

Université Badji Mokhtar (Annaba)

Faculté des sciences.

Département de Chimie.

L3- Chimie Pharmaceutique.

Initiation à la modélisation

Corrigé du TD1

La Liaison chimique :

La Théorie de Lewis et la règle du duet et de l'octet.

Exercice1 : Parmi les composés suivant : Identifier les composés dont les liaisons sont covalentes et ceux qui sont ioniques et dites pourquoi en expliquant :



Réponse:

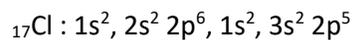
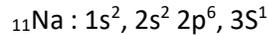
Une liaison covalente est une liaison où il y a un partage d'électrons :

Une liaison ionique est une liaison entre charges + et -

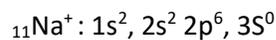
Une liaison covalente est le partage de deux électrons, elle peut être simple, polarisée et dative.

a) Pour NaCl :

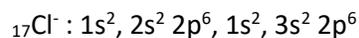
- Configuration électronique des atomes est:



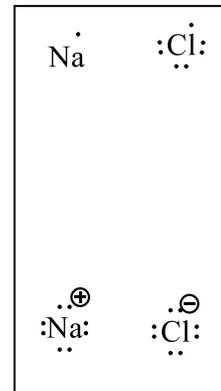
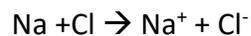
Dont la configuration devient après perte d'un électron :



Qui est gagné par le chlore:



Bilan électronique:

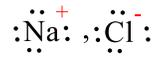


C'est une liaison entre charges (liaison ionique)

Si on applique la règle des électrons partagés : $S = (8+8) - (8+8) = 0$ pas de liaisons covalentes et $L = 16 - 0 = 16$.

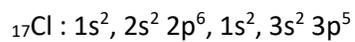
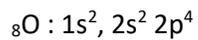
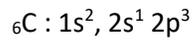
Soit 8 doublets

Représentation :



b) CH₃COCl

La Configuration électronique de chaque atome est:



On peut éventuellement calculer le nombre d'électrons partagés et nombre de doublet libres

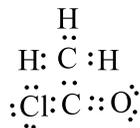
Nombre d'électrons partagés :

$$S=N-A = ((3 \times 2) + (2 \times 8) + 8 + 8) - ((3 \times 1) + (2 \times 4) + 6 + 7) = 38 - 24 = 14 \text{ électrons soit } 7 \text{ liaisons.}$$

Nombre de doublets libres

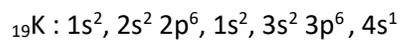
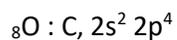
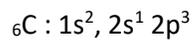
$$L=A-S=24-14=10 \text{ soit } 5 \text{ doublets}$$

Représentation:



c) K₂CO₃

La Configuration électronique de chaque atome est:



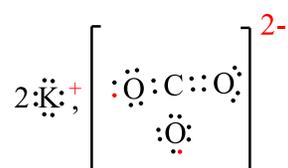
Nombre de d'électrons partagés

$$S=N-A=(2 \times 8 + (3 \times 8) + 8) - (2 \times 8 + (1 \times 6 + 2 \times 7) + 4) = 48 - 40 = 8 \text{ soit 4 liaisons covalentes}$$

Nombre de doublets libres

$$L=A-S=40-8=32 \text{ soit 16 doublets}$$

Représentation:



d) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

La Configuration électronique de chaque atome est:

$${}_1\text{H} : 1s^1$$

$${}_6\text{C} : 1s^2, 2s^1 2p^3$$

$${}_8\text{O} : 1s^2, 2s^2 2p^4$$

$${}_{17}\text{Cl} : 1s^2, 2s^2 2p^6, 1s^2, 3s^2 3p^5$$

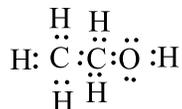
Nombre de d'électrons partagés

$$S=N-A= ((6 \times 2) + (2 \times 8) + 8) - ((6 \times 1) + (2 \times 4) + 6) = 36 - 20 = 16 \text{ électrons soit 8 liaisons.}$$

Nombre de doublets libres

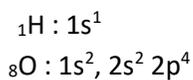
$$L=A-S=20-16=4 \text{ soit 2 doublets}$$

Représentation:



e) H_2O_2

La Configuration électronique de chaque atome est:



Nombre d'électrons partagés

$$S=N-A = (((2 \times 2) + (2 \times 8)) - ((2 \times 1) + (2 \times 6))) = 20 - 14 = 6 \text{ électrons soit } 3 \text{ liaisons.}$$

Nombre de doublets libres

$$L=A-S=14-6=8 \text{ soit } 4 \text{ doublets}$$

Représentation:



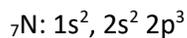
Exercice 2: Représenter les molécules suivantes selon la théorie de Lewis en respectant la règle de l'octet et du duet et calculer la charge formelle quand elle existe :



Réponses:

a) N_2

La Configuration électronique de chaque atome est:



Nombre d'électrons partagés.

$$S=N-A = ((2 \times 8) - (2 \times 5)) = 16 - 10 = 6 \text{ électrons partagés soit } 3 \text{ liaisons covalentes.}$$

Nombre de doublets libres.

