



Nom : ; prénom : Binôme :

Classe :

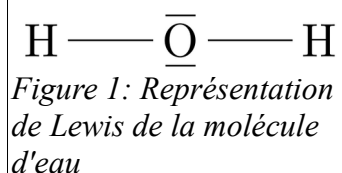
TP3 : Géométrie des molécules et polarité

I- La représentation de Lewis de molécules (s'approprier à la maison)

Doc 1 : « La physique en 18 mots clés », La Recherche, hors-série n°1, 2005

Le premier vrai modèle de la liaison chimique a été proposé à partir de 1916 par le chimiste américain Gilbert Lewis. Ce modèle est très utile pour les chimistes, car il permet de prédire le nombre de liaisons que forme chaque atome. Il répartit les électrons d'un atome en deux catégories : ceux de cœur, chimiquement inactifs, et ceux de valence (ou externe). Comme presque toutes les molécules stables connues à l'époque comportent un nombre pair d'électrons de valence, Lewis postule l'existence de paires électroniques. Les liaisons sont assurées par des paires liantes, mais il existe aussi des « paires libres » [ou non-liantes], qui n'interviennent pas directement. Pour former une liaison covalente, les atomes mettent en commun un électron chacun. Le but, pour chaque atome, est d'être entouré de huit électrons (sauf l'hydrogène et l'hélium, auxquels deux électrons suffisent).

Ainsi, dans la molécule d'eau, formée d'un atome d'oxygène (qui possède au départ six électrons de valence) et de deux d'hydrogène (qui possèdent au départ un électron de valence chacun), l'oxygène, partage un électron avec chaque atome d'hydrogène. Il se retrouve ainsi avec huit électrons de valence, tandis que chaque atome d'hydrogène, avec deux électrons de valence, atteint également son « quota ».



- 1) a) Comment les électrons se répartissent-ils dans le nuage électronique d'un atome ?
b) Combien d'électrons externes les atomes d'hydrogène et d'oxygène possèdent-ils ?
- 2) Pourquoi un atome forme-t-il des liaisons ? Comment une liaison est-elle formée ?
- 3) Combien de liaisons un atome d'oxygène va-t-il réaliser ? même question pour un atome d'hydrogène.
- 4) Combien reste-t-il alors d'électrons non-liants sur la couche externe de chaque atome ? En déduire le nombre de paires non-liantes possède alors chaque atome.
- 5) a) D'après la figure 1, comment une paire d'électrons non liantes est-elle représentée par Lewis ?
b) Compter le nombre d'électron qui entoure l'atome d'oxygène. Satisfait-il la règle de l'octet ?
c) Compter le nombre d'électron qui entoure l'atome d'hydrogène. Satisfait-il la règle du duet ?
- 6) Pour chacun des atomes ci-dessous, déterminer la structure électronique. En déduire :
 - le nombre de liaisons qu'il peut effectuer.
 - le nombre de paires non liantes qu'il contient.

atome	carbone	azote
numéro atomique Z	6	7

- 7) En déduire la représentation de Lewis des molécules:

- méthane : CH₄
- éthane : C₂H₆
- éthène : C₂H₄
- ammoniac : NH₃
- dioxygène : O₂



Nom : ; prénom : Binôme :

Classe :

II- La géométrie des molécules

Doc 2 : La théorie VSEPR (https://fr.wikipedia.org/wiki/Théorie_VSEPR)

La théorie VSEPR (sigle de l'anglais Valence Shell Electron Pair Repulsion, en français RPECV : « **répulsion des paires électroniques de la couche de valence** ») est une méthode destinée à prédire la géométrie des molécules en se basant sur la théorie de la répulsion des électrons de la couche de valence. Elle est aussi connue sous le nom de « théorie de Gillespie ».

Ce sont les Britanniques Nevil Sidgwick et Herbert Powell de l'Université d'Oxford qui ont proposé en 1940 une corrélation entre la géométrie moléculaire et le nombre des électrons de valence. En 1957 à University College de Londres, Ronald Gillespie et Ronald Sydney Nyholm se sont appuyés sur cette idée pour proposer une théorie plus détaillée. En 1958 Gillespie déménage à Université McMaster en Ontario et continue à développer et affiner la théorie, de sorte qu'il est considéré comme le véritable instaurateur de cette théorie. La méthode VSEPR s'inscrit dans la poursuite des idées sur les liaisons chimiques de G.N Lewis (1916).

