



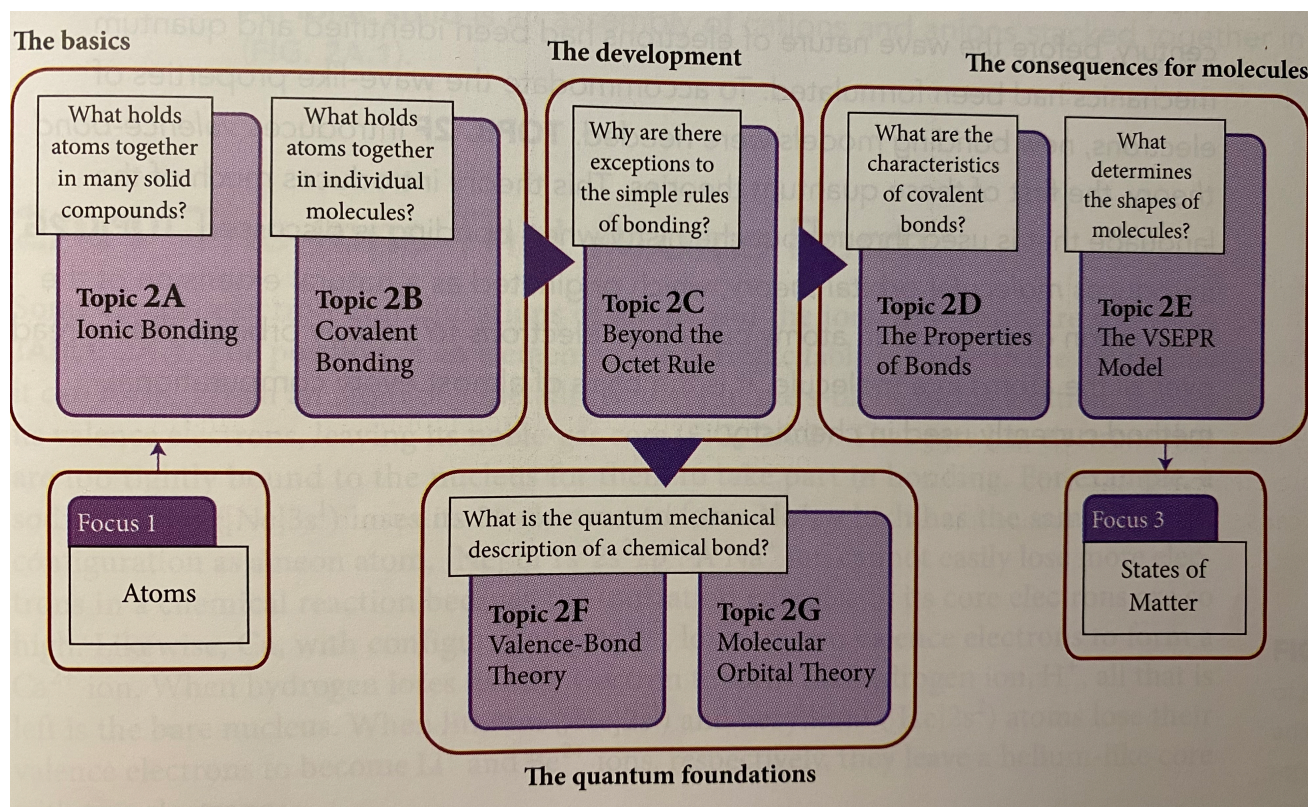
# CH-110 Chimie Générale Avancée I

Prof. A. Steinauer  
[angela.steinauer@epfl.ch](mailto:angela.steinauer@epfl.ch)

## Notes de gestion

- Nous avons décidé que le mode examen pour les calculatrices n'était pas autorisé. Veuillez utiliser une calculatrice non programmable.
- Session de questions-réponses : délégué de classe, veuillez venir me voir pendant la pause pour trouver une date et une heure convenable !

## Prévisualisation du chapitre 2 (Thème 2 : Liaisons entre les atomes)



# Les Propriétés des Liaisons

Sujet 2D



**Dernière fois :** Sujet 2D.1 Corriger le modèle covalent : l'électronégativité.

**Dernière fois :** Sujet 2D.2 Corriger le modèle ionique : la polarisabilité.  
Sujet 2D.3 Forces de liaison.

Sujet 2D.4 Longueurs des liaisons.

POURQUOI DEVEZ-VOUS SAVOIR  
CELA?

- Les propriétés des liaisons varient considérablement. Les variations de la force et de la longueur des liaisons, ainsi que la distribution des électrons dans une liaison, sont utilisées pour expliquer les propriétés physiques et chimiques des molécules.

QUE DEVEZ-VOUS SAVOIR  
AUPARAVANT ?

- Périodicité (Sujet 1F)
- Concept de résonance (Sujet 2B)
- Rôle du partage des doublets libres d'électrons dans la liaison covalente (Sujet 2B)

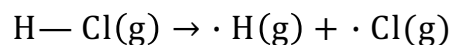
# Forces des liaisons

Sujet 2D.3

## 2D.3 Forces des liaisons

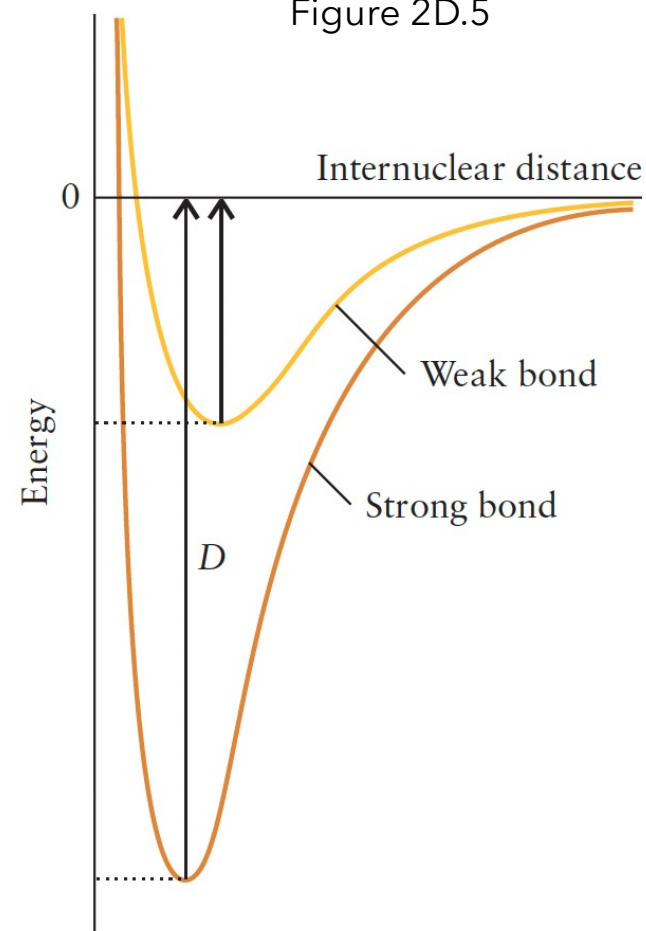
### Énergie de dissociation

- La **force d'une liaison** est mesurée par son **énergie de dissociation**,  $D$ , l'énergie nécessaire pour séparer complètement les atomes liés.
- Pour ces valeurs, lors de la dissociation, chaque atome conserve un électron (**homolytique**) :



- La profondeur du puits indique (approximativement) la force de liaison.
- **Liaison la plus forte connue** entre non-métaux : Triple liaison du monoxyde de carbone :  $\text{C}\equiv\text{O}$  (1062 kJ/mol)
- Liaison la plus faible : l'iode dans  $\text{I}_2$  (139 kJ/mol)

Figure 2D.5



## 2D.3 Forces des liaisons

### Énergies de dissociation des molécules diatomiques

**TABLE 2.3** Bond Dissociation Energies of Diatomic Molecules ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )

Molecule	Bond dissociation energy
$\text{H}_2$	424
$\text{N}_2$	932
$\text{O}_2$	484
$\text{CO}$	1062
$\text{F}_2$	146
$\text{Cl}_2$	230
$\text{Br}_2$	181
$\text{I}_2$	139
$\text{HF}$	543
$\text{HCl}$	419
$\text{HBr}$	354
$\text{HI}$	287

La tendance (voir les structures de Lewis) pour les molécules diatomiques :

- $\text{N}_2 > \text{O}_2 > \text{F}_2$ : Liaison triple > double > simple :

15/V	16/VI	17/VII
$\text{N}_2$ 932	$\text{O}_2$ 484	$\text{F}_2$ 146

Figure 2D.6



## 2D.3 Forces des liaisons

### C—C vs. C=C vs. C≡C

- Une double liaison n'est pas deux fois plus forte qu'une liaison simple : Une liaison C=C (623 kJ/mol) contre deux liaisons C-C simples (696 kJ/mol).
- Une liaison C≡C (837 kJ/mol) vs. trois liaisons C-C simples (1044 kJ/mol)
- **Pourquoi y a-t-il une perte d'énergie pour les liaisons multiples ?** Les répulsions entre les doublets d'électrons dans une liaison multiple ne sont pas aussi efficaces pour la liaison qu'un doublet dans une liaison simple.

