

Architecture des corps moléculaires

Définitions

L'article WIKIPÉDIA intitulé *Molécule*¹ nous donne cette définition :

Une **molécule** est une structure de base de la matière appartenant à la famille des composés covalents. L' IUPAC² (Union internationale de chimie pure et appliquée) définit la molécule comme « **une entité électriquement neutre comprenant plus d'un atome** ». C'est l'assemblage chimique électriquement neutre d'au moins deux atomes, différents ou non, qui peut exister à l'état libre, et qui représente la plus petite quantité de matière possédant les propriétés caractéristiques de la substance considérée. Les molécules constituent des agrégats atomiques liés par des forces de valence (**liaisons covalentes**) et elles conservent leur individualité physique.

Le site Internet *superprof.fr*³ nous donne ces autres informations :

Une molécule est un assemblage électriquement neutre d'atomes. Il résulte de la **formation de liaisons** entre les atomes. La liaison entre les atomes peut être simple si les atomes ne sont liés que par une seule liaison ou multiple si les atomes sont liés par 2 ou 3 liaisons (elle est dite double ou triple). C'est en **1811** qu'un scientifique mentionna pour la première fois le concept de molécule. C'est en effet **Avogadro**⁴, un physicien et chimiste italien, qui fut le premier à distinguer les molécules des atomes.

Il apparaît ainsi que le terme de *molécule* doit être réservé aux assemblages d'atomes, identiques ou non, reliés entre eux par des *liaisons covalentes*, lesquelles feront l'objet ci-après d'une étude particulière et d'une interprétation dans le cadre de la théorie NR faisant appel à la notion de *puits de potentiel cardioïde*.

Notons que le physicien-chimiste *Amedeo Avogadro* (1776-1856) ne faisait pas la différence entre *atome* et *molécule*, ce qui ne risque guère de gêner les mathématiciens ensemblistes, un atome pouvant parfaitement être considéré comme une molécule à un seul élément.

1 Voir cet article: <https://fr.wikipedia.org/wiki/Molécule>

2 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Union_internationale_de_chimie_pure_et_appliquée

3 Voir article : <https://www.superprof.fr/ressources/physique-chimie/physique-chimie-2nde/petits-morceaux-matiere.html>

4 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Amedeo_Avogadro

Classification

Sans établir de limite précise à la famille des corps formés de ce que l'on peut appeler des *molécules simples*, les chimistes et les physiciens ont créé le terme de *macromolécule*¹ :

Une **macromolécule** est une très grande molécule, qui possède une masse moléculaire relativement élevée. La notion de macromolécule a été introduite en 1922 par le chimiste allemand Hermann Staudinger².

L'IUPAC (*Union internationale de chimie pure et appliquée*) a apporté certaines précisions, tout en conservant la notion ambiguë de *masse moléculaire relative* :

A molecule of high *relative molecular mass*, the structure of which essentially comprises the multiple repetition of units derived, actually or conceptually, from molecules of low *relative molecular mass*.

1. In many cases, especially for synthetic polymers, a molecule can be regarded as having a high *relative molecular mass* if the addition or removal of one or a few of the units has a negligible effect on the molecular properties. This statement fails in the case of certain macromolecules for which the properties may be critically dependent on fine details of the molecular structure.

2. If a part or the whole of the molecule has a high *relative molecular mass* and essentially comprises the multiple repetition of units derived, actually or conceptually, from molecules of low *relative molecular mass*, it may be described as either macromolecular or polymeric, or by polymer used adjectivally.

Source: PAC, 1996, 68, 2287. (*Glossary of basic terms in polymer science (IUPAC Recommendations 1996)*) on page 2289 [Terms] [Paper]

La note 2 introduit la notion de *polymère*³, qui concerne selon l'IUPAC les *substances composées de macromolécules*.

Les *polymères* sont eux-mêmes composés de *monomères*⁴, ainsi définis : Un **monomère** est une petite molécule simple qui peut s'attacher à d'autres molécules pareilles pour fabriquer une grande chaîne appelée polymère.

1 Voir article WIKIPÉDIA : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Macromolécule>

2 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Hermann_Staudinger

3 Voir article WIKIPÉDIA : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Polymère>

4 Voir article WIKIPÉDIA : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Monomère>

ARCHITECTURE DE LA MATIÈRE

Géométrie moléculaire (Modèle standard)

Ces quelques définitions étant posées, venons en à ce qui préoccupe *au premier chef* la théorie NR, à savoir la *géométrie*, notion *mathématique* souvent remplacée ici par celle d'*architecture*¹. L'architecte étant ainsi originellement considéré comme un *maître charpentier*, il importe donc, pour étudier la *géométrie moléculaire*², non seulement de connaître la nature des différents atomes assemblés, mais également d'apprécier ce qui constitue la « charpente d'une molécule », c'est-à-dire en langage de physicien les *liaisons chimiques*³. Celles-ci sont de différentes natures :

- *Liaison covalente*
- *Liaison aromatique*
- *Liaison métallique*
- *Liaison hydrogène*
- *Liaison ionique*
- *Liaison halogène*
- *Liaison de van der Waals*
- *Liaison π*

Dans cette section consacrée aux *corps moléculaires*, tels qu'ils viennent d'être définis, seule la première liaison chimique dite *covalente* va nous intéresser. Les autres liaisons seront évoquées dans la section prochaine consacrée aux *corps non moléculaires*.

