

Séquence 10 - Géométrie et polarité des molécules

Première spécialité

2023 - 2024

Schémas de Lewis

Le schéma de Lewis d'une molécule consiste à représenter sa formule développée ou semi-développée en y faisant apparaître les **doublets non-liant** et les **lacunes électroniques**

Schémas de Lewis

Le schéma de Lewis d'une molécule consiste à représenter sa formule développée ou semi-développée en y faisant apparaître les **doublets non-liant** et les **lacunes électroniques**

Rappel : Un doublet, qu'il soit liant ou non-liant, est composé de **deux électrons**. Chaque atome cherche à acquérir la **structure électronique d'un gaz noble**, il cherche donc à **compléter sa couche électronique externe**. Cela conduit en général à avoir **8 électrons** autour de lui (un octet).

Schémas de Lewis

Le schéma de Lewis d'une molécule consiste à représenter sa formule développée ou semi-développée en y faisant apparaître les **doublets non-liant** et les **lacunes électroniques**

Rappel : Un doublet, qu'il soit liant ou non-liant, est composé de **deux électrons**. Chaque atome cherche à acquérir la **structure électronique d'un gaz noble**, il cherche donc à **compléter sa couche électronique externe**. Cela conduit en général à avoir **8 électrons** autour de lui (un octet).

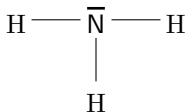


Figure – L'atome d'azote possède 8 électrons autour de lui

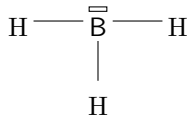


Figure – L'atome de bore ne possède que 6 électrons autour de lui, il lui manque donc deux électrons que l'on représente par une case vide.

Schéma de Lewis d'un atome

Exemple avec l'atome d'azote ($Z = 7$). La structure électronique de l'atome d'azote est :

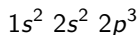
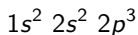


Schéma de Lewis d'un atome

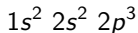
Exemple avec l'atome d'azote ($Z = 7$). La structure électronique de l'atome d'azote est :



La couche électronique externe (également appelée couche de valence), ici la n° 2 est composée de 5 électrons.

Schéma de Lewis d'un atome

Exemple avec l'atome d'azote ($Z = 7$). La structure électronique de l'atome d'azote est :



La couche électronique externe (également appelée couche de valence), ici la n° 2 est composée de 5 électrons.

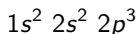


notation équivalente à

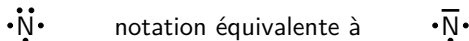


Schéma de Lewis d'un atome

Exemple avec l'atome d'azote ($Z = 7$). La structure électronique de l'atome d'azote est :



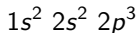
La couche électronique externe (également appelée couche de valence), ici la n° 2 est composée de 5 électrons.



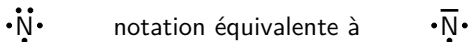
Les électrons qui sont **appairés forment un doublet non liant**. Les **3 électrons célibataires** vont pouvoir former **trois doublets liant avec d'autres atomes** afin de compléter la couche électronique externe.

Schéma de Lewis d'un atome

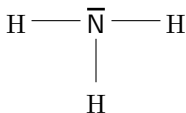
Exemple avec l'atome d'azote ($Z = 7$). La structure électronique de l'atome d'azote est :



La couche électronique externe (également appelée couche de valence), ici la n° 2 est composée de 5 électrons.



Les électrons qui sont **appairés forment un doublet non liant**. Les **3 électrons célibataires** vont pouvoir former **trois doublets liant avec d'autres atomes** afin de compléter la couche électronique externe.



Un doublet liant est une mise en commun des électrons de valence de chaque atome. L'électron apporté par N et celui apporté par H sont mis en commun, tel que maintenant, les deux électrons appartiennent à la fois à N et à H

Schéma de Lewis d'une molécule

Afin de construire le schéma de Lewis d'une molécule, il suffit de partir des schémas de Lewis atomiques et de **relier les électrons célibataires de la couche de valence** entre eux !

