

La VSEPR (Valence Shell Electron Pairs Repulsion)

1. Trouver la VSEPR d'un élément :

Objectif : la VSEPR sert à connaître, pour une molécule, sa géométrie théorique (avec les doublets non liants) ou expérimentale, c'est-à-dire visible au microscope adéquate (sans les doublets).

Principe : les paires d'électrons se repoussent pour se gêner le moins possible autour d'un atome central.

Méthode :

On écrit la structure de Lewis d'une molécule et on nomme A l'atome central.

On compte le nombre n de liaisons simples ou multiples notées Xn.

On compte le nombre n' de doublets non liants notés En'.

➤ Rigoureuse :

Le plus dur dans la VSEPR est de connaître le nombre d'électrons de valence de l'atome central et des atomes périphériques.

Pour cela il faut écrire la configuration électronique de l'atome, en déduire sa couche de valence (cf. fiche tut' rentrée) et vous trouverez ainsi son nombre d'électrons de valence. A partir de là vous devez trouver la valence (primaire ou secondaire) qui permet de lier tous les atomes périphériques.

En écrivant la structure de Lewis vous en déduirez la VSEPR de l'élément en regardant le nombre de liaisons et de doublets non-liants.

Exercice d'application : trouver la VSEPR de l'atome de carbone dans le méthane (CH₄).

La configuration électronique du carbone est : 1s² 2s² 2p² sa couche de valence est 2s² 2p², il a donc 4 électrons de valence ; sa valence primaire est 2 et sa secondaire est 4. Or nous voulons faire des liaisons avec 4 éléments monovalents, nous utiliserons donc la valence secondaire. Les 4 électrons participeront chacun à une liaison simple avec l'électron de chacun des atomes d'hydrogène.



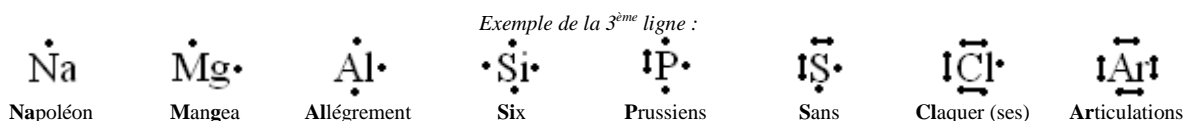
On peut donc établir la structure de Lewis de cet élément (ci-contre) qui nous permet d'en conclure directement sa VSEPR : 4 liaisons et aucun doublet non liant → AX₄

Remarque : une liaison simple, une double et une triple ont la même valeur pour la VSEPR.

➤ Tutorielle : **Plus rapide plus efficace !!!**

Méthode utilisable pour les 3 premières lignes : l'utilisation des moyens mnémotechniques nous permet de trouver le nombre d'électrons de valence. En effet, à chaque colonne un nouvel électron de valence apparaît. Un doublet non liant peut remplacer 2 électrons célibataires sauf pour N, O et F (ceci correspond à un changement de valence).

Le moyen mnémotechnique est pour la deuxième ligne : **Lili (Lithium) Becqueta (Béryllium) Bien (Bore) Chez (Carbone) Notre (azote) Oncle (Oxygène) Ferdinand (Fluor) Nestor (Néon).**



On connaît ainsi la structure de Lewis de l'élément et on en déduit la structure de Lewis puis la VSEPR comme avec la méthode rigoureuse.

Reprise de l'exemple précédent :



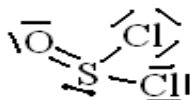
*On en déduit directement la structure de Lewis car on sait que l'hydrogène est monovalent.
Cf. fin de l'exercice par méthode rigoureuse.*

Nouvel exemple : trouver la VSEPR de l'atome de Soufre dans OSOCl₂

En repensant au moyen mnémotechnique on trouve pour S : $\cdot \text{S} \cdot$ (6 électrons de valence, bi, tétra ou hexa valent), pour O : $\cdot \ddot{\text{O}} \cdot$ (obligatoirement bivalent) et pour Cl : $\cdot \ddot{\text{Cl}} \cdot$ (les halogènes sont assimilables à des hydrogènes donc monovalents).

