Intra-atomic and intermolecular interactions

II.1. Introduction

Les interactions **intra**-atomiques et **inter**moléculaires sont des concepts fondamentaux en chimie et en physique qui décrivent les forces agissant entre les atomes et entre molécules. Ces interactions sont essentielles pour comprendre la structure et le comportement des atomes et des molécules. Elles jouent un rôle fondamental dans la chimie, la biologie et la physique, influençant la structure des molécules, leurs propriétés physiques et les réactions chimiques.

II.2. Quelques définitions

2.1. La molécule

Une **molécule** est la plus petite portion d'une substance qui conserve ses propriétés chimiques et physiques. Chaque **molécule** est un système composé d'un ensemble d'atomes organisés et liés entre eux par des liaisons chimiques de diverse nature. Ces atomes peuvent être du même élément ou d'éléments différents, auquel cas, ils sont appelés **composés**.

Exemple : la molécule d'eau H_2O, la molécule de dioxygène O_2, …, etc.

2.2. L'électronégativité

L'électronégativité notée **χ** est une grandeur qui traduit **l'aptitude** ou bien **la tendance** d'un atome à **attirer** vers lui des électrons. Dans une *liaison covalente*, l'atome le **plus électronégatif** rapproche vers lui les électrons de la liaison, ce qui lui confère un **pôle négatif**. Alors que l'atome le **moins électronégatif** obtient à son tour un **pôle positif**. Cela crée une **molécule polaire** dont le partage des électrons est **inégal.**

Exemples :

Elément (Atome)	**L'électronégativité χ** (selon le tableau périodique de Mendeleïev)
Oxygène (O)	3.44
Carbone (C)	2.5
Azote (N)	3.0
Fluor (F)	4.0
Hydrogène (H)	2.2
Sodium (Na)	0.9

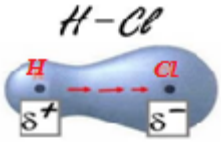
Tableau 1. L'électronégativité **χ** de quelques éléments chimiques.

Intra-atomic and intermolecular interactions

2.3. Polarité - Dipôle

La **polarité** est le résultat de la **répartition inégale** des charges partielles (inférieures à celle de l'électron) entre **deux atomes différents d'électronégativités légèrement différentes (**voisines**)** d'une molécule formant une *liaison covalente* à condition que **$0.5 < \Delta\chi < 1.7$.** Le **dipôle** est donc la **molécule polaire** résultante de cette **répartition inégale** et qui possède **deux pôles,** l'un **est positif** symbolisé par (δ^+) et l'autre **est négatif** symbolisé par (δ^-).

Exemple : la molécule de HCl. $\chi_H = 2,2$ et $\chi_{Cl} = 3,0$

$\Delta\chi$: 0.5 < **0.8** < 

1.7

Remarque

Le **pôle électronégatif** (δ^-) d'une **molécule polaire** constitue **l'atome le plus électronégatif** de la liaison covalente alors que le **pôle électropositif** (δ^+) constitue l'atome le **moins électronégatif** de cette liaison.

2.4. Molécule polaire

La **molécule polaire** est une **molécule** qui **ne partage pas uniformément la charge électrique** à travers d'une liaison **covalente** et qui présente un **dipôle** sur les atomes formant la liaison.

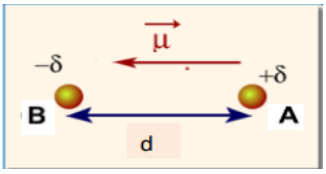
2.5. Moment dipolaire

En électricité, deux charges électriques de grandeurs égales mais de signes opposés, **+ q** et **(- q)**, séparées par une distance **r**, constituent un dipôle. On le caractérise par un vecteur de module égal au produit **q × r**, orienté, par convention, de la charge négative à la charge positive (du -vers le +). Dans une molécule diatomique polaire, chaque atome porte une charge partielle δ^+ ou (δ^-), où **0** < δ < **|e|** où **e** est la charge de l'électron ($e = -1,6.10^{-19}C$) :

Le moment dipolaire est représenté par une flèche qui **pointe du pôle positif** (charge partielle positive δ^+) **vers le pôle négatif** (charge partielle négative δ^-). Le moment dipolaire est alors un vecteur qui se dirige vers l'atome le **plus électronégatif**. Il caractérise la force et la direction du dipôle. Cette grandeur

Intra-atomic and intermolecular interactions

traduit le **déséquilibre des charges électriques au sein d'un dipôle**. On le représente par un vecteur nommé "mu" et noté $\vec{\mu}$. Il s'exprime en Debye (D) ou C. m.



