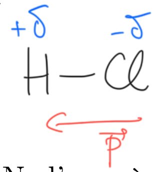
## Comment savoir si une molécule est polaire ?

Une molécule est une espèce chimique globalement neutre constituée d'atomes reliés entre eux par des liaisons **covalentes**.
Une liaison covalente résulte de la mise en commun de deux électrons par deux atomes voisins.
Certains atomes sont dits **électronégatifs** : l'électronégativité est le pouvoir d'un atome d'attirer à lui les électrons quand il fait partie d'un composé.
Le chlore Cl est par exemple plus électronégatif que l'hydrogène H. Dans la molécule HCl, les électrons constituants la liaison sont statistiquement plus proches de Cl que de H. On modélise ce phénomène en associant une charge partielle négative (notée $-\delta$) au chlore ainsi que la charge opposée ($+\delta$) à l'atome d'hydrogène.
Les barycentres des charges positives et négatives ne sont pas confondus : la molécule HCl est polaire.




moment dipolaire

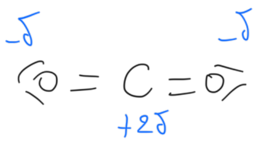
On peut retenir que l'azote N, l'oxygène O, le fluor F, le chlore Cl et le brome Br ont une électronégativité assez forte.

Dans le cas d'une molécule comportant plus de 2 atomes, on doit connaître la géométrie de la molécule pour prévoir l'existence d'un moment dipolaire. Comparer par exemple les molécules $CO_2$ (linéaire), $H_2O$ (coudée), $NH_3$ (pyramide à base triangulaire), $CH_4$ (le carbone est au centre d'un tétraèdre formé par les hydrogènes).

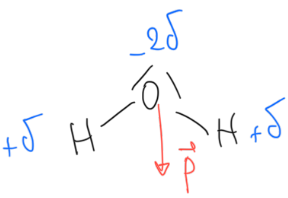
Remarque : en chimie, l'unité usuelle pour le moment dipolaire est le Debye (D) :

$$1D = \frac{1}{3}.10^{-29}\mathrm{C.m}$$

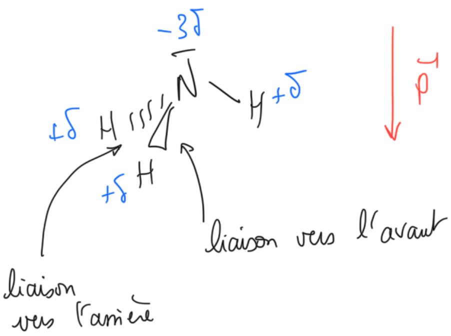
$$p(H_2O) = 1,85\ \mathrm{D}$$

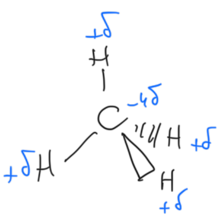



Il existe des charges partielles mais le barycentre des charges négatives est confondu avec celui des charges positives ⇒ $\vec{p} = \vec{0}$




molécule polaire



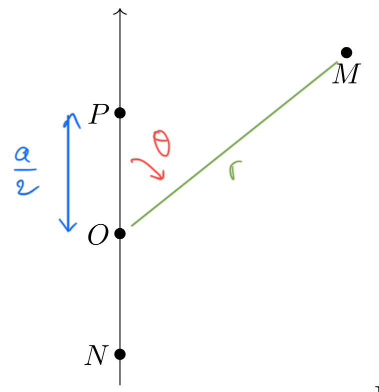




Le barycentre des charges négatives est confondu avec celui des charges positives.
⇒ $\vec{p} = \vec{0}$

