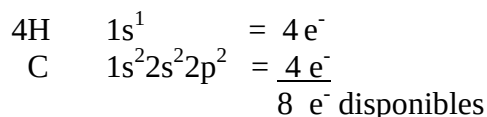
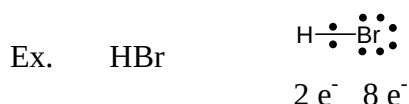


2) Compter le nombre d'électrons de valence disponibles.

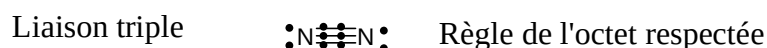
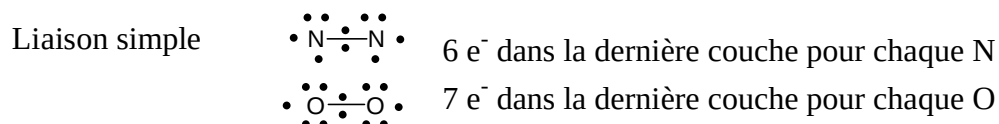
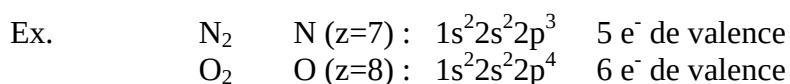


3) Règle de l'octet.

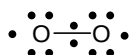
Les gaz rares possèdent 8 e^- sur la dernière couche (sauf He qui en possède 2) ce qui leur confère une stabilité particulière. Ils ont une réactivité chimique très faible. Tous les autres éléments ne possèdent pas 8 e^- sur leur dernière couche, ceux-ci auront donc tendance à former des molécules de manière à atteindre la configuration électronique de type gaz rares.



Parfois, les électrons de valence sont tels que des structures avec des liaisons simples ne satisfont pas la règle de l'octet. Dans ce cas, nous avons besoin des liaisons doubles ou triples.



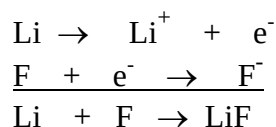
Il existe des exceptions à cette règle notamment l'oxygène de l'air O_2 que nous respirons est en fait un biradical :



La liaison ionique

Cette liaison résulte d'un transfert d'électron(s). Par exemple, dans la formation de LiF, l'atome de Li a 2 e^- dans sa couche interne et 1 e^- sur sa couche externe ou couche de valence; la perte d'un électron laisserait le lithium avec une couche externe complète de 2 e^- . L'atome de F a 2 e^- dans la couche interne et 7 e^- dans sa couche de valence. Le gain d'un électron donnerait au fluor une couche externe complète avec 8 e^- . Le fluorure de lithium se forme donc par le transfert d'un électron du Li au F. Le lithium a maintenant une charge (+) et le fluor une charge (-). L'attraction électrostatique entre ions de charge opposée s'appelle

liaison ionique. Elle est typique dans les sels formés par combinaison des éléments métalliques (électropositifs) de la gauche du tableau périodique avec les éléments non-métalliques (électronégatifs) de droite.

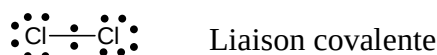


La liaison covalente

Une liaison covalente peut être décrite comme la mise en commun d'électrons par deux atomes.

Les atomes forment des liaisons pour acquérir la configuration électronique des gaz rares (règle de l'octet).

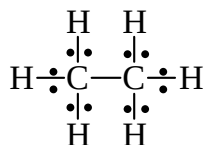
Pour acquérir la configuration d'un gaz rare, le chlore par exemple, a deux solutions: soit il arrache un électron à un autre atome (par exemple le Na), soit il met en commun son électron avec celui d'un autre atome de chlore.



Selon l'atome auquel il est lié, l'atome de chlore peut former soit une liaison ionique soit une liaison covalente. Il doit cette propriété à sa position sur le tableau périodique.

Le carbone, par contre, n'a pas le choix : perdre 4 électrons pour ressembler à l'hélium ou gagner 4 pour ressembler au néon lui coûte trop d'énergie, seules les liaisons covalentes lui sont autorisées.

