette probabilité de présence est donnée par une fonction décrivant la distribution spatiale de l'électron.

Il s'agit de la **fonction d'onde** notée Ψ .



Les nombres quantiques

- Nombre quantique principal n :

- ✓ $n \geq 1$;

- ✓ Il définit un niveau d'énergie == **couche électronique**:

$n = 1$: couche K
 $n = 2$: couche L
 $n = 3$: couche M, etc

A chaque couche électronique n est associée une énergie E_n .



Les nombres quantiques

- Nombre quantique secondaire/azimutal ℓ :

- ✓ $0 \leq \ell \leq n-1$;

- ✓ Il définit un sous niveau d'énergie: sous-couche électronique;

- ✓ caractérise la forme de l'**orbitale atomique**:

$\ell = 0 \Rightarrow$ sous-couche s \Rightarrow orbitale atomique de type s

$\ell = 1 \Rightarrow$ sous-couche p \Rightarrow orbitale atomique de type p

$\ell = 2 \Rightarrow$ sous-couche d \Rightarrow orbitale atomique de type d

$\ell = 3 \Rightarrow$ sous-couche f \Rightarrow orbitale atomique de type f



Les nombres quantiques

- Nombre quantique magnétique m

- ✓ $(- \ell \leq m \leq +\ell)$;

- ✓ Il définit l'**orientation de l'orbitale** dans une même sous-couche:

$$\ell = 0 \Rightarrow m = 0$$

\Rightarrow 1 valeur de m

\Rightarrow 1 orientation

\Rightarrow 1 orbitale atomique s

$$\ell = 1 \Rightarrow m = -1, 0, 1$$

\Rightarrow 3 valeurs de m

\Rightarrow 3 orientations

\Rightarrow 3 orbitales atomique p

$$\ell = 2 \Rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2$$

\Rightarrow 5 valeurs de m

\Rightarrow 5 orientations

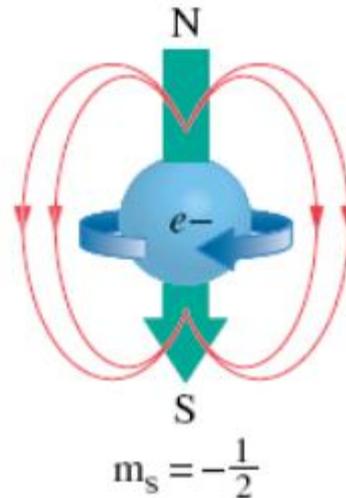
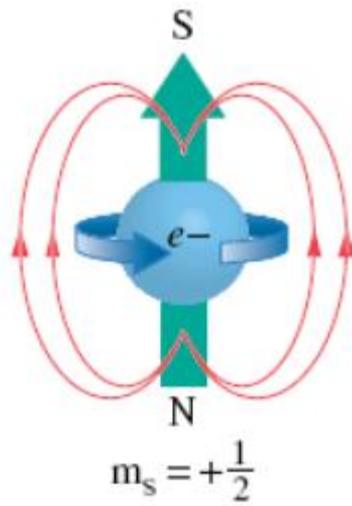
\Rightarrow 5 orbitales atomique d



Les nombres quantiques

- **Nombre quantique de spin s :**

- ✓ L'électron est animé d'un mouvement de rotation autour de lui-même \Rightarrow spin = $1/2$.
- ✓ Il peut prendre deux valeurs: $+ 1/2$ et $- 1/2$.





Représentation des orbitales atomiques

- OA représente le volume à l'intérieur duquel il y a 95% de chance de trouver l'électron.
- Chaque triplet (n, ℓ, m) définit une solution de $\Psi_{n,\ell,m}$, appelée orbitale atomique, d'énergie E_n .
- On associe à l'orbitale atomique le signe, positif ou négatif, de la fonction d'onde $\Psi_{n,\ell,m}$ correspondante.
- L'orbitale atomique existe, même vide d'électron. Elle est symbolisée par une case électronique.



