



Les modèles pour décrire la liaison chimique

17^e JIREC*, compte rendu des discussions d'ateliers

Marne-la-Vallée, 23-26 mai 2000

Roland Lissillour, animateur de ces ateliers

Les réflexions présentées dans ce qui suit sont parfois générales, parfois ponctuelles ; elles doivent être replacées dans le contexte d'une conférence où se côtoient des enseignants de lycée et d'université et où les idées et les expériences pédagogiques sont brassées. Il en résulte quelques propositions qui peuvent être utiles.

Trois sujets ont été abordés et débattus au sein des groupes :

- le modèle de Lewis et la théorie VSEPR en classe de seconde,
- les orbitales atomiques, les orbitales moléculaires, la théorie VSEPR et l'hybridation en classes préparatoires et premier cycle universitaire,
- les orbitales moléculaires, à tous les niveaux universitaires.

■ Sur le premier sujet, l'unanimité des participants s'est faite sur les propositions concernant le modèle de Lewis telles qu'elles sont données dans le « Document d'accompagnement » associé à la réforme de l'enseignement de la physique et de la chimie en classe de seconde pour la rentrée 2000 (faisant suite aux textes du *BO n° 6* du 12 août 1999). Ce document propose la stratégie suivante :

- la liaison se fait par paire d'électrons,
- on admet la règle de l'octet (du duet pour l'hydrogène),
- le nombre d'électrons de valence est déterminé, pour chaque atome, à partir de la configuration électronique exprimée sur la base des couches ; Exemples : H K^1 , $\text{C K}^2\text{L}^4$, $\text{N K}^2\text{L}^5$
- à partir de la formule brute de la molécule, il suffit de faire la demie somme des électrons de valence pour obtenir le nombre de doublets électroniques,
- on répartit ces doublets selon la règle de l'octet pour obtenir les doublets de liaison et les doublets non liants.

Une discussion sur les avantages et les inconvénients d'une telle approche a souligné les points suivants :

- Cette approche tient compte du fait que les élèves de seconde n'ont pas de notion de sous-couche s, p... qui sont évitées ici.
- Le carbone tétravalent est introduit sans difficulté.
- Il faut, la plupart du temps, préciser l'enchaînement des atomes dans la formule brute pour que l'élève aboutisse à la forme moléculaire la plus stable (HCN ou HNC ?).
- La notion de liaison donneur-accepteur n'a pas lieu d'être évoquée et peut éventuellement être reportée à des cours ultérieurs.

Quant à la géométrie moléculaire en classe de seconde, les applications de la théorie VSEPR ne posent aucun problème

pédagogique dans la mesure où elles sont limitées à des molécules simples, ayant comme structure un atome central entouré de substituants.

■ Sur le deuxième sujet, le modèle de l'hybridation a été évoqué mais repoussé en second cycle universitaire. Certains, notamment les chimistes théoriciens, étaient pour l'éradication pure et simple de ce modèle, mais d'autres y étaient attachés en soulignant qu'il restait un attribut du langage des chimistes organiciens. Un débat animé a conduit à la proposition suivante :

- La notion d'hybridation n'est pas nécessaire en début de cursus universitaire (la géométrie moléculaire peut être déterminée dans beaucoup de cas par la théorie VSEPR, la théorie des orbitales moléculaires – OM – n'a nul besoin de l'hybridation des orbitales atomiques – OA) ;
- Un étudiant en chimie doit cependant connaître cette théorie. Elle sera introduite au niveau de la licence.

La notion d'hybridation s'appuie sur la connaissance des orbitales atomiques qu'il faut introduire en première année d'université. Pour cela, l'évocation de l'équation de Schrödinger est incontournable, en évitant cependant les développements mathématiques (qui seront vus éventuellement en licence) et en se limitant aux résultats, à savoir la forme analytique des fonctions hydrogénoïdes et l'expression de l'énergie. A des degrés divers, on pourra introduire les définitions des probabilités, de la densité radiale, des valeurs moyennes de grandeurs physiques... Pour la suite, on utilisera les connaissances sur la forme des OA.

