

## TP : De la structure à la géométrie d'une entité

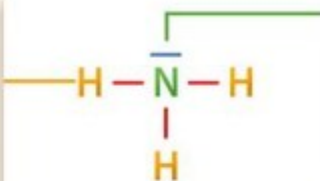
### Activité 1 : Etablir le schéma de Lewis d'une entité

Les engrais azotés, comme le nitrate d'ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_3^-$ ) fabriqué à partir de l'ammoniac  $\text{NH}_3$ , sont les engrais les plus utilisés en agriculture pour pallier une carence en azote chez certaines plantes.

**Existe-t-il un point commun structurel entre l'ion ammonium et l'ammoniac ?**

#### Doc 1 : Méthode pour déterminer le schéma de Lewis d'une molécule.

Configuration électronique de l'hydrogène [ $1\text{H}$ ] =  $1s^1$ .  
Chaque atome d'hydrogène possède 1 électron de valence. Il doit gagner 1 seul électron pour avoir la même configuration électronique stable que l'hélium.



Configuration électronique de l'azote [ $7\text{N}$ ] =  $1s^2 2s^2 2p^3$ .  
L'azote possède 5 électrons de valence. Il doit **gagner 3 électrons** sur sa couche de valence pour avoir la même configuration électronique stable que le gaz noble le plus proche (néon).

© Marse

Nombre total  $N_v$  d'électrons de valence dans  $\text{NH}_3$  :  $5 + 3 \times 1 = 8$  soit 4 doublets d'électrons.

L'atome d'azote forme **3 doublets liants** pour s'associer aux 3 atomes d'hydrogène.

Il reste **1 doublet non liant** sur l'azote.

**N s'entoure de 4 doublets (8 électrons comme le néon).**

**H s'entoure d'un doublet (2 électrons comme l'hélium).**

#### Doc.2 Méthode pour déterminer le schéma de Lewis d'un ion.

Un ion est une entité chargée positivement (cation) ou négativement (anion). Il est essentiel de tenir compte de la charge de l'ion dans la détermination du nombre total  $N_{v,\text{ion}}$  d'électrons de valence : Cela se calcule de la manière suivante :

- Si l'entité est anionique de formule  $A^{a-}$  :  $N_{v,\text{anion}} = N_{v,\text{neutre}} + a$
- Si l'entité est cationique de formule  $C^{c+}$  :  $N_{v,\text{cation}} = N_{v,\text{neutre}} - c$ .

#### Doc 3 : Nombre de lacunes électroniques et de charges formelles

Dans un schéma de Lewis, lorsqu'un atome autre que l'atome d'hydrogène est entouré de  $d$  doublets (liants et non-liants) avec  $d < 4$ , cet atome est entouré de  $(4 - d)$  lacunes électroniques. L'ion hydrogène possède une lacune électronique.

Pour un atome  $X$  dans le schéma de Lewis d'une entité ionique, on note :

- $l$  le nombre de doublets liants entourant  $X$  dans le schéma de Lewis d'une molécule usuelle ;
- $p$  le nombre de doublets liants entourant  $X$  dans le schéma de Lewis de l'ion.

Alors le nombre de charges formelles de  $X$  dans le schéma de Lewis de l'entité ionique est le nombre entier relatif  $p - l$ .

La somme des charges formelles présentes sur un schéma de Lewis d'une entité est égale à la charge de l'entité.

## Appropriation et analyse

1. Préciser ce que représentent un tiret entre un atome d'azote et un atome d'hydrogène et le tiret situé au-dessus de l'atome d'azote.
2. Indiquer s'il faut, par rapport à une entité neutre, ajouter ou enlever des électrons au nombre  $N_v$  dans le cas d'un anion puis dans le cas d'un cation.
3. À l'aide des docs 1, 2, 3 et de la classification périodique, proposer les schémas de Lewis de la molécule de diazote  $N_2$  et de l'ion ammonium  $NH_4^+$

## Conclusion

4. Justifier la stabilité de l'atome d'azote dans une molécule d'ammoniac où il forme 3 liaisons covalentes et dans un ion ammonium où il en forme 4.
5. Proposer les schémas de Lewis des molécules  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $HCl$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$  et des ions  $H^+$ ,  $H_3O^+$ ,  $Na^+$ ,  $Cl^-$ ,  $HO^-$  et  $O^{2-}$ .
6. Lister les étapes qui permettent d'établir le schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion mono ou polyatomique.

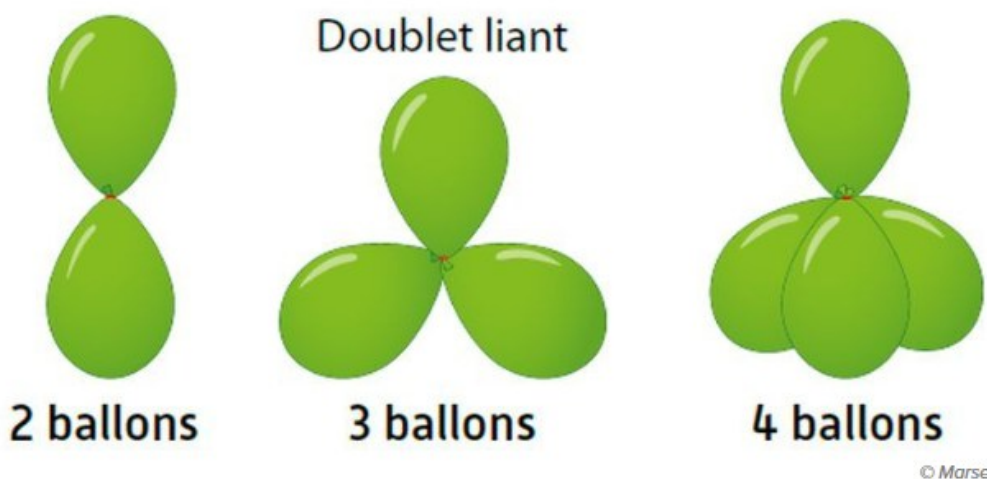
## Activité 2 : Interpréter la géométrie d'une entité

Le schéma de Lewis de la molécule d'eau pourrait nous laisser croire que sa géométrie est linéaire. Or, celle-ci est coudée. Cette géométrie lui confère des propriétés physico-chimiques très particulières.