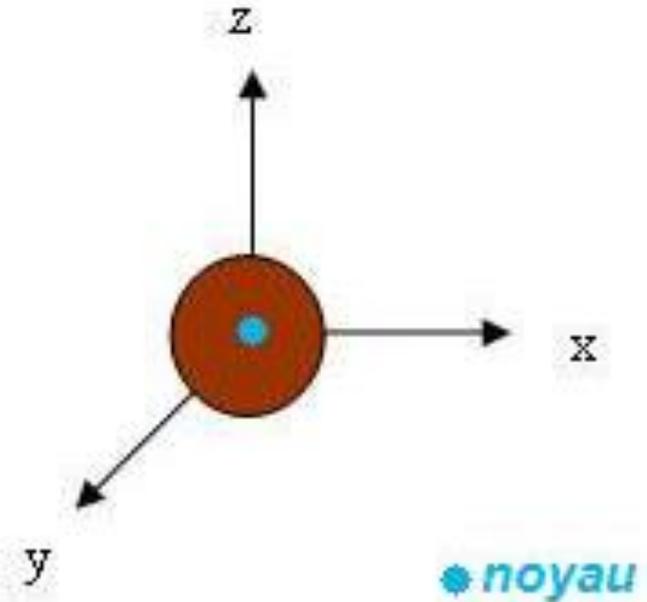
Représentation des orbitales atomiques

- Orbitales atomiques de type « s » :

- ✓ $n \geq 1$ et $\ell = 0$;

- ✓ symétrie sphérique;

- ✓ signe positif;



Quand n augmente, le volume de l'orbitale augmente.



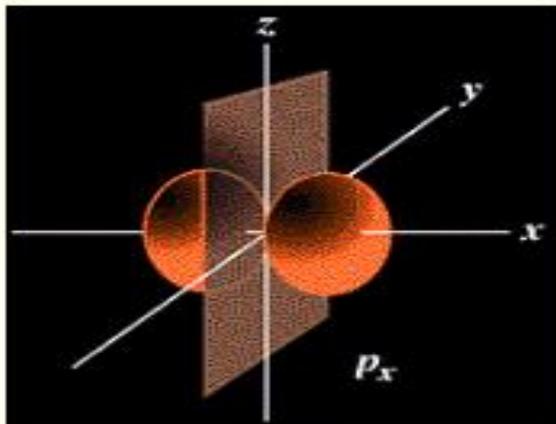
Représentation des orbitales atomiques

- Orbitales atomiques de type « p » :

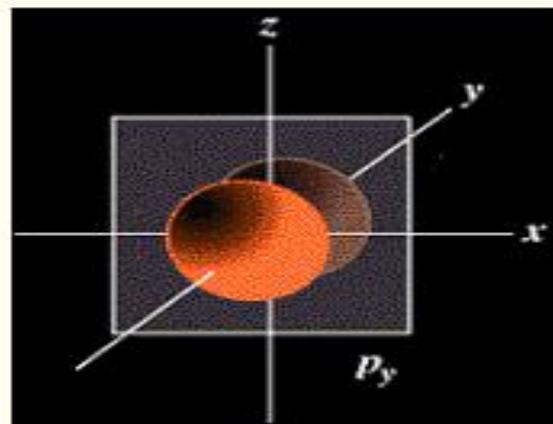
- ✓ $n \geq 2$ et $\ell = 1$;

- ✓ $m = -1, 0$ et 1 ; trois orbitales de type p dans une même sous-couche ℓ ;

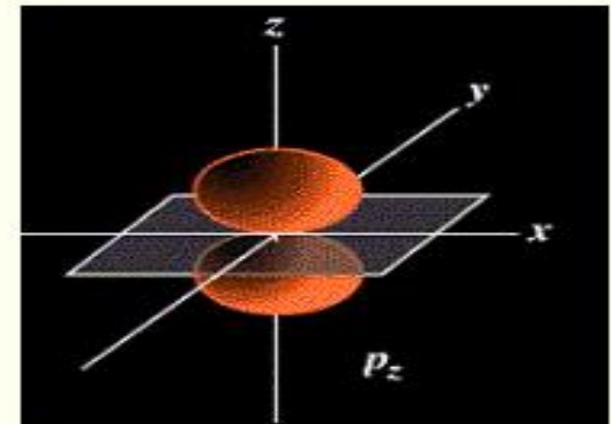
- ✓ Deux lobes; Un de signe positif et un de signe négatif:



