

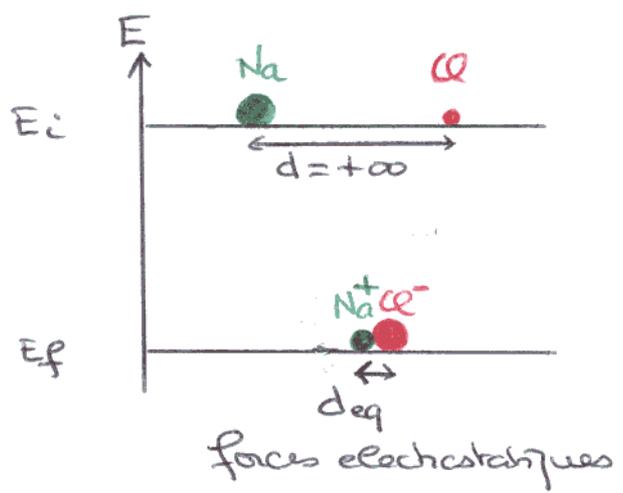
# MOLÉCULES : THÉORIE DE LEWIS

## I. Liaison covalente.

### I.1. Liaisons entre atomes.

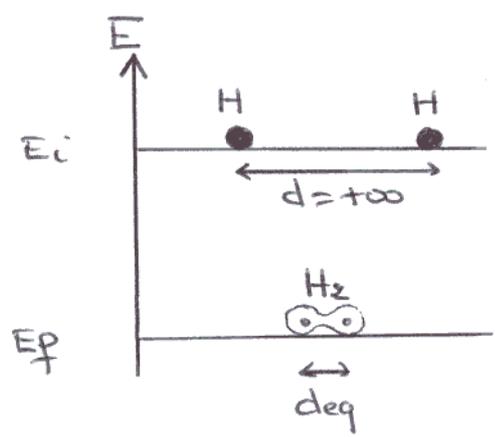
\* mélange d'atomes = création d'édifices + stables

#### \* Liaison ionique



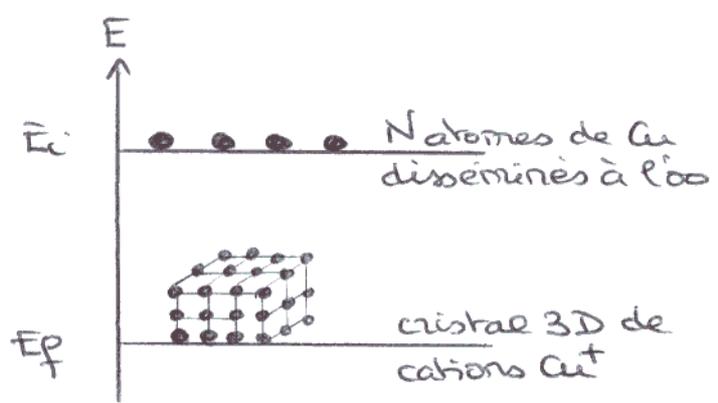
$A + B \rightarrow A^+ + B^-$   
 possible si: A électropositif  
 et B électro-négatif  
 =  $\chi(B) - \chi(A) > 1,5$   
 : A  $s^1$  ou  $s^2$  ou  $d^x$   
 B  $p^4$  ou  $p^5$

#### \* Liaison covalente



$A + B \rightarrow A - B$   
 possible si A et B électro-négatifs  
 = bloc p + hydrogène H

#### \* Liaison métallique



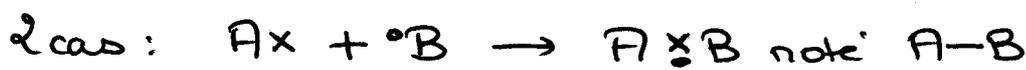
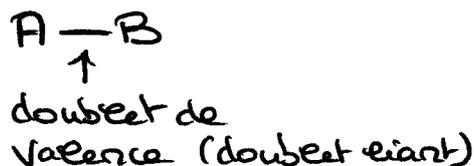
possible si A électropositif  
 => bloc s, d, f

\*  $\Delta$  transition continue entre liaison ionique et covalente.

## 1.2 Théorie de Lewis.

\* (i) Seules les  $e^-$  de valence participent à la liaison covalente ( $e^-$  de cœur trop attirés par noyau). Nu  $e^-$  de valence.