Modèle standard de la physique des particules et théorie NR ont jusqu'ici suivi des voies parallèles, qui si on les compare métaphoriquement à des œuvres d'art seraient très « impressionniste » en ce qui concerne la vision de la physique officielle — avec sa mer de quarks et de gluons, ses gouttes liquides et ses nuages électroniques — et plutôt « classique », voire même « gothique », dans le présent exercice, qui d'émergence en émergence s'est attaché à maintenir tout au long du parcours une géométrie aussi rigoureuse que possible.

1 Le dictionnaire Littré nous donne cette étymologie du mot *architecte* :
Le mot **architecte** vient du grec ancien *arkhitektôn*, formé de *arkhi* (en chef, premier) et *tektôn* (charpentier, constructeur).

Il signifie donc « maître charpentier » ou « chef des constructeurs ».

2 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Géométrie_moléculaire

3 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_chimique

THÉORIE NR

Mais avec le passage à ce nouveau niveau de complexité que constituent les *corps moléculaires*, Modèle standard et théorie NR sont condamnés à s'accorder sur cette notion de *géométrie moléculaire*, puisqu'il est incontestable, par exemple, qu'une simple molécule d'eau H_2O a toujours formé et formera toujours une équerre à **104,45°** avec des cotés d'une longueur de **0,9584 Å**.

En pratique, la géométrie reprend ses droits dans le Modèle standard de la physique des particules avec la notion d'*orbitale moléculaire*¹, elle-même issue de celle d'*orbitale atomique*² par ce que les physiciens appellent des *combinaisons linéaires*³.

Cet extrait du site <https://portail.polytechnique.edu/editions/> nous en dit plus sur la *théorie des orbitales moléculaires* :

Introduction à la théorie des orbitales moléculaires

I. L'APPROXIMATION DES PARTICULES INDÉPENDANTES

Les molécules obéissant aux lois de la physique quantique, le calcul de la fonction d'onde d'une molécule devrait consister, en toute rigueur, à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un système à N noyaux et n électrons. C'est bien entendu impraticable, de sorte que l'on est amené à faire un certain nombre d'approximations fondamentales.

La première approximation est tellement justifiée dans les cas qui nous intéressent que ce n'en est pratiquement pas une : c'est la séparation de Born-Oppenheimer. Elle consiste à remarquer que le mouvement des électrons est à tel point plus rapide que celui des noyaux que ces derniers apparaissent comme pratiquement immobiles vis-à-vis des électrons. Bien sûr, le mouvement des noyaux n'est pas négligeable puisqu'il est responsable des spectres de vibration infra-rouge des molécules, mais les électrons ont mille fois le temps d'adapter leurs mouvements aux changements de position des noyau durant le temps d'une vibration : la position et la dynamique des électrons dépendent bien sûr de la position des noyaux mais pas de leur vitesse. Le mouvement des électrons étant ainsi découplé de celui des noyaux, on pourra, pour chaque géométrie d'une molécule calculer une fonction d'onde purement électronique, décrivant le mouvement des électrons dans le champ électrique des noyaux considérés comme fixes.

1 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Théorie_de_l'orbitale_moléculaire

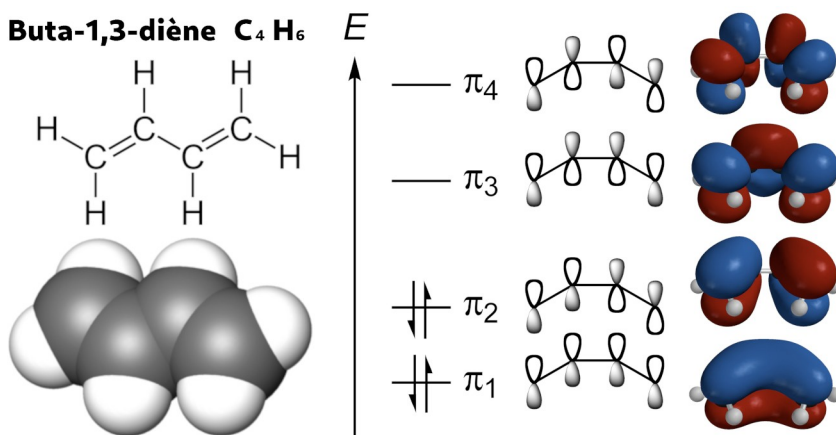
2 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Orbitale_atomique

3 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Combinaison_linéaire_d'orbitales_atomiques

Force est de constater que les physiciens ont en quelque sorte « baissé les bras » devant la complexité du modèle théorique des orbitales moléculaires. Le comportement des noyaux atomiques est négligé, et les électrons continuent d'être localisés dans des orbitales en terme de *probabilité de présence*. La géométrie des molécules est donc issue d'une fusion d'orbitales atomiques — qui peuvent être sphériques, toriques ou en forme de « larmes d'eau » — ce qui donne lieu à ce type d'illustration :

Fig. 9.116 : Orbitales moléculaires par combinaison linéaire d'orbitales atomiques

Source WIKIPÉDIA : **buta-1,3-diène** hydrocarbure de formule C_4H_6 gazeux



L'article WIKIPÉDIA consacré aux orbitales moléculaires assimile une orbitale moléculaire à une *fonction mathématique* :

En chimie quantique, une **orbitale moléculaire** est une fonction mathématique décrivant le comportement ondulatoire d'un électron dans une molécule. Cette fonction peut être utilisée pour calculer la configuration électronique des molécules, la distribution spatiale et énergétique des électrons dans les molécules, et en déduire des propriétés physiques ou chimiques, comme la probabilité de trouver un électron dans une région donnée. La combinaison linéaire d'orbitales atomiques offre un moyen simple de construire une représentation approchée des orbitales moléculaires, notamment pour les descriptions qualitatives.