Soit **q** la charge positive (q = **δ^+)** . Si **d** est la distance qui sépare les deux barycentres, le moment dipolaire électrique est un vecteur dont le module est, par définition :

$$\mu = q \times d = \delta \times d$$

Où

q : est la charge portée par l'atome (unité : Coulomb).

d : est la longueur de la liaison en (m) (1 Å = 10^{-10} m).

δ : est la charge partielle ($0 < \delta < |e|$)

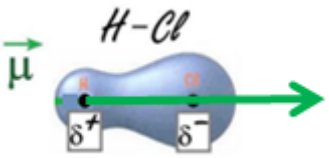
1 debye (D) = 10^{-18} ues· cm = 3, 3 ×10^{-30} C· m.

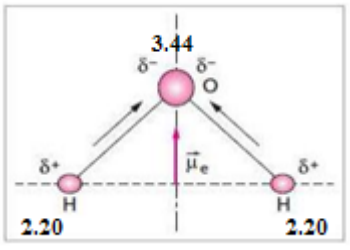
Précisément : **1 D = 3.33564×10^{-30} C. m**

ues : unité électrostatique

Exemples :

1. Dans la molécule de chlorure d'hydrogène HCl, nous avons vu que les charges négatives étaient plutôt vers l'atome de chlore.





2. Dans la molécule H_2O (χ_H = 2,20 et χ_O = 3,44). Les deux flèches le long des liaisons covalentes polaires sont les deux composantes du moment dipolaire électrique total de la molécule.

N.B: Il existait auparavant **deux conventions contradictoires**: la convention établie maintenant, est une convention opposée, dite des chimistes, dans laquelle le moment dipolaire est orientée de la charge partielle positive δ^+ à la charge partielle négative δ^- (de l'atome **le moins électronégatif** vers celui **le**

plus électronégatif). On trouve encore dans les volumes de référence l'une ou l'autre de ces conventions.

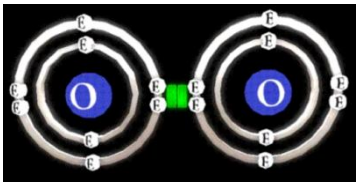
2.6. Molécule apolaire

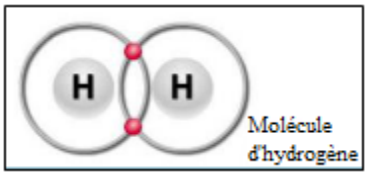
Une **molécule apolaire** est une molécule qui ne possède aucune **charge électrique** ou **charge partielle**.

Les **molécules apolaires** sont composées d'atomes qui ont une valeur d'**électronégativité similaire (Δχ = 0).** Lorsque deux atomes d'électronégativité similaire partagent des électrons dans une **liaison covalente**, ils sont attirés vers l'un ou l'autre atome de manière égale. Il y a donc une répartition égale de la charge et la molécule entière est **neutre**, et donc **apolaire**.

Exemples de molécules apolaires :

Le dioxygène O = O (O_2) et l'hydrogène gazeux H-H (H_2).





II. 3. La liaison chimique

La liaison chimique est le phénomène physique qui lie les atomes entre eux en **échangeant** ou **partageant** un ou plusieurs électrons par des **forces électrostatiques**. La formation d'une liaison chimique entre deux atomes nécessite la mise en commun d'électrons en minimisant de l'énergie. Le but de la formation des liaisons chimiques entre les atomes est d'acquérir **la structure électronique la plus stable** qui est **celle du gaz rare le plus proche dans la classification périodique**.