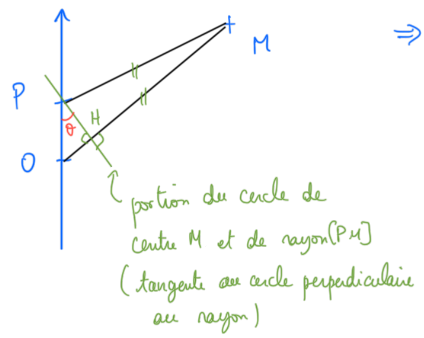
## Démonstration rapide du potentiel V

Il est important de savoir établir l'expression vue dans le cours :

$$\frac{1}{PM} \simeq \frac{1}{r}\left(1 + \frac{a}{2r}\cos(\theta)\right)$$




Retrouver rapidement l'expression approchée de $PM$ en considérant le cercle de centre $M$ et de rayon $PM$ coupant $[OM]$ en un point $H$. *Cette démonstration est moins classique que celle présentée dans le cours, il faut la garder pour un calcul au brouillon, ou une démonstration rapide lors de l'oral.*




$\Rightarrow$ $OP \simeq OM - OH$

avec $\cos\theta = \frac{OH}{OP}$

$\Rightarrow$ $OP \simeq OM - OP\cos\theta$

avec $OP = \frac{a}{2}$, $OM = r$

puis $\frac{1}{OP} = \left(r - \frac{a}{2}\cos\theta\right)^{-1}$

$= \frac{1}{r}\left(1 - \frac{a}{2}\cos\theta\right)^{-1}$

$\simeq \boxed{\frac{1}{r}\left(1 + \frac{a}{2}\cos\theta\right)}$

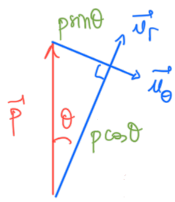
## Démonstration expression intrinsèque de $\vec{E}$

On a montré que le champ $\vec{E}$ créé par un dipôle en un point $M$ éloigné s'écrit :

$$\vec{E} = \frac{2p\cos(\theta)}{4\pi\varepsilon_o\, r^3}\vec{u}_r + \frac{p\sin(\theta)}{4\pi\varepsilon_o\, r^3}\vec{u}_\theta$$

Vérifier que :

$$\vec{p} = p\cos\theta\vec{u}_r - p\sin\theta\vec{u}_\theta$$




En déduire l'expression intrinsèque du champ électrostatique :

$$\vec{E}(M) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o r^3}\left(3(\vec{p}.\vec{u}_r)\vec{u}_r - \vec{p}\right)$$

On écrit $p\sin\theta\,\vec{u}_\theta = p\cos\theta\,\vec{u}_r - \vec{p}$

$\Rightarrow \vec{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\left(2p\cos\theta\,\vec{u}_r + p\cos\theta\,\vec{u}_r - \vec{p}\right) \Rightarrow \vec{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\left(3\,p\cos\theta\,\vec{u}_r - \vec{p}\right)$

On remarque ensuite que $\vec{p}\cdot\vec{u}_r = p\cos\theta$ (avec $\vec{p} = p\cos\theta\,\vec{u}_r - p\sin\theta\,\vec{u}_\theta$)

$\Rightarrow \boxed{\vec{E} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\left(3(\vec{p}\cdot\vec{u}_r)\vec{u}_r - \vec{p}\right)}$ On écrit parfois $\vec{u}_r = \frac{\vec{r}}{r}$ avec $\vec{r} = \vec{OM}$

## Allure des lignes de champ - Démonstration

On reprend l'expression du champ $\vec{E}$ créé par le dipôle :

$$\vec{E} = \frac{2p\cos(\theta)}{4\pi\varepsilon_o\, r^3}\vec{u}_r + \frac{p\sin(\theta)}{4\pi\varepsilon_o\, r^3}\vec{u}_\theta$$

Une ligne de champ est une courbe tangente au champ $\vec{E}$ en tout point. Un petit déplacement $d\overrightarrow{OM}$ sur la ligne de champ doit donc être colinéaire à $\vec{E}$.