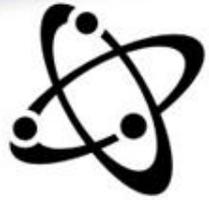
orbitale p_x



orbitale p_y



orbitale p_z

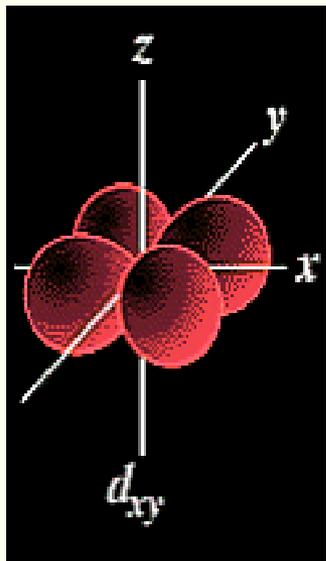


Représentation des orbitales atomiques

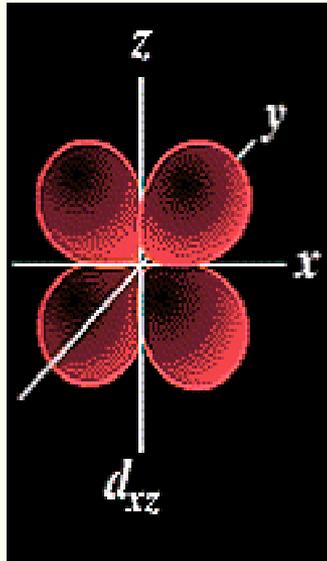
- Orbitales atomiques de type « d » :

- ✓ $n \geq 3$ et $\ell = 2$;

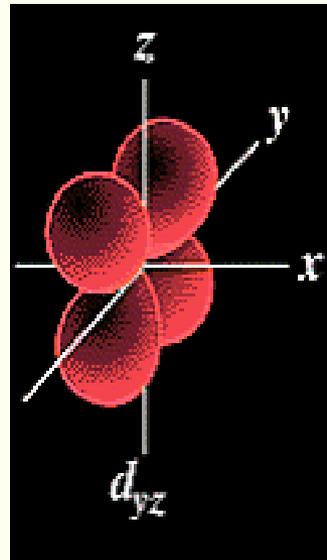
- ✓ $m = -2, -1, 0, 1, 2$; cinq orbitales de type d dans une même sous-couche ℓ :



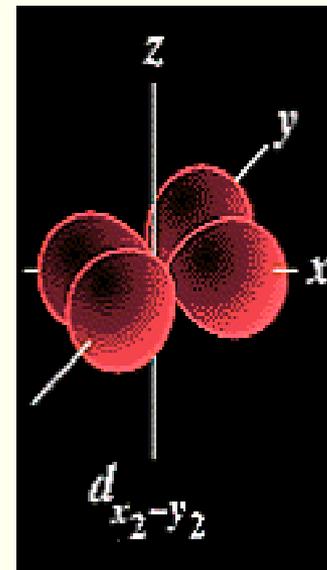
orbitale d_{xy}



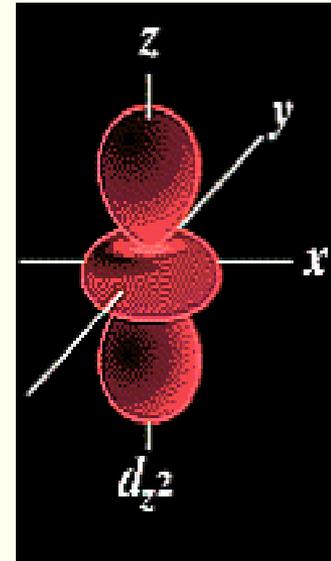
orbitale d_{xz}



orbitale d_{yz}



orbitale $d_{x^2-y^2}$



orbitale d_{z^2}



IV. Configuration électronique de l'atome



Principes fondamentaux

Principe de stabilité

Les electrons
vont se placer
dans les états
énergétiques
les plus faibles

L'atome sera
dans son état
fondamental

Sa stabilité
est maximale



Principes fondamentaux

- ✓ Principe d'exclusion de Pauli
- ✓ Principe de stabilité, Règle de Klechkowski
- ✓ Règle de Hund
- ✓ Règle de l'octet



