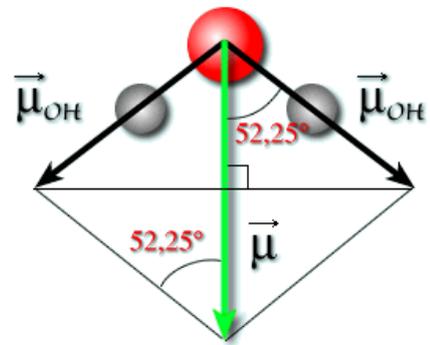


Chimie Quantique II



FIZIR MERIEM

Table des matières



Introduction	3
I - Objectifs intermédiaires du chapitre et pré-requis nécessaires	4
II - Chapitre III . Propriétés électroniques des molécules	5
1. Moment dipolaire	5
2. Polarité des molécules	6
3. La géométrie des molécules	7
3.1. Prédiction de la géométrie des molécules : Théorie de Gillespie	8
4. Détermination de la géométrie moléculaire	9
4.1. Géométrie de Molécule type AXn	9
4.2. Présence de paires non liantes : molécule symbolisée par AXnEm	10
4.3. Géométrie de Molécule type AXnEm	11
4.4. Correspondance entre Hybridation et VSEPR	11
5. Polarité des Molécules polyatomiques	11
III - Exercices	13
IV -	
Série d'exercice n°3 pour évaluation globale de ce chapitre et stratégie d'orientation	14
Solutions des exercices	15
Glossaire	16
Webographie	17

Introduction



Parmi les propriétés électroniques des molécules c'est le moment dipolaire. Afin de connaître la polarité des molécules, nous avons abordé dans ce chapitre à la définition de moment dipolaire, les étapes pour identifier la polarité des molécules et la géométrie des molécules parce que c'est une partie très important pour savoir si la molécule est polaire ou apolaire.



Objectifs intermédiaires du chapitre et pré-requis nécessaires



La compétence visée par ce chapitre, dans son ensemble, est d'être capable de :

- Déterminer la géométrie des molécules
- Prévoir la polarité des molécules
- Calculer le moment dipolaire des molécules
- La seul pré-requis nécessaires à la compréhension de cette troisième chapitre c'est l'électronégativité des molécules

Chapitre III . Propriétés électroniques des molécules



Moment dipolaire	5
Polarité des molécules	6
La géométrie des molécules	7
Détermination de la géométrie moléculaire	9
Polarité des Molécules polyatomiques	11

1. Moment dipolaire

Si la molécule est dissymétrique (A-B avec $\chi_A \neq \chi_B$; par exemple : HCl) la différence d'électronégativité $\rho.16 \rightleftharpoons$ entre les deux atomes crée une polarisation de la liaison AB. Le plus électronégatif attire plus fortement les électrons qui, en moyenne, se rapprochent de lui. Le nuage électronique est déformé et le barycentre $\rho.16 \rightleftharpoons$ des charges négatives ne coïncide plus avec celui des charges positives.