La méthode employée par les physiciens pour obtenir des « représentations approchées » des orbitales moléculaires consiste donc à combiner linéairement des fonctions mathématiques probabilistes, ce qui ne semble pas *a priori* être d'une grande précision.

Géométrie moléculaire (théorie NR)

Nota : Dans cette section consacrée à la *géométrie moléculaire*, les différents atomes sont identifiés par leur numéro atomique **Z**.

Venons en à la manière de concevoir l'architecture des *corps moléculaires* en théorie NR, à partir de la notion de *puits de potentiel cardioïde*.

Nécessairement ce problème commence par l'étude du concept de *liaison covalente*, qui dans une géométrie précise demande d'aborder les notions suivantes :

1. *Nature de la liaison covalente*
2. *Longueur de liaison*
3. *Angle de liaison*
4. *Rotation de liaison*

Examinons donc successivement ces quatre critères.

1. Nature de la liaison covalente : La question posée est de savoir comment deux électrons « au caractère négatif », censés s'éviter par répulsion mutuelle en toutes circonstances, en viennent à « se mettre en couple » pour former une liaison covalente. La réponse du Modèle standard est ambiguë, en raison de la localisation *probabiliste* des électrons, la liaison entre atomes se faisant par recouvrement partiel d'orbitales atomiques définies comme des fonction mathématiques. Donc, rien de très concret.

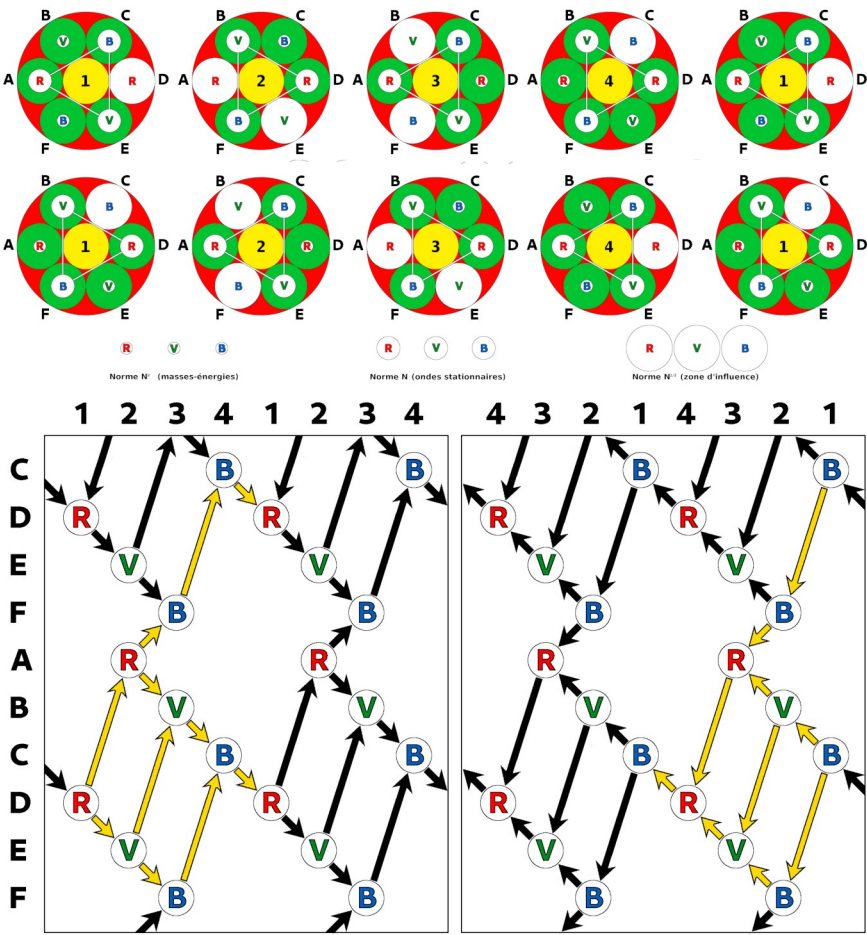
En théorie NR, la liberté de manœuvre d'un électron est très encadrée, de par son positionnement dans un puits de potentiel cardioïde à la structure hexagonale, tout en décrivant une trajectoire *stochastique*, mais dans le cadre restreint de ce que nous avons baptisé *intégrale des quatre chemins*, en hommage au célèbre physicien quantique Richard Feynman (voir section *Trajectoire des électrons dans les puits de potentiel des quarks up*, pages 140 à 142).

La figure 9.86 de la page 140, intitulée « *Intégrale des quatre chemins* » en théorie NR, illustre les quatre trajectoires que peut emprunter un électron dans un puits de potentiel cardioïde généré par le quark up d'un proton au cours de la phase ternaire pendant laquelle l'électron adopte successivement les configurations *métrique* (norme **N**), *énergétique* (norme **N**²) et *informationnelle* (norme **N**^{1/2}). Il a par ailleurs été convenu, par hypothèse, que l'électron s'approche au plus près du noyau de l'atome lorsque l'oscillateur harmonique auquel il fait face est dilué dans l'espace.

