

## 5. Les interactions intermoléculaires

### Questions fondamentales du chapitre 5:

Qu'est qui détermine l'état d'un composé (*i.e.*, gaz, liquide ou solide) aux conditions normales?

Quels sont les types de forces intermoléculaires?

Chapitre 5: Les interactions intermoléculaires

## Littérature Chapitre V

**Atkins et Jones: *Principes de Chimie* :**

### Chapitre 5: Liquides et Solides

#### Forces Intermoléculaires

5.1 La formation des phases condensées

5.2 Forces ion-dipôle

5.3 Forces dipôle-dipôle

5.4 Forces de London

5.5 La liaison hydrogène

## Littérature Chapitre V

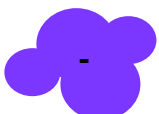
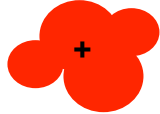

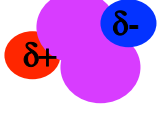
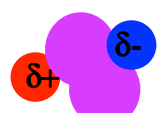
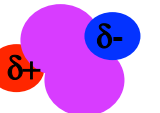
*Atkins and Jones: Chemical Principles, the Quest for Insight*

### Chapter 5: Liquids and Solids

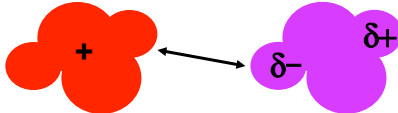
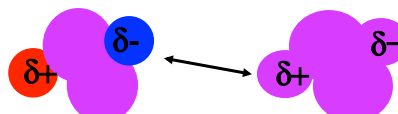
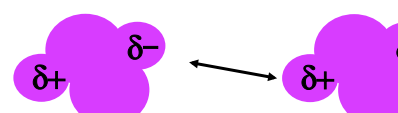
#### Intermolecular Forces


- 5.1 The Formation of Condensed Phases
- 5.2 Ion-Dipole Forces
- 5.3 Dipole-Dipole Forces
- 5.4 London Forces
- 5.5 Hydrogen Bonding

### Les interactions intermoléculaires

		Interaction	force relative
	↔		
monopôle $\text{ClO}_4^-$		monopôle $\text{NH}_4^+$	ion - ion 1000
	↔		
monopôle $\text{CO}_3^{2-}$		dipôle permanent molécule polaire $\text{H}_2\text{O}$	ion - dipôle 100
	↔		
dipôle permanent $\text{H}_2\text{O}$		dipôle permanent $\text{H}_2\text{O}$	dipôle - dipôle cas spécial: liaison hydrogène 100

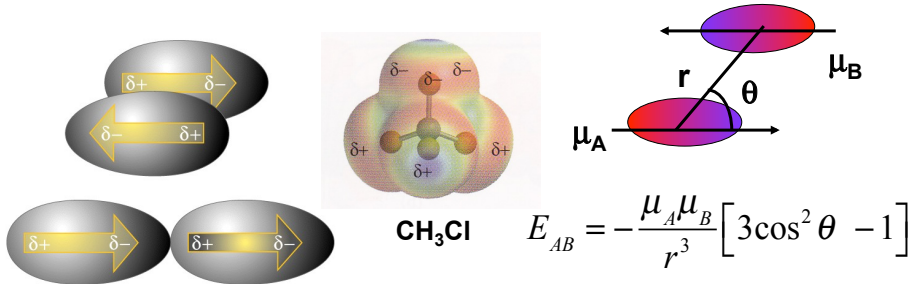
Chapitre 5: Les interactions intermoléculaires

Les interactions intermoléculaires		Interaction	force relative
 <p>monopôle Na<sup>+</sup></p> <p>dipôle induit CH<sub>4</sub></p>		ion - dipôle induit	10
 <p>dipôle permanent H<sub>2</sub>O</p> <p>dipôle induit CH<sub>4</sub></p>		dipôle - dipôle induit	1-10
 <p>dipôle instantané CH<sub>4</sub></p> <p>dipôle instantané CH<sub>4</sub></p>		dipôle instantané - dipôle instantané forces de London= Forces de dispersion Interaction van der Waals	1