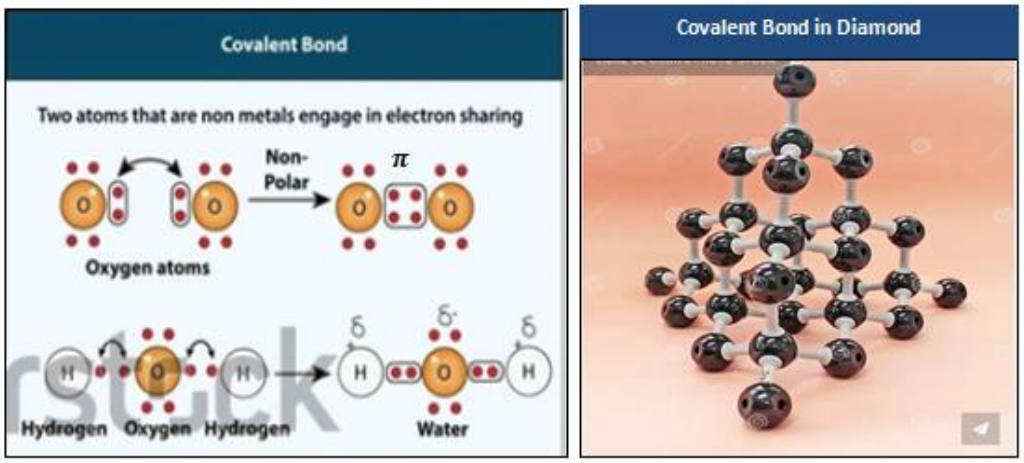
Selon l'énergie et le mécanisme de formation de la liaison, on peut classer les liaisons chimiques en deux catégories : **liaisons fortes intra-atomiques** et **liaisons faibles intermoléculaires.**

II.3.1. Les interactions (liaisons) intra-atomiques

Les interactions intra-atomiques sont dues à des forces qui agissent entre atomes. Ce sont des **liaisons fortes** qui relient les atomes entre eux pour former des composés. Elles existent dans les molécules, les cristaux ou dans les solides métalliques et elles organisent les atomes en structures organisées. Il existe 3 types de **liaisons intra-atomiques** : **covalente**, **ionique** et **métallique**.

Intra-atomic and intermolecular interactions

A. La liaison covalente : Une liaison covalente est une liaison chimique **très forte** difficile à décomposer qui se forme entre deux atomes **non métalliques** **d'électronégativités similaires** ou **voisines** se partagent entre eux deux électrons ou plus (un électron pour chacun ou plus venant du même atome) appartiennent à l'une de leurs couches les plus externes afin de former un **doublet d'électrons** ou plus liant les deux atomes comme dans le cas des solides durs tel que le diamant (atomes du carbone condensés) où les atomes du carbone sont difficiles à décomposer (figure **1b**). Dans le dioxygène (O_2) et la molécule d'eau (liaisons covalentes polaires).



a *b*

Figure 1. *Liaison covalente (Covalent bond) dans :*
a- Le dioxygène et la molécule d'eau (ou la glace);
b - Le diamant.

Remarque

-Les composés **moléculaires** désignent des espèces liées par **covalence**, généralement de faible **masse moléculaire**.

-Les composés **macromoléculaires** sont des composés de **masse moléculaire** élevée, liés par **covalence** et linéaires, ramifiés ou réticulés.

- Pour briser les liaisons fortes, il faut fournir des énergies de dissociation de l'ordre de 200 à 500 kJ par mole de liaison diatomique (soit environ 50 à 100 kcal par mole ; ou environ 2 à 5 eV par liaison).

- Les gaz rares (Ar, Kr, Xe et Ne) ne forment pas des molécules parce qu'ils ne se combinent avec aucun autre atome car il n'y avait pas de force entre les atomes. Les atomes sont **saturés.**

Intra-atomic and intermolecular interactions

B. La liaison ionique : C'est un type de liaison chimique qui se forme entre deux atomes un **métal** et un **non-métal** possédant une **grande différence d'électronégativité** (par convention **Δχ >1.7**). Le métal donne un ou plusieurs électrons de valence pour former un ion chargé positivement nommé ***cation***. Le non-métal capte ces électrons pour former un ion chargé négativement nommé ***anion***. La liaison résulte donc de **l'attraction électrostatique** entre le cation et l'anion résultant. Cette liaison est très résistante et elle peut rompre par un choc ou une déformation qui rapproche les ions de même signe.

Exemple :

- ✓ Cas du sel de cuisine ou chlorure de sodium NaCl (le halite) ;
- ✓ Cas d'oxyde de magnésium (MgO).

