

Géométrie de quelques molécules

Situation déclenchant

Pour un atome donné certains ions sont privilégiés, par exemple Na^+ et non Na^{++} , Mg^{++} et non Mg^+ , Cl^- et non Cl^- ou Cl^+ .

On outre, comment les molécules se forment ?

Bilan : Le monde qui nous entoure est constitué par

I- Les règles du «duet» et de l'octet

1- Les gaz rares

Dans la nature, les atomes ont tendance à s'associer pour former des molécules, des composés ioniques ou des métaux. Seuls les atomes de gaz nobles (He, Ne, Ar, ...) présentent une certaine inertie chimique, ce sont des gaz monoatomiques dans les conditions ordinaires de température et de pression.

Cette particularité est liée à la configuration électronique de la couche externe des atomes de gaz nobles :

Gaz rare	He (Z = 2)	Ne (Z = 10)	Ar (Z = 18)
Structure électronique	(K) ²	(K) ² (L) ⁸	(K) ² (L) ⁸ (M) ⁸

A l'exception de l'atome d'hélium qui possède 2 électrons sur sa couche externe, les autres atomes de gaz nobles ont tous 8 électrons sur leur couche externe.

La grande stabilité des atomes de gaz nobles est donc liée au nombre particulier d'électrons qu'ils possèdent sur la couche externe :

Soit 2 électrons ou un «duet» d'électrons pour l'atome d'hélium He

Soit 8 électrons ou un octet d'électrons pour les autres atomes de gaz nobles : Ne, Ar, ... etc.

2- Énoncé des deux règles : duet & octet

Contrairement aux atomes de gaz nobles, les autres atomes, dans les entités (ions, molécules) qu'ils forment, ont tendance à adopter la configuration électronique externe des gaz rares. On peut alors définir deux règles :

2- 1- La règle du «duet»

Les atomes dont le numéro atomique est proche de celui de l'hélium ($Z \leq 4$) ont tendance à adopter sa configuration à deux électrons (K)². C'est la règle du «duet».

2- 2- La règle de l'octet

Les autres atomes dont le numéro atomique ($4 < Z \leq 18$) ont tendance à adopter la configuration électronique externe possédant huit électrons comme celle des autres gaz nobles : Ne, Ar, C'est la règle de l'octet.

3- Application aux ions monoatomiques stables

Atome	Structure électronique de l'atome	Structure électronique du gaz rare le plus proche		Ion correspondant	Structure électronique de l'ion
${}^7_3\text{Li}$	(K) ² (L) ¹	${}^4_2\text{He}$	(K) ²	Li^+	(K) ²
${}^{27}_{13}\text{Al}$	(K) ² (L) ⁸ (M) ³	${}^{20}_{10}\text{Ne}$	(K) ² (L) ⁸	Al^{3+}	(K) ² (L) ⁸
${}^{19}_9\text{F}$	(K) ² (L) ⁷	${}^{20}_{10}\text{Ne}$	(K) ² (L) ⁸	F^-	(K) ² (L) ⁸
${}^{16}_8\text{O}$	(K) ² (L) ⁶	${}^{20}_{10}\text{Ne}$	(K) ² (L) ⁸	O^{2-}	(K) ² (L) ⁸
${}^{35}_{17}\text{Cl}$	(K) ² (L) ⁸ (M) ⁷	${}^{36}_{18}\text{Ar}$	(K) ² (L) ⁸ (M) ⁸	Cl^-	(K) ² (L) ⁸ (M) ⁸

II- Représentation des molécules selon le modèle de Lewis

Dans les molécules, les atomes mettent en **commun** des électrons de leurs couches externes en respectant, si possible, les règles du «duet» et de l'octet.

1. La liaison covalente

i) Une **liaison covalente simple** est une mise en commun de deux électrons entre deux atomes, chaque atome fournissant normalement un électron. Le doublet d'électrons mis en commun (ou doublet liant) est à l'origine de la liaison covalente établie entre les deux atomes. On représente une liaison covalente par un tiret entre les deux atomes concernés.



↑
doublet liant ou **liaison covalente associant les deux atomes**

ii) Une **liaison covalente double** est une mise en commun de quatre électrons entre deux atomes, chaque atome fournissant normalement deux électrons.

iii) Une **liaison covalente triple** est une mise en commun de six électrons entre deux atomes, chaque atome fournissant normalement trois électrons.

Remarque : Les électrons mis en commun appartiennent à chacun des deux atomes et doivent être pris en compte dans le total des électrons de chaque atome.

2. Les doublets non liants

Les électrons d'un atome, qui ne participent pas aux liaisons covalentes, restent sur cet atome et sont répartis en doublets d'électrons appelés **doublets non liants**. Chaque doublet non liant est représenté par un tiret placé sur l'atome considéré.