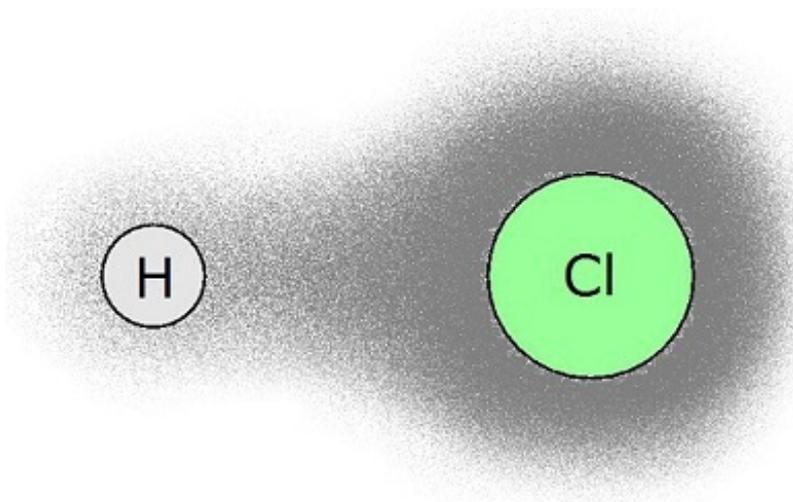


Figure.3.1 Nuage électronique de la molécule HCL

La molécule est toujours globalement neutre, puisque le nombre d'électrons n'a pas varié. Mais elle possède deux pôles $\rho.16 \rightleftharpoons$, l'un positif, l'autre négatif, elle est polaire. Du point de vue électronique elle est assimilable à un dipôle, formé par l'ensemble deux charges $+\delta$ et $-\delta$, à une distance d de l'une de

l'autre :

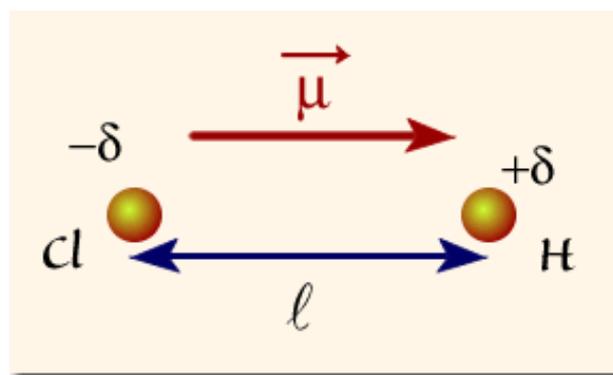


Figure.3.2 Moment dipolaire de HCl

Un dipôle est caractérisé par son moment dipolaire μ . Ce moment dipolaire μ est une grandeur vectorielle qui possède une direction et un module :

$$\mu = \delta * d$$

- μ est exprimé en C.m . En pratique on utilise une unité mieux adaptée (Debey):

$$1 D = 3,33 \cdot 10^{-30} C \cdot m$$

2. Polarité des molécules

- Comment déterminé-t-on la polarité une molécule ?



Figure.3.3 Polarité des molécules

Donc pour connaître le caractère polaire ou apolaire d'une molécule, il faut identifier :

- Les charges partielles
- La géométrie des molécules

3. La géométrie des molécules



3.1. Prédiction de la géométrie des molécules : Théorie de Gillespie

3.1.1. Principe de la méthode VSEPR

Cette méthode mise au point par Gillespie permet de prévoir très simplement la forme géométrique des molécules à partir de leur schéma de Lewis moléculaire.

Le sigle V.S.E.P.R signifie en anglais " Valence Shell Electronic Pairs Répulsion ", et en français " Répulsion des Paires Electroniques de la Couche de Valence".

La méthode V.S.E.P.R consiste donc à déterminer la position relative des doublets entourant l'atome central, ces doublets pourront être de deux types :

- doublets participant à une liaison avec un autre atome. Ces doublets de liaison (doublets liants) seront désignés par la lettre X.
- doublets libres ne participant pas à une liaison avec un autre atome. Ces doublets libres (doublets non liants) seront désignés par la lettre E.

Les doublets liants et non liants de la couche externe évoluent à la même distance du noyau, lequel serait au centre d'une sphère. Ces doublets se repoussent mutuellement ; ils se disposent de telle manière que leurs répulsions mutuelles soient minimales (donc distances maximales). Suivant le nombre de ces doublets, on peut en déduire les directions dans lesquelles se trouvent les doublets liants. L'orientation des doublets liants fixera les directions des liaisons et donc la géométrie de la molécule.

