



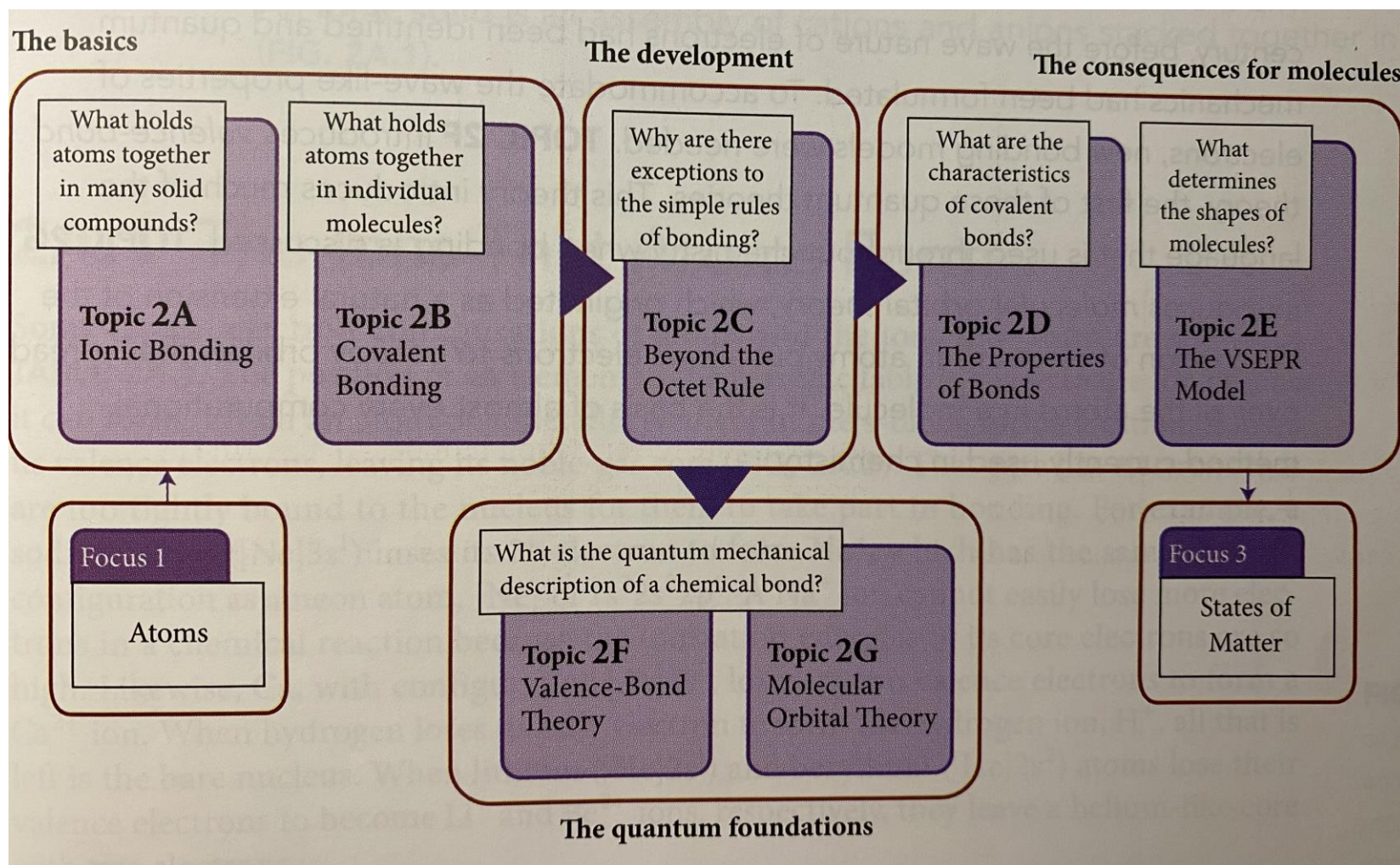
# CH-110 Chimie Générale Avancée I

Prof. A. Steinauer  
angela.steinauer@epfl.ch

# Liaisons Entre Atomes

Focus 2

# Vue d'ensemble Chapter 2 (Focus 2: Liaisons entre atomes)



# Liaison Covalente

Sujet 2B

# Sujet 2B.1 Structures de Lewis

# Sujet 2B.2 Résonance

# Sujet 2B.3 Charge Formelle

POURQUOI AVEZ-VOUS BESOIN DE  
CONNAÎTRE CE MATÉRIEL ?

- Comprendre la nature de la liaison covalente est essentiel pour interpréter les structures, les propriétés et les réactions des molécules.

QUE FAUT-IL DÉJÀ SAVOIR ?

- Configurations électroniques d'atomes à plusieurs électrons (Sujet 1E)
- Symboles de Lewis (Sujet 2A)
- Nomenclature des différents types de composés (Fondamentaux D et C)
- Notion de nombre d'oxydation (Fondamentaux K)
- Concept d'électronégativité (Sujet 1F)

# Symboles de Lewis

Sujet 2B.1

## 2B.1: Symboles de Lewis

### La nature des liaisons covalentes

- Comment les non-métaux forment-ils des liaisons ? Avec des énergies d'ionisation trop élevées pour former des ions ?
- Pourquoi existe-t-il **une valence particulière d'un élément** (un nombre préféré de liaisons qu'il souhaite former) ?
- In 1916, G. N. Lewis published an explanation:

**Il a proposé qu'une liaison covalente soit une paire d'électrons partagés entre deux atomes.**

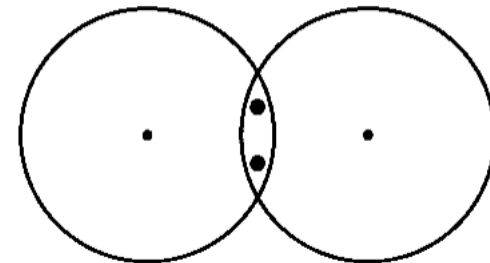


Figure 2B.1

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Règle de l'octet

- Lorsque les atomes forment des **ions** : ils **gagnent ou perdent** des électrons pour atteindre le même nombre d'électrons que le gaz noble le plus proche.
- Lorsque les atomes forment des liaisons **covalentes** : ils **partagent** des électrons pour atteindre le même nombre d'électrons que le gaz noble le plus proche.