Les interactions ion - ion	
 $E = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$ <p>Energies typiques = 250 kJ mol<sup>-1</sup></p>	<p>Interaction coulombienne entre deux molécules chargées (ions).</p>
Chapitre 5: Les interactions intermoléculaires	

## Les interactions dipôle – dipôle

L'interaction dipôle – dipôle concerne les molécules qui contiennent des liaisons polaires, i.e. qui possèdent un **moment dipolaire permanent ( $\mu$ )**



Les dipôles s'alignent pour maximiser l'interaction électrostatique  
→ en compétition avec l'énergie thermique (rotation de la molécule)

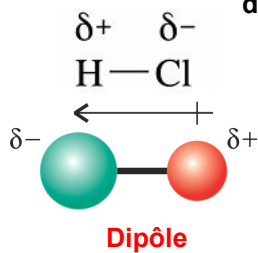
Les composés de molécules polaires ont des **points de fusion et d'ébullition plus élevés** que ceux des molécules apolaires

Energies typiques = 2 kJ mol<sup>-1</sup>

Chapitre 5: Les interactions intermoléculaires

## Rappel: moments dipolaires permanents

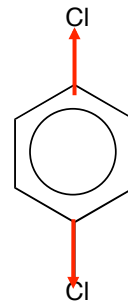
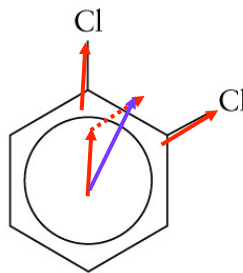
$\Delta\text{EN} > 0$ , liaison polaire: le doublet est plus proche de l'atome le plus électronégatif



Moments dipolaires en Debye 1 D =  $3.33564 \cdot 10^{-30}$  Cm

$$\mu = \sum_i q_i \vec{r}_i$$

Addition vectorielle



- \* CO<sub>2</sub>: 0
- \* CO: 0.112
- \* O<sub>3</sub>: 0.53

- \* H<sub>2</sub>O gaz: 1.85
- \* HCN : 2.98
- \* cyanamide CN<sub>2</sub>H<sub>2</sub>: 4.27
- \* KBr: 10.41

## L'électronégativité selon Pauling

Period	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A										
1	H 2.1																
2	Li 1.0	Be 1.5	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0										
3	Na 0.9	Mg 1.2	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0										
4	K 0.8	Ca 1.0	Sc	Ti 1.3	V 1.5	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.7	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8
5	Rb 0.8	Sr 1.0	Y	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5
6	Cs 0.7	Ba 0.9	La*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	Ac†														

Below 1.0: 2.0-2.4  
 1.0-1.4: 2.5-2.9  
 1.5-1.9: 3.0-4.0

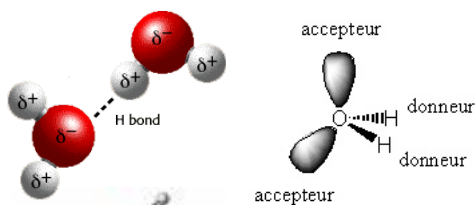
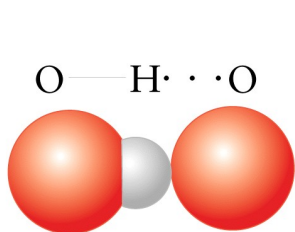
\*Lanthanides: 1.1-1.3  
 †Actinides: 1.3-1.5

**Les liaisons H-F, H-O, H-N et H-Cl sont particulièrement polaires!**

Chapitre 5: Les interactions intermoléculaires

## Liaison hydrogène ou pont hydrogène

La liaison hydrogène se forme lorsque des atomes d'hydrogène sont liés à l'oxygène, l'azote ou au fluor (H-F, H-O, H-N). C'est l'interaction intermoléculaire la plus forte (10% de la force d'une liaison covalente)

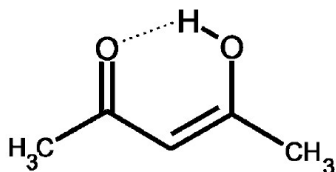


### 8 Hydrogen bond

La liaison hydrogène est responsable des **points de fusion et d'ébullition anormalement élevés de H<sub>2</sub>O, HF, NH<sub>3</sub>.**