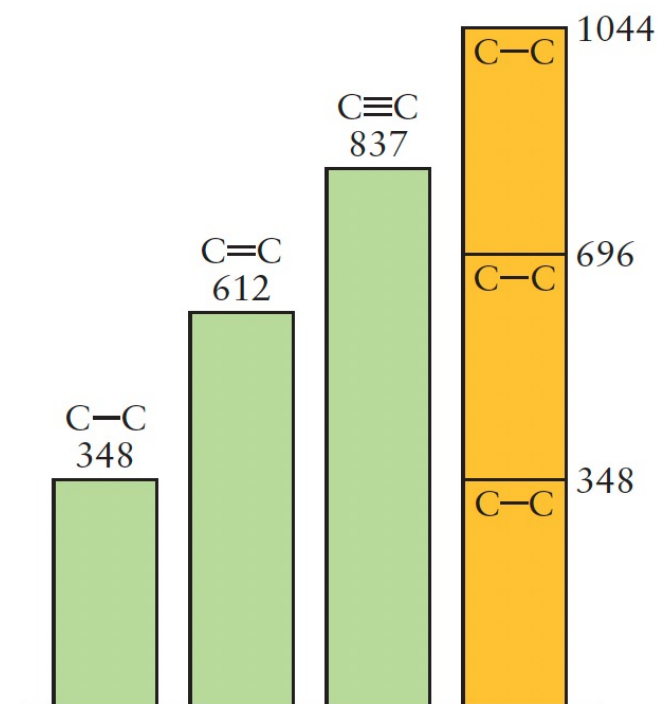


Figure 2D.7

## 2D.3 Forces des liaisons

### Énergies moyennes de dissociation de la liaison

- Moyenne pour un type de liaison, l'énergie de dissociation précise de la liaison dépend du **contexte**.
- Par exemple, la liaison C-H peut être présente dans le méthane (CH<sub>4</sub>), l'éthane (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>) et l'éthène (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>).

TABLE 2.4 Average Bond Dissociation Energies (kJ·mol<sup>-1</sup>)

Bond	Average bond dissociation energy	Bond	Average bond dissociation energy
C—H	412	C—I	238
C—C	348	N—H	388
C=C	612	N—N	163
C···C*	518	N=N	409
C≡C	837	N—O	210
C—O	360	N=O	630
C=O	743	N—F	195
C—N	305	N—Cl	381
C—F	484	O—H	463
C—Cl	338	O—O	157
C—Br	276		

\*In benzene.

## 2D.3 Forces des liaisons

### Résumé : Facteurs qui influencent la force de liaison

- Ordre de liaison :  $C\equiv C > C=C > C-C$
- Résonance :  $C=C > C-C(\text{benzene}) > C-C$
- Doublet libres sur des atomes voisins :  $F-F < H-H$
- Rayon atomique :  $HF > HCl > HBr > HI$

Plus le rayon est petit, plus la liaison est forte.

	1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	18/VIII
2	Li	Be	B	CH 412	NH 388	OH 463	HF 543	Ne
3	Na	Mg	Al	SiH 318	PH 322	SH 338	HCl 419	Ar
4	K	Ca	Ga	GeH 289	AsH 297	SeH 312	HBr 354	Kr
5	Rb	Sr	In	SnH 253	SbH 257	TeH 267	HI 287	Xe
6	Cs	Ba	Tl	PbH 205	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra						

Figure 2D.8

## 2D.3 Forces des liaisons

### Résumé

La force d'une liaison entre deux atomes est mesurée par son énergie de dissociation : plus l'énergie de dissociation est grande, plus la liaison est forte. La force d'une liaison entre deux mêmes atomes augmente avec la multiplicité de la liaison, diminue avec l'augmentation du nombre de doublet libre sur les atomes voisins et diminue avec l'augmentation des rayons atomiques.



# Longueur des liaisons

Sujet 2D.4

## 2D.4 Longueur des liaisons

### Longueur des liaisons

- **Distance internucléaire entre les centres de deux atomes = longueur de la liaison**
- La longueur des liaisons influence la **taille et la forme** de la molécule.
- Par exemple, la réplication de l'ADN, la liaison des enzymes aux sites actifs.
- Déterminé par spectroscopie ou diffraction des rayons X.

## 2D.4 Longueur des liaisons

### Longueur des liaisons

**TABLE 2.5** Average and Actual Bond Lengths

Bond	Average bond length (pm)	Molecule	Bond length (pm)
C—H	109	H <sub>2</sub>	74
C—C	154	N <sub>2</sub>	110
C=C	134	O <sub>2</sub>	121
C⋯C*	139	F <sub>2</sub>	142
C≡C	120	Cl <sub>2</sub>	199
C—O	143	Br <sub>2</sub>	228
C=O	112	I <sub>2</sub>	268
O—H	96		
N—H	101		
N—O	140		
N=O	120		

\*In benzene.

## 2D.4 Longueur des liaisons

### Résumé : Facteurs qui influencent la longueur de la liaison

- Ordre de liaison :  $C\equiv C < C=C < C-C$
- Résonance :  $C=C < C-C(\text{benzene}) < C-C$
- Doublets libres sur des atomes voisins :  $F-F > H-H$
- Rayon atomique :  $HF < HCl < HBr < HI$

Plus le rayon est petit, plus la liaison est courte  
(voir Figure 2D.9).

Ces tendances sont **opposées** à celles observées  
pour la force de liaison.

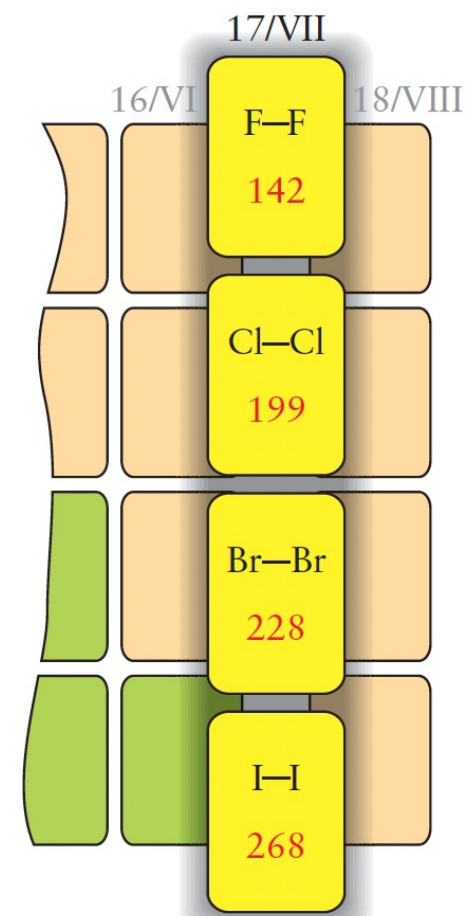


Figure 2D.9



## 2D.4 Longueur des liaisons

### Rayon covalent

- **Contribution d'un atome à la longueur d'une liaison covalente = rayon covalent**
- Mesurée comme la moitié de la distance entre les centres (noyaux) d'atomes voisins reliés par une liaison covalente (*pour des atomes identiques*).
- Les rayons covalents peuvent être additionnés pour estimer les longueurs des liaisons dans les molécules.
- Les valeurs tabulées sont des moyennes de rayons dans des molécules polyatomiques.

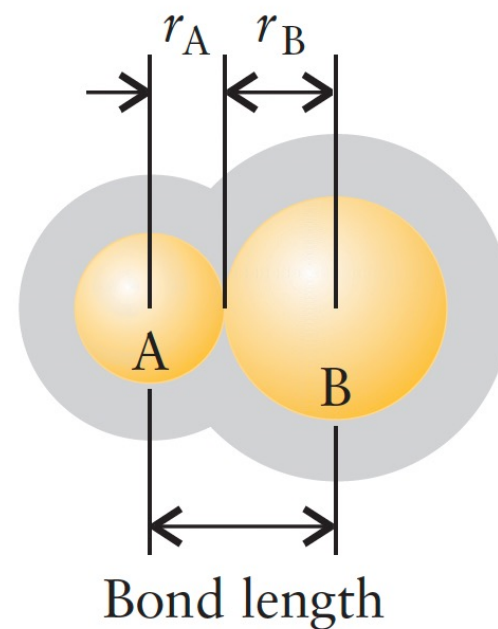


Figure 2D.8

## 2D.4 Longueur des liaisons

Figure 2D.5

### Rayons covalents de l'hydrogène et des éléments du bloc p (en pm)

				<div>H<span>37</span></div>				18/VIII
								<div>He</div>
	1	2	13/III	14/IV	15/V	16/VI	17/VII	
2	<div>Li</div>	<div>Be</div>	<div>B<span>88</span></div>	<div>C<span>60</span> <span>67</span> <span>77</span></div>	<div>N<span>55</span> <span>60</span> <span>75</span></div>	<div>O<span>60</span> <span>66</span></div>	<div>F<span>58</span></div>	<div>Ne</div>
3	<div>Na</div>	<div>Mg</div>	<div>Al<span>118</span></div>	<div>Si<span>111</span></div>	<div>P<span>110</span></div>	<div>S<span>102</span></div>	<div>Cl<span>98</span></div>	<div>Ar</div>
4	<div>K</div>	<div>Ca</div>	<div>Ga<span>126</span></div>	<div>Ge<span>122</span></div>	<div>As<span>121</span></div>	<div>Se<span>117</span></div>	<div>Br<span>114</span></div>	<div>Kr</div>
5	<div>Rb</div>	<div>Sr</div>	<div>In<span>144</span></div>	<div>Sn<span>141</span></div>	<div>Sb<span>138</span></div>	<div>Te<span>137</span></div>	<div>I<span>134</span></div>	<div>Xe</div>
6	<div>Cs</div>	<div>Ba</div>	<div>Tl</div>	<div>Pb</div>	<div>Bi</div>	<div>Po</div>	<div>At</div>	<div>Rn</div>

## 2D.4 Longueur des liaisons

### Résumé

Le rayon covalent d'un atome est la contribution qu'il apporte à la longueur d'une liaison covalente ; les rayons covalents sont additionnés pour estimer la longueur des liaisons dans les molécules.