Configuration électronique de l'atome

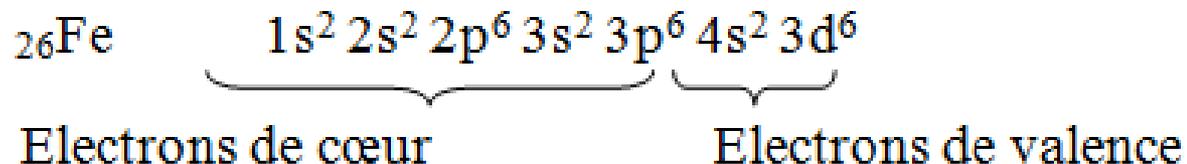
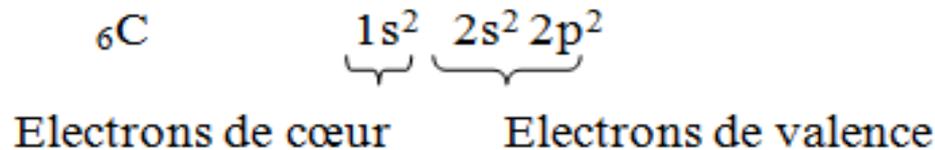
- Electrons de cœur et électrons de valence :

- ✓ électrons de la couche de valence /externe:

- la couche de n le plus grand \implies (blocs s et p);

- la couche de n le plus grand + la sous-couche $(n-1)$ \implies (bloc d)

- ✓ électrons de cœur: e^- des autres couches de plus bas niveau.





Configuration électronique de l'atome

- Principe d'exclusion de Pauli

- ✓ Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir le même état quantique;
- ✓ Deux électrons contenus dans une même orbitale atomique (n , ℓ et m identiques) diffèrent par leur nombre quantique de spin.
- ✓ Une orbitale ne pouvant contenir que deux électrons au maximum de spins opposés, ils sont dits antiparallèles ($\uparrow\downarrow$).



Configuration électronique de l'atome

• Principe d'exclusion de Pauli

On rencontre alors trois cas :

n, ℓ, m → OA vide (lacune électronique)