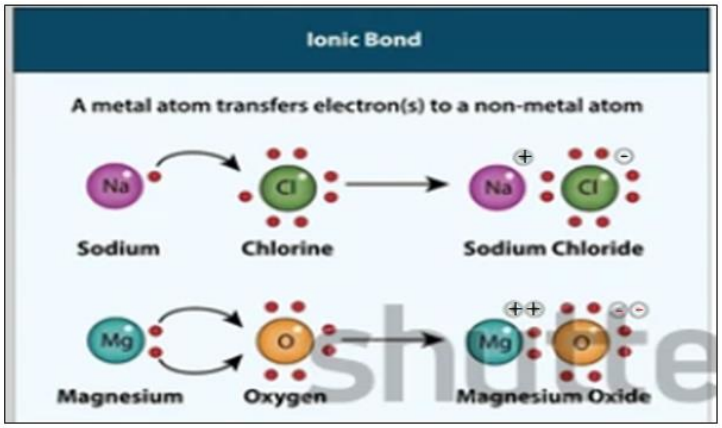
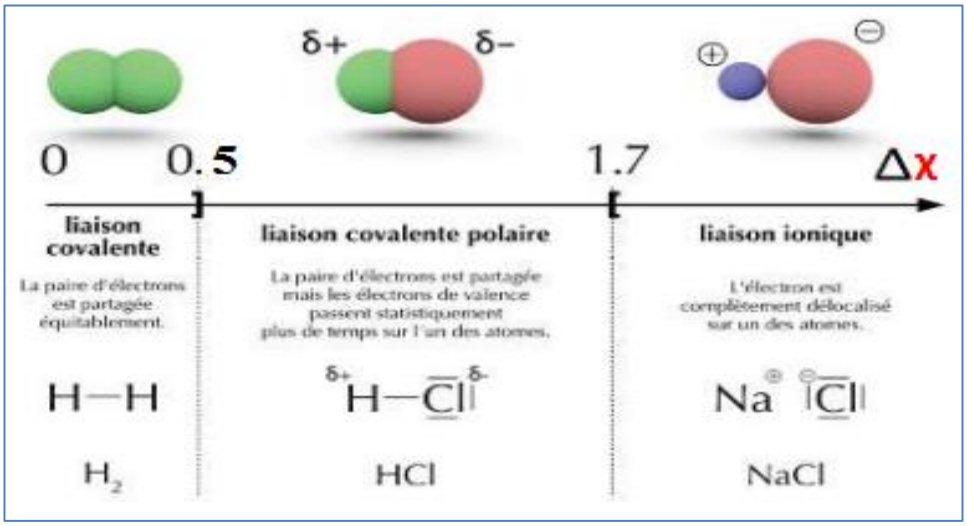


Figure 2. *Exemple de liaison ionique dans les molécules de chlorure de sodium (NaCl) et oxyde de magnésium.*



Intra-atomic and intermolecular interactions

Classification des liaisons chimiques entre atomes selon la différence entre leurs électronégativités ***Δχ.***

Remarque :

La liaison est purement covalente ou covalente neutre (apolaire) si: $\delta = 0$;

La liaison covalente est polarisée si: $0 < \delta < e$;

La liaison covalente est ionique si: $\delta = e$.

C. La liaison métallique: C'est une **liaison** résultant de ***l'attraction électrostatique*** entre des **cations métalliques relativement immobiles** (atomes ionisés positivement) et des **électrons libres délocalisés** qui l'entourent (charges négatives mobiles libérées par les atomes métalliques à cause de l'agitation thermique à température ambiante) comme le montre la figure **3**. La liaison métallique **solidifie la matière à température ambiante** (à l'exception du mercure) et rende les solides métalliques **très durs.**

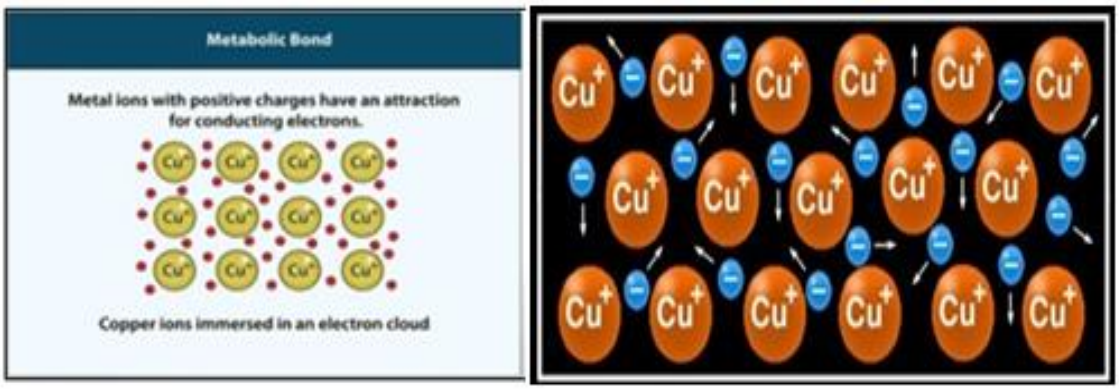


Figure 3. *Exemple de liaison métallique dans le métal du cuivre.*

Exemple : La liaison métallique existe dans les métaux purs (fer, cuivre, aluminium…etc.) et les alliages métalliques comme la fonte Fe_3C (fer et 2% carbone en masse), l'acier (fer et 0.02% carbone en masse), le bronze (cuivre et étain), NiZr,….etc.

