

Modèle de Lewis de la liaison covalente

Structure de Lewis (doublets, charges partielles...)

Formes mésomères

Le modèle de Lewis et la liaison Chimique " covalente"



Gilbert Newton LEWIS

Une approche **non-quantique**
de la liaison chimique

En 1916, Lewis a proposé un modèle permettant de représenter les entités moléculaires (neutres ou ioniques).

Les liaisons chimiques

Les atomes n'existent que très rarement à l'état isolé.
Ils s'unissent généralement entre eux pour former des molécules.

Par la formation de liaisons chimiques.

La cause de la formation des liaisons chimiques est une tendance naturelle de tout système à acquérir une énergie minimale synonyme de grande stabilité.

L'établissement d'une liaison chimique entre 2 atomes se fait par une redistribution de leurs densités électroniques respectives.

→ le système créé soit le plus stable.

Energie molécule < Σ (énergies atomes)

Plus $\Delta E = E_{\text{molécule}} - E_{\Sigma \text{atomes}}$ est grand, plus la liaison créée est forte.

4 types de liaisons qui peuvent s'établir entre atomes :

- la liaison covalente
- la liaison métallique
- les liaisons intra et intermoléculaires
- la liaison ionique

Notion de Valence

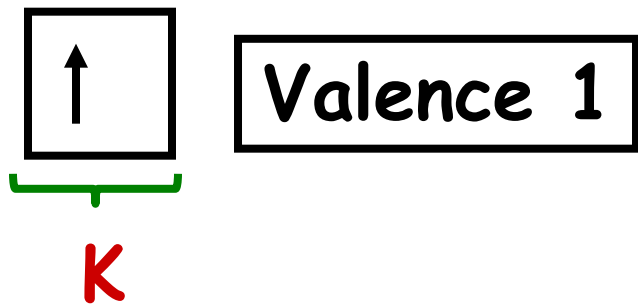
- C'est le nombre de liaisons que fait un atome dans une molécule.
- Elle correspond en général au nombre d'électrons célibataires de l'atome considéré.
- La valence normale d'un élément se déduit du schéma de Lewis atomique et donc de sa configuration électronique

**NE PAS CONFONDRE AVEC LES
ELECTRONS DE VALENCE**

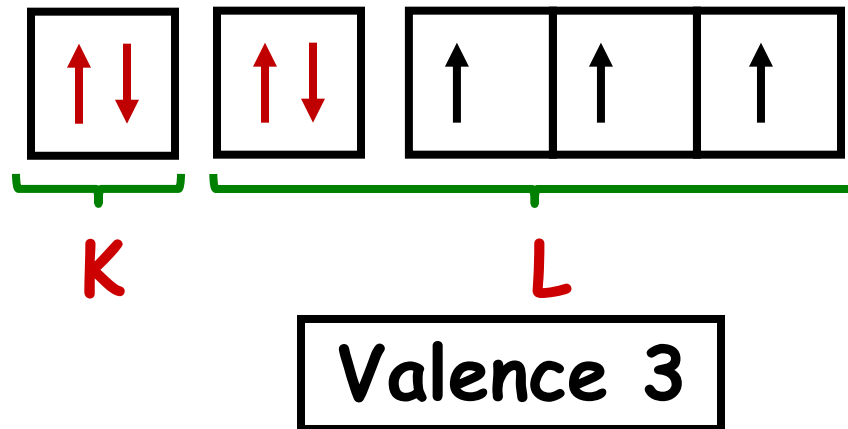
Exemples



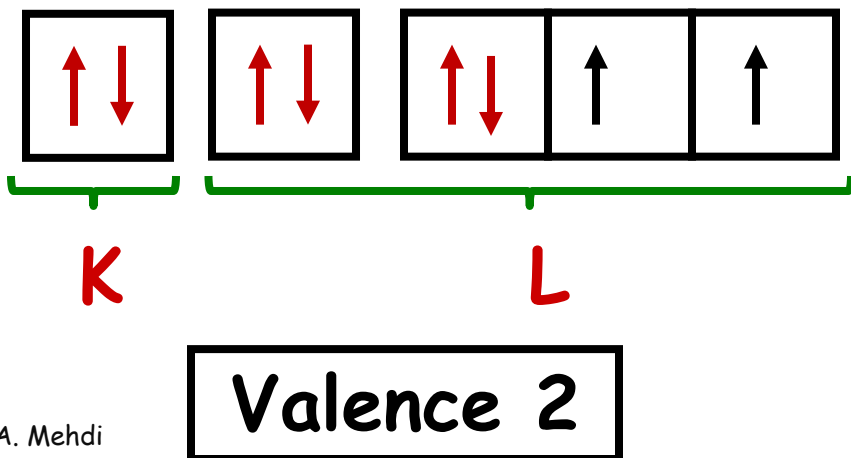
Hydrogène : ${}_1\text{H}$



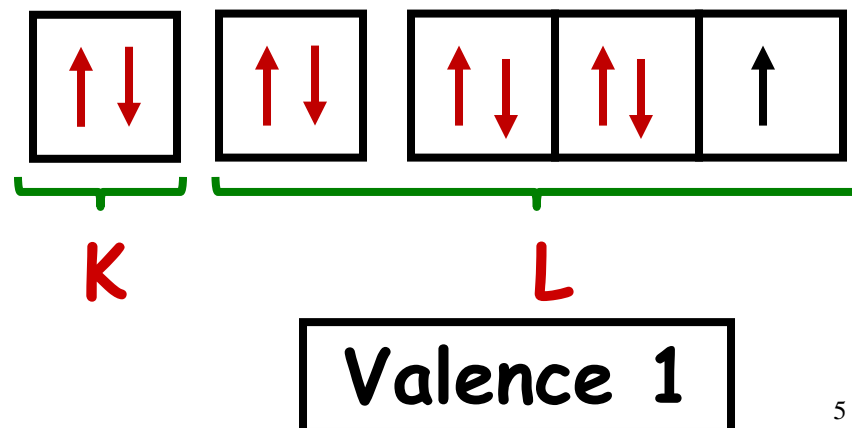
Azote : ${}_7\text{N}$



Oxygène : ${}_8\text{O}$



Fluore : ${}_9\text{F}$





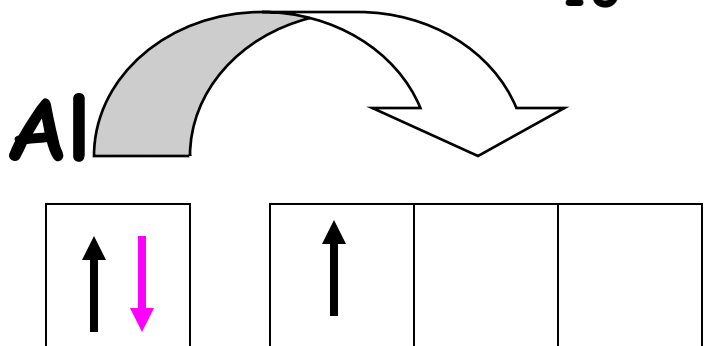
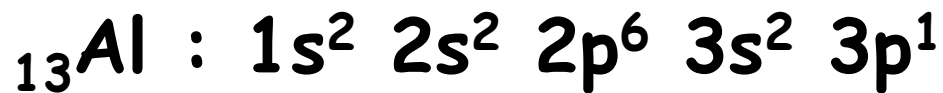
Excitation d'un atome

La valence d'un atome peut être augmentée ou diminuée par excitation de l'atome.

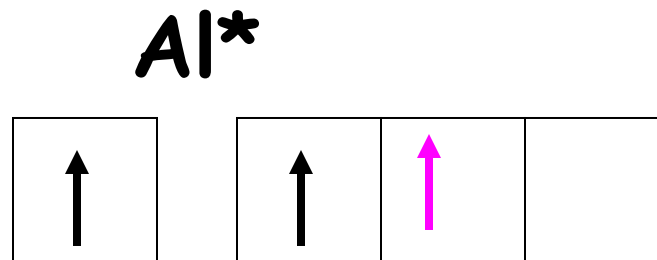
Un électron change simplement de case quantique

- si le nombre d'électrons célibataires augmente **la valence augmente.**
- si le nombre d'électrons célibataires diminue **la valence diminue. (Exceptionnel!!)**