La liaison hydrogène intermoléculaire: e.g. réseau de liaisons hydrogènes de l'eau

## Liaison hydrogène ou pont hydrogène



Exemple de liaison hydrogène  
intramoléculaire

## Forces typiques

L' énergie d'un pont hydrogène peut être faible (1-2 kJ mol<sup>-1</sup>)  
ou très forte (40 kJ mol<sup>-1</sup> pour l'ion HF<sub>2</sub><sup>-</sup>).  
énergies typiques:

O—H...:N	(29 kJ/mol)
O—H...:O	(21 kJ/mol)
N—H...:N	(13 kJ/mol)
N—H...:O	(8 kJ/mol)

## La liaison hydrogène en biologie

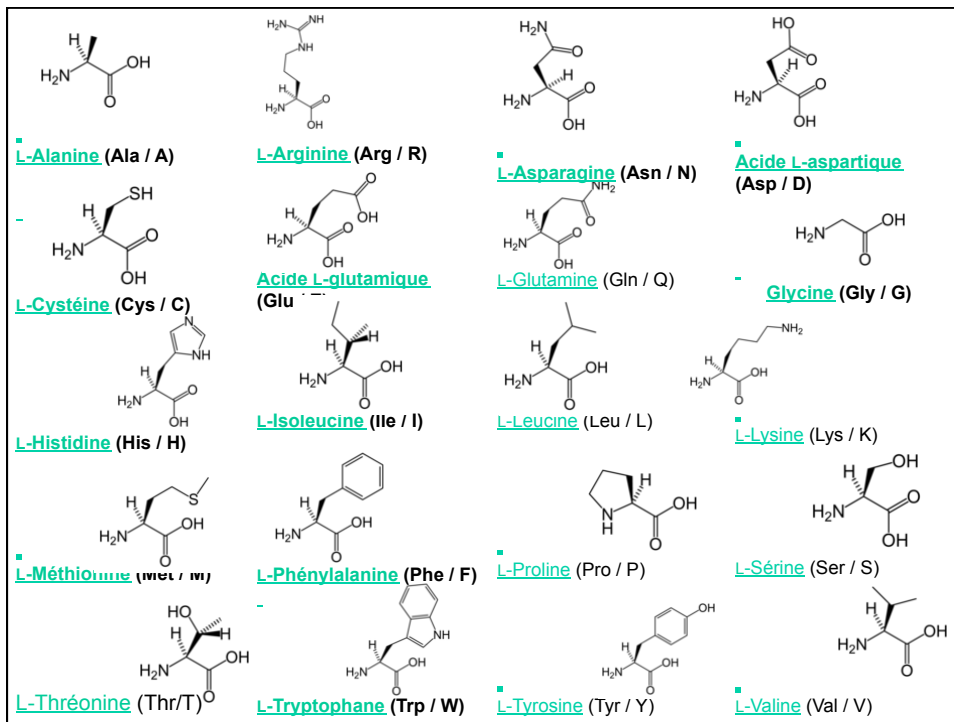
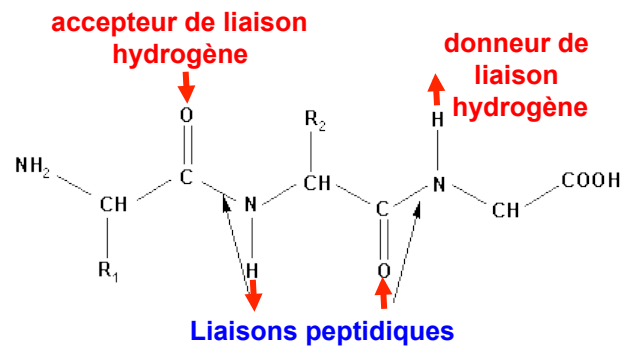
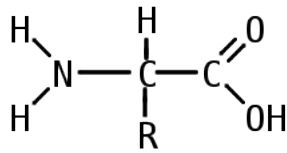
Les molécules biologiques contiennent de nombreux groupes polaires