## Les compétences que vous avez acquises vous permettent

- ❑ D'expliquer le concept d'électronégativité et de l'utiliser pour estimer si une liaison est polaire.
- ❑ D'expliquer comment on utilise la résonance pour améliorer la description d'une liaison covalente en y introduisant un caractère ionique.
- ❑ D'estimer le caractère ionique ou covalent.
- ❑ D'expliquer comment on utilise le concept de polarisabilité pour améliorer la description d'une liaison ionique.
- ❑ De prédire et expliquer les évolutions périodiques de la polarisabilité des anions et le pouvoir polarisant des cations.
- ❑ De prédire et expliquer les forces et les longueurs de liaison relatives.
- ❑ **Résumé : Vous avez appris que l'électronégativité d'un élément vous permet d'identifier l'atome d'une liaison qui possède la plus grande part du doublets d'électrons. Les liaisons chimiques présentent toute une gamme de caractéristiques, allant de la liaison entièrement covalente à la liaison entièrement ionique. Vous avez vu que les forces de liaison sont approximativement transférables entre les molécules et que les atomes contribuent de manière caractéristique à la longueur des liaisons.**



# Le modèle VSEPR

Sujet 2E

## 2E Le modèle VSEPR

### Introduction

Structures de Lewis vs modèle VSEPR

Structures de Lewis	modèle VSEPR
Indique la <b>répartition</b> des électrons de valence en doublet liants (liaisons) et en doublets libres ou électrons non appariés.	Les électrons de valence autour d'un atome central déterminent la <b>forme</b> d'une molécule.
Montre comment les atomes sont <b>connectés</b> .	

**Sujet 2E.1 Le modèle VSEPR de base**

**Sujet 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central**

**Sujet 2E.3 Molécules polaires**

POURQUOI DEVEZ-VOUS SAVOIR  
CELA?

- La forme moléculaire est essentielle pour comprendre la réactivité.

QUE DEVEZ-VOUS SAVOIR  
AUPARAVANT ?

- Structures de Lewis (Sujet 2B)
- Molécules polaires et liaisons polaires (Sujet 2D)

# Le modèle VSEPR de base

Sujet 2E.1

Quelle est la forme 3D d'une  
molécule ?

## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

### Valence-shell electron-pair repulsion (VSEPR) model

- Axé sur la compréhension de la **forme moléculaire**.
- Le modèle VSEPR élargit la théorie de la liaison de Lewis en y ajoutant des règles qui expliquent les **angles de liaison** et les **formes moléculaires** en termes de **régions de forte concentration électronique**.

**Règle 1:** Les régions de forte concentration électronique (les liaisons et les doublets libres sur l'atome central) se repoussent mutuellement et, pour minimiser leurs répulsions, **ces régions s'éloignent autant que possible les unes des autres** en conservant la même distance par rapport à l'atome central.

**Règle 2:** Une liaison multiple est traitée comme une seule zone de concentration électronique.

## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

### Valence-shell electron-pair repulsion (VSEPR) model

=Modèle de répulsion des paires d'électrons de la couche de Valence

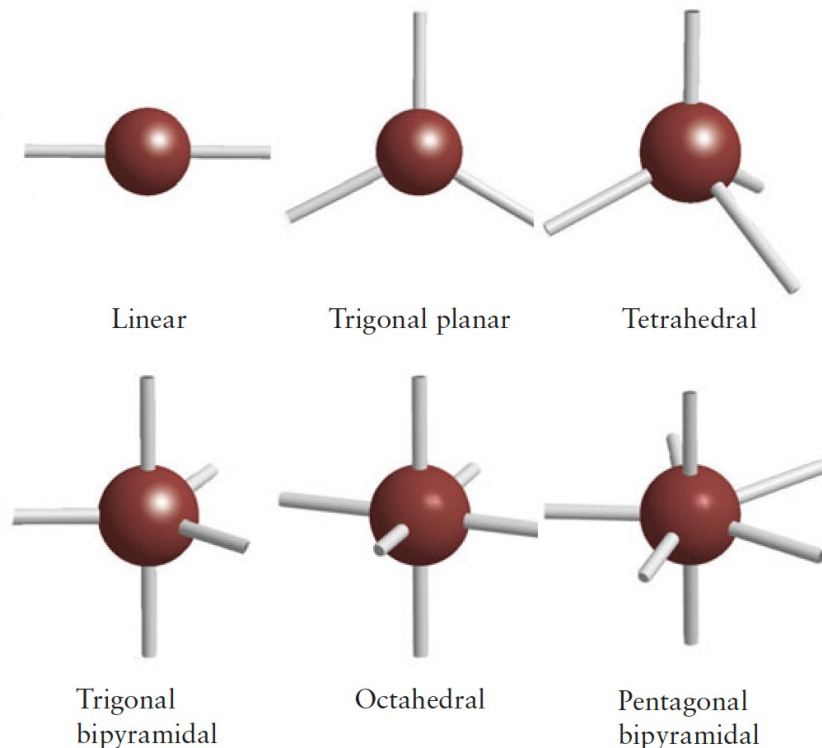
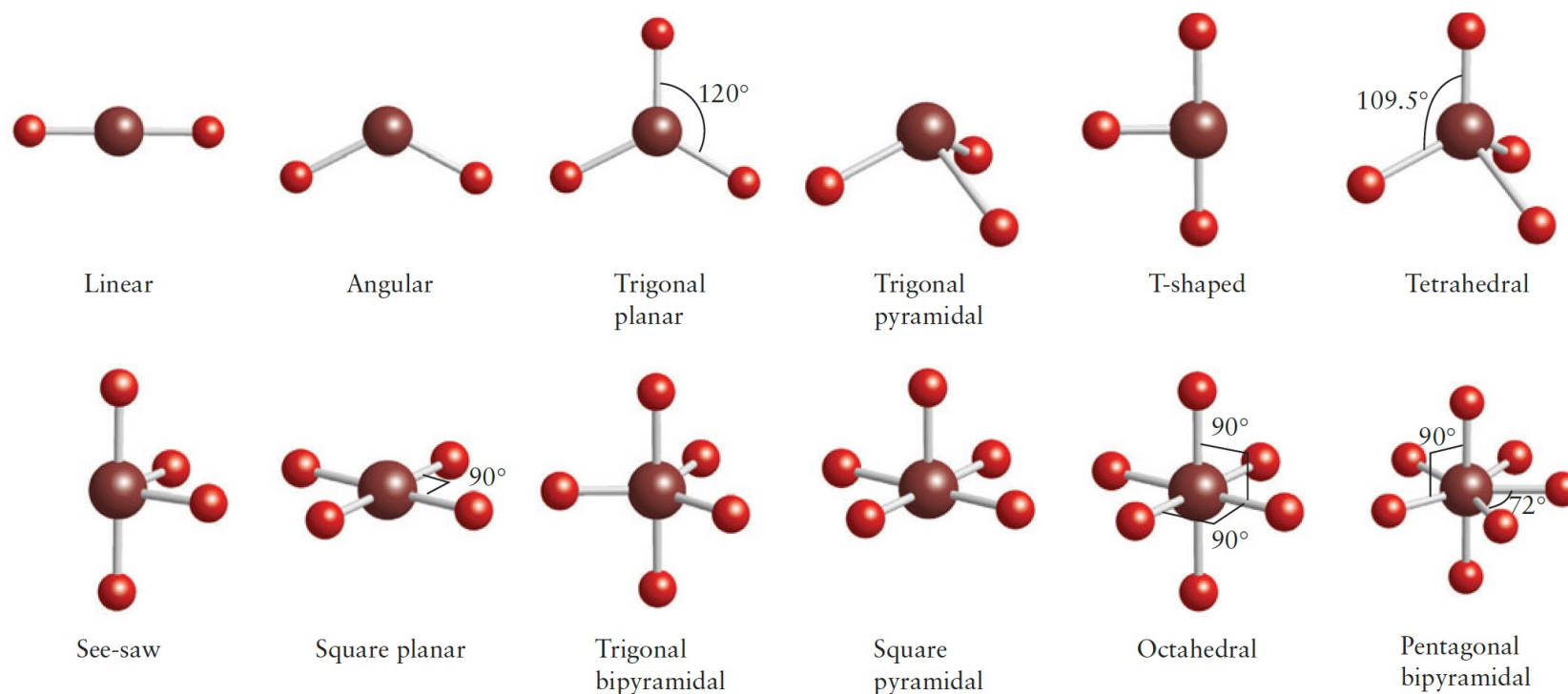


Figure 2E.2

- Les positions que prennent deux à sept régions à forte concentration d'électrons (atomes et doublets libres) autour d'un atome central.
- **Régions** : lignes droites partant de l'atome central (rouge).
- Utilisez ce diagramme pour identifier **l'arrangement électronique** d'une molécule, puis utilisez la Fig. 2E.1 pour identifier la forme de la molécule à partir de l'emplacement de ses atomes.

## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

### Valence-shell electron-pair repulsion (VSEPR) model



Remarque : les doublets libres ne sont pas représentés dans ces figures, seuls les atomes le sont..