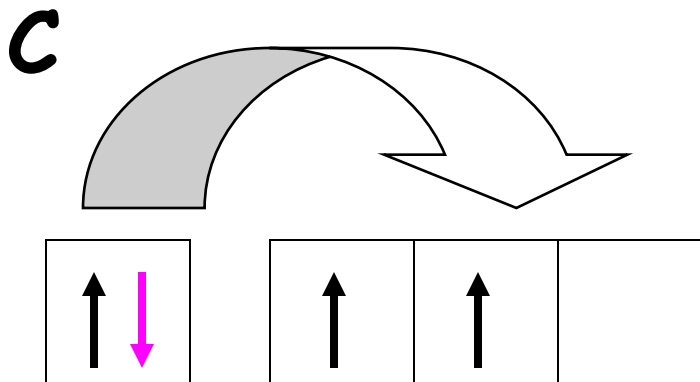
Augmentation de la valence



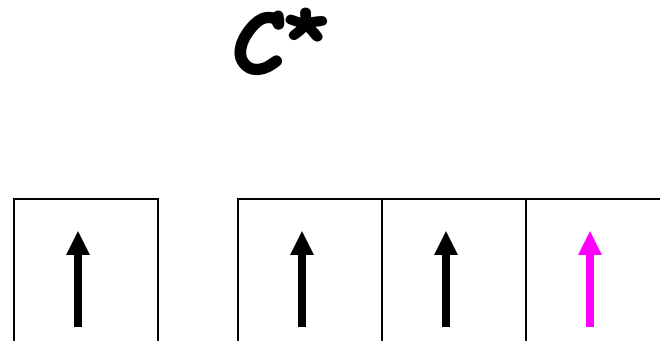
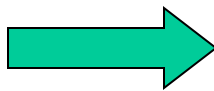
$s^2 p^1$ Valence 1



$s^1 p^2$ Valence 3



$s^2 p^2$ Valence 2



$s^1 p^3$ Valence 4

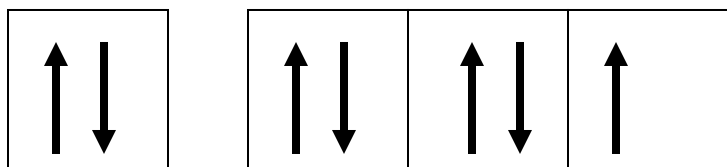
Remarques

L'excitation d'un atome pour augmenter sa valence n'est possible que si celui-ci possède simultanément **des doublets électroniques** et des **cases quantiques vides accessibles sur sa couche de valence**.

Pour certains atomes, il ne sera donc pas possible d'augmenter la valence.

ATOME DE FLUOR

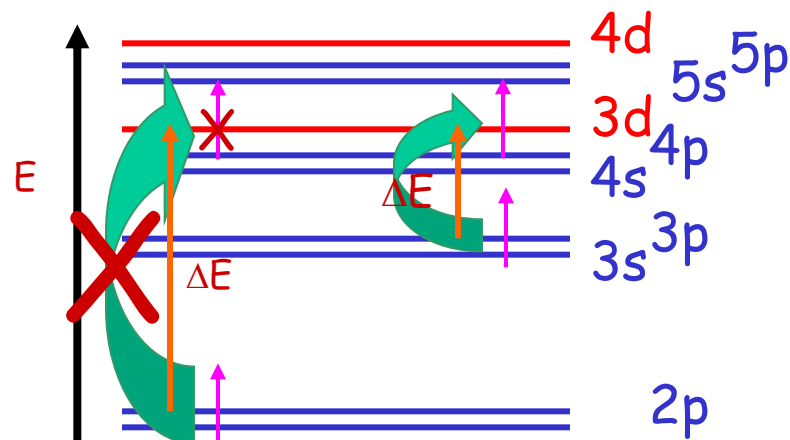
$Z=9$ $1s^2$ $2s^2$ $2p^5$



2s

2p

PAS D'EXCITATIONS POSSIBLES

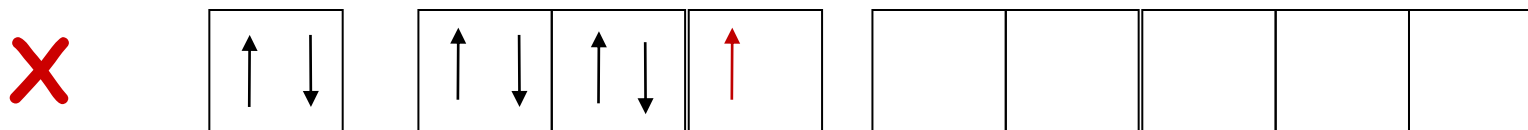


Cela est particulièrement vrai pour les éléments de la deuxième période ne possédant pas de sous niveaux d.

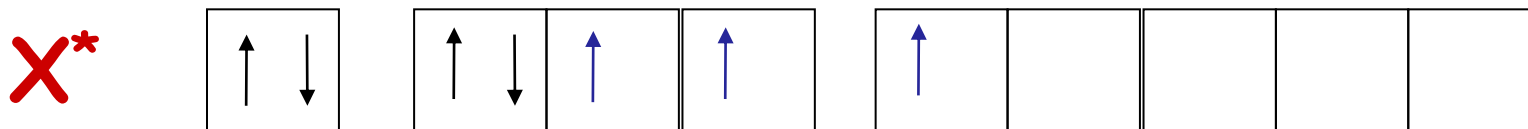
Augmentation de la valence



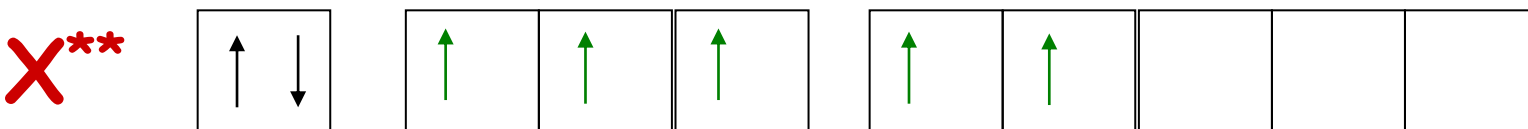
Exemple des Halogènes (sauf F)



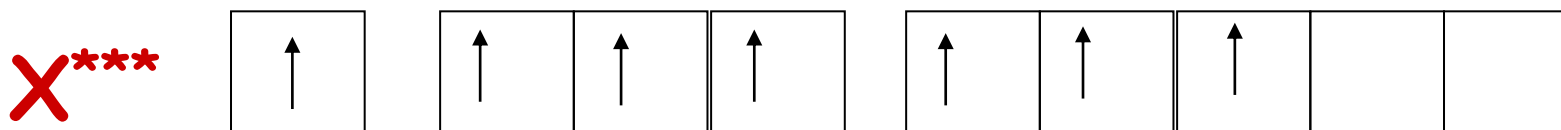
Valence 1



Valence 3



Valence 5



Valence 7



Schéma de Lewis atomique

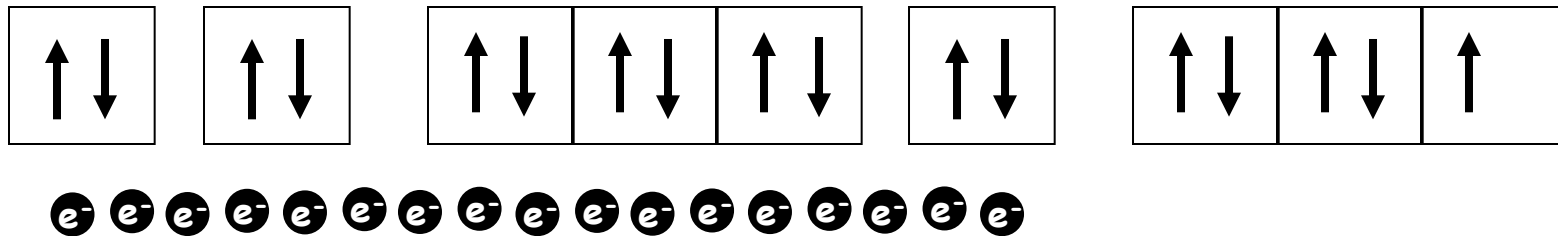
Le schéma de Lewis atomique précise la nature de la couche de valence des atomes.

On représente simplement la **couche de valence** sous forme de schéma figurant les diverses cases quantiques de celle-ci et leur occupation ou non par des électrons.

Ce schéma est très utile pour prévoir ou décrire simplement certaines propriétés atomiques.

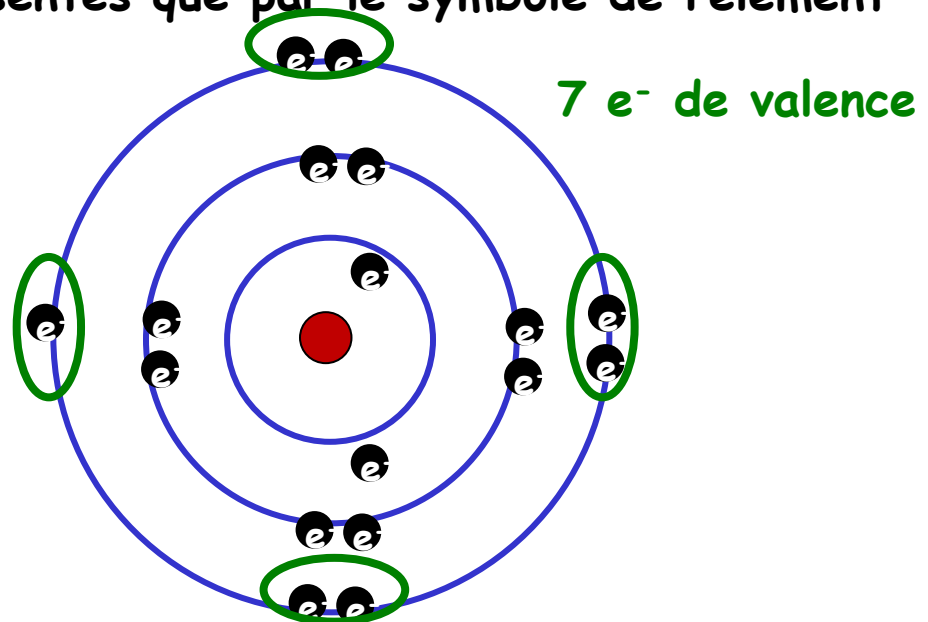
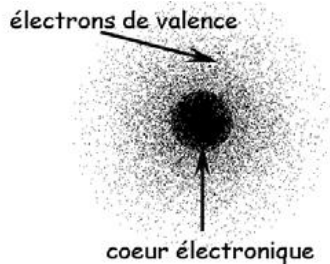
Exemple: Atome de **Chlore** comporte **17 électrons**