Schéma de Lewis d'une molécule

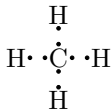
Afin de construire le schéma de Lewis d'une molécule, il suffit de partir des schémas de Lewis atomiques et de **relier les électrons célibataires de la couche de valence** entre eux !

Exemple n° 1 : Formation du méthane CH_4 . 1 atome de carbone $\cdot\dot{\text{C}}\cdot$ et 4 atomes d'hydrogène $\text{H}\cdot$

Schéma de Lewis d'une molécule

Afin de construire le schéma de Lewis d'une molécule, il suffit de partir des schémas de Lewis atomiques et de **relier les électrons célibataires de la couche de valence** entre eux !

Exemple n° 1 : Formation du méthane CH_4 . 1 atome de carbone $\cdot\dot{\text{C}}\cdot$ et 4 atomes d'hydrogène $\text{H}\cdot$



Les électrons célibataires se relient
→
afin de former des doublets liant

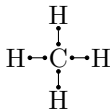
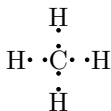


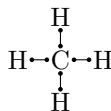
Schéma de Lewis d'une molécule

Afin de construire le schéma de Lewis d'une molécule, il suffit de partir des schémas de Lewis atomiques et de **relier les électrons célibataires de la couche de valence** entre eux !

Exemple n° 1 : Formation du méthane CH_4 . 1 atome de carbone $\cdot\dot{\text{C}}\cdot$ et 4 atomes d'hydrogène $\text{H}\cdot$



Les électrons célibataires se relient
afin de former des doublets liant

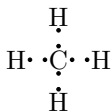


Exemple n° 2 : Si l'on prend deux atomes d'azote $\cdot\bar{\text{N}}\cdot$, on obtient :

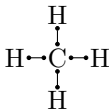
Schéma de Lewis d'une molécule

Afin de construire le schéma de Lewis d'une molécule, il suffit de partir des schémas de Lewis atomiques et de **relier les électrons célibataires de la couche de valence** entre eux !

Exemple n° 1 : Formation du méthane CH_4 . 1 atome de carbone $\cdot\dot{\text{C}}\cdot$ et 4 atomes d'hydrogène $\text{H}\cdot$



Les électrons célibataires se relient
afin de former des doublets liant



Exemple n° 2 : Si l'on prend deux atomes d'azote $\cdot\bar{\text{N}}\cdot$, on obtient :



Les électrons célibataires se relient
afin de former une triple liaison



Schéma de Lewis d'un ion polyatomique

Méthode générale

- Compter le nombre d'électrons de valence au sein de l'ion polyatomique
- Prendre en compte la charge de l'ion polyatomique dans le décompte des électrons
- En déduire le nombre de doublets (liants et non liants)
- Représenter la structure de l'ion en respectant les règles de stabilité
- Identifier l'atome qui porte la charge formelle en comparant au schéma de Lewis atomique

Schéma de Lewis d'un ion polyatomique

Méthode générale

- Compter le nombre d'électrons de valence au sein de l'ion polyatomique
- Prendre en compte la charge de l'ion polyatomique dans le décompte des électrons
- En déduire le nombre de doublets (liants et non liants)
- Représenter la structure de l'ion en respectant les règles de stabilité
- Identifier l'atome qui porte la charge formelle en comparant au schéma de Lewis atomique

Exemple de l'ion ammonium NH_4^+ :

1 atome d'azote ($Z = 7$) : $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$ → 5 électrons

Schéma de Lewis d'un ion polyatomique

Méthode générale

- Compter le nombre d'électrons de valence au sein de l'ion polyatomique
- Prendre en compte la charge de l'ion polyatomique dans le décompte des électrons
- En déduire le nombre de doublets (liants et non liants)
- Représenter la structure de l'ion en respectant les règles de stabilité
- Identifier l'atome qui porte la charge formelle en comparant au schéma de Lewis atomique

Exemple de l'ion ammonium NH_4^+ :

1 atome d'azote ($Z = 7$) : $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$ → 5 électrons

