



Agencement à l'échelle atomique de la matière

Prérequis



Cours atomistique

Lycée (2^{nde})

Notion d'atome / molécule / ion

Lycée



Lecture du tableau périodique des éléments

Lycée

I Vers le tableau périodique des éléments

I.A Constitution des atomes

Un atome est constitué de trois types de particules :

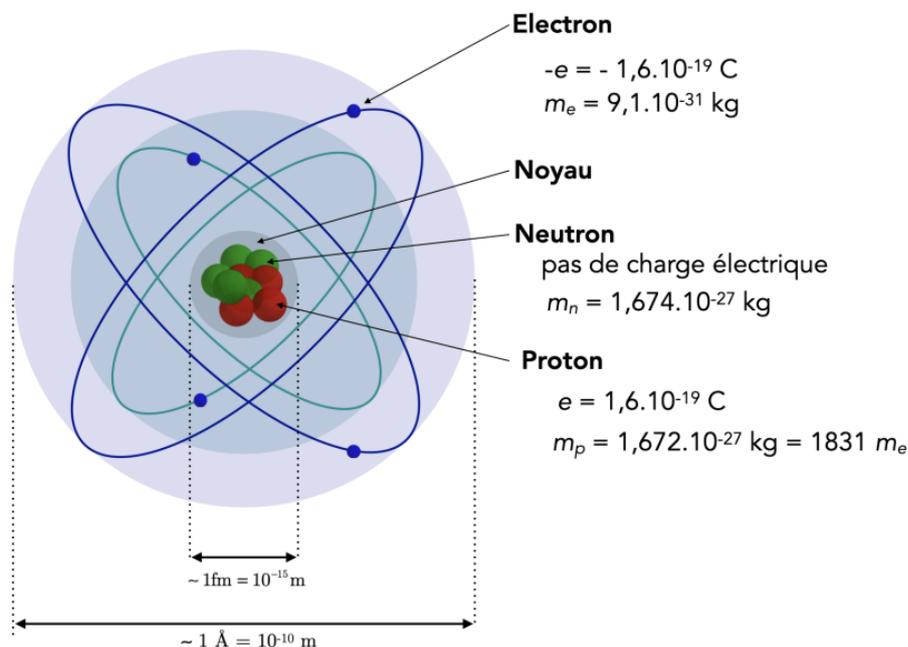
- ↪ les protons, de charge $+e$ et de masse $m_p \approx 1,67 \times 10^{-27}$ kg ;
- ↪ les neutrons, de charge nulle et de masse $m_n \approx 1,67 \times 10^{-27}$ kg ;
- ↪ les électrons, de charge $-e$ et de masse $m_e \approx 9,11 \times 10^{-31}$ kg

Remarque : seul l'électron est une particule élémentaire, les protons et les neutrons sont des particules composites constituées de quarks.

La masse de l'atome est essentiellement constituée par la masse des protons et des neutrons, car la masse de l'électron est très faible par rapport à celle du proton ou du neutron.

Dans le modèle de l'atome de Bohr :

- ↪ le noyau, au centre, regroupe les protons et les neutrons (donc la masse de l'atome) ;
- ↪ les électrons gravitent autour du noyau dans des couches électroniques (c'est-à-dire des niveaux d'énergie quantifiés).



I.C Modèle quantifié de l'atome

Le nombre d'électrons dans un atome est égal au nombre de protons dans le noyau, car l'atome est électriquement neutre. Donc, pour un atome de numéro atomique Z , il y a Z électrons.

D'après le modèle quantique de l'atome, les électrons sont organisés en couches électroniques : une couche électronique correspond à une période (ligne) du tableau périodique des éléments. Chaque couche électronique est constituée de sous-couches :

- ↪ la première couche électronique (la plus proche du noyau) est la couche s , qui peut contenir jusqu'à 2 électrons ;
- ↪ la deuxième couche électronique est la couche p , qui peut contenir jusqu'à 6 électrons ;
- ↪ la troisième couche électronique est la couche d , qui peut contenir jusqu'à 10 électrons ;
- ↪ la quatrième couche électronique est la couche f , qui peut contenir jusqu'à 14 électrons.

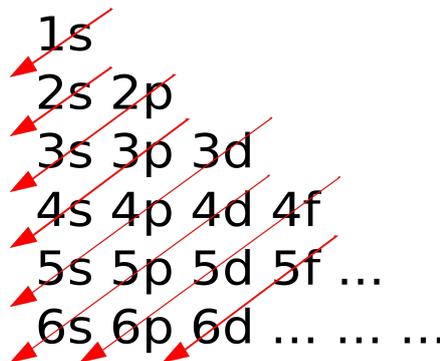
Diagramme du tableau périodique des éléments montrant les sous-couches électroniques (s, p, d, f) et les blocs correspondants. Les sous-couches sont représentées par des cases colorées (bleu pour s, vert pour p, orange pour d, rouge pour f) et les électrons sont indiqués par des traits dans ces cases. Les blocs sont étiquetés : s block, p block, d block, f block. Les éléments sont classés par numéro atomique (1 à 118) et par période (1 à 7). Les sous-couches sont notées de 1s à 7f.

