

TP de Chimie (Chapitre CTM4) : Géométrie des molécules

1/ Représentation de Lewis**Document N°1/ Rappels sur la structure électronique des atomes H, O, N et C**

Atome	Numéro atomique	Configuration électronique	Electrons externes	Nombre de doublets liants	Nombre de doublets non liants
H	Z = 1				
C	Z = 6				
N	Z = 7				
O	Z = 8				

Document 2 : Représentation de Lewis :

La représentation de Lewis ou formule de Lewis fait apparaître **l'ensemble des atomes présents dans une molécule ainsi que tous les électrons externes de ces atomes**. Tous les **doublets liants et non-liants** des atomes sont représentés.

Les doublets non-liants sont représentés par des tirets placés à côté des atomes qui les portent.

1.1/ Donner la représentation de Lewis des molécules suivantes : H_2O ; CO_2 ; CH_4 ; CH_2O ; NH_3 ; HCN

Molécule	Représentation de Lewis
H_2O	
CO_2	
CH_4	
CH_2O	
NH_3	
HCN	

2/ Géométrie des molécules**Aide : Utilisation du logiciel avogadro**

Les outils que vous utiliserez sont les suivants :

- Dessin (**crayon**) : permet de dessiner des atomes et les liaisons entre atomes. Pour dessiner un atome, choisir le symbole de l'atome et cliquer sur la fenêtre. Pour dessiner un atome et une liaison vers un autre atome, choisir le symbole de l'atome et une multiplicité de 1 pour une liaison simple ou de 2 pour une liaison double. Cliquer pour dessiner l'atome puis glisser avec la souris vers l'atome formant une liaison.
- Navigation (**étoile**) : permet de faire tourner la molécule autour d'un atome sélectionné avec la souris. Les touches shift et Ctrl permettent en plus d'agrandir ou de déplacer la molécule.
- Manipulation des liaisons (**90**) : permet de mesurer les angles formés par 3 atomes consécutifs d'une molécule.
- Manipulation (**main**) : permet de déplacer les atomes d'une molécule.
- Optimisation automatique (**E**) : optimise le placement des atomes d'une molécule dans l'espace. Utiliser la barre commencer et arrêter lorsque l'optimisation est terminée.
- Pour effacer le dernier dessin faire Alt←. Le clic droit de la souris permet d'effacer un atome ou une liaison.

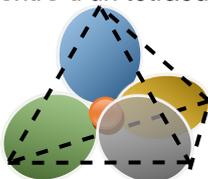
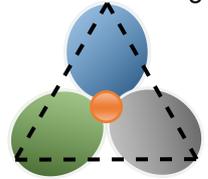
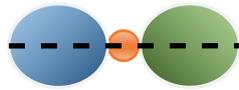
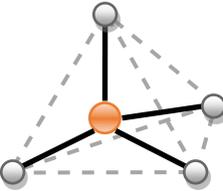
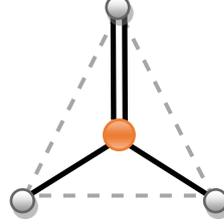
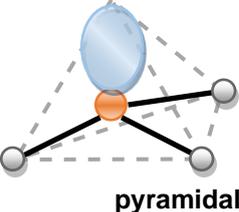
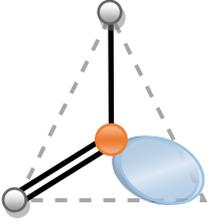
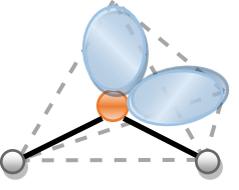
2.1/ Dessiner séparément sur Avogadro chaque molécule donnée dans le tableau ci-dessous puis optimiser le placement de leurs atomes dans l'espace. Pour chaque molécules, effectuer une capture d'écran puis l'imprimer.

Molécule	Modèle moléculaire (Avogadro)	Angle
H ₂ O		Angle H-O-H
CO ₂		Angle O-C-O
CH ₄		Angle H-C-H
CH ₂ O		Angle H-C-O Angle H-C-H
NH ₃		Angle H-N-H
HCN		Angle H-C-N

Document N°3/ Géométrie des molécules

Les **doublets électroniques** (liants et non liants) adoptent **une géométrie qui les fait s'éloigner au maximum les uns des autres.**

Type de molécules : AX_mE_n (A : atome central ; X : atomes liés à A ; E : doublets non liants de A)

Atome central qui réalise	4 liaisons simples AX_4 OU 3 liaisons simples + 1 doublet non liant AX_3E_1 OU 2 liaisons simples + 2 doublets non liants AX_2E_2	1 liaison double + 2 liaisons simples AX_3 OU 1 double + 1 liaison simple + 1 doublet non liant AX_2E_1	AX_2 2 liaisons doubles OU 1 liaison simple + 1 liaison triple
Position de l'atome central et directions vers lesquelles pointent les doublets (liants et non liants)	Centre d'un tétraèdre  Les doublets pointent vers les sommets du tétraèdre régulier	Centre d'un triangle  Les doublets pointent vers les sommets du triangle	Centre d'un segment  Les doublets pointent vers les extrémités du segment
Géométrie de la molécule	 tétraédrique	 triangulaire plane	 linéaire
	 pyramidale	 coudée	 linéaire
	 coudée		

Molécule	Type de molécules	Forme géométrique
H ₂ O		
CO ₂		
CH ₄		
CH ₂ O		
NH ₃		
HCN		