

Géométrie des molécules

I- Règles du duet et de l'octet :

Lorsque les atomes subissent des transformations (transformation en ion monoatomique ou lorsque qu'ils établissent des liaisons avec d'autres atomes) **ils le font de façon à saturer leur couche externe**. Les atomes dont la couche externe est déjà saturée ne donneront donc pas d'ion monoatomique et n'auront pas tendance à établir de liaison avec d'autres atomes. Ils sont dits "**chimiquement stables**".

1- Règle du duet.

Au cours de leurs transformations chimiques, les atomes caractérisés par $Z \leq 4$ évoluent de manière à saturer leur couche (K). Ils acquièrent un "**duet**" d'électrons c'est-à-dire une paire d'électrons.

2- Règle de l'octet.

Au cours de leurs transformations chimiques, les atomes caractérisés par $Z > 4$ évoluent de manière à saturer leur couche externe (L) ou (M) etc.... Ils acquièrent un "**octet**" d'électrons c'est-à-dire 8 électrons ou 4 paires d'électrons.

II- Prédiction de la charge des ions monoatomiques.

L'application de ces règles permet de prévoir la charge et donc la formule de la plus part des ions monoatomiques.

1)- Structure électronique.

- Les électrons d'un atome ou d'un ion se répartissent en couches.
- Chaque couche est caractérisé par son numéro n (appelé nombre quantique).
- Chaque couche électronique est représentée par une lettre.
- Pour les atomes des éléments tels que $1 \leq Z \leq 18$, les couches électroniques qui peuvent être occupées sont les couches K, L, M.
- Les électrons de la première couche (K) sont les plus proches du noyau et plus liés à lui.
- À la dernière couche qui porte des électrons, on donne le nom de couche externe.
- Elle contient les électrons les moins liés au noyau : que l'on nomme les électrons périphériques (valences).

2)- Règles de remplissage.

Principe de Pauli :

- chaque couche ne peut contenir qu'un nombre limité d'électrons.
- La couche de rang n ne peut contenir que **$2n^2$** électrons.
- Ainsi la couche K ne peut contenir au plus que : 2 électrons.
- La couche L, 8 électrons,
- Et la couche M, 18 électrons (en seconde, on se limite à 8 électrons sur la couche M).
- Les électrons de l'atome remplissent progressivement les différentes couches électroniques.
- Ils se placent d'abord dans la couche K,
- Puis quand celle-ci est saturée à 2 électrons, ils remplissent la couche L.
- Quand la couche L est saturée à 8 électrons, ils remplissent la couche M.
- L'état de l'atome obtenu en utilisant ce principe de remplissage est appelé : l'état fondamental.

Exemple 1 : le magnésium Mg de numéro atomique $Z = 12$ peut donner des ions Mg^{2+} .

- Donner la structure électronique de l'atome et de l'ion :
- Pour l'atome : $(K)^2 (L)^8 (M)^2$ ou K (2) L (8) M (2), la couche externe est la couche M.
- Pour l'ion: $(K)^2 (L)^8$ ou K (2) L (8), la couche externe est la couche L.
- Remarque : ce sont les électrons de la couche électronique externe qui déterminent la construction des édifices chimiques.
- Ils sont responsables de la réactivité chimique d'un élément.

Exemple 2:

Considérons l'atome de chlore de numéro atomique $Z=17$ dont la formule électronique est: $(K)^2(L)^8(M)^7$. Il possède 7 électrons sur sa couche externe (M). En se transformant en ion chlorure il sature cette couche externe avec un octet (8) électrons. Cet atome, initialement neutre du point de vue électrique, va donc gagner un électron c'est-à-dire une charge négative lors de sa transformation en ion chlorure. La formule de cet ion est alors: **Cl⁻**.

III. Représentation de Lewis des molécules.

La représentation de Lewis d'une molécule fait apparaître tous les atomes de la molécule ainsi que tous les doublets liants et non liants .

Dans la représentation de Lewis, la règle du "duet" doit être satisfaite pour chaque atome d'hydrogène et la règle de "l'octet" doit être satisfaite pour tous les autres atomes.

1. Définition :

Une molécule est constituée d'un ensemble d'atomes liés entre eux. Une molécule est électriquement neutre car elle est constituée d'atomes eux-mêmes électriquement neutres.

2. Liaison covalente.

Une liaison covalente entre deux atomes correspond à la mise en commun entre ces deux atomes de deux électrons de leurs couches externes pour former un doublet d'électrons appelé doublet liant.

Le doublet liant, mis en commun entre les deux atomes, est considéré comme appartenant à chacun des atomes liés.

3. Doublets liants.

Les doublets liants ont été définis comme les doublets mis en commun entre deux atomes.

Ce sont eux qui assurent les liaisons entre les atomes.

4. Doublets non liants.

Les doublets non liants sont les paires d'électrons qui ne servent pas de liaisons entre deux atomes.

5. Méthode permettant d'établir la représentation de Lewis d'une molécule.

Déterminer le nombre d'électrons périphériques apportés par chaque atome de la molécule.

Déterminer le nombre total n_T d'électrons périphériques de la molécule.

En déduire le nombre de doublets n_d (liants et non liants) à répartir dans la molécule. Pour cela il suffit de diviser n_T par 2.

