

## De la structure à la polarité d'une entité

### I. Modèle de Lewis des molécules et des ions.

#### 1. Les règles de stabilités des atomes

Les gaz nobles sont une catégorie particulière d'éléments. Ils sont chimiquement inertes. On dit que les gaz nobles sont les éléments chimiques les plus stables. Ils possèdent une structure électronique particulière. La couche électronique de valence (la couche électronique externe) contient soit 2 soit 8 électrons.

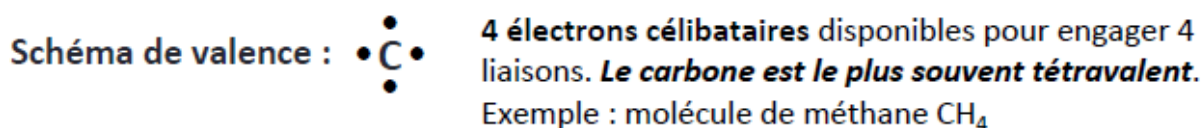
Les autres éléments chimiques cherchent à acquérir la même structure électronique que le gaz noble de numéro atomique le plus proche. Pour cela, ils peuvent former des ions ou des molécules.

#### 2. Rappel sur la représentation de Lewis des molécules

Dans le modèle de Lewis, il faut d'abord établir le schéma de Lewis (ou aussi appelé schéma de valence) des atomes impliqués dans la molécule.

Le schéma de Lewis de l'atome traduit l'organisation des électrons de valence (de la dernière couche électronique, on parle également « d'orbitale atomique de valence ou OA ») autour de l'atome lorsqu'il est engagé dans une molécule.

Exemple : le carbone



#### 1. Schéma de Lewis des atomes des couches électronique K et L

##### Éléments de la couche K : 1 OA de valence disponible (1s)

H (Z=1)	$1s^1$	1 électron de valence	Schéma de valence :	H•
He (Z=2)	$1s^2$	2 électrons de valence	Schéma de valence :	He : = He

L'hydrogène est monovalent.

L'hélium ne peut pas avoir d'électron célibataire sur sa couche de valence.

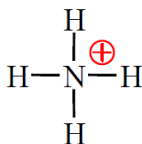
Il ne peut donc pas former de liaison. C'est le cas de tous les gaz rares.

##### Éléments de la couche L : 4 OA de valence disponibles (2s, 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, 2p<sub>z</sub>)

Li (Z=3)	$2s^1$	1 électron de valence	Schéma de valence :	Li•
Be (Z=4)	$2s^2$	2 électrons de valence	Schéma de valence :	•Be•
B (Z=5)	$2s^2 2p^1$	3 électrons de valence	Schéma de valence :	•B•
C (Z=6)	$2s^2 2p^2$	4 électrons de valence	Schéma de valence :	•C•
N (Z=7)	$2s^2 2p^3$	5 électrons de valence	Schéma de valence :	•N•
O (Z=8)	$2s^2 2p^4$	6 électrons de valence	Schéma de valence :	•O•
F (Z=9)	$2s^2 2p^5$	7 électrons de valence	Schéma de valence :	F•
Ne (Z=10)	$2s^2 2p^6$	8 électrons de valence	Schéma de valence :	Ne

Remarque : dans ce tableau ne sont représentés que les électrons de valence. Pour avoir la structure électronique complète des atomes, il faut rajouter la structure de l'hélium. Par exemple, la structure électronique du Bore [B] =  $1s^2 2s^2 2p^1$ , le bore possède 3 électrons de valences



Exemple 2 : l'ion ammonium  $\text{NH}_4^+$  :II. Géométrie des molécules simples1) Le modèle de Gillespie

La représentation de Lewis ne donne pas d'indication sur la géométrie de la molécule. Une règle simple permet de déterminer, à partir de la représentation de Lewis : c'est le modèle VSEPR proposé en 1958 par Gillespie. Ce modèle est fondé sur les propriétés des charges électriques :

Les doublets d'électrons externes d'un même atome se repoussent les uns les autres : **la structure adoptée par une molécule est donc celle pour laquelle les doublets d'électrons externes de chaque atome s'écartent au maximum les uns des autres.**

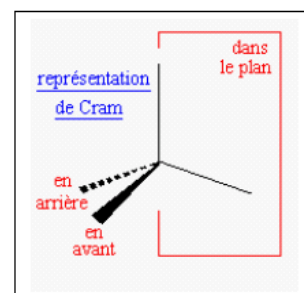
2) Structure tétraédrique

Pour minimiser leurs répulsions mutuelles, quatre doublets adoptent une disposition tétraédrique. On en déduit la position des différents atomes et donc la structure géométrique des molécules.