ARCHITECTURE DE LA MATIÈRE

Que peut-il se passer lorsque deux puits de potentiel générés par deux quarks up de deux protons appartenant à deux atomes voisins se font face? La figure 9.117 ci-dessous illustre cette situation, en dédoublant les principes de l'intégrale des quatre chemins présentés dans la figure 9.86 de la page 140 :

Fig. 9.117 : Principe de la liaison covalente en théorie NR



Le principe d'hélicité — définie comme *gauche*, arbitrairement et par pur mimétisme avec les dispositions du Modèle standard de la physique des particules — implique que les structures hexagonales de deux puits de potentiel cardioïdes se faisant face tournent en sens inverse au niveau de leur jonction. Le haut de la figure adopte ce principe de rotations inverses au niveau du plan électronique.

La phase **1 2 3 4 1**, devenue commune aux deux puits de potentiel cardioïdes, se déroule toujours de gauche à droite. Cependant, la deuxième ligne tourne en sens inverse, car les dispositions graphiques qu'elle adopte sont en fait **4 3 2 1 4**. Le bas de la figure démontre que les deux électrons présents dans ces puits de potentiel cardioïdes jumelés, bien que situés dans le même plan, n'occupent jamais la même position, tout en gardant leur « liberté conditionnelle » dans le cadre restreint de l'*intégrale des quatre chemins*.

Ainsi, selon ces principes, la formation d'une liaison covalente garantit un lien rigide entre atomes, tout en préservant le caractère stochastique des orbitales électroniques, lesquelles ne sont pas « satellitaires » à la manière des anciennes orbitales du *Modèle de Bohr*¹, mais comparables à l'anneau circulaire² que forme la corde d'un lasso au-delà du nœud coulant, celui-ci prenant la place de l'électron attaché au quark up qui le « pilote ».

Mais les physiciens et chimistes qui ont étudié les liaisons covalentes — grâce à la *diffraction électronique*³ ou à la *diffraction des rayons X*⁴ — nous ont appris qu'elles pouvaient s'associer pour devenir souvent *double* ou *triple*, et exceptionnellement *quadruple*, *quintuple*, voire même *sextuple*⁵. Voyons si nous pouvons interpréter ces phénomènes d'associations de liaison covalentes dans le cadre géométrique de la théorie NR.

Les puits de potentiel cardioïdes ont été métaphoriquement comparés à des plateaux de roulettes de casino sur lesquels les électrons suivent tels les billes des trajectoires erratiques (voir section *Trajectoire des électrons dans les puits de potentiel des quarks up*, page 142). Mais cette image a été complétée en soulignant la nécessité d'imaginer « un empilement fractal de plateaux de roulette de casino ».

1 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Modèle_de_Bohr

2 Les lecteurs amateurs d'humour décalé apprécieront peut-être l'idée de qualifier cet anneau de « bracelet électronique ».

3 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Diffraction_des_électrons

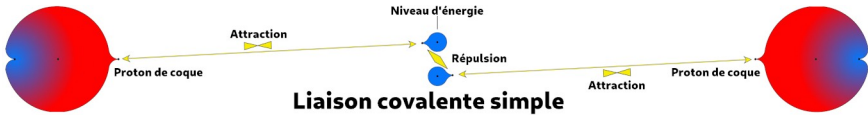
4 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Cristallographie_aux_rayons_X

5 Voir articles WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_double
https://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_triple
https://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_quadruple
https://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_quintuple
https://fr.wikipedia.org/wiki/Liaison_sextuple

ARCHITECTURE DE LA MATIÈRE

L'établissement d'une *liaison covalente simple* entre deux atomes d'une molécule peut être représentée ainsi, en ne regardant que les profils de deux puits de potentiel cardioïdes se faisant face :

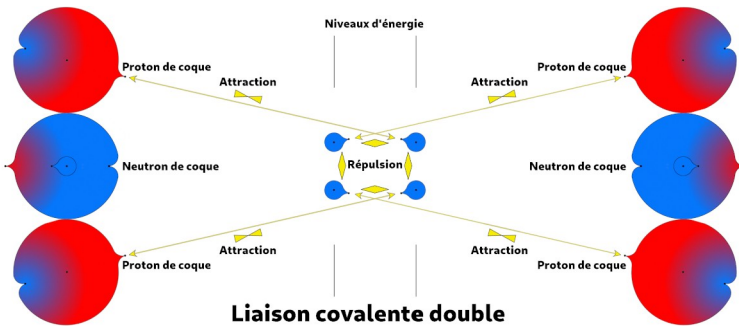
Fig. 9.118 : *Liaison covalente simple*



Cet assemblage se résume ainsi à deux atomes d'hydrogène formant une molécule de *dihydrogène*¹. La solidité du lien s'explique, comme toujours en théorie NR, en faisant appel à la *force de Casimir généralisée* (FCG) (voir Tome 1 - Chapitre 8 Forces - Section Force de Casimir - Pages 227 à 235), l'atome d'hydrogène étant un objet *neutralisé* plongé dans l'espace *neutre*, lequel exerce sur la molécule une pression externe, liée à la présence d'ondes électromagnétiques d'une longueur d'onde supérieure à la distance séparant les deux protons de coque sur le schéma.