### Les protéines:

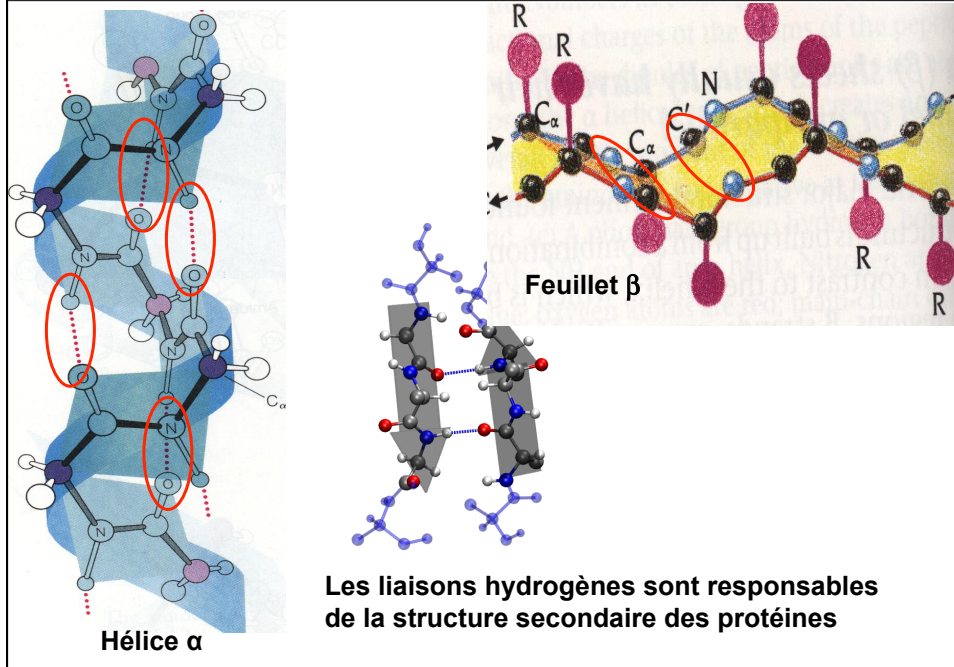
Une protéine, est une macromolécule composée d'une chaîne (ou séquence) d'acides aminés liés entre eux par des liaisons peptidiques.