Pour la description des OA, on peut se limiter à présenter l'équation de Schrödinger et à introduire les notions de couche et de sous-couche.

Pour décrire la liaison par la méthode des orbitales moléculaires, commencer par les molécules diatomiques (O_2 , N_2 ...) n'est pas forcément l'approche la plus simple. Elle a toutefois l'avantage de ne pas soulever le problème de la localisation ou de la délocalisation des liaisons. Le principe de recouvrement maximum des OA en s'appuyant sur leur symétrie doit constituer l'idée directrice de la stratégie pédagogique. Cela ne nécessite aucun développement mathématique.

Il est possible d'introduire la liaison d'une molécule homonucléaire A-A avec la construction du diagramme des OM en mettant en évidence le rôle du recouvrement : un recouvrement positif conduit aux OM liantes, un recouvrement négatif aux OM antiliantes. La détermination de l'expression des OM en fonction des OA et de l'expression de



MANIFESTATIONS

l'énergie des OM en fonction de celles des OA dépend du temps imparti pour cet enseignement et du niveau de l'auditoire. Le diagramme des molécules hétéronucléaires A-B peut être explicité à partir des résultats précédents.

On peut ainsi construire un diagramme à partir des énergies des OA, de leur symétrie par rapport à l'axe internucléaire (σ ou π) et donc de leur type de recouvrement. La méthode des fragments permet d'étendre la description de la liaison aux molécules possédant plus de deux atomes.

■ Le troisième sujet a été abordé essentiellement par quelques exemples utilisant la méthode des fragments. Le premier exemple traité a été la molécule linéaire H-Be-H : les différentes OA de valence sont classées selon leur propriété de symétrie (symétrique ou antisymétrique) par rapport à trois plans de symétrie orthogonaux de la molécule. Il suffit ensuite de construire les OM (liantes, non liantes et antiliantes) sur la base des OA ainsi regroupées. L'obtention d'un diagramme qualitatif ne pose alors aucune difficulté si

l'on utilise la propriété que plus la symétrie d'une fonction est élevée, plus son énergie est basse.

Le deuxième exemple illustre la construction de la molécule H_6 octaédrique à partir des fragments H_4 plan carré (obtenu lui-même à partir de $H_2 + H_2$) et H_2 amené selon l'axe perpendiculaire au carré H_4 en son centre. Le diagramme qualitatif est obtenu assez facilement, sans calcul, en exploitant les propriétés de symétrie par rapport à quelques éléments de symétrie judicieusement choisis. Certains participants à cette discussion se sont révélés séduits par la simplicité avec laquelle les résultats sont obtenus, mais sceptiques sur la possibilité d'introduire de telles notions en première année de DEUG.

■ En conclusion, quel que soit le niveau de l'étudiant, l'apprentissage et l'utilisation de la notion d'OM doivent passer par une connaissance minimale de notions de symétrie.

* JIREC : Journées sur l'Innovation et la Recherche pour l'Enseignement de la Chimie.

L'ASW2000P

L'Automate pour la synthèse parallèle sous pression!



L'ASW2000P vous permettra de réaliser des réactions pressurisées.

Des procédures telles que le traitement, l'échantillonnage et l'analyse sont intégrées et réalisables pendant ou après la synthèse.

- Réactions automatisées sous pression.
- Jusqu'à 80 réactions en parallèle.
- Utilisation en parallèle de blocs réactionnels pressurisés et non-pressurisés.
- Haut débit associé à une manipulation facile et sûre.
- Addition de réactifs sous agitation, en chauffant ou en refroidissant sous conditions inertes.

www.chemspeed.com

Chemspeed Ltd. Suisse
Chemspeed Inc. USA Côte Est
Chemspeed Inc. USA Côte Ouest
Chemspeed Ltd. Angleterre

Téléphone +41 61 816 95 00
Téléphone +1 732 329 1225
Téléphone +1 707 251 5529
Téléphone +44 1276 670 668



Multiply your productivity!