**Comment justifier que la molécule d'eau ne soit pas linéaire mais coudée ?**

### Doc 1. Modèle de répulsion de Gillespie

Plusieurs ballons de baudruche reliés par leur embouchure adoptent une géométrie particulière et modélisent ainsi les géométries digonale, trigonale et tétragonale des molécules à 2, 3 et 4 doublets liants.



Dans le modèle de Gillespie, ce sont les doublets liants ou non liants autour de l'atome central d'une molécule qui jouent le rôle des ballons. Constitués d'une paire d'électrons (chargés négativement), les doublets se repoussent au maximum dans l'espace afin d'être les plus éloignés possibles les uns des autres.

## Mise en œuvre

1. Sur un smartphone, télécharger et ouvrir l'application « Mirage : géométrie des molécules ». Étudier le couple de marqueurs du méthane (cartes 2-7) et le couple de marqueurs de l'ammoniac (3-8) disponible en annexe. Justifier la géométrie de ces deux molécules à partir des doc. 1 et 2.

- Dans la molécule de méthane, l'angle HCH est de  $109,5^\circ$ . Donner la valeur qui serait attendue de l'angle HNH dans la molécule d'ammoniac. Expliquer.
- En réalité, l'angle HNH n'est que de  $106,7^\circ$ . Proposer une explication.
- L'ion oxonium  $\text{H}_3\text{O}^+$  a une géométrie pyramidale et l'ion ammonium  $\text{NH}_4^+$ , une géométrie tétraédrique. À partir des schémas de Lewis de ces ions polyatomiques, justifier ces structures.

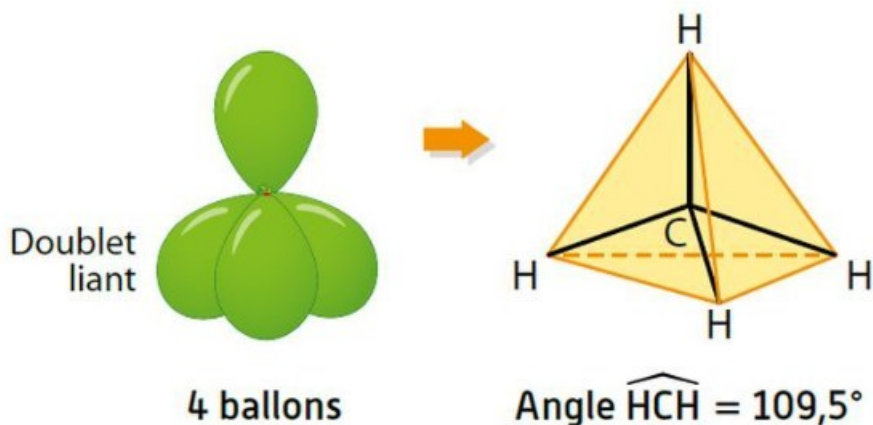
### Conclusion

- Justifier, à partir de son schéma de Lewis, la forme coudée de la molécule d'eau et l'écart de la valeur de l'angle HOH de  $104,5^\circ$  par rapport à la valeur de  $109,5^\circ$ . Valider en étudiant le couple de cartes 4-9 de l'eau  $\text{H}_2\text{O}$ .
- Expliquer comment interpréter la géométrie d'une molécule simple à partir de son schéma de Lewis.

### Doc 2 : Géométrie d'une molécule simple

#### Molécule à 4 doublets liants ( $\text{CH}_4$ )

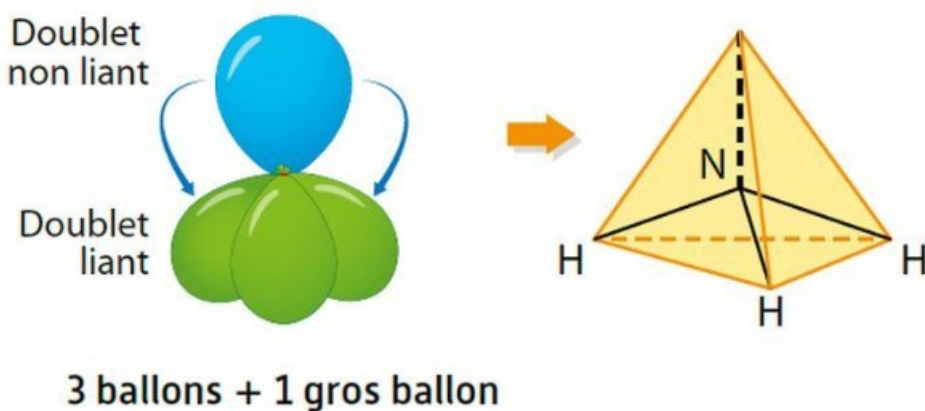
Quatre doublets liants forment un tétraèdre dont le centre est occupé par l'atome central.



© Marse

#### Molécule à 3 doublets liants et 1 non liant ( $\text{NH}_3$ )

Un doublet non liant est plus répulsif qu'un doublet liant.



© Marse