### acide aminé

20 R différents → 20 acides aminés



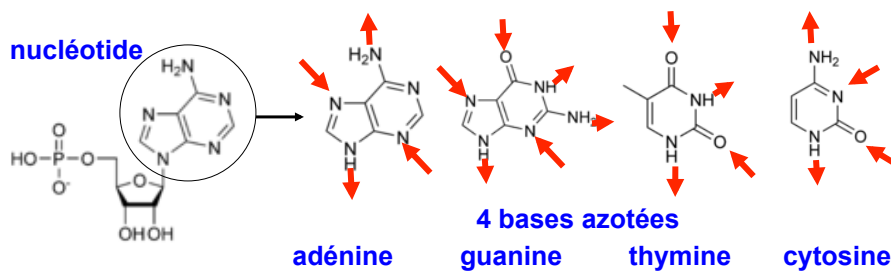
## La liaison hydrogène en biologie



## La liaison hydrogène en biologie

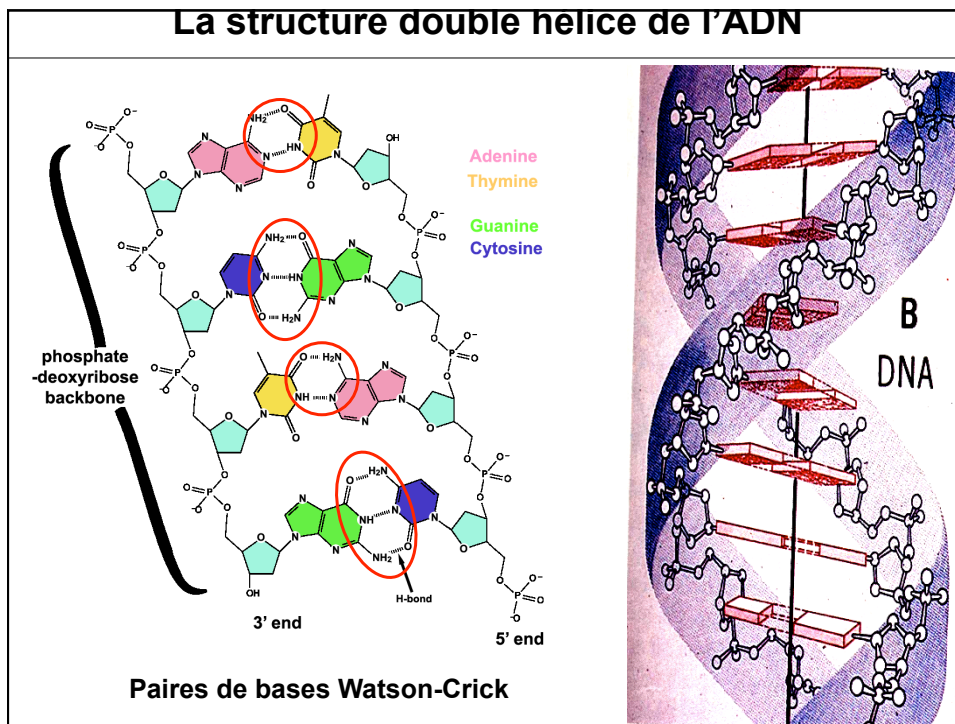
### Acides nucléiques par exemple l'ADN:

L'acide désoxyribonucléique (ADN) est un polymère de bases désoxyribonucléiques, plus communément appelées **nucléotides**. Chaque nucléotide est constitué d'un groupe **phosphate** lié au **désoxyribose**, un sucre, lui-même lié à une **base azotée**.

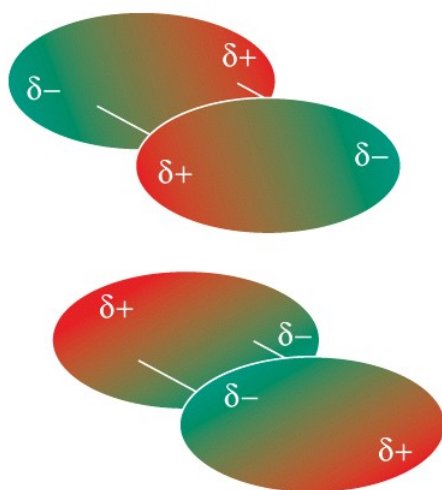




## La structure double hélice de l'ADN



## Forces de London (dispersion)



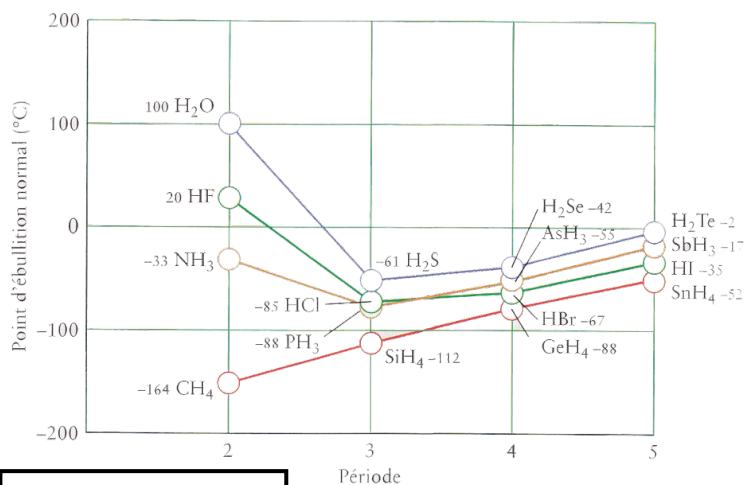
Les interactions de London sont dues à des interactions entre des **moments dipolaires instantanés** causées par des fluctuations de charges spontanées. Elles sont moins fortes que les interactions entre les dipôles permanents mais proportionnelles au nombre d'électrons, au volume et à la polarisabilité

