

Chapitre 1

Détermination de la géométrie d'une molécule à l'aide de la méthode VSEPR

1.1 Introduction - Représentation de Cram



FIGURE 1.1 – Convention de Cram

1.2 Principe de la méthode VSEPR

1.3 Structures de base AX_n , $n = 2, \dots, 7$

1.3.1 Structure AX_2

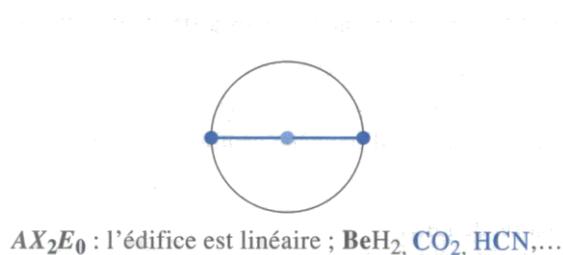


FIGURE 1.2 – Structure de type AX_2

Exemple : la molécule HCN (il faut cliquer pour activer)

1.3.2 Structure AX_3

■ $m + n = 3$: doublets d'électrons pointant vers les sommets d'un triangle

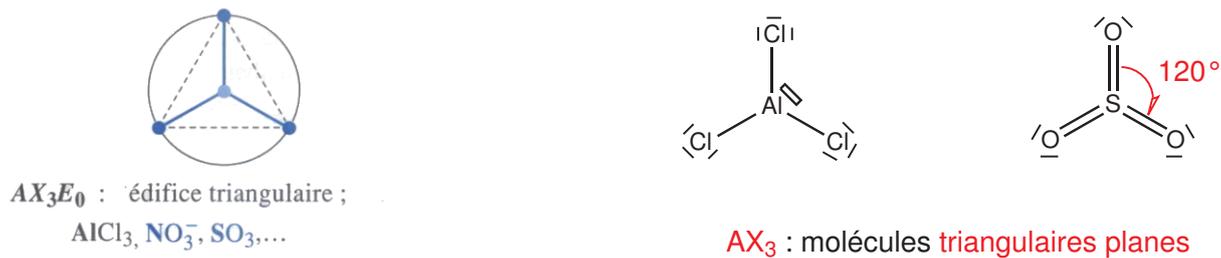


FIGURE 1.3 – Structure de type AX_3

Exemple : la molécule SO_3 (il faut cliquer pour activer)

1.3.3 Structure AX_4

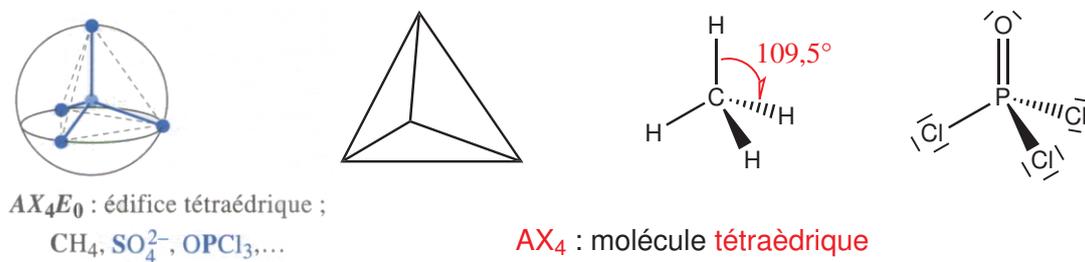


FIGURE 1.4 – Structure de type AX_4

Exemple : la molécule $OPCl_3$ (il faut cliquer pour activer)

1.3.4 Structure AX_5

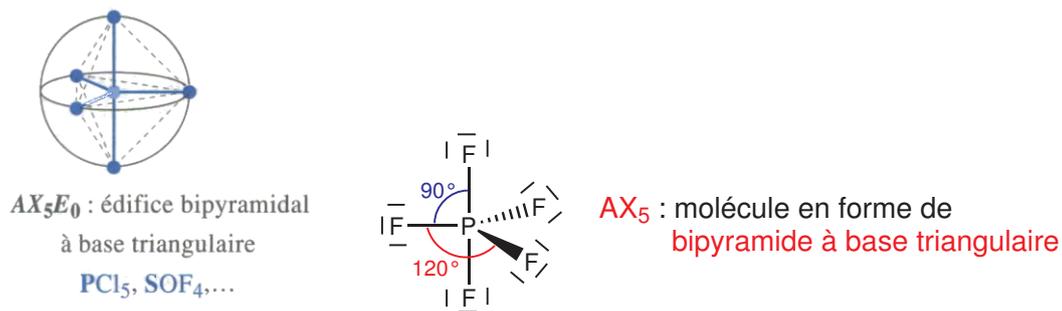


FIGURE 1.5 – Structure de type AX_5

Exemple : la molécule PF_3Br_2 (il faut cliquer pour activer) ici les deux atomes de brome sont en position axiale, les atomes de fluor sont en position équatoriale.

