

Méthode VSEPR

Introduction :

En 1957 le chimiste canadien R.J Gillespie a développé les règles de la théorie de répulsion des électrons de la couche de valence (VSEPR de valence shell electron pair repulsion).

Cette méthode nous permet de déterminer simplement la géométrie d'un ion polyatomique ou d'une molécule.

Règles :

Dans le modèle de Lewis, la liaison entre deux atomes est décrite par la mise en commun d'un doublet d'électrons : on l'appelle doublet liant. Les paires d'électrons non employées pour décrire les liaisons constituent les doublets non liants notés E.

Doublets	Liants : X	Non liants : E
Nombre	n	m

Principes de base

En première approximation, l'arrangement géométrique adopté par les paires électroniques de l'atome central d'un ion ou d'une molécule est la conséquence de leur répulsion mutuelle.

On obtient un résultat correct en recherchant l'arrangement qui rend maximum les distances entre les paires d'électrons.

A ce premier niveau d'approximation, il n'y a pas de distinction à faire entre un doublet liant et un doublet non liant.

Dans ces conditions, l'arrangement qui minimise la répulsion des doublets dépend seulement de leur nombre : $m + n$. Cela correspond aux figures géométriques suivantes en se limitant à la coordination six.

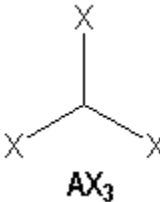
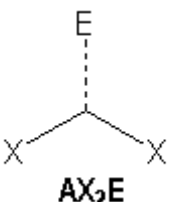
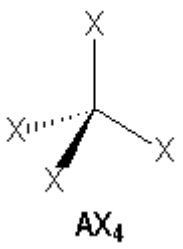
$m + n$	Figure géométrique
2	Segment de droite
3	Triangle
4	Tétraèdre
5	Bipyramide trigonale
6	Octaèdre

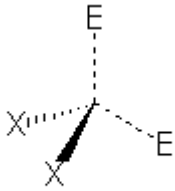
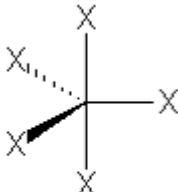
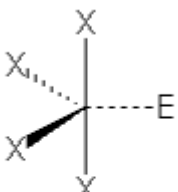
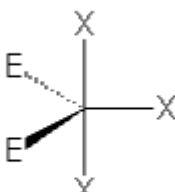
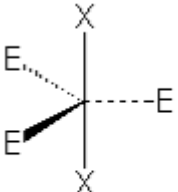
A ces cinq types de figures géométriques, correspondent davantage d'arrangements des paires d'électrons que nous allons passer en revue. Dans ce qui suit X désigne un atome et E un doublet non liant.

En première approximation, les liaisons multiples sont traitées comme si elles ne faisaient intervenir qu'un seul doublet.

Nous prendrons des exemples de molécules avec des liaisons simples et des molécules avec des liaisons multiples.

Les différents arrangements des doublets :

Type d'arrangement	Géométrie	Exemple
Arrangement linéaire (AX ₂)	$X-A-X$	BCl ₂ C ₂ H ₂ (triple liaison CC) HCN (triple liaison CN) COS (double liaisons CO et CS)
Arrangement triangulaire (AX ₃)	 AX ₃	BF ₃ H ₂ CO (double liaison CO) COCl ₂ (double liaison CO) C ₂ H ₄ (double liaison CC) CO ₃ ²⁻
Arrangement triangulaire (AX ₂ E)	 AX ₂ E	SO ₂ (double liaison SO)
Arrangement tétraédrique (AX ₄)	 AX ₄	CH ₄ , NH ₄ ⁺ , S ₂ O ₃ ²⁻ POCl ₃ (double liaison PO)
Arrangement tétraédrique (AX ₃ E)	 AX ₃ E	NH ₃ PH ₃ H ₃ O ⁺

Arrangement tétraédrique (AX₂E₂)	 AX₂E₂	<u>H₂O</u> <u>H₂S</u> <u>NH₂⁻</u>
Arrangement pentagonal (AX₅)	 AX₅	<u>PCl₅</u> <u>PF₃Cl₂</u> <u>XeO₃F₂</u>
Arrangement pentagonal (AX₄E)	 AX₄E	<u>XeO₂F₂</u>
Arrangement pentagonal (AX₃E₂)	 AX₃E₂	
Arrangement pentagonal (AX₂E₃)	 AX₂E₃	