

Représentation des espèces chimiques formules, représentations, projections

Gédéon Légaut

Table des matières

1	Formule brute	2
1.1	d'une molécule	2
1.2	d'un ion	2
2	Formule développée et semi-développée plane d'une molécule	3
2.1	Formule développée	3
2.2	Formule semi-développée plane d'une molécule	3
2.3	Remarque importante	4
3	Formule topologique d'une molécule	5
4	Représentation de Lewis d'une molécule	6
5	Représentation de Cram	7
6	Représentation de Neumann	8

Le terme **espèce chimique** est une expression permettant de désigner un atome, une molécule ou un ion.

Une **molécule** est un groupe d'atome qui sont chimiquement reliés entre eux de manière électriquement neutre. Une molécule est donc plus qu'un groupe d'atome : la description d'une molécule doit s'attacher à comprendre et à représenter les différentes liaisons chimiques présentes au sein de la molécule.

1 Formule brute

1.1 d'une molécule

La première étape quand on parle d'une molécule, avant même de parler des liens entre les atomes composant la molécule, c'est justement de décrire ces atomes qui constituent la molécule considérée : on a besoin de connaître 2 choses :

- le type d'atome mis en jeu (chaque atome sera représenté par son symbole¹ qu'on retrouve dans le tableau périodique)
- le nombre de chaque type d'atome (il sera indiqué sous la forme d'un indice en bas à droite du symbole de l'atome)

Ainsi, l'indication C_{12} désignera le fait qu'il y a 12 atomes de carbone C dans notre molécule.

Il ne reste plus qu'à se poser la question de l'ordre des atomes dans la formule brute :

1. on **commence** par C parce que le squelette des molécules organiques est un squelette d'atome de carbone
2. on continue avec H parce qu'il est toujours présent
3. puis on continue par O, N, et les autres atomes éventuels

Exemples : C_6H_{12} , C_2H_6O , CO_2 , H_2O , CH_4

Exercice 1 : Quelle est la composition de la molécule $Fe(OH)_3$? Solution en fin de document.

1.2 d'un ion

La seule chose qui change pour un ion, c'est qu'il faut rajouter une information sur la charge électrique : cela se fait par une expression en haut à droite de la formule brute.

La charge électrique élémentaire est $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C.

L'expression retenue est **le nombre de charge élémentaire** suivi du **signe de la charge** que porte l'ion.

Exemples : CO_3^{2-} , PO_4^{3-} , N^{3-} , Cl^- , Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+}

L'ion carbonate CO_3^{2-} porte donc la charge $-2e$ et l'ion sodium Na^+ porte la charge électrique $+e$.

1. Rappel : le symbole d'un atome est constitué d'une ou deux lettres, la première étant systématiquement une majuscule, l'éventuelle seconde lettre étant une minuscule. Dans certains tableaux périodiques, les derniers atomes trouvés dans représentés avec 3 lettres le temps que l'association IUPAC leur donne leur nom officiel.

2 Formule développée et semi-développée plane d'une molécule

Maintenant qu'on sait décrire avec la formule brute les atomes présents dans une molécule, on va s'intéresser aux liens chimiques entre ces atomes. Ces liaisons chimiques peuvent être simple (—), double (==) ou triple (≡) : les symboles entre parenthèses seront utilisés pour les représenter.

2.1 Formule développée

La formule développée plane correspond à l'idée la plus simple qu'on peut se faire : **on représente toutes les liaisons et tous les atomes, le tout dans le plan de la feuille. On ne se préoccupe ni de la géométrie 3D de la molécule, ni de l'orientation des liaisons les unes par rapport aux autres.**

Exemples

acide cyanhydrique	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$
eau	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$
méthane	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
méthanal	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagup \\ \text{H} \end{array}$
éthanol	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$
dioxyde de carbone	$\text{O}=\text{C}=\text{O}$

2.2 Formule semi-développée plane d'une molécule

A la longue, il devient pénible d'écrire toutes les liaisons vers les hydrogènes, surtout quand la molécule devient grande : on a donc choisit de **grouper** les hydrogènes sur l'atome qui les porte : cela donne la formule semi-développée.