1.3.5 Structure AX_6

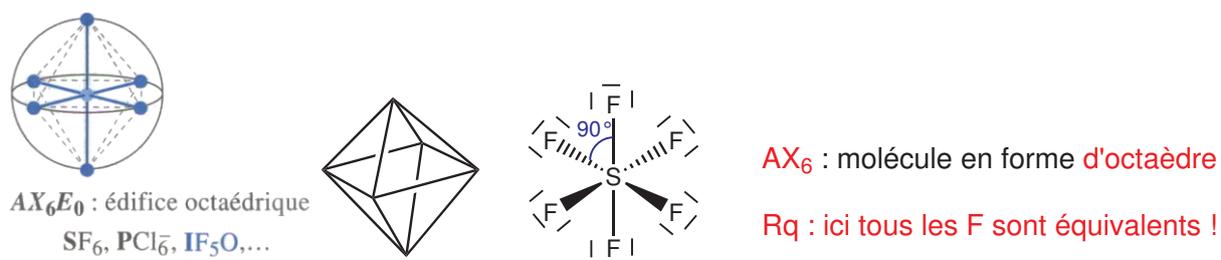
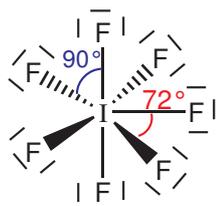


FIGURE 1.6 – Structure de type AX_6

Exemple : la molécule SF_6 (il faut cliquer pour activer)

1.3.6 Structure AX_7



AX_7 : molécule en forme de bipyramide à base pentagonale
Rq : ici tous les F ne sont pas équivalents !

FIGURE 1.7 – Structure de type AX_7

Exemple : la molécule IF_7 (il faut cliquer pour activer)

1.4 Molécules ayant des doublets libres sur l'atome central, structures dérivées de type AX_nE_m

1.4.1 Structure AX_2E_1



Géométrie "imposée" : AX_3

Géométrie apparente : AX_2E_1 molécule coudée

FIGURE 1.8 – Structure de type AX_2E_1

Exemple : la molécule SO_2 (il faut cliquer pour activer)

1.4.2 Structure AX_3E_1



Géométrie "imposée" : AX_4

Géométrie apparente : AX_3E_1 molécule pyramidale à base triangulaire

FIGURE 1.9 – Structure de type AX_3E_1

Exemple : la molécule NH_3 (il faut cliquer pour activer)

1.4.3 Structure AX_2E_2



Géométrie "imposée" : AX_4

Géométrie apparente : AX_2E_2 molécule coudée

FIGURE 1.10 – Structure de type AX_2E_2

Exemple : la molécule H_2O (il faut cliquer pour activer)

1.4.4 Structure AX_4E_1

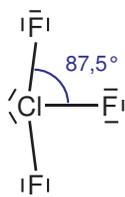


Géométrie "imposée" : AX_5
Géométrie apparente : AX_4E_1 molécule "papillon"

FIGURE 1.11 – Structure de type AX_4E_1

Exemple : la molécule SF_4 (il faut cliquer pour activer)

1.4.5 Structure AX_3E_2

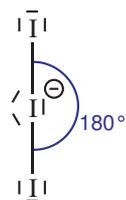


Géométrie "imposée" : AX_5
Géométrie apparente : AX_3E_2 molécule "T-shape"

FIGURE 1.12 – Structure de type AX_3E_2

Exemple : la molécule ClF_3 (il faut cliquer pour activer)

1.4.6 Structure AX_2E_3

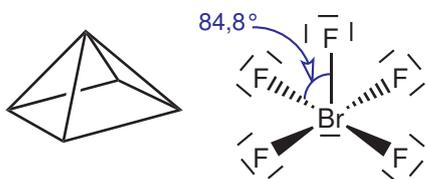


Géométrie "imposée" : AX_5
Géométrie apparente : AX_2E_3 molécule linéaire

FIGURE 1.13 – Structure de type AX_2E_3

Exemple : la molécule I_3^- (il faut cliquer pour activer)

1.4.7 Structure AX_5E_1



AX_5E_1 : molécule en forme de pyramide à base carrée
Rq : ici tous les F ne sont pas équivalents !

FIGURE 1.14 – Structure de type AX_5E_1

Exemple : la molécule BrF_5 (il faut cliquer pour activer)