

LG n°5 : Forces intermoléculaires. (L).

Prérequis :

- Électrostatique
- Notion de liaison chimique
- Le gaz parfait et le gaz réel
- Électronégativité et ses conséquences sur l'évolution des paramètres atomiques
- Base d'atomistique

Bibliographie :

- Gerschel
- Atkins
- Stryer
- Bottin Mallet 2
- Stryer
- Handbook

Introduction : GP, limite aux hautes pressions *Atkins p 15*, Carrément non négligeable à l'état condensé (liquide et solide) ODG des forces de liaison chimique et ion ion, nous on va regarder des liaisons plus faibles mais qui sont pourtant indispensables. *Gerschel p 15-16*

I Liaisons de Van Der Waals

1 Dipôle permanent, dipôle permanent

Gerschel p 9, Atkins p 631 définition du moment dipolaire. Keesom

2 Dipôle permanent, dipôle induit

Gerschel p 9, Atkins p 633 Solubilité de I₂, Br₂ dans l'eau. *Handbook* Debye

○ Mais on a une autre force qui se révèle être encore plus importante

3 Dipôle induit, dipôle induit

Gerschel p 10, Atkins p 633 London. Origine quantique mais très importante.

4 Répulsion aux courtes distances

Principe de Fermi et répulsion électrostatique. *Gerschel p 6*. en général, $1/r^{12}$ car on a déjà le terme en $1/r^6$ de connu pour des simulations numériques.

○ *Gerschel p 11* tableau récapitulatif avec le pourcentage de chaque force. Ces interactions sont peu intenses, mais leur nombre les rend très difficile à modéliser. Eau, déjà un cas particulier, mais pas seulement à cause de Keesom prépondérant

II Liaisons hydrogène

1 Mise en évidence

Bottin Mallet 2 p 12, Spectroscopie infra-rouge. T_f acide maléique et fumarique.

2 Caractéristiques

Liaison directionnelle, structure de l'eau, on dit être lié à un atome plus électronégatif, ODG de la liaison. *Gerschel p 212*

○ Les liaisons hydrogène influencent

III Applications

1 Structure de l'eau

Bottin Mallet, Gerschel

2 Solubilité

Alcool, glucose, Br₂, interactions hydrophobes, micelles. *Atkins p 396*

3 Application en biologie

Importance de l'ADN *Stryer p 112 Atkins p 638* Nouveaux médicaments, importance de la simulation

Conclusion : *Gerschel* Importance de la simulation. Repliement des protéines.