Figure 2E.1



## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

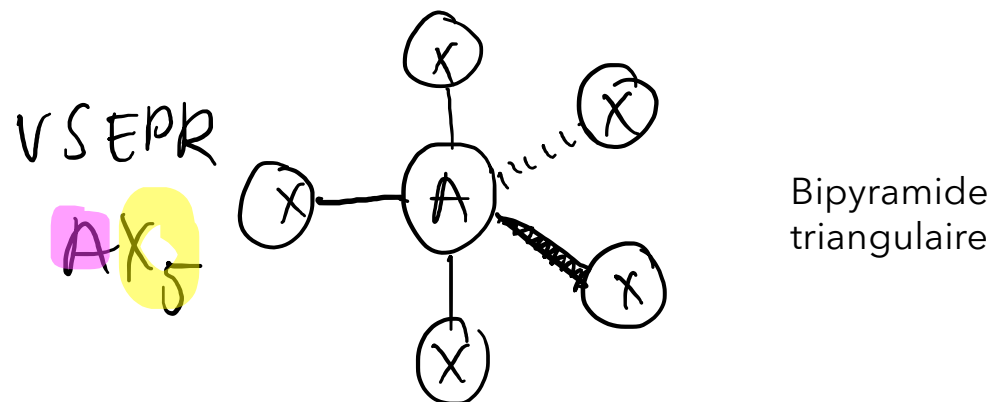
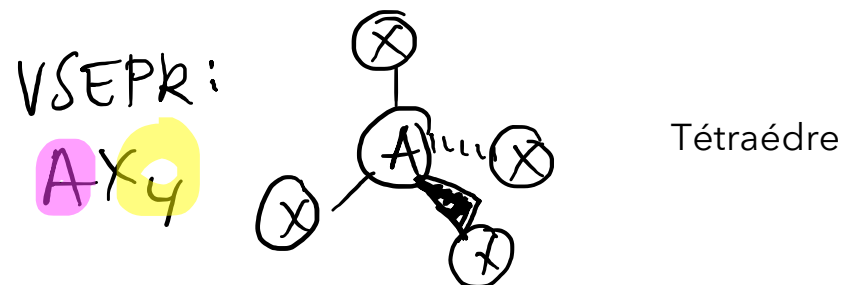
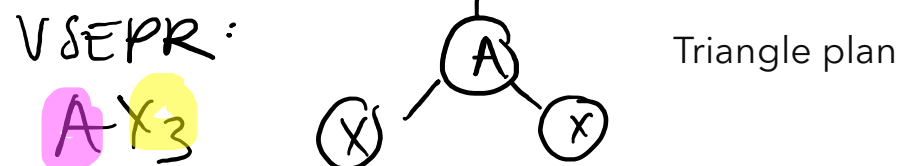
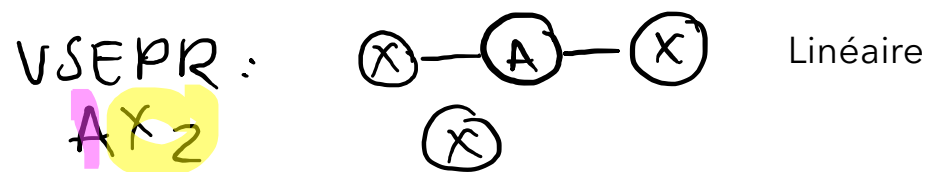
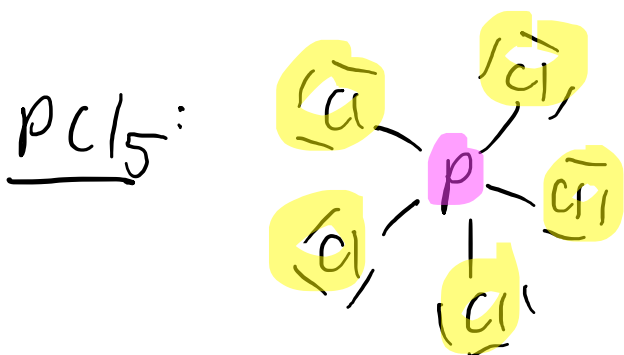
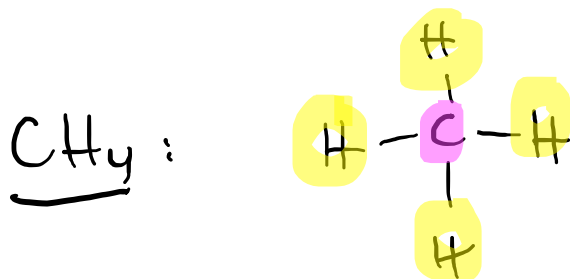
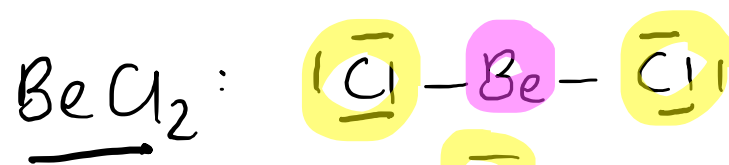
### La méthode

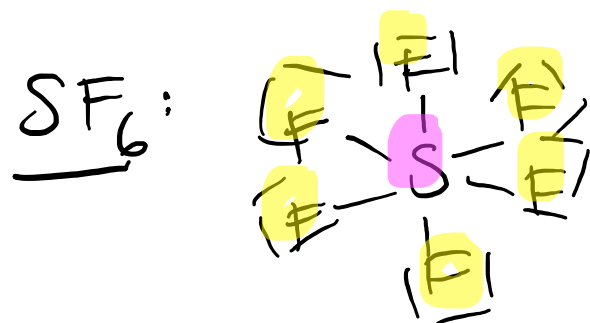
1. Écrivez la structure de Lewis. S'il existe des structures de résonance, choisissez-en une.
2. Compter le nombre de doublets d'électrons (liants et non liants) autour de l'atome central (ou des atomes centraux). Traiter une liaison multiple comme une seule unité de haute densité électronique.
3. Identifiez *l'arrangement des électrons*. Placez les doublets d'électrons le plus loin possible les uns des autres.
4. Localisez les *atomes* et classez la *forme* de la molécule..
5. Optimisez les *angles de liaison* pour les molécules comportant des *doublet libres* sur le ou les atomes centraux en gardant à l'esprit que les répulsions se font dans cet ordre :  
doublet libre-doublet libre > doublet libre-doublet liant > doublet liant-doublet liant

## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

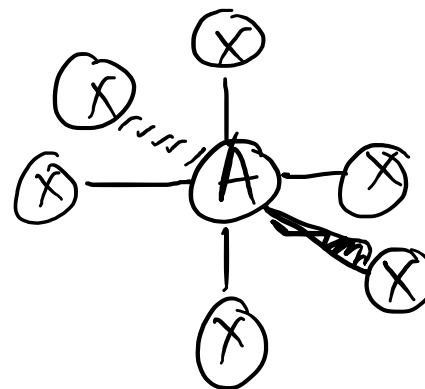
**Quelques exemples : prédire la forme de ces molécules.**

- Chlorure de béryllium,  $\text{BeCl}_2$
- Trifluorure de bore,  $\text{BF}_3$
- Méthane,  $\text{CH}_4$
- Pentachlorure de phosphore,  $\text{PCl}_5$
- Hexafluorure de soufre,  $\text{SF}_6$
- Dioxyde de carbone,  $\text{CO}_2$
- Ion carbonate,  $\text{CO}_3^{2-}$
- Ion nitrate,  $\text{NO}_3^-$
- Éthène,  $\text{C}_2\text{H}_4$





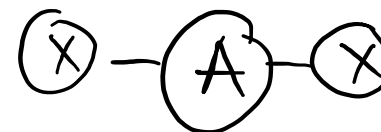
VSEPR:



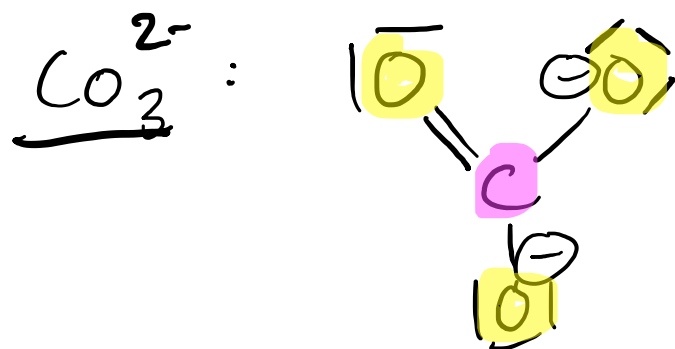
Octaèdre



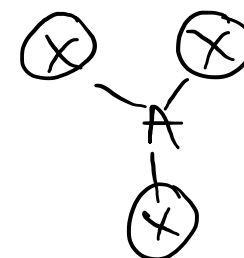
VSEPR:



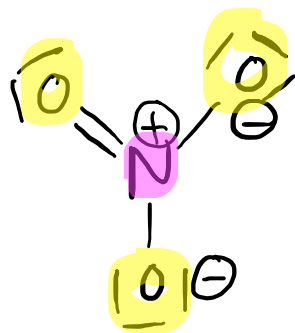
Linéaire



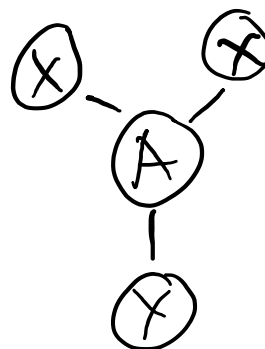
VSEPR:



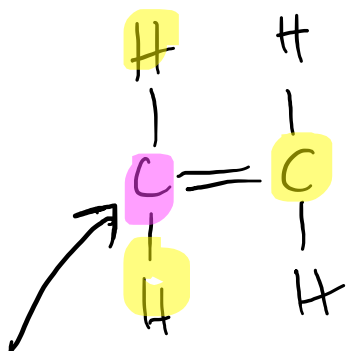
Triangle plan



VSEPR:

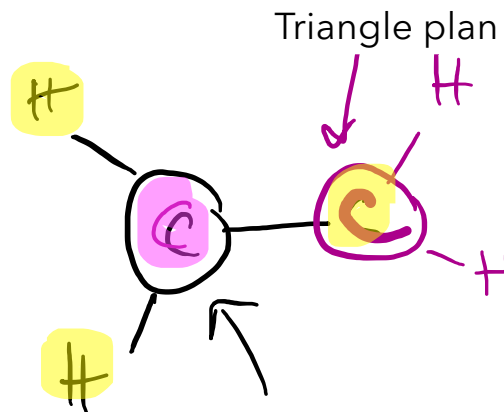


Triangle plan



look  
at each central  
carbon separately

VSEPR

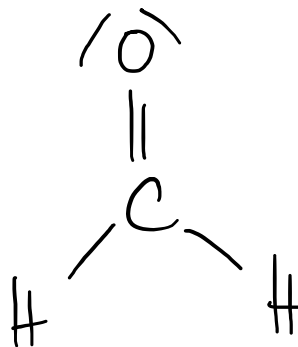
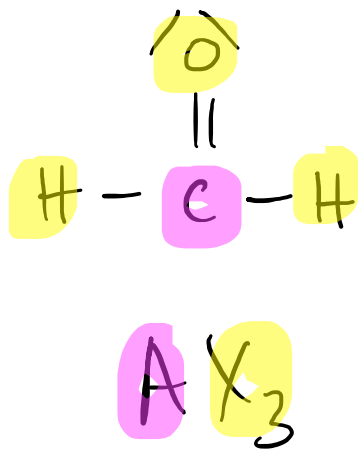


Triangle plan

## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

### Exemple 2E.1

Prédire la forme d'une molécule de méthanal (formaldéhyde,  $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$ ).