Rappel sur le remplissage des couches électroniques



1) On ne représente que les électrons de la couche externe (e^- de valence), le noyau et les autres e^- ne sont représentés que par le symbole de l'élément

Atome isolé: constitué d'électrons de cœur autour desquels gravitent les électrons de valence





Pour représenter un atome, à l'aide de représentation de Lewis, on utilise les règles suivantes

2) Chaque doublet d'électrons de la couche externe est symbolisé par un tiret, un électron est symbolisé par un point

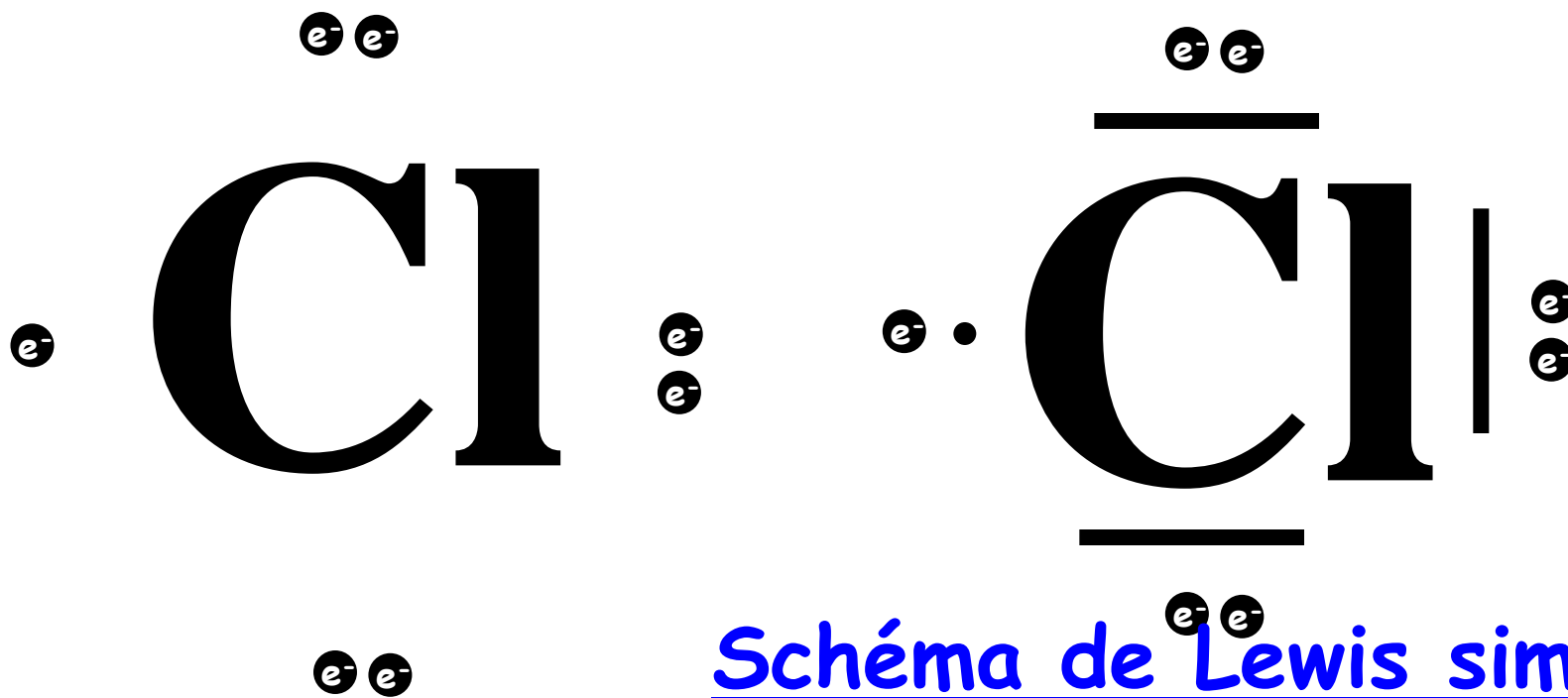
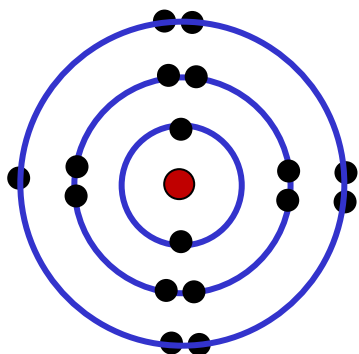


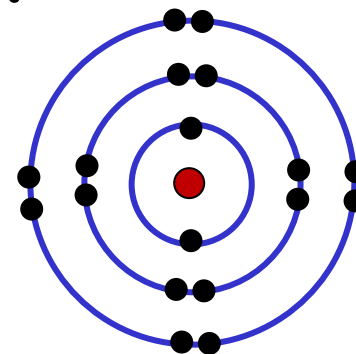
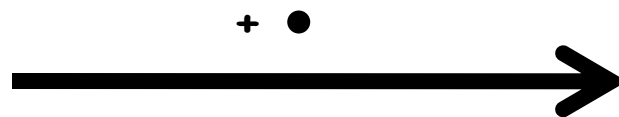
Schéma de Lewis simplifié

Schéma de Lewis d'un ion atomique

Exemple: Ion **Chlorure (Cl⁻)**



Cl : 17 électrons



Cl⁻ : 18 électrons

7 e de valence



8 e de valence
4 paires d'e

Schéma de Lewis simplifié



Schéma de Lewis moléculaire

Ce schéma constitue une description symbolique de la molécule faisant apparaître la manière dont les atomes s'unissent entre eux.

On fait apparaître non seulement les liaisons chimiques entre atomes mais aussi les électrons qui ne participent pas aux liaisons (doublets libres).

La représentation de Lewis :

*Seule la dernière couche électronique des atomes participe à la formation des liaisons

**Règle de l'octet* : tout atome engagé dans une ou plusieurs liaisons tend à s'entourer de 8 électrons afin d'acquérir la structure électronique du gaz rare le plus proche.



Schéma de Lewis moléculaire



Modèle Lewis de la liaison chimique

La liaison chimique résulte de la mise en commun d'un doublet d'électrons entre deux atomes.

Il existe deux modes de formation des liaisons:

1) Liaison de Covalence normale (liaison covalente)

Chaque atome fournit un électron célibataire

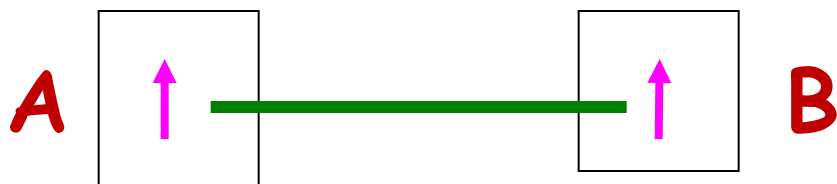


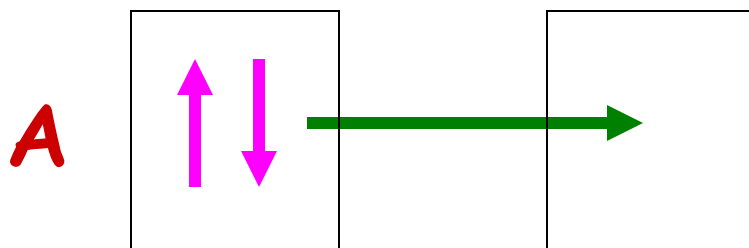
Schéma de Lewis moléculaire
"cases quantiques"



Schéma de Lewis moléculaire
"standard"

2) Liaison de Covalence dative (ou liaison de coordination)

- Un atome fournit le doublet, le deuxième atome possédant une case quantique vide.



Ces deux types de liaisons ne diffèrent que par leur mode de construction sur le papier.

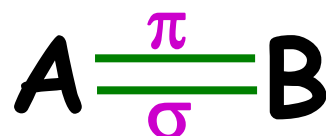
Elles sont en fait identiques et totalement indiscernables l'une de l'autre.

