

**Etude des connaissances relatives à la détermination de la géométrie des molécules organiques maîtrisées par de futurs enseignants algériens de sciences physiques : de Gillespie à l'hybridation**

**Study of knowledge related to the determination of the geometry of organic molecules by future teachers of Algerian physical sciences: from Gillespie to hybridization**

**Hazzi Salah <sup>1\*</sup>, Mazouze Brahim <sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Ecole Normale Supérieure Kouba, Algérie, salah.hazzi@g.ens-kouba.dz

<sup>2</sup> Ecole Normale Supérieure Kouba, Algérie, mazouze.brahim@g.ens-kouba.dz

**Réception:** 25/04/2021, **Acceptation:** 23/05/2021, **Publication:** 08/06/2021

**Résumé :** l'objet de ce travail est d'identifier les connaissances du contenu disciplinaire relatif au concept de la géométrie des édifices covalents maîtrisées par de futurs enseignants de l'Ecole Normale Supérieure (ENS) de Kouba (Alger). Pour décrire cette géométrie, deux méthodes (basées toutes les deux sur le modèle de Lewis) sont proposées : la théorie de Gillespie utilisant la méthode (VSEPR) et la théorie de l'hybridation utilisant la liaison de valence(TBV). Nous chercherons à analyser dans quelle mesure la détermination de cette « géométrie » sous l'angle des deux modèles a été assimilée par les étudiants ? L'analyse des réponses à un questionnaire écrit et des échanges enregistrés entre étudiants lors de séquences d'activités de groupes montre que, beaucoup de futurs enseignants rencontrent des difficultés pour mettre en œuvre une procédure systématique de raisonnement pour représenter la géométrie des édifices covalents sous le formalisme des deux théories. La correspondance entre les deux procédés de détermination de la géométrie des molécules n'est prise en compte que par une infime minorité d'étudiants. De plus, diverses conceptions alternatives concernant aussi bien les concepts de l'hybridation que celle de la théorie de Gillespie apparaissent. **Mots-clés :** liaison chimique, géométrie, VSEPR, Lewis, hybridation, structure covalente,

**Abstract:** The purpose of this work is to identify the knowledge of the disciplinary content related to the concept of the geometry of covalent buildings mastered by future teachers of the Ecole Normale Supérieure (ENS) of Kouba

---

\* Auteur correspondant

(Algiers). To describe this geometry, two methods (both based on the Lewis model) are proposed: the Gillespie theory using the method (VSEPR) and the theory of hybridization using the valence bond (TBV). We will try to analyze to what extent the determination of this "geometry" from the angle of the two models has been assimilated by the students? The analysis of the answers to a written questionnaire and the exchanges recorded between students during group activity sequences show that many future teachers encounter difficulties to implement a systematic reasoning procedure to represent the geometry of the covalent buildings under the formalism of the two theories. The correspondence between the two methods of determining the geometry of the molecules is taken into account by only a tiny minority of students. Moreover, various alternative conceptions concerning the concepts of hybridization as well as that of Gillespie's theory appear.

**Keywords:** chemical bond, geometry, VSEPR, Lewis, hybridization, covalent structure,

- **Introduction:**

La détermination de la géométrie de quelques édifices covalents peut être déterminée à partir de leurs structures de Lewis par deux méthodes : la théorie de Gillespie utilisant la méthode (VSEPR) et la théorie de l'hybridation des orbitales atomiques utilisant la liaison de valence. L'extension de la méthode VSEPR à l'hybridation des orbitales atomiques répond à un souci de réconcilier les deux théories en une seule image cohérente de la structure électronique et de la géométrie des molécules organiques. Pour appliquer ces règles il faut connaître la structure de Lewis de la molécule, qui elle-même ne peut être établie qu'à partir des configurations électroniques des atomes, connaissant la valeur de Z de l'élément considéré. Celles-ci, constituent donc le vrai point de départ. Les lacunes dans la maîtrise de ces concepts peuvent représenter un obstacle pour l'interprétation de la réactivité des composés organiques. L'objet de ce travail est d'identifier les connaissances du contenu disciplinaire relatif à ces concepts, maîtrisées par de futurs enseignants de l'Ecole Normale Supérieure (ENS) de Kouba (Alger). Nous chercherons à analyser dans quelle mesure la détermination de cette « géométrie » sous l'angle des deux modèles a été assimilée par les étudiants ? L'étude a été réalisée auprès de 50 étudiants de la licence de sciences physiques du secteur de formation à l'enseignement, futurs professeurs de lycée, de l'ENS de Kouba (Alger). Ce sont des étudiants ayant suivi le même cours de chimie organique durant l'année universitaire 2017-2018 et possédant plusieurs

éléments du registre des modèles à leur disposition. C'est à leur capacité à les mobiliser pour déterminer la géométrie des molécules organiques que nous allons nous intéresser.

