

Chapitre 5

Les principales géométries des molécules

Dr. Pierre-Alexis GAUCHARD

Chapitre 5.

Les principales géométrie des molécules

I. Représentation de Cram

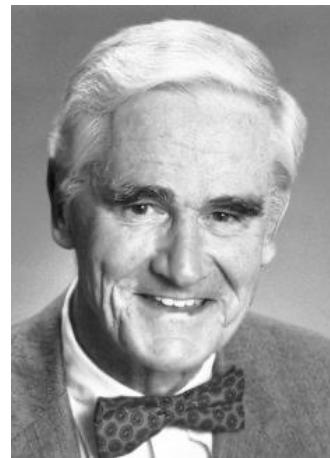
II. Théorie VSPER

III. Les principaux géométries

IV. Notion de polarité

I. Représentation de Cram

Cram, prix Nobel de chimie (1987)



Liaison dans le plan de la diapositive



Liaison vers l'avant du plan de la diapositive



Liaison vers l'arrière du plan de la diapositive



II) Théorie VSPER

Théorie VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) ou de Gillespie

répulsion des doublets d'électrons des couches de valence

→ renseigne sur la géométrie spatiale de l'espèce



La géométrie d'une molécule autour d'un atome donné est celle pour laquelle les répulsions entre les doublets (liants ou non) seront minimales.

II.1) Formalisme AX_nE_p

II.2) Figure de répulsion

II.1) Formalisme AX_nE_p

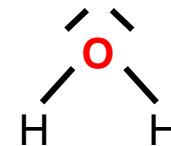
Formalisme AX_nE_p :

A : atome central considéré

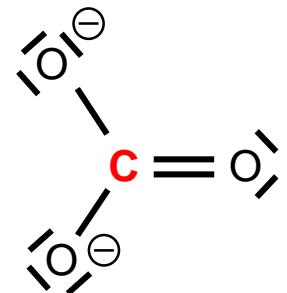
n : nombre d'atomes liés à l'atome A

p : nombre de doublets non liant sur l'atome A

exemples



AX_2E_2



AX_3E_0 ou AX_3

Les liaisons doubles ou triples sont considérés comme impliquant les mêmes répulsions que des liaisons simples.

Un doublet non liant génère plus de répulsion avec un autre doublet que deux doublets liants entre eux. La conséquence ne sera pas évoquée dans ce cours.

II.2) Figures de répulsion

Ou géométrie globale de l'entité.

Elle est imposée par le nombre de directions prises par les doublets autour de l'atome A.

2 directions
($n+p = 2$)



Figure de
répulsion
linéaire

3 directions
($n+p = 3$)



Figure de
répulsion trigonale
(ou triangle plan)

4 directions
($n+p = 4$)



Figure de
répulsion
tétraédrique

III) Géométries

Les géométries découlent des différentes figures de répulsion

II.1) Les géométries linéaire et triangle plan

II.2) Les géométries issues du tétraèdre

III.1) Les géométries linéaire et triangle plan

III.1.i) La géométrie linéaire

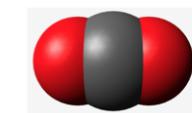
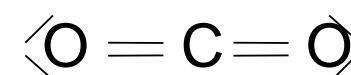
Figure de répulsion linéaire ($n+p = 2$)



AX_2E_0 (ou AX_2)
Géométrie linéaire



exemple



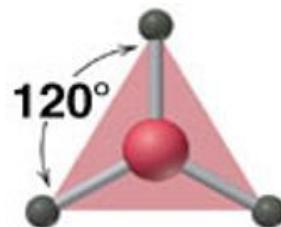
III.1.ii) La géométrie triangle plan

Figure de répulsion trigonale ($n+p = 3$)



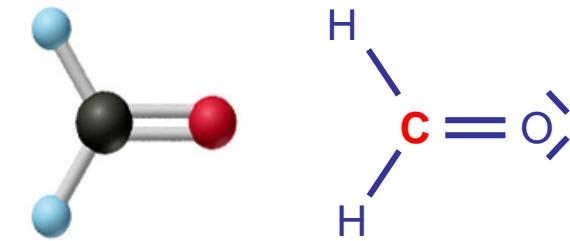
Géométrie trigonale ou triangle plan

AX_3E_0 (ou AX_3)



exemple

Formaldéhyde (méthanal)

