

Série N° 3 — semaine du 23 Septembre 2025  
**Molécules, réactions et liaisons atomiques**

1. **Vrai ou faux ?**

	Vrai	Faux
a. Entre le carbone et l'oxygène, on a une liaison de type ionique.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
b. Dans une liaison covalente, les atomes partagent les électrons entre eux.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
c. Les liaisons ioniques sont directionnelles, alors que les liaisons covalentes ne le sont pas.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
d. Soient les électronégativités suivantes : H (2.1), C (2.5), N (3.0), O (3.5). Une liaison N-H est plus polaire qu'une liaison C-O.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
e. Les liaisons fortes sont de l'ordre de quelques centaines de kJ/mol, ce qui correspond à quelques électronvolts.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
f. Une liaison polaire est un dipôle électrique qui peut interagir avec un autre dipôle d'une autre molécule et ainsi créer une interaction intermoléculaire.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
g. Si on considère le potentiel de Lennard Jones, la distance d'équilibre entre deux atomes correspond au minimum d'énergie potentielle.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
h. L'affinité électronique donne la variation d'énergie de l'atome lors de la capture d'un électron, et est donnée en électron-Volts, alors que l'électronégativité est une valeur sans unité qui décrit la force d'attraction d'un atome engagé dans une liaison avec un autre atome.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

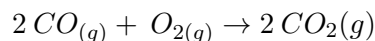
2. **Répondez aux questions suivantes**

- a. Qualifier la nature et la polarité des liaisons chimiques (ionique, covalente non polaire, covalente polaire, métallique, ion-dipôle...) dans les corps suivants :  
*HBr*, *Ti* avec lui même, *KF*, la liaison *C - C* dans *CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>*,  
*BaCl<sub>2</sub>*, *CO*, *O<sub>2</sub>*, *Cl<sub>(aq)</sub><sup>-</sup>*
- b. Quelle est l'hybridation des atomes de Carbone dans l'éthylène, le méthane et le benzène (*C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>*) ?

- c. Et dans la molécule d'éthyne (ou acétylène  $C_2H_2$ ) ?
- d. Et dans le diamant et le graphite ? Quelle influence cela peut-il avoir sur leur conductivité des électrons ?
- e. Pourquoi les métaux conduisent-ils l'électricité ?

### 3. Dioxyde de Carbone

La transformation du monoxyde de carbone en dioxyde de carbone se fait naturellement dans l'atmosphère par le biais de l'oxygène. La réaction chimique s'écrit comme suit :



L'enthalpie de cette réaction est :  $\Delta H = -566 kJ$ . On vous donne aussi l'énergie de la liaison O=O dans l'oxygène qui est  $E_{(O=O)} = 498 kJ/mol$ , et l'énergie de la liaison C=O dans le  $CO_2$  qui est  $E_{(C=O)} = 799 kJ/mol$ . Estimez à partir de ces données quelle est l'énergie de la liaison  $C \equiv O$  dans la molécule de CO. Indice : L'enthalpie de la réaction correspond à l'énergie pour briser les liaisons  $C \equiv O$ , et  $O_2$ , plus l'énergie pour former les liaisons C=O du  $CO_2$ . Souvenez vous aussi que l'enthalpie de bris de liaisons est positive, et celle de formation de liaisons est négative (et vaut l'opposé de l'énergie de bris de cette liaison).

### 4. Potentiel de Lennard Jones

Une liaison atomique correspond à un équilibre entre les forces d'attraction et de répulsion entre les atomes. Ces forces, tout comme la force de rappel d'un ressort par exemple, sont conservatives, c'est à dire qu'elles peuvent s'exprimer comme la dérivée d'une énergie potentielle  $E(r)$  (considérée comme dépendante d'une seule variable de l'espace), selon la relation

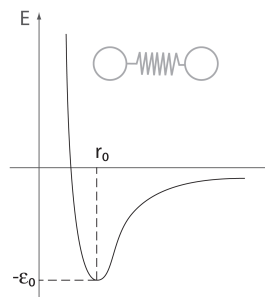
$$F(r) = F(r)\vec{e}_r$$

avec  $F(r) = -dE/dr$ . En vertu du principe d'action/réaction, si la force de rappel est donnée par  $F$ , alors la force extérieure à appliquer pour maintenir l'atome à une position  $r$  est donnée par  $F_{ext} = -F$ . A la position d'équilibre, les composantes attractive et répulsive se compensent et la force  $F$  vaut zéro. L'énergie potentielle correspondante est alors minimale. Dans cet exercice, on va voir pourquoi le potentiel de Lennard-Jones présenté en cours modélise bien l'interaction entre deux atomes.

- a. On considère l'énergie potentielle d'une liaison exprimée sous la forme  $E(r) = A/r^\alpha$ , avec  $\alpha > 0$ . Quel doit être le signe de la constante  $A$  pour avoir une force attractive (pour laquelle l'énergie potentielle **augmente** avec la distance  $r$ ) ?

- b. Montrer qu'il ne peut pas y avoir de position d'équilibre pour une telle énergie.
- c. On considère maintenant une énergie composée de deux termes :  $E(r) = A/r^\alpha + B/r^{2\alpha}$ , avec A et B non nuls, et  $\alpha > 0$ . Pour avoir une position d'équilibre à une distance  $r = r_0$ , quelle relation doit-on avoir entre A, B,  $\alpha$  et  $r_0$ ? Exprimer A en fonction des autres paramètres. Qu'en déduire sur le signe de A et B, et qu'est-ce que cela signifie physiquement ?
- d. On considère maintenant le potentiel de Lennard-Jones, en posant que  $\varepsilon_0 = \frac{B}{r_0^{2\alpha}}$ , et en choisissant  $\alpha = 6$  :

$$E = \varepsilon_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$



La force exercée par l'atome qui est à une distance  $r$ , sur l'autre qui est à la position  $r=0$ , est donc donnée par

$$F = -\frac{dE}{dr}$$

Trouvez l'expression de cette force, à partir de celle donnée pour l'énergie.

- e. A quelle valeur de  $r$  cette force est-elle nulle? Pourquoi? Dessinez la forme (approximative) de la force à exercer pour séparer les atomes en fonction de la position  $r$ .
- f. Trouver une expression de la distance  $r_{max}$  en fonction de  $r_0$  où la force en traction est maximale. Indiquez sur la courbe la distance interatomique correspondant à cette force.
- g. En déduire la valeur de la force de traction maximale  $F_{ext}$  que l'on peut exercer sur deux atomes en ce point (faire l'application numérique avec  $\varepsilon_0 = 1 \text{ eV}$ ,  $r_0 = 2 \text{ \AA}$ ).

5. Pour vérifier si vous avez la bonne réponse :

- a. Exercice 3 :  $1066 \text{ kJ/mol}$
- b. Exercice 4 : Question f :  $r_{max} = \sqrt[6]{\frac{13}{7}} r_0$ ; Question g :  $2.15 \cdot 10^{-9} \text{ N}$