#### Octet rule:

Dans la formation d'une liaison covalente, les atomes vont aussi loin que possible vers la complétude de leur octet (ou doublet dans le cas de l'hydrogène) en partageant des paires d'électrons.



## 2B.1: Symboles de Lewis

### Liaisons multiples et ordre de liaison

- Une seule paire d'électrons partagée entre deux atomes → **liaison simple**
- Deux paires d'électrons partagées entre deux atomes → **liaison double**
- Trois paires d'électrons partagées entre deux atomes → **liaison triple**
- **Ordre de liaison** : le nombre de liaisons qui lient une paire spécifique d'atomes

Molécule	Ordre de liaison
H <sub>2</sub>	1
F <sub>2</sub>	1
O <sub>2</sub>	2
N <sub>2</sub>	3

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Electrons de valence

Définition: Electrons dans la couche externe (le plus grand nombre quantique principal  $n$ )

- **Pour les éléments des groupes principaux:** seuls les électrons  $s$  et  $p$  de la couche externe comptent.
- *Ex. l'ion iodure,  $I^-$ , avec la configuration électronique  $[Kr]4d^{10}5s^25p^6$ , a huit électrons de valence ; les électrons de  $4d$  ne comptent pas.*
- **Pour les métaux de transition:** les électrons  $s$  et  $d$  au-delà de la configuration de gaz noble qui précède l'élément en question sont considérés comme des électrons de valence.  
*Ex. le manganèse,  $Mn$ , avec la configuration électronique  $[Ar]3d^54s^2$ , a sept électrons de valence.*

## 2B.1: Symboles de Lewis

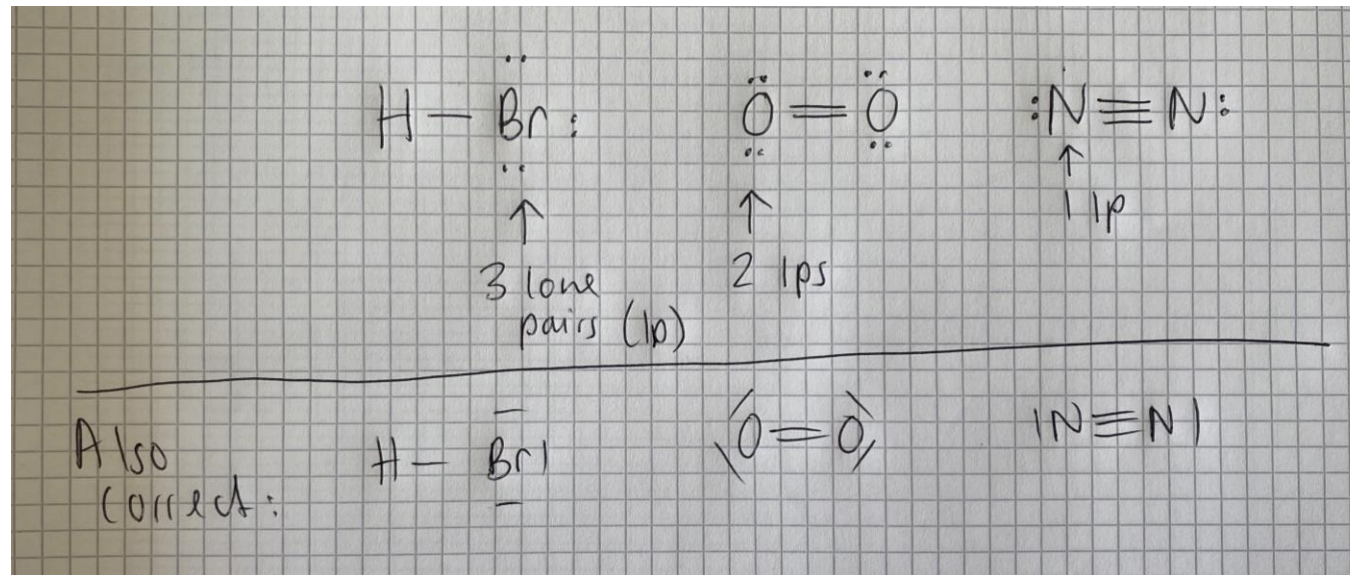
### Paires non liantes

- Une paire non liante ou une paire libre est une paire d'électrons de valence **qui n'est pas impliquée dans la liaison.**
- Dans le  $F_2$ , chaque atome possède trois paires non liantes qui se repoussent fortement, ce qui rend le  $F_2$  très réactif.
- En revanche, le  $N_2$  possède une liaison triple forte et est très non réactif (il est souvent utilisé comme gaz inerte dans les synthèses chimiques).