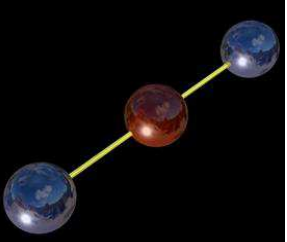
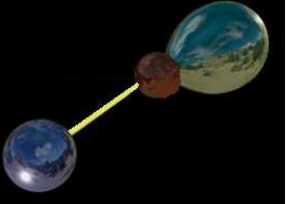
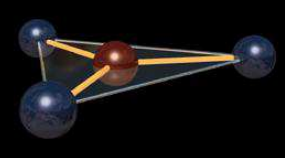
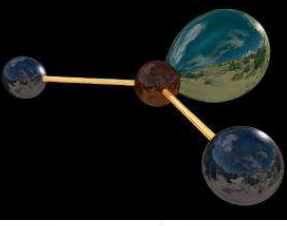
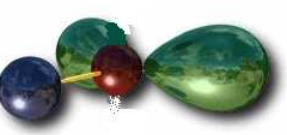
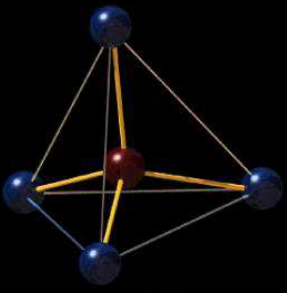
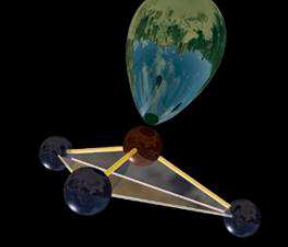
Il faut que le soufre ait 2 (pour l'oxygène) + 2×1 (pour les halogènes) = 4 électrons célibataires et donc 1 doublet non-liant.

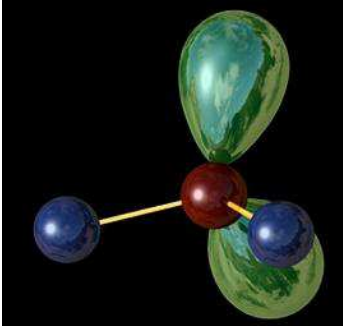
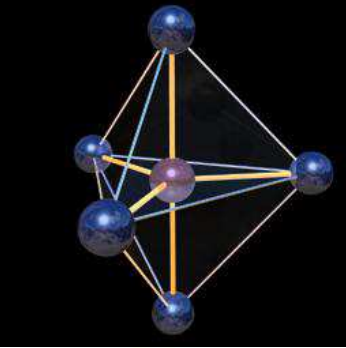
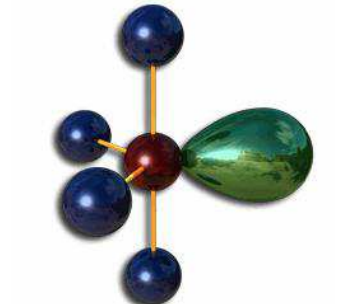

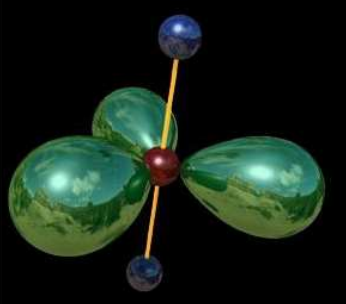
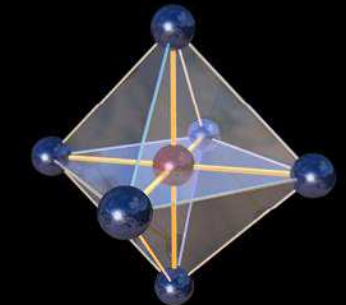
*On en déduit la structure de Lewis ci-contre :
La VSEPR du soufre est AX₃E.*



Ex : (C de) CO₂:AX₂, (O de) H₂O:AX₂E₂, (P de) PCl₃:AX₃E, (P de) PCl₅:AX₅, (S de) SO₂:AX₂E, (C de) HCN : AX₂.

