

VSEPR

Les structures obtenues en théorie VSEPR sont identifiées par la nomenclature de Gillespie.

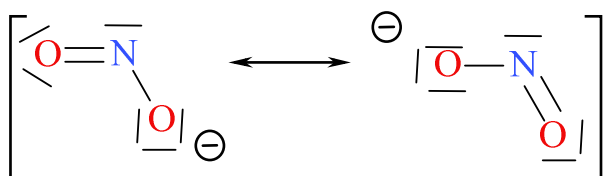
Dans cette nomenclature, on se concentre sur la **géométrie locale autour d'un atome** de l'entité :

- L'atome considéré est noté A ;
- Le nombre de liaisons formées par l'atome A avec ses voisins est noté X. Il n'y a pas de distinction entre les liaisons simples ou multiples (on peut parler de connectivité plutôt que de liaisons) ;
- Le nombre de doublets libres est noté E ;
- La structure locale autour de l'atome A est donnée sous la forme AX_xE_e .

Le tableau ci-après présente les structures obtenues en minimisant les répulsions électrostatiques en fonction des valeurs de x et de e. On distingue deux descripteurs :

- La figure de répulsion décrit le polyèdre formé par la totalité des charges placées autour de l'atome central, c'est-à-dire par l'ensemble des liaisons (simples ou multiples) et des doublets libres portés par l'atome A ;
- La géométrie locale ou structure locale décrit la figure géométrie formée par les atomes entourant l'atome central, c'est-à-dire la structure observée expérimentalement.

Reprenons l'exemple de l'ion nitrite : NO_2^-



Dans les deux formules mésomères N est de type AX_2E_1 .

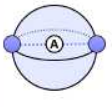
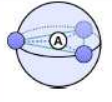
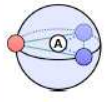
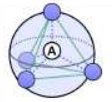
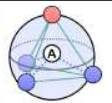
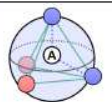
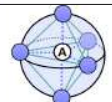
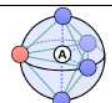
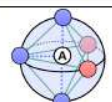
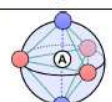
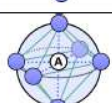
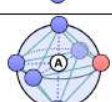
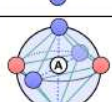
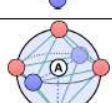
En effet N engage 2 connectivités N-O d'où X_2 et possède 1 doublet libre d'où E_1 .

$$2+1 = 3$$

On considère 3 "charges" autour de N qui se repoussent et forment donc un triangle pour optimiser leurs distances. L'une de ces charges est un doublet libre qui ne se voit pas, les atomes ONO forment donc un coude.

Reprendre tous les exercices et déterminer la géométrie des molécules en vous aidant du tableau suivant.

Nota : les sphères bleues représentent les doublets liants ; les sphères rouges représentent les doublets non-liants ; les traits verts représentent les figures de répulsion ; les pointillés bleus représentent les liaisons chimiques entre l'atome central et ses voisins.

Nombre total de charges ($x + e$) (figure de répulsion)	Nombre de doublets libres (e) (géométrie locale)	Structure
2 (linéaire)	0 (linéaire)	
3 (trigonale)	0 (trigonale plane)	
	1 (coudée)	
4 (tétraédrique)	0 (tétraédrique)	
	1 (pyramide à base triangulaire)	
	2 (coudée)	
5 (bipyramidale à base triangulaire)	0 (bipyramidale à base triangulaire)	
	1 (tétraédrique déformée)	
	2 (en T)	
	3 (linéaire)	
6 (octaédrique)	0 (octaédrique)	
	1 (pyramidale à base carrée)	
	2 (plan carré)	
	3 (en T)	
	4 (linéaire)	