

<i>Séquence 4</i>	<b>Structure des espèces chimiques</b>
-------------------	--

**A. Représentation de Lewis d'un atome**

A.1. Configuration électronique d'un atome ..... P1

A.2. Représentation de la structure électronique d'un atome ..... P2

**B. Représentation de Lewis d'une molécule** ..... P2

**C. Représentation de Lewis d'un ion** ..... P3

D. Du schéma de Lewis à la géométrie de la molécule ..... P4

**A. Représentation de Lewis d'un atome**

**A.1. Configuration électronique d'un atome**

• Un atome, entité neutre, possède autant d'électron(s) que de proton(s).

**Exemple :**

L'atome de chlore  ${}_{17}\text{Cl}$  a pour numéro atomique  $Z = 17$ . Il possède 17 protons et par conséquent 17 électrons.

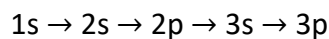
♦ Les  $Z$  électrons d'un atome sont répartis dans des couches électroniques ( $n = 1, 2, 3 \dots$ )

Chaque couche  $n$  est elle-même divisée en une ou plusieurs sous-couche ( $s, p, d \dots$ )

- Les sous-couches «  $s$  » peuvent contenir au maximum 2 électrons.
- Les sous-couches «  $p$  » peuvent contenir au maximum 6 électrons.
- Les sous-couches «  $d$  » peuvent contenir au maximum 10 électrons.

Couche $n = 1$	Couche $n = 2$		Couche $n = 3$		
2 électrons	8 électrons		18 électrons		
s	s	p	s	p	d
2 e-	2 e-	6 e-	2 e-	6 e-	10 e-

• Les sous-couches se remplissent successivement pour  $Z \leq 18$  :



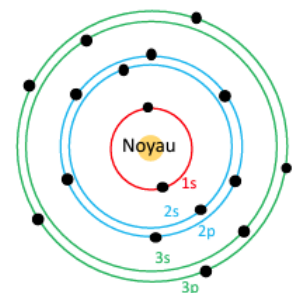
♦ Les électrons situés sur la dernière couche sont appelés « **électrons de valence** » : ils permettent la création de liaisons chimiques.

**Exemple :**

L'atome de chlore possède 17 électrons. Sa configuration électronique est :



La dernière couche électronique (couche 3) possède 7 électrons : l'atome de chlore possède donc 7 électrons de valence.



## A.2. Représentation de la structure électronique d'un atome

• La représentation de Lewis d'un atome, représente les électrons de valence, ceux de la couche externe:

→ Certains de ces électrons sont représentés par un point : ils sont dits « célibataires ». Ce sont les « points d'attaches » des atomes : ce sont eux qui seront engagés dans les liaisons covalentes (*liaisons permettant la création des molécules*).

→ Les autres électrons, présents dans la couche externe et n'intervenant pas dans les futures liaisons, sont regroupés par 2 et sont représentés par des traits, appelés « doublets non liants ».

### Exemple :

Pour représenter la structure électronique de l'atome de chlore, on représente le symbole de l'atome de chlore et on l'entoure de ses 7 électrons de valence :



H								He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca							

## B. Représentation de Lewis d'une molécule

• Le schéma de Lewis d'une molécule permet de visualiser la répartition des électrons de valence de chacun des atomes de la molécule.

La représentation de Lewis d'une molécule fait apparaître l'ensemble des atomes présents dans une molécule ainsi que tous les électrons externes de ces atomes, regroupés par paires, par doublets :

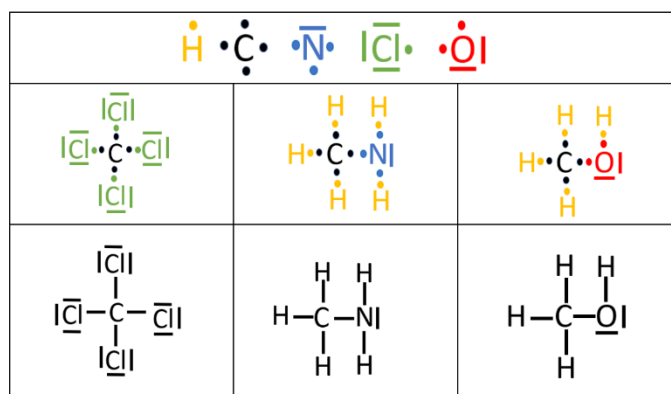
→ les doublets permettant de lier les atomes entre eux (**liaisons covalentes**) sont appelés « **doublets liants** ».

→ les autres doublets, constitués par des paires d'électrons externes ne participant pas à une liaison chimique, sont appelés « **doublets non liants** ».

### Comment déterminer la représentation de Lewis des molécules

**ETAPE 1 :** On détermine la représentation de Lewis de chacun des atomes composant la molécule

**ETAPE 2 :** On assemble les schémas de Lewis des atomes : les électrons célibataires s'associent par doublets liants formant alors les liaisons covalentes



### Remarque :

- Certaines molécules comportent des **liaisons multiples**. Il s'agit d'une liaison formée par plusieurs doublets liants.

