

Géométrie des molécules

➤ Règle de Gillespie :

Les domaines électroniques autour d'un atome s'orientent dans l'espace de façon à minimiser les répulsions, donc à être le plus loin possible les unes des autres.

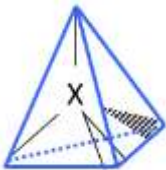
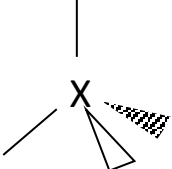
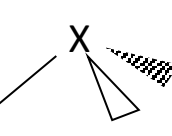
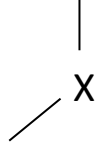
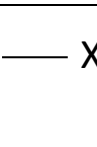
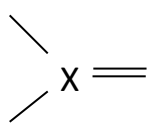
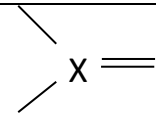
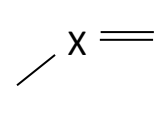
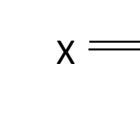
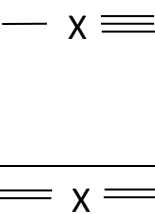
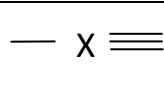
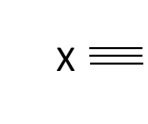
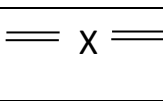
On distingue les types de domaines électroniques suivants :

- 1 liaison simple constitue 1 domaine électronique
- 1 liaison double constitue 1 domaine électronique
- 1 liaison triple constitue 1 domaine électronique
- 1 doublet non liant constitue 1 domaine électronique

➤ Représentations de Cram :

La représentation de Cram permet de représenter sur la feuille la disposition dans l'espace de la molécule. La molécule est donc représentée en « perspective ».

Cette représentation dépend du nombre de domaines autour de l'atome étudié et du nombre de liaisons partagés.

Avec 4 domaines		L'atome central est au centre d'un tétraèdre régulier (4 faces identiques = 4 triangles équilatéraux)		Lorsque l'atome partage 4 liaisons simples avec 4 voisins différents
				Lorsque l'atome partage 3 liaisons simples avec 3 voisins différents et possède 1 doublet non-liant (non représenté)
				Lorsque l'atome partage 2 liaisons simples avec 2 voisins différents et possède 2 doublets non liants (non représentés)
				Lorsque l'atome partage 1 seule liaison avec 1 seul voisin et possède 3 doublets non liants (non représentés)
Avec 3 Domaines		Les trois domaines (liaisons) sont dans un même plan, ainsi que les centres des atomes liés à X.		Lorsque l'atome partage 3 liaisons (2 simples + 1 double) avec 3 voisins différents
				Lorsque l'atome partage 2 liaisons (1 simple + 1 double) avec 2 voisins différents et 1 doublet non liant non représenté
				Lorsque l'atome partage 1 liaison double avec 1 seul voisin et possède 2 doublets non liants non représentés.
Avec 2 domaines		Les deux domaines (liaisons) sont alignés, ainsi que les centres des atomes liés à X.		Lorsque l'atome partage 2 liaisons (1 simple + 1 triple) avec 2 voisins différents
				Lorsque l'atome partage 1 liaison triple avec 1 seul voisin et possède 1 doublet non liant non représenté
				Lorsque l'atome partage 2 liaisons doubles avec 2 voisins différents

➤ Application :






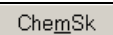

Prévoir la géométrie des molécules suivantes.

Une fois prévue, construire la molécule en utilisant le logiciel chemsketch :

Méthane	Lewis	Cram
Ammoniac	Lewis	Cram
Eau	Lewis	Cram
Ethylène C_2H_4	Lewis	Cram
Dioxyde de carbone (CO_2)	Lewis	Cram
Méthanal (HCHO) (autour du carbone en gras)	Lewis	Cram

Ethanol (CH ₃ CH ₂ OH) (autour du carbone en gras)	Lewis	Cram
Ethanol (CH ₃ CH ₂ OH) (autour de l'atome d'oxygène)	Lewis	Cram
Cyanure d'hydrogène (HCN)	Lewis	Cram

Construction des molécules 3D avec chemsketch

<ul style="list-style-type: none"> - Dans le menu <i>Tools</i> , sélectionner la commande <i>Structure Properties</i>. Pour voir les atomes C dans les formules, cochez la case All de la zone Show Carbons de l'onglet Common. - Cliquer sur le bouton Set Default pour appliquer ce réglage à toutes les formules qui seront dorénavant dessinées.
<ul style="list-style-type: none"> - Sélectionner l'élément chimique souhaité à gauche de l'écran.
<ul style="list-style-type: none"> - Dessiner le squelette de la molécule en cliquant sur la page blanche aux positions souhaitées.
<p>La géométrie actuelle de la molécule n'est peut-être pas correcte car elle est issue de vos indications, très approximatives...</p>
<ul style="list-style-type: none"> - Dans le menu « Tools », choisir « Clean Structure » - Dans le menu « Tools », choisir « 3D Structure Optimization »
<ul style="list-style-type: none"> - Visualiser la molécule en 3D en cliquant sur l'icône 
<ul style="list-style-type: none"> - modifier la manière de visualiser la molécule : choisir parmi <i>Balls and Sticks</i>  et <i>Spacefill</i> 
<ul style="list-style-type: none"> - Cliquer sur l'icône  pour faire tourner manuellement la molécule avec la souris
<ul style="list-style-type: none"> - mesurer les angles en utilisant l'icône 
<p>Pour créer une nouvelle représentation :</p>
<ul style="list-style-type: none"> - Revenir à la représentation 2D 
<ul style="list-style-type: none"> - Ouvrir une nouvelle page en cliquant sur l'icône <i>New Page</i>  pour pouvoir travailler sur une nouvelle molécule, tout en conservant la précédente.