Symbole de l'atome	Structure électronique	Nbre d'é de la couche externe	Nbre de liaison possible	Exemple	Observation
Hydrogène 1_1H	$(K)^1$	1	$n_L = 2 - 1 = 1$	$H - H$	monovalent
Chlore ${}^{35}_{17}Cl$	$(K)^2(L)^8(M)^7$	1	$n_L = 8 - 7 = 1$	$H - Cl$	
Oxygène ${}^{16}_8O$	$(K)^2(L)^6$	6	$n_L = 8 - 6 = 2$	$O = O$	bivalent
Azote ${}^{14}_7N$	$(K)^2(L)^5$	5	$n_L = 8 - 5 = 3$	$N \equiv N$	trivalent
Carbone ${}^{12}_6C$	$(K)^2(L)^4$	4	$n_L = 8 - 4 = 4$	$\begin{array}{c} H \\ \\ H - C - H \\ \\ H \end{array}$	Tétravalent

3. Représentation des molécules selon le modèle de Lewis.

Méthode pratique pour représenter les molécules selon le modèle de Lewis

Pour représenter les molécules selon le modèle de Lewis, on suit les étapes suivantes :

- 📌 On écrit le nom et la formule brute de la molécule.
- 📌 On écrit la configuration électronique en différentes couches de chaque atome constituant la molécule.
- 📌 On trouve le nombre d'électrons n_e de la couche externe de chaque atome constituant la molécule.
- 📌 On trouve le nombre total n_t d'électrons externes intervenant dans la molécule en faisant la somme des différents n_e .
- 📌 On trouve le nombre total n_d de doublets liants et non liants en divisant par 2 le nombre total d'électrons externes n_t de la molécule $n_d = \frac{n_t}{2}$.
- 📌 On détermine le nombre de doublet liant réparti (les liaisons covalente) n_l de chaque atome en respectant :
 - ⚡ La règle du « duet ». pour l'atome d'hydrogène ($n_l = p - n_e$) avec $p = 2$.
 - ⚡ La règle de l'octet pour les autres atomes ($n_l = p - n_e$) avec $p = 8$.
- 📌 On détermine le nombre de doublet non liant (doublet libre) n_{nl} de chaque atome en utilisant la relation :

$$n_{nl} = \frac{n_t - n_l}{2}$$

📌 finalement, on représente la molécule selon le modèle de Lewis.

Exemple

l'atome	Structure électronique	n_t : Nbre d'é de la couche externe	n_l : Nbre de doublet liant $n_l = 8 - n_e$ ou $n_l = 2 - n_e$	n_{nl} : Nbre de doublet liant
1_1H				
${}^{35}_{17}Cl$				
${}^{16}_8O$				
${}^{14}_7N$				
${}^{12}_6C$				

Exemples de représentation de la molécule selon le modèle de Lewis

i) La molécule du gaz de chlorure de hydrogène : HCl

Les atomes	Structure électronique	p	n_l	n_{nl}	n_t	n_d	Représentation de Lewis
1_1H	(K) ¹	2	1	0	1	$\frac{8}{2} = 4$	
${}^{35}_{17}Cl$	(K) ² (L) ⁸ (M) ⁷	8	1	3	7		

ii) La molécule du dioxyde de hydrogène H₂

Les atomes	Structure électronique	p	n_l	n_{nl}	n_t	n_d	Représentation de Lewis
1_1H	(K) ¹	2	1	0	1	$\frac{2}{2} = 1$	
1_1H	(K) ¹	2	1	0	1		

iii) La molécule de l'eau : H₂O

Les atomes	Structure électronique	p	n_l	n_{nl}	n_t	n_d	Représentation de Lewis
1_1H	(K) ¹	2	1	0	1	$\frac{8}{2} = 4$	
1_1H	(K) ¹	2	1	0	1		
${}^{16}_8O$	(K) ² (L) ⁶	8	2	2	6		

vi) La molécule de dioxyde d'oxygène : O₂

Les atomes	Structure électronique	p	n_l	n_{nl}	n_t	n_d	Représentation de Lewis
${}^{16}_8O$	(K) ² (L) ⁶	8	2	2	6	$\frac{12}{2} = 6$	
${}^{16}_8O$	(K) ² (L) ⁶	8	2	2	6		

v) La molécule de dioxyde de carbone : CO₂

Les atomes	Structure électronique	p	n_l	n_{nl}	n_t	n_d	Représentation de Lewis
${}^{12}_6C$	(K) ² (L) ⁴	8	4	0	4	$\frac{16}{2} = 8$	
${}^{16}_8O$	(K) ² (L) ⁶	8	2	2	6		
${}^{16}_8O$	(K) ² (L) ⁶	8	2	2	6		

vi) La molécule de dioxyde d'azote

Les atomes	Structure électronique	p	n _l	n _{nl}	n _t	n _d	Représentation de Lewis
${}^{14}_7\text{N}$	(K) ² (L) ⁵	8	3	1	5	$\frac{14}{2} = 7$	
${}^{14}_7\text{N}$	(K) ² (L) ⁵	8	3	1	5		

IV- Les isomères

1- La formule brut & formule développée

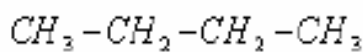
1- 1- Formule brute : La formule brute d'une molécule est une écriture simplifiée qui renseigne sur la nature et le nombre des éléments qui la composent.