Triangle plan

## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

### Résumé

Selon le modèle VSEPR, les régions à forte concentration d'électrons prennent des positions qui maximisent leurs séparations ; les doublets d'électrons dans une liaison multiple sont traitées comme une seule unité. La forme de la molécule est alors identifiée à partir des positions relatives de ses atomes.

# Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

Sujet 2E.2





## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### La formule générique du VSEPR $AX_nE_m$

A = l'atome central

$X_n = n$  atome(s) lié(s)

$E_m = m$  doublet libre

Les molécules ayant la même formule VSEPR ont le même arrangement électronique et la même forme.

E.g.  $BF_3$  et  $NO_3^-$  sont des exemples d'espèces  $AX_3$ .

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### Arrangement des électrons vs forme moléculaire

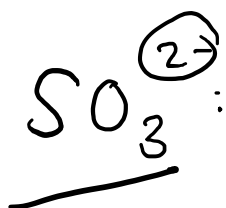
**Règle 3:** Toutes les zones de forte concentration électronique, les doublets libres et les liaisons, sont prises en compte pour la description de la figure de répulsion, **mais seules les positions des atomes** sont prises en compte pour indiquer la forme de la molécule.

Un électron célibataire sur l'atome central est traité comme une zone de forte densité électronique (= doublet libre).

Exemples (tableau) :

Ion sulfite,  $\text{SO}_3^{2-}$

Dioxyde d'azote,  $\text{NO}_2$

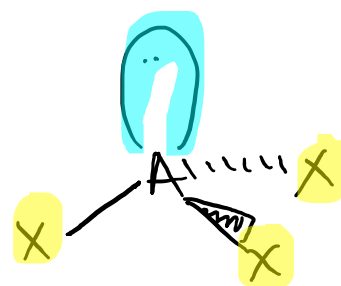


$$6 + 3 \cdot 6 + 2 = 26 e^-$$

$$13 e^- \text{ pairs}$$

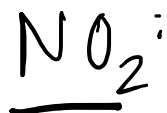


one resonance structure



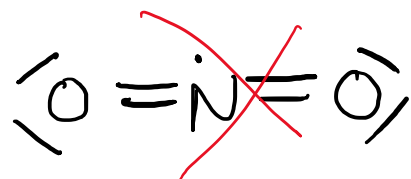
Pyramide triangulaire

4 units of  $e^-$  density:  $\text{AX}_3\text{E}$

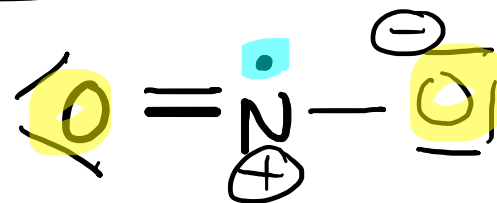


$$5 + 2 \cdot 6 = 17 e^-$$

odd number  
↓  
unpaired  $e^-$ !



↑  
N is in 2nd period,  
cannot be hypervalent.



VSEPR:  $\text{AX}_2\text{E}$

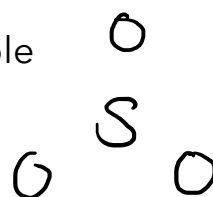


coudée

## Pas à pas : Structure de Lewis de $\text{SO}_3^{2-}$

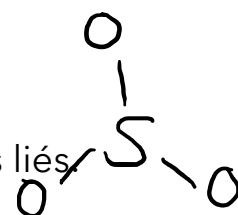
Étape 1 : Compter les électrons de valence  $6 + 3 \cdot 6 + 2 = 26$

Étape 2 : rédiger l'arrangement le plus probable



13  $e^-$  paires

Étape 3 : Placer un doublets d'électrons entre chaque série d'atomes liés



Étape 4 : Compléter les octets/doublets  $13 - 3 e^- \text{ paires} = 10 \text{ remaining}$

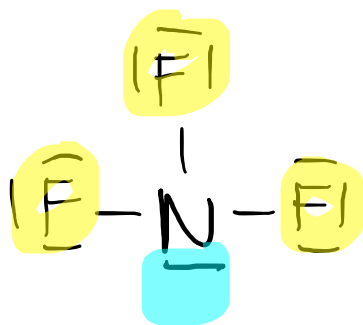


Ce sont toutes des structures de résonance théoriquement possibles, la plus stable (encadrée) minimise les charges formelles et place les charges formelles sur l'atome le plus électronégatif (l'oxygène).

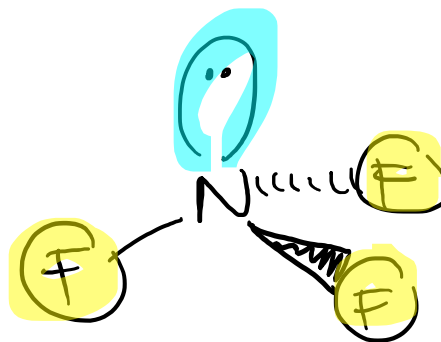
## 2E.1 Le modèle VSEPR de base

### Exemple 2E.2

Prévoir l'arrangement électronique et la forme d'une molécule de trifluorure d'azote,  $\text{NF}_3$ .



VSEPR:  $\text{AX}_3\text{E}$



## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### Raffinement du modèle VSEPR

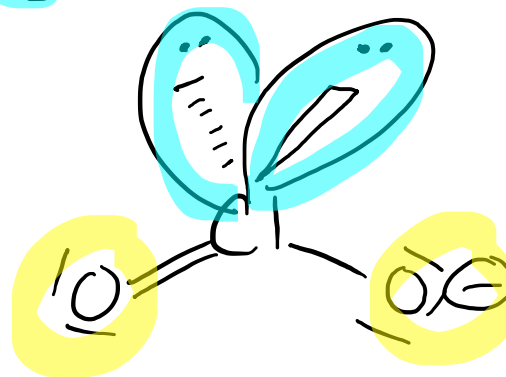
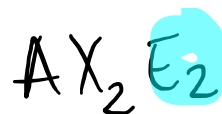
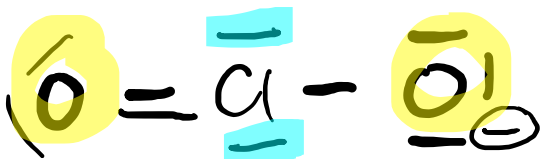
- Jusqu'à présent, les doublets libres ont été considérés comme équivalents aux liaisons pour ce qui est de leur effet sur la forme. Est-ce vraiment le cas ?
- $\text{SO}_3^{2-}$  ion est tétraédrique : Un angle de liaison O-S-O de  $109,5^\circ$  attendu
- Trouvé :  $106^\circ$
- Pourquoi ? Les doublets libres ont un effet plus fortement répulsif que les électrons des liaisons. Le doublet libre rapprochent les atomes liés à l'atome central. Le nuage électronique d'un doublet libre peut s'étendre sur un plus grand volume que celui d'un doublet liant. Un doublet liant est maintenue en place par deux atomes, le doublet libre par un seul.
- **Règle 4:** L'ordre des intensités des répulsions est doublet libre-doublet libre > doublet libre-atome > atome-atome.
- État d'énergie le plus bas : doublet libre aussi éloignées que possible l'un de l'autre.
- Vous pouvez vous attendre **à ce que l'angle XAX soit inférieur à  $109,5^\circ$  pour toutes les espèces  $\text{AX}_3\text{E}$ .**

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### Auto-test

- Donnez la formule VSEPR d'un  $\text{ClO}_2^-$  ion. Prédire son arrangement électronique et sa forme

$$7 + 2 \cdot 6 + 1 = 20 \text{ électrons} \mid 10 \text{ e}^- \text{ pairs}$$



Tétraédre

Coudée

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### $AX_4E$

**Règle 4:** L'ordre des intensités des répulsions est doublet libre-doublet libre > doublet libre-atome > atome-atome.

La règle 4 permet de prédire la position dans laquelle un doublet libre sera trouvé.