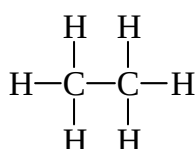
Ex. $\text{CH}_3\text{-CH}_3$ (éthane)



L'électronégativité

Elle est définie comme la tendance relative d'un atome à attirer à lui les électrons d'une liaison. Plus la différence d'électronégativité est forte entre deux atomes, plus la liaison est dite polarisée. Les éléments le plus électronégatifs se trouvent dans le coin supérieur droit du tableau périodique (F, O, N, Cl) et les électropositifs se trouvent à gauche de celui-ci.

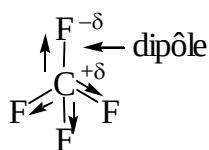
Ex. Ethane



Atome	EN
C	2.55
H	2.10

Différence faible:
composé apolaire

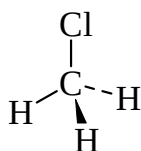
Ex. CF₄



Atome	EN
F	3.98
C	2.55

Forte différence:
chaque liaison est
très polaire

Dans les liaisons polarisées, le centre de la densité électronique est déplacé vers l'atome le plus électronégatif. Cependant CF₄ est une molécule complètement apolaire ! La géométrie de la molécule provoque l'annulation globale des dipôles. Mais dans le cas de chlorure de méthyle (CH₃Cl) la polarité de la liaison C-Cl fait que cette molécule est polaire ($\mu = 1.86 \text{ D}$, D= Debye).