En représentant la structure équatoriale de deux noyaux appartenant à des atomes plus complexes que l'hydrogène, il devient possible d'élaborer ce nouveau schéma, caractérisant une *liaison covalente double* :

Fig. 9.119 : *Liaison covalente double*



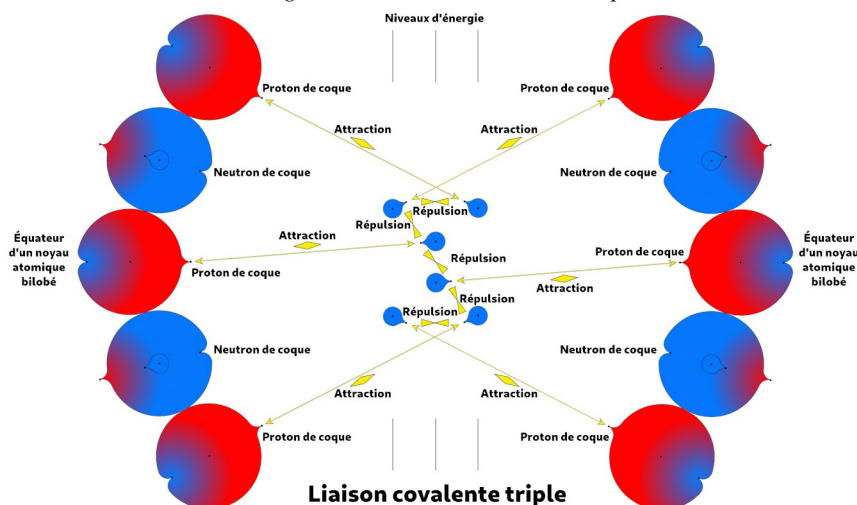
L'espace entre les deux traits verticaux symbolisant les niveaux d'énergie appartient à la zone de chevauchement des quatre puits de potentiel cardioïdes associés aux protons de coque. Il nous faut cependant faire un petit effort de visualisation en trois dimensions d'espace (en raison du maillage de la « peau » des noyaux atomiques), les groupes de trois nucléons n'étant pas alignés, ni dans le même plan, mais dans des plans décalés selon des angles proches de multiples de 30° (60° 90°).

1 Voir article WIKIPÉDIA : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Dihydrogène>

Notons qu'avec la multiplication des paires proton $\leftrightarrow$ électron, la force de la liaison covalente augmente, ce qui en principe doit provoquer dans cette liaison double un raccourcissement du lien entre atomes par rapport à la liaison simple.

En ajoutant quelques nucléons supplémentaires, nous obtenons le schéma d'une *liaison covalente triple* :

Fig. 9.120 : *Liaison covalente triple*



Les électrons se positionnent maintenant par paires sur trois niveaux d'énergie, tout en conservant le principe des liaisons croisées, l'ensemble devant bien sûr être interprété en trois dimensions, avec enchaînement des nucléons « en zigzag » et pivotement des deux plans opposés.

Par ailleurs, il est indiqué sur le schéma que ce sont les nucléons situés sur l'équateur ou à proximité immédiate de l'équateur d'un noyau atomique bilobé qui sont ici représentés, ce qui a pour vertu de provoquer le basculement des axes de projection des protons les plus éloignés de l'équateur, facilitant ainsi le regroupement des électrons impliqués dans cette liaison triple.

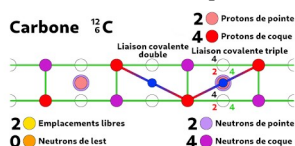
Un dernier effort de visualisation en trois dimensions est demandé pour imaginer la représentation des liaisons covalentes *quadruple*, *quintuple* ou *sextuple*, ce qui peut se concevoir en superposant deux schémas, deux *liaisons doubles* donnant une *liaison quadruple*, une *double* plus une *triple* devenant une *liaison quintuple* et deux *triples* une *liaison sextuple*.

ARCHITECTURE DE LA MATIÈRE

Les articles WIKIPÉDIA consacrés aux *liaisons covalentes triple quadruple quintuple et sextuple* mettent exergue quelques atomes « originaux » pratiquant cette sorte de « *polyamour*¹ » entre électrons. Ce sont l'atome de **carbone 12** en ce qui concerne les liaisons *triple* et *quadruple*, le **chrome 24** pour les liaisons *quadruple* ou *quintuple* et le **molybdène 42** pour les très rares liaisons *quintuple* et *sextuple*. Voyons ce que le *Modèle du vieux galion* — décrivant en théorie NR l'architecture des noyaux atomiques et par projection l'architecture des nuages électroniques des entiers atomes — pourrait nous dire sur ces phénomènes particuliers de liaisons covalentes multiples.

Commençons par l'atome de **carbone 12** dont voici une version compactée du graphe équatorial de son noyau :

Fig. 9.121 : Liaisons double et triple de l'atome de carbone



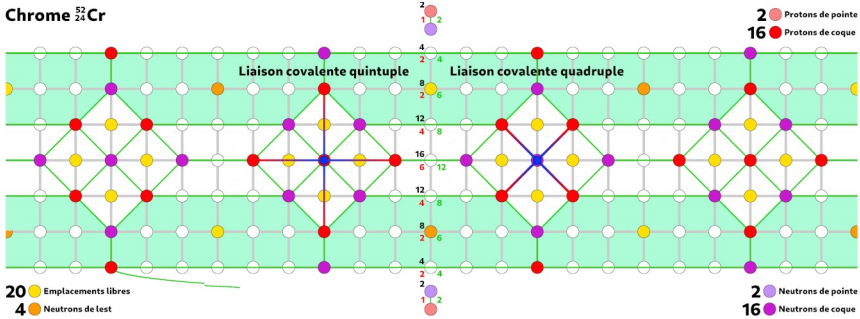
La figure 9.79 de la page 125 intitulée *Polyèdres associés à la nucléogénèse intermédiaire croissante* nous a présenté en premier le polyèdre associé au noyau de l'atome de carbone, qui est en fait un simple cube auquel il suffit d'ajouter deux protons de pointe au centre de deux faces opposées pour avoir une vision en trois dimensions de ce noyau, baptisé « *le précurseur* », en ce sens qu'il est le premier à faire apparaître les notions de *proton de pointe* et de *neutron de pointe*. Le graphe équatorial ci-dessus a non seulement été compacté, mais les nucléons de pointe ont été déplacés pour les positionner aux centres de deux faces opposés.