4 atomes d'hydrogène ($Z = 1$) : $1s^1$ → 4 électrons

Schéma de Lewis d'un ion polyatomique

Méthode générale

- Compter le nombre d'électrons de valence au sein de l'ion polyatomique
- Prendre en compte la charge de l'ion polyatomique dans le décompte des électrons
- En déduire le nombre de doublets (liants et non liants)
- Représenter la structure de l'ion en respectant les règles de stabilité
- Identifier l'atome qui porte la charge formelle en comparant au schéma de Lewis atomique

Exemple de l'ion ammonium NH_4^+ :

1 atome d'azote ($Z = 7$) : $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$ → 5 électrons

4 atomes d'hydrogène ($Z = 1$) : $1s^1$ → 4 électrons

La charge « + » signifie qu'il y a eu perte d'un électrons

Schéma de Lewis d'un ion polyatomique

Méthode générale

- Compter le nombre d'électrons de valence au sein de l'ion polyatomique
- Prendre en compte la charge de l'ion polyatomique dans le décompte des électrons
- En déduire le nombre de doublets (liants et non liants)
- Représenter la structure de l'ion en respectant les règles de stabilité
- Identifier l'atome qui porte la charge formelle en comparant au schéma de Lewis atomique

Exemple de l'ion ammonium NH_4^+ :

1 atome d'azote ($Z = 7$) : $1s^2$ $2s^2$ $2p^3 \rightarrow 5$ électrons

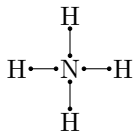
4 atomes d'hydrogène ($Z = 1$) : $1s^1 \rightarrow 4$ électrons

La charge « + » signifie qu'il y a eu perte d'un électrons

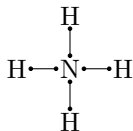
Au total, l'ion polyatomique NH_4^+ possède **8 électrons de valence**, donc **4 doublets**.

Représentation de la structure le l'ion polyatomique :

Représentation de la structure le l'ion polyatomique :



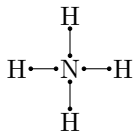
Représentation de la structure le l'ion polyatomique :



On vérifie si la structure est correcte :

- 2 électrons autour de l'hydrogène : ok !

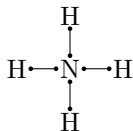
Représentation de la structure le l'ion polyatomique :



On vérifie si la structure est correcte :

- 2 électrons autour de l'hydrogène : ok !
- 8 électrons autour de l'azote : ok !

Représentation de la structure le l'ion polyatomique :

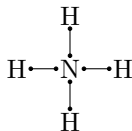


On vérifie si la structure est correcte :

- 2 électrons autour de l'hydrogène : ok !
- 8 électrons autour de l'azote : ok !

Quel atome porte la charge positive ?

Représentation de la structure le l'ion polyatomique :



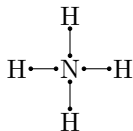
On vérifie si la structure est correcte :

- 2 électrons autour de l'hydrogène : ok !
- 8 électrons autour de l'azote : ok !

Quel atome porte la charge positive ?

L'atome d'azote apporte 5 électrons d'après le schéma de Lewis atomique $\cdot \bar{\text{N}} \cdot$ et dans cet ion, seuls 4 électrons sont directement autour de lui. il lui manque donc un électron, il va porter une charge positive.

Représentation de la structure le l'ion polyatomique :

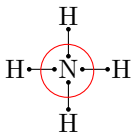


On vérifie si la structure est correcte :

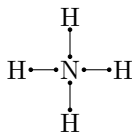
- 2 électrons autour de l'hydrogène : ok !
- 8 électrons autour de l'azote : ok !

Quel atome porte la charge positive ?

L'atome d'azote apporte 5 électrons d'après le schéma de Lewis atomique $\cdot\bar{\text{N}}\cdot$ et dans cet ion, seuls 4 électrons sont directement autour de lui. il lui manque donc un électron, il va porter une charge positive.



Représentation de la structure le l'ion polyatomique :



On vérifie si la structure est correcte :

- 2 électrons autour de l'hydrogène : ok !
- 8 électrons autour de l'azote : ok !

Quel atome porte la charge positive ?