II.3.2. Les Interactions intermoléculaires

Les interactions intermoléculaires sont dues à des forces de cohésion qui agissent entre les molécules où les possibilités de liaisons fortes sont déjà saturées. Ces liaisons sont très faibles faciles à rompre (à briser) et leur rupture ne nécessite pas autant d'énergie. Une énergie de dissociation allant d'environ 1 à 40 $kJ \cdot mol^{-1}$ (moins de 50 $kJ \cdot mol^{-1}$) est suffisante pour les briser. De telles forces intermoléculaires permettent la solidification de gaz. Ces interactions incluent :

Intra-atomic and intermolecular interactions

A. La liaison hydrogène : la liaison hydrogène est l'**attraction électrostatique** entre un **atome d'hydrogène lié par covalence à un atome très électronégatif** (comme l'atome O) d'une molécule et **une autre molécule contenant au moins un atome de fluor, d'oxygène** ou **d'azote**. Cette liaison est très faible et rende la matière solide à des températures très faibles.

Exemple : Cas de la glace ⇔ plusieurs molécules d'eau liées par des liaisons hydrogène comme le montre la figure 4.

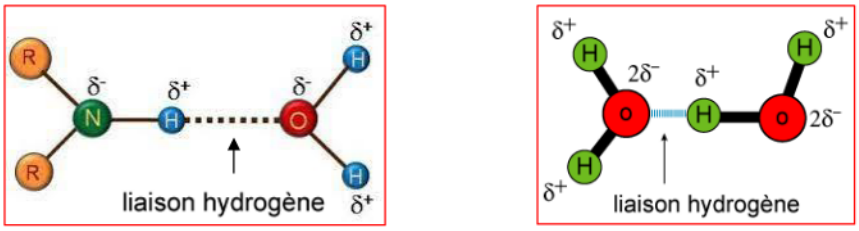


Figure 4. *La liaison hydrogène dans la glace (eau solide).*

Les liaisons hydrogène régulent la structure de certaines macromolécules biologiques les plus importantes, y compris les protéines transmembranaires et l'acide désoxyribonucléique (ADN). Les liaisons hydrogène sont représentées par de fines lignes pointillées (figure 5). Il y a deux liaisons hydrogène entre les paires de bases complémentaires thymine (T) et adénine (A) et trois liaisons hydrogène entre les paires de bases complémentaire cytosine (C) et guanine (G).

