

**COMMENT CONSTRUIRE LA STRUCTURE ELECTRONIQUE
D'UNE MOLECULE SIMPLE ?**
Objectif :

Déterminer à partir de règles simples la structure électronique de quelques molécules simples

Règle de stabilité des atomes de gaz nobles (rares) (dernière colonne de la classification périodique)

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

2 électrons ou un duet pour l'atome d'Hélium.

8 électrons ou un octet pour les atomes Néon, Argon, Krypton, Xenon On en déduit la règle suivante :

Règle du duet et de l'octet :

Lorsqu'un atome tend à se transformer soit pour former un ion, soit pour se lier et former un édifice moléculaire, il tend à acquérir la structure électronique du gaz noble le plus proche (dans la classification périodique)

Application des règles du duet et de l'octet pour l'obtention des structures électroniques de quelques molécules simples:

Dans les molécules, les atomes mettent en commun les électrons de valence pour suivre (en général) les règles du duet ou de l'octet.

Une liaison covalente simple est une mise en commun d'une paire d'électrons entre deux atomes. Le doublet mis en commun est un doublet liant et est représenté par un tiret entre les deux atomes.

Les autres doublets qui ne participent pas aux liaisons sont non liants ou libres.

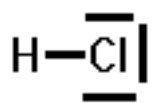
Chaque doublet non liant est représenté par un tiret placé sur un atome.

On se propose de trouver la structure de quelques molécules simples.

Pour cela on suivra **la méthode suivante** :

- 1) *Ecrire la formule brute de la molécule.*
- 2) *Ecrire la configuration électronique de chaque atome.*
- 3) *Ecrire le nombre d'électrons de valence de chaque atome.*
- 4) *Calculer le nombre total d'électrons intervenant dans la structure de la molécule en faisant la somme des électrons des électrons de valence de chaque atome.*
- 5) *Calculer le nombre de doublet liant et non liant.*
- 6) *Répartir les doublets de la molécules en doublets liants et doublet libre en respectant les règles du duet et de l'octet.*

Un exemple :

Molécule	Nom Chlorure d'hydrogène	Formule HCl
Atomes	Hydrogène H Z=1	Chlore Cl Z=17
Configuration électronique	K^1	$K^2L^8M^7$
n_{electron} (dans la couche externe)	1	7
n_{total}	$1+7 = 8$	
n_{doublet}	$8/2 = 4$ à répartir sur les deux atomes	
Formule de Lewis de la molécule (en respectant la règle du duet et de l'octet)	1 doublet liant H et Cl (<u>le doublet liant appartient à la fois aux deux atomes liés</u>) 3 doublets non liants sur Cl	
Conclusion	Duet pour l'atome H	Octet pour Cl

Première S

Travail à faire :

Effectuer le même travail pour les molécules suivantes:

(faire les huit premières molécules jusque CO_2 puis passer à la partie II)

revenir aux autres molécules s'il reste du temps et **pour le compte rendu, terminer toutes les molécules**)

Dihydrogène H_2

Dichlore Cl_2

Dioxygène O_2

Diazote N_2

Eau H_2O

Ammoniac NH_3

Méthane CH_4

Dioxyde de carbone CO_2

Bien suivre les règles de construction et remplir un tableau analogue à celui élaboré pour HCl (si la molécule comporte trois atomes différents, rajouter une colonne) comme suit (par exemple pour HCN voir infra) :

Voir le fichier Excel en ligne dans le cahier de texte

Molécules supplémentaires à faire pour le compte rendu :

Cyanure d'hydrogène HCN

Acide hypochloreux $ClOH$

Eau oxygénée H_2O_2

Ethène C_2H_4

Composé (s ?) de formule brute :

C_4H_{10}

C_2H_6O

Le modèle de la fiche ci-dessous est dans un fichier Excel en ligne dans le cahier de texte

Pour le compte rendu, rendre une fiche par molécule

Imprimer chaque fiche et remplir les cases suivant le modèle fait pour la molécule du HCl

Molécule	Nom : Cyanure d'hydrogène	Formule : HCN	
Atomes	H	C	N
Configuration électronique			
$n_{electron}$ (dans la couche externe)			
n_{total}			
$n_{doublet}$			
Formule de Lewis de la molécule (en respectant la règle du duet et de l'octet)			
Conclusion			