\* (ii) Liaison covalente: mise en commun doublet d'électrons



rem: théorie complète: orbitales moléculaires obtenues par CLOA, justifie paire d' $e^-$

\* (iii) Règle de l'octet.

permet de déterminer le nombre de liaisons covalentes qu'engage un atome dans une molécule

$\Rightarrow$  Chaque atome s'entoure:

- d'un doublet d'électron pour première période ( $\#$ )
- de 4 doublets pour  $n \geq 2$  (octet).

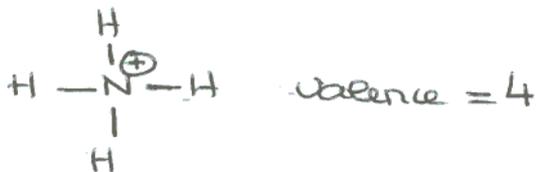
justification: chaque atome acquiert ainsi la configuration électronique du gaz noble qui suit dans la classification.

$\Rightarrow$  stabilisation énergétique



La valence est  $\neq$  à  $q \neq 0$

expe :  $\text{NH}_4^+$



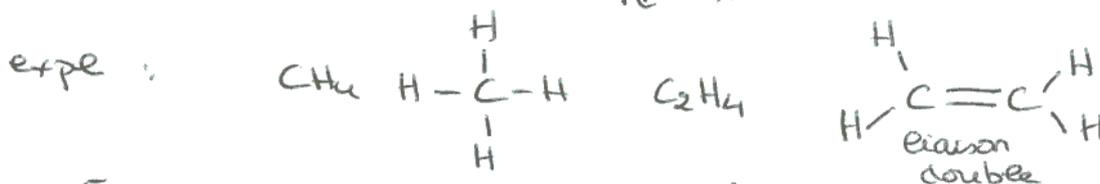
N porte une charge formelle  $\oplus$  car  $N_0 = 5$   
 $N_a = 4$

\* Valence de qq elements :

H :  $N_0 = 1$  valence = 1. expe :  $\text{H}_2$   $\text{H}-\text{H}$

C :  $N_0 = 4$  valence = 4 , s'interprete à partir

d'un état excité de C :  $\left[ \begin{array}{l} \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow 2p^3 \\ \uparrow\downarrow 2s^1 \\ \uparrow\downarrow 1s^2 \end{array} \right] \cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}$

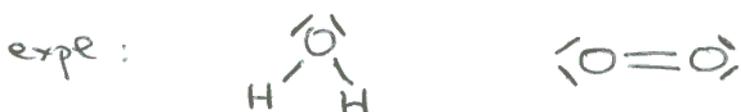


N :  $N_0 = 5$  valence = 3 expe

$\text{N} \equiv \text{N}$   
liaison triple

O :  $N_0 = 6$  valence = 2

$\left[ \begin{array}{l} \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow 2p^4 \\ \uparrow\downarrow 2s^2 \\ \uparrow\downarrow 1s^2 \end{array} \right] \cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{O}}}$



F :  $N_0 = 7$  valence = 1

$\left[ \begin{array}{l} \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow 2p^5 \\ \uparrow\downarrow 2s^2 \\ \uparrow\downarrow 1s^2 \end{array} \right] \cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{F}}}$



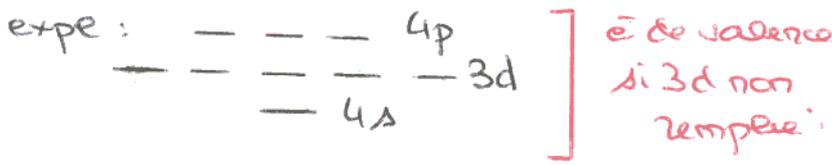
Ne :  $N_0 = 8$  valence = 0

$\left[ \begin{array}{l} \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow 2p^6 \\ \uparrow\downarrow 2s^2 \\ \uparrow\downarrow 1s^2 \end{array} \right] \cdot \overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{Ne}}}$



