

Solvatation

* La solvatation c'est quand on arrive à rompre les liaisons intermoléculaires entre les molécules de substrat pour les remplacer par des liaisons avec le solvant (cf "solvatation")

* La solvatation s'effectue en 3 étapes Tou en un NPSI-PSI p 264

* Ionisation : $H_2O = (H^+; OH^-)$

• C'est la création d'une paire d'ion au sein du substrat.

• Il faut un solvant polaire pour ça

↳ cf "solvant"

* Dissociation : $(H^+; OH^-) = H^+ \dots OH^-$

• C'est la séparation des paires d'ions

• Il faut diminuer les interactions coulombiennes

↳ solvant dissociant ($\epsilon_r > 40$)

* Solvatation $H^+ \dots OH^- = H^+(aq) + OH^-(aq)$

• C'est l'étape où on crée des interactions stabilisantes entre les ions et le solvant

• On a $\left\{ \begin{array}{l} \text{alignement des moments dipolaires} \\ \text{création de liaisons H} \end{array} \right.$

↳ cf "solvatation Na^+ "

↳ il peut y avoir plusieurs coques de solvatation

↳ cf "coques solvatation"

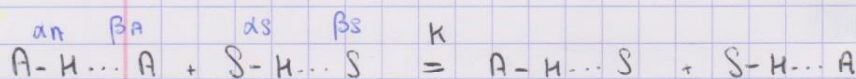
=> Cela permet d'introduire la notion d'électrolyte

- électrolyte fort: espèce sous forme d'ions libres (HCl)
- électrolyte faible: équilibre entre paire d'ions et ions libres (AcOH)

* Pour les espèces qui ne peuvent pas être ionisées, ce pour le solvant non dissociant / ionisant il y a uniquement la phase de solvation

* Modèle pour la solvation en chimie organique

- On ne prend en compte que des interactions électrostatiques
- Il faut l'établissement de liaisons H.



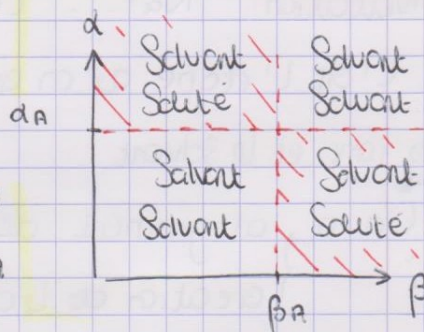
$$\Delta_r H_s = \alpha_A \beta_S + \alpha_S \beta_A - \alpha_A \beta_A - \alpha_S \beta_S$$
$$= -(\alpha_A - \alpha_S)(\beta_A - \beta_S)$$

avec α et β les énergies

- α : caractères donneur liaison H
- β : = accepteur =

On cherche à avoir $\Delta_r H_s < 0$

- Il faut $\begin{cases} \alpha_S > \alpha_A \text{ et } \beta_S < \beta_A \\ \alpha_S < \alpha_A \text{ et } \beta_S > \beta_A \end{cases}$



α = "table valeur alpha"
= "table valeur beta"