

Schéma de Lewis

Les atomes atteignent leur stabilité maximale lorsque leur configuration électronique de valence est identique à celle du gaz noble le plus proche dans le tableau périodique. Dans ce but, un atome peut ainsi établir une ou plusieurs liaisons avec un ou plusieurs autres atomes.

Règle du Duet

L'atome d'hydrogène possède 1 électron de valence et cherche à atteindre la configuration électronique de valence de l'atome d'hélium (He) à 2 électrons. Pour cela, il doit mettre en commun son électron avec un électron de valence d'un autre atome. Le doublet formé constitue une liaison covalente. L'atome d'hydrogène forme donc 1 liaison avec d'autres atomes : on dit qu'il est monovalent.

Règle de l'Octet

Les atomes du bloc p seront le plus souvent entourés de 8 électrons, pour ressembler aux gaz nobles.

Nb e- valence	4	5	6	7
tétravalents				
trivalents				
divalents				
Monovalents				

Règle de l'Octet réduite

Les atomes de la colonne du bore ne possèdent que 3 électrons de valence. Lorsqu'ils les mettent en commun avec les électrons de valence d'autres atomes, ils ne peuvent donc former au maximum que 3 liaisons (6 électrons de valence). Bien que la configuration obtenue ne soit pas celle d'un gaz noble, ces molécules sont cependant stables. Il s'agit de la règle de l'octet réduit. Il manque donc 2 électrons de valence (lacune) à ces éléments pour avoir 8 électrons dans leur couche de valence. Une lacune électronique correspond à l'absence d'une paire électronique (pour atteindre 8 électrons de valence) et est représentée par un rectangle vide.



Acide/Base de Lewis

Un acide de Lewis une espèce chimique dont un des atomes la constituant possède une lacune électronique, ce qui la rend susceptible d'accepter un doublet d'électrons (ex : AlCl_3 , BH_3). A contrario, une base de Lewis est une espèce chimique dont un des constituants possède un doublet ou plus d'électrons libres ou non liants sur sa couche de valence (ex : NH_3 , OH^-).

Électrophiles et nucléophiles

Un électrophile (littéralement "qui aime les électrons") est un composé déficient en électrons. Il est caractérisé par sa capacité à former une liaison avec un autre composé en acceptant un doublet électronique de celui-ci. Cet autre composé, excédentaire en électrons, est appelé nucléophile (littéralement "qui aime les noyaux"). Un atome électrophile porte une charge partielle positive ou une lacune électronique. Un atome nucléophile porte une charge partielle négative ou un doublet non liant.

Charges formelles et réelles

Pour compléter un diagramme de Lewis, on calcule les **charges formelles** (C_f) de chaque atome. La somme des charges formelles est toujours égale à la charge globale (z) de l'édifice. Une règle simple permet leur calcul à priori :

$$C_f = N_V - N_{NL} - N_L/2$$

N_V = nombre d'électrons de la couche de valence de l'atome considéré dans son état fondamental isolé.

N_{NL} = le nombre d'électrons de valence de l'atome engagés dans les doublets non liants, et

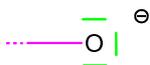
N_L = le nombre d'électrons de valence de l'atome engagés dans des liaisons. La somme de toutes les charges formelles d'une molécule est toujours égale à la charge réelle de cette molécule.

Exemples



O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 4 - 4/2 = 0$;

Dans une molécule l'oxygène divalent est neutre.



O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 6 - 2/2 = -1$;

Dans une molécule l'oxygène monovalent porte une charge formelle -1.

La **charge réelle** C_R est la charge effective de l'édifice moléculaire. Elle est égale à la somme des charges formelles.

Construction des schémas de Lewis

Le dessin d'une molécule faisant figurer l'intégralité des doublets liants et non liants s'appelle un schéma de Lewis. Il existe plusieurs façons d'arriver au schéma de Lewis d'une molécule à partir de sa composition atomique. La série de règles suivantes, à appliquer rigoureusement, permet de dessiner les molécules les plus simples ou les plus compliquées de la chimie.

1. Calcul du nombre de doublets électroniques

- 1.1 Chercher le nombre d'électrons de valence pour chaque atome de la molécule.
- 1.2 Faire la somme de tous les électrons de valence dans la molécule.
- 1.3 Tenir compte de la charge réelle de la molécule s'il y a lieu : retrancher un électron de valence par charge positive et ajouter un électron de valence par charge négative.
- 1.4 Diviser par deux le nombre d'électrons obtenu pour obtenir le nombre total de doublets électroniques (liants et non liants) à faire figurer sur le schéma.

2. Représentation de la molécule avec des liaisons simples

- 2.1 Dessiner l'atome central puis, autour de lui, les atomes périphériques.
- 2.2 Tracer un doublet liant entre l'atome central et chaque atome périphérique.
- 2.3 En déduire le nombre de doublets restants, à partir du nombre de doublets total calculé en 1.4.
- 2.4 Compléter les atomes périphériques avec 3 doublets non liants pour que ceux-ci respectent la règle de l'octet.
- 2.5 S'il reste des doublets, les placer comme doublets non liants sur l'atome central.
- 2.6 Calculer la (ou les) éventuelle(s) charge(s) formelles. Leur somme doit être égale à la charge réelle de la molécule.
- 2.7 Représenter la (ou les) éventuelle(s) lacunes électroniques sur l'atome central.

3. Représentation de la molécule avec des liaisons multiples

- 3.1 Minimiser le nombre de charges formelles et de lacunes électroniques en transformant des doublets non liants présents sur les atomes périphériques en doublets liants avec l'atome central. Apparaissent ainsi des liaisons doubles ou triples.
- 3.2 Si l'atome central est B, C, N ou O, vérifier que la règle de l'octet est toujours respectée. Si ce n'est pas le cas (si l'atome central est entouré de plus de 8 électrons), alors il faut revenir en arrière et s'arrêter au schéma précédent.
- 3.3 Réaffecter les charges formelles aux différents atomes comme en 2.6.
- 3.4 Recommencer l'application de 3.1 jusqu'à ce que le nombre de charges formelles écrites sur le schéma de Lewis soit le même que celui de la formule de la molécule, ou soit minimal.