Liaisons simples et multiples

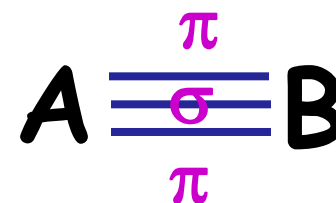
SIMPLE



DOUBLE



TRIPLE



2 types de liaisons σ et π .

Liaison simple \Rightarrow 1 σ

Liaison double \Rightarrow 1 σ et 1 π

Liaison triple \Rightarrow 1 σ et 2 π

Schéma de Lewis moléculaire Exemple H_2

Chaque H fournit un
électron célibataire



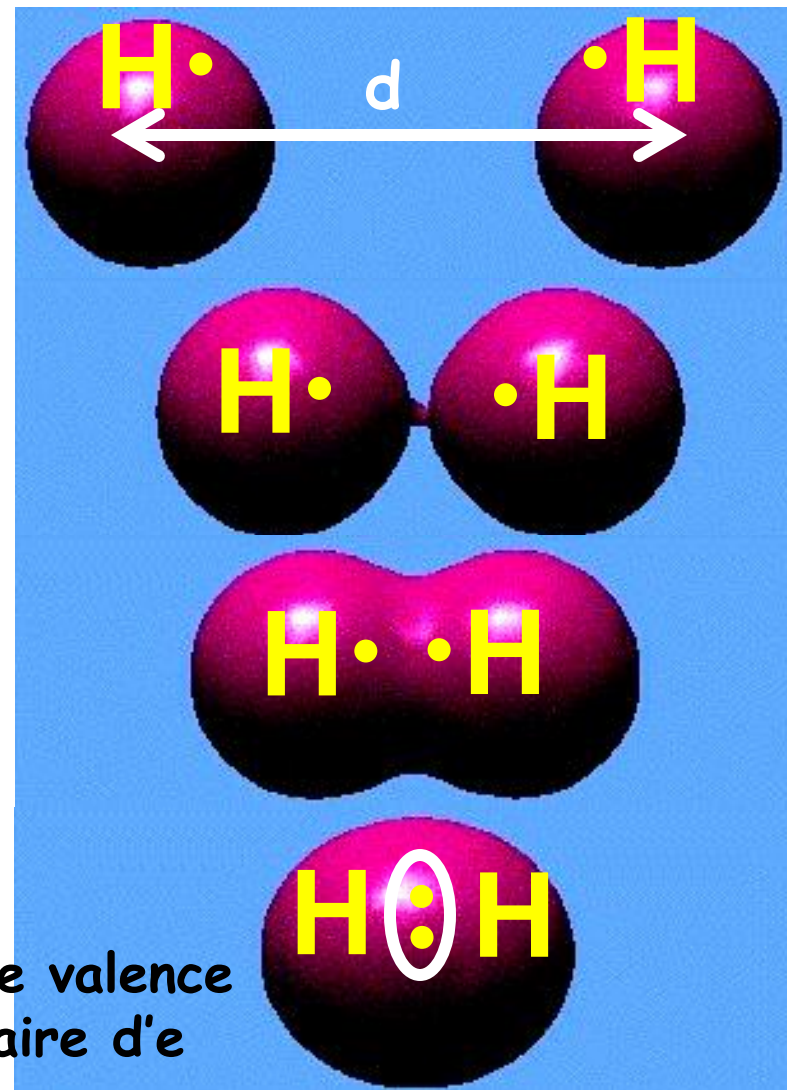
Schéma de Lewis moléculaire
"cases quantiques"

Mise en commun de
2 e^- célibataires



Schéma de Lewis moléculaire
"standard"

2 e^- de valence
1 paire d' e^-



Molécule de dihydrogène

Exemple : molécule de Cl₂

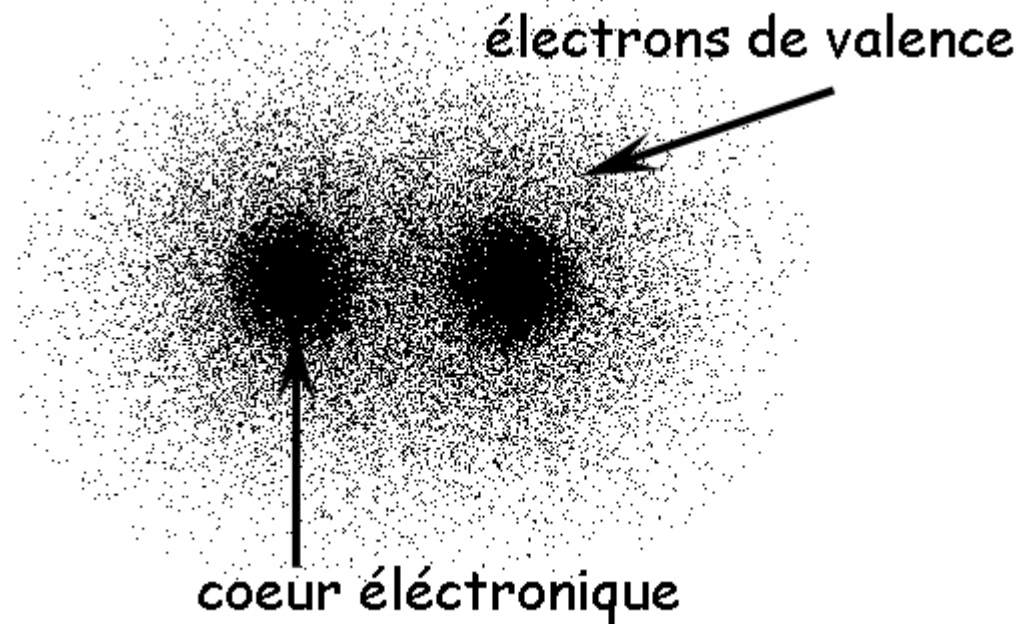
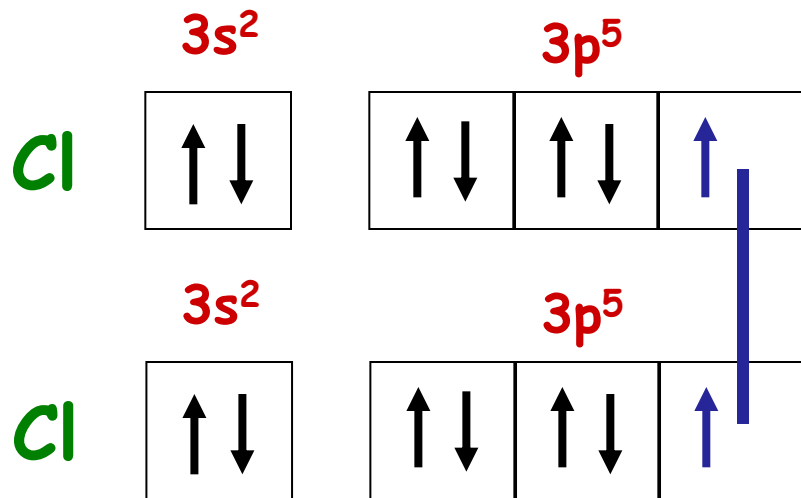
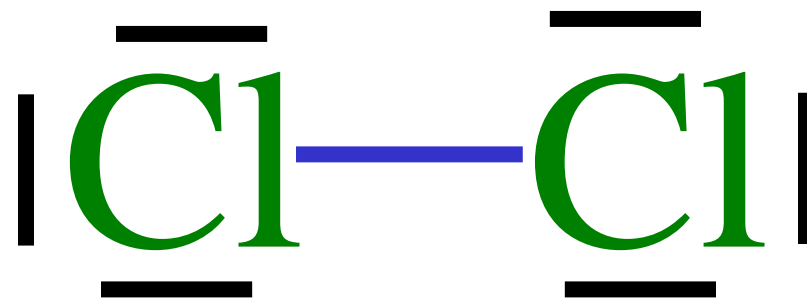
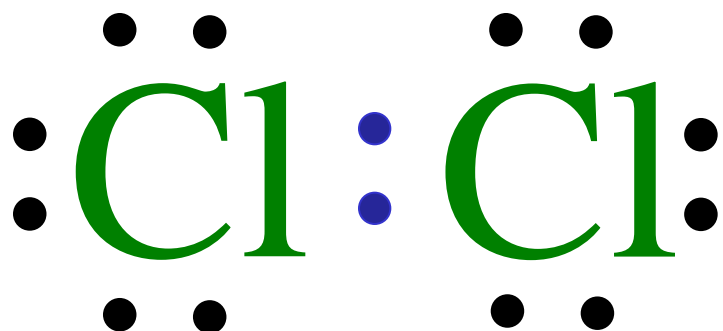


Schéma de Lewis moléculaire
" cases quantiques "

14 e de valence → 7 paires d'e



Exemples : Molécules N_2 et O_2

Configurations électroniques



Schéma de Lewis moléculaire "cases quantiques"

"