L'atome d'azote apporte 5 électrons d'après le schéma de Lewis atomique $\cdot\bar{\text{N}}\cdot$ et dans cet ion, seuls 4 électrons sont directement autour de lui. il lui manque donc un électron, il va porter une charge positive.

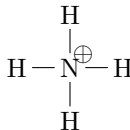
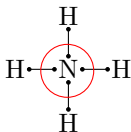


Figure – Schéma de Lewis

La répulsion électronique

Les doublets, qu'ils soient liants ou non liants, sont toujours composés de deux électrons. Les électrons étant chargés négativement, chaque doublet va avoir tendance à s'écarter un maximum afin de gagner en stabilité.

La répulsion électronique

Les doublets, qu'ils soient liants ou non liants, sont toujours composés de deux électrons. Les électrons étant chargés négativement, chaque doublet va avoir tendance à s'écarter un maximum afin de gagner en stabilité.

Exemple n° 1 : Soit une molécule composée de deux doublets liants



Afin que les doublets liants soient écartés au maximum, il se forme un angle de 180° entre eux. La molécule est **linéaire**

La répulsion électronique

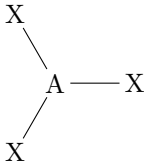
Les doublets, qu'ils soient liants ou non liants, sont toujours composés de deux électrons. Les électrons étant chargés négativement, chaque doublet va avoir tendance à s'écarter un maximum afin de gagner en stabilité.

Exemple n° 1 : Soit une molécule composée de deux doublets liants



Afin que les doublets liants soient écartés au maximum, il se forme un angle de 180° entre eux. La molécule est **linéaire**

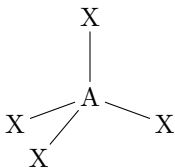
Exemple n° 2 : Soit une molécule composée de trois doublets liants



Afin que les doublets liants soient écartés au maximum, il se forme un angle de 120° entre eux. La molécule est **triangulaire plane**

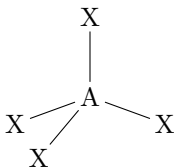
Si il y a 4 atomes voisins, on obtient une géométrie en 3D difficilement représentable sans de nouvelles notations qui ne sont pas au programme du lycée. On peut quand même essayer de représenter la molécule :

Si il y a 4 atomes voisins, on obtient une géométrie en 3D difficilement représentable sans de nouvelles notations qui ne sont pas au programme du lycée. On peut quand même essayer de représenter la molécule :



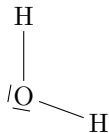
La molécule est **tétraédrique** avec un angle entre chaque liaison est de $109,5^\circ$

Si il y a 4 atomes voisins, on obtient une géométrie en 3D difficilement représentable sans de nouvelles notations qui ne sont pas au programme du lycée. On peut quand même essayer de représenter la molécule :



La molécule est **tétraédrique** avec un angle entre chaque liaison est de $109,5^\circ$

Un doublet non liant, agit quasiment de la même manière qu'une liaison : Autour de l'atome d'oxygène présent dans la molécule d'eau se trouve deux atomes d'hydrogène et deux doublets non liants : il a donc 4 voisins dont 2 fictifs !



La molécule d'eau est dite « coudée » à cause des doublets non liants présents sur l'atome d'oxygène

Quelques géométries à connaître :

Géométrie	Tétraédrique	Pyramidale à base triangulaire	Coudée	Triangulaire	Linéaire
------------------	--------------	--------------------------------	--------	--------------	----------

Polarité d'une liaison

Electronégativité des atomes

L'électronégativité représente la capacité d'un élément chimique à attirer les électrons d'un doublet liant. Elle se note χ .

Polarité d'une liaison

Electronégativité des atomes

L'électronégativité représente la capacité d'un élément chimique à attirer les électrons d'un doublet liant. Elle se note χ .

