AD-GEOMETRIE DES MOLECULES

Nous avons vu en seconde que, les atomes, afin de gagner en stabilité vont réagir de manière à acquérir la configuration électronique du gaz noble de numéro atomique le plus proche (règle de stabilité en duet ou en octet). Pour acquérir ces structures stables, les atomes ont tendance à perdre ou à gagner des électrons et donc à former des ions monoatomiques. Par exemple : l'ion magnésium Mg^{2+} ou l'ion chlorure Cl^-. Une autre possibilité est d'engager des liaisons covalentes avec d'autres atomes pour former une molécule : dans ce cas les atomes liés partagent des électrons.

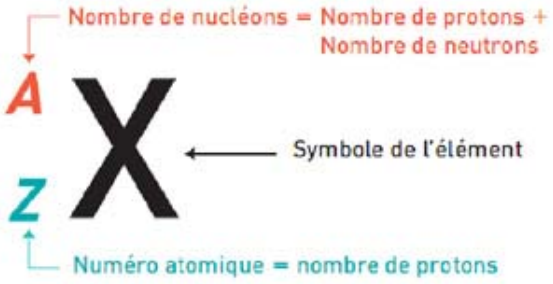
Comment se forment les molécules et comment les représenter ?

I. Formation des molécules

Document 1 : Composition d'un atome

Un atome est un édifice électriquement neutre composé d'un noyau chargé positivement et d'électrons chargés négativement. Le noyau renferme des particules appelées nucléons parmi lesquelles on distingue les neutrons (particules électriquement neutres) et les protons (particules chargées positivement). Pour être neutre, l'atome possède autant d'électrons que de protons. Donc connaissant la composition d'un noyau atomique, on peut facilement en déduire celle de l'atome.

Représentation symbolique d'un noyau



Pour un atome :
nombre de protons Z = nombre d'électrons

Document 2 : Configuration électronique et classification périodique (voir vidéo 1 ENT)

Les électrons d'un atome se répartissent en couches électroniques (notées $n = 1, 2, 3$, etc.), elles-mêmes composées de sous-couches (notées s, p, d, etc.). La configuration électronique d'un atome décrit la répartition de ses électrons sur les différentes sous-couches.

Règles de remplissage

Couche	Sous-couche
$n = 1$	1s
$n = 2$	2s → 2p
$n = 3$	3s → 3p … 3d

Lorsqu'une sous-couche est pleine, remplir la suivante si nécessaire.

Exemple :
Atome de soufre S ($Z = 16$)

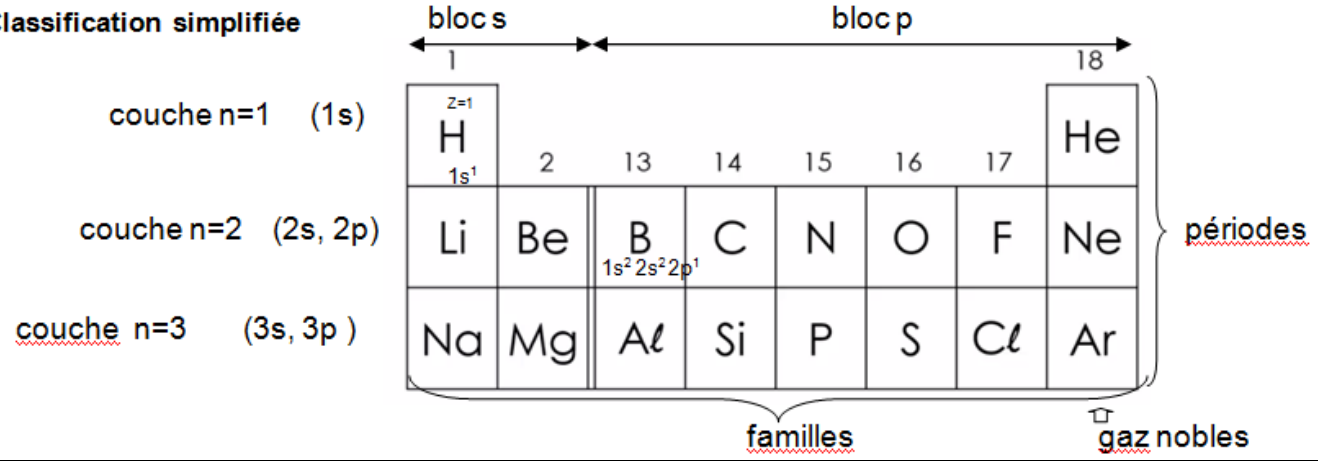
Configuration électronique :
$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^4$
6 électrons de valence