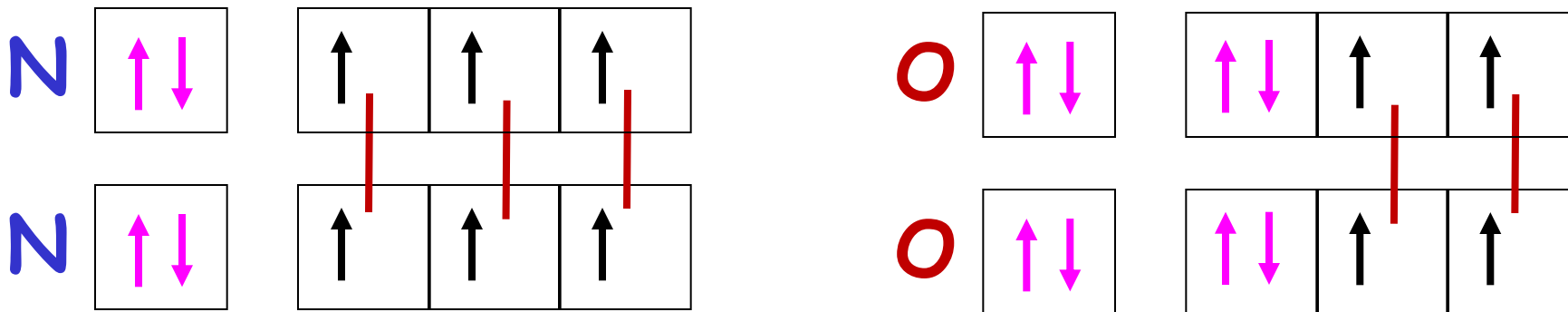


Schéma de Lewis moléculaire "standard"



10 e de valence \rightarrow 5 paires d'e

12 e de valence \rightarrow 6 paires d'e

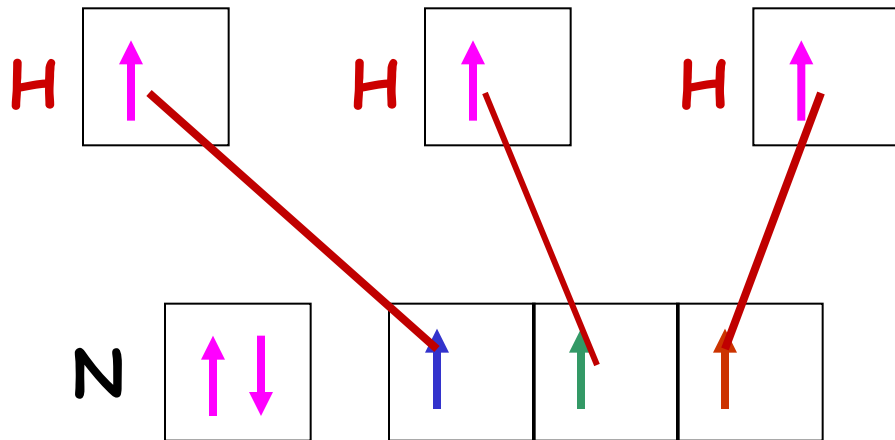
Exemple : Molécule NH_3

Configurations électroniques

$\text{N} : 1s^2 2s^2 2p^3$

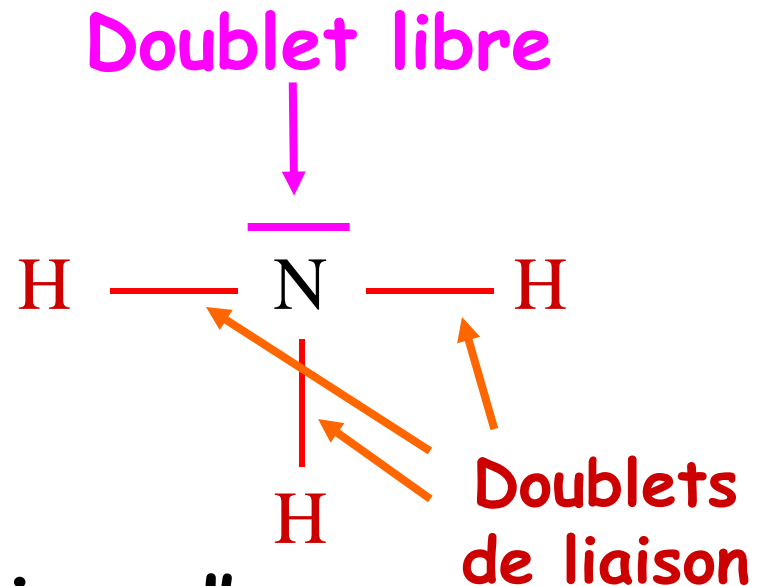
$\text{H} : 1s^1$

Schéma de Lewis moléculaire
"cases quantiques"



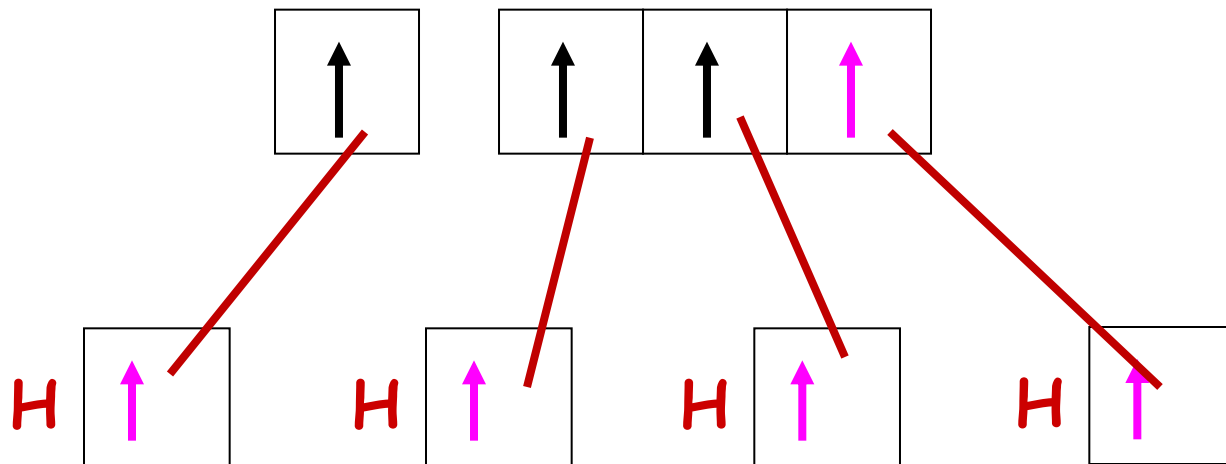
8 e de valence \rightarrow 4 paires d'e

Schéma de Lewis moléculaire "standard"

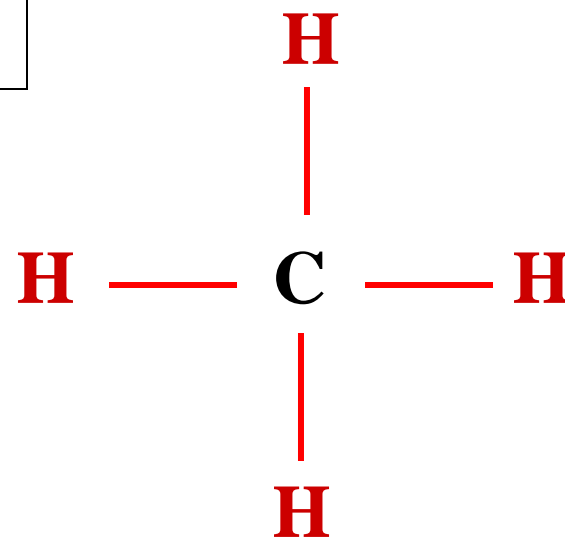


Exemple : Molécule CH_4

C^* $s^1 p^3$ Valence 4



8 e de valence \rightarrow 4 paires d'e



Exemple : Molécule AlCl_3

Configurations électroniques :

