

De la structure à la polarité d'une entité

1/ Schéma de Lewis

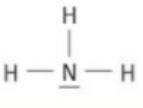
Le modèle de Lewis d'une molécule est une représentation de celle-ci faisant apparaître la répartition des doublets non liants et des liaisons covalentes sur la molécule.

Seuls les électrons externes ont de « l'importance » car ce sont les seuls susceptibles d'intervenir dans des liaisons ou autres.

Une méthode possible pour établir le schéma du modèle de Lewis d'une molécule à partir de sa formule brute consiste à :

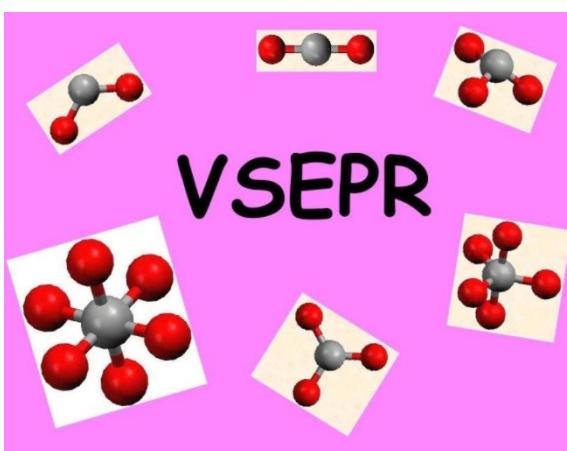
- 1) écrire la configuration électronique de chaque atome ;
- 2) déterminer le nombre total d'électrons de valence n_t mis en jeu dans la molécule étudiée ;
- 3) déterminer le nombre de doublets d'électrons (impliqués dans des liaisons covalentes ou des doublets non liants) en divisant le nombre n_t par deux ;
- 4) répartir les doublets en respectant les règles du duet (pour H) et de l'octet pour les autres atomes. Chaque atome forme un nombre de liaisons covalentes égal au nombre d'électrons manquant pour respecter la règle de l'octet ou du duet.

Exemple : la molécule d'ammoniac NH_3 :

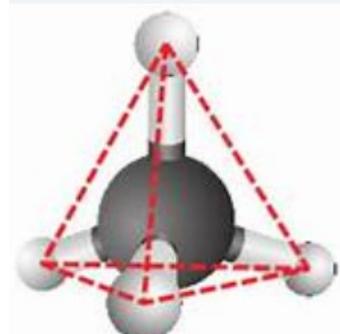
Molécule	Ammoniac NH_3			
Atomes	H	H	H	N
Configuration électronique	$1s^1$	$1s^1$	$1s^1$	$1s^2 2s^2 2p^3$
Électrons de valence (couche externe)	1	1	1	5
Nombre d'électrons manquant pour respecter la règle du duet (H) et la règle de l'octet (N)	1	1	1	3
n_t	$1+1+1+5=8$			
Nombre de doublets	$\frac{8}{2}=4$			
Répartition des doublets et nature des doublets	3 liaisons covalentes entre H et N 1 doublet non liant sur N			

Remarque : certaines molécules, appelées acide de Lewis, ne respectent pas la règle de l'octet et présentent une lacune temporaire en électrons externes ; elles sont donc amenées à réagir afin de la combler.

2/ Géométrie spatiale et théorie V.S.E.P.R. valence shell electron pair repulsion



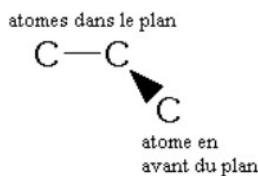
Les doublets étant négatifs s'écartent au maximum les uns des autres afin de minimiser la répulsion électrostatique et donne donc une certaine géométrie à la molécule.



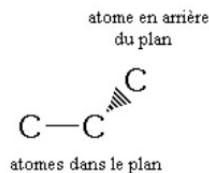
Convention de Cram

Une liaison, entre deux atomes dans le plan de la feuille, est représentée par un trait simple.

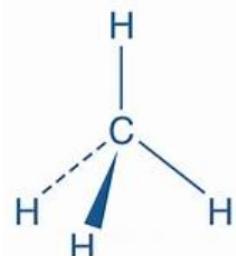
Une liaison, entre un atome dans le plan et un atome en avant de la feuille, est représentée par un triangle, la pointe étant du côté de l'atome dans le plan, la base du côté de l'autre atome :



• Une liaison, entre un atome dans le plan et un atome en arrière du plan, est représentée par un triangle hachuré dont la pointe est du côté de l'atome dans le plan, la base du côté de l'autre atome :



exemple: méthane CH₄



3/ Électronégativité et polarité

► L'électronégativité d'un atome traduit son aptitude à attirer à lui les électrons d'une liaison dans laquelle il est engagé. Cette grandeur sans unité varie en fonction de la place de l'élément chimique dans le tableau périodique.

Dans une liaison covalente entre deux atomes A et B, si l'atome A est plus électronégatif que l'atome B, la liaison A–B est dite polarisée. Elle est alors notée A $\delta+$ –B $\delta-$.

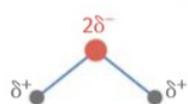
Les symboles $\delta+$ et $\delta-$ traduisent les charges partielles portées par les atomes de cette liaison covalente : A étant plus électronégatif, il porte une charge partielle négative notée $\delta-$, et B porte alors une charge partielle positive notée $\delta+$.

Dans le tableau de Mendeleïev, l'électronégativité augmente de gauche à droite et de bas vers le haut.

Une molécule peut être polaire si elle comporte au moins une liaison polarisée :

- si elle ne comporte qu'une seule liaison polarisée, elle est alors nécessairement polaire ;
- si elle comporte plusieurs liaisons polarisées, il faut alors étudier la géométrie de cette molécule pour s'assurer que les polarisations des liaisons ne se compensent pas.

La molécule d'eau possède 2 liaisons O–H polarisées :



La géométrie coudée de cette molécule impose des charges partielles positives et négatives.