La méthode VSEPR est fondée sur un certain nombre de suppositions :

- les atomes dans une molécule sont liés par des paires d'électrons ;
- deux atomes peuvent être liés par plus d'une paire d'électrons (on parle alors de liaisons multiples) ;
- certains atomes peuvent aussi posséder des paires d'électrons qui ne sont pas impliqués dans une liaison (on parle de 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 ;**
- les doublets non liants occupent plus de place que les doublets liants ;
- les liaisons multiples prennent plus de place que les liaisons simples.

a) Figures de répulsion

1. Modéliser un atome par une boule de pâte à modeler et chaque doublet d'électron par un pic cure dent.
2. Disposer les pics pour respecter la règle de répulsion électronique en utilisant tout l'espace utile.
3. Faire valider par le professeur.
4. Compléter la dernière ligne du tableau.

Description	Figure de répulsion (avec 4 doublets)	Linéaire, plane ou 3D	Validation par le professeur
Il n'y a pas de liaisons multiples	Tétraédrique	3D	
Une liaison double (modélisée par deux pics accolés)	Triangulaire	plane	
Deux liaisons doubles	Linéaire	linéaire	
Une liaison triple			



Nom : ; prénom : Binôme :


Classe :

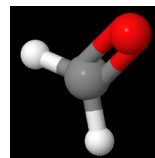
b) Géométrie des molécules

https://phet.colorado.edu/sims/html/molecule-shapes/latest/molecule-shapes_fr.html

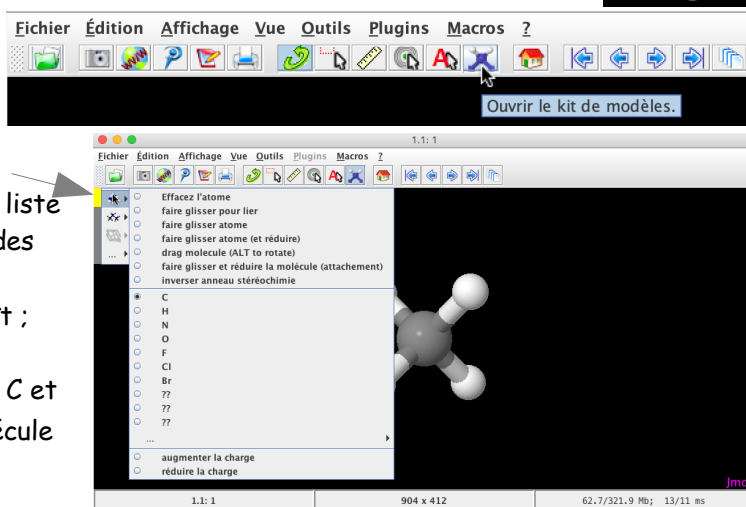
1. Visualiser la molécule de méthane CH_4 (mode expérimental).
 - Quel est l'atome central de la molécule ? Donner son code couleur.
 - Comparer la géométrie de la molécule à la figure de répulsion. Justifier.
 - Donner les angles de liaison.
2. Visualiser la molécule d'ammoniac NH_3 (mode expérimental).
 - Quel est l'atome central de la molécule (quand les doublets non liants sont affichés) ? Donner son code couleur.
 - Comparer la géométrie de la molécule (observable quand les doublets non liants sont masqués) à la figure de répulsion (observable quand les doublets non liants sont affichés).
 - Comment un doublet non liant est-il représenté ?
 - Justifier que les angles de liaison (plus faibles que pour le méthane) sont en accord avec la théorie VSEPR
3. Visualiser la molécule d'eau H_2O (mode expérimental).
 - Quel est l'atome central de la molécule (quand les doublets non liants sont affichés) ? Donner son code couleur.
 - Comparer la géométrie de la molécule (observable quand les doublets non liants sont masqués) à la figure de répulsion (observable quand les doublets non liants sont affichés).
 - Justifier que les angles de liaison (plus faibles que pour l'ammoniac) sont en accord avec la théorie VSEPR
4. Visualiser la molécule de CO_2 (mode expérimental).
 - Comparer la géométrie de la molécule à la figure de répulsion. Justifier.
 - Donner les angles de liaison.
5. Visualiser les autres molécules (hors programme) proposées par le logiciel
 - Le nombre de doublets autour de l'atome central est-il égal à 4 pour ces molécules ?
 - La théorie VSEPR s'applique-t-elle pour ces molécules ?

c) Géométrie de la molécule de méthanal

1. Lancer l'application Jmol en double cliquant sur le fichier  Jmol.jar (chemin : Ce PC > DOSSUP > PHYSIQUE > Ressources > Première scientifique > Jmol.jar) pour :



- construire la molécule de méthanal CH_2O :
 - ouvrir le kit de modèles (icône en forme de molécule) : la molécule de **méthane** apparaît ;
 - en haut à gauche du cadre, ouvrir le menu jaune et choisir l'atome d'oxygène dans la liste des atomes proposés puis cliquer sur un des atomes d'hydrogène de la molécule de méthane : la molécule de **méthanol** apparaît ;
 - cliquer au milieu de la liaison simple entre C et O pour obtenir une double liaison : la molécule de **méthanal** apparaît.