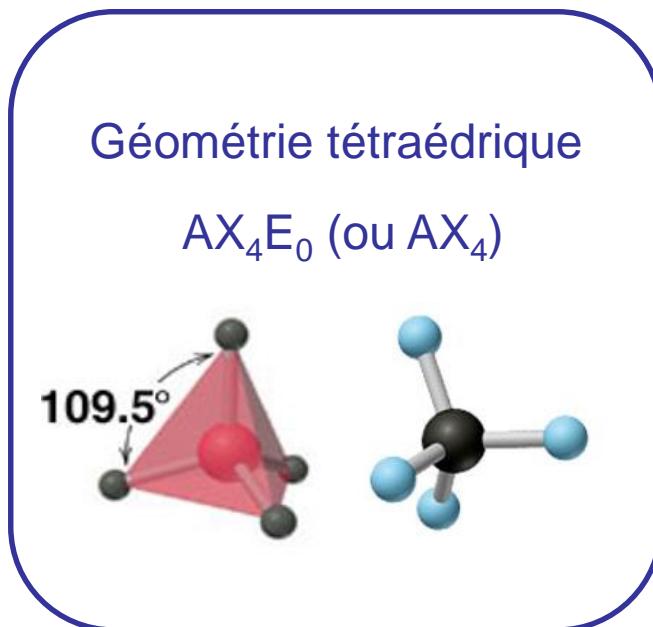
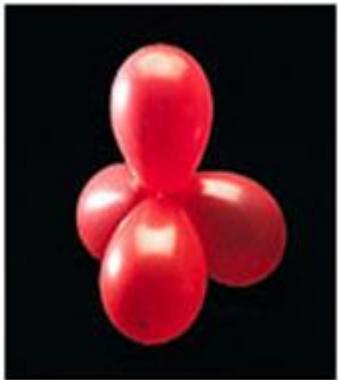


≈ chimie organique, biochimie : la géométrie autour du carbone est trigonale dans les cétones, les aldéhydes, les acides carboxyliques, les amides...

III.2) Les géométries issues du tétraèdre

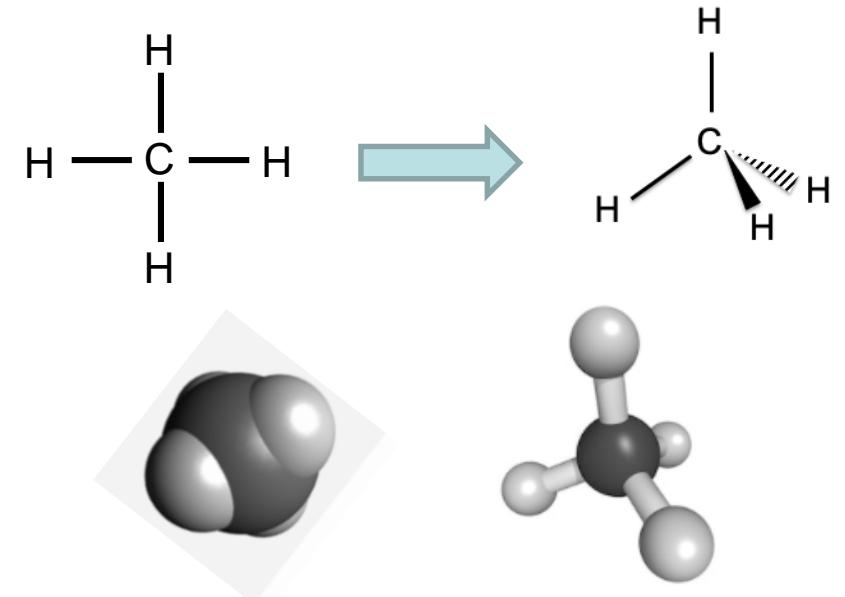
III.2.i) La géométrie tétraédrique

Figure de répulsion tétraédrique ($n+p = 4$)



exemple

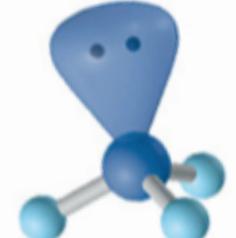
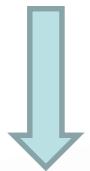
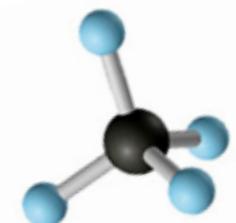
Méthane : CH_4