Nombre maximal d'électrons par sous-couche

s	p
2	6

Électrons de valence
Électrons des sous-couches de numéro n le plus grand.

- **Classification simplifiée**



Document 3 : la représentation de Lewis des atomes: (voir vidéo 2 ENT)

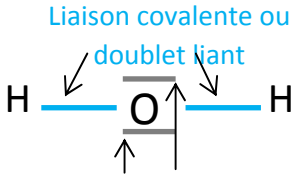
La représentation de Lewis de l'atome se réalise à partir de la configuration électronique de l'atome. Cela consiste à placer les électrons de valence (de la dernière couche) autour de l'élément représentant l'atome. Les 4 premiers électrons sont forcément célibataires, à partir du 5ème électrons on regroupe les électrons par paires, représentant des doublets non-liants. Les électrons célibataires sont disponibles pour réaliser des liaisons covalentes avec d'autres atomes pour former des molécules.

TRAVAIL :

1. Déterminer la composition d'un atome de brome dont la représentation symbolique du noyau est $^{80}_{35}Br$.
2. Les molécules de la chimie organiques sont constituées essentiellement d'atomes de carbone et hydrogène. Ces 2 atomes sont souvent accompagnés des atomes d'oxygène, d'azote, de chlore .
    a. A l'aide de la classification périodique et de vos connaissances, compléter le tableau n°1 en annexe
    b. En déduire la représentation de Lewis des molécules et remplir la deuxième colonne du tableau n°2
3. A partir de la configuration électronique de l'atome d'oxygène (voir tableau 1), déterminer la place de l'élément oxygène dans le tableau périodique. Même question pour l'élément argon. A quelle famille appartient l'argon ?
4. Combien d'électrons de valence possède un atome de gaz noble (dernière colonne), un atome halogène (avant dernière colonne) ?
5. A partir de la position dans le tableau périodique (période 3 : colonne 2), déterminer la configuration électronique de l'atome de magnésium. Même question pour l'atome de carbone (période 2 ; colonne 4 ou 14).

II. <u>Schéma de Lewis d'une molécule et géométrie</u>

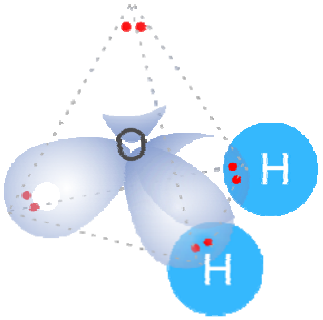
Document 4 : Représentation de Lewis des molécules :
La représentation de Lewis est une représentation de la molécule explicitant la façon dont les atomes sont liés entre eux. Tous les électrons des couches externes (électrons de valence) sont regroupés par doublets représentés chacun par un tiret. Le doublet est situé entre les deux atomes s'il représente une liaison covalente ou doublet liant. Il est représenté autour de l'atome s'il n'appartient qu'à un seul atome : doublet non liant. Autour d'un atome, les doublets occupent les positions : Nord , Sud, Est, Ouest. Cette représentation ne rend pas compte de la géométrie de la molécule.



Document 5 : Géométrie des molécules : vidéo 3 ENT
Une molécule est un groupe d'atomes liés entre eux toujours de la même façon par des liaisons covalentes. Sa formule brute nous renseigne sur le type et le nombre d'atomes qui la constitue.
Une liaison covalente est la mise en commun de 2 électrons de la couche externe appartenant à deux atomes différents pour former un doublet liant appartenant à chacun des 2 atomes. Chaque liaison covalente formée apporte un électron supplémentaire à l'atome qui l'engage.