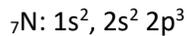
$$L=A-S=10-6=4 \text{ soit } 2 \text{ doublets}$$

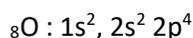
Représentation:



b) NO_2

La Configuration électronique de chaque atome est:





Nombre d'électrons partagés

$$S=N-A=(((2 \times 8)+8)-((2 \times 6)+5))=24-17=7 \text{ chiffre impair (c'est une exception) donc on a 3 liaisons}$$

covalentes et un électron célibataire.

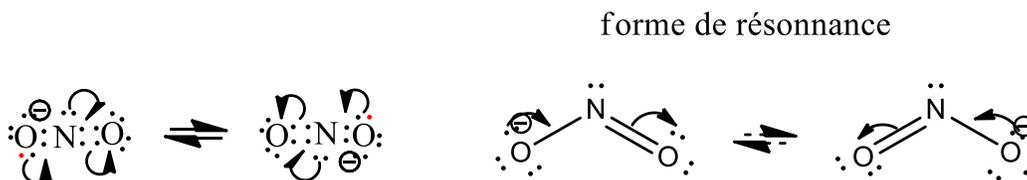
Nombre de doublets libres

$L=A-S=17-7=10$ soit 5 doublets (l'électron célibataire et un deuxième électron rajouté feront un sixième doublet et une charge (-) sur l'oxygène)

Calcul de la charge formelle sur l'azote $C_{(f)}N=5-3-2=0$

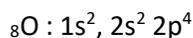
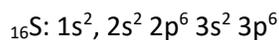
Calcul de la charge formelle sur l'azote $C_{(f)}O=6-1-6=-1$

Représentation:



c) SO_3

La Configuration électronique de chaque atome est:



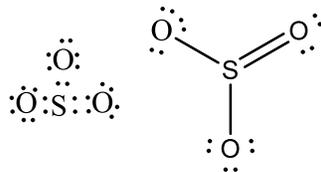
Nombre d'électrons partagés

$$S=N-A=(((3 \times 8)+8)-((3 \times 6)+6))=32-24=8 \text{ donc on a 4 liaisons covalentes.}$$

Nombre de doublets libres

$$L=A-S=24-8=16 \text{ soit 8 doublets}$$

Représentation:



Calcul de la charge formelle sur le soufre $C_{(f)}S = 6 - 4 = +2$

Calcul de la charge formelle pour les 2 oxygène $C_{(f)}O = 6 - 1 - 6 = -1$

d) HNO_3

La Configuration électronique de chaque atome est:

${}_1\text{H}: 1s^1$

${}_7\text{N}: 1s^2, 2s^2 2p^3$

${}_8\text{O}: 1s^2, 2s^2 2p^4$

Nombre d'électrons partagés

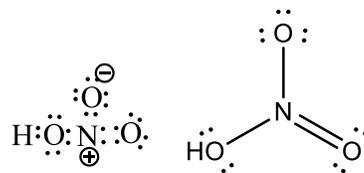
$S = N - A = ((2 + (3 \times 8) + 8) - (1 + (3 \times 6) + 5)) = 34 - 24 = 10$ donc on a 3 liaisons covalentes.

Nombre de doublets libres

$L = A - S = 24 - 10 = 14$ soit 7 doublets

Représentation:

⊕

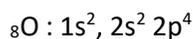
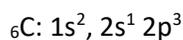


Calcul de la charge formelle sur le soufre $C_{(f)}N = 5 - 4 = +1$

Calcul de la charge formelle pour l'oxygène $C_{(f)}O = 6 - 1 - 6 = -1$

e) CO_3

La Configuration électronique de chaque atome est:



Calcul des électrons partagés:

$$S=N-A=(((3 \times 8)+8)-((2 \times 7+6)+4))=32-24=8 \quad \text{donc on a 4 liaisons covalentes}$$

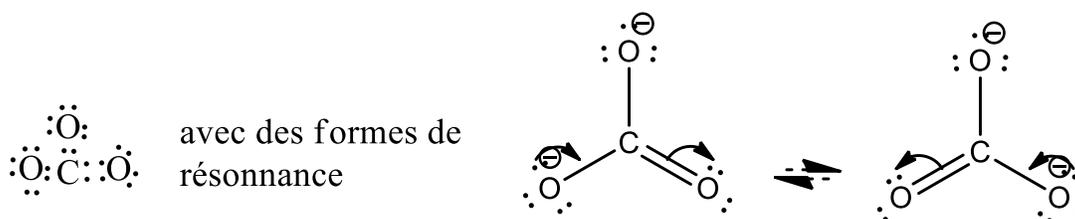
Calcul du nombre de doublets libres :

$$L=A-S=24-8=16 \text{ soit 8 doublets}$$

Calcul de la charge formelle sur le carbone $C_{(f)}C=4-4=0$

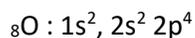
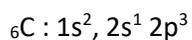
Calcul de la charge formelle sur les deux oxygènes $C_{(f)}O=6-1-6=-1$

