



Université Mostapha Benboulaïd, Batna 2
Département génie de procédés

Licence 2

Cours chimie minérale L2 liaison chimique et hybridation

Présenté par : Dr TOBBI Ouafa

Année universitaire 2023-2024



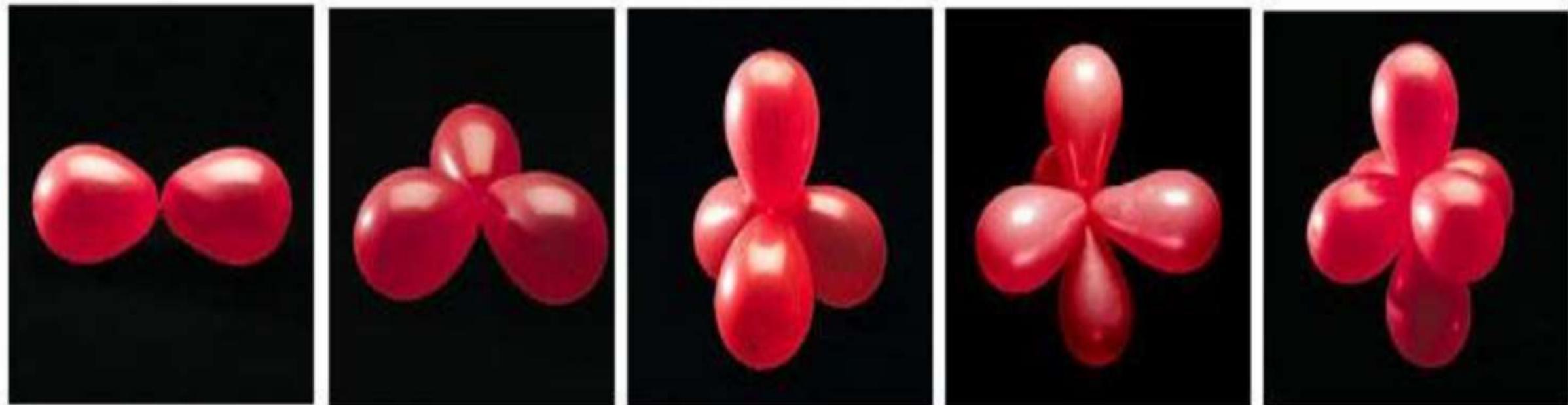
La liaison chimique II: la forme des molécules et l'hybridation des orbitales atomiques

le modèle VSEPR (valence-shell electron- pair repulsion model)

le modèle VSEPR a deux règles:

- les liaisons doubles et triples équivalent à des liaisons simples (on prendra compte du fait qu'elles sont plus volumineuses seulement pour légèrement ajuster les angles autour d'un atome)
- si une molécule a plusieurs structures de résonance, le modèle VSEPR est valable pour n'importe laquelle de ces structures

A Balloon Analogy for the Mutual Repulsion of Electron Groups



La forme des molécules

AX_mE_n

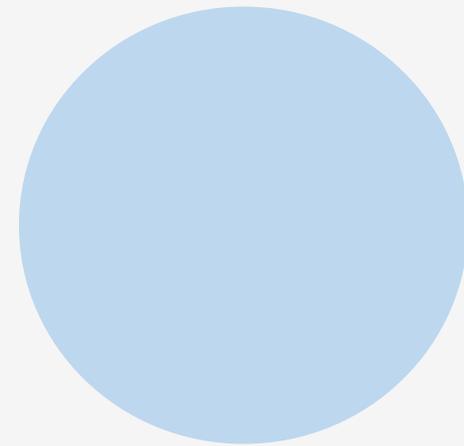
Considère un atome central, A, qui contient:

n doublets libres E (n peut être égal à zéro)