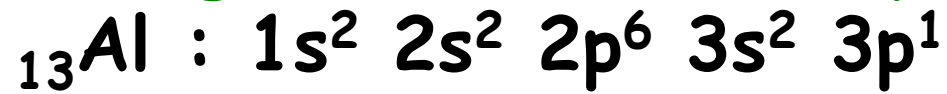
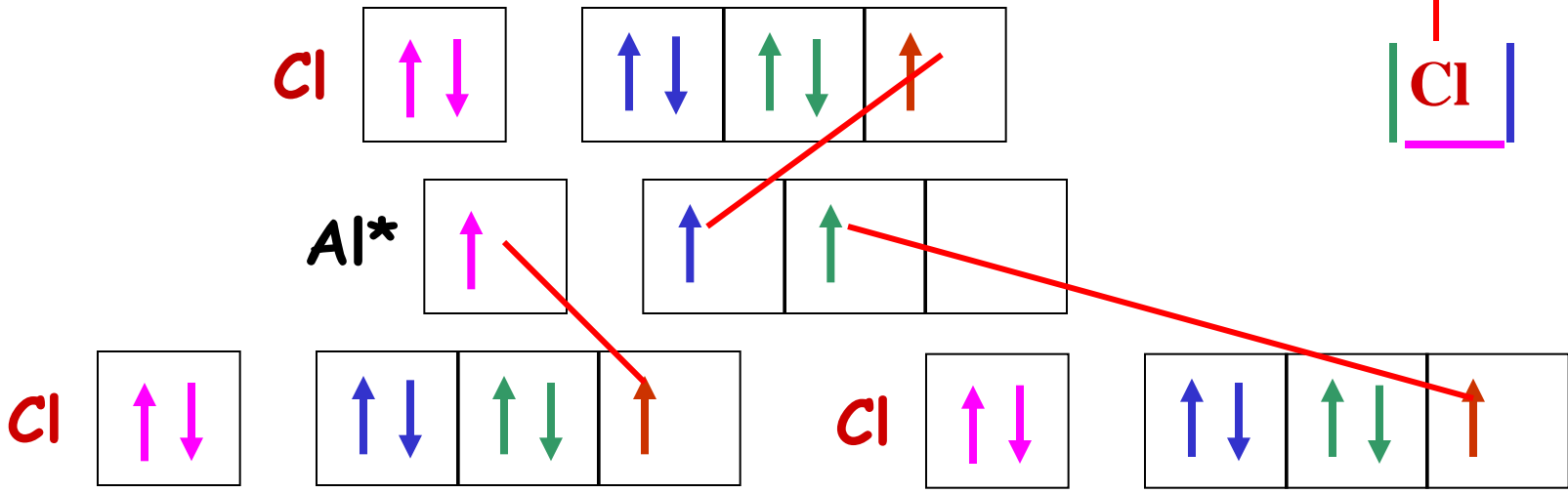
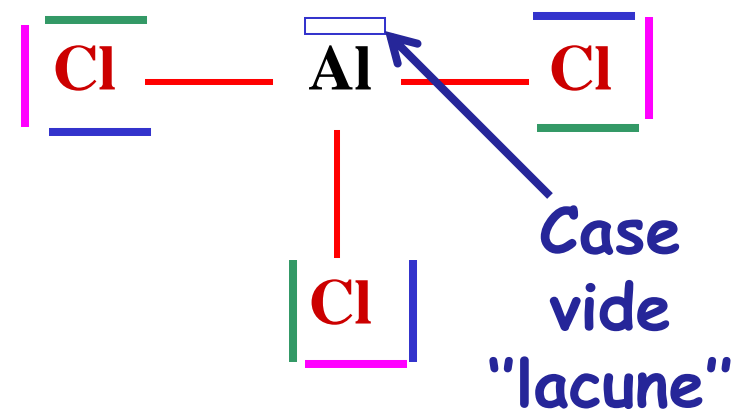
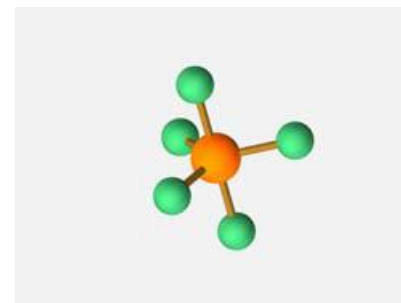
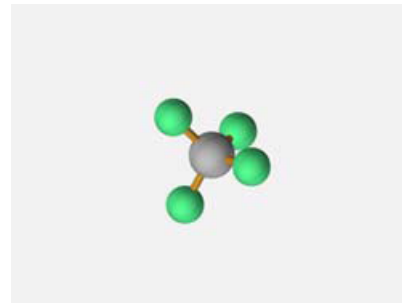
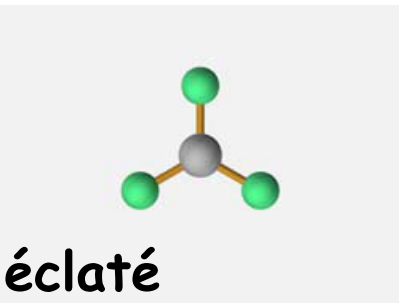
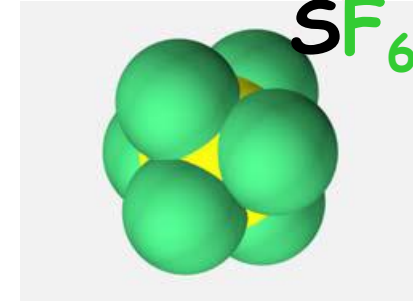
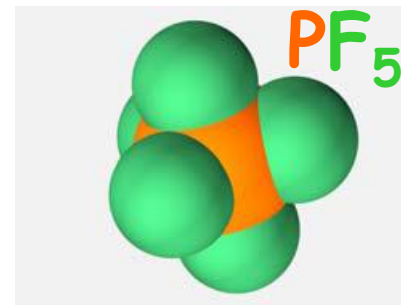
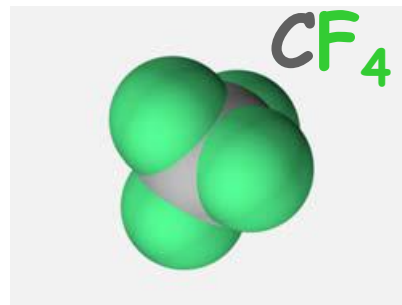
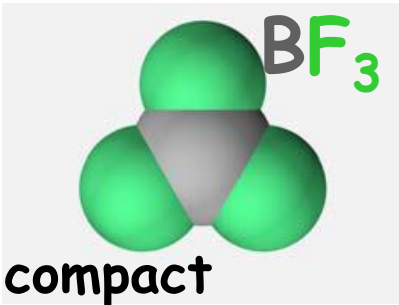


Schéma de Lewis moléculaire "standard"

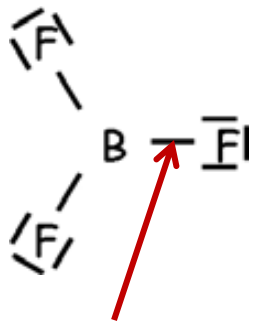
Schéma de Lewis moléculaire "cases quantiques"



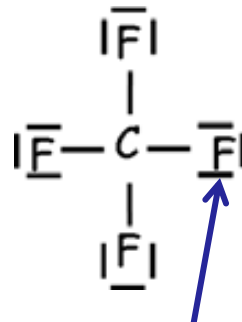
24 e de valence → 12 paires d'e



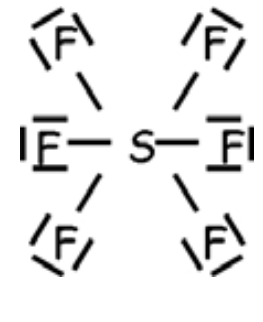
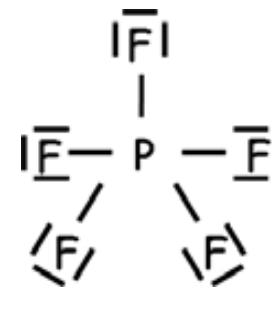
Représentations de Lewis



Liaison assurée par une
paire électronique

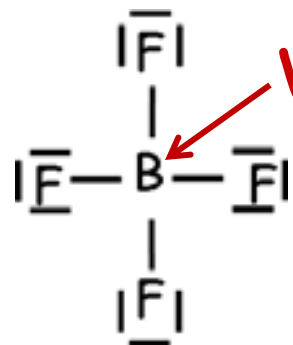


Paire électronique appelée
paire non-liante



Déterminer les paires électroniques??

Décompte des électrons et prévoir la charge??



16 Paires (32e)

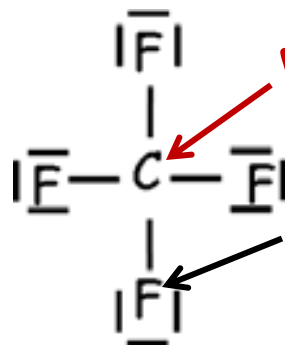
3 électrons
apportés par B

7x4 électrons
apportés par F

31 e

1e sup.

1 charge (-)



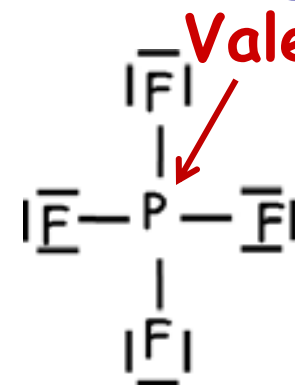
16 Paires (32e)

4 électrons
apportés par C

7x4 électrons
apportés par F

32 e

Pas de
charge



16 Paires (32e)

5 électrons
apportés par P

7x4 électrons
apportés par F

33 e

Manque 1e.
1 charge (+)

La molécule de dioxyde de carbone CO_2

On calcule le nombre total d'électrons de valence dans la molécule: **a**
C et 2 O $\rightarrow 4 + (2 \times 6) = 16$ électrons de valence

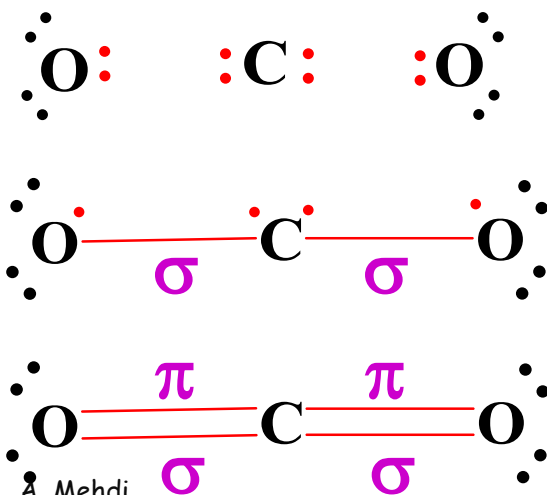
On calcule le nombre d'électrons nécessaire pour satisfaire à la règle de l'octet pour les atomes: **b**

$3 \times 8 = 24$ électrons

(dans le cas de H, on ne compterait que deux électrons par atome H)

Le nombre d'électrons partagés est: **c = b - a. 8 électrons**

On place les atomes autour de l'atome central de la molécule



Le nombre d'électrons σ est calculé ; c'est le double du nombre de liaisons simples à créer entre les atomes : ici, il faut prendre 4 électrons σ .