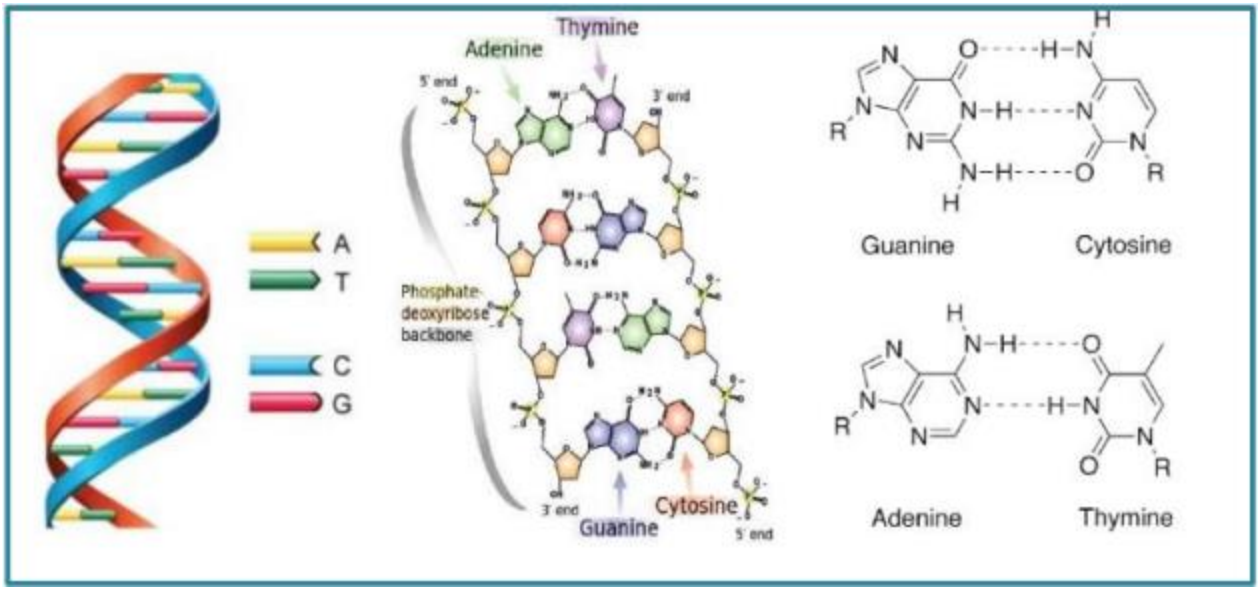


Figure 5. *Les liaisons hydrogène dans l'ADN.*

Intra-atomic and intermolecular interactions

B. Les Forces (liaisons) de Van der Waals : Les liaisons de Van der Waals sont la conséquence des **forces électrostatiques attractives** agissant sur de **courtes distances** (0.1 nm) entre les molécules en raison des **dipôles temporaires** qui sont causés par le **mouvement** aléatoire des **électrons**, comme dans la glace. Ces liaisons permettent de maintenir les molécules ensemble de manière lâche, ce qui influence la rigidité et la résistance des matériaux. Ces liaisons sont **très faibles** et ne rendent la matière solide qu'**à très basse température** comme dans la glace et le mono oxyde de carbone CO.



Les forces de Van der Waals sont deux types :

1. Forces de dispersion (ou de London): les **forces de London** sont les plus faibles des **forces intermoléculaires,** elles existent entre tous les types de **molécules**, qu'elles soient **ioniques** ou **covalentes polaires** ou **apolaires**. Plus une **molécule** possède d'électrons, plus les **forces de London** sont **fortes**.

2. Forces dipôle-dipôle permanents (forces de Keesom) : les **forces dipôle-dipôle permanents** sont un type de **force intermoléculaire** que l'on retrouve entre deux **molécules** possédant des **dipôles permanents**. Les **molécules** dont les **moments dipolaires** ne s'annulent pas mutuellement présentent ce que l'on appelle un **dipôle permanent**. Une partie de la **molécule** est partiellement chargée négativement, tandis qu'une autre est partiellement chargée positivement. Les **dipôles** de charge opposée dans des **molécules** voisines s'**attirent** mutuellement et les **dipôles** de charge similaire se **repoussent**.

Remarque

1. Les **liaisons hydrogène** sont beaucoup plus **fortes** que les **forces dipôle-dipôle permanentes** et les **forces de dispersion**. Elles nécessitent plus d'énergie pour être surmontées.

2. La **force de Van der Waals** augmente avec la taille de la **molécule**. Cela s'explique par le fait que les grosses **molécules** ont plus d'électrons. Cela crée un **dipôle temporaire** plus fort.

Résumé du cours

Intra-atomic and intermolecular interactions

- Les **forces intramoléculaires** sont des **forces** au sein des **molécules**, tandis que les **forces intermoléculaires** sont des **forces** entre les **molécules**. Les **forces intramoléculaires** sont beaucoup plus **fortes** que les **forces intermoléculaires**.
- La **polarité** détermine le type de **forces intermoléculaires** entre les **molécules**.
- Les **molécules polaires** se produisent lorsqu'il existe une différence d'**électronégativité** entre les atomes liés.
- Les **molécules apolaires** se produisent lorsque les électrons sont partagés de manière égale entre les atomes.

*La direction du **moment dipolaire** d'une **liaison covalente polaire** est orientée du pôle positif (charge partielle positive δ^+) vers le pôle négatif (charge partielle négative δ^-).

- Il existe 3 types de **liaisons intramoléculaires** : **covalentes**, **ioniques** et **métalliques**.
- Les **forces de Van der Waals**, également appelées **forces de London** ou **forces de dispersion**, existent entre toutes les **molécules** et sont causées par des **dipôles temporaires**. Ces **dipôles temporaires** sont dus au mouvement aléatoire des électrons et créent des **dipôles induits** dans les **molécules** voisines.

*Les **liaisons hydrogène** sont le type de **force intermoléculaire** le plus puissant. On les trouve entre les **molécules** contenant un atome de **fluor**, d'**oxygène** ou d'**azote**, lié à un atome d'**hydrogène**.