2. Trouver la géométrie dans l'espace d'une molécule à partir de la VSEPR :

VSEPR	Angle	Géométrie théorique (avec les doublets non-liants)	Géométrie expérimentale (sans les doubles non – liants)	Schémas	Hybridation
AX2	180°	Linéaire	Linéaire		sp
AXE		Linéaire	Linéaire		sp
AX3	120°	Plane triangulaire	Plane triangulaire		sp2
AX2E	120°	Plane triangulaire	Coudée en « V »		sp2
AXE2		Plane triangulaire	Linéaire		sp2
AX4	109.27°	Tétraédrique	Tétraédrique		sp3
AX3E	109.28°	Tétraédrique	Pyramidale à base triangulaire		sp3

AX2E2	109.28°	Tétraédrique	Coudée (en « V »)		sp3
AX5	120°, 90° ou 180° selon l'angle considéré	Bipyramide trigonale	Bipyramide trigonale		(pas au programme)
AX4E	120°, 90° ou 180° selon l'angle considéré	Bipyramide trigonale	Bascule Ou chevalet		(pas au programme)
AX3E2	90° ou 180° selon l'angle considéré	Bipyramide trigonale	Forme en « T »		(pas au programme)
AX2E3	180° selon l'angle considéré	Bipyramide trigonale	Linéaire		(pas au programme)
AX6	90° ou 180° selon l'angle considéré	Bipyramide à base carrée	Bipyramide à base carrée		(pas au programme)

3. Exercices (et oui après la théorie vient la pratique...) :

- ❖ Parmi les molécules suivantes, lesquelles sont linéaires ?

PCl_5 ; SF_4 ; H_2 ; H_2O ; XeF_2 ; Cl_2 ; HCN ; CO_2 ; ICl_3 . $Z(\text{Xe})=54$ et $Z(\text{I})=53$

Déjà, on voit vite que PCl_5 et SF_4 ne peuvent pas être linéaire vu qu'ils ont plus de trois atomes. Si vous voulez connaître leur VSEPR, vous savez grâce aux moyens mnémotechniques que P a 5 e⁻ de valence, comme il doit faire ici 5 liaisons simples, il est AX_5 . De même S a 6 e⁻ de valence, il doit faire 4 liaisons simples et a donc un doublet non liant, il est AX_4E .

H_2 et Cl_2 sont obligatoirement linéaires, vu qu'elles n'ont que deux atomes.

En ce qui concerne H_2O , l'oxygène a 6 e⁻ de valence, comme il fait deux liaisons simples, il a donc deux doublets non-liants et est AX_2E_2 . La molécule d'eau est donc coudée.

Pour XeF_2 , la méthode « tutoresque » ne peut pas servir. Il faut établir la configuration électronique de xénon : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 5p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$. La couche de valence est donc : $5s^2 5p^6$ et il a donc huit e⁻ de valence. Comme il fait ici deux liaisons simples, il aura 3 doublets non liants. Il est donc AX_2E_3 et est donc linéaire.

Pour HCN , grâce aux moyens mnémotechniques on trouve que le C a 4 e⁻ de valence et l'azote 3 e⁻ et un doublet non liant. La structure de Lewis de la molécule est donc : $\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}:$. Le carbone est AX_2 et la molécule linéaire.

Par un même raisonnement, on trouve la structure de Lewis du CO_2 : $\text{:O}=\text{C}=\text{O:}$. Le carbone est encore AX_2 et la molécule linéaire.

La molécule d' ICl_3 ne peut être linéaire. La configuration électronique de l'iode est : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 5p^6 4d^{10} 5s^2 5p^5$. La couche de valence est $5s^2 5p^5$, et il y a donc 7 e⁻ de valence (comme tous les halogènes, à retenir ...). Le chlore étant monovalent, l'iode a deux doublets non liants. Elle est AX_3E_2 et la molécule a une forme en T.