Ainsi, on peut comprendre à la vue de ce graphe que si nous présentons deux atomes de carbone « cubiques » face à face, nous obtiendrons une *liaison double* si ces faces ne sont pas associées à des protons de pointe et une *liaison triple* dans le cas contraire. Il nous faut bien sûr dédoubler visuellement le graphe ci-dessus en inversant les pentes des liaisons double et triple, afin de ne pas mettre des protons en opposition directe, ce qui logiquement doit favoriser l'établissement de liaisons covalentes robustes.

1 Voir article WIKIPÉDIA : <https://fr.wikipedia.org/wiki/Polyamour>

Poursuivons avec le graphe équatorial de l'atome de **chrome 24** :

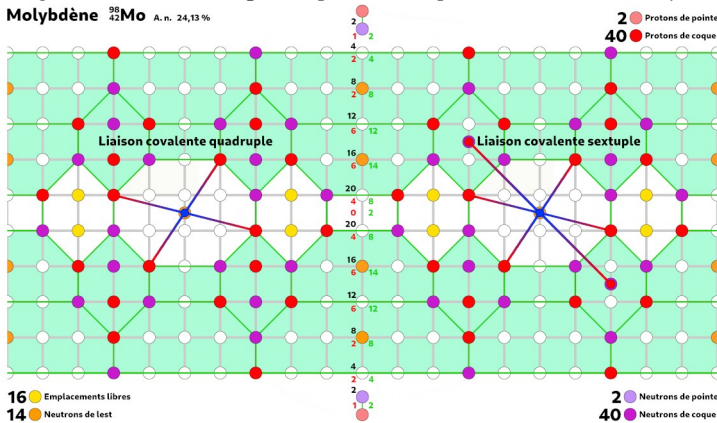
Fig. 9.122 : Liaisons quadruple et quintuple de l'atome de chrome



Le caractère exceptionnel l'atome de **chrome 24** a déjà été signalé en raison de sa *configuration électronique* dérogeant aux règles de base du Modèle standard, ce qui en théorie NR a été expliqué par la présence de *liaisons quadruples* autour de l'équateur du graphe, liaisons réputées faibles en raison de la géométrie hexagonale des quarks des nucléons. Or, c'est exactement ce maillage « carré » qui nous permet de décrire géométriquement des *liaisons quintuple ou quadruple*, selon qu'on envisage de positionner le centre de la liaison covalente sur un *proton de coque équatorial* à gauche, ou sur un *neutron de coque équatorial* à droite.

Il nous reste à examiner le cas de l'atome *bilobé* de **molybdène 42** :

Fig. 9.123 : Liaisons quadruple et sextuple de l'atome de molybdène



La solution apparaît maintenant en positionnant les axes des liaisons covalentes au centre des intervalles entre quadrants. Ce sont les mailles *octogonales* et *hexagonales*, qui nous donnent cette solution en facilitant la convergence des axes de liaison proton ↔ électron.

ARCHITECTURE DE LA MATIÈRE

2. **Longueur de liaison**¹ : En préambule de l'examen de ce deuxième critère de notre étude du concept de *liaison covalente*, consacrée aux longueurs de ces liens, rendons hommage à la carrière d'Albert Einstein en citant sa thèse de doctorat de vingt-et-une pages présentée à l'Université de Zurich le 30 juillet 1905 (son *annus mirabilis*²) intitulée *Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen* (*Une nouvelle définition des dimensions moléculaires*).

Les chimistes ont défini le *rayon covalent*³ comme étant égal la moitié de la distance entre deux noyaux atomiques liés par une *liaison covalente*, ce qui en supposant que les atomes liés soient sphériques équivaut à mesurer la distance entre les centres de deux sphères tangentes. Cette liaison covalente peut être *simple* ou *multiple*, selon le nombre de paires d'électrons mises en commun.

Le tableau ci-dessous nous donne la mesure de ces rayons pour les *liaisons covalentes simples* :

Tab. 9.25 : Évolution des rayons covalents des différents atomes
Source : P. Pyykkö et M. Atsumi, « Molecular Single-Bond Covalent Radii for Elements 1–118 ».