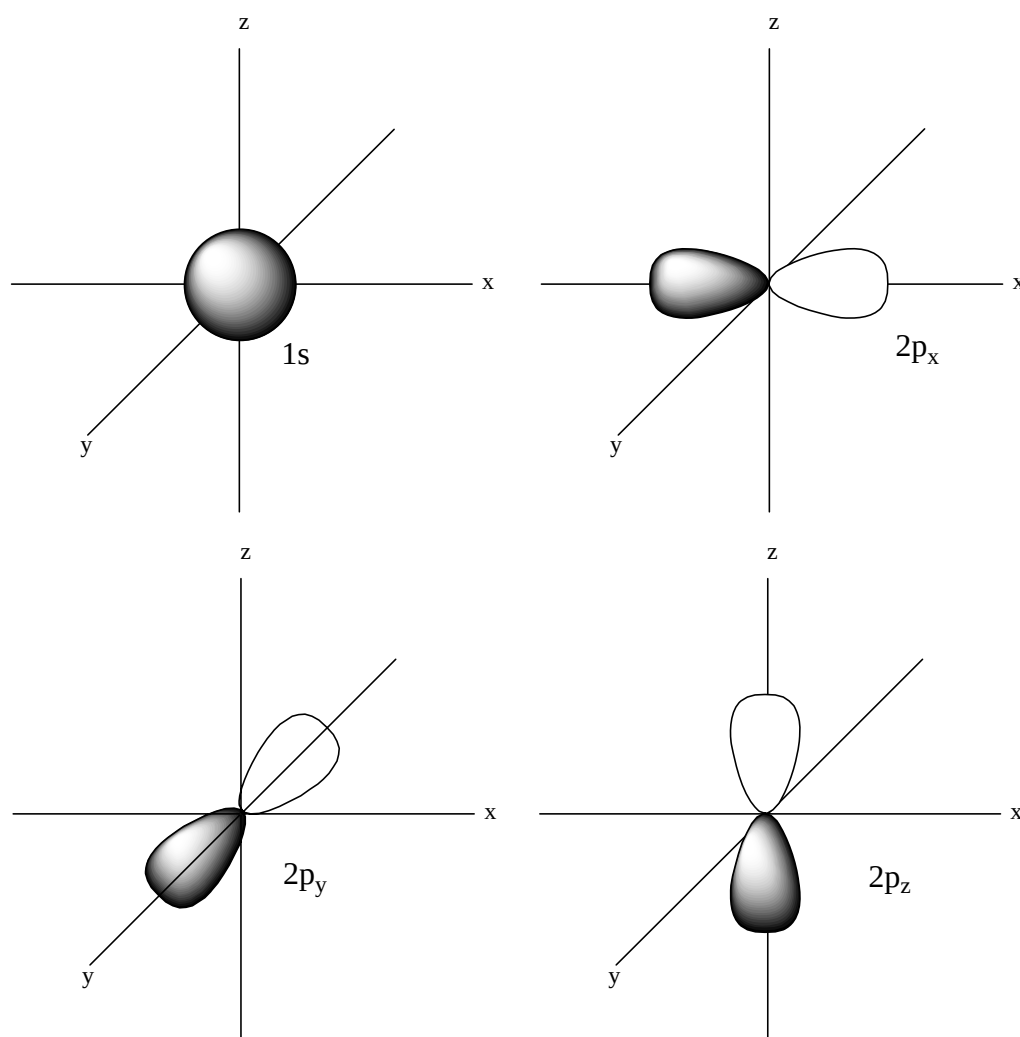


Donc, la polarité d'une molécule ne dépend pas seulement de la polarité des liaisons individuelles, mais aussi de la structure de la molécule.

L'état hybridé

Pour expliquer l'existence et la géométrie des molécules, une approche de la mécanique quantique a conduit au concept d'hybridation.

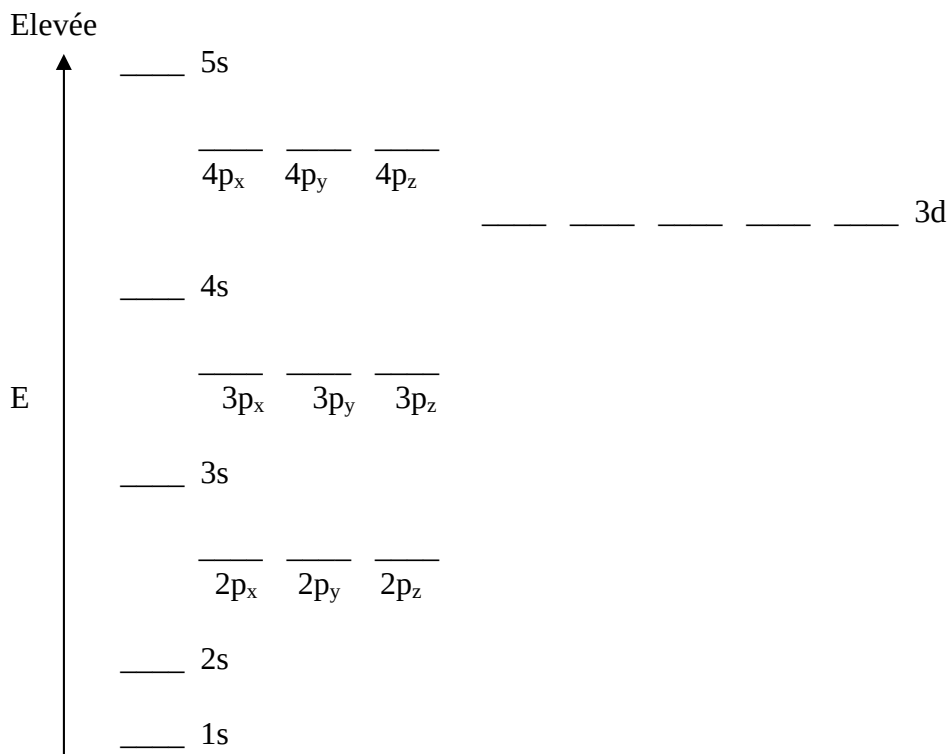
Les orbitales atomiques sont des solutions d'équations d'ondes et elles présentent des formes caractéristiques. Lorsqu'on trace le graphe des fonctions d'ondes, on constate que celles-ci ont l'apparence de sphères ou de lobes avec des amplitudes positives et négatives, ainsi que des points d'inflexion (nœuds) où les valeurs positives deviennent négatives et vice-versa.



Le sigle 1s indique la forme et le nombre de nœuds de l'orbitale. L'orbitale 1s présente une symétrie sphérique et n'a pas de nœud. L'orbitale 1s est la fonction d'onde dont l'énergie est la plus basse. L'orbitale 2s est aussi sphérique, mais elle est plus grande, de plus haute énergie et possède un nœud.

