

(1) Préparation pour l'examen : Interactions dipôles-charges et dipôles- dipôles :

Lire Atkins « 8th Edition » pp. 629-633

(2) Dipôle de HOH

1) Ionique ou covalente  $\overset{\ominus}{\text{O}}-\overset{\oplus}{\text{H}}?$

$$\chi_{\text{O}} = 3,5, \chi_{\text{H}} = 2,1$$

$$(\Delta\chi) = 1,4 \quad \therefore \text{covalente (p/c } \Delta\chi \leq 1,7)$$

2) Charge partielle

$$CP(\text{H}) = 1 - 0 - 2 \left( \frac{2,1}{5,6} \right) = 0,25$$

$$CP(\text{O}) = 6 - 4 - 2 \left( \frac{3,5}{5,6} \right) = -0,5$$

$\therefore$  On assume qu'on a ~~un~~ deux dipôles tête à tête avec un angle  $\theta = 104,5^\circ$  entre eux.



3) Chaque dipôle individuel est :

$$\mu = 191 \times e \times r_{\text{to}}$$

$$\mu = 0,25 \times e \times r_{\text{tot}}$$

$$\text{ou } r_{\text{tot}} = r_{\text{H}}^{\text{covalent}} + r_{\text{O}}^{\text{covalent}}$$

$$= 0,25 \cdot (1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \times 97 \times 10^{-12} \text{ m})$$

$$= (31 + 66) \times 10^{-12} \text{ m} \\ = 97 \times 10^{-12} \text{ m}$$

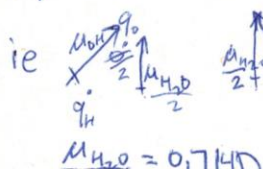
$$= 3,88 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

ou en unités de D

$$= 3,88 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m} \times 3 \times 10^{29} \frac{\text{D}}{\text{C} \cdot \text{m}}$$

$$= 1,17 \text{ D}$$

4) Pour trouver  $\mu_{\text{H}_2\text{O}}$  utilisez  $\cos \frac{\theta}{2} = \frac{1/2 \mu_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu_{\text{OH}}}$



$$\mu_{\text{H}_2\text{O}} = 2 \mu_{\text{OH}} \cos \frac{\theta}{2}$$

$$= 1,43 \text{ D}$$

Remarque: c'est 20% trop petit

### (3) benzène dans l'eau

(dipôle-dipôle induit).

Le dipôle induit dans benzène est la résultat du champ électrique de l'eau ( $\mu_{ben}^* = \alpha_{ben} E_{H_2O}$ )

$E_q = kq^+/r^2$  ← c'est pour une seule charge  
 $E_{M(H_2O)} = \frac{kq^-}{(r+l/2)^2} + \frac{kq^+}{(r-l/2)^2}$      $q^- = -q^+ = q$   
 $= -\frac{kq}{(r+l/2)^2} + \frac{kq}{(r-l/2)^2}$

$|q| = e$  pour E d'une molécule ionique

$|q| = C.P. \times (1,602 \times 10^{-19} C)$  d'une molécule covalente

Après la utilisation d'une expansion de Taylor

$$E_{M(H_2O)} = \frac{2kql}{r^3} = \frac{2k\mu}{r^3} (Jc^{-1}m^{-1})$$

$$\therefore \mu_{benzène}^* = \alpha_{benzène} E_{M(H_2O)}$$

$$= \frac{2k\mu_{H_2O} \alpha_{benzène}}{r^3} (C.M)$$

Remarque :  
 $\alpha$  - polarisabilité  
 $[\alpha] = C^2 m^2 \cdot J^{-1}$

L'énergie potentielle dipôle-dipôle induit

$$U = \frac{k M_1 M_2^*}{r^3} (1 - 3 \cos^2 \theta)$$

pour  $\rightarrow \rightarrow$   
 $M - M^*$  induit il va toujours prendre l'énergie minimal (plus stable)

Donc:  $\rightarrow M_1 \rightarrow M_2^* \rightarrow$

$$U = \frac{k M_1 M_2^*}{r^3} (1 - 3 \cos^2(180^\circ))$$

$$= \frac{-2k M_1 M_2^*}{r^3}$$

Avec  $M_{\text{benzène}}^* = \frac{2k M_{\text{H}_2\text{O}} \alpha_{\text{benzène}}}{r^3}$

$$U_{\text{H}_2\text{O-benzène}} = \frac{2k M_{\text{H}_2\text{O}}}{r^3} \left( - \frac{2k M_{\text{H}_2\text{O}} \alpha_{\text{ben}}}{r^3} \right)$$

$$= \frac{-4 k^2 M_{\text{H}_2\text{O}}^2 \alpha_{\text{ben}}}{r^6}$$

$$= \frac{-4 k M_{\text{H}_2\text{O}}^2 \alpha'_{\text{ben}}}{r^6}$$

Remarque:

$$\alpha' = k\alpha$$

$\alpha'$  - volume de polarisabilité

$$[\alpha'] = \text{Jm}^3 \text{C}^{-1} \times \text{C}^2 \text{m}^2 \text{J}^{-1} = \text{m}^3$$

ou en générale

$$U = \frac{-4 M_1^2 \alpha' k}{r^6} = \frac{M_1^2 \alpha'_2}{\pi \epsilon_0} \frac{1}{r^6}$$

Quelques valeurs de  $\alpha'$

$C_6H_6$  (benzène)

$$\alpha' = 10,33 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

diamètre =  $2,8 \times 10^{-10} \text{ m}$

$CH_4$  (méthane)

$$\alpha' = 2,67 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

$CO_2$

$$\alpha' = 2,51 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

$O_2$

$$\alpha' = 1,38 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

$C_{60}$  (fullerène)

$$\alpha' = 76,5 \times 10^{-30} \text{ m}^3$$

diamètre =  $10,2 \times 10^{-10} \text{ m}$