- Reconstruire la géométrie de la molécule :
Fichier > Console... puis saisir la commande `minimize` à la suite du \$; valider avec la touche **Entrée** du clavier. Donner l'énergie minimale de cette molécule puis fermer la Console.



Nom : ; prénom : Binôme : Classe :

2. Par un clic sur le fond noir du cadre puis en déplaçant la souris on peut faire tourner la molécule. Donner la géométrie de la figure de répulsion et celle de la molécule de **méthanal**.

d) Géométrie des molécules d'éthane et d'éthène

- Utiliser l'application Jmol pour construire la molécule d'éthane C_2H_6 et celle d'éthène C_2H_4
 - menu Fichier > Nouveau pour commencer une nouvelle molécule
 - ouvrir le kit de modèles : la molécule de **méthane** apparaît ;
 - cliquer sur un atome d'hydrogène : la molécule d'**éthane** apparaît ;
 - reconstruire la géométrie de la molécule d'éthane en cliquant sur **Réduire** (dans le menu blanc en haut à gauche) ;
 - cliquer sur la liaison C-C : la molécule d'**éthène** apparaît (avec une double liaison) ;
 - reconstruire la géométrie de la molécule d'éthène en cliquant sur **Réduire** ;
- Construire la molécule d'éthane C_2H_6 et celle d'éthène C_2H_4 avec les boîtes de modèle moléculaire
- Indiquer laquelle de ces deux molécules autorise une libre rotation autour de l'axe de la liaison
- Quel est l'élément qui empêche la libre rotation de l'autre molécule ?

III- La polarité des molécules

Utiliser l'application Jmol pour afficher la polarité des molécules d'eau H_2O et de dioxyde de carbone CO_2 :

- Visualiser la polarité de la molécule d'eau
 - menu Fichier > Nouveau pour commencer une nouvelle molécule
 - ouvrir le kit de modèles : la molécule de méthane apparaît ;
 - choisir l'atome d'oxygène ;
 - cliquer sur l'atome de carbone du méthane : la molécule d'eau apparaît ;
 - reconstruire la géométrie de la molécule d'eau en cliquant sur **Réduire** ;
 - ouvrir la console à partir du menu Fichier > Console...
 - à la suite du \$ qui s'affiche dans la console, entrer l'instruction :

isosurface resolution 10 molecular mep
 - valider avec la touche **Entrée** du clavier.
- Visualiser la polarité de la molécule de dioxyde de carbone
 - menu Fichier Nouveau pour commencer une nouvelle molécule
 - ouvrir le kit de modèles : la molécule de méthane apparaît ;
 - choisir l'atome d'oxygène cliquer sur deux des atomes d'hydrogène de la molécule pour obtenir le méthanol puis le méthanediol ;
 - cliquer sur les liaisons simples entre C et O pour faire apparaître la molécule de CO_2 ;
 - reconstruire la géométrie de la molécule de CO_2 en cliquant sur **Réduire** ;
 - ouvrir la console à partir du menu Fichier > Console...
 - à la suite du \$ qui s'affiche dans la console, entrer l'instruction qui permet d'afficher la polarité de la molécule :

isosurface resolution 10 molecular mep

Doc 3 Code couleur

- **rouge** : zone portant une charge négative prononcée
- **jaune** : zone portant une charge négative moins importante que la précédente
- **vert** : zone portant une charge nulle
- **cyan** : zone portant une charge positive moins importante que la suivante
- **bleu** : zone portant une charge positive prononcée

Le déséquilibre des charges que l'on observe au sein de ces molécules provient d'une aptitude différente que possèdent les différents atomes à attirer à eux les électrons des doublets liants.



Nom : ; prénom : Binôme :

Classe :

Vocabulaire : un atome est plus **électronégatif** qu'un autre s'il attire plus fortement à lui les électrons de la liaison le liant à l'autre atome.

- a) Entre le carbone et l'oxygène indiquer celui qui est le plus électronégatif des deux. Justifier.
- b) Entre l'oxygène et l'hydrogène indiquer celui qui est le plus électronégatif des deux. Justifier.
- c) Où se trouvent le barycentre des charges positives et celui des charges négatives pour la molécule d'eau ? (faire un schéma)
- d) Où se trouvent le barycentre des charges positives et celui des charges négatives pour la molécule de dioxyde de carbone ? (faire un schéma)