Par exemple, l'arrangement électronique dans une molécule ou un ion  $AX_4E$ , tel que  $IF_4^+$ , est bipyramide triangulaire. Il existe deux emplacements possibles pour le doublet libre:

- a) Un doublet libre axial
- b) Un doublet libre équatorial

Conclusion : **b) est préféré.**

**Cette forme est connue sous le nom de « bascule ».**

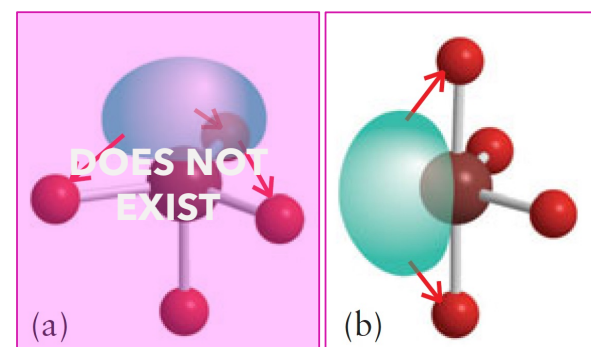
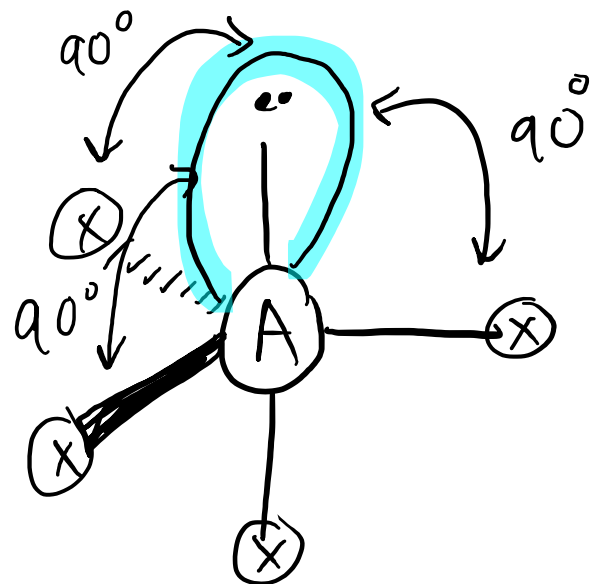


Figure 2E.4



AX<sub>4</sub>E:

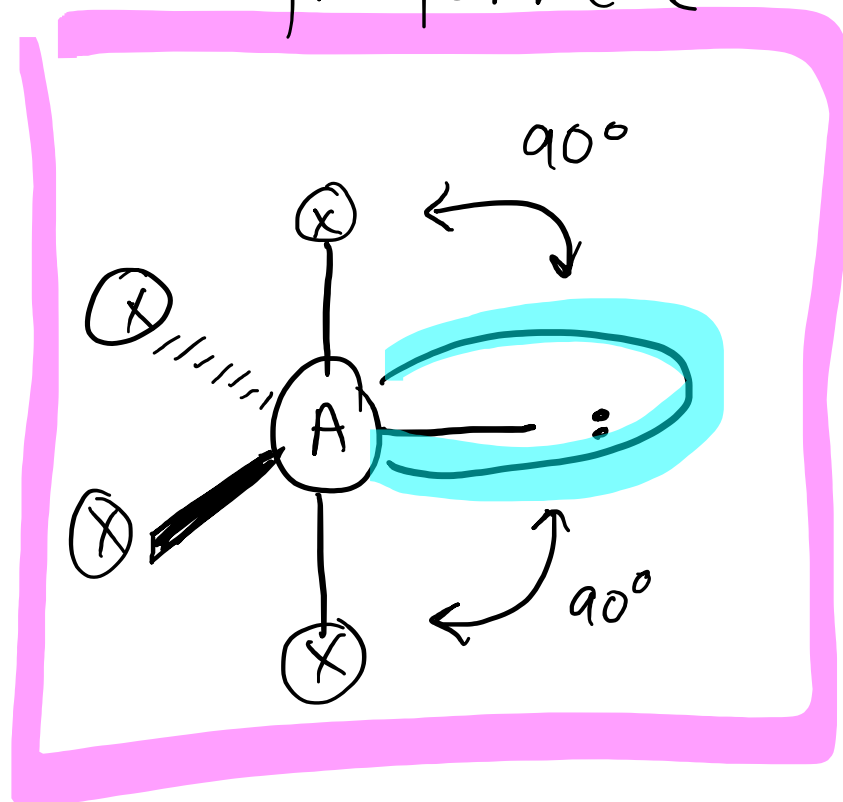


doublet libre axial

3 repulsive interactions

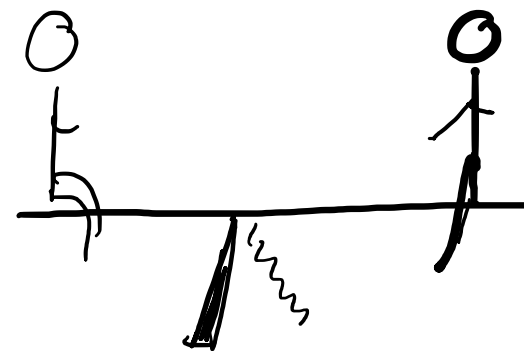
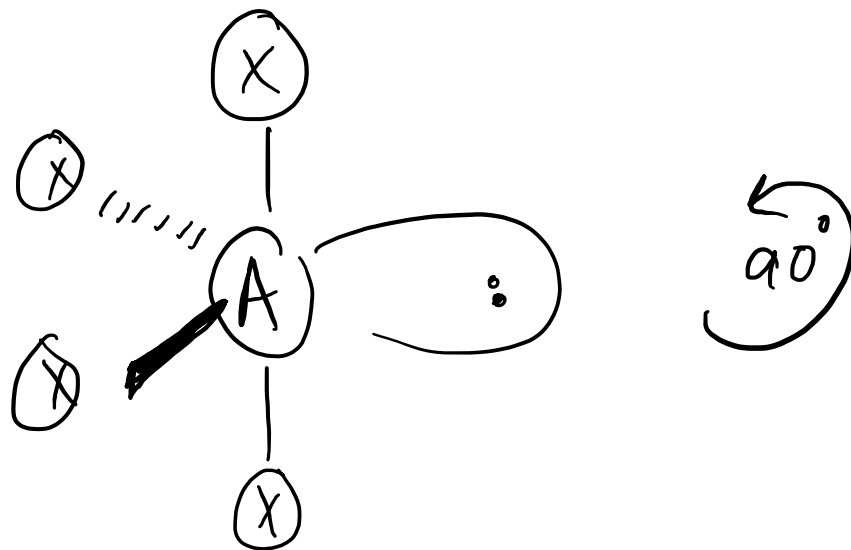
vs.

preferred



Un doublet libre équatorial

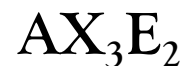
2 repulsive interactions



SeeSaw

(bascule)

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central



- Arrangement des électrons : bipyramide triangulaire
- Forme moléculaire : **En forme de T**
- Pourquoi ? Les doublets libres sont les plus éloignés les uns des autres ( $120^\circ$ ). Dans le cas axial, ils auraient été à  $90^\circ$  des positions équatoriales.

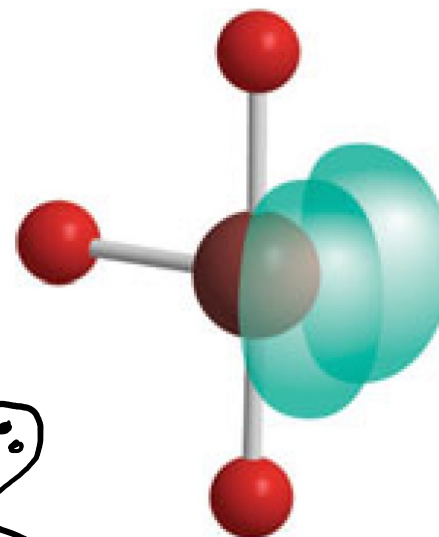
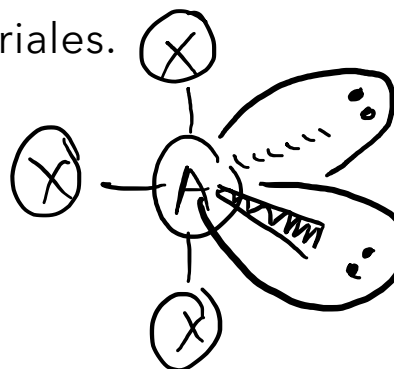


Figure 2E.5

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central



- Arrangement des électrons : octaèdre
- Forme moléculaire : **carré plan**
- Pourquoi ? Les deux doublets libres sont plus éloignés l'un de l'autre lorsqu'ils se trouvent en face l'un de l'autre.

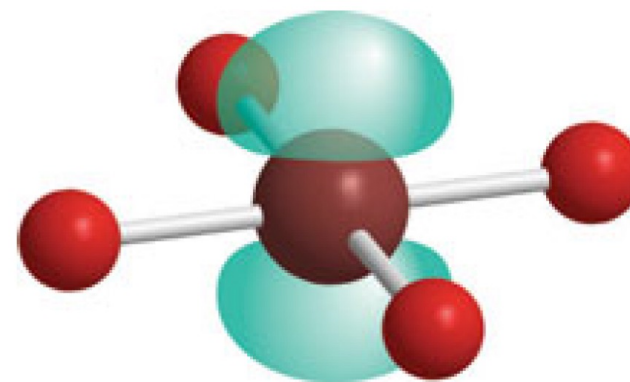


Figure 2E.6

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### TOOLBOX 3.1

### HOW TO USE THE VSEPR MODEL

#### CONCEPTUAL BASIS

Regions of high electron concentration—bonds and lone pairs attached to a central atom in a molecule—arrange themselves in such a way as to minimize mutual repulsions.

#### PROCEDURE

The general procedure for predicting the shape of a molecule is as follows:

*Step 1* Decide how many atoms and lone pairs are present on the central atom by writing a Lewis structure for the molecule.

*Step 2* Identify the electron arrangement, including lone pairs and atoms, and treating a multiple bond as equivalent to a single bond (see Fig. 3.2).

*Step 3* Locate the atoms and identify the molecular shape (according to Fig. 3.1). The molecular shape describes only the positions of the atoms, not the lone pairs.

*Step 4* Allow the molecule to distort so that lone pairs are as far from one another and from bonding pairs as possible. The repulsions are in the order

Lone pair–lone pair > lone pair–atom > atom–atom

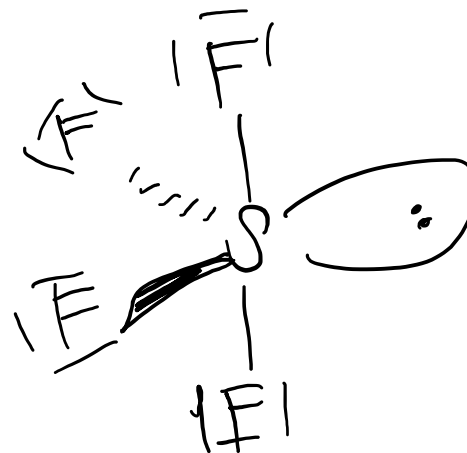
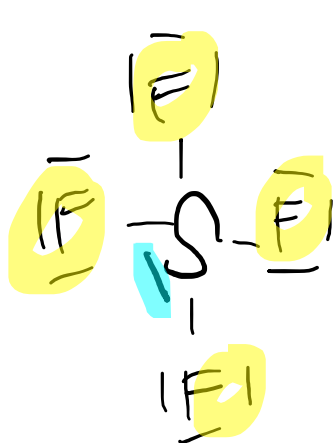
*Example 3.3* shows how this procedure is used.