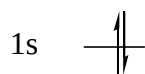
Les orbitales $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$ consistent en deux sphères adjacentes ou lobes qui ressemblent à un « huit tridimensionnel ». Elles sont de même énergie et sont aussi appelées *orbitales dégénérées*. Les deux lobes de chaque orbitale sont de signes opposés et sont séparés par un plan nodal perpendiculaire à l'axe de l'orbitale.

Le diagramme d'énergie nous permet de placer les électrons dans les orbitales atomiques :

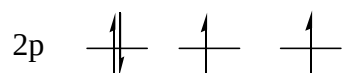


Faible

- 1) Les orbitales de plus faible énergie sont remplies avant celles de plus haute énergie.
- 2) **Le principe d'exclusion de Pauli** stipule que deux électrons ne peuvent pas avoir leurs quatre nombres quantiques (n, m, l et s) égaux ce qui veut dire que les orbitales ne peuvent être occupées que par deux électrons au maximum et ils doivent différer par l'orientation de leur spin.
Une orbitale est donc remplie lorsqu'elle est occupée par deux électrons de spins opposés.

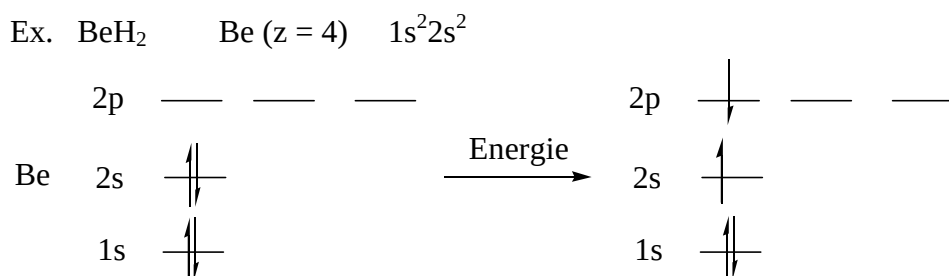


- 3) **La règle de Hund** donne des instructions quant à l'ordre selon lequel les orbitales dégénérées sont remplies : elles sont remplies d'abord par 1 e⁻ du même spin et ensuite avec un spin opposé à celui de la première série.

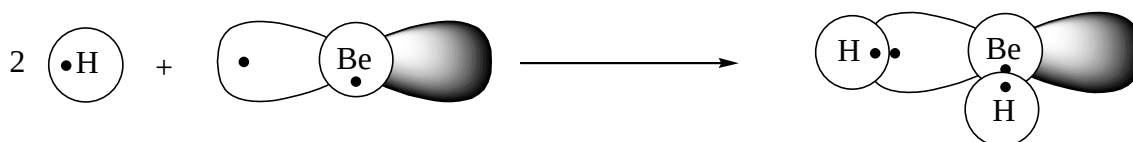


Orbitales hybrides

En général, l'image du recouvrement des orbitales atomiques illustre de manière satisfaisante la liaison dans le cas de molécules diatomiques. Néanmoins, ce schéma ne s'applique pas aux systèmes plus compliqués. C'est pour cela que nous parlons de formation d'orbitales hybrides.



