

Chapitre STR 01 (Fiche)

Structure d'une entité chimique

Capacités exigibles

- ☐ STR01.01 Déterminer, pour les éléments des blocs s et p, le nombre d'électrons de valence d'un atome à partir de la position de l'élément dans le tableau périodique.
- ☐ STR01.02 Citer les éléments des périodes 1 à 3 du tableau périodique (nom, symbole, numéro atomique).
- ☐ STR01.03 Établir un ou des schémas de Lewis pertinent(s) pour une molécule ou un ion.
- ☐ STR01.04 Associer qualitativement la géométrie d'une entité à la minimisation de son énergie.
- ☐ STR01.05 Prévoir et interpréter les structures de type AX_n avec $n \leq 4$ et AX_pE_q , avec $p + q = 3$ ou 4.
- ☐ STR01.06 Comparer les électronégativités de deux atomes à partir de données ou de leurs positions dans le tableau périodique.
- ☐ STR01.07 Prévoir la polarisation d'une liaison à partir des électronégativités comparées des deux atomes mis en jeu.
- ☐ STR01.08 Relier l'existence ou non d'un moment dipolaire permanent à la structure géométrique d'une molécule.
- ☐ STR01.09 Déterminer direction et sens du vecteur moment dipolaire d'une liaison ou d'une molécule.

Incontournables

- Donner la configuration électronique du ... à l'état fondamental et identifier ses électrons de valence.
- Proposer une structure de Lewis pour ...
- Quelle est la géométrie autour de l'atome de ... ?
- La molécule ... est-elle polaire ?

FALC

La répartition des électrons dans un atome est fournie en complétant la "configuration électronique à l'état fondamental". On complète dans l'ordre $1s\ 2s\ 2p\ 3s\ 3p\ 4s\ 3d\ 4p$, en allant au plus jusqu'à 2 électrons pour les "sous-couches" " s ", 6 pour les " p " et 10 pour les " d ".

Exemple pour $Z = 22$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^2$ ($2 + 2 + 6 + 2 + 6 + 2 + 2 = 22$)

Les électrons de valence sont ceux pour lesquels la sous-couche possède le numéro (1, 2, 3, 4, ...) le plus grand, ou pour lesquels la sous-couche est en cours de remplissage.

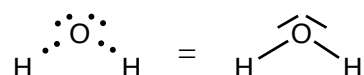
Exemple précédent : $4s^2\ 3d^2$

La configuration électronique de valence est liée à la position dans la classification périodique. Le plus grand nombre indique la ligne, et la sous-couche en cours de remplissage.

Exemple : $4s$ donc quatrième ligne, d^2 donc deuxième colonne du bloc d soit quatrième colonne.

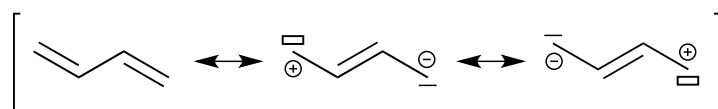
Les atomes ont tendance à s'entourer de 8 électrons lorsqu'ils forment des ions ou des molécules, c'est la règle de l'octet (deux électrons pour l'hydrogène, règle du duet). Le modèle de Lewis représente de manière localisée les doublets d'électrons de valence, liants ou non liants.

Exemple :



Quand il y a une liaison double dans une molécule, le modèle de Lewis peut ne pas être suffisant. C'est le cas s'il y a une alternance liaison double - liaison simple - {liaison double ou lacune électronique ou doublet non liant}. La molécule est alors décrite par une moyenne de schémas de Lewis, appelées formes mésomères.

Exemple :



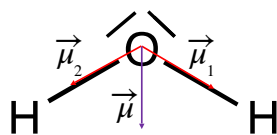
La géométrie locale autour d'un atome peut être prédite à l'aide de la théorie VSEPR, modèle basé sur la répulsion électrostatique entre doublets d'électrons de valence. Le nombre d'atomes voisins p et le nombre de doublets non liants q permet de prédire le type VSEPR.

Type	AX_2E_0	AX_2E_1	AX_2E_2
Géométrie	Linéaire	Coudée	Coudée
Type	AX_3E_0	AX_3E_1	AX_4E_0
Géométrie	Trigonale plane	Pyramidale à base triangulaire	Tétraédrique

Exemple : Géométrie coudée de la molécule d'eau car l'atome d'oxygène est de type AX_2E_2 .