## 1. Le cadre contextuel

### *Modélisation de la liaison covalente*

Le modèle de Lewis, bien que relativement simple, met implicitement en jeu de nombreuses connaissances. C'est en première année du cycle secondaire que les élèves abordent le concept de la structure électronique des atomes et les règles de remplissage. La liaison covalente est définie comme résultant de la mise en commun d'une paire d'électrons de valence entre deux atomes (modèle de Lewis). Est ensuite expliqué comment représenter les formules de Lewis des molécules (ou ions polyatomiques) par application de la règle de l'octet (du duet). Durant les deux premières années du cycle universitaire, la liaison covalente est abordée dans le chapitre traitant de la liaison chimique relevant du module de chimie générale. Elle est d'abord décrite selon le modèle de Lewis enrichi de nouvelles caractéristiques: origines du doublet (proprement et coordinence); rupture homolytique et hétérolytique d'une liaison; électrons liants (assurant des liaisons) et non liants (libres); exception à la règle de l'octet (il peut subsister dans la molécule des lacunes d'électrons sur certains atomes ou existence de «cases vides» en référence au modèle quantique); liaisons multiples ( $\sigma$  et  $\pi$ ; ce qui correspond à un modèle mixte: Lewis + quantique); structure électronique d'une molécule décrite en précisant le nombre et le rôle (liant ou non liant) des doublets externes de chaque atome, ainsi que la présence éventuelle de lacunes électroniques;

Sont ensuite introduits les différents éléments du modèle quantique : les orbitales atomiques (s, p, d,...), la méthode LCAO pour la représentation des orbitales moléculaires, les orbitales moléculaires  $\sigma$  (recouvrement axial des OA s) et  $\pi$  (recouvrement latéral des OA p), l'hybridation et ses différents états ( $sp^3$ ,  $sp^2$  et  $sp$ ). Ces éléments du modèle quantique sont fréquemment utilisés par la suite dans l'enseignement de la chimie organique.

### *La géométrie des molécules selon la théorie VSEPR*

Il est possible de prévoir l'orientation relative des liaisons issues d'un atome en appliquant les règles de Gillespie, fondée sur le modèle VSEPR (Valence Shell Electrons Pairs Repulsion). Pour appliquer les règles de Gillespie, il faut connaître la structure de Lewis de la molécule, qui elle-même ne peut être établie qu'à partir des configurations électroniques des atomes. Celles-ci, qui constituent donc le vrai point de départ. Il est expliqué par la suite la différence entre figures de répulsion et géométrie moléculaire. Une note particulière est soulignée en ce qui concerne les différences entre la forme de répulsion autour de l'atome centrale, qui détermine les

angles de liaisons et la géométrie qui est déterminée par les doublets liants uniquement.

#### *La géométrie des molécules selon la théorie l'hybridation*

La méthode LCAO ne peut pas expliquer le fait que dans la molécule de méthane (CH<sub>4</sub>), les 4 liaisons C-H sont identiques et que la molécule soit parfaitement tétraédrique (angle 109°28'). En effet, l'atome de carbone ne possède que 2 électrons célibataires sur sa couche de valence (2s<sup>2</sup> 2p<sup>2</sup>).

La structure de nombreuses molécules tel que le méthane, ne peut être expliquée que par la combinaison (hybridation) de certaines OA non équivalentes qui conduit à des OA hybrides équivalentes (de même énergie et de même géométrie) d'orientation différente des OA de départ.

Les orbitales hybrides, très utiles pour expliquer la géométrie des molécules, sont représentées sous forme de lobes dont les axes de symétrie sont disposés suivant une géométrie tétraédrique (sp<sup>3</sup>), plane (sp<sup>2</sup>) ou linéaire (sp) c'est à dire qu'ils forment entre eux respectivement des angles de 109°28', 120° et 180. Par ailleurs il n'ya pas à faire de distinction entre doublets s, p ou d, puisque les orbitales s'hybrident et correspondent en définitive à des états identiques, de même énergie.

On peut noter du reste que la théorie de l'hybridation et le modèle VSEPR conduisent à définir les mêmes orientations pour les orbitales et donc pour les liaisons.

## **2. Revue de littérature**

Plusieurs études ont été menées sur les difficultés rencontrées par les étudiants lors de l'apprentissage du concept abstrait et complexe de liaison chimique (voir par exemple la revue de littérature de Levy Nahum et al. 2010). En ce qui concerne la liaison covalente, pour certains élèves et étudiants, dans ces liaisons les électrons sont partagés également entre les atomes (Coll et Treagust, 2001). L'interprétation de ce partage repose sur la règle de l'octet et la stabilité des couches pleines (Coll et Treagust, 2001, 2002). Keig et Rubba (1993) montrent de plus qu'à l'université, les étudiants ont du mal à passer de la configuration électronique des atomes à la représentation des molécules qu'ils forment. L'origine de ces difficultés, confusions et conceptions pourrait provenir de l'approche pédagogique traditionnelle, caractérisée par une simplification du concept à travers des définitions courtes et une distinction entre les différentes catégories de liaisons entre atomes (covalente, ionique, etc.), utilisée pour la présentation du concept (Levy Nahum et al., 2007). Laszlo (2002) et Ferguson et Bodner (2008) ont mis en relief les difficultés qu'éprouvent les apprenants dans la description de la réactivité à l'aide de structure de Lewis en utilisant des flèches incurvées pour suivre le mouvement des électrons. Les difficultés qu'éprouvent les apprenants dans la description de la géométrie moléculaire ont été