Exemples

acide cyanhydrique	$\text{HC}\equiv\text{N}$
eau	H_2O
méthane	CH_4
méthanal	$\text{CH}_2=\text{O}$ ou $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$
éthanol	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$
dioxyde de carbone	$\text{O}=\text{C}=\text{O}$

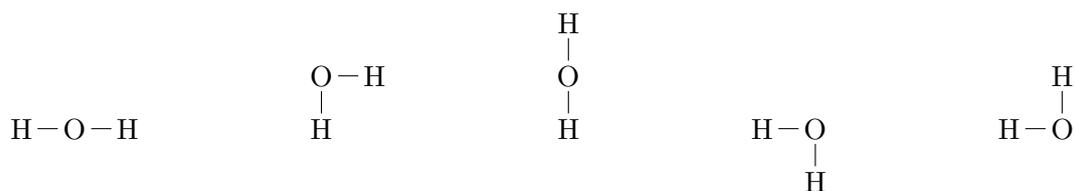
La deuxième représentation du méthanal est un petit peu plus pertinente que la première car c'est bien l'atome de C qui est relié à l'atome d'oxygène O, mais il n'est pas possible de tout le temps faire

comme on vient de faire en passant le terme en H_2 de l'autre côté du carbone C : il suffit de regarder la molécule d'éthanol juste dessous pour voir que le carbone au milieu de la molécule aura toujours une liaison du côté du H_2 .

2.3 Remarque importante

Au début de ce qu'on a vu sur la formule développée, il est dit **On ne se préoccupe ni de la géométrie 3D de la molécule, ni de l'orientation des liaisons les unes par rapport aux autres.**

La remarque porte sur la deuxième partie de la phrase : **ni de l'orientation des liaisons les unes par rapport aux autres.** On ne s'intéresse pas encore à représenter une molécule d'une manière aussi fidèle que possible de la réalité. Ainsi, toutes les molécules suivantes sont identiques :



La seule chose qui compte, c'est que l'enchaînement des atomes au sein de la molécule soit correct ! Peut importe l'orientation des liaisons les unes par rapport aux autres.

3 Formule topologique d'une molécule

La chimie organique est la branche de la chimie qui étudie les molécules dites « organiques » : ce sont les molécules que l'on trouve dans les végétaux, les animaux et les êtres humains. Même si on peut les fabriquer (on dit synthétiser) à partir de poudres en laboratoire.

La chimie organique est aussi appelée « chimie du carbone » car toutes ces molécules ont un squelette constitué d'atome de carbone.

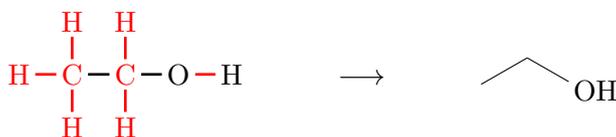
Une molécule organique a donc un squelette carboné. Comme vous l'avez vu (ou vous le verrez bientôt), un atome de carbone est **tétravalent** : il établit 4 liaisons covalentes (il y a quelques exceptions, mais elles ne sont pas nombreuses).

On sait donc que chaque atome de carbone C a les liaisons chimiques qui lui permettent d'être dans le squelette de la molécule, on sait qu'il doit avoir 4 liaisons, donc on sait combien de d'atome d'hydrogène lui sont attachés chimiquement. Ce qui permet de comprendre que la formule topologique d'une molécule permet de retrouver toutes les infos contenues dans la formule développée ou semi-développée si on prend les règles suivantes :

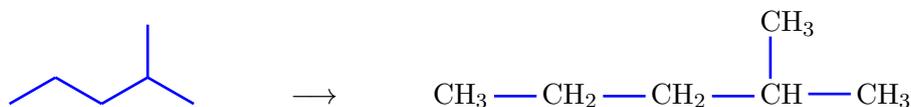
- les liaisons C—C sont représentées par un trait
- si plusieurs traits se suivent, on forme une ligne brisée
- les atomes de carbone ne sont pas représentés
- les liaison C—H et les H concernés par ces liaisons ne sont pas représentés
- les hydrogènes H autres que ceux des liaisons C—H sont groupés sur l'atome qui les porte

Exemple 1 : la molécule d'éthanol a pour formule développée
$$\begin{array}{ccccccc} & & & & \text{H} & \text{H} & \\ & & & & | & | & \\ \text{H} & - & \text{C} & - & \text{C} & - & \text{O} - \text{H} \\ & & & & | & | & \\ & & & & \text{H} & \text{H} & \end{array}$$