Représentation:



f) CH_3CO

La Configuration électronique de chaque atome est:



Nombre d'électrons partagés:

$$S=N-A= ((3 \times 2)+(2 \times 8)+8)-((3 \times 1)+(6 \times 1)+(4+4))=30-17=13 \text{ électrons soit 6 liaisons covalente et 1}$$

électrons célibataire non partagé (qu'il faut soustraire du fait qu'il a été transféré à un atome (Cl, Br..) ou

un groupe d'atomes (OH, OEt, ...) lié au carbone après rupture de la liaison

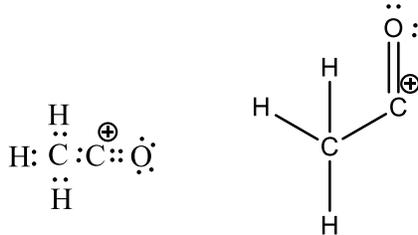
Nombre de doublets libres

$$L=A-S=17-13=4 \text{ soit 2 doublets}$$

Charge formelle sur l'oxygène: $C_{(f)}O=6-2-4=0$

Charge formelle sur le carbone : $C_{(f)}=4-3=+1$

Représentation:

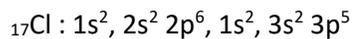
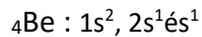


Quelles est la particularité de ces composés :



Pour ces trois composés on ne peut pas appliquer la règle de l'octet et du duet : **ils sont parti de la règle des exceptions.**

a) $BeCl_2$



L'application de la règle NASL doit tenir compte que le Béryllium se sature à 4 et pas à 8 électrons.

Nombre d'électrons partagés.

$S=(4+(2 \times 8))-((2+(2 \times 7)))=4$ soit 2 liaisons covalentes

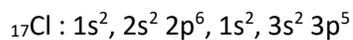
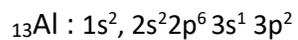
Nombre de doublet libres :

$L=16-4=12$ soit 6 doublets

Représentation :



b) $AlCl_3$



L'application de la règle NASL doit tenir compte que l'Aluminium se sature à 6 et pas à 8 électrons

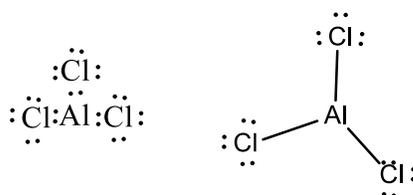
Nombre d'électrons partagés :

$$S = (6 + (3 \times 8)) - ((3 + (3 \times 7))) = 6 \text{ soit 3 liaisons covalentes}$$

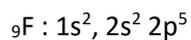
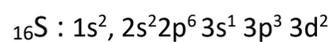
Nombre de doublets libres

$$L = 24 - 6 = 18 \text{ soit 9 doublets}$$

Représentation :



c) SF₆



L'application de la règle NASL doit tenir compte que le soufre peut se saturer à 12 et pas à 8 électrons

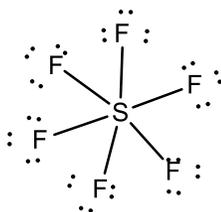
Nombre d'électrons partagés :

$$S = (12 + (6 \times 8)) - ((6 + (6 \times 7))) = 12 \text{ soit 6 liaisons covalentes}$$

Nombre de doublets libres :

$$L = 48 - 12 = 36 \text{ soit 18 doublets}$$

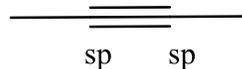
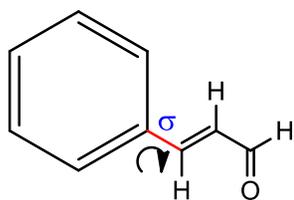
Représentation :



Exercice 3 : Parmi les composés organiques suivants. Quelles sont ceux qui sont linéaires, ceux qui sont plans, et ceux qui sont en 3D.

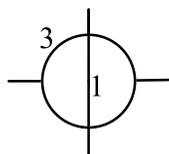
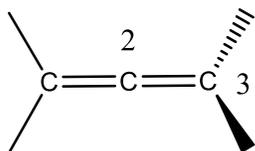
Réponse :

Il suffit pour cela de voir l'hybridation de chaque atome et les axes de symétrie et de rotation pour le savoir

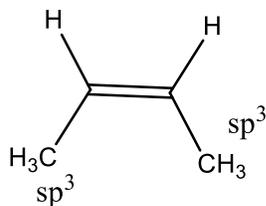


Le cycle benzénique est plan, les trois carbones de la chaîne sont hybridés sp^2 donc plan sauf que la liaison avec le cycle est une liaison sigma donc qui permet une rotation selon l'axe C-C donc le produit au final n'est pas plan pour cette raison

Les deux carbones sont hybridés Sp donc le composé est linéaire



Tous les atomes sont hybridés sp^2 mais la molécule n'est pas plane. on peut voir cela avec la projection de Newman



Cette molécule contient des atomes hybridés sp^3 donc n'est pas plane