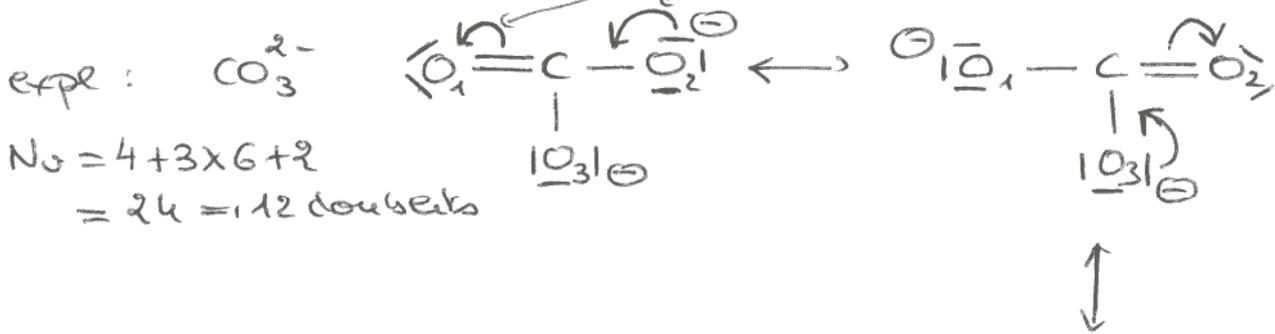
rem: Valence max = No

\* éléments du groupe d : on a alors jusqu'à 18 e de valence



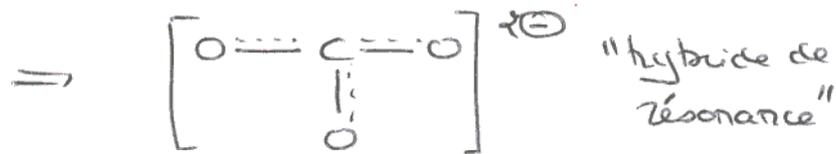
## 1.6. Résonance (résonance)

\* il peut exister plusieurs formules de Lewis pour m molécule



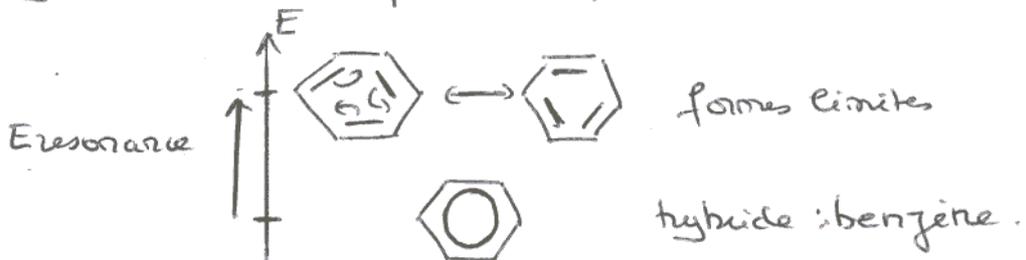
No = 4 + 3x6 + 2  
= 24 = 12 doublets

3 formes mésoformes stables, aucune ne traduit la réalité. L'ion  $\text{CO}_3^{2-}$  est représenté par les 3, avec m poids statistique. résultats exp: m longueurs de liaison C-O (129 pm). Un des doublets de la double liaison est délocalisé sur la structure.



rem: l'hybride + stable que les formes limites.

benzène  
 $\text{C}_6\text{H}_6$ .





# 2. Géométrie des molécules : théorie VSEPR de Gillespie.

## 2.1 Règles de Gillespie.

Valence Shell Electron Pair Repulsion : répulsion des paires d'e<sup>-</sup> de la couche de valence

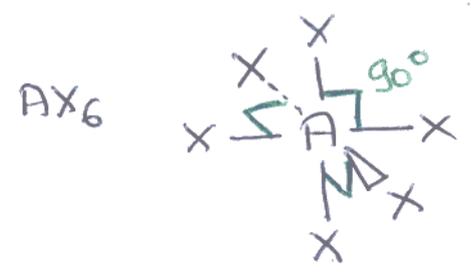
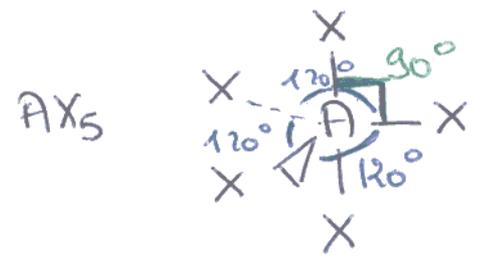
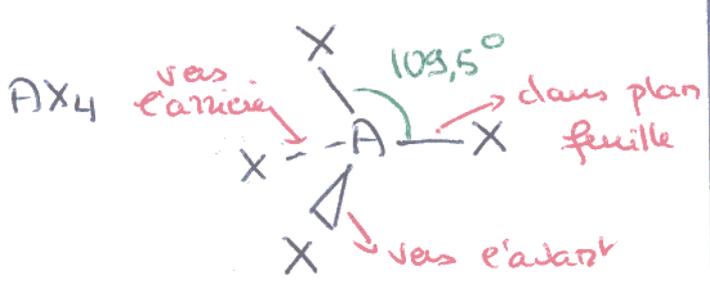
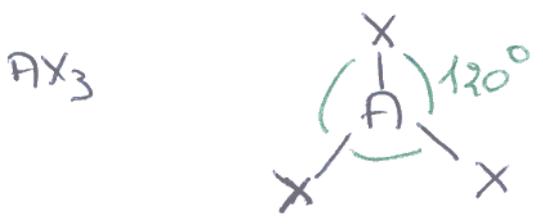
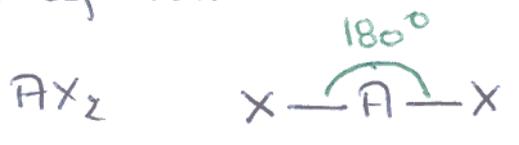
⇒ les paires d'e<sup>-</sup> de valence autour de chaque atome s'éloignent le + possible les uns des autres afin de minimiser l'énergie potentielle électrostatique.