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### Exemple 2E.3

$$6 + 4 \cdot 7 = 34 \text{ } e^- \rightarrow 17 \text{ } e^- p$$

Prévoir la forme d'une molécule de tétrafluorure de soufre,  $\text{SF}_4$ .



Forme moléculaire : bascule

## 2E.2 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central

### Résumé

Dans une molécule qui possède des doublet libres ou un seul électron non liant sur l'atome central, les électrons de valence contribuent à l'arrangement électronique autour de l'atome central, et seuls les atomes liés sont pris en compte dans l'identification de la forme. Les paires solitaires déforment la forme d'une molécule de manière à réduire les répulsions doublet libre-doublet libre et doublet libre-double liant.

# Molécules polaires

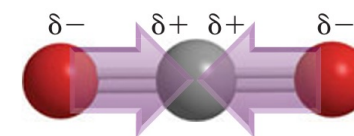
Sujet 2E.3



## 2E.3 Molécules polaires

### Définitions des molécules polaires

- Une molécule diatomique est polaire si sa liaison est polaire.
- Toutes les molécules diatomiques composées de deux types d'atomes différents sont au moins légèrement polaires.
- Une **molécule non polaire** est une molécule qui n'a pas de moment dipolaire électrique.
- Une **molécule diatomique homonucléaire** (e.g.  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $Cl_2$ ) est non polaire.
- Une molécule polyatomique peut être non polaire même si ses liaisons sont polaires. Par exemple : dans le dioxyde de carbone, les deux moments dipolaires C-O sont égaux en magnitude et se trouvent dans des directions opposées dans une molécule plane. Les moments dipolaires s'annulent.
- **Le moment dipolaire moléculaire** est la *somme* vectorielle des moments dipolaires des liaisons.



## 2E.3 Molécules polaires

### Une molécule polaire possède un moment dipolaire non nul

- Le HCl est une molécule polaire. Le moment dipolaire est de 1,08 D (typique).

**TABLE 3.1** Dipole Moments of Selected Molecules

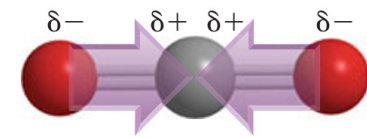
Molecule	Dipole moment (D)	Molecule	Dipole moment (D)
HF	1.91	PH <sub>3</sub>	0.58
HCl	1.08	AsH <sub>3</sub>	0.20
HBr	0.80	SbH <sub>3</sub>	0.12
HI	0.42	O <sub>3</sub>	0.53
CO	0.12	CO <sub>2</sub>	0
ClF	0.88	BF <sub>3</sub>	0
NaCl*	9.00	CH <sub>4</sub>	0
CsCl*	10.42	<i>cis</i> -CHCl=CHCl	1.90
H <sub>2</sub> O	1.85	<i>trans</i> -CHCl=CHCl	0
NH <sub>3</sub>	1.47		

\*For pairs of ions in the gas phase, not the bulk ionic solid.

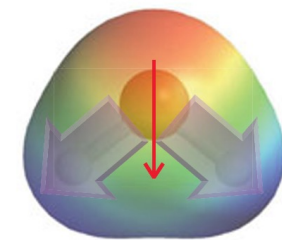
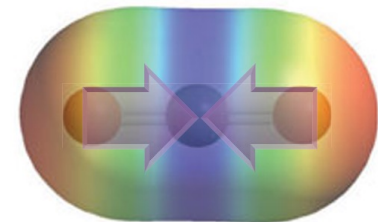
## 2E.3 Molécules polaires

### La surface du potentiel électrostatique (une *surface elpot*)

- Une autre façon de visualiser le moment dipolaire
- Le potentiel électrique net est calculé en chaque point de la surface de la molécule et représenté par différentes couleurs.
- **Bleu** : potentiel relativement positif
- **Rouge** : potentiel relativement négatif
- CO<sub>2</sub>: molécule non polaire
- H<sub>2</sub>O: molécule polaire



