

## Solution de TD N°3 : Molécules.

### Exercice 1 :

Quelle est le type de liaison (ionique, covalente ou covalente polaire) entre les atomes des molécules biatomiques : K-F ; H-F ; K-Cl ; H-Cl et H-H.

On donne l'électronégativité des atomes  $\chi$  : H (2,2), F (3,98), Cl (3,16) et K (0,82)

### **Solution**

Pour déterminer la nature d'une liaison on peu utiliser la différence d'électronégativité  $\Delta\chi$ .

Si  $\Delta\chi < 0,5$ , la liaison est **covalente**.

Si  $0,5 \leq \Delta\chi < 1,7$  (**1,67**), la liaison est **covalente polaire**.

Si  $1,7$ (**1,67**)  $\leq \Delta\chi$ , la liaison est **ionique**.

K-F:  $3,98 - 0,82 = 3,16 > 1,7$ . La liaison est **ionique**.

H-F:  $3,98 - 2,2 = 1,78 > 1,7$ . La liaison est **ionique**.

K-Cl:  $3,16 - 0,82 = 2,34 > 1,7$ . La liaison est **ionique**.

H-Cl:  $3,16 - 2,2 = 0,96 < 1,7$ . La liaison est **covalente polaire**.

H-H:  $2,2 - 2,2 = 0 < 0,5$ . la liaison est **covalente pure (apolaire)**.

### Exercice 2 :

- 1- Donner le schéma de LEWIS des molécules suivantes :  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{OCN}$ ,  $\text{COCl}_2$ ,  $\text{SnCl}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{PCl}_3$ ,  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{AlCl}_4^-$  (l'atome central est indiqué en gras)
- 2- Donner les types de liaisons de chaque molécule.
- 3- Calculer les charges formelles.
- 4- Ces molécules respectent-elles la règle de l'octet ?
- 5- A l'aide de la théorie de Gillespie (VSEPR), préciser le type et la géométrie des molécules.

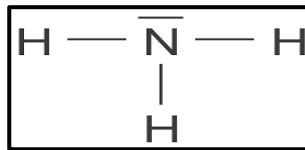
### **Solution**

- 1- Ecrire la formule brute : ainsi on connait tous les atomes de la molécule.
- 2- Ecrire la structure électronique de chaque atome.
- 3- Trouver le nombre Ne d'électrons externes de chaque atome. (Électrons de valence).
- 4- Trouver le nombre NI de liaisons covalentes que doit établir l'atome pour acquérir une structure en octet  $\text{NI} = (8 - \text{Ne})$ . (Exception pour H,  $\text{NI} = 2-1$ ).
- 5- Calculer le nombre Nnl de doublets non liants de chaque atome :  $\text{Nnl} = (\text{Ne} - \text{NI}) / 2$
- 6- L'atome qui a le plus de liaisons covalentes (de doublets liants) est un atome central
- 7- Disposer les autres atomes autour de l'atome central de façon à respecter la formule de la molécule et le nombre de liaisons covalentes de chaque atome.

- 8- Placer le(s) doublet(s) liant(s) entre les atomes de la molécule (liaisons covalentes).  
 9- Placer le(s) doublet(s) non liant(s) autour des atomes qui en possèdent.  
 10- Vérifier que chacun des atomes de la molécule satisfait à la règle de l'octet en étant entouré de 4 doublets.  
 11- Attribuer à chaque atome sa charge formelle.

**La formule brute : NH<sub>3</sub>**

${}^7\text{N} : 1s^2 2s^2 2p^3$ ,  ${}^7\text{N} : {}_2[\text{He}]2s^2 2p^3$ ,  $N_e = 5$ ,  $N_l = 8 - N_e = 8 - 5 = 3$ ,  $N_{nl} = N_e - N_l = 5 - 3/2 = 1$ . |  $\cdot \ddot{\text{N}} \cdot$   
 ${}^1\text{H} : 1s^1$ ,  $N_e = 1$ ,  $N_l = 2 - N_e = 2 - 1 = 1$ ,  $N_{nl} = N_e - N_l = 1 - 1/2 = 0$  H  $\cdot$



**La charge formelle :**

La somme des charges formelles de tous les atomes est égale à la charge totale Q de la molécule.