mises en relief par diverses études (Gillespie, R.J. 1996, 2001 et 2004). Le modèle VSEPR présente des limites bien établies quant à sa capacité à représenter des géométries moléculaires et électroniques précises de molécules simples ce qui peut créer un besoin important pour les étudiants de réapprendre les concepts de structure et de liaison en chimie organique. (Brian J. Esselman et al. 2018). Plusieurs chercheurs ont relevé que le modèle quantique de l'atome et de la molécule est l'un des sujets les plus difficiles à comprendre par les étudiants à tous les niveaux d'apprentissage de la chimie (Zoller, 1990 ; Taber, 2001, 2002a et b ; Tsaparlis & Papaphotis, 2002 ; Papaphotis & Tsaparlis, 2008a ; Nakiboğlu, 2003). Pour Zoller (1990), la compréhension du concept d'orbitale atomique, la signification réelle de la symbolisation s, p, d, f et l'aspect directionnel des orbitales sont des connaissances fondamentales pour l'apprentissage des orbitales hybrides et de l'hybridation. Dans son étude, Nakiboglu (2003) relève que peu d'étudiants (seulement 7,2%) donnent une définition acceptable de l'hybridation.

### 3. Question de recherche et méthodologie

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'évaluation de la capacité des futurs professeurs des lycées à mettre en œuvre une procédure systématique de raisonnement pour représenter la géométrie des édifices covalents sous le formalisme des deux théories, plus particulièrement lorsqu'il s'agit de mettre en relation la structure de Lewis avec la théorie de Gillespie ainsi qu'avec celle de l'hybridation.

L'étude a été réalisée durant l'année universitaire 2017-2018 auprès de 50 étudiants de la licence de sciences physiques de l'ENS de Kouba (Alger). Ce sont des étudiants ayant suivi le même cours de chimie organique et possédant plusieurs éléments du registre des modèles à leur disposition. C'est à leur capacité à les mobiliser pour déterminer la géométrie des molécules organiques que nous allons nous intéresser.

Trois questions leur ont été posées, dans un questionnaire papier crayon. Puis, afin de mieux évaluer la compréhension par les étudiants des différents concepts et d'interpréter les réponses au questionnaire écrit, nous avons eu recours à des séquences d'activités d'une durée de 30 mn. Ces séquences ont concerné un groupe de travail, volontaires et appartenant au quart supérieur de la promotion en termes de résultats universitaires. Pour chaque question posée, un temps de débat est accordé au groupe.

### 4. Présentation du questionnaire

Dans le but d'analyser dans quelle mesure ces compétences ont été atteintes, trois formules moléculaires azotées, une neutre et deux chargées, sont présentées aux étudiants. On rencontre ces cas dans les cours de chimie organique lorsqu'on étudie le caractère basique des amines en milieu acide ou à l'inverse leur acidité en milieu fortement basique.



## 5.2 Intégration du modèle de Lewis

### *Analyse des résultats concernant la première question du questionnaire*

La première question comporte deux formules chargées (1 et 2) et une formule neutre (3). Le fait que les entités chargées ne soient pas aussi « familières » que la molécule neutre pour les étudiants, peut conduire à des difficultés dans la description.

Les résultats sont regroupés dans le tableau1. Y figurent les pourcentages de réponses incorrectes et de non réponses (N.R.).

### Représentation de Lewis

Procédure systématique de représentation de formules de Lewis	réponses incorrectes (%)				N.R (%)			
	1	2	3	A au moins une des 3 formules	1	2	3	A au moins une des 3 formules
Description de la structure électronique d'entités neutres et chargées	35	34	45	24	3	2	1	5
Représentation de Lewis d'entités neutres et chargées	47	48	45	43	9	10	2	10

Tableau.1 - Représentation de Lewis d'entités neutres et chargées

**Détermination des électrons de valence :** Si la configuration électronique de l'azote à l'état fondamentale  $1S^22S^22P^3$  est réalisée par un grand nombre d'étudiants (95%), la difficulté de déterminer la couche de valence pour certains (45%) est visible à travers leurs réponses ( $2P^3$  au lieu de  $2S^22P^3$ ) dans le cas de  $NH_3$ . Un peu plus d'un tiers (34%) pense que la molécule a perdu un électron dans  $NH_4^+$  et qu'elle en a gagné un dans  $NH_2^-$ . Cette affirmation est confirmée par l'observation des échanges entre étudiants lors de la réalisation de la tâche concernant les structures de Lewis : *l'azote possède 3 électrons célibataires dans sa couche de valence qui lui permettent de former 3 liaisons ; l'azote dans  $NH_4^+$  porte une charge + donc il a perdu un électron en formant 4 liaisons avec 4H (1S-S et 3 P-*