Selon la théorie de la VSEPR, les principaux édifices moléculaires sont les suivants (1)^{p.17} :

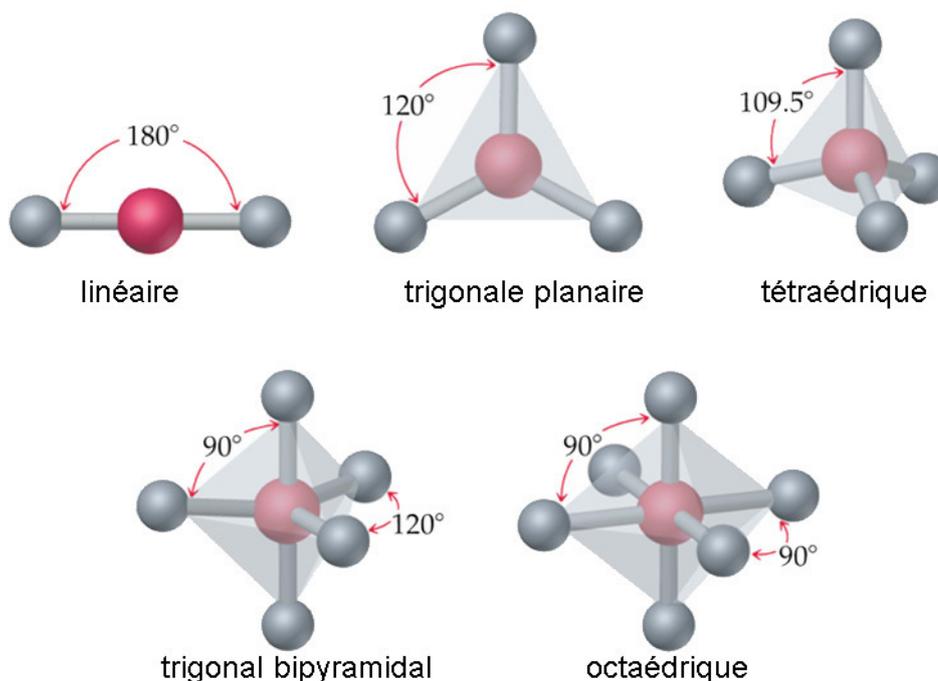


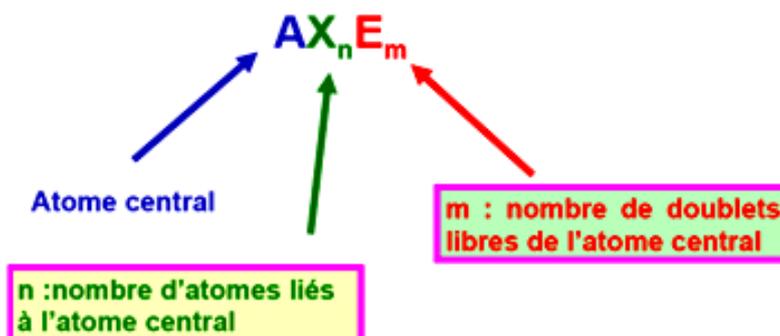
Figure.3.4 Les principaux édifices moléculaires

4. Détermination de la géométrie moléculaire

On notera l'atome central de la molécule étudiée A :

- Les doublets liants (les paires d'électrons liant l'atome central A aux autres atomes de la molécule) seront notés X. Le nombre de doublets liants sera noté n.
- Les doublets non liants (les paires d'électrons appartenant à l'atome central A et n'étant pas impliqués dans des liaisons) seront notés E. Le nombre de doublets non liants sera noté m.

Les molécules simples, dont la géométrie est facilement définissable grâce à la méthode VSEPR sont donc de la forme : AX_nE_m



Cette écriture signifie que l'atome A est lié à n atomes X et possède m doublets d'électrons. C'est l'expression de AX_nE_m qui détermine la géométrie de la molécule et plus particulièrement la valeur de $n + m$.

Dans la méthode V.S.E.P.R la géométrie est déterminée uniquement par la répulsion entre les doublets de l'atome central. Les doublets libres des atomes latéraux n'entrent donc pas en ligne de compte.

- Les liaisons multiples n'interviennent pas dans la détermination du type moléculaire. Elles sont considérées comme des liaisons simples.

