Structure, schéma de LEWIS et géométrie des entités microscopiques

Chap. 12,02

1 Structure d'une molécule

1.1 Définition	
Une molécule est aux autres.	formé d'un nombre limité d'atomes liés les un
− À chaque molécule on attribue un nom et une form	ule brute.
1.2 Formule brute	
 La formule brute est une écriture compacte indiquant (en indice) des atomes dans la molécule. 	t la(C, H, O, N,) et le
Exemple. dioxygène : O_2 , diazote : N_2 , méthane : CH_4	, dioxyde de carbone : CO_2 , glucose : $C_6H_{12}O_6$.
1.3 Liaison covalente	
Une consiste en la appelés	par deux atomes d'un ou plusieur
 Chaque doublet liant est constitué par la liaison. Ces électrons doivent être pris en compte 	appartenant à chacun des atomes engagés dans le décompte du nombre d'électrons de valence.
- En formant des chaque ato	ome acquiert, en général (cf. section 2.3), une structure en
Le nombre de liaisons covalentes que forme un atome	e est égal au
1.4 Formules développée et semi-dévelop	pée
- La formule développée d'une molécule fait apparaitre . d'une molécule.	et
La formule semi-développée d'une molécule fait appa les atomes	araitre mais pas les liaisons entre
Exemple. (butane)	
Formules : brute, C_4H_{10} ; développée, H — C — C — C — H	H

2 Schéma de Lewis d'une molécule

2.1 Doublets liants ou non liants d'électrons de valence

_	Lors de la formation d'une molécule tous les électrons de valence	et forment
	Certains des doublets d'électrons de valence sont et donc par d'autres sont et donc à un atome en particulier.	les atomes,
	Le schéma de LEWIS fait apparaître,, d'une molécule.	et

2.2 Algorithme de détermination du schéma de Lewis d'une molécule

- 1. Déterminer la structure électronique de chacun des atomes de la molécule.
- 2. En déduire le nombre d'électrons de valence de chacun des atomes de la molécule.
- 3. En déduire le nombre d'électrons que chaque atome de la molécule doit acquérir afin d'obtenir une structure en octet ou en duet : ce nombre correspond au nombre de liaisons covalentes que cet atome doit former.
- 4. Déterminer le nombre total de doublets d'électrons de valence présents dans la molécule.
- 5. Lier entre eux les atomes de façon à ce que chacun possède le bon nombre de doublets liants.
- 6. Placer les doublets non liants de façon à ce que chaque atome possède une structure en duet ou en octet.

Exercice 1. (Détermination du schéma de Lewis de quelques molécules)

Établir le schéma de Lewis des molécules suivantes : O₂ , H₂, N₂, H₂O, CO₂, NH₃, CH₄, HCl, C₂H₄, C₂H₂.

2.3 Écarts à la règle de l'octet

- Les atomes (autres que l'hydrogène et l'hélium) qui possèdent moins de 4 électrons de valence n'ont pas assez d'électrons à partager dans des doublets liants pour pouvoir acquérir une structure en octet. Ils peuvent cependant former des liaisons covalentes et donc des molécules¹ au sein desquelles il leur manque un ou plusieurs doublets d'électrons de valence.

^{1.} Ces molécules sont souvent très réactives, voire instables.

- On représente le manque d'un doublet d'électrons de valence par une boite rectangulaire vide.
 On appelle une que peut posséde un atome dans une molécule. Cet atome ne repecte alors pas la
Exercice 2. (Molécule de borane)
1. Écrire la configuration électronique du bore B :
2. Le bore se lie à trois atomes d'hydrogène pour former du borane BH ₃ . Donner le schéma de LEWIS du boran
Exercice 3. (Chlorure d'aluminium)
Contrairement à ce que son nom peut laisser penser, le chlorure d'aluminium n'est pas un solide ionique mai moléculaire.
1. Écrire la configuration électronique de l'aluminium Al :
2. Écrire la configuration électronique du chlore Cl :
3. Donner le schéma de Lewis du chlorure d'aluminium.

2.4 Cas des ions mono et polyatomiques

2.4.1 Schéma de Lewis

 Le schéma de Lewis d'un ion s'obtient de la même façon que celui d'une molécule. Il ne faut cependant pas oublier de prendre en compte

2.4.2 Algorithme de détermination du schéma de Lewis d'un édifice ionique

- 1. Déterminer la structure électronique de chacun des atomes.
- 2. En déduire le nombre d'électrons de valence de chacun des atomes dans l'édifice ionique.
- 3. En déduire le nombre d'électrons que chaque atome de l'édifice ionique doit acquérir afin d'obtenir une structure en octet ou en duet : ce nombre correspond au nombre de liaisons covalentes que cet atome doit former.
- 4. Déterminer le nombre total de doublets d'électrons de valence présents dans l'édifice ionique.
- 5. Lier entre eux les atomes de façon à ce que chacun possède le bon nombre de doublets liants.
- 6. Placer les doublets non liants de façon à ce que chaque atome possède une structure en duet ou en octet.

Exercice 4. (Détermination du schéma de Lewis de quelques ions)

Établir le schéma de Lewis des ions suivants : H₃O⁺, Na⁺, NH₄⁺, Cl⁻, OH⁻, O²⁻, NO²⁻, NO³⁻, ClO⁻.

Exercice 5. (Cas de l'ion H^+)
Établir le schéma de Lewis de l'ion H ⁺
2. Cásmátnia das antitás mismossanismos

3 Géométrie des entités microscopiques

3.1 Prévision

- Le schéma de Lewis ne donne sur la géométrie de la molécule.
- Une règle simple² permet de déterminer, à partir de la représentation de Lewis, la disposition des liaisons issues d'un même atome :
 - « Les doublets d'électrons externes d'un même atome se repoussent les uns des autres : la structure adoptée par une molécule est donc celle pour laquelle les doublets d'électrons externes de chaque atome s'écartent au maximum les uns des autres. »
- Pour minimiser leurs répulsions mutuelles, quatre doublets adoptent une disposition

3.2 Moyens de représentation : convention de Cram

À partir du schéma de Lewis, on peut établir la représentation de Cram en respectant les conventions suivantes :

- Un trait plein (—) représente une liaison entre deux atomes situés dans le plan de la figure; les angles entre les liaisons ainsi représentées sont respectés.
- Un triangle allongé plein représente une liaison entre un atome situé dans le plan de la figure (à la pointe du triangle) et un atome situé en avant de ce plan (à la base du triangle).
- Un **triangle allongé hachuré** représente une liaison entre un atome situé dans le plan de la figure (à la pointe) et un atome situé en arrière de ce plan (à la base).

^{2.} Mais incorrecte