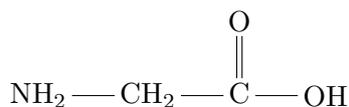
On peut représenter en rouge toutes les parties qui ne seront pas représentées dans la formule topologique :



Exemple 2 : dans cet exemple, toutes les parties en bleu dans la formule topologique se retrouvent en bleu dans la formule semi-développée



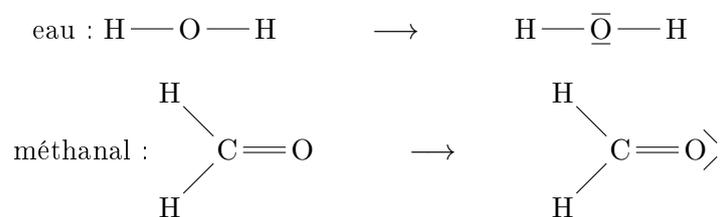
Exercice 2 : voici l'acide aminé appelé glycine. Quelle est sa formule topologique ? Réponse en fin de document.



4 Représentation de Lewis d'une molécule

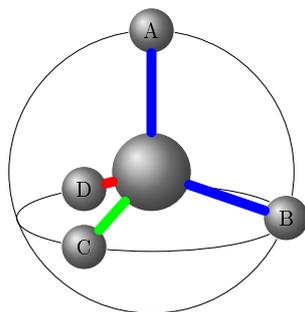
Pour avoir la représentation de Lewis d'une molécule, on part de la formule développée et on rajoute les **doublets non-liants** présents sur les atomes de manière à ce qu'ils respectent la règle de l'octet et du duet.

Une autre manière de dire la même chose : dans la représentation de Lewis d'une molécule, on représente tous les doublets, qu'ils soient liants ou non-liants.



5 Représentation de Cram

Le but de la représentation de Cram est d'indiquer la **géométrie** en 3 dimensions de la molécule.



Sur l'exemple ci-dessus, la molécule de méthane CH_4 est représentée dans des cercles qui permettent de comprendre que

- les liaisons **bleues** sont dans le plan de la feuille (donc les atomes d'hydrogène *A* et *B* et l'atome central de carbone sont dans le plan de la feuille)
- la liaison **verte** vient vers nous (donc l'atome d'hydrogène *C* est en **avant** du plan de la feuille)
- la liaison **rouge** part vers le fond (donc l'atome d'hydrogène *D* est en **arrière** de ce plan)

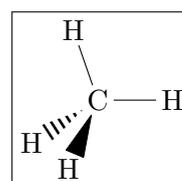
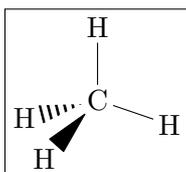
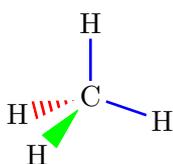
Dans la représentation de Cram, on représente les **liaisons** entre atomes. On représente différemment ces liaisons suivant qu'elles sont

- dans le plan de la feuille —
- en avant du plan de la feuille \blacktriangleleft
- en arrière du plan de la feuille $\cdots||$

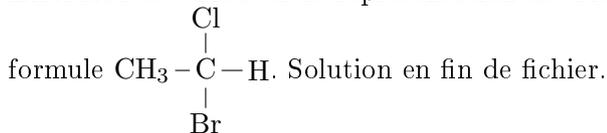
On rajoute une contrainte : **on met le maximum possible de liaison dans le plan de la feuille** dans un souci de simplification et surtout de clarté ! Quand on représente la molécule au crayon, on essaye d'être **le plus fidèle possible** dans les angles.

Dans l'exemple du méthane CH_4 ci-dessus, voici qu'elle serait sa représentation de Cram :

- à gauche, la représentation de Cram avec les liaisons en couleur pour bien se repérer avec le schéma de départ ci-dessus
- à droite, ce qui est attendu dans l'un ou l'autre des encadrés



Exercice 3 : Trouver la représentation de Cram de l'atome central de carbone C de la molécule de

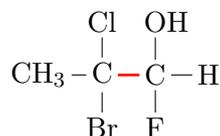


Exercice 4 : Trouver la représentation de Cram de la molécule d'éthanol de formule $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$. La correction est en fin de document.

