

# Représentation des espèces chimiques

## Formules brutes

Il s'agit d'une notation qui indique la nature et les proportions des différents éléments chimiques.

Exemples :

- Eau :  $H_2O$
- Dioxyde de carbone :  $CO_2$
- Acide acétique :  $C_2H_4O_2$

L'écriture d'une formule brute se fait en suivant quelques règles de base :

- chaque élément chimique est représenté par son symbole atomique.
- le nombre (ou la proportion) de chaque élément est noté en indice.
- un symbole sans indice est associé à une quantité « 1 ».
- dans le cas d'un ion, le nombre et signe des charges élémentaires portées est noté en exposant.

Dans le cas de molécules simples il est parfois possible de déduire la formule brute du nom de la molécule. Il est par exemple courant de trouver les préfixes suivant :

- « mono » pour un
- « di » pour deux
- « tri » pour trois
- On trouve également le terme oxyde qui désigne l'oxygène

Ainsi on peut facilement établir par exemple que :

- le dihydrogène  $H_2$  est une molécule constituée de deux atomes d'hydrogène.
- le monoxyde de carbone  $CO$  est une molécule constituée d'un atome de carbone et d'un atome d'oxygène.
- le dioxyde de soufre  $SO_2$  est une molécule constituée d'un atome de soufre et de deux atomes d'oxygène.

La formule brute d'un ion comporte aussi un exposant.

Exemples :

- L'ion cuivre  $Cu^{2+}$  est formé d'un élément cuivre et présente un défaut de deux d'électrons.
- L'ion hydroxyde  $HO^-$  est composé d'un élément hydrogène, d'un élément oxygène et présente un excès d'un électron.
- L'ion acétate  $C_2H_3O_2^-$  est composé de deux éléments carbone, de cinq éléments hydrogène, de deux éléments oxygène, il présente un excès d'un électron.

## Formules brutes de quelques espèces chimiques courantes

Nom	Formule brute
Dioxygène	O <sub>2</sub>
Diazote	N <sub>2</sub>
Dioxyde de carbone	CO <sub>2</sub>
Monoxyde de carbone	CO
Eau	H <sub>2</sub> O
Méthane	CH <sub>4</sub>
Propane	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
Ion hydrogène	H <sup>+</sup>
Ion hydroxyde	HO <sup>-</sup>
Ion sulfate	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>
Chlorure de sodium	NaCl
Hydroxyde de sodium	NaOH

## Formules développées

Une formule développée est la représentation d'une molécule qui fait figurer les liaisons entre atomes.

Une formule développée apporte davantage d'informations que la formule brute :

- elle indique aussi la composition de la molécule
- elle permet de visualiser l'enchaînement des atomes.
- donne une idée élémentaire de la géométrie de la molécule.
- permet de faire apparaître des groupes particuliers d'atomes (groupes caractéristiques) qui ont une influence sur la réactivité de la molécule.
- permet de distinguer des molécules ayant la même composition (donc la même formule brute) mais dont l'enchaînement des atomes est différent (de telles molécules sont dites isomères).

Inconvénients : l'écriture d'une formule développée nécessite parfois beaucoup de place.

### Qu'est-ce qu'une liaison ?

Dans une molécule on dit que deux atomes sont liés lorsqu'il existe entre eux une interaction qui les maintient ensemble

Cette interaction se fait entre les deux noyaux atomiques et une partie des électrons de chacun d'entre eux. Elle correspond pour chaque atome à un état plus stable que s'ils étaient isolés par conséquent ils ne peuvent quitter cet état (et donc rompre la liaison) que si une énergie suffisante leur est fournie (par exemple sous forme de rayonnement lumineux ou lors d'une transformation chimique).

On peut comparer la stabilité acquise par un atome grâce à une liaison à celle obtenue lorsqu'il gagne des électrons pour compléter sa couche externe (règles du duet et l'octet)

En effet (cette notion sera étudiée en première S), la formation d'une liaison peut être interprétée comme la mise en commun d'un électron par chacun des atomes liés, par conséquent on peut considérer que chaque atome bénéficie d'un électron supplémentaire. Les éléments chimiques susceptibles de former une ou des liaisons sont donc ceux qui ont besoin de gagner des électrons pour compléter leur couche externe, ils sont principalement situés dans les colonnes de droite du tableau périodique (à l'exception de la toute dernière qui comporte les gaz nobles).

## On distingue plusieurs types de liaisons :

Les liaisons simples correspondent à l'établissement d'une seule liaison entre deux atomes, elles sont symbolisées par un trait joignant les deux atomes liés.