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Auto-test

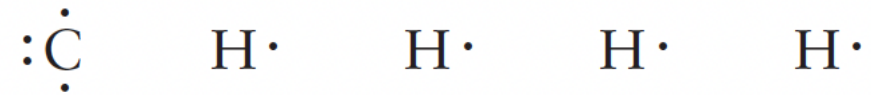
Écrivez les structures de Lewis pour HBr, O<sub>2</sub> et N<sub>2</sub> et indiquez combien de paires libres possède chaque atome.



## 2B.1: Symboles de Lewis

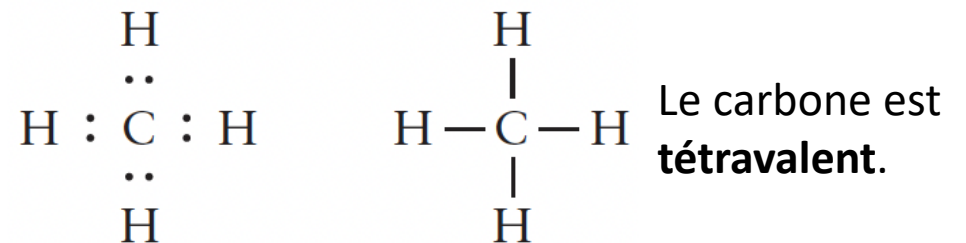
### Structures de Lewis pour les molécules polyatomiques : le méthane CH<sub>4</sub>

1. Comptez les électrons de valence disponibles pour tous les atomes de la molécule:



2. Disposez les points représentant les électrons de sorte que l'atome C ait un octet, que chaque atome H ait un doublet et que les atomes C et H partagent des paires d'électrons.

3. Dessinez la disposition moléculaire ; pour la structure de Lewis finale, remplacez les paires d'électrons par des lignes (liaisons) :



Remarque : la structure de Lewis ne montre pas la forme géométrique d'une molécule!

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Quelques modèles à retenir

- Un atome H est toujours terminal.
- Un atome central est lié à au moins deux autres atomes.
- Choisissez comme atome central l'élément ayant **l'électronégativité la plus faible**.
- Disposez les atomes **symétriquement** autour de l'atome central (ex. OSO, FOF).

*Exception: **N<sub>2</sub>O** (asymétrique, NNO)*

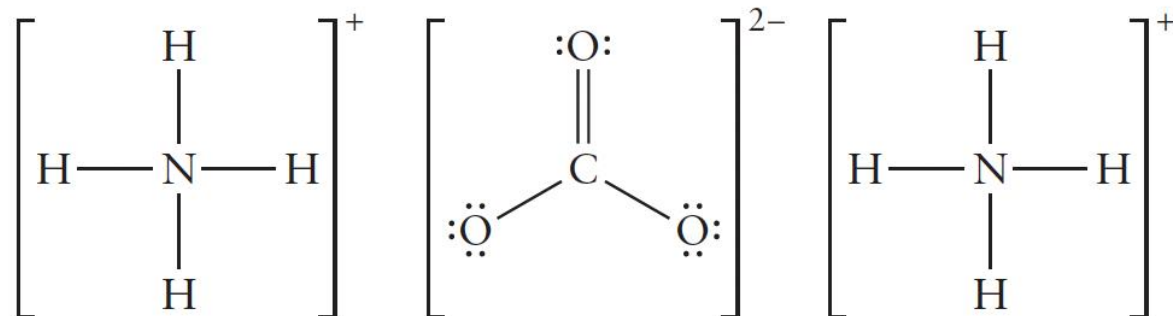
- Pour la plupart des atomes, l'atome central est écrit en premier (ex. CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>)

*Exception: pour les acides, le H est écrit en premier, ex. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, HNO<sub>3</sub>*

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Ions polyatomiques

- Même procédure pour les ions polyatomiques, e.g.  $\text{NH}_4^+$  ou  $\text{CO}_3^{2-}$ .
- Seule différence : des électrons sont ajoutés ou soustraits pour tenir compte de la charge.
- Oxoanions, e.g.  $\text{CO}_3^{2-}$ : le premier atome est l'atome central
- Pour les paires de cations et d'anions : traiter les charges séparément, elles ne partagent pas d'électrons.
- Carbonate d'ammonium  $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ :



## 2B.1: Symboles de Lewis

### TOOLBOX 2.1

### HOW TO WRITE THE LEWIS STRUCTURE OF A POLYATOMIC SPECIES

#### CONCEPTUAL BASIS

We look for ways of using all the valence electrons to complete the octets (or duplets).

#### PROCEDURE

*Step 1* Count the number of valence electrons on each atom; for ions adjust the number of electrons to account for the charge. Divide the total number of valence electrons in the molecule by 2 to obtain the number of electron pairs.

*Step 2* Write down the most likely arrangements of atoms by using common patterns and the clues indicated in the text.

*Step 3* Place one electron pair between each pair of bonded atoms.

*Step 4* Complete the octet (or duplet, in the case of H) of each atom by placing any remaining electron pairs around the atoms. If there are not enough electron pairs, form multiple bonds.

*Step 5* Represent each bonded electron pair by a line.

To check on the validity of a Lewis structure, verify that each atom has an octet or a duplet. As we shall see in Section 2.10, a common exception to this rule arises when the central atom is an atom of an element in Period 3 or higher. Such an atom can accommodate more than eight electrons in its valence shell. Consequently, the most stable Lewis structure may be one in which the central atom has more than eight electrons.