S); en ce qui concerne  $NH_2^-$ , l'azote forme 2 liaisons genre P-S et porte une charge négative dû à l'électron célibataire restant de la couche P. Le nombre d'électrons de la couche de valence se résume donc, pour ces étudiants, aux électrons de valence de la sous couche P. Leur référence à la charge négative ou positive est synonyme de gain ou de perte d'électrons. Les conséquences de la formation d'une liaison dative dans le cas de l'ammonium ou la rupture hétérolytique de la liaison covalente dans le cas du nitrite semblent leur échapper. Il apparaît donc que ces étudiants rencontrent des difficultés pour modéliser aussi bien des molécules chargées que neutres en utilisant le formalisme de Lewis. Ils ont du mal à imaginer et à mettre en relation :

- l'origine du doublet liant (dl) et la charge formelle induite dans la formule (1), où l'on constate la formation d'une liaison dative avec apparition d'une charge (+) ;

- le doublet non liant (dnl) et la charge formelle (-) induite dans la formule (2).

La rupture de la liaison covalente génère des charges (+) ou (-) qui sont identifiées à une lacune électronique (formule 1') ou à un doublet libre (formule 2'). Leur non maîtrise de la valence (lorsqu'il s'agit d'imaginer la formation d'une liaison covalente) semble visible à travers les représentations incorrectes de la formule (3).

**Structure de Lewis :** Beaucoup de futurs enseignants (75%) rencontrent des difficultés à mettre en œuvre une procédure systématique de raisonnement pour représenter la structure de Lewis des édifices covalents, plus particulièrement lorsqu'il s'agit de structure chargées (calcul du nombre d'électrons de la couche de valence de la molécule (ajouter ou soustraire des électrons dans le cas des formules chargées) puis répartir ces électrons sur les atomes en doublets liants (dl) et non liants (dnl) en respectant la règle de l'octet et du duet.

Pour la détermination des doublets liants (dl) et non liants (dnl), les étudiants essaient de procéder par mobilisation des structures de Lewis mémorisés mécaniquement lors de leur apprentissage du concept, puis déterminent à partir du schéma dessiné le nombre (n+m) des différents doublets. La représentation de la structure de Lewis de molécules neutres ou chargées semble plus délicate que leur description. En effet, moins de la moitié des étudiants donne une représentation incorrecte pour les trois formules proposées, avec toujours un meilleur taux de réponses correctes pour la molécule neutre que pour les molécules chargées.



Il apparaît que pour les étudiants, représenter une formule par sa structure de Lewis c'est avant tout représenter sa formule développée en faisant figurer les liaisons entre les atomes et en respectant la valence des éléments. La priorité est loin d'être donnée à la représentation de tous les atomes, avec leurs doublets liants et non liants, en respectant, pour tous les atomes de la molécule ainsi représentée, la règle de l'octet ou du duet.

On peut en déduire que la description du passage de l'état de molécule neutre à l'état ion chargé, qui caractérise la liaison N-H en termes de rupture ( $3 \rightarrow 2$ ) ou de formation ( $3 \rightarrow 1$ ) dans ces différentes structures, en utilisant le formalisme de Lewis, n'est pas maîtrisée par un nombre non négligeable d'étudiants.

### 5.3 Géométrie des 3 formules selon la VSEPR : Réponses attendues à la Q2

Tableau.1. Procédure théorique à suivre pour représenter la géométrie des 3 formules

$\text{NH}_3$ ,  $[\text{NH}_4]^+$  et  $[\text{NH}_2]^-$

formule	f. de répulsion $\text{AX}_n\text{E}_m$	Angles de liaisons	Géométrie tenant compte de l'influence des (dnl)
$\text{NH}_3$	$\text{AX}_3\text{E}_1$	$107,5^\circ$	pyramidale à base triangulaire
$\text{NH}_4^+$	$\text{AX}_4$	$109^\circ 28'$	tétraédrique
$\text{NH}_2^-$	$\text{AX}_2\text{E}_2$	$104^\circ$	géométrie coudée

#### *Analyse des réponses*

En réponse à la deuxième question les étudiants doivent utiliser le procédé de détermination de la géométrie moléculaire des trois formules précédentes.

Les résultats sont regroupés dans le tableau 2. Y figurent les pourcentages de réponses incorrectes et de non réponses (N.R.).

Procédé VSEPR	réponses incorrectes (%)				N.R (%)			
	1	2	3	A au moins une des 3 formules	1	2	3	A au moins une des 3 formules
Détermination des formes de répulsion AX <sub>n</sub> E <sub>m</sub>	25	68	47	38	3	5	1	5
Géométrie des 3 formules	25	68	47	38	3	5	1	5
Angles de liaisons	3	95	95		3	5	1	5