Déterminer le nombre de liaisons qu'établit chaque atome de la molécule

Cette opération donne le nombre de doublets liants n_L

En déduire le nombre de doublets non liants $n_{NL} = (n_T - 2n_L) / 2$ et les répartir autour des atomes en respectant la règle de l'octet.

Exemple:

on veut représenter le modèle de Lewis de la molécule de chlorure d'hydrogène HCl.
(H: Z=1; Cl: Z=17.)

H: 1 électron périphérique. Cl: 7 électrons périphériques.

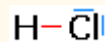
$n=1+7$ ou $n=8$

Le nombre de doublets est alors 4

H établit 1 liaison covalente et Cl établit 1 liaison covalente. Ce qui correspond à un doublet liant mis en commun entre ces deux atomes.

Il reste donc 3 doublets non liants qui seront répartis autour de l'atome de chlore de façon à respecter la règle de l'octet. Le respect de la règle du duet est assuré pour l'atome d'hydrogène par la présence du doublet liant.

La représentation de Lewis de la molécule est donnée ci-contre.



Exercice : donner la représentation de Lewis des molécules suivantes : O₂. CO₂. H₂O. N₂.

6. Modèles moléculaires :

On distingue les modèles compacts des modèles éclatés. Dans les deux cas, ces modèles permettent d'observer la forme tridimensionnelle d'une molécule.

a-Modèles compacts :

Les modèles compacts sont les plus proches de la "réalité", ils rendent compte convenablement de l'encombrement des atomes dans la molécule, donc de la géométrie "réelle" de la molécule. Le problème de ce genre de modèle est que la forme de la molécule est difficile à interpréter lorsque le nombre d'atomes composant la molécule devient important.

b-Modèles éclatés :

Les modèles éclatés permettent de bien voir la structure, les liaisons, mais surtout la géométrie tridimensionnelle de la molécule. Leur interprétation est plus simple que dans le cas des modèles compacts.

7. Notion d'isomérisation :

a-La formule brute d'une molécule est l'écriture qui indique le type et le nombre d'atomes contenus dans la molécule.

b-La formule développée d'une molécule fait apparaître les liaisons entre tous les atomes constituant la molécule.

c-La formule semi-développée d'une molécule est une représentation de la molécule où on ne fait apparaître que certaines liaisons indispensables pour comprendre la structure de la molécule. En particulier on ne fait pas apparaître les liaisons avec l'atome d'hydrogène.

d- les isomères :

Des molécules isomères ont même formule brute mais des formules développées différentes. Ce sont des molécules de structures différentes.

Remarque :



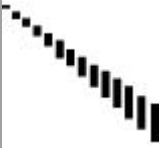
Des isomères ont même composition atomique mais n'ont pas les mêmes propriétés physiques. Ce sont des molécules différentes.

IV-Géométrie des molécules :

1. La représentation de Cram

Pour indiquer la répartition spatiale des atomes dans une molécule on peut utiliser la représentation

de Cram qui utilise les conventions suivantes:

Un trait plein correspond à une liaison dans le plan de représentation	Un triangle en contours pleins correspond à une liaison qui pointe vers l'avant du plan de représentation	Un triangle hachuré représente une liaison qui pointe vers l'arrière du plan de représentation
		

2.Géométrie de quelques molécules simples

Si l'on applique le principe d'éloignement maximum alors on peut prévoir la géométrie d'une molécule

simple constituée d'un atome central respectant la règle de l'octet. Un tel atome comporte au total 8

électrons sur sa couche externe et il est donc entouré de 4 doublets (liants et non liants).

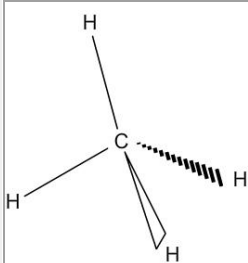
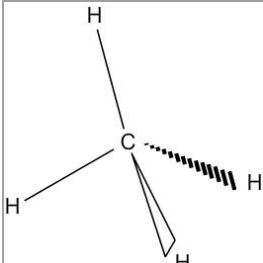
L'éloignement maximal aboutit à une géométrie où les doublets forment un tétraèdre.

a-Cas du méthane

Le méthane a pour formule CH_4 . Le carbone central est entouré de 4 doublets liants qui donnent

effectivement à la molécule une forme tétraédrique

.

Répartition des doublets autour du carbone	Géométrie de la molécule de méthane
	

b-Cas de l'ammoniac

L'ammoniac a pour formule NH_3 . L'azote central est entouré de 3 doublets liants et d'un doublet

non liant. Le tétraèdre formée par tous les doublets n'est donc pas complet puisque l'un d'entre eux

n'est lié à aucun atome. L'azote et les hydrogènes auxquels il est lié s'inscrivent donc dans une forme pyramidale.

Répartition des doublets autour de l'azote	Géométrie de la molécule d'ammoniac

e-Cas de l'eau

L'eau a pour formule H_2O . L'oxygène central est entouré de 2 doublets liants et de 2 doublets non liants. Le tétraèdre formée par tous les doublets n'est donc pas complet puisque deux d'entre eux ne sont liés a aucun atome. L'oxygène et les deux hydrogènes auxquels il est lié s'inscrivent donc dans une forme en " V ", on aussi de forme coudée.

Répartition des doublets autour de l'oxygène	Géométrie de la molécule d'eau

Professeur JAMIL RACHID

wwwjjamrach@gmail.com