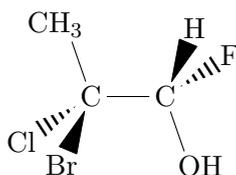
6 Représentation de Neumann

Cette représentation nécessite d'avoir vu en cours la notion de conformation : on passe d'une conformation à une autre par rotation autour d'une liaison simple C—C (une liaison double ou triple empêchant la rotation).

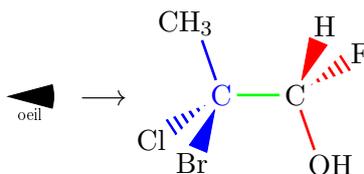
Considérons la molécule ci-dessous et regardons comment on pourrait représenter les différentes conformations par rotation autour de la liaison en rouge.



Une des représentations de Cram de cette molécule est la suivante :

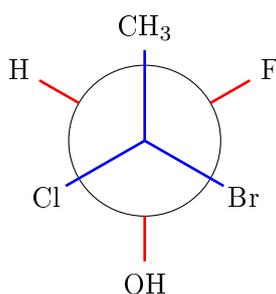


Si on regarde par la gauche cette molécule dans l'axe de la liaison rouge, on peut dire que les liaisons en **bleu** sont sur le devant et les liaisons en **rouge** sont sur le derrière de la liaison C—C centrale en **vert**.

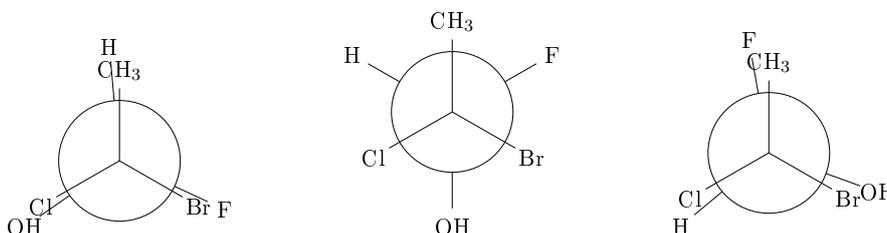


On représente

- l'atome de carbone en **bleu** par un cercle
- les liaisons sur le devant (en bleu) **partent du centre** du cercle
- les liaisons en arrière (en rouge) sont en partie cachées par le cercle qui représente l'atome de carbone central et **il n'y a qu'une partie des liaisons qui dépasse**



Il y a une infinie de conformation ; en voici quelques unes (on garde fixe la partie de devant et on fait tourner la partie arrière) :



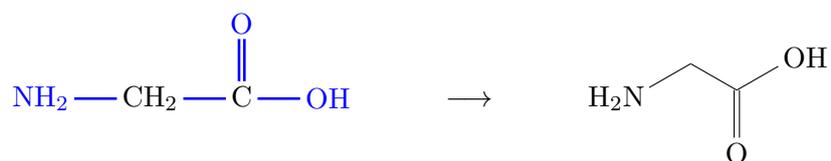
Correction des exercices

Solution 1 : Quelle est la composition de $\text{Fe}(\text{OH})_3$?

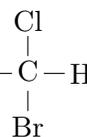
Cette molécule contient 1 atome de Fe et 3 groupes OH, soit en tout

- 1 atome Fe
- 3 atomes O
- 3 atomes H

Solution 2 : Formule topologique de la glycine :

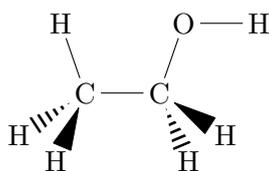


Solution 3 : représentation de Cram de l'atome central de carbone C de $\text{CH}_3-\text{C}-\text{H}$



Il y a 2 possibilités différentes qui ne sont pas superposables, donc deux molécules différentes. Quand on représente la molécule au crayon, on essaye d'être le plus fidèle possible dans les angles.

Solution 4 : représentation de Cram de la molécule d'éthanol de formule $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH}$



On met un maximum de liaison dans le plan. La partie C-O-H a une géométrie coudée plane, donc ces 2 liaisons doivent être dans le plan. Quand on représente la molécule au crayon, on essaye d'être le plus fidèle possible dans les angles.