Table des rayons covalents																		source WIKIPÉDIA : Rayon covalent (pm = 10 ⁻¹² m)																	
1 H 32 ↗																	2 He 46 ↑																		
3 Li 133 ↘	4 Be 102 ↘															5 B 85 ↘	6 C 75 ↘	7 N 71 ↘	8 O 63 ↘	9 F 64 ↘	10 Ne 67 ↑														
11 Na 155 ↘	12 Mg 139 ↘															13 Al 126 ↘	14 Si 116 ↘	15 P 111 ↘	16 S 103 ↘	17 Cl 99 ↘	18 Ar 96 ↑														
19 K 196 ↘	20 Ca 171 ↘															21 Sc 148 ↘	22 Ti 136 ↘	23 V 134 ↘	24 Cr 122 ↘	25 Mn 119 ↘	26 Fe 116 ↘	27 Co 111 ↘	28 Ni 110 ↘	29 Cu 112 ↘	30 Zn 118 ↘	31 Ga 124 ↘	32 Ge 121 ↘	33 As 121 ↘	34 Se 116 ↘	35 Br 114 ↘	36 Kr 117 ↑				
37 Rb 210 ↘	38 Sr 185 ↘															39 Y 163 ↘	40 Zr 154 ↘	41 Nb 147 ↘	42 Mo 138 ↘	43 Tc 128 ↘	44 Ru 125 ↘	45 Rh 125 ↘	46 Pd 120 ↘	47 Ag 128 ↘	48 Cd 136 ↘	49 In 142 ↘	50 Sn 140 ↘	51 Sb 140 ↘	52 Te 136 ↘	53 I 133 ↘	54 Xe 131 ↑				
55 Cs 232 ↘	56 Ba 196 ↘	57 La 180 ↘	58 Ce 163 ↘	59 Pr 176 ↘	60 Nd 174 ↘	61 Pm 173 ↘	62 Sm 172 ↘	63 Eu 172 ↘	64 Gd 169 ↘	65 Tb 168 ↘	66 Dy 167 ↘	67 Ho 166 ↘	68 Er 165 ↘	69 Tm 164 ↘	70 Yb 170 ↘	71 Lu 162 ↘	72 Hf 152 ↘	73 Ta 146 ↘	74 W 137 ↘	75 Re 131 ↘	76 Os 129 ↘	77 Ir 122 ↘	78 Pt 122 ↘	79 Au 124 ↘	80 Hg 133 ↘	81 Tl 144 ↘	82 Pb 144 ↘	83 Bi 151 ↘	84 Po 145 ↘	85 At 145 ↘	86 Rn 142 ↑				
87 Fr 223 ↘	88 Ra 201 ↘	89 Ac 186 ↘	90 Th 175 ↘	91 Pa 169 ↘	92 U 170 ↘	93 Np 171 ↘	94 Pu 172 ↘	95 Am 166 ↘	96 Cm 166 ↘	97 Bk 166 ↘	98 Cf 168 ↘	99 Es 165 ↘	100 Fm 167 ↘	101 Md 173 ↘	102 No 176 ↘	103 Lr 176 ↘	104 Rf 161 ↘	105 Db 157 ↘	106 Sg 149 ↘	107 Bh 141 ↘	108 Hs 134 ↘	109 Mt 129 ↘	110 Ds 128 ↘	111 Rg 121 ↘	112 Cn 122 ↘	113 Nh 136 ↘	114 Fl 143 ↘	115 Mc 162 ↘	116 Lv 175 ↘	117 Ts 165 ↘	118 Og 157 ↘				

1 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Longueur_de_liaison

Citation : En géométrie moléculaire, la **longueur de liaison** est la distance moyenne entre les noyaux de deux atomes liés par une liaison chimique.

2 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Annus_mirabilis_d'Albert_Einstein

3 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Rayon_covalent

THÉORIE NR

Les cent-dix-huit atomes sont ici présentés selon la disposition classique du tableau périodique des éléments, sous sa forme comprenant sept lignes (*périodes*) et trente-deux colonnes (*groupes*). Les *couches cylindriques* de la théorie NR sont identifiées par des encadrements **rouges** pour les verticales et **bleus** pour les horizontales (remplissage). Les atomes présentant des *configurations électroniques anormales* sont signalés en **rouge**, comme dans les tableaux ayant permis de comparer les nomenclatures du Modèle standard et de la théorie NR.

L'évolution des rayons covalents est supposée obéir à deux règles simples :

1. Dans un même *groupe*, les rayons covalents augmentent du haut vers le bas du tableau, en raison du nombre de *couches électroniques* (nombre quantique principal n).
2. Dans une même *période*, les rayons covalents diminuent de la gauche vers la droite du tableau ($\searrow$), au fur et à mesure que la *couche de valence* d'un atome se charge en électrons, jusqu'à aboutir à la configuration des gaz nobles.

Vingt-deux éléments — soit **18,64 %** du total — dérogent à la première règle (Al13 Y39 Zr40 Nb41 Mo42 Rh45 Ag47 Cd48 Cs55 Pr59 Nd60 Pm61 Sm62 Eu63 Gd64 Tb65 Ho67 Lu71 Au79 Hg80 Tl81 et Pb82). Ils sont signalés par un fond **vert** au niveau des numéros et symboles atomiques en cas d'évolution contraire, et par un fond **jaune** en cas d'absence d'évolution¹.

Trente-sept éléments — soit **31,36 %** du total — dérogent à la deuxième règle (H1 O8 F9 Ni28 Cu29 Ga31 Br35 Ru44 Pd46 Ag47 Cd48 Sn50 Ce58 Sm62 Tm69 Ir77 Pt78 Au79 Hg80 Tl81 Pb82 Po84 Pa91 U92 Np93 Am95 Cm96 Bk97 Es99 Fm100 Md101 Rg111 Cn112 Nh113 Fl114 et Mc115). Ils sont également signalés par un fond **vert** ou **jaune**, mais au niveau de la mesure du rayon atomique et de la flèche ($\nearrow$ ou $\rightarrow$) symbolisant l'évolution dans une même période. Les gaz nobles terminant chaque période sont signalés par un fond **bleu** et une flèche verticale ($\uparrow$), illustrant la forte augmentation du rayon covalent lorsqu'on passe d'une période donnée à la suivante.