4.1. Géométrie de Molécule type AX_n

Géométrie de Molécule type AX_n est présentées dans la figure.3.5

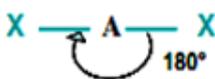
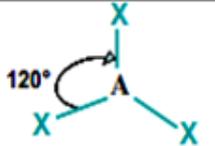
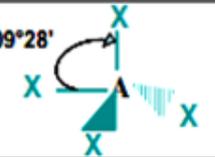
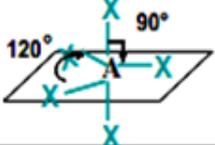
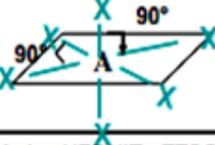
Molécule type	Représentation	Géométrie
AX_2		Molécule linéaire ou digonale
AX_3		Molécule triangulaire (ou trigonale) plane
AX_4		Molécule tétraédrique ou tétragonale
AX_5		Molécule bipyramide à base triangulaire (≡ bipyramide trigonale)
AX_6		Molécule octaédrique (≡ bipyramide à base carrée)

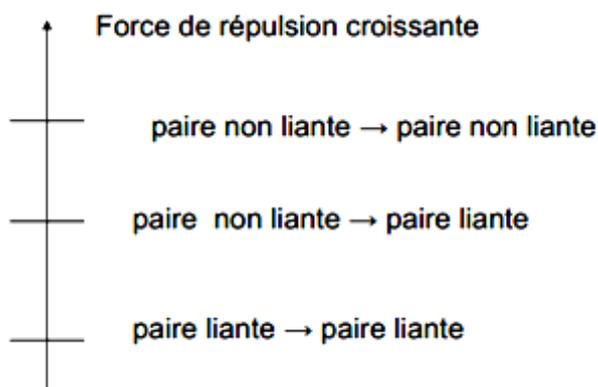
Figure 3.5 Géométrie de la molécule de type AX_n

4.2. Présence de paires non liantes : molécule symbolisée par AX_nE_m

A est entouré par $n+m$ doublets non équivalents: les règles précédentes s'appliquent MAIS les angles idéaux sont modifiés.

Exemple: Si molécule de type AX_2E_2 → Géométrie équivalente à AX_4
 → Angle différent de $109^\circ 28'$

Sachant qu'un doublet non liant est plus volumineux qu'un doublet liant partagé entre 2 atomes, il en résulte l'évolution suivante :



4.3. Géométrie de Molécule type AX_nEm

Géométrie de Molécule type AX_nEm est présentés dans le figure.3.6 suivant :

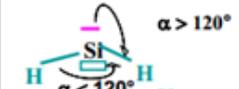
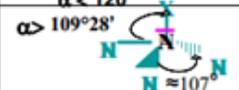
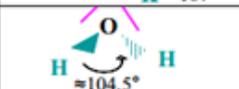
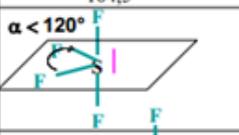
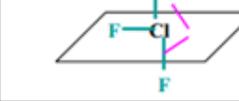
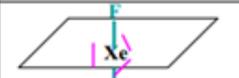
Exemple	Type	n + p	Géométrie	Représentation
SiH ₂ (Si: Z = 14)	AX ₂ E	3	≡ AX ₃ Molécule triangulaire déformée	
NH ₃	AX ₃ E	4	≡ AX ₄ Molécule tétraédrique déformée	
H ₂ O	AX ₂ E ₂			
SF ₄	AX ₄ E	5	≡ AX ₅ Molécule bipyramide à base triangulaire déformée	
ClF ₃	AX ₃ E ₂		Molécule plane (forme T)	
XeF ₂ (Xe: Z = 54)	AX ₂ E ₃		Molécule linéaire	

Figure.3.6 Géométrie de la molécule de type AX_nEm

Cf. "Géométries"

4.4. Correspondance entre Hybridation et VSEPR

Correspondance entre les modèles hybrides et la représentation VSEPR est présentés dans la figure. 3.7.