Règle de remplissage des sous-couches électroniques

Le sous-couches se remplissent dans l'ordre suivant (pour les 3 premières périodes) :

$$1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p \rightarrow 3s \rightarrow 3p$$

Pour l'ensemble des périodes, on suit la règle de Klechkowski (Hors-programme) :



Règle de Klechkowski

Exemples de configuration électronique des atomes :

- | | |
|--------------------------|-------------------------------------|
| ↪ H : $1s^1$; | ↪ Ne : $1s^2 2s^2 2p^6$; |
| ↪ He : $1s^2$; | ↪ Na : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$; |
| ↪ Li : $1s^2 2s^1$; | ↪ Mg : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$; |
| ↪ Be : $1s^2 2s^2$; | ↪ Al : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$; |
| ↪ B : $1s^2 2s^2 2p^1$; | ↪ Si : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$; |
| ↪ C : $1s^2 2s^2 2p^2$; | ↪ P : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$; |
| ↪ N : $1s^2 2s^2 2p^3$; | ↪ S : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$; |
| ↪ O : $1s^2 2s^2 2p^4$; | ↪ Cl : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$; |
| ↪ F : $1s^2 2s^2 2p^5$; | ↪ Ar : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$; |

I.D Électrons de valence

Les électrons de valence sont les électrons situés sur la couche électronique la plus externe de l'atome. Ils sont responsables des propriétés chimiques de l'élément, car ce sont eux qui participent aux réactions chimiques.

Pour les 3 premières périodes du tableau périodique, la couche externe est la couche s et p . Exemples :

- ↪ C : $1s^2 2s^2 2p^2$: 4 électrons de valence ;
- ↪ O : $1s^2 2s^2 2p^4$: 6 électrons de valence ;
- ↪ Ne : $1s^2 2s^2 2p^6$: 8 électrons de valence.

Pour les périodes suivantes, la couche externe est la couche s ainsi que la couche d ou f si elles ne sont pas complètement remplies. Exemples :

- ↪ K : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$: 1 électron de valence ;
- ↪ Co : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$: 9 électrons de valence ;
- ↪ Ga : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^1$: 3 électrons de valence (la sous-couche d est complètement remplie, donc on ne la compte pas) ;

II Représentation de Lewis des molécules

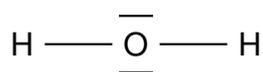
La représentation de Lewis consiste à représenter les atomes d'une molécule ainsi que les liaisons chimiques entre eux dans un plan 2D. Il s'agit d'une représentation simplifiée qui permet de visualiser les électrons de valence et les liaisons chimiques entre les atomes, mais qui ne peut rendre compte de toute la réalité.

II.A Liaisons covalentes et non liantes

Liaison covalente

Une liaison covalente est une liaison chimique entre deux atomes qui mettent en commun des électrons de valence. Elle est représentée par une ligne entre les deux atomes dans la représentation de Lewis.

Par exemple, la molécule d'eau H_2O est représentée par :



On peut voir que l'oxygène partage ses 2 électrons de valence avec les 2 hydrogènes pour former 2 liaisons covalentes. L'oxygène possède également 2 doublets non liants, qui sont des paires d'électrons de valence qui ne participent pas à la liaison covalente.

Doublet non liant

Un doublet non liant est une paire d'électrons de valence qui ne participe pas à la liaison covalente. Il est représenté par deux points ou un tiret entre les deux atomes dans la représentation de Lewis.

II.B Méthode : construction de la représentation de Lewis

Règle de l'octet

Chaque atome tend vers la configuration électronique la plus stable : en s'associant, ils tendent vers la configuration électronique du gaz rare qui le suit dans la classification périodique.

Ainsi : dans une molécule ou un ion, les atomes s'associent de façon à ce que chacun d'eux soit entouré de huit électrons.

Exception : l'atome d'hydrogène obéit à la règle du duet en s'entourant de 2 électrons au maximum.

Charge formelle

La formation de liaisons covalentes par un atome peut se traduire par une perte ou un gain d'électron par rapport à l'atome neutre, on le représente par une charge formelle localisée sur l'atome dans la structure de Lewis de l'édifice polyatomique étudié.