⚠ paires liantes ou non liantes.

## 2.2 Molécules AX<sub>n</sub>.

\* A atome central lié à n atomes ou group<sup>ts</sup> identiques X

\* représentation de Gam



23 molécules  $AX_nE_p$  : p doublets non liants sur A.

\* m figure de répulsion que  $AX_{n+p}$ .

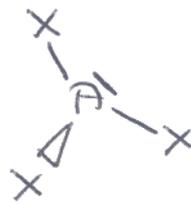
\* répulsion non liant/non liant > non liant/liant > liant/liant

— angles réels  $\neq$  de ceux dans  $AX_n$

\*  $AX_2E$



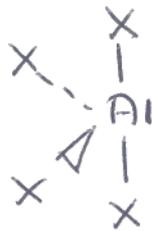
$AX_3E$



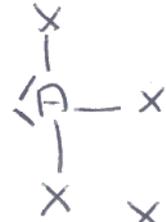
$AX_2E_2$



$AX_4E$



$AX_3E_2$



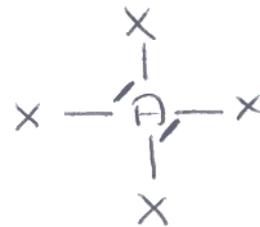
$AX_2E_3$



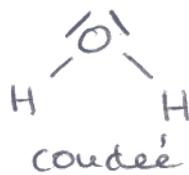
$AX_5E$



$AX_4E_2$

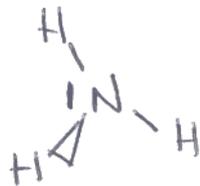


\* expe:  $H_2O$



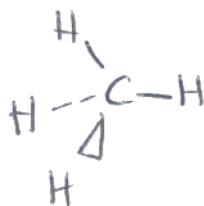
$AX_2E_2$

$NH_3$



$AX_3E$

$CH_4$

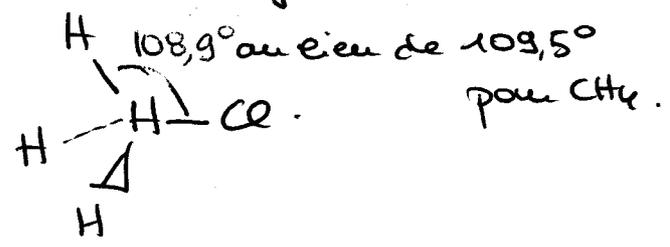


$AX_4$

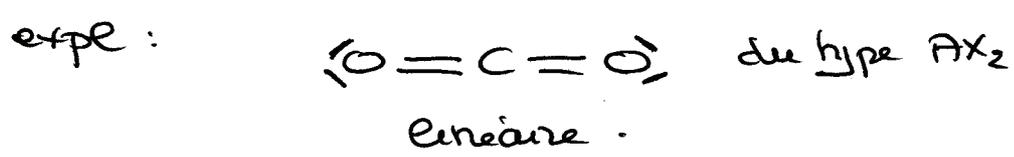
24. Autres molécules.