Tableau.3- Géométrie d'entités neutres et chargées selon la VSEPR

### Discussion

*Détermination des formes de répulsion* : Une majorité d'étudiants arrive à déterminer la forme de répulsion de l'ammonium AX<sub>4</sub>, à partir de la structure de Lewis NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. C'est une géométrie tétraédrique avec 4 orientations autour de l'atome centrale avec des angles de liaisons de 109°. Cependant, ils ne sont que (32%) à déterminer celle de l'ion nitrite (AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub>) à partir de la structure de Lewis NH<sub>2</sub><sup>-</sup> et un peu plus de la moitié (53%) pour l'ammoniac (AX<sub>3</sub>E<sub>1</sub>). Ces résultats montrent que le taux de réponses attendues est meilleur pour l'ammonium et l'ammoniac que pour l'ion chargé négativement. Pour représenter ces structures de Lewis, les étudiants procèdent par mobilisation du schéma mémorisé machinalement sans une véritable compréhension avant de dessiner la structure. Ils sont un peu plus des 2/3 à donner des réponses incorrectes (AX<sub>2</sub>E<sub>1</sub>) pour la formule (2). Il semble que l'effet de familiarisation avec les structures organiques ait joué positivement en faveur des structures (1) et (3). Les étudiants n'ayant pu déterminer la structure de Lewis de l'ion nitrite car peu familière et donc plus difficile à mémoriser et à mobiliser en temps opportun, éprouvent des difficultés à déterminer sa forme de répulsion.

*Géométrie des 3 formules* : De l'analyse des réponses incorrectes, il résulte que les étudiants ont des difficultés à déterminer la géométrie de certains édifices covalents, notamment les formules (2) NH<sub>2</sub><sup>-</sup> de géométrie triangulaire AX<sub>2</sub>E<sub>2</sub> et (3) NH<sub>3</sub> de géométrie tétraédrique AX<sub>3</sub>E<sub>1</sub>

Ils font des confusions entre la forme de répulsion  $AX_nE_m$  due à l'arrangement des paires  $(n+m)$  de la couche de valence, autour de l'atome central, et la géométrie due uniquement aux doublets liants. La référence à la notion de répulsion des doublets apparaît dans toutes les réponses, avec une fréquence plus ou moins grande. Cependant le fait que cette répulsion ne concerne que les doublets liants (responsables de la détermination de la géométrie) n'est indiqué de façon explicite que par une infime partie. Dans les discussions durant les échanges entre étudiants lors de la réalisation de la tâche concernant la géométrie des molécules, apparaît la nécessité de connaître le nombre d'électrons de la couche de valence. Cependant, la mise en relation de la connaissance du nombre d'électrons de valence avec le nombre de doublets liants et non liants apparaît peu. Ici l'ion nitrite, l'ammoniac (*de géométrie coudée et pyramidale*) et l'ammonium sont inscrits dans la même forme de répulsion tétraédrique. Pour les étudiants l'angle formé par les liaisons N-H est de  $109^{\circ},28$  dans les trois cas. Or seul l'ammonium est conforme à cette prévision en raison de sa symétrie tétraédrique réelle. Pour  $NH_3$  et  $NH_2^-$ , l'angle des liaisons vaut respectivement  $107^{\circ},5$  et  $104^{\circ},5$ . Dans l'ammoniac l'azote est entouré de quatre doublets qui se localisent dans les quatre directions tétraédriques l'une des orbitales étant occupée par le doublet non liant. Le nitrite est également entouré par quatre doublets, comme l'ammonium, qui se localisent dans les quatre directions tétraédriques, deux des orbitales dans ce cas, étant occupées par deux doublets non liant. L'ammonium est le seul cas où la forme de répulsion représente elle-même la géométrie. Bien que la notion des effets répulsifs des doublets non liants soit présente dans les échanges entre étudiants, il n'en est fait aucun usage pour expliciter les écarts d'angles qui caractérisent les différentes géométries. En dehors du fait que la distinction claire entre les éléments du modèle n'est pas souvent réalisée par les enseignants, on peut faire l'hypothèse que les étudiants se contenteraient alors de décrire implicitement cette description en termes de  $(n+m)$  de doublets. Mais cela peut également s'interpréter en considérant que les étudiants éprouvent des difficultés à donner du sens à l'abréviation VSEPR et qu'ils rencontrent de sérieuses difficultés à mettre en œuvre une procédure systématique de raisonnement pour représenter la géométrie des édifices covalents, plus particulièrement lorsqu'il s'agit de structure chargées.

## 5.4 Géométrie des 3 formules selon l'hybridation : Réponses attendues à la Q3

 Tableau.2.Procédure théorique à suivre pour représenter l'état d'hybridation  $sp^3$  de l'atome N, dans les structures de  $NH_3$  et  $[NH_4]^+$  et  $[NH_2]^-$ 