1- 2- Formule développée : La représentation en formule développée d'une molécule est une représentation de Lewis où les doublets liants n'en sont pas représentés.

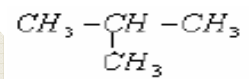
2- Les isomères

Les isomères sont des composés moléculaires ayant la même formule brut mais ils se différencient de leurs formules développées.

Exemple :



et



3- Exemples d'application

Donner la formule développée des molécules suivantes : O_2 , C_2H_2 , N_2 , CO_2 , C_2H_4 , HCN et CH_2O

Réponse

Non de la molécule	La formule brute	Modèle de Lewis	La formule développée
Dioxyde d'oxygène	O_2		$\text{O}=\text{O}$
Éthyne (Acétylène)	C_2H_2	$\text{H}::\text{C}::\text{C}::\text{H}$	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$
Azote	N_2	$ \text{N}::\text{N} $	$\text{N}::\text{N}$
Dioxyde de carbone	CO_2		$\text{O}=\text{C}=\text{O}$
Ethylène	C_2H_4		
Acide nitrique	HCN	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N} $	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$
méthanal	CH_2O		

V. Géométrie de quelques molécules simples

1- Observation de modèles moléculaires


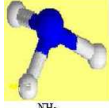

- Un modèle moléculaire permet de construire une image de la molécule en 3 dimensions en respectant la position des atomes les uns par rapport aux autres.
- Chaque atome y est représenté par une boule de couleur et volume bien définies ; le couleur des éléments les plus courants : H : blanc C : noir O : rouge N : bleu Cl : vert

On distingue de types de modèles moléculaires :

- Les liaisons covalentes sont représentées par des bâtonnets dans **les modèles éclatés** (les distances entre les atomes ne sont pas respectées dans ce cas).
- Dans **les modèles compacts** les distances interatomiques sont respectées et les liaisons n'apparaissent pas.

Exercice d'application : Construire les modèles moléculaires des molécules suivantes et donner leur géométrie HCl , O_2 , CH_4 , NH_3 et H_2O

La molécule	Modèle éclaté	La géométrie
HCl		
O_2		

CH_4		Tétraédrique
NH_3		Pyramide
H_2O		triangulaire

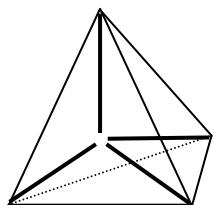
Remarques :

- La plupart des molécules se forment d'un atome central lié à d'autres atomes par des liaisons simples ;
- suite à la répulsion des doublets d'électrons liants et non liants entre eux, les molécules vont prendre des formes géométriques dans l'espace bien déterminées.

La représentation de Lewis permet-elle d'expliquer pourquoi les molécules CH_4 et NH_3 ne sont pas planes et pourquoi la molécule H_2O n'est pas linéaire ?**2- Un nouveau modèle : le modèle de Gillespie**

- Les charges électriques de même signe se et les forces de répulsion sont d'autant plus fortes que les charges sont plus les unes des autres.
- Les doublets d'électrons (liants ou non) étant constitués d'électrons porteurs de charges, ils exercent les uns sur les autres des forces de
- Le **modèle de Gillespie** explique la géométrie des molécules en considérant que les doublets externes (liants et non liants) des atomes s'orientent dans l'espace de façon à ce que les répulsions entre doublets soient les plus faibles possibles ce qui signifie que les doublets doivent être le plus possibles les uns des autres. (l'ensemble est ainsi plus stable).

Les atomes d'une molécule sont généralement entourés de 4 doublets. S'ils étaient tous dans le même plan, l'angle entre 2 doublets serait de



Dans l'espace il existe une configuration pour laquelle ces doublets sont plus éloignés les uns des autres : c'est la **configuration tétraédrique**

L'atome est au centre d'un tétraèdre régulier et les 4 doublets sont dirigés vers les 4 sommets ; les angles entre 2 doublets sont de 109° .

— : représente un doublet liant **ou** non liant

Remarque concernant les angles des liaisons dans les différentes molécules :

angle HCH = 109°

angle HNH = 107°

angle HOH = 105°

Les doublets non liants sont répulsifs que les doublets liants.


3- La représentation de Cram


Pour représenter une molécule tétraédrique sur une feuille de papier on utilise **la représentation de Cram**.

- La molécule est placée de façon à ce que le maximum d'atomes soit dans le plan de la figure

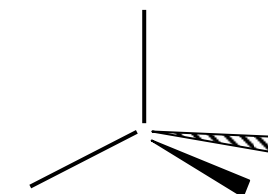
- Par convention on représente par:

Un trait simple (—) les liaisons situées dans ce plan et les doublets non liants

Un triangle noir () la liaison située en avant de ce plan

Un triangle hachuré () la liaison située en arrière de ce plan

- L'atome formant le plus de liaisons est au centre de la représentation.



Donner les représentations de Cram des molécules ci-dessous :

CH_4

NH_3

H_2O