**1 -** Justifier que : $d\overrightarrow{OM} = dr\ \vec{u}_r + rd\theta\ \vec{u}_\theta$ (*pourquoi n'y a-t-il pas de composante sur* $\vec{u}_\varphi$ *?*)

**2 -** En écrivant que $d\overrightarrow{OM}$ et $\vec{E}$ sont colinéaires, montrer que :

$$\frac{dr}{r} = \frac{2\cos(\theta)}{\sin(\theta)}d\theta$$

**3 -** En déduire l'équation des lignes de champ :

$$r = r_o\ \sin^2(\theta)$$

$\downarrow$ $\vec{E}$ n'a pas de composante sur $\vec{u}_\varphi$

$d\overrightarrow{OM} = dr\,\vec{u}_r + r\,d\theta\,\vec{u}_\theta\ \cancel{+ r\sin\theta\, d\varphi\, \vec{u}_\varphi}$

on enlève cette composante (les lignes de champ sont dans des plans $\varphi$ = cte)

2) $d\overrightarrow{OM} = dr\,\vec{u}_r + r\,d\theta\,\vec{u}_\theta$

$\vec{E} = \frac{p}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\left[2\cos\theta\,\vec{u}_r + \sin\theta\,\vec{u}_\theta\right]$

$\Rightarrow \frac{dr}{2\cos\theta} = \frac{r\,d\theta}{\sin\theta}$ pour avoir $\vec{E}$ et $d\overrightarrow{OM}$ colinéaires

$\Rightarrow \frac{dr}{r} = \underbrace{2\,\frac{\cos\theta}{\sin\theta}}_{2\frac{u'}{u}}\,d\theta \quad \Rightarrow \ln(r) = \underbrace{2\ln(|\sin\theta|)}_{\ln(\sin^2\theta)} + \underbrace{C}_{\ln(r_0)}$ avec $r_0 > 0$ $\quad \Rightarrow \boxed{r = r_0 \sin^2\theta}$

## Énergie potentielle d'un dipôle dans un champ $\vec{E}_{ext}$

On considère un dipôle constitué de deux charges ponctuelles $+q$ en $z = a/2$ et $-q$ en $z = -a/2$. L'énergie potentielle électrostatique s'écrit :

$$\mathcal{E}_p = qV_{ext}(P) - qV_{ext}(N)$$

En coordonnées cartésiennes : $V_{ext}(P) = V_{ext}(0, 0, a/2)$
Soit, en effectuant un développement de Taylor :

$$V_{ext}(P) \simeq V_{ext}(O) + \frac{a}{2}\frac{\partial V_{ext}}{\partial z} \qquad ; \ V_{ext}(N) \simeq V_{ext}(O) - \frac{a}{2}\frac{\partial V_{ext}}{\partial z}$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_p = q\ a\ \frac{\partial V_{ext}}{\partial z} \text{ soit } \mathcal{E}_p = -pE_{ext,z}$$

car $\vec{E}_{ext} = -\overrightarrow{\text{grad}}\, V_{ext}$

À l'aide d'un raisonnement analogue, montrer que la force subie par ce dipôle dans un champ $\vec{E}_{ext}$ quasi-uniforme s'écrit :

$$\vec{F} = q\ a\ \frac{d\vec{E}_{ext}}{dz}$$

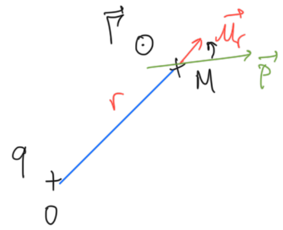
On a $\vec{F} = q\,\vec{E}_{ext}(0,0,\frac{a}{2}) - q\,\vec{E}_{ext}(0,0,-\frac{a}{2})$ avec $\vec{E}_{ext}(0,0,\pm\frac{a}{2}) = \vec{E}_{ext}(0,0,0) \pm \frac{a}{2}\frac{d\vec{E}_{ext}}{dz}$

$\Rightarrow \vec{F} = q\left(\vec{E}_{ext}(0,0,0) + \frac{a}{2}\frac{d\vec{E}_{ext}}{dz}\right) - q\left(\vec{E}_{ext}(0,0,0) - \frac{a}{2}\frac{d\vec{E}_{ext}}{dz}\right)$

Soit $\vec{F} = q\,a\,\frac{d\vec{E}_{ext}}{dz}$ en accord avec l'écriture $\vec{F} = (\vec{p}\cdot\overrightarrow{\text{grad}})\vec{E}_{ext}$

## Interaction entre une charge ponctuelle et un dipôle

On place un dipôle électrostatique $\vec{p}$ en un point $M$, à proximité d'une charge ponctuelle $q$ située en $O$.
**1 -** Montrer que le dipôle s'oriente radialement par rapport à la charge $q$.
**2 -** Déterminer alors l'expression de l'énergie potentielle du dipôle et de la force subie par le dipôle dans le champ de la charge ponctuelle.




