

Chapitre 4

Structure et polarité des espèces chimiques

4.1	Structure et schéma de Lewis des espèces chimiques	32
4.1.1	Configuration électronique des éléments chimiques	32
4.1.2	Schéma de Lewis d'un atome ou d'un ion monoatomique	32
4.1.3	Schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion polyatomique	33
4.2	Géométrie des molécules et ions polyatomiques	33
4.3	Polarité d'une molécule	34
4.3.1	Electronégativité d'un atome	34
4.3.2	Polarisation d'une liaison covalente	35
4.3.3	Polarité d'une molécule	35

Ce chapitre est le premier d'un ensemble portant sur la structure et les propriétés de la matière. Les connaissances de seconde concernant la structure des atomes et des ions sont indispensables à la compréhension de cette partie.

Dans un premier temps il sera rappelé comment se définit la structure électronique d'un élément chimique ou d'un ion monoatomique, notamment en précisant la notation exigible du nouveau programme. La structure des molécules et des ions polyatomiques sera détaillée, en particulier leur géométrie. Enfin la notion de polarité d'une molécule chimique sera expliquée, posant ainsi les bases permettant d'appréhender certaines propriétés des espèces chimiques, de leur cohésion et de leur capacité à interagir entre elles.

Tous les phénomènes décrits ici et dans les deux chapitres suivants permettent, sans le dire, d'amorcer la compréhension des interactions entre les différentes espèces chimiques pouvant mener à certaines réactions chimiques. Le lien s'établit alors avec les premiers chapitres de l'année concernant l'étude et le suivi des transformations chimiques.

4.1 Structure et schéma de Lewis des espèces chimiques

4.1.1 Configuration électronique des éléments chimiques

Dans l'ancien programme de seconde, la configuration électronique des éléments chimiques était introduite avec les couches K , L et M , qui correspondaient respectivement aux trois premières périodes de la classification périodique. Le modèle réel, dicté par la règle de Klechkowski, décrit de manière plus fine la façon dont se remplissent les sous-couches électroniques pour chaque élément chimique.

On fait correspondre les numéros 1, 2, 3 etc. correspondant aux couches principales K , L et M (périodes du tableau périodique). Ensuite pour chaque couche il y a des sous-couches : s pour les deux premières colonnes, p pour les six dernières, mais aussi d , f pour les blocs centraux de la classification (**hors programme**).

On se limitera ici aux trois premières périodes (1, 2 et 3) et aux sous-couches s et p . Les sous-couches s peuvent accueillir deux électrons, alors que les sous-couches p peuvent en accueillir six. Le remplissage pour chaque élément chimique se fait comme pour les couches K , L et M de l'ancien modèle, à savoir de la couche la plus basse à la couche la plus haute : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ comme le montre la classification périodique réduite aux trois premières périodes sur la figure 4.3 à la fin du chapitre.

4.1.2 Schéma de Lewis d'un atome ou d'un ion monoatomique

Comme vu dans le programme de seconde, tous les éléments chimiques de la classification périodique sont des atomes, constitués d'un noyau (protons et neutrons) et d'électrons.

Les ions monoatomiques sont des atomes ayant perdu ou gagné un ou plusieurs électrons, de sorte à obtenir la configuration électronique du gaz rare le plus proche dans la classification, avec une couche externe saturée en électrons.

Afin de représenter les atomes ou les ions monoatomiques en tenant compte de la structure électronique de la **couche externe**, on utilise la **représentation de Lewis**.

- Un **doublet non liant** correspond à un doublet d'électrons de la couche externe d'un atome, qui n'intervient pas dans une liaison avec une autre espèce. On représente les doublets non-liants dans la représentation de Lewis par un trait (-).

- Un **électron célibataire** (donc pas un doublet), est un électron de la couche externe qui n'intervient pas dans une liaison chimique, on le représente par un point (\bullet).
- Une **lacune électronique** correspond à une couche électronique restée vide pour un atome ou un ion. La représentation de Lewis met en évidence ces lacunes à l'aide d'un rectangle.