3) Représentation de Cram

Pour représenter l'aspect tridimensionnel des molécules, les chimistes utilisent la convention de Cram

- Un trait plain représente une liaison entre deux atomes situés dans le plan de la figure
- Un triangle allongé plein représente une liaison entre un atome situé dans le plan (à la pointe du triangle) et un atome situé en avant de ce plan (à la base du triangle).
- Un triangle hachuré représente une liaison entre un atome situé dans le plan (à la pointe du triangle) et un atome situé en arrière de ce plan (à la base du triangle).

4) Quelques molécules

Nombre de liaisons et de doublets non liants portés par l'atome	Répartition des doublets (atome central)	Représentation de Cram	Modèle moléculaire	Géométrie
4	4 doublets liants			tétraédrique
4	3 doublets liants 1 doublet non liant			pyramidale à base triangulaire
4	2 doublets liants 2 doublets non liants			coudée
3	4 doublets liants			plane
3	4 doublets liants			plane
2	4 doublets liants			linéaire

### III. Molécule polaire et apolaire

#### 1. Polarité d'une liaison et dipôle électrique :

Dans les solides moléculaires, les atomes sont liés par des liaisons covalentes. Lorsque les deux atomes sont identiques, la paire d'électrons formant la liaison est répartie de manière symétrique entre les deux atomes. Cependant, certains atomes ont plus ou moins tendance à attirer les électrons de la liaison covalente à eux : **on dit que ces atomes sont plus électronégatifs.**

Dans ce cas, le doublet d'électron n'est pas localisé entre les deux atomes mais il est plus fortement attiré par un atome que par l'autre : **Il se forme alors un dipôle électrique : c'est un ensemble de deux charges électriques  $q$ , égales et de signes contraires, placées à une distance fixe l'un de l'autre.** La liaison est alors appelée **liaison covalente polarisée.**

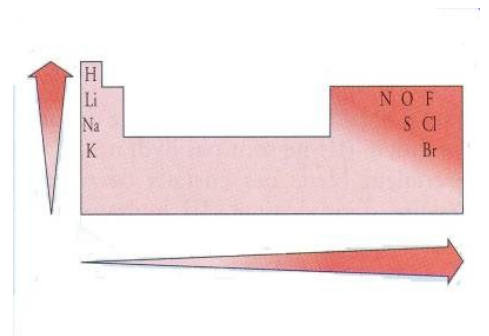
Une liaison A - B polarisée est notée :  $\overset{+}{\delta} \text{A} - \overset{-}{\delta} \text{B}$

L'électronégativité varie avec la place d'un élément dans la classification périodique.

- Sur une ligne, de gauche à droite, l'électronégativité augmente.
- Sur une colonne, de bas en haut, l'électronégativité augmente.
- Elle est nulle pour les gaz nobles.

Le fluor (F) est l'élément le plus électronégatif et le césium (Cs) est l'élément le moins électronégatif.

Une liaison est polarisée si les deux atomes ont des électronégativités différentes. Plus la différence d'électronégativité est importante, plus la liaison est polarisée.



#### 2. Polarité d'une molécule :

Une molécule diatomique constituée de deux atomes identiques est apolaire.

Une molécule diatomique constituée de deux atomes différents est polaire.

Une molécule polyatomique est polaire :

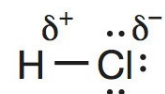
- si elle présente une liaison polarisée.
- et si le barycentre de ses charges négatives n'est pas confondu avec celui de ses charges positives.

Exemple :

- la molécule de chlorure d'hydrogène :

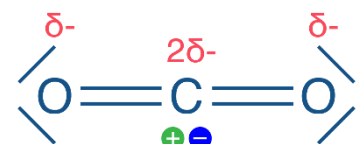
Il apparaît donc deux pôles électriques différents et distincts aux extrémités de la liaison H - Cl.

On dit que cette liaison est polarisée. Il en résulte que la molécule HCl présente un caractère dipolaire.



- La molécule de dioxyde de carbone :

Ici, les deux liaisons sont polarisées mais les deux barycentres sont confondus, la molécule est apolaire.



- La molécule d'eau :

Ici les 2 liaisons sont également polarisées, mais les deux barycentres ne sont pas confondus, la molécule d'eau est polaire.