**This procedure is illustrated in Examples 2.3 and 2.4.**

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Exemple 2B.1: Ecrire la structure de Lewis d'une molecule ou un ion

Écrivez les structures de Lewis de (a) l'eau,  $\text{H}_2\text{O}$  ; (b) le méthanal,  $\text{H}_2\text{CO}$  ; et (c) l'ion chlorite,  $\text{ClO}_2^-$ .

	(a) $\text{H}_2\text{O}$	(b) $\text{H}_2\text{CO}$	(c) $\text{ClO}_2^-$
<b>SOLVE</b>			
<i>Step 1</i> Count the valence electrons and adjust the number for charges on ions.	$1 + 1 + 6 = 8$	$1 + 1 + 4 + 6 = 12$	$7 + 6 + 6 + 1 = 20$
Count the electron pairs.	4	6	10
<i>Step 2</i> Arrange the atoms.	H O H	H C O H	O Cl O
<i>Step 3</i> Connect the atoms with bonding electron pairs.	H : O : H	H :C:O H	O:Cl:O
Count electron pairs not yet located.	::(2)	:::(3)	:::::(8)
<i>Step 4</i> Complete the octets.	H : $\ddot{\text{O}}$ : H	H C:: $\ddot{\text{O}}$ H	: $\ddot{\text{O}}$ : $\ddot{\text{Cl}}$ : $\ddot{\text{O}}$ : $\left[ \right]^-$
<i>Step 5</i> Represent the bonds.	H— $\ddot{\text{O}}$ —H	H   C= $\ddot{\text{O}}$   H	: $\ddot{\text{O}}$ — $\ddot{\text{Cl}}$ — $\ddot{\text{O}}$ : $\left[ \right]^-$

## 2B.1: Symboles de Lewis

### Example 2B.2: Ecrire les structures de Lewis pour les molécules ayant plus d'un atome central

Write the Lewis structure for acetic acid,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ , the carboxylic acid in vinegar that forms when the ethanol in wine is oxidized. In the  $-\text{COOH}$  group, both O atoms are attached to the same C atom, and one of them is bonded to the final H atom. The two C atoms are bonded to each other.

**Anticipate** The formula of acetic acid suggests that the molecule consists of a  $\text{CH}_3-$  group and a  $-\text{COOH}$  group. We can anticipate that the  $\text{CH}_3-$  group, by analogy with methane, will consist of a C atom joined to three H atoms by single bonds.

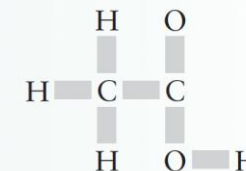
**PLAN** Apply the procedure in Toolbox 2.1.

#### SOLVE

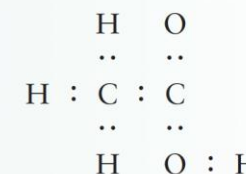
	$\text{CH}_3\text{COOH}$
<b>Step 1</b> Count the valence electrons to determine the number of electron pairs:	.....

$$4 + (3 \times 1) + 4 + 6 + 6 + 1 = 24, 12 \text{ pairs}$$

**Step 2** Arrange atoms (linked atoms are indicated by the rectangles).



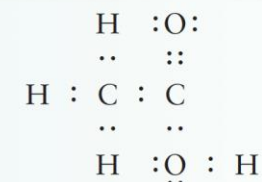
**Step 3** Connect the atoms with bonding electron pairs.



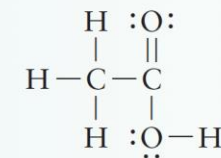
Count electron pairs not yet located.

..... (5 pairs)

**Step 4** Complete the octets.



**Step 5** Represent the bonds.



## 2B.1: Symboles de Lewis

### Résumé

Dans la structure de Lewis d'une espèce polyatomique, tous les électrons de valence sont utilisés pour compléter les octets (ou doublets) des atomes présents en formant des liaisons simples ou multiples ; certains électrons peuvent être laissés sous forme de paires non liantes (paire libres).

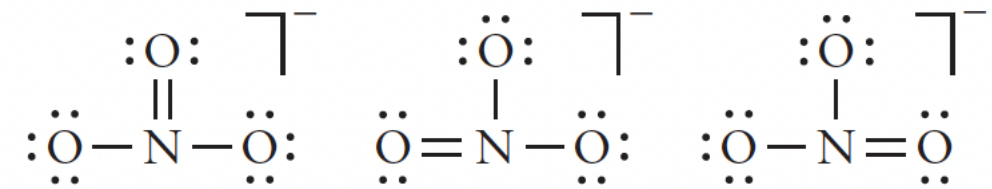
# Résonance

Sujet 2B.2

## 2B.2: Résonance

### Résonance et ordre de liaison

- Certaines molécules ne sont pas représentées de manière adéquate par une seule structure de Lewis.
- Le nitrate,  $\text{NO}_3^-$ , possède trois structures de Lewis valides d'énergie égale :

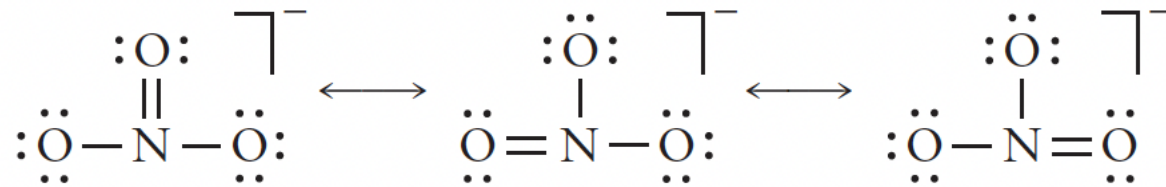


- La longueur de liaison observée est la même pour les trois liaisons : 124 pm
- Typiquement N-O liaison simple: 140 pm, typiquement N=O liaison double: 120 pm
- **L'ordre de liaison** est entre 1 et 2 pour la liaison NO du nitrate

## 2B.2: Résonance

### Structures de Résonance

- Le meilleur modèle consiste à **mélanger les trois structures de Lewis**, chaque liaison a des propriétés intermédiaires entre une simple et une double liaison



- Le mélange des structures est appelé résonance, représenté par des flèches à deux pointes.**

Les **structures de résonance** sont des structures de Lewis alternatives qui ne diffèrent que par la disposition des électrons. La structure réelle est un **hybride de résonance**, avec des électrons **délocalisés** sur la molécule.