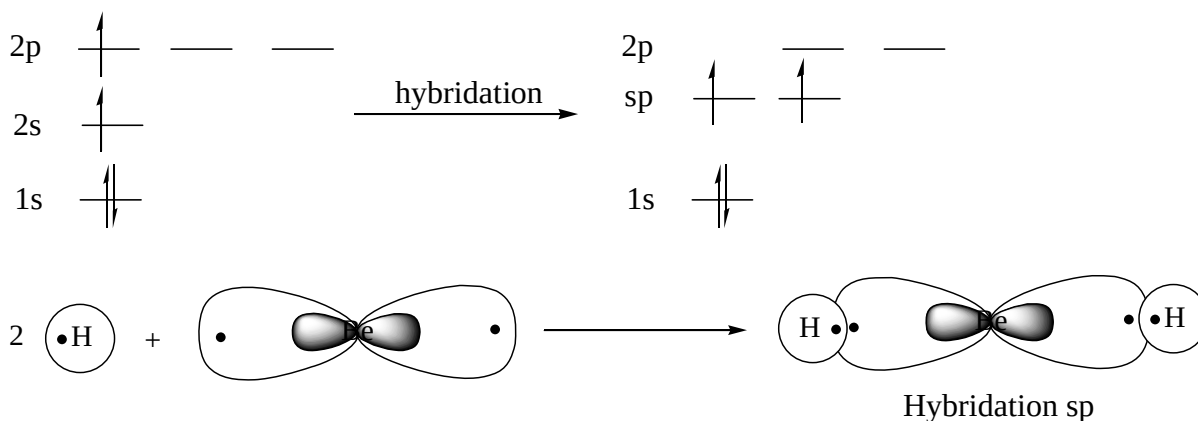
Les orbitales atomiques du Be sont pleines. Il ne devrait donc pas pouvoir former de liaison. Cependant le déplacement d'un électron vers une orbitale de plus haute énergie permet d'atteindre un état dans lequel le Be va pouvoir former des liaisons avec d'autres atomes.



FAUX

La molécule de BeH_2 ne présente pas une géométrie coudée. La théorie prévoit que des composés tels que BeH_2 doivent présenter des structures linéaires. Des expériences confirment cette prédiction.

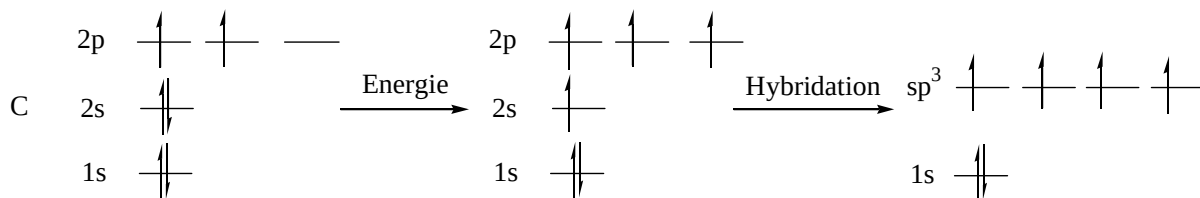
Comment peut-on rendre compte de cette géométrie en terme d'orbitales ? Pour répondre à cette question, il faut faire appel à une approche de la mécanique quantique appelée **hybridations des orbitales**. Tout comme les OA d'atomes différents peuvent se mélanger pour former des OM, de la même manière les OA d'un même atome peuvent se combiner pour donner naissance à des **orbitales hybrides**.



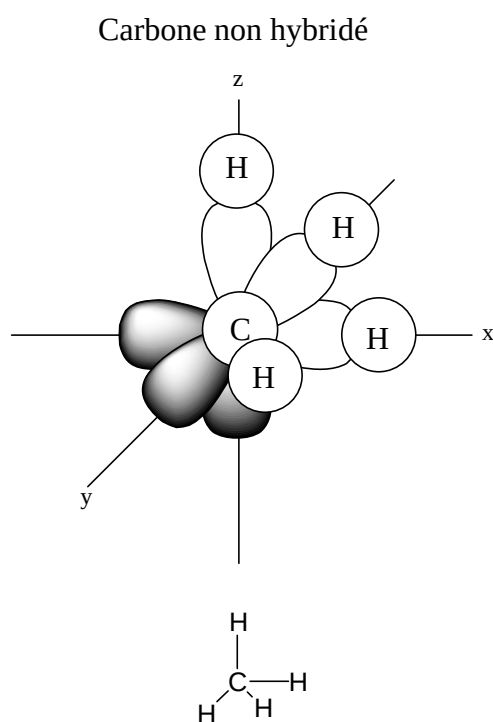
L'hybridation sp permet une géométrie linéaire de la molécule.

