

Charges formelles

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 :

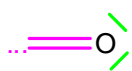
$$C_f = N_v - N_\ell - 2 \times D_\ell$$

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

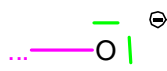
N_ℓ = nombre de liaisons formées par l'atome considéré dans la molécule étudiée.

D_ℓ = nombre de doublets libres pour l'atome considéré dans la molécule étudiée.

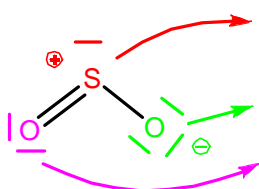
Exemples



O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 2 - 2 \times 2 = 0$;
Dans une molécule l'oxygène divalent est neutre.



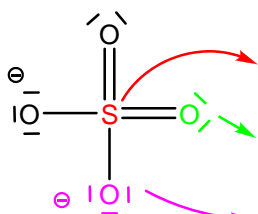
O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 1 - 2 \times 3 = -1$;
Dans une molécule l'oxygène monovalent porte une charge formelle -1.



S : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 3 - 2 \times 1 = +1$

O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 1 - 2 \times 3 = -1$

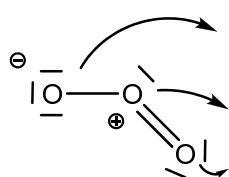
O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 2 - 2 \times 2 = 0$



S : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 6 - 2 \times 0 = 0$

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

O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 1 - 2 \times 3 = -1$



O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 1 - 2 \times 3 = -1$

O : $1s^2 2s^2 2p^4$; 6 électrons de valence ; $C_f = 6 - 3 - 2 \times 1 = +1$

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