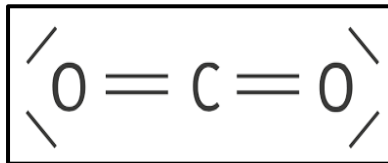
$$Q = \sum C_f$$

$$C_f = N_e - N_l - (2 \times N_{nl})$$

**N** :  $C_f = 5 - 3 - (2 \times 1) = 0$ , **H** :  $C_f = 1 - 1 - (2 \times 0) = 0$ . Donc **Q = 0**

**La formule brute : CO<sub>2</sub>**

${}^6\text{C} : 1s^2 2s^2 2p^2$ ,  ${}^6\text{C} : {}_2[\text{He}]2s^2 2p^2$ ,  ${}^6\text{C}^* : {}_2[\text{He}]2s^1 2p^3$   
 $N_e = 4$ ,  $N_l = 8 - N_e = 8 - 4 = 4$ ,  $N_{nl} = N_e - N_l = 4 - 4/2 = 0$ .  $\cdot \ddot{\text{C}} \cdot$   
 ${}^8\text{O} : 1s^2 2s^2 2p^4$ ,  ${}^8\text{O} : {}_2[\text{He}]2s^2 2p^4$ ,  $N_e = 6$ ,  $N_l = 8 - N_e = 8 - 6 = 2$ ,  $N_{nl} = N_e - N_l = 6 - 2/2 = 2$ .  $\cdot \ddot{\text{O}} \cdot$



**La charge formelle :**

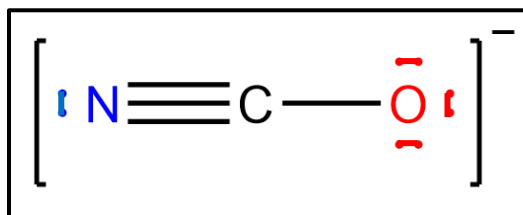
La somme des charges formelles de tous les atomes est égale à la charge totale Q de la molécule.

$$Q = \sum C_f$$

$$C_f = N_e - N_l - (2 \times N_{nl})$$

**C** :  $C_f = 4 - 4 - (2 \times 0) = 0$ , **O** :  $C_f = 6 - 2 - (2 \times 2) = 0$ . Donc **Q = 0**

La formule brute : **OCN**

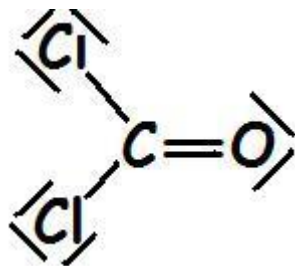


Le carbone C forme 4 liaisons, 3 liaisons (1 liaison triple) avec l'azote N et 1 liaison avec l'oxygène.

Donc il reste un électron célibataire sur l'atome O, l'atome d'oxygène va gagner un électron pour respecter la règle de l'octet et donc avoir 3 doublets non-liants