Le carbone :

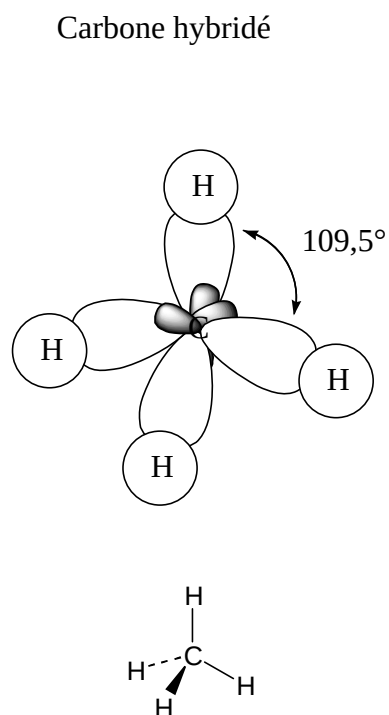
Ex. CH_4 $\text{C} (z=6)$ $1s^2 2s^2 2p^2$



L'hybridation sp^3 permet une géométrie tétraédrique de la molécule de CH_4 .

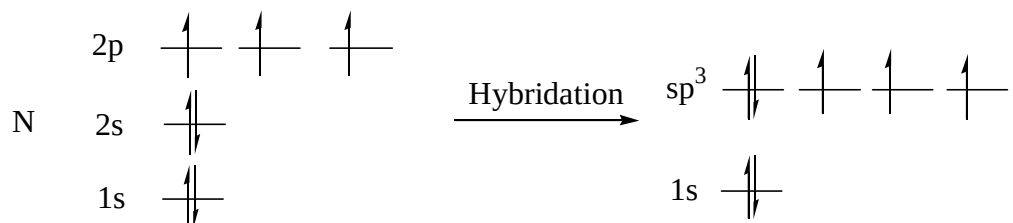


Ne correspond pas à la réalité !

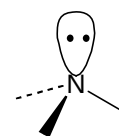


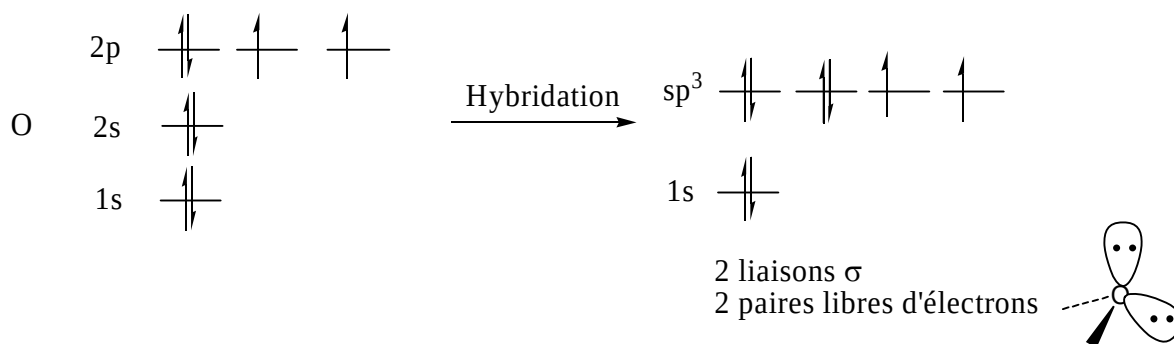
Correspond à la réalité !

L'hybridation sp^3 ne permet que des liaisons σ (sigma)