≈ chimie organique, biochimie :
la géométrie autour du carbone engageant
4 liaisons simples est toujours tétraédrique

III.2.ii) La géométrie pyramidale

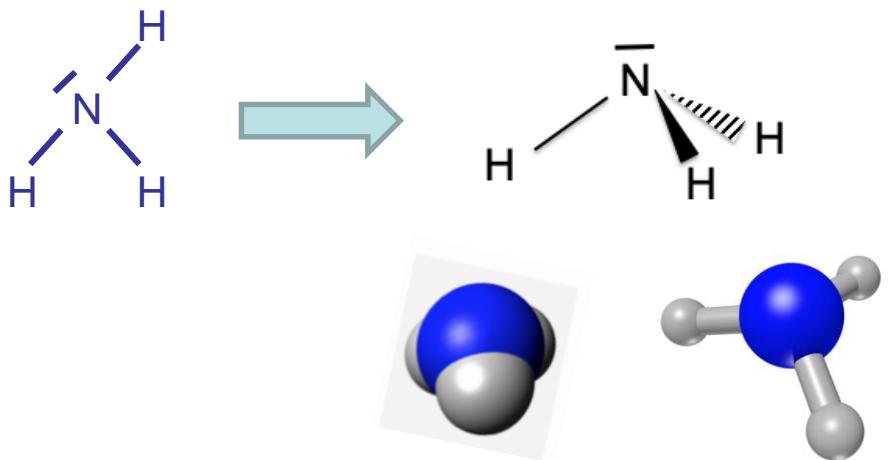
Figure de répulsion tétraédrique ($n+p = 4$)



Géométrie pyramidale
(ou pyramide trigonale)

exemple

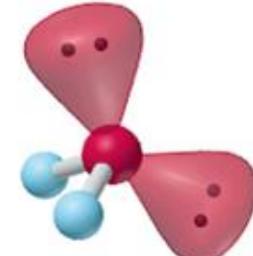
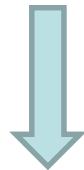
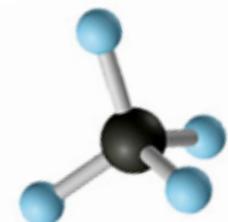
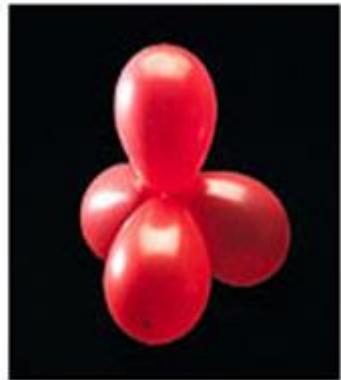
Ammoniac : NH_3



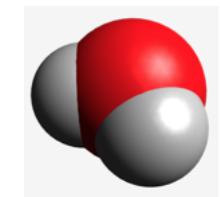
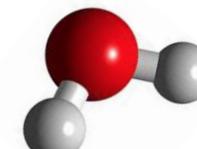
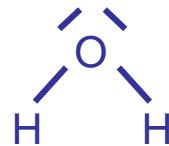
Cf. chimie organique, biochimie : la géométrie autour de l'atome d'azote dans les amines (3 liaisons simples) est toujours pyramidale

III.2.ii) La géométrie coudée

Figure de répulsion tétraédrique ($n+p = 4$)



AX_2E_2
Géométrie coudée
(ou plane coudée)



exemple

Eau : H_2O

↪ chimie organique, biochimie : la géométrie autour de l'atome d'oxygène dans les alcools (2 liaisons simples) est toujours coudée

IV) Notion de polarité

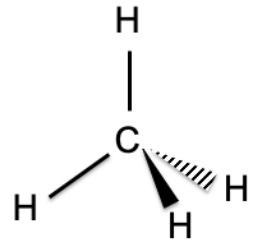
Rappel : une liaison polarisée a un caractère ionique partiel et on attribue à chaque atome de la liaison une charge partielle $\delta+$ ou $\delta-$

Les liaisons polarisées d'importance biologique : O—H, N—H, C—O et C=O

On distingue les molécules polaires des molécules apolaires.