1) Le champ $\vec{E}$ créé par la charge q en M s'écrit :

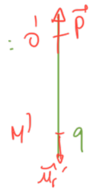
$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\vec{u_r}$$

Le dipôle $\vec{p}$ subit un couple $\vec{\Gamma} = \vec{p}\wedge\vec{E}$ qui tend à aligner $\vec{p}$ sur $\vec{E}$
$\Rightarrow$ $\vec{p}$ s'oriente donc radialement.

2) On a alors $\vec{p} = p\,\vec{u_r}$. L'énergie potentielle $E_p = -\vec{p}\cdot\vec{E} \Rightarrow E_p = -\dfrac{pq}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\mathrm{grad}}\,E_p \Rightarrow \boxed{\vec{F} = -\frac{2pq}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\vec{u_r}}$$

Rq :




Pour $\theta = \pi$, le champ créé par le dipôle au point où se trouve q s'écrit :
$\vec{E'} = \dfrac{2p}{4\pi\varepsilon_0 r^3}(-\vec{u_r'}) \Rightarrow$ la charge q subit $\vec{F'} = \dfrac{2pq}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\vec{u_z}$
$\vec{u_r'} = -\vec{u_z}$

## Interaction entre 2 dipôles

Dans les compléments du chapitre 2, on a déterminé l'expression de l'énergie potentielle d'une distribution de charges.
**1 -** En utilisant la même méthode, proposer une expression de l'énergie potentielle d'un ensemble de dipôles $\{\vec{p_i}\}$ placés aux points $M_i$.
**2 -** Écrire cette énergie potentielle $\mathcal{E}_p$ pour un système constitué de deux dipôles $\vec{p}_1$ et $\vec{p}_2$. Utiliser l'expression intrinsèque du champ $\vec{E}$ créé par un dipôle pour écrire $\mathcal{E}_p$ en fonction de $\overrightarrow{M_1M_2}$.
**3 -** L'énergie potentielle d'un dipôle $\vec{p}$ dans un champ extérieur $\vec{E}_{ext}$ s'écrit :

$$\mathcal{E}_p = -\vec{p}.\vec{E}_{ext}$$

Elle est minimale pour $\vec{p}$ aligné sur $\vec{E}_{ext}$. Utiliser la carte du champ électrostatique créé par un dipôle pour déterminer les positions relatives des dipôles $\vec{p}_1$ et $\vec{p}_2$ à l'équilibre.

1) On avait $\mathcal{E}_p = \dfrac{1}{2}\sum_{i\neq j} q_i V_j$, on a dans ce cas :

$$\mathcal{E}_p = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\left(-\vec{p_i}\cdot\underbrace{\vec{E_j}(M_i)}\right)$$

champ créé par le dipôle $\vec{j}$ au point $M_i$ où se trouve le dipôle $\vec{p_i}$

2) On écrit $\mathcal{E}_p = -\vec{p_2}\cdot\vec{E_1}$ avec $\vec{E_1} = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\left(3(\vec{p_1}\cdot\vec{u_r})\vec{u_r} - \vec{p_1}\right)$

en notant $\vec{u_r} = \dfrac{\overrightarrow{M_1M_2}}{r}$ avec $r = M_1M_2$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_p = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\left(3(\vec{p_1}\cdot\vec{u_r})(\vec{p_2}\cdot\vec{u_r}) - \vec{p_1}\cdot\vec{p_2}\right)$$

rôle symétrique de $\vec{p_1}$ et $\vec{p_2}$

3) On doit avoir $\vec{p_2}$ aligné sur les lignes de champ de $\vec{p_1}$ et réciproquement.