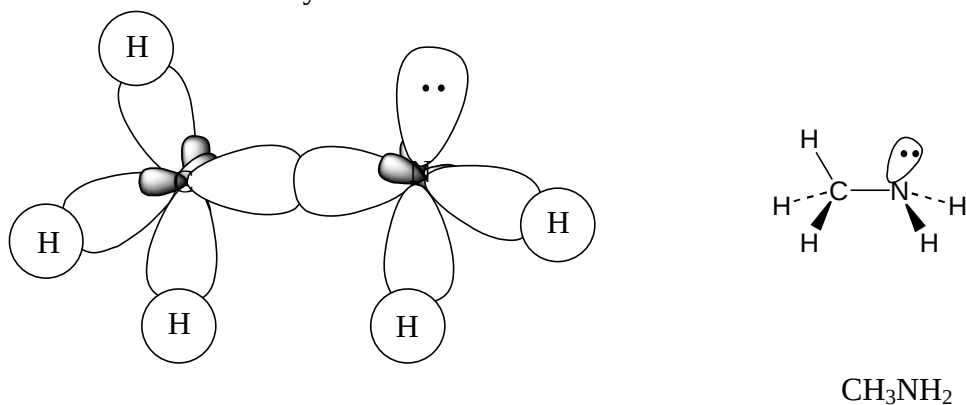


3 liaisons σ
1 paire libre d'électrons

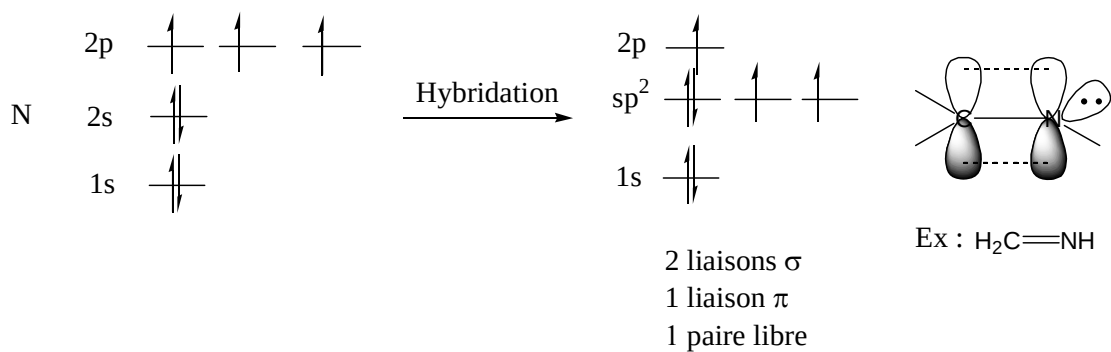
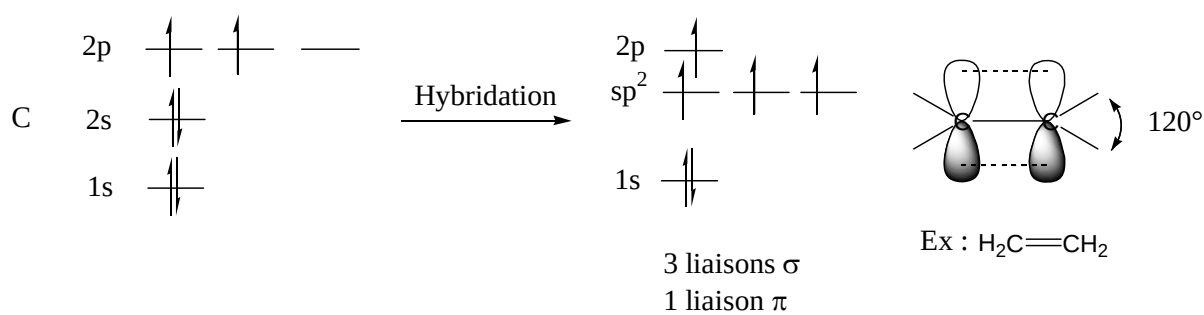


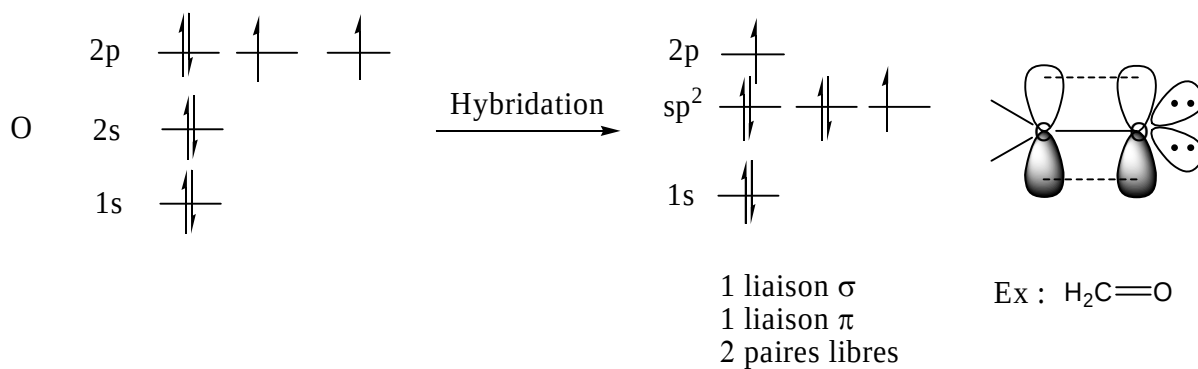


Les liaisons σ sont un recouvrement axial entre les atomes formant la liaison. Les électrons se situent entre les deux noyaux.