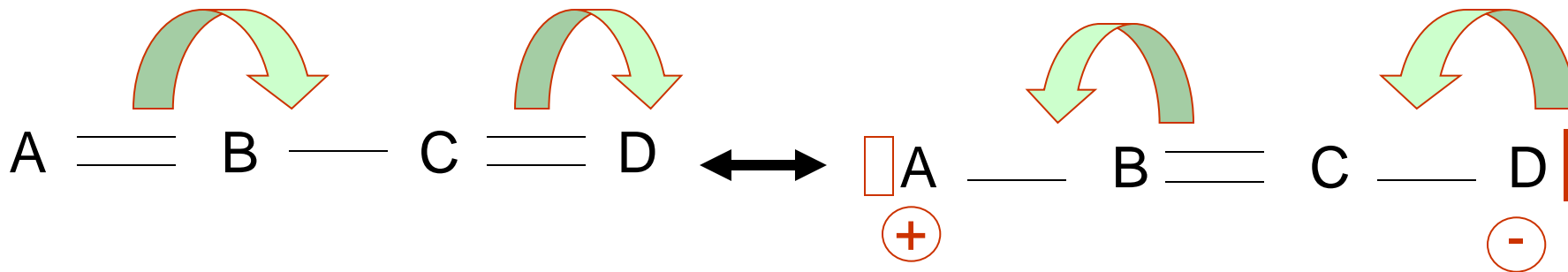
Le nombre d'électrons π est déterminé comme la différence entre le nombre d'électrons partagés et le nombre d'électrons σ . $8 - 4 = 4$: 2 liaisons π .

Formes mésomères

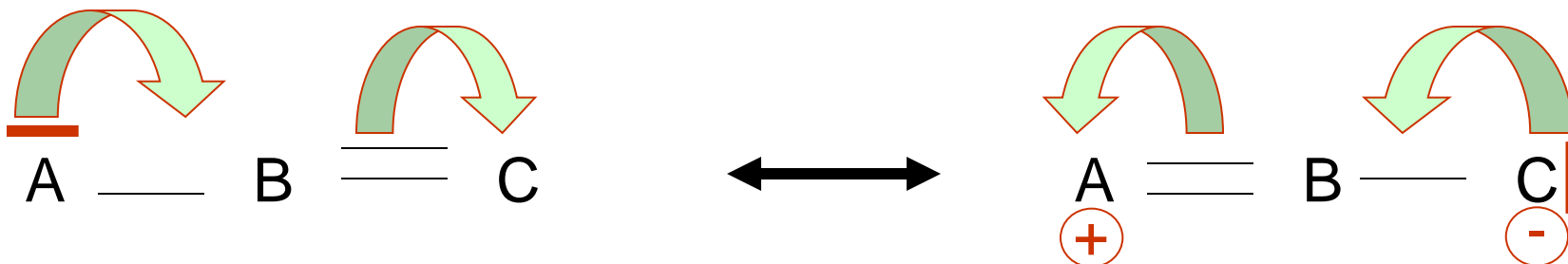
Principaux cas de mésomérie

: déplacement d'un doublet d'e⁻

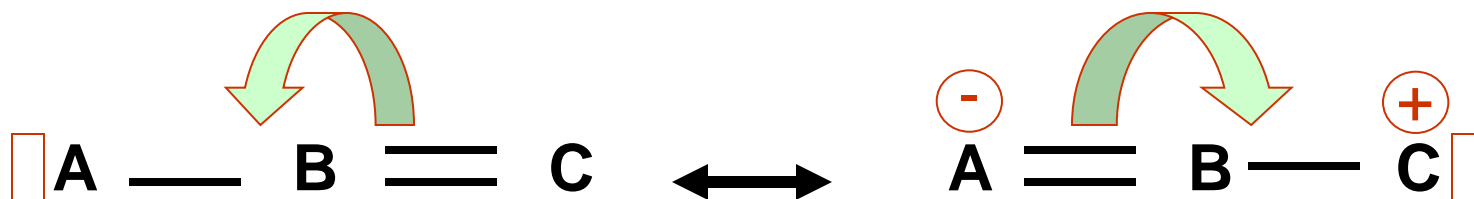
Alternance simple liaison-double liaison



Participation d'un doublet libre



Participation d'une case vide



Les entités moléculaires chargées

Exemple : Na_2CO_3

2 Na^+ et une entité moléculaire chargée CO_3^{2-}

Nombre total d'électrons de valence

$4 + (3 \times 6) + 2 = 24$ électrons de valence

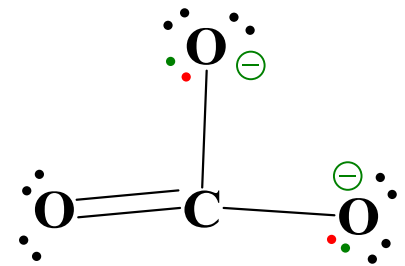
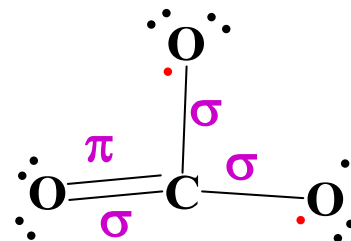
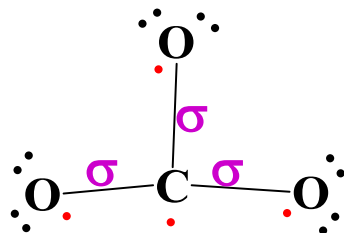
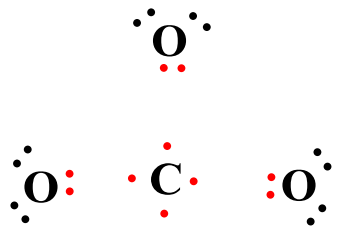
Règle de l'octet

$4 \times 8 = 32$ électrons

Nombre d'électrons partagés :

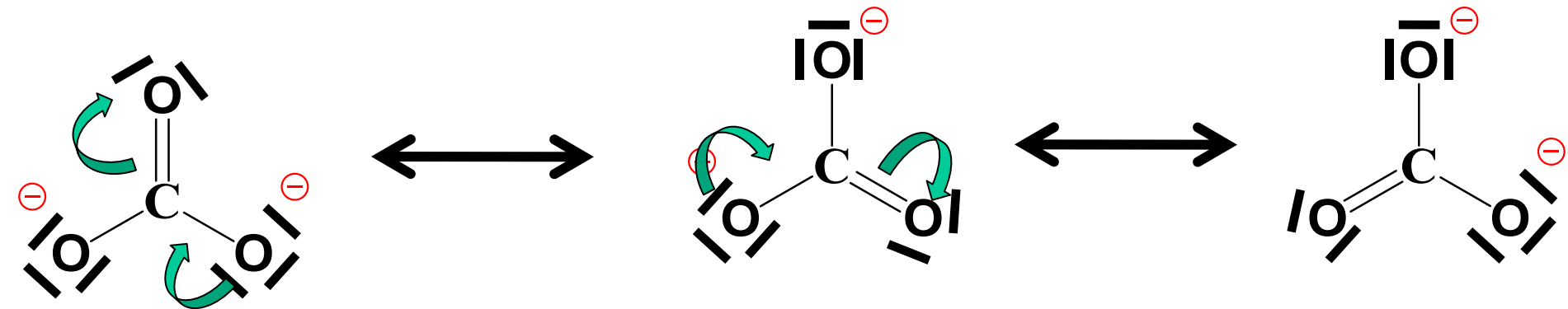
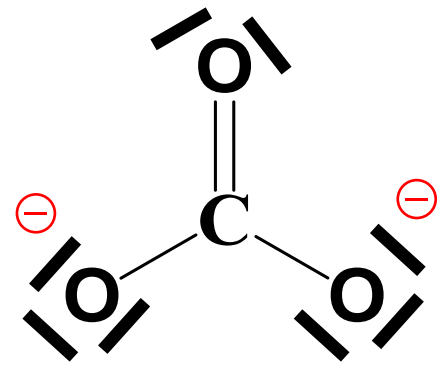
$32 - 24 = 8$

6 électrons σ (3 liaisons) 2 électrons π (1 liaison)