- L'atome H ne peut pas avoir plus de 1 doublet (règle du duet)

- Les atomes tels que  $Z \leq 13$  ne peuvent pas avoir plus de 4 doublets (règle de l'octet).

- A partir de  $Z > 13$ , certains atomes peuvent avoir plus de 4 doublets pour aller jusqu'à 7 comme pour le chlore : ils sont dits **hypervalents** ;

## C. Représentation de Lewis d'un ion

- Comme dans la représentation de Lewis d'une molécule, **la représentation de Lewis d'un ion polyatomique** fait apparaître l'ensemble des atomes présents dans l'ion ainsi que tous les électrons externes de ces atomes regroupés par doublets (doublets liants et non liants).
- Dans la représentation de Lewis d'un ion polyatomique apparaît des « **charges formelles** » portés par certains atomes de l'édifice : **la somme de toutes ces charges formelles donne la charge globale de l'ion polyatomique**
- **Lorsqu'il existe plusieurs représentations de Lewis pour un ion, la plus stable est celle qui comporte le moins de charges formelles**

### Comment déterminer la représentation de Lewis d'un édifice polyatomique

**ETAPE 1** : On détermine le nombre d'électrons de valence de chaque atome isolé intervenant dans l'édifice ionique (à l'aide de la structure électronique ou du schéma de Lewis de l'atome isolé)

**ETAPE 2** : On en déduit le nombre total d'électrons de valence dans l'édifice en tenant compte de la charge globale de l'ion

**ETAPE 3** : On en déduit le nombre total de doublets (liants et non liants) :  $nb_{doublets} = \frac{nb_{\text{électrons de valence}}}{2}$

**ETAPE 4** : On répartit les doublets dans l'édifice ionique

*Rappel : L'atome H ne peut pas avoir plus de 1 doublet (règle du duet) ; les atomes tels que  $Z \leq 13$  ne peuvent pas avoir plus de 4 doublets (règle de l'octet). A partir de  $Z > 13$  certains atomes sont hypervalents avec plus de 4 doublets*

**ETAPE 5** : On positionne les charges formelles sur chacun des atomes :

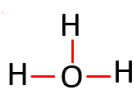
**(1)** On détermine le nombre d'électrons autour de l'atome dans l'édifice ionique

- chaque liaison covalente apporte 1 e<sup>-</sup> à l'atome
- chaque doublet non liants apporte 2 e<sup>-</sup> à l'atome

**(2)** Au nombre d'électrons de valence de l'atome isolé, on soustrait le nombre d'électrons autour de l'atome dans l'édifice ionique

**Exemple :** Formule de Lewis de l'ions  $H_3O^+$

H	Z = 1	$1s^1$	1 électron de valence	Nombre total d'électrons de valence : $3 \times (1) + 1 \times (6) - 1 = 8$
O	Z = 8	$1s^2 2s^2 2p^4$	6 électrons de valence	
Charge de l'ion: 1+			On retire 1 électron de valence	

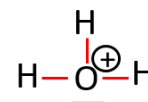


Nombre de doublets :  $nb_{doublets} = \frac{nb_{\text{électrons de valence}}}{2} = \frac{8}{2} = 4 \text{ doublets}$

### Position des charges formelles

	Électrons de valence dans l'atome isolé	Electrons « en propre » dans l'édifice	Charge formelle
H	1 e- de valence	1 liaison : 1 e-	1 - 1 = 0
O	6 e- de valence	3 liaisons : 3 e- 1 doublet : 2 e- } = 5 e-	6 - 5 = 1

Le schéma de Lewis de l'ion  $\text{H}_3\text{O}^+$  doit donc comporter 4 doublets (liants et non liants) ainsi qu'une charge formelle (+) portée par l'atome d'oxygène



## D. Du schéma de Lewis à la géométrie de la molécule

Principe : 2 charges de même signe se repoussent  $\leftarrow \ominus \quad \ominus \rightarrow$

- Dans une molécule les doublets électroniques liants et non liants se repoussent puisqu'ils sont tous chargés négativement.

♦ **Théorie VSEPR** : Autour d'un atome, les doublets liants et non liants s'écartent au maximum les uns des autres de façon à minimiser la répulsion entre eux.

**La géométrie adoptée par une molécule est celle dans laquelle les doublets d'électrons (liants et non liants) sont donc les plus éloignés les uns des autres.**

Molécules	Dioxyde de carbone	Formaldéhyde	Nitroxyle	Méthane	Ammoniac
Formule brute	$\text{CO}_2$	$\text{CH}_2\text{O}$	$\text{NHO}$	$\text{CH}_4$	$\text{NH}_3$
Schéma de Lewis					
Disposition des doublets liants et non liants de l'atome central					
Disposition des atomes					
Géométrie autour de l'atome central	Linéaire	Trigonale	Coudée	Tétraédrique	Pyramidale (base triangulaire)