

Composition de la boîte de modèles moléculaires

Élément	Symbole	Couleur	Figure	Type	Quantité
Hydrogène	H- (terminal)	blanc	10	H1 terminal (s) H-	60
Carbone	C(C4)	noir	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	25
	C(C3)	noir	4	Trigonal plan (sp^2) 120°	16
	C(C2)	noir	6	Digonal linéaire (sp) 180°	4
	NE4	bleu	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	6
Azote	N3	bleu	2	Trigonal pyramidal (sp^3) 109,5°	4
	NE3	bleu	4	Aromatique (sp^2) 120°	2
	NE2	bleu	6	Digonal (sp) 180°	2
	O(O2)	rouge	3	Divalent -O- 109,5°	12
Oxygène	O(O1)	rouge	5	Carbonyle O	8
	O(O4)	rouge	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	2
Chlore	Cl (terminal)	vert	9	Terminal	8
	Vert (V4)	vert	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	1
Brome/Fluor	Br/F (terminal)	brun	9	Terminal	8
Iode	I (terminal)	violet	9	Terminal	2
Soufre	S(S4)	jaune	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	1
	S(S2)	jaune	3	Divalent -S- 109,5°	2
Phosphore	P(P4)	(violet)	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	2
Métal	Me(Me4)	gris	1	Tétraédrique (sp^3) 109,5°	1
	Me(Me5)	gris	7	Trigonal bipyramidal ou bipyramide à base triangulaire (sp^3d)	1
	Me(Me6)	gris	8	Octaédrique -90°	1

+ 4 orbitales matérialisées hybrides, pures ou doublet électronique non liant
8 orbitales matérialisées liantes des liaisons π (π)

Les éléments

Les structures des atomes sont basées sur la théorie d'hybridation des orbitales atomiques : sp , sp^2 , sp^3 , dsp^2 , dsp^3 .

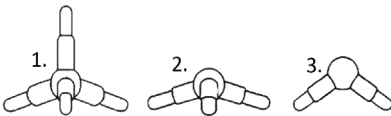


Figure 1 : Structures d'hybridation sp^3

- 1. **Tétraédrique** : hybridation sp^3 avec 4 liaisons σ à 109,5°.
- 2. **Pyramidale** : structure sp^3 simplifiée, avec 3 liaisons σ à 109,5°.
- 3. **Digonale** : structure sp^3 simplifiée, seules sont représentées les 2 liaisons σ à 109,5°.

Cas des atomes -O- et -S- .



Figure 2 : Structures d'hybridation sp^2

- 4. **Trigonale** : hybridation sp^2 avec 3 liaisons σ à 109,5° et une liaison π .
- 5. **Carbonyle C=O** : structure sp^2 simplifiée, avec une liaison σ et une liaison π dans la même direction.

Cas de C=O ; N=O.

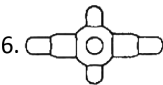


Figure 3 : Structure d'hybridation sp

- 6. **Digonale linéaire** : hybridation sp avec 2 liaisons σ à 180° et 2 liaisons π .

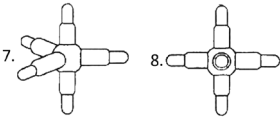


Figure 4 : Structures d'hybridation d^*sp^3

- 7. **Bipyramidale triangulaire** : hybridation dsp^3 avec 5 liaisons σ à 120° et 90°.
- 8. **Octaédrique** : hybridation d^2sp^3 avec 6 liaisons σ à 90°.

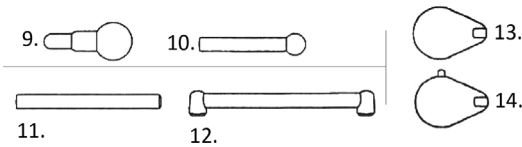
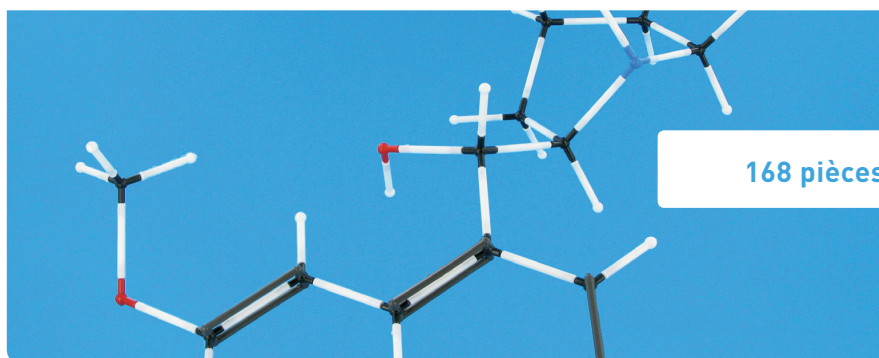


Figure 5

- 9. **Monovalent** : orbitale s avec une liaison σ .
- 10. **Atome H-** : atome d'hydrogène avec une liaison σ .
- 11. **Liaison σ** : liaisons simples ou σ , rigide ou flexible.
- 12. **Raccord π** : raccord ponté représentant $\frac{1}{2}$ d'une liaison π .
- 13. **Orbitale non-liante** : représentation d'une paire d'électrons libres.
- 14. **Orbitale liante** : orbitales avec possibilité de recouvrement latéral pour former une liaison π .



BOÎTE DE MODÈLES MOLECULAIRES

Manipuler les molécules pour les comprendre



© Ciaco & SASM – boîte composée pour CIACO srl,
2, Grand-Rue 1348 Louvain-la-Neuve, Belgique,
par SASM, 15, avenue des Grenots, 91150 Étampes, France

DUC

Échelle et longueur des liaisons

Échelle de représentation : 4 cm/Å

La collection ne propose que des liaisons à longueur fixe de façon à simplifier le montage des structures. Seule la dimension des atomes C ; O ; H permet de différencier quelques « longueurs de liaisons » :

C-C : 6 cm/1,54 Å

C=C : 5,7 cm/1,33 Å

C $\equiv$ C : 5,5 cm/1,20 Å

C=O : 5,5 cm/1,45 Å

O-H : 4 cm/0,96 Å

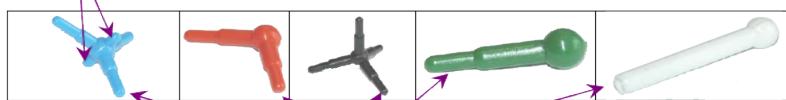
C-H : 4 cm/1,10 Å

Les modèles sont donc une représentation à l'échelle des atomes et des liaisons. Ils permettent d'observer la rotation autour des liaisons, à savoir simuler le mouvement des atomes à l'intérieur d'une molécule. Il est également possible de visualiser les différentes fonctions ainsi que les divers isomères et stéréoisomères.

Pièces des modèles moléculaires

- La « boule » représente le noyau de l'atome.
- Le noyau de l'atome est entouré des connections des différentes liaisons possibles, sous forme de « pattes et plots ».

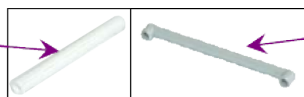
Liaisons possibles : plots



Liaisons possibles : pattes

- Les liaisons sont modélisées par :
 - des tubes **blancs** lorsqu'il s'agit de « liaisons simples »
 - des tubes **gris** lorsqu'il s'agit de « liaisons doubles ou triples »

Liaisons simples



Liaisons doubles
ou liaisons triples

On utilise les plots pour représenter les liaisons multiples ; les pattes sont quant à elles obligatoirement occupées par des liaisons simples, c'est-à-dire : **doublets liants** ou **doublets non-liants**.