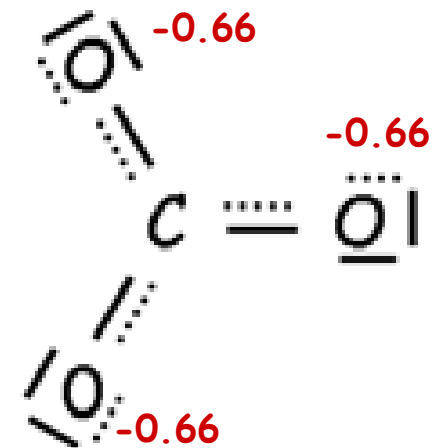


Entité moléculaire CO_3^{2-}

Plusieurs formes
mésomères



La "meilleure" représentation
de Lewis de l'ion CO_3^{2-}





La charge formelle

Ne représente pas la charge réelle sur un atome dans une molécule

Permet de nous aider à vérifier la validité d'une représentation Lewis

Il faut minimiser les charges formelles dans une structure de Lewis

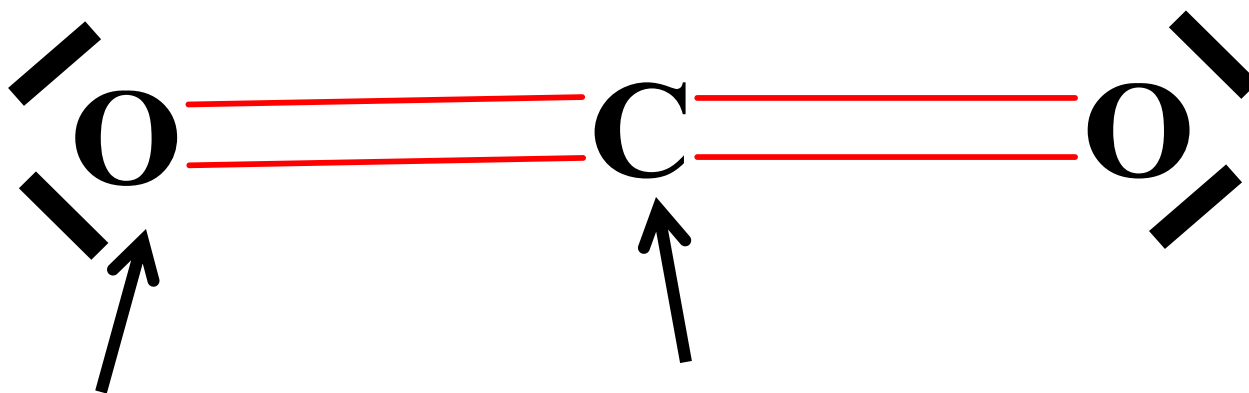
Eviter les charges formelles positives sur un atome d'une forte électronégativité

Comment calculer de la charge formelle

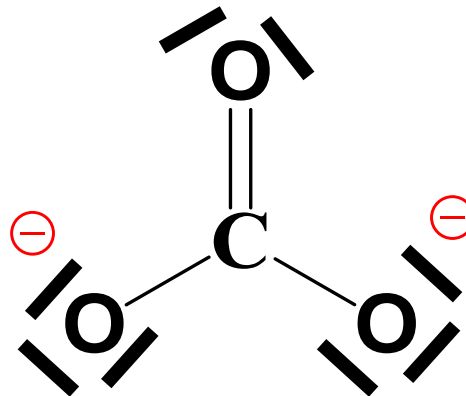
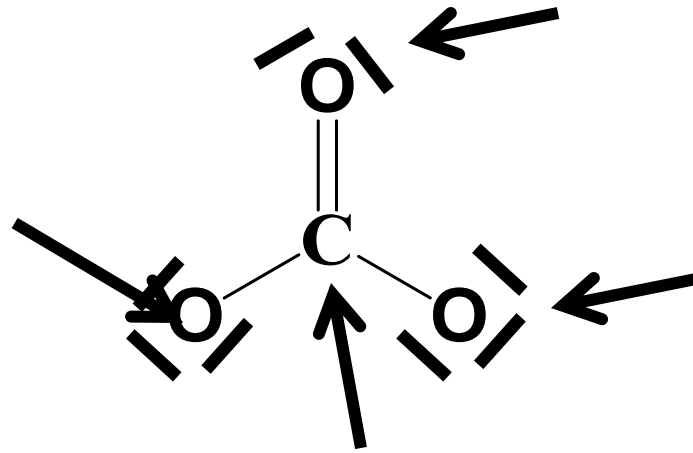
Charge formelle =

nb e de valence (atome neutre) - nb e sur l'atome

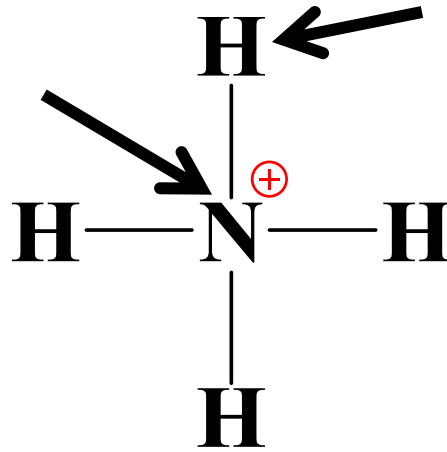
nb e sur l'atome = ses propres e + la moitié d'e partagés



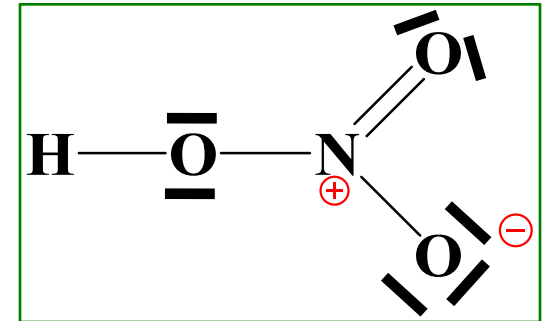
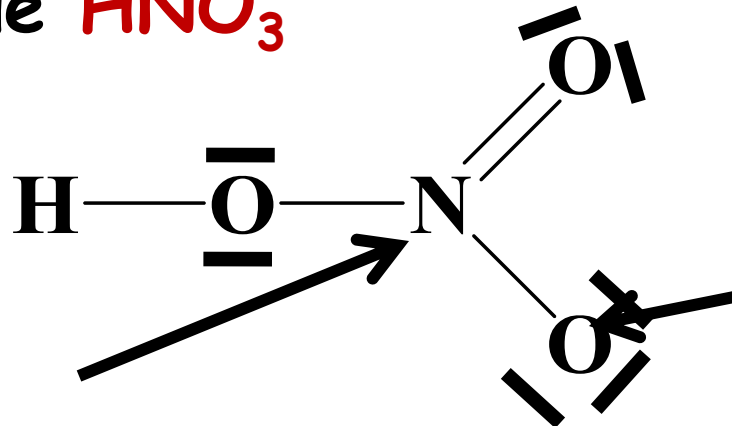
Entité moléculaire CO_3^{2-}



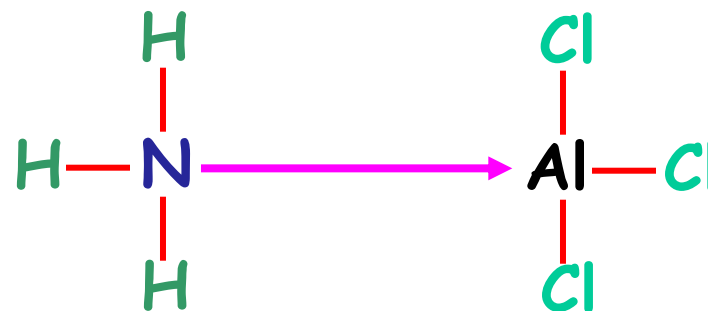
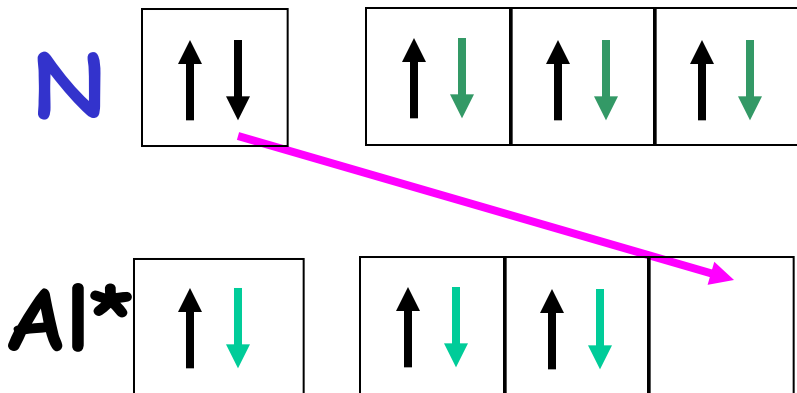
Entité moléculaire NH_4^+



Acide nitrique HNO_3



Liaison de Covalence dative (ou liaison de coordination)



L'atome d'azote N a perdu 1 électron et l'atome Al en a reçu 1

Charges formelles