Étapes de construction de la représentation de Lewis

Pour construire la représentation de Lewis d'une molécule, on suit les étapes suivantes :

1. Déterminer le nombre total d'électrons de valence (n_v) : additionner les électrons de valence de chaque atome dans la molécule. Δ il faudra tenir compte des charges globales de l'ion si la molécule est un ion.
2. Calculer le nombre de liaisons : si n_v est pair, il y a $n_d = n_v/2$ doublets. Si n_v est impair, il y a $n_d = (n_v - 1)/2$ doublets et un électron célibataire.
3. Placer les atomes : placer les atomes dans l'espace. On veillera à placer l'atome avec la valence la plus importante au centre de la molécule. On placera notamment les atomes d'hydrogène en périphérie, car ils ne peuvent pas former de doublets non liants.
4. Former des liaisons covalentes : former un doublet liant entre chaque atome. Compléter l'édifice avec des doublets non liants pour chaque atome.
5. Vérifier la règle de l'octet : compter la charge pour chaque atome et s'assurer que chaque atome est entouré de 8 électrons (sauf l'hydrogène qui doit être

entouré de 2 électrons). Si la règle de l'octet n'est pas respectée, on peut former des liaisons multiples (double ou triple) entre les atomes pour respecter la règle de l'octet.

6. Vérifier la charge formelle : calculer la charge formelle de chaque atome dans la molécule : c'est-à-dire la différence entre le nombre d'électrons de valence de l'atome dans la molécule et le nombre d'électrons de valence de l'atome dans l'atome neutre.

Exemple : acide formique HCOOH et monoxyde d'azote NO , monoxyde de carbone CO , hydronium H_3O^+ .

Voir vidéo explicative : méthode par Paul Olivier.

III Polarité des liaisons

III.A Électronégativité

L'électronégativité est la capacité d'un atome à attirer les électrons de valence dans une liaison chimique. Elle est mesurée par l'échelle de Pauling, qui attribue une valeur d'électronégativité à chaque élément chimique.

Ce qui est à retenir :

Électronégativité

On note l'électronégativité d'un élément chimique par χ (la lettre grecque chi).

↪ l'électronégativité augmente de gauche à droite dans le tableau périodique ;

↪ l'électronégativité diminue de haut en bas dans le tableau périodique.

Ainsi, l'élément le plus électronégatif est le fluor F.

Pour construire la représentation de Lewis d'une molécule, on peut utiliser les valeurs d'électronégativité pour déterminer la polarité des liaisons entre les atomes :

Structure d'une molécule à partir de l'électronégativité

On placera toujours l'atome le moins électronégatif au centre de la molécule. On placera ensuite les atomes les plus électronégatifs en périphérie en terminant par les atomes d'hydrogène.

III.B Polarisation d'une liaison

On note $\chi(A)$ l'électronégativité de l'atome A et $\chi(B)$ l'électronégativité de l'atome B .

Si A et B sont deux atomes liés, le doublet liant est polarisé vers l'atome le plus électronégatif : en effet celui tend à attirer les doublets à lui.

Ainsi, si $\chi(A) > \chi(B)$, le doublet liant est polarisé de l'atome B vers l'atome A et on dit que la liaison est polaire.

Il en résulte une différence de charge entre les deux atomes qui induit un moment dipolaire \vec{p} , qui est un vecteur de norme $\|\vec{p}\| = q \cdot d$ où q est la charge partielle et d la distance entre les deux atomes.

La charge partielle de chaque atome est : $q_A = -\delta e$ et $q_B = \delta e$ (A est négatif, car il attire les électrons, donc à "plus" d'électrons, alors que B est positif, car il est en déficit d'électrons). Avec e la charge élémentaire, et δ un coefficient de polarisation qui est compris entre 0 et 1 : qui représente le fait que la liaison soit ionique (si $\delta = 1$, des charges apparaissent alors sur A et B) ou covalente (si $\delta = 0$, pas de charges sur A et B).

À retenir :

Polarité d'une liaison

La différence d'électronégativité entre deux atomes liés permet de déterminer la polarité de la liaison :

$$\vec{p} = qd\vec{u}$$

où \vec{u} est le vecteur unitaire de la liaison entre les deux atomes A et B, dirigé du plus électronégatif (charge -) vers le moins électronégatif (charge +).

III.C Polarité d'une molécule

Polarité d'une molécule

La polarité d'une molécule est déterminée par la somme des moments dipolaires de chaque liaison dans la molécule :

↪ si la somme des moments dipolaires est nulle, la molécule est apolaire.

↪ si la somme des moments dipolaires n'est pas nulle, la molécule est polaire.

Attention, ce sont des vecteurs, donc il faut bien prendre en compte la géométrie de la molécule.

Exemples : H_2O est polaire, car les moments dipolaires des liaisons O-H ne s'annulent pas, alors que CO_2 est apolaire, car les moments dipolaires des liaisons C=O s'annulent.