Les électrons de la couche d'un atome, qui ne sont pas engagés dans des liaisons covalentes, se regroupent par deux pour former des doublets non liants.

Les électrons composant ces doublets liants ou non liants exercent les uns sur les autres des forces électriques répulsives. Les doublets sont donc disposés autour de chaque atome de façon à minimiser les valeurs de ces forces.

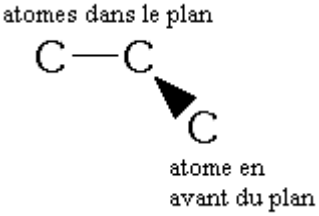


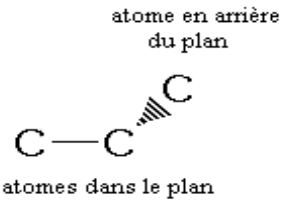
Exemple de la molécule d'eauH_2O

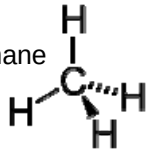
Document 6 : la représentation en 3D ou représentation de Cram

La représentation de Cram d'une molécule permet sa représentation dans l'espace.

- Une liaison, entre 2 atomes dans le plan de la feuille, est représentée par un trait plein.
- Une liaison, entre un atome dans le plan et un atome en avant de la feuille, est représentée pa un triangle plein, la pointe étant du côté de l'atome dans le plan, la base du côté de l'autre atome.
- Une liaison, entre un atome dans le plan et un atome en arrière du plan, est représentée par un trait en pointillé .





Exemple pour la molécule de méthane 

Document 7 : les modèles moléculaires et logiciels de représentation

On peut donner des représentations des molécules en 3 dimensions avec :

- Les modèles moléculaires

Chaque atome est représenté par une sphère de couleur et de taille bien définies. Les sphères sont liées les unes aux autres par des tiges représentant les liaisons covalentes.

- Les logiciels 3D

Ces logiciels permettent de construire des molécules et de les visualiser en 3D donc d'étudier leur structure et la répartition spatiale des atomes qui les composent.

Phet : simulation, animation sur ENT

TRAVAIL

1. d'après le tableau n°1, combien de liaisons va former un atome de carbone (quel qu'il soit)?
2. Fabriquer les modèles moléculaires des molécules du tableau 2 et finir de le compléter, pour cela :
   a. Associer à chacune sa géométrie en choisissant parmi les suivantes : linéaire, pyramidale, plane, tétraédrique, coudée.
   b. Les représenter en géométrie 3D en respectant les conventions données dans les informations.
   c. utiliser l'animation de l'ENT pour représenter les angles entre les liaisons.
3. Rechercher ensuite la représentation de Lewis des molécules suivantes :
   a. éthane C_2H_6, propane C_3H_8,
   b. éthène C_2H_4, éthyne C_2H_2.
   c. éthanal C_2H_4O , méthanol CH_4O
   d. Représenter les molécules à l'aide du logiciel de représentation des molécules pour vérifier leur géométrie en 3D.
4. Rechercher la formule de Lewis des molécules et ions suivants, et indiquer leur géométrie :

   BH_3 , $A\ell C\ell_3$, NH_4^+, H_3O^+, SH^- .

ANNEXE **Tableau n°1**

Nom de l'atome	Hydrogène	Bore	Carbone	Azote	Oxygène	Chlore
Symbole et numéro atomique Z						
Structure électronique						
Nombre d'électrons de valence						
Représentation de Lewis						
Nombre de doublets non liants						

Tableau n°2

Molécules	Formule de LEWIS	Représentation dans l'espace (cram) + angles en °	Géométrie (plane, triangulaire, coudée, tétraédrique, pyramidale)
CH_4			
CH_2O			
$HC\ell$			
CO_2			
NH_3			
H_2O			