

Structure, schéma de LEWIS et géométrie des entités microscopiques

Chap. 12,02

1 Structure d'une molécule

1.1 Définition

- Une molécule est un édifice électriquement neutre formé d'un nombre limité d'atomes liés les uns aux autres.
- À chaque molécule on attribue un **nom** et une **formule brute**.

1.2 Formule brute

- La formule brute est une écriture compacte indiquant la nature (C, H, O, N, ...) et le nombre (en indice) des atomes dans la molécule.

Exemple. dioxygène : O₂, diazote : N₂, méthane : CH₄, dioxyde de carbone : CO₂, glucose : C₆H₁₂O₆.

1.3 Liaison covalente

- Une liaison covalente consiste en la mise en commun par deux atomes d'un ou plusieurs doublets d'électrons de valence appelés doublets liants.
- Chaque doublet liant est constitué par deux électrons appartenant à chacun des atomes engagés dans la liaison. *Ces électrons doivent être pris en compte dans le décompte du nombre d'électrons de valence.*
- En formant des liaisons covalentes chaque atome acquiert, en général (cf. section 2.3), une structure en duet ou en octet.
- Le nombre de liaisons covalentes que forme un atome est égal au nombre d'électrons qu'il lui manque pour acquérir une structure en octet ou en duet.

1.4 Formules développée et semi-développée

- La *formule développée* d'une molécule fait apparaître tous les atomes et tous les doublets liants d'une molécule.
- La formule semi-développée d'une molécule fait apparaître tous les atomes mais pas les liaisons entre les atomes de carbone et d'hydrogène.

Exemple. (butane)

Formules : brute, C₄H₁₀; développée, $\begin{array}{cccc} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ | & | & | & | \\ \text{H}-\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ | & | & | & | \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$; semi-développée, CH₃ – CH₂ – CH₂ – CH₃.

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 **se regroupent par deux**..... et forment **des doublets d'électrons de valence**.....
- Certains des doublets d'électrons de valence sont **liants**..... et donc **partagés**..... par les atomes, d'autres sont **non liants**..... et **appartiennent**..... donc à un atome en particulier.
- Le schéma de LEWIS fait apparaître **tous les atomes**....., **tous les doublets liants**..... et **tous les doublets non liants**..... d'une molécule.

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 : O_2 , H_2 , N_2 , H_2O , CO_2 , NH_3 , CH_4 , HCl , C_2H_4 , C_2H_2 .

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 [lacune électronique](#)..... une [sous-couche électronique vide](#)..... que peut posséder un atome dans une molécule. Cet atome ne respecte alors pas la [règle de l'octet](#).....

Exercice 2. (Molécule de borane)

1. Écrire la configuration électronique du bore B : [1s²2s²2p¹](#).....
2. Le bore se lie à trois atomes d'hydrogène pour former du borane BH₃. Donner le schéma de LEWIS du borane.

Exercice 3. (Chlorure d'aluminium)

Contrairement à ce que son nom peut laisser penser, le chlorure d'aluminium n'est pas un solide ionique mais moléculaire.

1. Écrire la configuration électronique de l'aluminium Al : [1s²2s²2p⁶3s²3p¹](#).....
2. Écrire la configuration électronique du chlore Cl : [1s²2s²2p⁶3s²3p⁵](#).....
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 [les charges électriques](#).....

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⁺**3 Géométrie des entités microscopiques****3.1 Préviation**

- Le schéma de LEWIS ne donne [aucune indication](#)..... 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 [tétraédrique](#).....

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