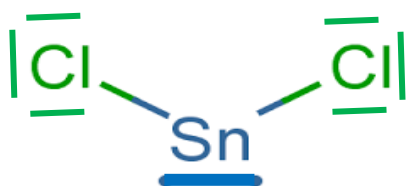
La charge formelle : **Q = -1**

La formule brute : **COCl<sub>2</sub>**



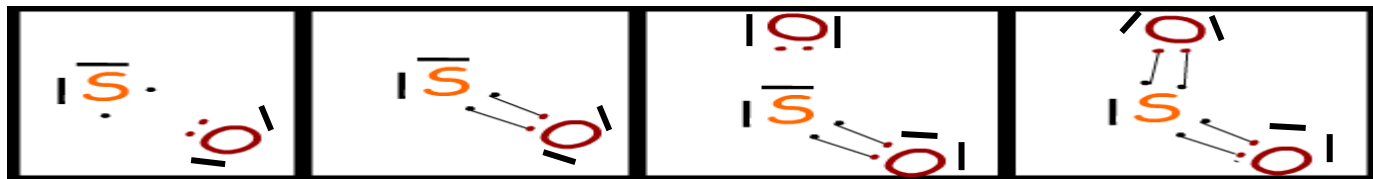
La charge formelle : **Q = 0**

La formule brute : **SnCl<sub>2</sub>**



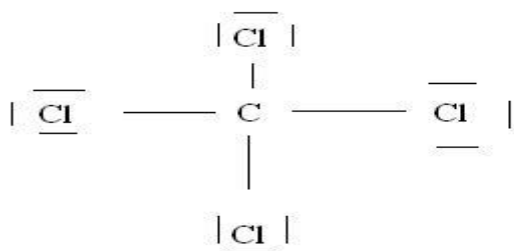
La charge formelle : **Q = 0**

La formule brute :  $\text{SO}_2$



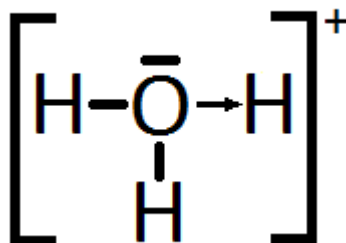
La charge formelle :  $Q=0$

La formule brute :  $\text{CCl}_4$



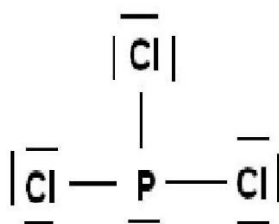
La charge formelle :  $Q=0$

La formule brute :  $\text{H}_3\text{O}^+$



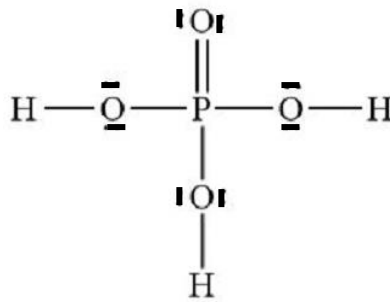
La charge formelle :  $Q=+1$

La formule brute :  $\text{PCl}_3$



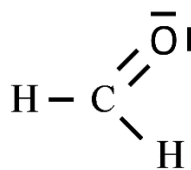
La charge formelle :  $Q=0$

La for mule brute :  $\text{H}_3\text{PO}_4$



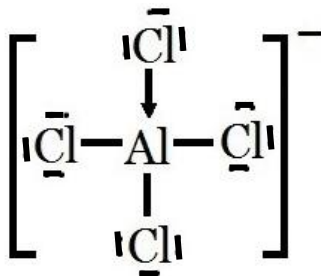
La charge formelle :  $Q=0$

La for mule brute :  $\text{CH}_2\text{O}$



La charge formelle :  $Q=0$

La for mule brute :  $\text{AlCl}_4^-$



La charge formelle :  $Q=-1$

4- Les molécules  $\text{CO}_2$ ,  $\text{OCN}$ ,  $\text{COCl}_2$ ,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{PCl}_3$ ,  $\text{AlCl}_4^-$  respectent la règle de l'octet

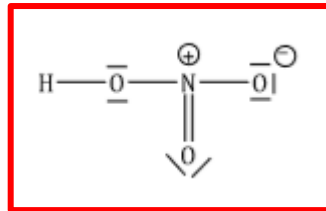
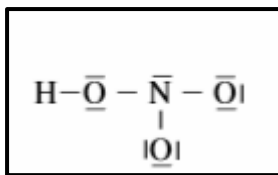
Les molécules  $\text{NH}_3$ ,  $\text{SnCl}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$  ne respectent pas la règle de l'octet

	Type selon VSEPR $\text{AX}_n\text{E}_m$	Géométrie
$\text{NH}_3$	$\text{AX}_3\text{E}$	Tétraèdre
$\text{CO}_2$	$\text{AX}_2$	Linéaire
$\text{OCN}$	$\text{AX}_2$	Linéaire
$\text{COCl}_2$	$\text{AX}_3$	Triangulaire (trigone plan)
$\text{SnCl}_2$	$\text{AX}_2\text{E}$	Triangulaire (en V)
$\text{SO}_2$	$\text{AX}_2\text{E}$	Triangulaire (en V)
$\text{CCl}_4$	$\text{AX}_4$	Tétraèdre
$\text{H}_3\text{O}^+$	$\text{AX}_3\text{E}$	Tétraèdre (pyramide)
$\text{PCl}_3$	$\text{AX}_3\text{E}$	Tétraèdre (pyramide)
$\text{H}_3\text{PO}_4$	$\text{AX}_4$	Tétraèdre
$\text{CH}_2\text{O}$	$\text{AX}_3$	Triangulaire (trigone plan)
$\text{AlCl}_4^-$	$\text{AX}_4$	Tétraèdre

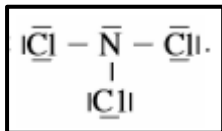
**Exercice 3 :**

Les formules de Lewis suivantes correspondent-elles effectivement aux formules moléculaires indiquées (molécules ou ions) ? Si elles sont incorrectes, rectifiez-les.

a-  $\text{HNO}_3$

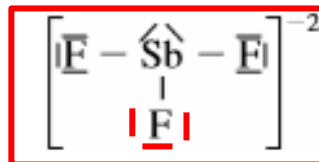
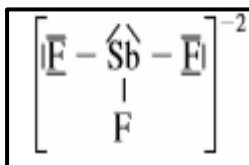


b-  $\text{NCl}_3$

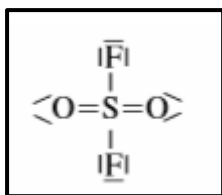


La formule de Lewis correspond à la formule bute  $\text{NCl}_3$

c-  $(\text{SbF}_3)^{2-}$



d-  $\text{SO}_2\text{F}_2$



La formule de Lewis correspond à la formule bute  $\text{SO}_2\text{F}_2$

**Exercice 4:**

- Calculer le pourcentage ionique de la liaison dans les molécules suivantes :

Molécule	CsF	CsCl	KF	KCl	H2
$\mu$ (expérimental) (D)	7,9	10,5	7,3	10,4	0
longueur de la liaison (Å)	2,34	2,9	2,55	2,67	0,95
% i	7,04	75,5	59,7	81,3	0