Electronégativité des éléments de la classification périodique
(numéro atomique < 105)

Electronégativité →																		Non-métaux					He
H 2,2																		Ne					
Li 0,98	Be 1,57																Ar						
Na 0,93	Mg 1,31																Kr						
Electronégativité ↗																		Xe					
K 0,82	Ca 1	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,9	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr						
Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 2,1	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,2	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe						
Cs 0,79	Ba 0,89	La 1,1	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,8	Bi 1,9	Po 2	At 2,2	Rn						
Fr 0,7	Ra 0,9	Ac 1,1																					
Métaux																		Semi-conducteurs					
Electronégativité →																							
La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,2	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27									
Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,7	Np 1,3	Pu 1,3	Am 1,3	Cm 1,3	Bk 1,3	Cf 1,3	Es 1,3	Fm 1,3	Md 1,3	No 1,3	Lr 1,3									

L'électronégativité d'un atome augmente lorsqu'on se déplace vers la droite et vers le haut du tableau périodique des éléments.

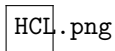
Lorsque deux éléments chimiques avec une différence d'électronégativité importante (par convention supérieure à 0.4) sont liés, on dit que la **liaison est polarisée**.

Lorsque deux éléments chimiques avec une différence d'électronégativité importante (par convention supérieure à 0.4) sont liés, on dit que la **liaison est polarisée**.

HCl.png

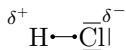
La liaison entre l'hydrogène et le chlore est très polarisée, en effet, l'élément chlore est bien plus électronégatif que l'élément hydrogène : $\chi(Cl) = 3,16$ et $\chi(H) = 2,2$.

Lorsque deux éléments chimiques avec une différence d'électronégativité importante (par convention supérieure à 0.4) sont liés, on dit que la **liaison est polarisée**.

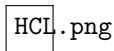
HCl.png

La liaison entre l'hydrogène et le chlore est très polarisée, en effet, l'élément chlore est bien plus électronégatif que l'élément hydrogène : $\chi(Cl) = 3,16$ et $\chi(H) = 2,2$.

Cela signifie qu'au lieu de représenter la liaison comme cela :

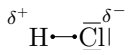


Lorsque deux éléments chimiques avec une différence d'électronégativité importante (par convention supérieure à 0.4) sont liés, on dit que la **liaison est polarisée**.

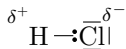
 HCL.png

La liaison entre l'hydrogène et le chlore est très polarisée, en effet, l'élément chlore est bien plus électronégatif que l'élément hydrogène : $\chi(Cl) = 3,16$ et $\chi(H) = 2,2$.

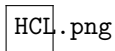
Cela signifie qu'au lieu de représenter la liaison comme cela :



On peut représenter la liaison comme cela :

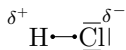


Lorsque deux éléments chimiques avec une différence d'électronégativité importante (par convention supérieure à 0.4) sont liés, on dit que la **liaison est polarisée**.

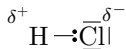


La liaison entre l'hydrogène et le chlore est très polarisée, en effet, l'élément chlore est bien plus électronégatif que l'élément hydrogène : $\chi(Cl) = 3,16$ et $\chi(H) = 2,2$.

Cela signifie qu'au lieu de représenter la liaison comme cela :



On peut représenter la liaison comme cela :



Les électrons de la liaison sont attirés par l'atome de chlore. Il y a donc apparition d'une **charge partielle négative** sur l'atome de chlore que l'on note δ^- et d'une **charge partielle positive** sur l'hydrogène δ^+

Polartié d'une molécule

Si une molécule est composée uniquement de liaisons apolaires (non polarisées) comme par exemple le méthane CH_4 , alors la molécule est forcément apolaire.

Polartié d'une molécule

Si une molécule est composée uniquement de liaisons apolaires (non polarisées) comme par exemple le méthane CH_4 , alors la molécule est forcément apolaire.

Si la molécule est composée de liaisons polaires, il y a deux cas différents :

- Si le barycentre des charges positives **coïncide** avec celui des charges négatives, alors la molécule est **apolaire**.
- Si les barycentres des charges positives et négatives **ne coïncident pas**, alors la molécule est **polaire**.