↑ OA à moitié pleine

- 1 e^- célibataire
- $m_s = 1/2$

↑↓ OA pleine

- 2 e^- appariés
- Spins antiparallèles



Configuration électronique de l'atome

- Principe d'exclusion de Pauli

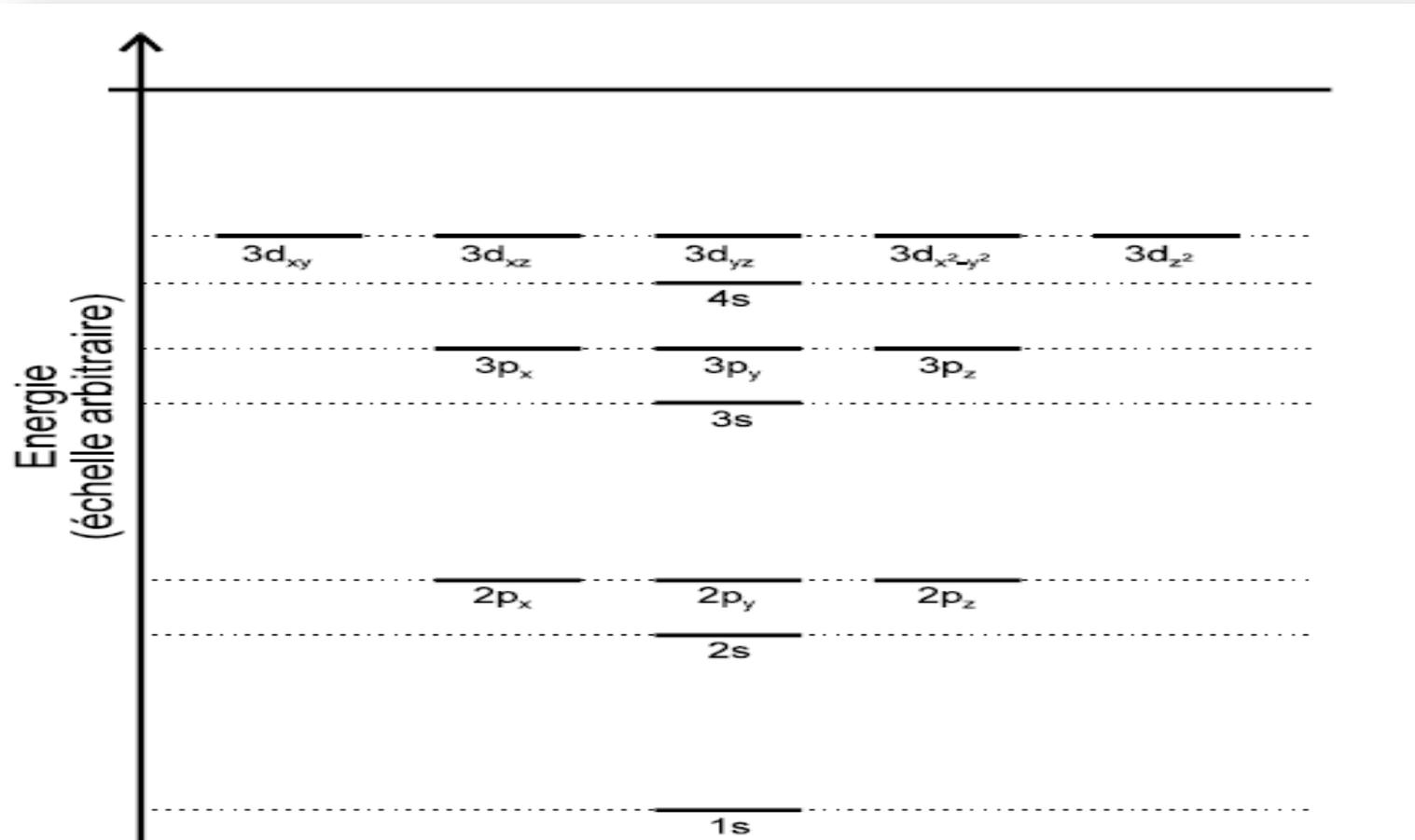
Par conséquent, on aura au maximum $2n^2$ électrons pour chaque couche n :

n		<i>nombre maximum d'électrons</i>									
1	<table border="1"><tr><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓	2								
↑↓											
2	<table border="1"><tr><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	8					
↑↓	↑↓	↑↓	↑↓								
3	<table border="1"><tr><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td><td>↑↓</td></tr></table>	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	18
↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓			



Configuration électronique de l'atome

- Principe de stabilité, Règle de Klechkowski





• Principe de stabilité, Règle de Klechkowski

A l'état fondamental, les électrons d'un atome occupent les niveaux de plus basse énergie dépendant des nombres n et l :

$E_{n,l}$ augmente avec $(n+l)$ et avec n quand $(n+l)$ est constant.

