

3.1b – Hybridation du carbone

Nous allons aborder dans ce grain un aspect plus théorique qui est **l'hybridation du carbone**.

En effet les formes nano du carbone, leurs propriétés sont étroitement corrélées à l'état d'hybridation du carbone qui les compose.

Le carbone a pour configuration électronique la configuration $1s^2, 2s^2, 2p^2$.

Donc ces orbitales de valence sont de type $2s, 2p$ et si on respecte les règles que vous avez appris en atomistique, donc les règles de Klechkowski et de Hund, on a donc un doublet sur l'orbitale $2s$ et des électrons célibataires dans deux des orbitales p .

De la même manière on va pouvoir combiner une orbitale $2s$ avec deux des orbitales $2p$ notamment les orbitales $2p_x$ et $2p_y$ de façon à obtenir trois orbitales hybrides dites sp^2 .

Il va donc nous rester une orbitale $2p_z$ que nous n'avons pas dans le cas précédent.

Les trois orbitales atomiques hybrides sp^2 vont être capables de venir se recouvrir avec les orbitales hybrides de trois autres atomes de carbone et ainsi de se lier à trois autres atomes de carbone.

Donc dans le cas d'un carbone **sp^2 nous avons un carbone trivalent**.

Et dans le cas d'un carbone **sp^3 nous avons un carbone tétravalent**.

Maintenant donc au moment de la formation des orbitales moléculaires, si l'on part de recouvrement d'orbitales atomiques de type sp^3 ou sp^2 , on va venir former une orbitale moléculaire de type sigma.

Quand on a à disposition une orbitale $2p_z$ comme dans le cas des carbones hybridés sp^2 , il est possible alors de recouvrir deux orbitales de type $2p_z$ de deux carbones donc en hybridation sp^2 et ainsi de former une liaison de type pi.

On va donc avoir pour ces carbones sp^2 la possibilité de former des doubles liaisons, **liaison sigma et liaison pi**.

Alors qu'elles sont maintenant les conséquences de ces hybridations sp^2 et sp^3 sur les propriétés ? Il faut savoir que les liaisons $c-c$, ces liaisons covalentes, simples liaisons, donc liaisons sigma uniquement, sont des liaisons fortes déjà avec une énergie de liaison qui est supérieure à 350 kilojoule par mole.

Dans le cas des liaisons pi ou plus exactement des liaisons doubles, donc sigma et pi, les énergies de liaison sont encore plus fortes et là on a des énergies de liaison supérieures à 600 kilojoule par mole.

Cela confère donc au carbone **une très grande stabilité chimique**, ils vont donc être peu réactif vis-à-vis d'autres réactifs chimiques puisse que justement nous avons une énergie de liaison extrêmement forte. D'autre part, étant donné la force de ces liaisons, on comprend bien que dans le cas de carbone sp^2 donc qui génère des structures on l'a vu de type graphène ou nanotubes de carbone, nous allons avoir des résistances mécaniques très élevées dans le plan du graphène ou le long de l'axe du nanotube de carbone.

Maintenant la présence de liaison pi dans ses structures de carbone sp^2 va permettre en fait la **délocalisation des électrons** dans l'ensemble du plan de graphène ou dans l'ensemble du nanotube par exemple et on va donc avoir des matériaux qui ont **une bonne conductivité électrique**.

Toutefois on comprend bien qu'étant donnée **l'anisotropie de la structure** générée par ses carbones sp^2 , puisse que on a des structures qui ne sont pas équivalentes dans le plan et dans l'axe perpendiculaire au plan de graphène par exemple on va avoir une structure différente le long d'un nanotube et dans l'axe perpendiculaire aussi dans le plan perpendiculaire à ce nanotube on va donc effectivement avoir des propriétés différentes selon les directions ce que l'on appelle l'anisotropie de ces propriétés.

Maintenant quelles sont les conséquences des carbones hybridés sp^2 sur les formes nanométriques ? On a bien compris pourquoi en fait on génère à partir de ces carbones sp^2 des formes planaires comme les plans de graphène.

Effectivement si on repart au carbone hybridé sp^2 nous avons les trois orbitales atomiques équivalentes sp^2 qui sont dans un même plan et qui donc vont former avec les carbones voisins des liaisons qui vont se trouver toutes les trois dans le plan, d'où la génération effectivement de ces **formes planaires**.

Pourtant on a d'autres formes nanos ou des rayons de courbure existent pourtant générés à partir de carbones hybridés sp^2 aussi.

C'est le cas notamment des structures de type fullerène qui est représentée ici.



Alors le fullerène représenté est un **C60**, celui-ci est bien connu puisque en fait il a exactement la forme d'un ballon de football.

Et bien nous avons vu tout à l'heure que les structures de plan de graphène étaient formées d'hexagones, dans le cas des fullerènes on va avoir un certain nombre d'hexagones mais la courbure va être engendrée par la présence de pentagones qui va permettre ces formes donc particulières.

C'est le cas aussi notamment des nanotubes fermés au niveau des fermetures.

Maintenant, dernier point, nous avons vu que ces formes nanométriques des carbones hybridés SP2 avaient des propriétés particulièrement intéressantes en terme **de conductivité, de propriétés mécaniques, de résistance aux produits chimiques**.

Toutefois ces propriétés sont altérées par la présence de **défauts**.

Ces défauts peuvent très bien être des trous par exemple dans un plan de graphène, ou encore, correspondent à des carbones qui auraient subi une oxydation et donc qui seraient liés simplement, ou par des liaisons doubles à des oxygènes, et là, effectivement, les propriétés s'en trouvent altérées.

Christine Vautrin