Sept éléments — soit **5,93 %** du total — ne satisfont aucune des deux règles (Ag47 Cd48 Sm62 Au79 Hg80 Tl81 et Pb82).

1 Cette absence d'évolution entre certains rayons covalents d'éléments chimiques adjacents est évidemment dépendante de la précision des données fournies, qui est celle du *picomètre* (10^{-12} m). Une précision du dixième de picomètre (10^{-13} m) permettrait sans doute de lever les ambiguïtés et de décider s'il y a ou non dérogation aux deux règles de base.

ARCHITECTURE DE LA MATIÈRE

Au final, *cinquante-et-un* éléments sur cent-dix-huit ne respectent pas au moins une des deux règles proposées — soit **43,22 %** du total — ce qui est considérable.

A noter une relativement bonne correspondance entre la localisation des atomes dont le *rayon covalent* déroge aux règles d'évolution et la distribution des *couches cylindriques* de la théorie NR. Certaines ne comportent que des dérogations pour au moins une des deux règles, voire même pour les deux (séquence **Au79 Hg80 Tl81** et **Pb82**).

Quant aux vingt-et-une **exceptions** dérogeant aux règles de *configuration électronique*, seules cinq respectent les deux règles d'évolution des rayons covalents (**Cr24 La57 Ac89 Th90** et **Lr103**). Au vu de l'important nombre d'éléments dérogeant aux règles de base de l'évolution des rayons covalents, il serait fastidieux d'en faire un examen exhaustif à l'aide des graphes équatoriaux des différents noyaux atomiques, qui en application de la *géométrie projective* de la théorie NR permettent d'établir une correspondance entre *architecture nucléaire* et *architecture atomique*.

Les données fournies ayant permis d'établir le tableau 9.25 intitulé *Évolution des rayons covalents des différents atomes* (**Source** : P. Pyykkö et M. Atsumi, « *Molecular Single-Bond Covalent Radii for Elements 1–118* ») nous renseignent également sur les *rayons covalents* des atomes associés par des *liaisons covalentes doubles et triples*.

Deux éléments chimiques ne peuvent établir de telles liaisons covalentes en raison de leur faible nombre d'électrons de valence. Ce sont évidemment l'**hydrogène 1** et l'**hélium 2**. Le **fermium 100** et les six derniers éléments du tableau périodique, dits *synthétiques*, ne nous montrent également que le rayon covalent de la liaison simple, pour des raisons évidentes d'absence de données en raison de la brièveté de leurs apparitions dans les expériences.

Tous les autres éléments chimiques du tableau disposent d'une mesure de leur rayon covalent en cas de liaison double.

Trente éléments chimiques ne présentent pas de mesure du rayon covalent d'une possible liaison triple. Ce sont les *alcalins* occupant le premier groupe à gauche du tableau (**lithium 3 sodium 11 potassium 19 rubidium 37 césium 55 francium 87**). On trouve également le **néon 10** et trois éléments de la douzième colonne, dits *métaux pauvres* (**zinc 30 cadmium 48** et **mercure 80**). Les vingt autres éléments se trouvent dans les deux séries des *terres rares* : *actinides* et *lanthanides*.

THÉORIE NR

Une nouvelle règle semble bien établie, à savoir qu'avec l'établissement progressif de liaisons covalents multiples le rayon covalent diminue. Or, une vingtaine d'éléments chimiques dérogent à cette troisième règle. Force est de constater que la Nature est pleine de fantaisies et ne se plie pas facilement aux tentatives de catégorisation des différents éléments du tableau périodique.

Rappelons simplement les différentes particularités que nous avons identifiées dans les graphes équatoriaux comme étant susceptibles de fournir quelques explications plausibles à la grande variété des propriétés physiques et chimiques des éléments produits par la nucléogenèse des noyaux atomiques et par leur « habillage » de cortèges électroniques :

- Dissymétries entre hémisphères Est et Ouest ou Nord et Sud dans les graphes polaires de certains isotopes des éléments chimiques possédant un numéro atomique **Z** impair, ou dans ceux des éléments chimiques possédant un nombre de masse **A** impair.
- Liaisons quadruples entre nucléons de coque, réputées « faibles » en raison de la structure hexagonale des quarks up des protons.
- Encombrement excessif de l'équateur de certains graphes pouvant nécessiter de faire appel à une transition isomérique.
- Présence de mailles hexagonales verticales abritant en leur centre un noyau de deutérium dont le proton se trouve déporté vers l'extérieur.
- Présence de mailles octogonales ou décagonales « poreuses ».
- Présence aux centres de mailles octogonales de protons uniques déportés vers l'extérieur de la coque.
- Architecture bilobée avec équateurs secondaires dits « tropiques ».
- Nucléogenèse ascendante (**Z ↗**) ou descendante (**Z ↘**).

Pour conclure, le *rayon covalent* présente l'intérêt particulier de participer d'une manière rigoureuse à l'architecture des molécules, ce que ne peut pas faire le *rayon atomique*¹ à la définition incertaine.

1 Voir article WIKIPÉDIA : https://fr.wikipedia.org/wiki/Rayon_atomique

Citation : Le **rayon atomique** d'un élément chimique est une mesure de la taille de ses atomes, d'habitude la distance moyenne entre le noyau et la frontière du nuage électronique qui l'entoure. Comme cette frontière n'est pas une entité physique bien définie, il y a plusieurs définitions non équivalentes du rayon atomique.