	$NH_3$	$[NH_4]^+$	$[NH_2]^-$
<b>Hybridation des orbitales atomiques s et p</b>	<p>L'existence de trois liaisons <math>\sigma</math> + un doublet non liant nécessite une hybridation <math>sp^3</math> de N.</p> <p>La combinaison des quatre orbitales atomiques <math>2s^2 + 2p_x^1 + 2p_y^1 + 2p_z^1</math> engendre quatre orbitales atomiques équivalentes hybridées <math>sp^3</math> ; soit 4 OA <math>sp^3</math>, contenant consécutivement 2, 1, 1 et 1 <math>e^-</math>.</p>	<p>L'existence de quatre liaisons <math>\sigma</math> autour de N, nécessite une hybridation <math>sp^3</math> de N.</p> <p>La combinaison de ses quatre orbitales atomiques <math>2s^2 + 2p_x^1 + 2p_y^1 + 2p_z^1</math> engendre quatre orbitales atomiques équivalentes hybridées <math>sp^3</math> ; soit 4 OA <math>sp^3</math>, contenant consécutivement, 2, 1, 1 et 1 <math>e^-</math>.</p>	<p>L'existence de deux liaisons <math>\sigma</math> autour de N + deux doublets non liant nécessite une hybridation <math>sp^3</math> de N qui donne une meilleure concordance entre l'angle théorique des deux liaisons N-H (<math>109,5^\circ</math> au lieu de <math>90^\circ</math>) et l'angle réel (<math>104,5^\circ</math>).</p> <p>La combinaison de ses quatre orbitales atomiques <math>2s^2 + 2p_x^1 + 2p_y^1 + 2p_z^1</math> engendre quatre orbitales atomiques équivalentes hybridées <math>sp^3</math> ; soit 4 OA <math>sp^3</math>, contenant consécutivement, 2, 2, 1 et 1 <math>e^-</math>.</p>
<b>Angles entre liaisons et géométrie de la molécule</b>	<p><math>107,5^\circ</math></p> <p>pyramidale à base triangulaire</p> <p>La formation des 3 liaisons <math>\sigma</math> entre N et 3H nécessite un recouvrement axial de 3OA <math>sp^3</math> de N et 3s de H</p>	<p><math>109^\circ 28'</math></p> <p>Tétraédrique</p> <p>La formation des 4 liaisons <math>\sigma</math> entre N et 4H nécessite un recouvrement axial de 4OA <math>sp^3</math> de N et 4s de H</p>	<p><math>104,5^\circ</math></p> <p>Coudée en (V)</p> <p>La formation des 2 liaisons <math>\sigma</math> entre N et 2H nécessite un recouvrement axial de 2OA <math>sp^3</math> de N et 2s de H</p>

## Réponses des étudiants et analyse

En réponse à la troisième question les étudiants doivent utiliser le procédé de détermination de la géométrie des 3 formules à partir de l'hybridation des OA d'atomes appartenant à ces molécules neutres ou chargées précédentes. Les

résultats sont regroupés dans le tableau3. Y figurent les pourcentages de réponses incorrectes et de non réponses (N.R.).

Procédé de l'hybridation des orbitales S et P	réponses incorrectes (%)				N.R. (%)			
	1	2	3	A au moins une des 3 formules	1	2	3	A au moins une des 3 formules
Détermination de l'état d'hybridation	25	75	47	30	3	9	1	7
Géométrie des 3 formules	25	70	40	29	3	5	1	5
Angles de liaisons	3	90	81		3	5	1	5

Tableau.3- Géométrie d'entités neutres et chargées selon l'hybridation

### Discussion

*Géométrie des 3 formules* : Le raisonnement poursuivi par les étudiants dans la détermination de la géométrie des 3 formules à partir de l'hybridation des OA d'atomes appartenant à ces molécules neutres ou chargées, semble reposer sur le nombre des liaisons  $\sigma$  que l'atome central peut établir avec ses voisins. Pour beaucoup d'entre eux, c'est le nombre de liaisons qui fixe la géométrie de la molécule: *L'existence de quatre liaisons  $\sigma$  nécessite une hybridation  $sp^3$  de  $[NH_4]^+$  tout comme l'existence de trois et deux liaisons  $\sigma$  nécessite une hybridation  $sp^2$  et  $sp$  de  $NH_3$  et  $[NH_2]^-$ .* On remarque en plus que la relation qui lie l'état d'hybridation et la valeur des angles entre liaisons, repose sur un raisonnement issu d'un apprentissage mécanique:  $sp =$  linéaire ( $180^\circ$ ) ;  $sp^2 =$  triangulaire plane ( $120^\circ$ );  $sp^3 =$  tétraédrique ( $109^\circ28'$ ). De l'analyse des résultats nous observons une différence entre cette connaissance cible qui a été enseignée aux étudiants pendant le tronc commun de la licence et l'état présent de la connaissance des étudiants et de leur compréhension du concept d'hybridation. Cette affirmation est confirmée par l'observation des échanges entre étudiants lors de la réalisation de la tâche concernant l'hybridation: C'est un raisonnement reposant sur la formation des liaisons entre atomes qui est mis en œuvre : représentation de la structure de Lewis de la molécule  $\rightarrow$  prise en compte uniquement du nombre et de la nature des liaisons à former (les doublets non liants sont oubliés)  $\rightarrow$  si le nombre d'électrons non appariés ne permet pas la formation du nombre de liaison

identifié, alors un état hybridation par réorganisation/mélange ou excitation des électrons doit être envisagé, sinon ce n'est pas utile.