## 2B.2: Résonance

### Délocalisation

- Les électrons délocalisés sont **partagés entre plusieurs atomes** plutôt qu'entre seulement deux.
- Les structures de résonance du nitrate n'existent pas en tant que molécules réelles, elles sont simplement une façon de montrer que les **électrons sont répartis à travers la molécule**.
- La délocalisation **stabilise** la molécule et réduit son énergie.

## 2B.2: Résonance

### Règles pour des structures de résonance

- Les atomes sont dans les mêmes positions; seuls les électrons se déplacent.
- Les structures équivalentes contribuent de manière égale à la résonance.
- Les structures à faible énergie contribuent davantage au mélange de résonance que les structures à haute énergie. (Vous verrez comment évaluer les énergies relatives dans la section suivante).
- Il n'y a pas de résonance si les **positions des atomes diffèrent**.

## 2B.2: Résonance

### Exemple 2B.3: Ecrire une structure de résonance

Suggérez deux structures de Lewis qui contribuent de manière égale à la structure de résonance de la molécule  $O_3$ . Les données expérimentales montrent que les deux longueurs de liaison sont identiques.

Solution:

#### EXAMPLE 2.5 Writing a resonance structure

Stratospheric ozone,  $O_3$ , protects life on Earth from harmful ultraviolet radiation from the Sun. Suggest two Lewis structures that contribute equally to the resonance structure for the  $O_3$  molecule. Experimental data show that the two bond lengths are the same.

**PLAN** Write a Lewis structure for the molecule by using the method outlined in Toolbox 2.1. Decide whether there is another equivalent structure that results from the interchange of a single bond and a double or triple bond. Write the actual structure as a resonance hybrid of these Lewis structures.

#### SOLVE

---

Count the valence electrons.

Oxygen is a member of Group 16/VI; so each atom has six valence electrons:  $6 + 6 + 6 = 18$  electrons.

---

Draw a Lewis structure for the molecule.  $:\ddot{O}-\ddot{O}=\ddot{O}$

Draw a second Lewis structure by exchanging the bonds.  $\ddot{O}=\ddot{O}-\ddot{O}:$

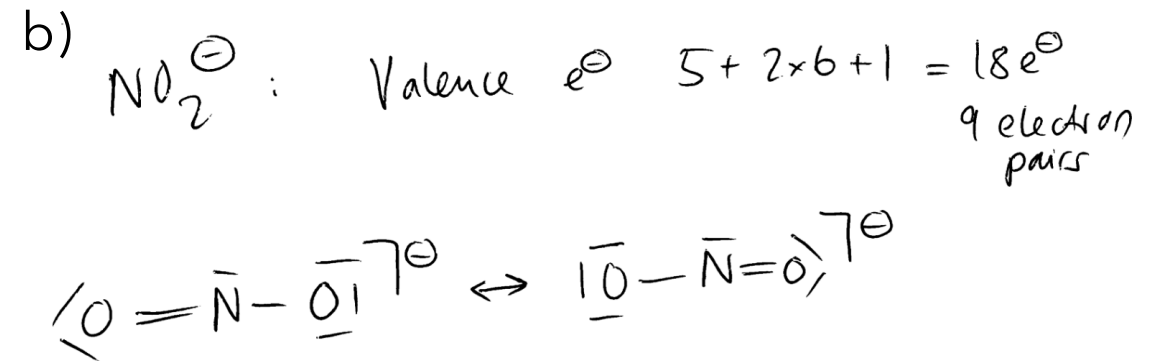
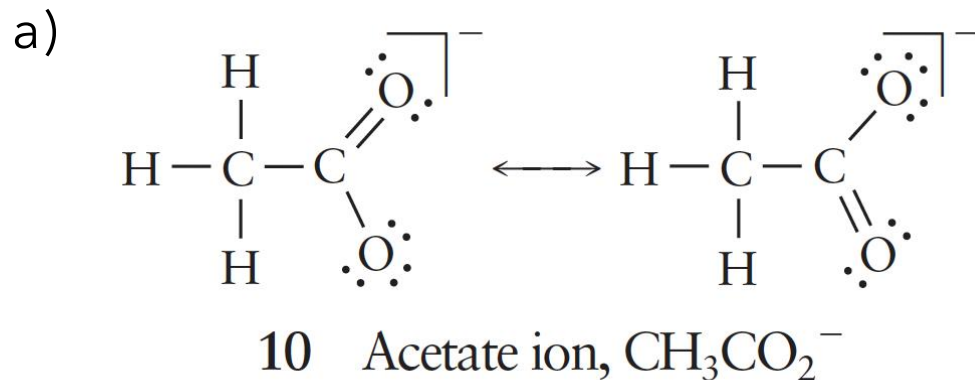
Draw the resonance hybrid as the two resonance structures connected with a double-headed arrow.  $:\ddot{O}-\ddot{O}=\ddot{O} \longleftrightarrow \ddot{O}=\ddot{O}-\ddot{O}:$

## 2B.2: Résonance

### Exemple 2B.3: Ecrire une structure de résonance (tableau)

Écrivez les structures de Lewis contribuant à l'hybride de résonance pour (a) l'ion acétate,  $\text{CH}_3\text{CO}_2^-$  and (b) l'ion nitrite,  $\text{NO}_2^-$ .

