V.S.E.P.R. sans formalisme de LEWIS

par G. LÉGER Lycée E. Loubet - 26021 Valence

Proposition pour une approche de la théorie V.S.E.P.R. à l'usage des élèves de la classe terminale sans le formalisme de la théorie de Lewis et sans «formule» mathématique.

1. OBSERVATIONS

La référence constante dans les ouvrages à la théorie de Lewis permettant d'aborder la présentation de la géométrie des molécules ne semble nécessaire à ce niveau que par sa relation avec la règle de l'octet présentée en classe de seconde reliée à la présentation des nombres d'oxydation de la classe de première S.

La théorie de Lewis, par son introduction préalable nécessite de présenter la <u>notion de groupe électronique</u> (une double ou triple liaison) ce qui ne simplifie guère la compréhension.

2. BASE DU RAISONNEMENT DE DÉTERMINATION DE LA STRUCTURE $AX_m E_n$

C'est un formalisme en terme d'acceptation d'électrons pour les atomes périphériques et de disponibilité pour l'atome central.

Évaluer sur l'atome central dans la molécule ou l'ion demandé :

2.1. L'indice de coordination de l'atome central

C'est-à-dire <u>le nombre de liaisons réelles effectuées</u> avec les atomes environnants (en précisant bien qu'il n'y a pas lieu de se préoccuper de la nature «double ou triple liaison» si les étudiants venaient à soulever ce point)!

L'atome Central de Carbone est lié à deux atomes d'oxygène dans la molécule	CO_2	AX ₂
L'atome Central d'oxygène est lié à trois atomes d'Hydrogène dans l'ion	H ₃ O ⁺	AX ₃

D'où les indices n = 2 et n = 3 dans les exemples ci-dessus.

2.2. Recherche des n doublets non liants de l'atome Central

• Évaluer d'après le numéro atomique chaque structure des atomes présents.

L'atome de carbone possède donc **deux** paires d'électrons externes disponibles (Z = 6).

L'atome d'oxygène possède donc **trois** paires d'électrons externes disponibles (Z=8).

• Affecter la **charge de l'ion** dont on recherche la structure **sur l'atome central** par addition ou soustraction d'électrons à l'atome neutre. (Ce qui est le point le plus contestable du modèle proposé) mais il ne peut être question de décrire la répartition de charges...

L'atome de Carbone dispose de **quatre** électrons dans la molécule CO_2 et six dans l'ion CO_3^{2-} .

L'atome d'oxygène dispose de cinq électrons dans l'ion H₃O⁺.

On obtient ainsi le nombre d'électrons présents sur l'atome central et que celui-ci peut fournir dans des liaisons de covalence (éventuellement «datives»).

• Déduire le nombre d'électrons ou de doublets que chaque atome environnant doit acquérir pour **suivre la règle de l'octet** <u>en conformité</u> avec **les N.O** présentés en première S.

Dans les deux cas présentés ci-dessus, l'atome d'oxygène peut gagner **deux** électrons (N.O = -II) et chaque atome d'hydrogène **un** (N.O = +I).

N.B. si l'on parle de lier H^+ à la molécule d'eau, le proton H^+ est accepteur d'un doublet complet car il comporte «une lacune électronique».

2.3. Conclusion

Les deux doublets disponibles de l'atome de carbone sont récupérés par les deux atomes d'oxygène de la molécule CO_2 et dans ce cas m = 0.

Trois électrons servent aux trois liaisons avec les atomes d'hydrogène dans l'ion H_3O^+ .

Il reste donc un doublet libre non utilisé. Ici $m\!=\!1$ d'où le symbolisme :

$$CO_2 AX_2 H_3O^+ AX_3E$$

3. EXEMPLE DE PRÉSENTATION DE STRUCTURE V.S.E.P.R.

3.1. L'ion carbonate CO₃²⁻

Formalisme classique

La somme des charges formelles donnant $\Sigma Cf = -2$. On a donc vingt-quatre électrons en tout (quatre pour le carbone, 3×6 en provenance des atomes d'oxygène et deux enfin d'après la charge de l'ion). Chaque atome doit satisfaire à la règle de l'octet et comporter huit électrons externes. Deux atomes d'oxygène dotés de la charge négative se lient par liaison simple au carbone, l'autre par double liaison pour assurer la géométrie trigonale. Celle-ci sera en fait comptée comme un seul groupe électronique en théorie V.S.E.P.R. pour justifier le carbone trigonal!

Formalisme risqué

Chaque atome d'oxygène se lie avec une paire d'électron cédée par le carbone qui du fait de la charge de l'ion en comporterait trois paires d'où l'absence de doublets non liants et la géométrie trigonale correspondant AX_3 .

Erreur classique des élèves parce qu'évidente :

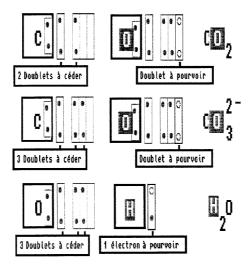
«Carbone disposant de trois doubles-liaisons»

Formalisme proposé

Deux électrons de plus sur le carbone central lui confèrent trois doublets, chacun d'eux est cédé à un atome d'oxygène accepteur.

Ainsi,

On ne se préoccupe de l'association électronique que constitue la liaison covalente qu'en terme «Donneur»-«Accepteur»! entre l'atome central et les atomes associés (cadre foncé ci-après). Reste l'existence des limites de modèles de représentation d'une réalité bien plus complexe...



A PROPOS DE LA THÉORIE DE LEWIS

Le principe des charges formelles portées par les atomes n'étant pas au programme actuel de terminale S, il convient de se retourner vers les nombres d'oxydation présentés en première S pour sensibiliser les élèves à l'idée que les charges se placent réellement sur les liaisons moléculaires en accord avec l'électronégativité des éléments et que dans un composé c'est par exemple l'oxygène qui tend plutôt à attirer les électrons et l'hydrogène à les perdre (cf. H_3O^+).

Dans ces conditions il semble peu indiqué de discuter des modèles faisant place à la notion de mésomérie, notion qui sera présentée en première année d'université. Seules les doubles ou triples liaisons devraient apparaître dans les molécules ou ions (CO₂, HCO₃⁻).

Ainsi dans le cas de CO₂ la molécule linéaire apparaîtra bien dotée de deux doubles liaisons.

Dans le cas d'H₃O⁺ les liaisons O-H ne peuvent être discernables, ce qui à ce niveau favorise plutôt l'interprétation par le départ <ô combien suspect !> de l'électron de l'atome central tout en correspondant bien à la géométrie symétrique.

En conclusion

La théorie de Lewis sera présentée à la suite de l'étude de la géométrie des molécules conformément à la présentation ci-dessus.

BIBLIOGRAPHIE

- J.-P. Foulon pour une présentation classique, B.U.P. n° 767.
- F. Soulié pour une position similaire.

Annexe Autres exemples d'application*

	Électrons présents sur l'atome A	Association et accepteur(s) des ligands X	Modèle
03	0(6)	2 liaisons O-O (2 × 2)	AX2E
SO ₂	S(6)	2 liaisons S-O (2×2)	AX2E
SO ₃	S(6)	3 liaisons S-O (3×2)	AX3
SO ₃ ² -	S(8)	3 liaisons S-O (3×2)	AX3E
SO ₄ ² -	S(8)	4 liaisons S-O (4 × 2)	AX4
H ₂ SO ₄	S(6)	4 liaisons S-O $\{(2 \times 2) + 2 \times 1\}$	AX4
NH ₂ ⁻	N (6)	2 liaisons N-H (2 × 1)	AX2E2

^{*} Voir l'article de F. Soulié.