26 Carbon dioxide, CO<sub>2</sub>

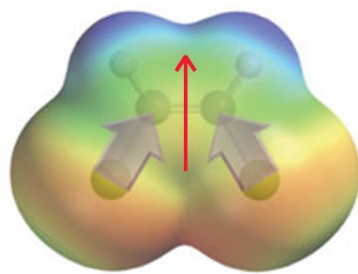


28 Water, H<sub>2</sub>O

## 2E.3 Molécules polaires

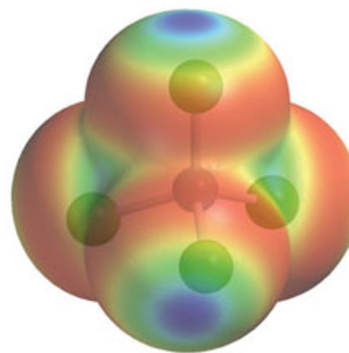
### Quelques exemples supplémentaires

polaire



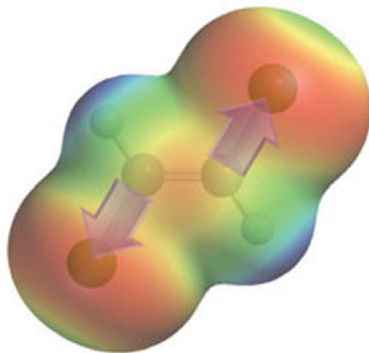
29 *cis*-Dichloroethene,  $C_2H_2Cl_2$

non polaire



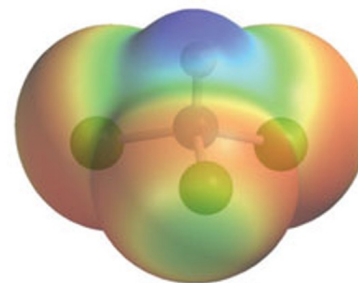
31 Tetrachloromethane,  $CCl_4$

non polaire



30 *trans*-Dichloroethene,  $C_2H_2Cl_2$

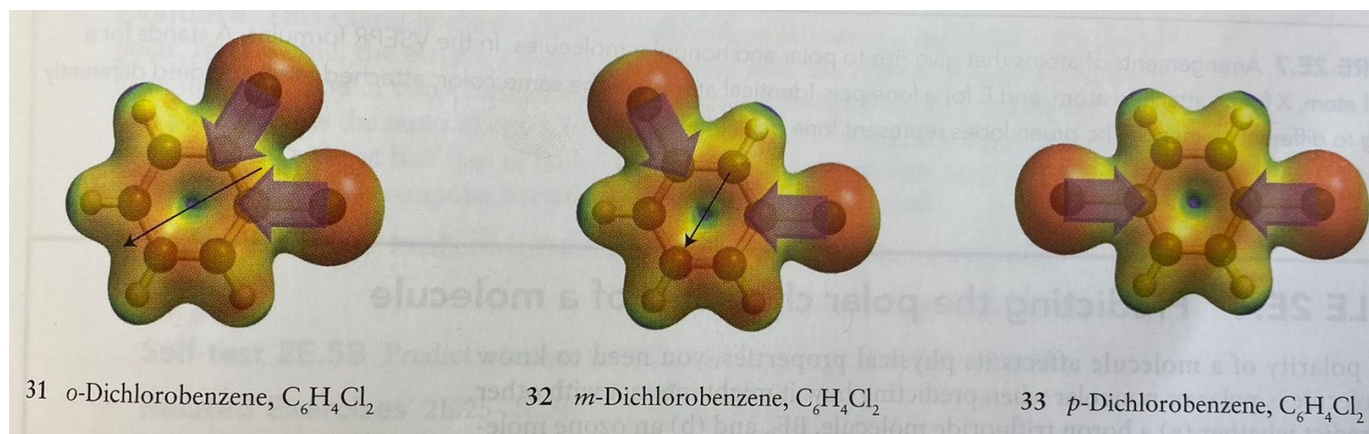
polaire



32 Trichloromethane,  $CH_3Cl$

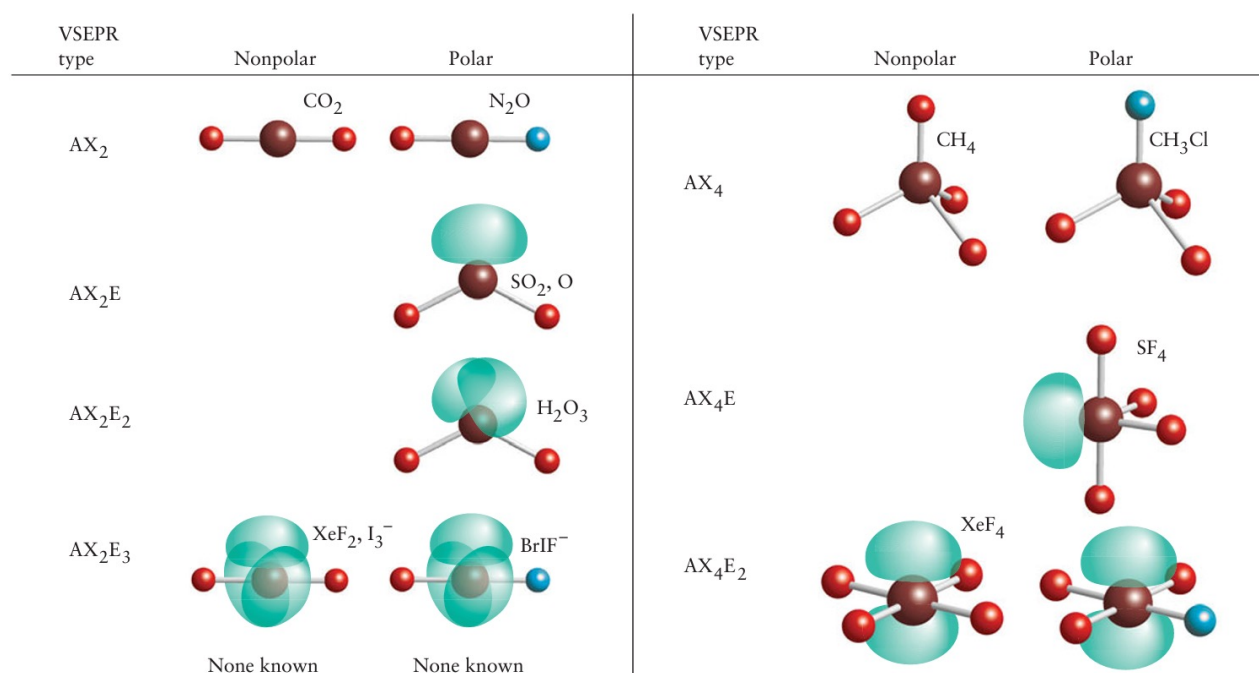
## 2E.3 Molécules polaires

### Quelques exemples supplémentaires



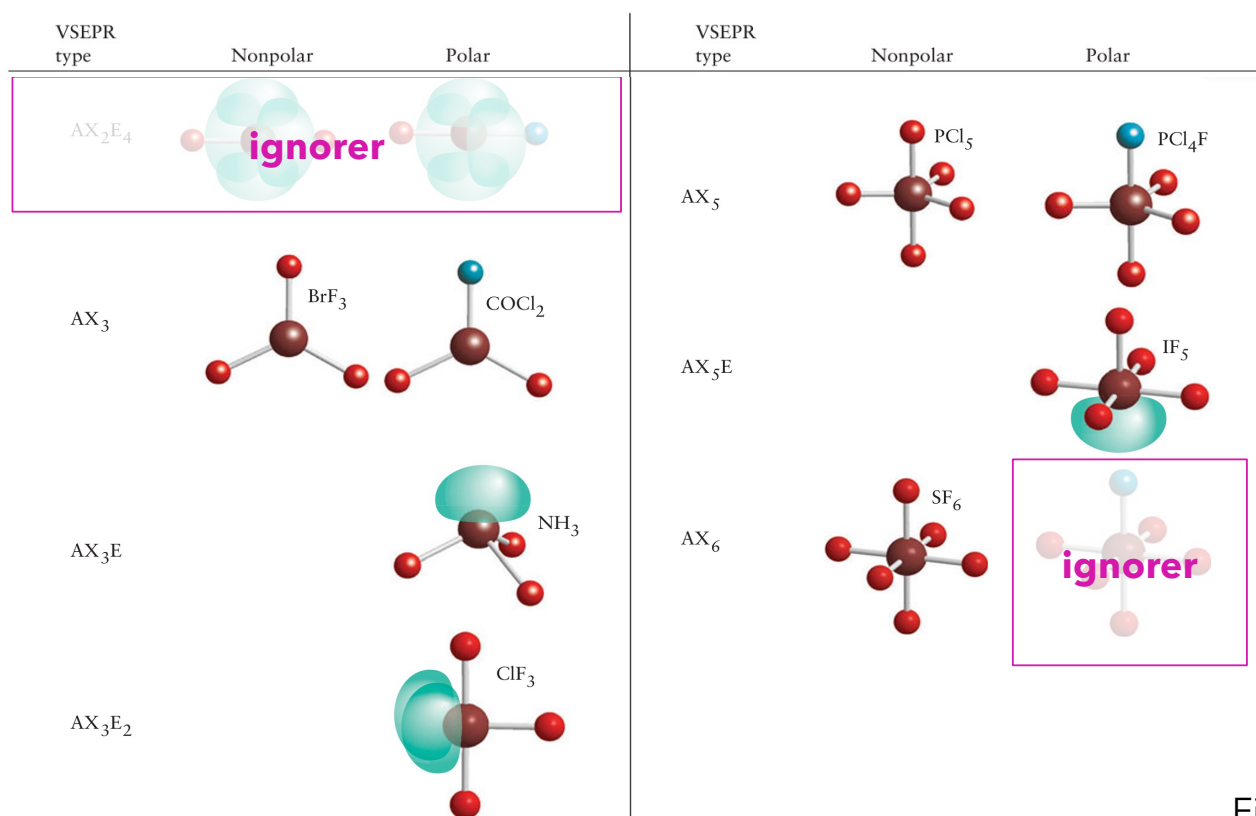
## 2E.3 Molécules polaires

### Aperçu des différentes configurations du VSEPR



## 2E.3 Molécules polaires

### Aperçu des différentes configurations du VSEPR



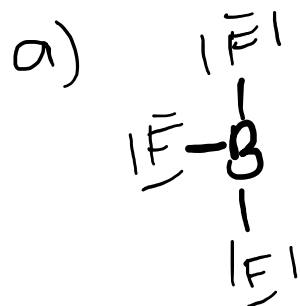
## 2E.3 Molécules polaires

### Example 2E.4

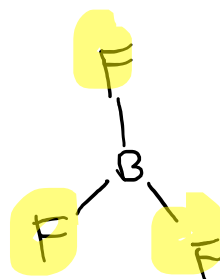
$$\rightarrow 3 + 3 \cdot 7 = 24 e^- / 12 e^- p$$

$$\rightarrow 3 \cdot 6 = 18 e^- / 9 e^- p$$

Predict whether (a) a boron trifluoride molecule,  $\text{BF}_3$ , and (b) an ozone molecule,  $\text{O}_3$ , are **polar**.



VSEPR  
shape



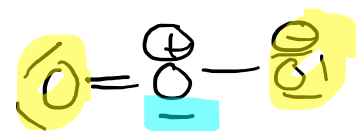
$\text{AX}_3$

Triangle plana

**nonpolar**

b)

~~$\text{O}=\text{O}=\text{O}$~~   
 $\rightarrow$  not enough  $e^-$  pairs



VSEPR:  $\text{AX}_2\text{E}$

Forme: Coudée

molecular  
dipole  
moment



**polar**

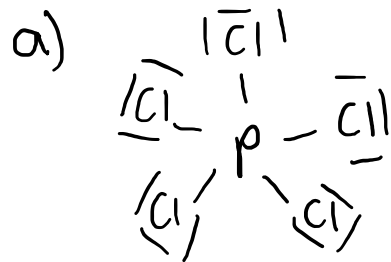


## 2E.3 Molécules polaires

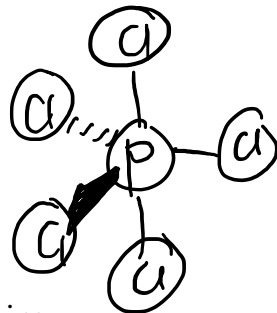
If time allows: **Example 2E.4**

$$5 + 5 \cdot 7 = 40 e^- / 20 e^- p$$

Predict whether (a)  $\text{PCl}_5$  and (b)  $\text{IF}_5$  are **polar or nonpolar**.



$\text{AX}_5$ :

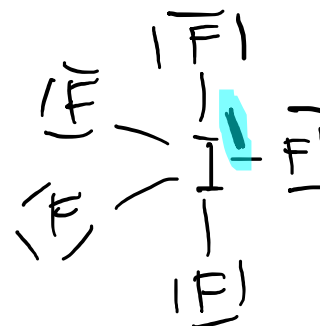


Bipyramide triangulaire

**nonpolar**

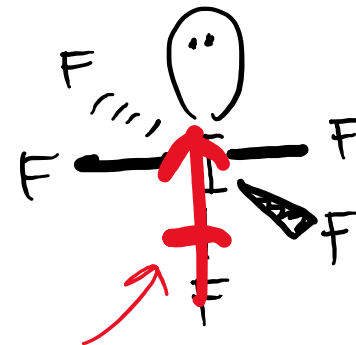
b)

$$7 + 5 \cdot 7 = 42 e^- / 21 e^- p$$



$\text{AX}_5\text{E}$

Pyramide Carrée



**polar**

molecular  
dipole  
moment

## 2E.3 Molécules polaires

### Résumé

Une molécule diatomique est polaire si sa liaison est polaire. Une molécule polyatomique est polaire si elle possède des liaisons polaires disposées dans l'espace de telle sorte que les moments dipolaires associés aux liaisons ne s'annulent pas.

## Les compétences que vous avez acquises vous permettent

- ❑ D'expliquer la base du modèle VSEPR de la liaison en termes de répulsions entre des doublets électroniques.
- ❑ D'utiliser le modèle VSEPR pour prédire l'arrangement électronique et la forme d'une molécule ou d'un ion polyatomique à partir de sa formule..
- ❑ De prédire le caractère polaire d'une molécule.
- ❑ **Résumé : Les formes des molécules simples (et les formes des régions localisées des molécules plus complexes) peuvent être prédites en évaluant les répulsions entre les régions à forte densité électronique. Vous avez vu que les doublets d'électrons libres se repoussent plus fortement que les électrons des liaisons. Vous avez appris que les liaisons multiples sont traitées comme des liaisons simples lors de la prédiction de la forme moléculaire et que la forme d'une molécule est identifiée à partir de la localisation de ses atomes (et non de ses doublets libres). Vous avez constaté que les doublets libres déforment souvent la forme d'une molécule de manière prévisible. Vous avez également constaté que la forme joue un rôle important pour déterminer si une molécule polyatomique est polaire.**