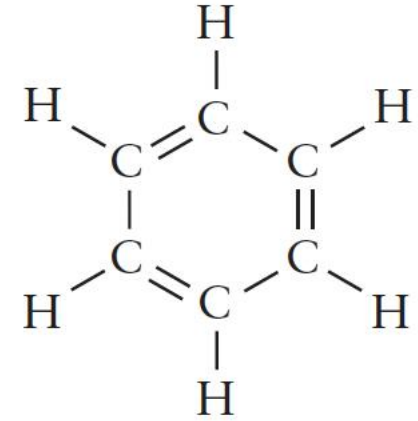
Solution:



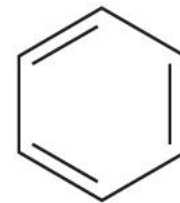
## 2B.2: Résonance

### Benzène, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>

- Le benzène est également un hybride de résonance
- Anneau hexagonal planaire de six C avec chacun un H attaché
- Une structure de Lewis illustrée (**11**) : **structure de Kekulé**
- Forme de ligne ou de bâton équivalente illustrée en (**12**)



11 Kekulé structure



12 Kekulé structure, stick form

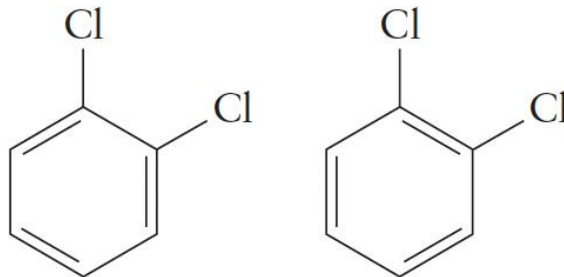
## 2B.2: Résonance

# Les propriétés du benzène ne correspondent pas à la structure de Kekulé

Une structure de Kekulé ne correspond pas à toutes les données expérimentales :

- 1. Réactivité** : le benzène ne subit pas les réactions typiques des composés à doubles liaisons.
- 2. Longueur des liaisons** : toutes les liaisons carbone-carbone du benzène ont la même longueur.
- 3. Preuve structurelle** : il n'existe qu'une seule version du 1,2-dichlorobenzène (dans laquelle les atomes de chlore sont attachés à deux atomes de carbone adjacents).

Si la structure de Kekulé était correcte, il existerait deux versions distinctes du 1,2-dichlorobenzène:

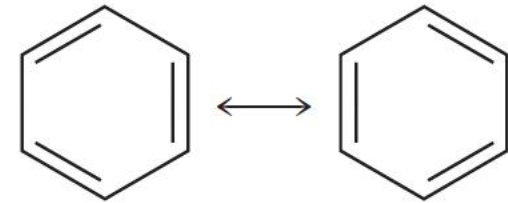


Cependant, une seule existe à notre connaissance!

## 2B.2: Résonance

### Le concept de résonance résout les contradictions

- **Deux structures de Kekulé ayant exactement la même énergie** : elles ne diffèrent que par la position des doubles liaisons (**14**)
- Les électrons partagés dans les doubles liaisons C=C sont **délocalisés sur l'ensemble de la molécule**.
- Longueurs des liaisons intermédiaires entre la simple et la double liaison et identiques (cercle dans **15**)
- La résonance stabilise une molécule → Le benzène est moins réactif que prévu



14 Benzene resonance structure



15 Benzene, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>

## 2B.2: Résonance

### Résumé

La résonance est un mélange de structures ayant le même arrangement d'atomes mais des arrangements d'électrons différents. La résonance entraîne une délocalisation des électrons ; elle répand le caractère de liaisons multiples sur une molécule et permet d'obtenir une énergie plus faible.

# Charge Formelle

Sujet 2B.3

## 2B.3: Charge formelle

### Structures de Lewis non équivalentes

- Ils ont des énergies différentes et contribuent de manière non équivalente.
- La forme la plus stable (la moins énergétique) a des charges formelles les plus proches de zéro.

## 2B.3: Charge formelle

### La charge formelle

- **Charge formelle** : charge qu'aurait un atome si la liaison était parfaitement covalente (chaque atome a exactement une demi-part dans chaque paire d'électrons de liaison). Chaque atome possède toutes ses propres paires et la moitié de chaque paire de liaison partagée.

$$\text{Charge formelle} = V - \left( L + \frac{1}{2}B \right)$$

$V$  est le nombre d'électrons de valence

$L$  est le nombre d'électrons présents sur l'atome (paires non liantes)

$B$  est le nombre d'électrons de liaison sur l'atome.

Charge formelle plus bas → structure plus stable

## 2B.3: Charge formelle

### TOOLBOX 2.2

### HOW TO USE FORMAL CHARGE TO DETERMINE THE MOST LIKELY LEWIS STRUCTURE

#### CONCEPTUAL BASIS

To assign a formal charge, we establish the “ownership” of the valence electrons of an atom in a molecule and compare that ownership with the free atom. An atom owns one electron of each bonding pair attached to it and owns its lone pairs completely. The most plausible Lewis structure will be the one in which the formal charges of the atoms are lowest.