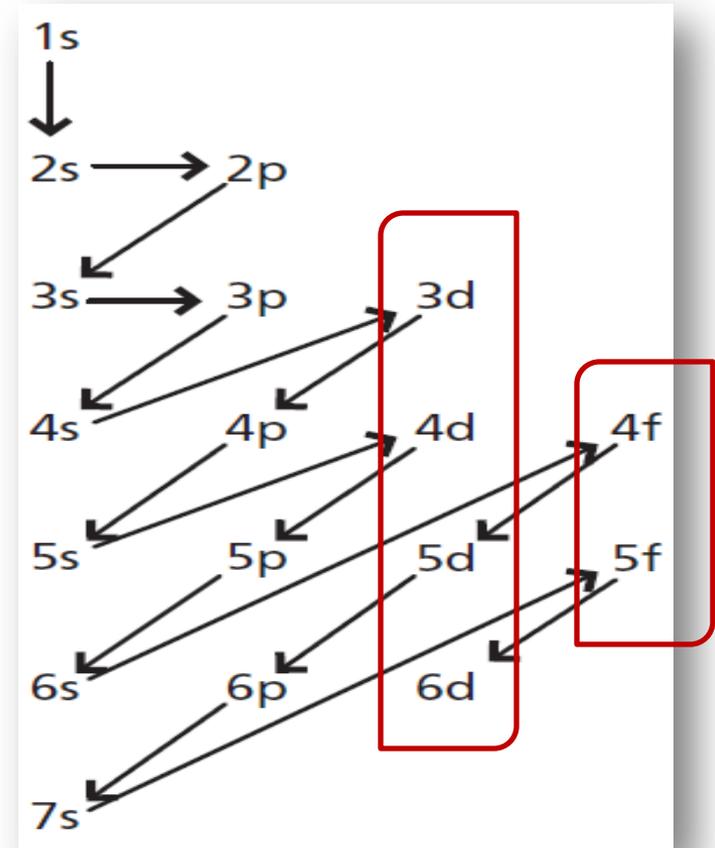


Diagramme de Klechkowski



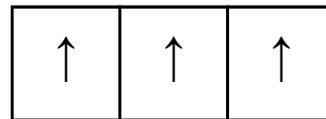
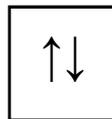
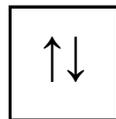
Configuration électronique de l'atome

• Règle de Hund

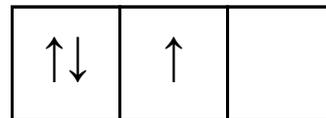
✓ Pour un niveau énergétique donné (même sous-couche), les électrons doivent occuper :

- Le maximum d'orbitales atomiques de même énergie ;
- Avec des spins + 1/2 (\uparrow) s'ils sont célibataires.

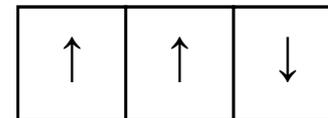
Exemples : ${}_{7}\text{N}$ $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$



pas



ni





Configuration électronique de l'atome

- *Règle de l'octet*

Un atome ou un ion qui présente une structure électronique similaire à celle des **gaz rares** ou $s^2 p^6$ (soit 8 électrons = octet sur sa couche de valence) présentera une stabilité particulièrement importante.

Un atome cherche à acquérir la structure électronique du gaz rare le plus proche de lui dans la classification périodique.



Configuration électronique des ions

- *Cation:*

ion positif, qui se forme à partir d'un atome qui perd des électrons

les électrons de la dernière couche disparaissent en priorité

Exp:

Na, $z=11$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Na^+

$1s^2 2s^2 2p^6$

- *Anion:*

ion négatif qui se forme à partir d'un atome qui gagne des électrons

Exp:

F, $z=9$

$1s^2 2s^2 2p^5$

F^-

$1s^2 2s^2 2p^6$



V. Propriétés chimiques périodiques



Classification périodique des éléments

- La classification périodique est basée sur le classement des éléments par numéro atomique Z croissant.
- Elle est constituée de 7 lignes appelées **périodes** et de 18 colonnes appelées **familles**.
- Le numéro atomique Z croît de gauche à droite dans une période et de haut en bas dans une famille.