De plus, comme les doublets non liants ne sont pas pris en considération, lorsqu'il est envisagé un état d'hybridation, celui-ci est systématiquement associé à un nombre de liaison  $\sigma$  pouvant être formées : 4 liaisons  $\sigma$  pour  $sp^3$ , 3  $\sigma$  et une  $\pi$  pour  $sp^2$ , 2  $\sigma$  et 2  $\pi$  pour  $sp$ . Lier les états d'hybridation au nombre de liaisons, telles que l'existence de 4 liaisons  $\sigma$  pour  $sp^3$ , laisse supposer que tous les éléments hybridés  $sp^3$  devraient former 4 liaisons  $\sigma$ , contrairement à ce que l'on constate dans le cas de  $NH_3$  (3  $\sigma$ ) ou  $[NH_2]^-$  (2  $\sigma$ ) par exemple.

Il semble que la majorité des étudiants sait que : l'hybridation permet de décrire la formation des liaisons entre atomes, mais par la mise en commun d'électrons célibataires pour former des doublets de liaisons et non par le recouvrement d'OA conduisant à la formation d'OM ; d'où la conception relevées :- conception selon laquelle la représentation des orbitales hybrides ( $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ) est associée, soit au fait que dans la « nouvelle » configuration électronique de l'atome il y a 1 électron appartenant à l'orbitale  $s$  et 1, 2, ou 3 électrons à des orbitales  $p$ , soit au nombre de mise en commun d'électrons d'une orbitale  $s$  d'un atome avec une orbitale  $p$  d'un autre atome : par exemple pour l'atome de carbone dans  $CH_4$ ,  $sp^3$  correspond à 3 mise en commun  $s_H-p_C$  ;

#### 4. Conclusion

En se référant à la citation de Giordan et de Vecchi (1987), « *Savoir, c'est d'abord être capable d'utiliser ce qu'on a appris, de le mobiliser pour résoudre un problème ou clarifier une situation* », nous pouvons dire que les savoirs relatifs au concept de géométrie de quelques molécules par les théories de Gillespie et de l'hybridation, enseignés durant le tronc commun universitaire, sont loin d'être maîtrisés par de nombreux étudiants. L'extension de la méthode VSEPR à l'hybridation des orbitales atomiques, répond à un souci de réconcilier les deux théories en une seule image cohérente de la structure électronique et de la géométrie des molécules organiques. La théorie de l'hybridation et le modèle VSEPR conduisent en effet à définir les mêmes orientations pour les orbitales et donc pour les liaisons.

Cette relation n'est prise en compte que par une minorité d'étudiants. L'analyse des réponses au questionnaire écrit et des échanges enregistrés entre étudiants lors de séquences d'activités de groupes montre que, beaucoup de futurs enseignants rencontrent des difficultés pour mettre en œuvre une procédure systématique de raisonnement pour représenter la géométrie des édifices covalents sous le

formalisme des deux théories, plus particulièrement lorsqu'il s'agit de mettre en relation la structure de Lewis avec la théorie de Gillespie ainsi qu'avec celle de l'hybridation. La structure de Lewis, pour de nombreux étudiants, correspond à la formule développée de la molécule qui montre seulement la nature et le nombre des liaisons qui la constituent, c'est-à-dire la nature des « connexions » entre les atomes (les doublets non liants, ne sont pas pris en considération). Dans le cas de Gillespie, ils font des confusions entre la forme de répulsion AX<sub>n</sub>E<sub>m</sub> due à l'arrangement des paires (n+m) de la couche de valence, au tour de l'atome central et la géométrie due uniquement aux doublets liants. La référence à la notion de répulsion des doublets apparaît dans toutes les réponses, avec une fréquence plus ou moins grande. Cependant le fait que cette répulsion ne concerne que les doublets liants (responsables de la détermination de la géométrie) n'est indiqué de façon explicite que par une infime partie. Dans le cas de l'hybridation, c'est un raisonnement reposant sur la formation des liaisons entre atomes qui est mis en œuvre par les étudiants : représentation de la structure de Lewis de la molécule → prise en compte uniquement du nombre et de la nature des liaisons à former (les doublets non liants sont oubliés). L'existence de quatre liaisons σ nécessite une hybridation sp<sup>3</sup> de [NH<sub>4</sub>]<sup>+</sup> tout comme l'existence de trois et deux liaisons σ nécessite une hybridation sp<sup>2</sup> et sp de NH<sub>3</sub> et [NH<sub>2</sub>]<sup>-</sup>. On remarque en plus que la relation qui lie l'état d'hybridation à la valeur des angles entre liaisons et à la géométrie, semble reposer sur un raisonnement issu d'un apprentissage mécanique : sp = linéaire (180°) ; sp<sup>2</sup> = triangulaire plane (120°) ; sp<sup>3</sup> = tétraédrique (109°28'). L'analyse des résultats montre une différence entre le savoir cible enseigné et l'état présent de la connaissance des étudiants et de leur compréhension du concept de géométrie. On peut donc en conclure que l'appropriation des connaissances relatives à la détermination de la géométrie des molécules organiques par les deux méthodes est loin d'être réalisée.