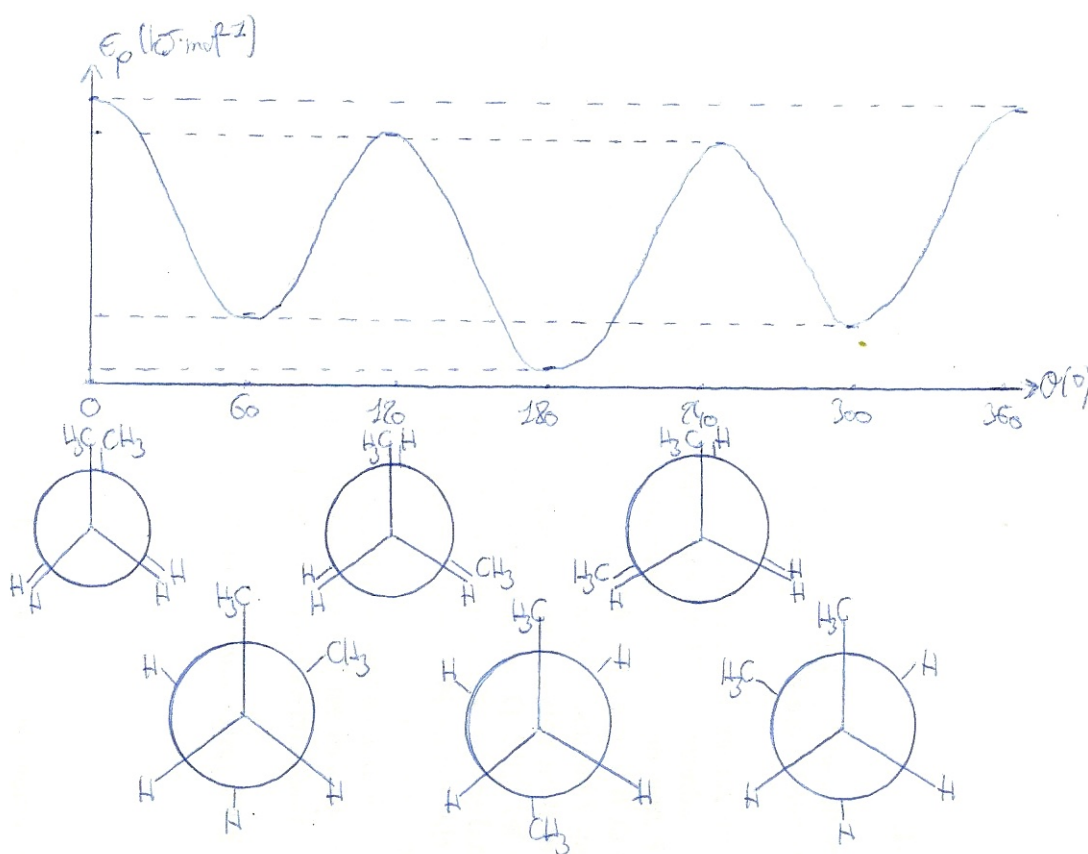
La différence d'électronégativité entre éléments entraîne une polarisation d'une liaison, modélisée par un vecteur appelé moment dipolaire. A l'échelle de la molécule, en sommant sur toutes les liaisons en tenant compte de la géométrie, peut apparaître un moment dipolaire global. La molécule est alors polaire.

Exemple : La molécule d'eau est polaire.



Du fait de la rotation autour des liaisons simples, les molécules peuvent adopter différentes géométries globales, appelées conformations. Certaines sont plus stables que d'autres du fait de la gêne qui peut exister entre groupements plus ou moins proches, appelée gêne stérique. Les conformations remarquables portent des noms : éclipsée, décalée gauche, décalée anti. Il est possible de représenter l'énergie potentielle de chaque conformation en fonction d'un angle entre liaisons sur la projection de Newman, appelé angle dièdre.

Exemple : Diagramme d'énergie potentielle pour le butane



Conformations éclipsées : 0° , 120° et 240°

Conformations décalées gauches : 60° et 300°

Conformation décalée anti : 180°

(angle entre les deux groupements CH_3 sur la projection)