Classification périodique des éléments

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H	2 He																
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57-71	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89-103	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo

Tableau Périodique Copyright du design et interface © 1997 Michael Dayah. Ptable.com Dernière mise à jour 30 sept. 2012

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



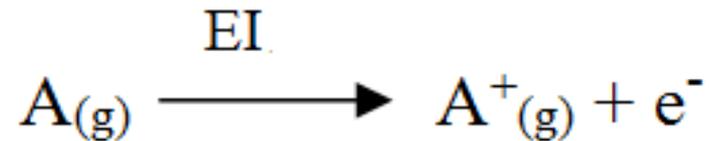
Notion de valence et règle d'octet

- **La valence: 1 à 4 (voir 5 ou 6).** nombre de liens pouvant se former via une liaison atomique dépend de nombre d'électrons de la couche externe.
- Stabilité \implies **règle d'octet** \iff configuration électronique des gaz rares.



Energie d'ionisation EI

- **EI**: l'énergie qu'il faut **fournir** pour **arracher** un électron périphérique à un élément à l'état gazeux.



- Elle varie de la manière suivante dans la classification

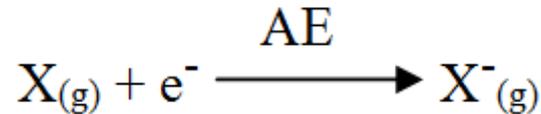


La variation dans une colonne est due à l'effet de distance.
La variation dans une période est due à l'effet de charge.

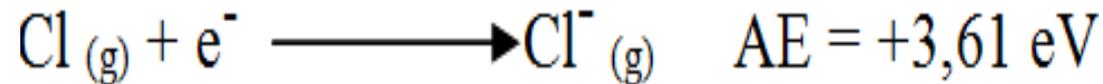


Affinité électronique AE

- **AE**: l'énergie **dégagée/absorbée** lorsqu'un électron est capté par un atome à l'état gazeux.



- $AE > 0 \Rightarrow$ AE bonne : la fixation de l'électron sur l'atome est une réaction exothermique (cas des halogènes ($ns^2 np^5$)).



- $AE < 0 \Rightarrow$ AE mauvaise: la fixation de l'électron sur l'atome est une réaction endothermique (cas des alcalino-terreux ns^2).



< 0

AE ↗

> 0

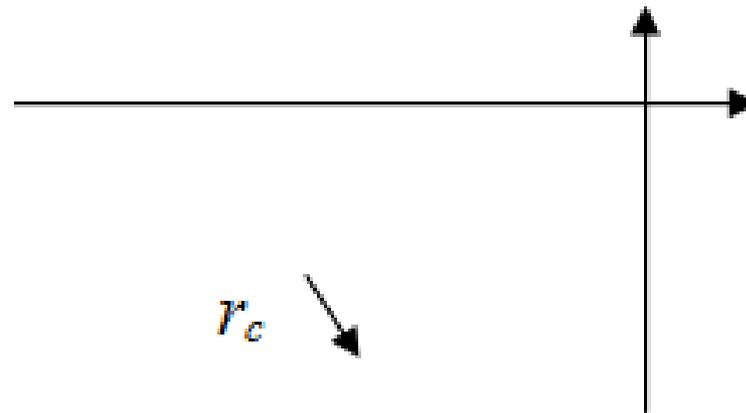
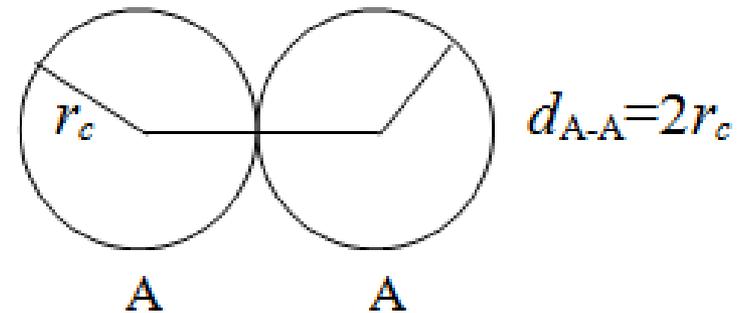


Rayon covalent r_c

- Le rayon atomique = la moitié de la distance **d** qui **sépare** deux noyaux d'une molécule **diatomique homonucléaire**, liés par une liaison **covalente simple**.