Exemples :

Atome ou ion	Symbole	Structure électronique	Formule de Lewis
Ion magnésium	Mg^{2+}	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\llbracket \text{Mg}^{2+}$
Carbone	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	$\cdot \dot{\text{C}} \cdot$
Ion oxygène	O^{2-}	$1s^2 2s^2 2p^6$	$\llbracket \text{O} \rrbracket^{2-}$

4.1.3 Schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion polyatomique

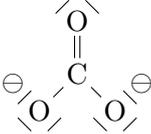
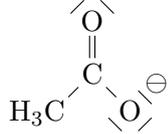
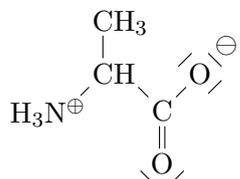
A plus grande échelle, les atomes et les ions monoatomiques peuvent s'associer pour former des molécules par l'intermédiaire de liaisons. Il existe plusieurs types de liaisons selon la nature de l'interaction entre les deux entités :

- les **liaisons covalentes** : deux atomes fournissent chacun un électron pour former un doublet liant.
- les **liaisons ioniques** : un cation et un anion se lient entre eux par l'intermédiaire d'une interaction électrostatique.
- les **liaisons métalliques** : *Hors Programme*
- les **liaisons hydrogène** : *voir chapitre suivant*
- les **liaisons de Van der Waals** : *voir chapitre suivant*

Lorsque les atomes ou ions monoatomiques s'associent pour former des molécules, ils le font de manière à ce que chaque atome ait la **configuration électronique du gaz rare le plus proche**.

Les ions polyatomiques sont des molécules possédant une charge car un ou plusieurs atomes la composant ont gagné ou perdu un ou plusieurs électrons.

Exemples :

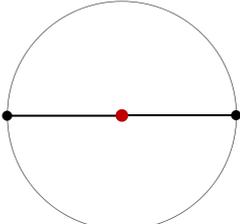
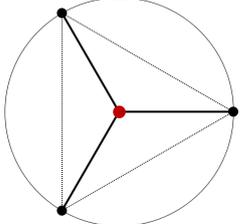
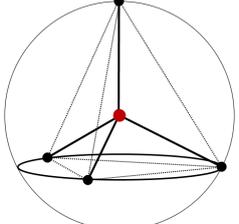
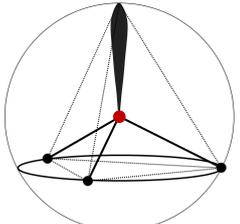
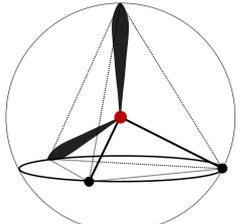
Molécule ou ion	Ethanol	Ion carbonate	Ion éthanoate	Alanine Zwitterion
Formule brute	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	CO_3^{2-}	$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$	$\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2^\pm$
Formule de Lewis	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\overline{\text{O}}\text{H}$			

4.2 Géométrie des molécules et ions polyatomiques

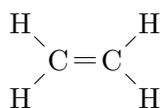
Au sein d'une molécule, les doublets liants et non liants se répartissent dans l'espace de sorte à être les plus éloignés les uns des autres. Ainsi, pour une entité donnée, la géométrie autour d'un atome donné va dépendre du nombre de doublets liants et non liants qui l'entourent, ainsi que du nombre de liaisons simples, doubles ou triples. Dans le cas des éléments chimiques des trois premières périodes, le nombre maximal de doublets autour d'un atome est de 4 (soit $4 \times 2 = 8$ électrons) (règle de l'octet dans l'ancien programme).

Les liaisons covalentes entre les différents atomes peuvent être **simples, doubles ou triples**.

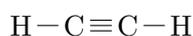
Le tableau suivant présente la géométrie autour d'un atome en fonction du nombre de doublets entourant l'atome, et de la nature de la liaison, à savoir si elle est simple, double ou triple. On note D le nombre de doublets entourant l'atome, D_{NL} le nombre de doublets non-liants, D_L le nombre de doublets liants.