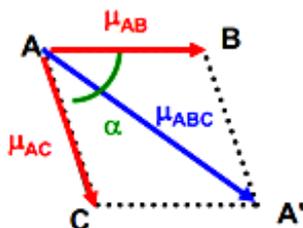
VSEPR	Hybridation de l'atome A	Formes géométriques engendrées par les P orbitales hybridées	Représentation des P orbitales hybridées
2	sp	Linéaire	
3	sp ²	Triangle équilatéral	
4	sp ³	Tétraédrique	
	dsp ²	Plan carré	
5	dsp ³	Biprisme trigonal	
6	d ² sp ³ ou sp ³ d ²	Octaèdre	

Figure.3.7 Correspondance entre les modèles hybrides et la représentation VSEPR

5. Polarité des Molécules polyatomiques

Les moments dipolaires de chaque liaison s'ajoutent vectoriellement. Leur résultante est le moment

dipolaire globale de la molécule :

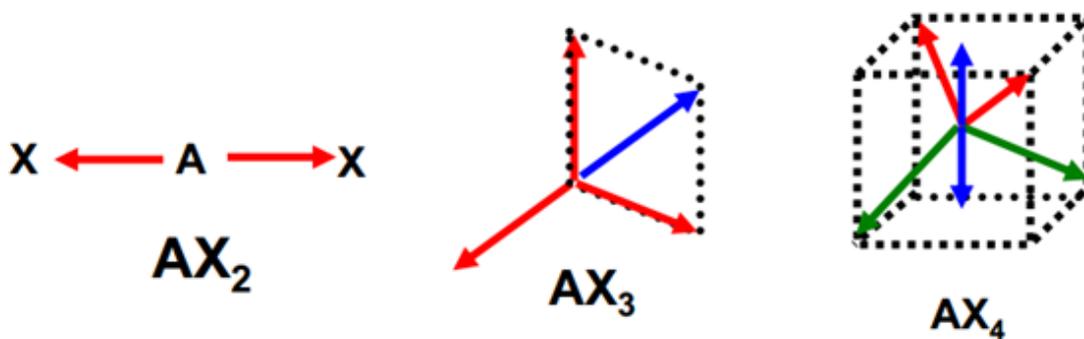


Exemple

Les molécules linéaires symétriques de type AX₂ (CO₂) ne posséderont pas de moment dipolaire puisque les moments des liaisons s'annulent mutuellement.

- Il en sera de même pour les molécules symétriques de type AX₃ (BH₃) ou AX₄ (BF₄)

On peut assez facilement le voir graphiquement.



Exercices



Exercice : Géométrie et moment dipolaire des molécules

[solution n°1 p.15]

La molécule NH_3 est de type AX_3E . C'est une à base trigonale, dans laquelle la somme des moments dipolaires de liaison est

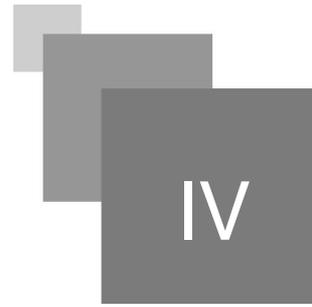
Exercice : polarité des molécules

[solution n°2 p.15]

Des deux molécules BH_3 et NH_3 , quelle est celle qui possède un moment dipolaire non nul ?



Série d'exercice n°3 pour évaluation globale de ce chapitre et stratégie d'orientation



[cf.]

Consulter les exercices 1, 2 et 3 .

En cas d'échec, l'étudiant doit revenir et réviser très bien ce chapitre de ce module avant de passer à la prochaine chapitre.

Solutions des exercices



> Solution n° 1

Exercice p. 13

La molécule NH_3 est de type AX_3E . C'est une pyramide à base trigonale, dans laquelle la somme des moments dipolaires de liaison est non nulle.

> Solution n° 2

Exercice p. 13

Des deux molécules BH_3 et NH_3 , quelle est celle qui possède un moment dipolaire non nul ?

NH_3

La molécule BH_3 est de type AX_3 . C'est un triangle équilatéral dans lequel tous les moments dipolaires de liaison se compensent. Le moment dipolaire total est donc nul.

La molécule NH_3 est de type AX_3E . C'est une pyramide à base trigonale, dans laquelle la somme des moments dipolaires de liaison est non nulle.



Webographie



<http://www.meine-mathe.de/Chimie/eModules/2b1/bc-1-polarite.pdf>