**COMMENT CONSTRUIRE LA STRUCTURE GEOMETRIQUE
D'UNE MOLECULE SIMPLE A PARTIR DE SA STRUCTURE DE LEWIS?**

Objectif :

Déterminer à partir de règles simples la structure géométrique de quelques molécules simples à partir de leur structure de Lewis

La représentation de Lewis d'une molécule précise l'enchaînement des atomes mais ne donne aucun renseignement sur la disposition des atomes dans l'espace, c'est-à-dire sur la géométrie de la molécule. Le modèle **VSEPR (Valence-Shell Electron-Pair Repulsion** ou répulsion des doublets électroniques de la couche de valence) permet de prédire la forme d'une molécule ou d'un ion polynucléaire. C'est un modèle empirique c'est-à-dire qu'il est fondé sur des règles suggérées par les observations expérimentales plutôt que sur des principes fondamentaux.

La principale règle de ce modèle est la suivante:

- Les interactions à l'échelle de l'atome, de l'ion et de la molécule sont essentiellement de nature électrique
- dans un édifice constitué d'une atome central autour duquel d'autres atomes sont fixés, les zones de forte concentration électronique (les liaisons et les doublets non liants) se repoussent mutuellement et, pour minimiser leurs répulsions, ces zones s'éloignent le plus possible des unes des autres en conservant la même distance par rapport à l'atome central.

Donc si l'atome central est entouré de 4 doublets électroniques, ceux-ci pointeront vers les sommets d'un tétraèdre régulier fictif dont le centre est occupé par l'atome central.

On peut avoir une idée de la géométrie de quelques édifices simples en faisant une analogie avec des ballons

Pour représenter les molécules et la répartition des doublets sur celles-ci, on peut utiliser des ballons comme ci-contre. On voit

- un modèle moléculaire compact
- un modèle moléculaire éclaté
- une représentation des doublets avec des ballons



1) Quelle peut-être la molécule étudiée dans la partie I représentée ci-contre ?

.....

2) Soient les deux représentations ci-dessous, dans chaque cas, déterminer les molécules représentées et préciser la nature des doublets également représentés.



Molécule (a)



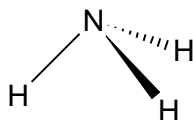
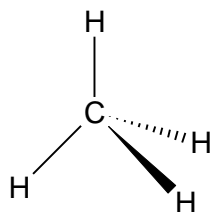
Molécule (b)

.....

Première S

Représentation de CRAM :

(essentiellement pour les composés du carbone –alcanes- mais appliqué également ici pour la molécule d'ammoniac)



On ne représente pas le doublet non liant sur N !

Compléments le **modèle VSEPR (1957)** (Sidwick, Powell, Nyholm, Gillespie)

- Soit A, l'atome centra
- S'il est entouré de p doublets liants et de q doublet non liants, on dit qu'il est de type : $A X_p E_q$
- Les $(p + q)$ doublets (sans distinction s'ils sont liants ou non liants) se disposent de façon à minimiser les interactions
- **Cas particulier** : dans le cas d'une liaison multiple, cette liaison multiple est traitée comme un seul doublet liant.

Exemple : si $(p + q) = 4$, tous les doublets sont disposés suivants un tétraèdre !

MAIS POUR OBTENIR LA STRUCTURE GEOMETRIQUE DEFINITIVE DE L'EDIFICE, ON NE CONSIDERE QUE LES DOUBLET LIANTS !

TRAVAIL A FAIRE

- 1) D'une part consulter une banque de données
<http://www.faidherbe.org/site/cours/dupuis/banque.htm>
- 2) D'autre part, construire les édifices correspondants dans le logiciel Chems sketch

Questions

Pour les molécules suivantes, remplir les différentes cases :

MOLECULE	STRUCTURE DE LEWIS	ATOME CENTRAL	STRUCTURE VSEPR ($A X_p E_q$)	GEOMETRIE DE L'EDIFICE
CH_4				
NH_3				
H_2O				
$ClOH$				
HCN				
CO_2				
C_2H_6				
C_2H_4				

Représenter les différentes molécules ci-dessus en représentation de CRAM. Est ce possible pour toutes les molécules ?