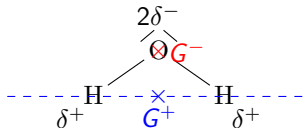
Polartié d'une molécule

Si une molécule est composée uniquement de liaisons apolaires (non polarisées) comme par exemple le méthane CH_4 , alors la molécule est forcément apolaire.

Si la molécule est composée de liaisons polaires, il y a deux cas différents :

- Si le barycentre des charges positives **coïncide** avec celui des charges négatives, alors la molécule est **apolaire**.
- Si les barycentres des charges positives et négatives **ne coïncident pas**, alors la molécule est **polaire**.

Exemple de la molécule d'eau :



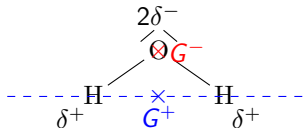
Polarté d'une molécule

Si une molécule est composée uniquement de liaisons apolaires (non polarisées) comme par exemple le méthane CH_4 , alors la molécule est forcément apolaire.

Si la molécule est composée de liaisons polaires, il y a deux cas différents :

- Si le barycentre des charges positives **coïncide** avec celui des charges négatives, alors la molécule est **apolaire**.
- Si les barycentres des charges positives et négatives **ne coïncident pas**, alors la molécule est **polaire**.

Exemple de la molécule d'eau :

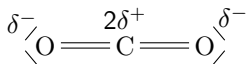


Les barycentres G^+ et G^- ne coïncident pas, **la molécule d'eau est donc polaire**. Elle peut être modélisée en première approximation par un dipôle électrique, comme une pile, avec un pôle + et un pôle - : C'est ce qui explique le fait qu'un filet d'eau soit dévié par une règle chargée électriquement comme vu en TP !

Exemple du dioxyde de carbone CO₂

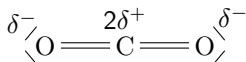
Exemple du dioxyde de carbone CO_2 La différence d'électronégativité entre le carbone et l'oxygène est supérieure à 0,4, la liaison C–O est donc polaire. De plus, l'atome de carbone est moins électronégatif que l'atome d'oxygène. C'est donc l'oxygène qui attire les électrons de la liaison et qui porte la charge partielle négative. Si l'on détermine le schéma de Lewis de la molécule on obtient :

Exemple du dioxyde de carbone CO₂ La différence d'électronégativité entre le carbone et l'oxygène est supérieure à 0,4, la liaison C–O est donc polaire. De plus, l'atome de carbone est moins électronégatif que l'atome d'oxygène. C'est donc l'oxygène qui attire les électrons de la liaison et qui porte la charge partielle négative. Si l'on détermine le schéma de Lewis de la molécule on obtient :

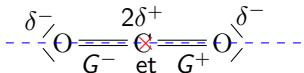


Détermination du barycentre des charges :

Exemple du dioxyde de carbone CO₂ La différence d'électronégativité entre le carbone et l'oxygène est supérieure à 0,4, la liaison C–O est donc polaire. De plus, l'atome de carbone est moins électronégatif que l'atome d'oxygène. C'est donc l'oxygène qui attire les électrons de la liaison et qui porte la charge partielle négative. Si l'on détermine le schéma de Lewis de la molécule on obtient :

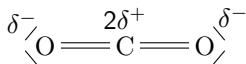


Détermination du barycentre des charges :

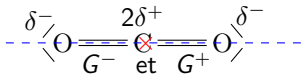


Les barycentres G^+ et G^- coïncident, les polarités de chaque liaison se compensent, la molécule de CO₂ est donc apolaire.

Exemple du dioxyde de carbone CO₂ La différence d'électronégativité entre le carbone et l'oxygène est supérieure à 0,4, la liaison C–O est donc polaire. De plus, l'atome de carbone est moins électronégatif que l'atome d'oxygène. C'est donc l'oxygène qui attire les électrons de la liaison et qui porte la charge partielle négative. Si l'on détermine le schéma de Lewis de la molécule on obtient :



Détermination du barycentre des charges :



Les barycentres G^+ et G^- coïncident, les polarités de chaque liaison se compensent, la molécule de CO₂ est donc apolaire.

Remarque : Les molécules qui possèdent un centre de symétrie sont toujours apolaires.