$$\blacktriangleright r_c (A^+) < r_c (A) < r_c (A^-);$$

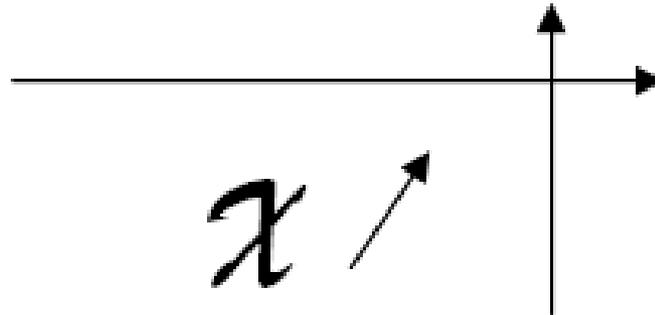
$$\blacktriangleright r_c (A^{2+}) < r_c (A^+).$$





Electronégativité χ

- χ : l'**aptitude** d'un élément à **attirer** vers lui les électrons au sein d'une liaison covalente.
- Différence d' χ entre deux atomes de la liaison covalente \Rightarrow **polarisation** \Rightarrow apparition de charge partielle δ :



Classification périodique																	
H 1,0																	He 4,0
Li 6,9	Be 9,0	Masses molaires atomiques										B 10,8	C 12,0	N 14,0	O 16,0	F 19,0	Ne 20,2
Na 23,0	Mg 24,3											Al 27,0	Si 28,1	P 31,0	S 32,1	Cl 35,5	Ar 39,9
K 39,1	Ca 40,1	Sc 45,0	Ti 47,9	V 50,9	Cr 52,0	Mn 54,9	Fe 55,8	Co 58,9	Ni 58,7	Cu 63,5	Zn 65,4	Ga 69,7	Ge 72,6	As 74,9	Se 79,0	Br 79,9	Kr 83,8
Rb 85,5	Sr 87,6	Y 88,9	Zr 91,2	Nb 92,9	Mo 95,9	Tc 99	Ru 101,1	Rh 102,9	Pd 106,4	Ag 107,9	Cd 112,4	In 114,8	Sn 118,7	Sb 121,8	Te 127,6	I 126,9	Xe 131,3
Cs 132,9	Ba 137,3	La à Lu	Hf 178,5	Ta 180,9	W 183,9	Re 186,2	Os 190,2	Ir 192,2	Pt 195,1	Au 197,0	Hg 200,6	Tl 204,4	Pb 207,2	Bi 209,0	Po 210	At 210	Rn 222
Fr 223	Ra 226	Ac à Lw															
Lanthanides			La 138,9	Ce 140,1	Pr 140,9	Nd 144,2	Pm 145	Sm 150,4	Eu 152,0	Gd 157,3	Tb 158,9	Dy 162,5	Ho 164,9	Er 167,3	Tm 168,9	Yb 173,0	Lu 175,0
Actinides			Ac 227	Th 232,0	Pa 231,0	U 238,0	Np 237,0	Pu 242	Am 243	Cm 247	Bk 247	Cf 251	Es 254	Fm 253	Md	No	Lw

Légende :

Métaux	Fond bleuté	Non métaux	Fond orangé	Artificiels	Caractères blancs
Solides	Caractères noirs	Liquides	Caractères verts	Gaz	Caractères bleus



Références bibliographiques

- V.Schore, P.Depovere. Traité de Chimie organique. Département De Boeck Université. 3^{ème} Edition De Boeck, Paris, Bruxelles, (1999).
- Paul Arnaud, B. Jamart, J. Bodiguel, N. Brosse. Chimie organique, Cours avec 350 questions et exercices corrigés . 18^{ème} Edition Dunod, Paris, (2009).
- John McMurry, Eric Simanek. Chimie organique : les grands principes, Cours et exercices corrigés. 2^{ème} Edition Dunod, Paris, (2009).
- H. Galons. Chimie organique: l'essentiel du cours, exercices corrigés. Pharmacie, Médecine: 1^{ère} et 2^{ème} années. Edition Masson, Paris, (2000).