Exemple : la liaison simple d'une molécule de dihydrogène  $\text{H}-\text{H}$

Les doubles liaisons (ou liaisons doubles) correspondent à l'établissement de deux liaisons entre deux atomes. Elles sont symbolisées par un double trait (deux traits parallèles) verticaux ou horizontaux joignant les deux atomes liés.

Exemple : la double liaison d'une molécule de dioxygène  $\text{O}=\text{O}$

Les triples liaisons (ou liaisons triples) correspondent à l'établissement simultané de trois liaisons entre deux atomes.

Exemple : la triple liaison d'une molécule de diazote.  $\text{N}\equiv\text{N}$

## Nombres de liaisons des principaux éléments chimiques

Chaque élément chimique ne forme qu'un nombre précis de liaisons. Pour être correcte une formule développée doit respecter ce nombre il est donc nécessaire de connaître le nombre de liaisons correspondant aux éléments les plus courants.

- Hydrogène : 1 liaison
- Carbone : 4 liaisons
- Oxygène : 2 liaisons
- Azote : 3 liaisons
- Chlore : 1 liaison

## Écrire une formule développée

La formule développée est écrite en suivant les règles suivantes:

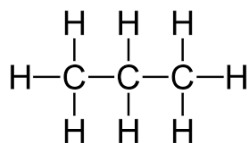
- tous les atomes sont individuellement représentés par leur symbole (si par exemple la molécule comporte 3 carbones alors le symbole C y figure 3 fois.
- les liaisons sont représentées par leur symbole
- chaque élément chimique doit comporter le nombre de liaisons qui lui est propre (1 pour l'hydrogène, 4 pour le carbone etc)

Ensuite, par tâtonnements, on tente de disposer les atomes de manière à obtenir une formule qui respecte ces règles de base. Il peut arriver que différentes formules développées soient possibles dans ce cas on parle de molécules isomères. Il est parfois nécessaire de disposer d'informations supplémentaires (présence de certains enchaînements, de groupes caractéristiques, de liaisons multiples etc) pour pouvoir conclure.

## Formule développée d'une molécule organique

Les espèces chimiques organiques sont toujours constituées de carbone et d'hydrogène, parfois d'oxygène et d'azote, éventuellement d'autres éléments. Les atomes de carbone forment ce qu'on appelle le squelette de la molécule auquel se rattachent les autres atomes et parfois des groupements carbonés. Pour établir la formule développée d'une molécule organique, il est préférable de commencer par noter les carbones et chercher leur enchaînement tandis que les hydrogènes ne sont ajoutés qu'à la fin.

**Exemple du propane** : sa formule est  $C_3H_8$ , les 3 carbones sont liés en ensemble pour former le squelette de la molécule et les hydrogènes se lient avec les carbones pour toutes les liaisons restantes



## Formules semi-développées

Une formule semi-développée est la représentation d'une molécule où figurent :

- ses différents atomes (représentés par leur symbole atomique)
- les différentes liaisons (simples, doubles, ou triples) entre atomes à l'exception de celles entre un hydrogène et un autre atome

Une formule semi-développée s'écrit en suivant les mêmes règles qu'une formule développée sauf pour les atomes d'hydrogène :

- leur symbole (H) est noté après celui de l'atome auquel ils sont liés
- si un même atome porte plusieurs hydrogènes alors leur symbole est suivi d'un indice précisant leur nombre (comme cela se fait dans une formule brute)

Exemples :

Un carbone hydrogéné en bout de chaîne se note en formule développée :  $\begin{array}{c} H \\ | \\ -C-H \\ | \\ H \end{array}$

et en formule semi-développée :  $-CH_3$

Un carbone hydrogéné à l'intérieur d'une chaîne se note en formule développée :  $\begin{array}{c} H \\ | \\ -C- \\ | \\ H \end{array}$

et en formule semi-développée :  $-CH_2-$

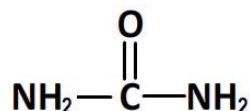
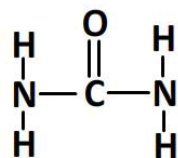
Un groupe hydroxyle (caractéristique des alcool) se note en formule développée :  $-O-H$

et en formule semi développée :  $-OH$

L'avantage d'une formule semi-développée est de présenter une forme plus compacte qu'une formule développée et plus rapide à noter en particulier pour les molécules organiques qui peuvent comporter de très nombreux hydrogène.

Exemples de formules développées et semi-développées :

L'urée :



L'acide lactique :

