

Chimie - Chapitre 3 : Structure électronique d'une molécule

Ce qu'il faut retenir...

LIAISON COVALENTE :

Une liaison covalente résulte de la mise en commun de 2 électrons de valence par 2 atomes. On parle de **doublet liant**.

La liaison covalente sera dite dative si les 2 électrons proviennent d'un seul atome. Après formation de la liaison, les électrons appartiennent indifféremment aux 2 atomes.

2 atomes peuvent mettre en commun plus de 2 électrons : on a alors une liaison multiple.

STRUCTURE DE LEWIS :

Dans le modèle de Lewis, les électrons sont localisés entre les atomes ou sur les atomes.

Les électrons de valence ne participant aux liaisons covalentes sont regroupés en **doublets non liant** ou libres, localisés sur les atomes.

La structure ou formule de Lewis est le schéma représentant l'ensemble des doublets électroniques au sein d'une molécule.

REGLE DE L'OCTET :

Dans une molécule ou un ion, les atomes s'associent de façon à ce que chacun d'eux soit entouré de huit électrons.

L'atome d'hydrogène obéit à la règle du **duet** en s'entourant de 2 électrons au maximum.

CHARGE FORMELLE :

La formation de liaisons covalentes par un atome peut se traduire par une perte ou un gain d'électron par rapport à l'atome neutre, on le représente par une **charge formelle** localisée sur l'atome dans la structure de Lewis de l'édifice polyatomique étudié.

Pour la calculer il faut tout d'abord attribuer les électrons aux atomes de l'édifice :

- 1 doublet liant est partagé de manière égale entre les 2 atomes liés
- 1 doublet non liant ou un électron célibataire appartient à l'atome sur lequel il est localisé

Charge formelle

=

Nombre d'électrons de valence de l'atome neutre - nombre d'électrons attribués dans l'édifice

EXCEPTIONS A LA REGLE DE L'OCTET :

- **Electron célibataire** : Lorsqu'il y reste un électron non apparié (\cdot). Les composés correspondant sont appelés **radicaux**.
- **Déficience d'électrons par rapport à l'octet** : Lorsqu'il manque un doublet pour satisfaire l'octet, on représente ce déficit par une **lacune électronique** (\square).
- **Extension de l'octet** : A partir de la 3^{ème} période de la classification périodique, les atomes peuvent s'entourer de plus de huit électrons : les composés sont dits **hypervalents**.

METHODE :

1. Calculer le nombre d'électrons de valence N_v (tenir compte de la charge globale de la molécule), en déduire le nombre de doublets à répartir.

Si N_v est pair : on doit répartir $\frac{N_v}{2}$ doublets sinon $\frac{N_v - 1}{2}$ doublets et 1 électron célibataire.

2. Faire une hypothèse sur l'enchaînement des atomes (on veillera à mettre H en bout de chaîne et les atomes les moins électronégatifs au centre).

3. Répartir les doublets électroniques.

Si N_v est pair, respecter l'octet pour tous les atomes de la 2^{ème} période et le duet pour H. Penser à envisager des liaisons multiples.

NE SURTOUT PAS DEPASSER L'OCTET POUR LES ELEMENTS DE LA 2^{ème} PERIODE !!!

On veillera donc à respecter l'octet pour N,C,O et F.

4. Calculer les charges formelles.

5. Vérifier que tous les doublets ont été répartis. Si cela est le cas :

Somme des charges formelles = charge de la molécule

Conseils : quelle structure privilégiée si plusieurs sont possibles ?

- *Essayer de minimiser la séparation de charges.*
- *S'il reste encore plusieurs possibilités, choisir la formule où la séparation de charge est en accord avec l'électronégativité.*

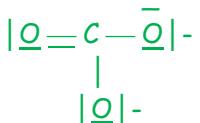
Exemple : CO_3^{2-}

$$N_v = 4 + 3 \times 6 + 2 = 24$$

On doit répartir 12 doublets.



Il reste 9 doublets à répartir pour respecter l'octet pour O et C.



On a bien réparti 12 doublets et la charge globale est bien 2-.