#### PROCEDURE

*Step 1* Decide on the number of valence electrons ( $V$ ) possessed by each free atom by noting the number of its group in the periodic table.

*Step 2* Draw the Lewis structures.

*Step 3* For each bonded atom, count each electron in its lone pairs ( $L$ ), plus one electron from each of its bonding pairs ( $B$ ).

*Step 4* For each bonded atom, subtract the total number of electrons it “owns” from  $V$ , as in Eq. 4.

Each equivalent atom (the same element, the same number of bonds and lone pairs) has the same formal charge. A check on the calculated formal charges is that their sum is equal to the overall charge of the molecule or ion. For an electrically neutral molecule, the sum of the formal charges is zero. Compare the formal charges of each possible structure. The structure with the lowest formal charges represents the least disturbance of the electronic structures of the atoms and is the most plausible (lowest energy) structure.

**This procedure is illustrated in Example 2.6.**

## 2B.3: Charge formelle

### Exemple 2B.4: Sélection de l'arrangement le plus probable des atomes

Écrivez trois structures de Lewis avec différents arrangements atomiques pour **l'ion thiocyanate (SCN<sup>-</sup>)** et sélectionnez la structure la plus probable en identifiant la structure dont les charges formelles sont les plus proches de zéro. Pour des raisons de simplicité, ne considérez que les structures comportant des doubles liaisons entre atomes voisins.

Rappel: Electronegativité TENDANCE:  $F > O > N/Cl > Br > I > S > C/Se > H > \dots$

Ajout important : L'électronégativité de N et de Cl est très similaire. Celle qui est la plus élevée ou la plus faible dépend du tableau périodique que vous utilisez.

Par exemple, pour celui du livre, l'électronégativité de  $Cl > N$ , mais pour celui de la salle de classe,  $N > Cl$ .

## 2B.3: Charge formelle

### Exemple 2B.4: Sélection de l'arrangement le plus probable des atomes

**Anticipate** The element with the lowest electronegativity of the three is carbon, so you should expect it to be the central atom and for the structure to be  $\text{NCS}^-$ .

**Plan** Proceed as set out in Toolbox 2B.2.

**Solve**

**Step 1** Count the valence electrons  $V$  and, for ions, adjust for the charge.

**Step 2** Draw Lewis structures.

**Step 3** For each bonded atom, count both electrons of its lone pairs ( $L$ ), plus one electron from each of its bonding pairs ( $\frac{1}{2}B$ ).

$\text{NCS}^-$	$\text{CNS}^-$	$\text{CSN}^-$
C: 4, N: 5, S: 6 Charge: -1 (16 electrons)	C: 4, N: 5, S: 6 Charge: -1 (16 electrons)	C: 4, N: 5, S: 6 Charge: -1 (16 electrons)
$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{N}}=\text{C}=\ddot{\text{S}}\text{:}^- \\ 6 \quad 4 \quad 6 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{C}}=\text{N}=\ddot{\text{S}}\text{:}^- \\ 6 \quad 4 \quad 6 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{C}}=\text{S}=\ddot{\text{N}}\text{:}^- \\ 6 \quad 4 \quad 6 \end{array}$

**Step 4** For each bonded atom, subtract the total number of electrons it owns from  $V$ , as in Eq. 4.

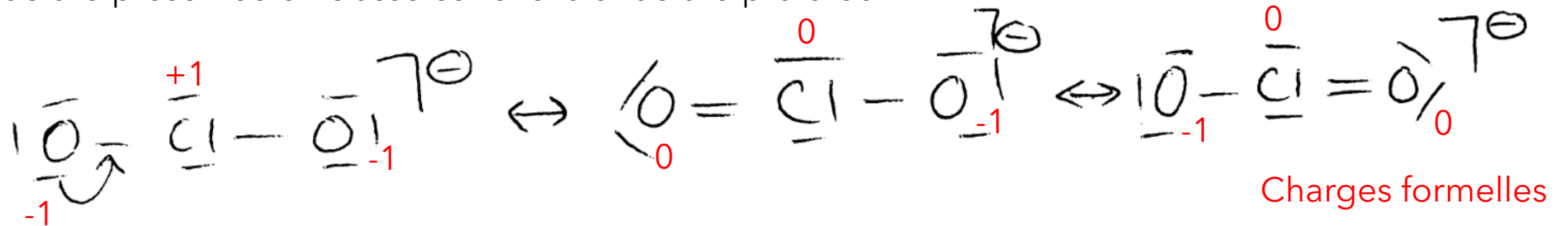
$\begin{array}{c} -1 \quad 0 \quad 0 \\ \text{:}\ddot{\text{N}}=\text{C}=\ddot{\text{S}}\text{:}^- \\ -1 \end{array}$	$\begin{array}{c} -2 \quad +1 \quad 0 \\ \text{:}\ddot{\text{C}}=\text{N}=\ddot{\text{S}}\text{:}^- \\ -1 \end{array}$	$\begin{array}{c} -2 \quad +2 \quad -1 \\ \text{:}\ddot{\text{C}}=\text{S}=\ddot{\text{N}}\text{:}^- \\ -1 \end{array}$
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Evaluate** The individual formal charges are closest to zero in the first column; the atom arrangement  $\text{NCS}^-$  is therefore the most likely one, as anticipated.

## 2B.1: Structure de Lewis

### Question d'un étudiant: l'ion chlorite

La structure de Lewis de l'ion chlorite pourrait également comporter une double liaison. Pourquoi la structure présentée en classe est-elle la structure préférée ?



