

Chapitre 5

De la structure à la polarité d'une entité

1. Schéma de Lewis et géométrie des entités

En classe de Seconde, il a été établi que le nombre d'électrons de valence des atomes des blocs s et p est le chiffre des unités du numéro de la colonne dans laquelle se situe l'atome dans le tableau périodique.

La détermination du schéma de Lewis d'une entité nécessite de connaître le nombre $N_{v,entité}$ d'électrons de valence de cette entité.

- Si l'entité est moléculaire :

$N_{v,neutre}$ est la somme des nombres d'électrons de valence de tous les atomes

- Si l'entité est anionique de formule A^{a-} :

$$N_{v,anion} = N_{v,neutre} + a$$

- Si l'entité est cationique de formule C^{c+} :

$$N_{v,cation} = N_{v,neutre} - c$$

1.1 - Schéma de Lewis d'une molécule non lacunaire

Le schéma de Lewis d'une entité est la représentation des atomes qui la constituent et de ses $N_{v,entité}/2$ doublets de valence. Le cas échéant, les charges formelles et les lacunes électroniques sont aussi représentées.

Afin d'établir le schéma de Lewis d'une molécule constituée d'hydrogène et d'atomes du bloc p, une démarche peut être :

1. calculer le nombre $N_{v,entité}/2$ de doublets de valence de l'entité ;
2. lier les atomes entre eux par un doublet ;
3. compléter le schéma de Lewis avec des doublets non-liants ou des doublets liants de doubles ou de triples liaisons en respectant deux règles :
 - le nombre total de doublets de valence doit être égal à $N_{v,entité}/2$;
 - un atome d'hydrogène s'entoure d'un doublet liant et les atomes du bloc p s'entourent de quatre doublets au total quand cela est possible.

1.2 - Autres schémas de Lewis

Dans un schéma de Lewis, lorsqu'un atome autre que l'atome d'hydrogène est entouré de d doublets (liants et non-liants) avec $d < 4$, cet atome est entouré de $(4 - d)$ lacunes électroniques.

L'ion hydrogène possède une lacune électronique.

Pour un atome X dans le schéma de Lewis d'une entité ionique, on note :

- ℓ le nombre de doublets liants entourant X dans le schéma de Lewis d'une molécule usuelle ;
- p le nombre de doublets liants entourant X dans le schéma de Lewis de l'ion.

Alors le nombre de charges formelles de X dans le schéma de Lewis de l'entité ionique est le nombre entier relatif $p - \ell$. La somme des charges formelles présentes sur un schéma de Lewis d'une entité est égale à la charge de l'entité.

1.3 - Géométrie d'une entité

La géométrie d'une entité peut être interprétée à partir de son schéma de Lewis. Pour une entité constituée entre autres d'un atome A , cette géométrie dépend du nombre d'atomes directement liés à A et du nombre de doublets non-liants entourant l'atome A .

- Si le nombre d'atomes liés à A et de doublets non-liants entourant l'atome A est de 4, alors A est au centre d'un tétraèdre ;
- Si le nombre d'atomes liés à A et de doublets non-liants entourant l'atome A est de 3, alors A est au centre d'un triangle ;
- Si le nombre d'atomes liés à A et de doublets non-liants entourant l'atome A est de 2, alors A est au centre d'un segment.

Les doublets non-liants ne sont pas représentés, laissant ainsi un ou plusieurs sommets de la représentation inoccupés par des atomes.

2. Caractère polaire d'une liaison ou d'une entité moléculaire

2.1 - Électronégativité des éléments

L'électronégativité d'un élément est une grandeur sans unité qui caractérise la capacité de l'atome à attirer à lui les doublets d'électrons d'une liaison dans laquelle il est engagé.

L'électronégativité d'un élément varie selon sa place dans le tableau périodique.

Dans une ligne du tableau périodique, l'électronégativité augmente avec le numéro atomique.

Dans une colonne (sauf pour l'hydrogène), l'électronégativité diminue quand le numéro atomique augmente.

2.2 - Liaison polaire

Pour une liaison entre les atomes A et B , si l'atome A est plus électronégatif que l'atome B , la liaison AB est dite polaire.

La liaison AB est alors associée à un vecteur caractérisant sa polarité, dont les caractéristiques sont :

- direction : droite portant les deux noyaux des atomes A et B ;
- sens : de l'atome le plus électronégatif vers l'atome le moins électronégatif ;
- norme : d'autant plus grande que la valeur absolue de la différence d'électronégativité entre A et B est grande pour une longueur de liaison fixée.

2.3 - Caractère polaire ou apolaire d'une entité

Le caractère polaire ou apolaire d'une entité moléculaire peut se déterminer à partir de sa géométrie et de la polarité de ses liaisons :

- déterminer le vecteur qui caractérise la polarité de chaque liaison ;
- réaliser la somme vectorielle de tous ces vecteurs de l'entité. Si cette somme est différente du vecteur nul, alors la molécule est polaire.