Nombre de doublets	$D = 2$ dont $2D_L$ et $0D_{NL}$	$D = 3$ dont $3D_L$ et $0D_{NL}$	$D = 4$ dont $4D_L$ et $0D_{NL}$
Nom de la géométrie	Linéaire	Triangulaire plane	Tétraédrique
Représentation spatiale			
Nombre de doublets	$D = 4$ dont $3D_L$ et $1D_{NL}$	$D = 4$ dont $2D_L$ et $2D_{NL}$	
Nom de la géométrie	Pyramidale triangulaire	Coudée	
Représentation spatiale			

Dans le cas où l'on a 4 doublets liants (donc 0 non liants) avec une double liaison, la géométrie sera triangulaire plane :



Si l'on a 4 doublets liants (dont 0 non liants) avec une triple liaison, la géométrie sera linéaire :



4.3 Polarité d'une molécule

4.3.1 Électronégativité d'un atome

Électronégativité

L'Électronégativité χ (prononcée « khi ») d'un atome est la grandeur qui caractérise la capacité de cet atome à attirer les électrons vers lui au sein d'une liaison chimique avec un autre atome. Plus l'électronégativité est élevée, plus l'atome attire les électrons vers lui.

<i>Échelle de Pauling</i>							
${}^1\text{H}$ 2,2							${}^2\text{He}$
${}^3\text{Li}$ 1,0	${}^4\text{Be}$ 1,5	${}^5\text{B}$ 2,0	${}^6\text{C}$ 2,5	${}^7\text{N}$ 3,0	${}^8\text{O}$ 3,5	${}^9\text{F}$ 4,0	${}^{10}\text{Ne}$
${}^{11}\text{Na}$ 0,9	${}^{12}\text{Mg}$ 1,2	${}^{13}\text{Al}$ 1,5	${}^{14}\text{Si}$ 1,8	${}^{15}\text{P}$ 2,2	${}^{16}\text{S}$ 2,5	${}^{17}\text{Cl}$ 3,1	${}^{18}\text{Ar}$

Figure 4.1 – Evolution de l'électronégativité pour les éléments des trois premières périodes de la classification périodique

4.3.2 Polarisation d'une liaison covalente

Polarisation d'une liaison covalente

Lorsque la différence d'électronégativité entre deux atomes A et B est supérieure à 0,4 on dit que la liaison est **polarisée**.

L'atome le plus électronégatif porte alors une charge partielle notée δ^- et l'atome le moins électronégatif porte une charge partielle notée δ^+ .

Exemples : Polarisation de quelques liaisons

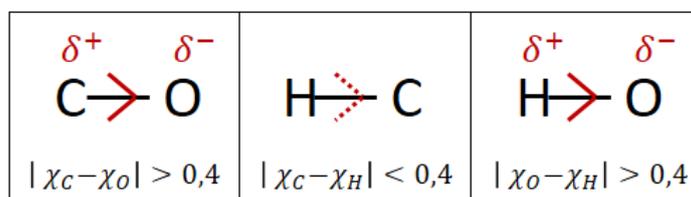


Figure 4.2 – Polarisation des liaisons carbone-oxygène, carbone-hydrogène et oxygène-hydrogène

4.3.3 Polarité d'une molécule

Au sein d'une molécule, plusieurs liaisons peuvent être polarisées. On définit les **barycentres géométriques** G^+ et G^- respectivement des charges partielles δ^+ et δ^- .

Polarité d'une molécule

Une molécule est dite **polaire** si elle vérifie deux critères :

- La molécule possède des liaisons polarisées.
- Les barycentres G^+ et G^- ne sont pas confondus par symétrie.

Dans le cas contraire, on dit que la molécule est **apolaire**.

Exemples :

Nom de la molécule	Tétrachlorométhane CCl ₄	Eau H ₂ O
Représentation de la molécule		<p>$G^- \neq G^+$</p>
Liaisons polarisées et centres de symétrie	Liaisons polarisées $G^+ = G^-$	Liaisons polarisées $G^+ \neq G^-$
Polarité de la molécule	Apolaire	Polaire