$$E^{disp} = \frac{\alpha_A \alpha_B I_A I_B}{2(I_A + I_B) r^6}$$

$\alpha$  : polarisabilité  
 $I$  : énergie d'ionisation

Energies typiques = 2 kJ mol<sup>-1</sup>

## Forces de London (dispersion)



$$E^{disp} = \frac{\alpha_A \alpha_B I_A I_B}{2(I_A + I_B) r^6}$$

$\alpha$  : polarisabilité  
 $I$  : énergie d'ionisation

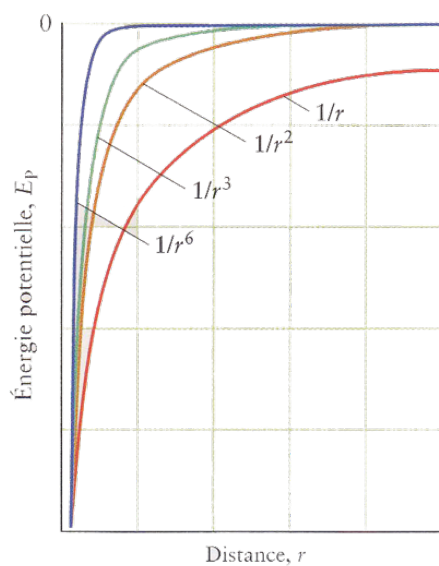
## Interactions intermoléculaires

Substance	Melting point, °C	Boiling point, °C	Substance	Melting point, °C	Boiling point, °C
<b>Noble gases</b>			<b>Small inorganic species</b>		
He	— <sup>†</sup>	-269 (4.2 K)	H <sub>2</sub>	-259	-253
Ne	-249	-246	N <sub>2</sub>	-210	-196
Ar	-189	-186	O <sub>2</sub>	-218	-183
Kr	-157	-153	H <sub>2</sub> O	0	100
Xe	-112	-108	H <sub>2</sub> S	-86	-60
<b>Halogens</b>			NH <sub>3</sub>	-78	-33
F <sub>2</sub>	-220	-188	CO <sub>2</sub>	—	-78s <sup>†</sup>
Cl <sub>2</sub>	-101	-34	SO <sub>2</sub>	-76	-10
Br <sub>2</sub>	-7	59	<b>Organic compounds</b>		
I <sub>2</sub>	114	184	CH <sub>4</sub>	-182	-162
<b>Hydrogen halides</b>			CF <sub>4</sub>	-150	-129
HF	-93	20	CCl <sub>4</sub>	-23	77
HCl	-114	-85	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	6	80
HBr	-89	-67	CH <sub>3</sub> OH	-94	65
HI	-51	-35	glucose	142	d <sup>†</sup>
			sucrose	184d <sup>†</sup>	—

## Résumé: interactions intermoléculaires

Type d'interaction	Dépendance de la distance	Énergie typique (kJ/mol)	commentaire
ion-ion	$1/r$	250	ions uniquement
ion-dipôle	$1/r^2$	15	ions et molécules polaires
dipôle-dipôle Liaisons hydrogène	$1/r^3$	20	Molécules contenant O, N, F partageant un H.
dipôle-dipôle	$1/r^3$	2	Molécules polaires statiques, alignées (solide, basse T)
dipôle-dipôle	$1/r^6$	0.6	En rotation (gaz, haute T)
London (dispersion)	$1/r^6$	<1	Tous les types de molécules

## interactions intermoléculaires vs distance



Les interactions entre deux ions diminuent moins vite avec la distance ( $1/r$ ) que celles entre deux dipôles instantanés ( $1/r^6$ )

## **À maîtriser**

- Prédire les forces relatives des interactions intermoléculaires.
- Identifier les molécules qui peuvent prendre part à des liaisons hydrogène.
- Expliquer d'où viennent les forces de London et comment elles varient avec la polarisabilité et la taille d'un atome ou d'une molécule.
- Prédire l'ordre relatif des points d'ébullition ou de fusion de deux substances à partir de l'intensité de leur forces intermoléculaires.