La première répond à la règle de l'octet. Les deuxième et troisième structures contiennent du chlore hypervalent. Laquelle est la plus proche de la vérité ? L'analyse des charges formelles suggère la deuxième et la troisième structure. En outre, il faut tenir compte de la longueur des liaisons :

Cl-O (liaison simple) : 172 pm

Cl=O (double liaison) : 140 pm

C-O dans  $\text{ClO}_2^-$  : 156 pm → Le chlorite a un ordre de liaison entre 1 et 2.

## 2B.3: Charge formelle

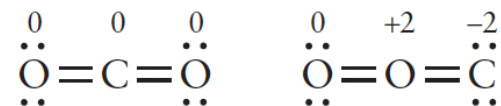
### Charge formelle et électronégativité

- Plus d'électrons que la neutralité → charge négative
- Moins d'électrons que la neutralité → charge positive.
- La structure de Lewis la plus stable a des **charges formelles les plus proches de zéro**, avec la moindre charge positive sur l'atome le moins électronégatif.
- Si les charges sont inévitables, les **charges positives** appartiennent aux atomes **les moins électronégatifs**.

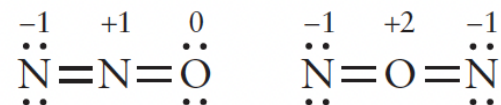
## 2B.3: Charge formelle

# Charge formelle pour prédire la disposition des atomes dans les molécules

- Une **charge formelle faible** (aussi proche que possible de zéro) indique qu'un atome n'a subi qu'une faible redistribution des électrons par rapport à l'atome libre.
- Pour le dioxyde de carbone, la charge formelle prédit que la structure OCO est plus probable que COO.
- De même, elle prédit que NNO est plus probable que NON pour N<sub>2</sub>O.



17



18

## 2B.3: Charge formelle

### Formal charge vs. oxidation number

- **La charge formelle** suppose un **partage égal** → souligne la covalence.
- Le nombre d'oxydation attribue les électrons à l'atome le plus électronégatif → souligne l'ionité.

Exemple:  $\text{CO}_2 \rightarrow$  charge formelle = 0, nombre d'oxydation de C = +4.  $\overset{0}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}=\overset{0}{\text{C}}=\overset{0}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}$

- Les charges formelles dépendent de **la structure de Lewis** dessinée, ce qui n'est **pas** le cas des nombres d'oxydation.
- La charge formelle aide à comparer les structures ; le nombre d'oxydation permet de suivre le caractère redox.

## 2B.3: Charge formelle

### Rappel : Comment attribuer des numéros d'oxydation

#### TOOLBOX K.1

#### HOW TO ASSIGN OXIDATION NUMBERS

##### CONCEPTUAL BASIS

To assign an oxidation number, we imagine that each atom in a molecule, formula unit, or polyatomic ion is present in ionic form (which it might not be). The oxidation number is then taken to be the charge on each “ion.” The “anion” is usually oxygen as  $O^{2-}$  or the element farthest to the right in the periodic table (actually, the most *electronegative* element; see Section 2.12). We then assign to the other atoms charges that balance the charge on the “anions.”

##### PROCEDURE

To assign an oxidation number  $N_{\text{ox}}(E)$  to an element E, we start with two simple rules:

- 1 The oxidation number of an element uncombined with other elements is 0.
- 2 The sum of the oxidation numbers of all the atoms in a species is equal to its total charge.

The oxidation numbers of elements in most of the compounds in this text are assigned by using these two rules along with the following specific values:

- The oxidation number of hydrogen is +1 in combination with nonmetals and  $-1$  in combination with metals.
- The oxidation number of elements in Groups 1 and 2 is equal to their group number.
- The oxidation number of all the halogens is  $-1$  unless the halogen is in combination with oxygen or another halogen higher in the group. The oxidation number of fluorine is  $-1$  in all its compounds.
- The oxidation number of oxygen is  $-2$  in most of its compounds. Exceptions are its compounds with fluorine (in which case, the previous statement takes precedence) and its occurrence as peroxides ( $O_2^{2-}$ ), superoxides ( $O_2^-$ ), and ozonides ( $O_3^-$ ).

This procedure is illustrated in Example K.1.

## 2B.3: Charge formelle

### Résumé

La charge formelle donne une indication de la mesure dans laquelle les atomes ont gagné ou perdu des électrons dans le processus de formation des liaisons covalentes ; les arrangements d'atomes et les structures de Lewis ayant les charges formelles les plus faibles sont susceptibles d'avoir l'énergie la plus basse.

# Les compétences que vous maîtrisez sont la capacité de

- ❑ Dessinez les structures de Lewis des molécules.
- ❑ Écrire les structures de résonance d'une molécule.
- ❑ Utilisez les calculs de charge formelle pour sélectionner l'arrangement atomique le plus probable.

**Résumé :** Vous avez appris qu'une liaison covalente consiste en un partage de paires d'électrons et que les atomes acquièrent généralement un octet (ou duet pour l'hydrogène) complet d'électrons. Les schémas de partage des paires d'électrons dans les composés covalents sont représentés par des structures de Lewis. Vous avez vu que dans certains cas, il est nécessaire de représenter une molécule comme un hybride de résonance qui répartit le caractère de liaison multiple sur l'ensemble de la molécule. Vous avez vu que la structure de Lewis de plus faible énergie peut souvent être identifiée en calculant les charges formelles des atomes.