\* liaisons simples mais groupements  $X_j \neq X_i$

=> bons résultats



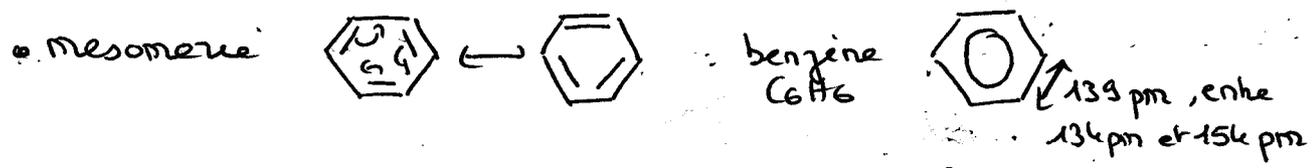
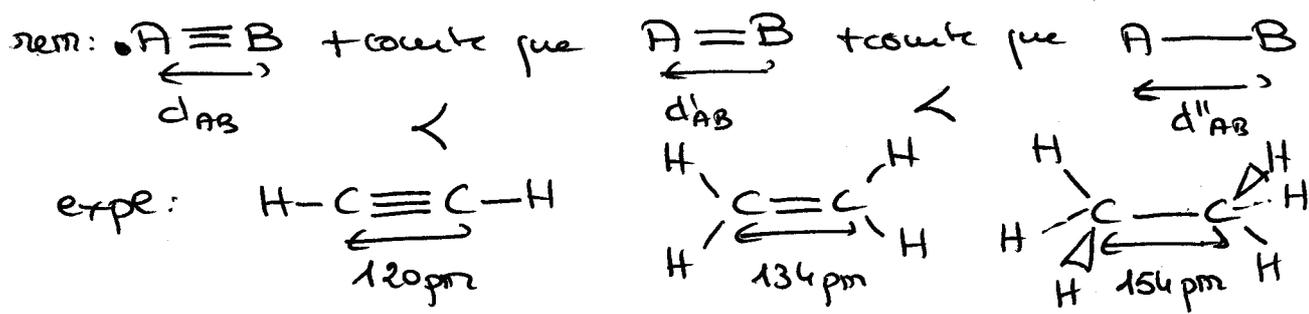
\* liaisons multiples : se comportent comme une seule paire (localisation)



\* mésomérie : géométrie "moyenne" des mésomères prédominants.

25. longueur de liaison / énergie de liaison.

\* d<sub>AB</sub> : distance entre noyaux dans A-B



\* énergie de liaison :



rem : d'autant + grande que d<sub>AB</sub> est petite.

## 2.6 Moment dipolaire

\* molécule diatomique A-B :

si  $\chi(A) > \chi(B) \Rightarrow$



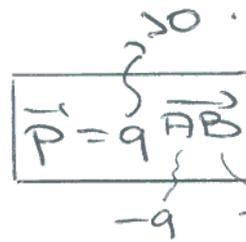
$\delta$  de liaison + produit en moyenne de A

$0 \leq \delta \leq 1$   $\Rightarrow \delta$  : pourcentage de liaison ionique.

↓  
part  
covalent

↓  
part  
ionique :  $\text{A}^{\ominus} + \text{B}^{\oplus}$

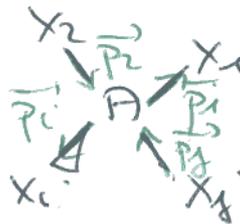
\* moment dipolaire



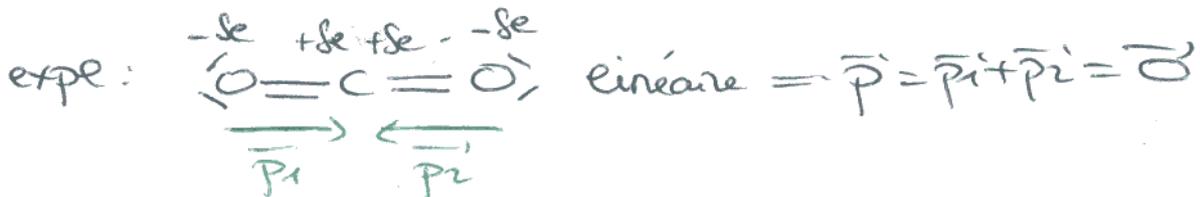
name:  $p = \delta e d$  en C.m, ou tableuse:

$$1D = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m (debye)}$$

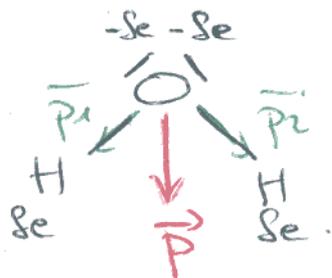
\* molécule  $\text{AX}_1\text{X}_2 \dots \text{X}_N$



$$\vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i, \text{ dépend de la géométrie.}$$