Une molécule est dite polaire si elle possède des liaisons polarisées et que le centre des charges partielles positives ne coïncide pas avec le centre des charges partielles négatives.
Sinon est elle dite apolaire.

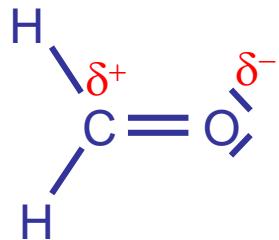
IV) Notion de polarité



CH_4 : la question de la polarité ne se pose pas car aucune liaison n'est polarisée.

CH_4 : apolaire

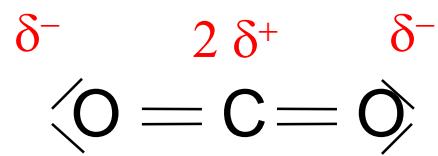
~ Généralisation : les chaînes carbonées (hydrocarbures, groupements alkyls) n'induisent pas de polarité



H_2CO : polaire

~ Généralisation : la liaison polarisée C=O induit de la polarité (aldéhydes, cétones, etc.)

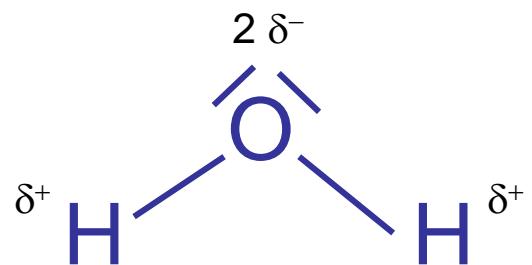
IV) Notion de polarité



CO_2 : type AX_2E_0

Géométrie linéaire autour de l'atome de carbone

CO_2 : apolaire



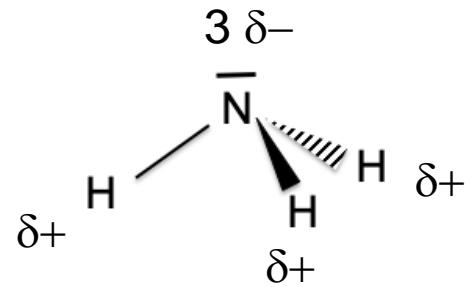
H_2O : type AX_2E_2

Géométrie coudée autour de l'atome d'oxygène

H_2O : polaire

~ Généralisation : la liaison polarisée O—H induit de la polarité (alcools)

IV) Notion de polarité



NH_3 : type AX_3E_1

Géométrie pyramidale autour de l'atome d'azote

NH_3 : polaire

≈ Généralisation : la liaison polarisée N—H induit de la polarité (amines)

L'essentiel

| Code VSEPR | Géométrie | Angle caractéristique | Exemple |
|------------|---------------------------------|-----------------------|---------|
| AX_2E_0 | linéaire | 180° | CO_2 |
| AX_3E_0 | trigonométrique (triangle plan) | 120° | H_2CO |
| AX_4E_0 | tétrédrique | $\approx 109,5^\circ$ | CH_4 |
| AX_3E_1 | pyramidale | | NH_3 |
| AX_2E_2 | coudée | $\approx 109,5^\circ$ | H_2O |

Une molécule est dite polaire si elle possède des liaisons polarisées et que le centre des charges partielles positives ne coïncide pas avec le centre des charges partielles négatives.
Sinon est elle dite apolaire.

CH_4 est apolaire (pas de liaisons polarisées) et en généralisant les hydrocarbures sont apolaires.
 CO_2 est apolaire (géométrie linéaire, les centres des charges partielles négative et positive sont confondus)

H_2CO , H_2O et NH_3 sont polaires (généralisation : les cétones, alcools et amines sont polaires)

Mentions légales

L'ensemble de ce document relève des législations française et internationale sur le droit d'auteur et la propriété intellectuelle. Tous les droits de reproduction de tout ou partie sont réservés pour les textes ainsi que pour l'ensemble des documents iconographiques, photographiques, vidéos et sonores.

Ce document est interdit à la vente ou à la location. Sa diffusion, duplication, mise à disposition du public (sous quelque forme ou support que ce soit), mise en réseau, partielles ou totales, sont strictement réservées à l'Université Grenoble Alpes (UGA).

L'utilisation de ce document est strictement réservée à l'usage privé des étudiants inscrits à l'Université Grenoble Alpes (UGA), et non destinée à une utilisation collective, gratuite ou payante.