### Conseils pour l'enseignement

L'extension de la méthode VSEPR à l'hybridation des orbitales atomiques répond à un souci de réconcilier les deux théories en une seule image cohérente de la structure électronique et de la géométrie des molécules organiques. En partant de l'idée que les orbitales hybrides sont très utiles pour expliquer la géométrie des molécules, il nous semblerait plus pertinent d'introduire le concept mathématique d'hybridation après avoir parlé des différentes géométries possibles des molécules à un atome central à partir de la méthode VSEPR. Pour améliorer cette intégration conceptuelle, caractérisée par une multitude de concepts abstraits, il conviendrait dans un premier temps que les enseignants distinguent clairement dans leurs enseignements les éléments des différents

modèles enseignés. L'accent doit être mis beaucoup plus sur le sens à donner au modèle en apportant une explication précise de la nature des concepts mis en jeu. Afin d'éviter que les étudiants ne tombent dans l'apprentissage mécanique et superficiel des modèles, il faudrait d'autre part les encourager à réfléchir aux liens existant entre les différents concepts et procéder du coup à la distinction entre des deux modèles. Pour atteindre un tel objectif, Frailich et al. (2007), proposent l'utilisation d'outils de visualisation combinée avec un apprentissage coopératif.

### **Bibliographie :**

- Brian J. Esselman, and Stephen B. Block. (2018). VSEPR-Plus: Correct Molecular and Electronic Structures Can Lead to Better Student Conceptual Models. *Journal of Chemical Education*. DOI: 10.1021/acs.jchemed.8b00316
- Coll, R.K. & Treagust, D.F. (2001). Learners' mental models of chemical bonding. *Research in Science Education*, 31, 357-382.
- Coll, R.K. & Treagust, D.F. (2002). Exploring tertiary students' understanding of covalent bonding. *Research in Science and Technological Education*, 20, 2, 241-267.
- Ferguson, R., & Bodner, G.M. (2008). Making sense of the arrow-pushing formalism among chemistry majors enrolled in organic chemistry. *Chemical Education Research and Practice*, 9, 102-113
- Frailich, M., Kesner, M., & Hostein, A. (2007). The influence of web-based chemistry learning on students' perceptions, attitudes and achievements. *Research in Science and Technological Education*, 25, 2, 179-197.
- Gillespie, R.J. (1996). Bonding without orbitals. *Education. Chemical.*, July, 103-106.
- Gillespie, R.J. & Matta, C.F. (2001). Teaching the VSEPR model and electron densities. *Chemistry Education Research and Practice in Europe.*, 2, 2, 73-90.
- Gillespie, R.J. (2004) Teaching Molecular Geometry with the VSEPR Model. *Journal of Chemical Education*, 81, 298-304.
- Giordan, A. & De Vecchi, G. (1987). *Les origines du savoir*. Neuchâtel, Paris : Delachaux et Niestlé.
- Keig, F.P. & RUBBA, A.P. (1993). Translation of representations of the structure of matter and its relationship to reasoning, gender, spatial reasoning, and



- specific prior knowledge. *Journal of Research in Science Teaching*, 30, 8, 883-903.
- Laszlo, P. (2002). Describing reactivity with structural formulas, or when push comes to shove. *Chemistry Education Research and Practice*, 3, 113-118.
- Levy Nahum, T., Mamlok-Naaman, R., Hofstein, A. &Krajcik, J. (2007). Developping a new teaching approach fort the chemical bonding concept aligned with current scientific and pedagogical knowledge. *Science Education*, 91, 579-603.
- Levy Nahum, T., Mamlok-Naaman, R., Hofstein, A. &Taber, K.S. (2010). Teaching and learning the concept of chemical bonding. *Studies in Science Education*,46,2, 179-207.
- Nakiboglu, C. (2003). Instructional misconceptions of turkish prospective chemistry teachers about atomic orbitals and hybridization. *Chemistry Education Research and Practice.*, 4, 2, 171-188.
- Papaphotis, G. &Tsaparlis, G (2008a). Conceptual versus algorithmic learning in high school chemistry: the case of basic quantum chemical concepts. Part 1. Statistical analysis of a quantitative study. *Chemistry Education Research and Practice*, 9, 323-331.
- Taber, K.S.(2001).Building the structural concepts of chemistry:some consideration from educational research.*Chemical Education Research and Practice in Europe*, 2,123-158.
- Taber K.S. (2002a). Conceptualizing quanta: illuminating the ground state of student understanding of atomic orbitals.*Chemistry Education Research and Practice.*, 3, 145-158.
- Taber, K.S. (2002b). Compounding quanta: probing the frontiers of student understanding of molecular orbitals.*Chemistry Education Research and Practice.*, 3, 159-173.
- Tsaparlis, G. &Papaphotis, G. (2002). Quantum-chemical concepts: are they suitable for secondary students? *Chemistry Education Research and Practice.*,3, 2, 129-144.
- Zoller, U. (1990). Students' misunderstandings and misconceptions in college freshman chemistry (General and Organic). *Journal of Research in Science Teaching*, 27, 10, 883-903
-