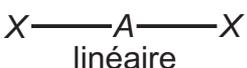
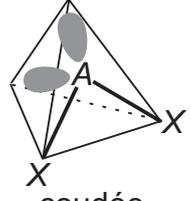
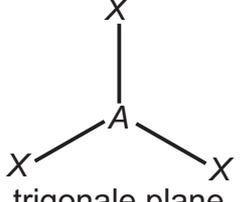
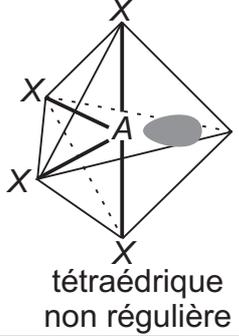
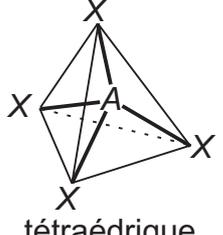
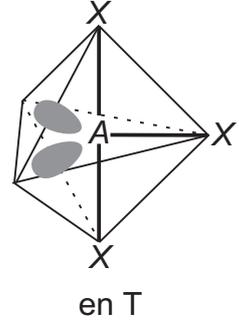
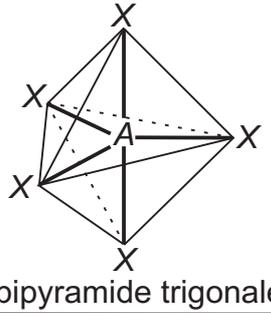
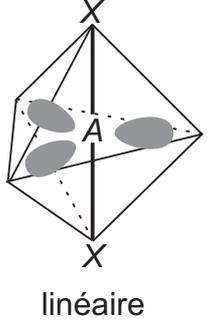
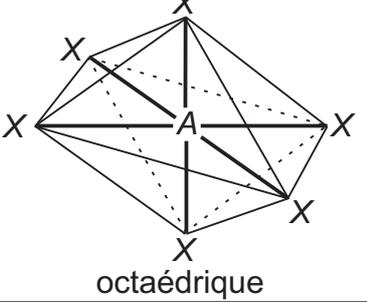
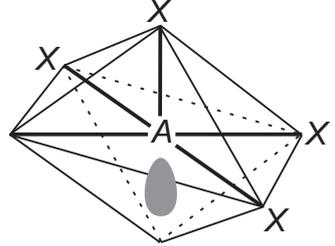
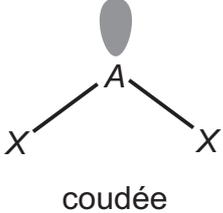
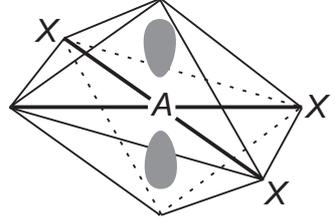
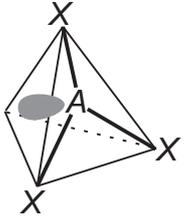
apolaire



$$\text{courbé} = \vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \neq \vec{0}$$

polaire.

## Géométrie des molécules $AX_n$ et $AX_nE_p$

formule		géométrie	formule		géométrie
	$n$ ↓	<b>Molécules <math>AX_n</math></b>			
$AX_2$	2	 <p style="text-align: center;">linéaire</p>	$AX_2E_2$	4	 <p style="text-align: center;">coudée</p>
$AX_3$	3	 <p style="text-align: center;">trigonale plane</p>	$AX_4E$	5	 <p style="text-align: center;">tétraédrique non régulière</p>
$AX_4$	4	 <p style="text-align: center;">tétraédrique</p>	$AX_3E_2$	5	 <p style="text-align: center;">en T</p>
$AX_5$	5	 <p style="text-align: center;">bipyramide trigonale</p>	$AX_2E_3$	5	 <p style="text-align: center;">linéaire</p>
$AX_6$	6	 <p style="text-align: center;">octaédrique</p>	$AX_5E$	6	 <p style="text-align: center;">pyramidale à base carrée</p>
	$n+p$ ↓	<b>Molécules <math>AX_nE_p</math></b>			
$AX_2E$	3	 <p style="text-align: center;">coudée</p>	$AX_4E_2$	6	 <p style="text-align: center;">carré plan</p>
$AX_3E$	4	 <p style="text-align: center;">pyramidale</p>			