L'hybridation sp² (liaisons $\sigma + \pi$)

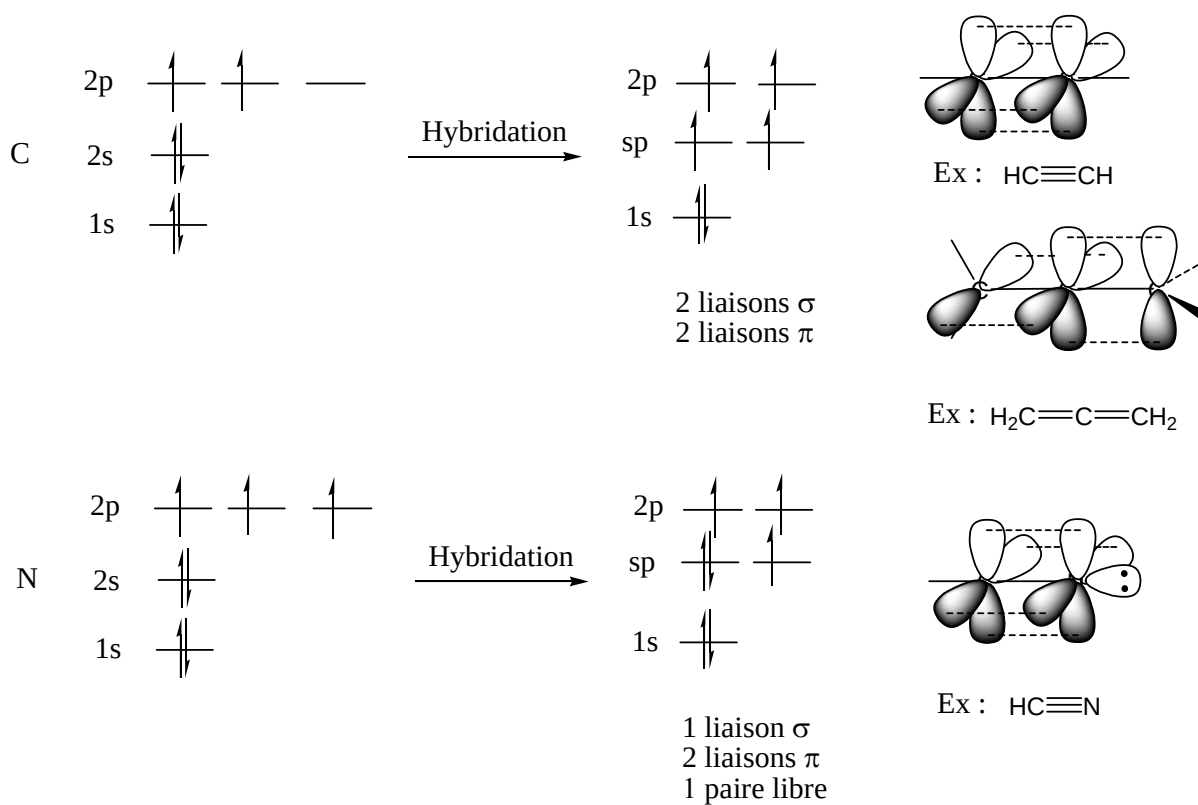




Lorsqu'un atome est dans l'état d'hybridation sp^2 les liaisons σ ou la (les) paire(s) libre(s) présentent une géométrie trigonale planaire.

Les liaisons π ont un recouvrement latéral des orbitales p. Une liaison π ne peut exister qu'avec une liaison σ . La liaison π empêche la rotation autour de la liaison.

L'hybridation sp (liaisons $\sigma + \pi$)



L'état d'hybridation sp donne une structure linéaire.