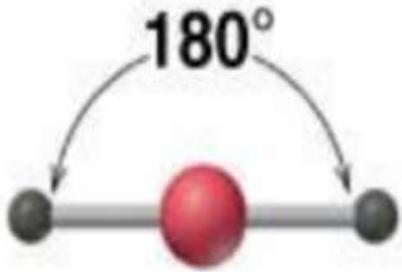
m atomes X (m est égal ou supérieur à deux)

(m+n) inférieur ou égale à 6

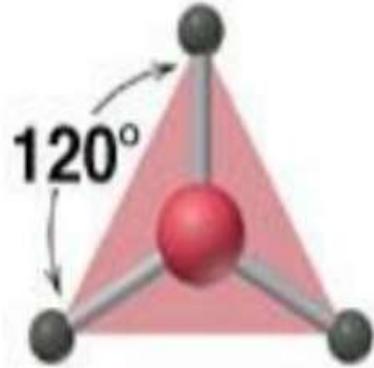
-
- linéaire, si $m + n = 2$
 - trigonale plane, si $m + n = 3$
 - tétraédrique, si $m + n = 4$
 - trigonale bipyramidale, si $m + n = 5$
 - octaédrique, si $m + n = 6$



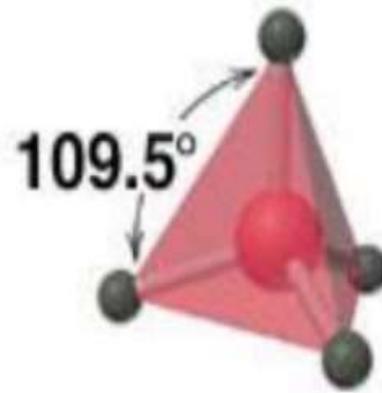
La forme des molécules



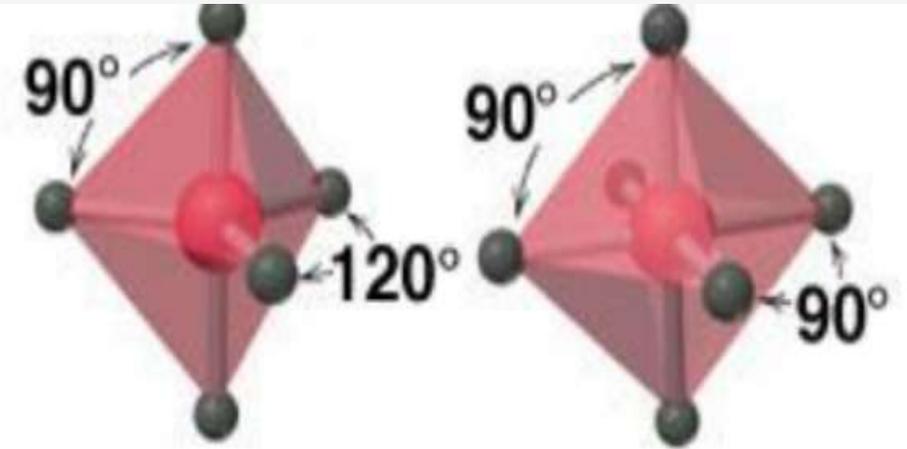
Linear



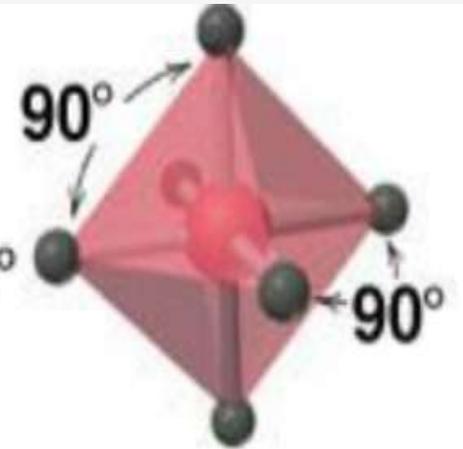
Trigonal planar



Tetrahedral



Trigonal bipyramidal



Octahedral

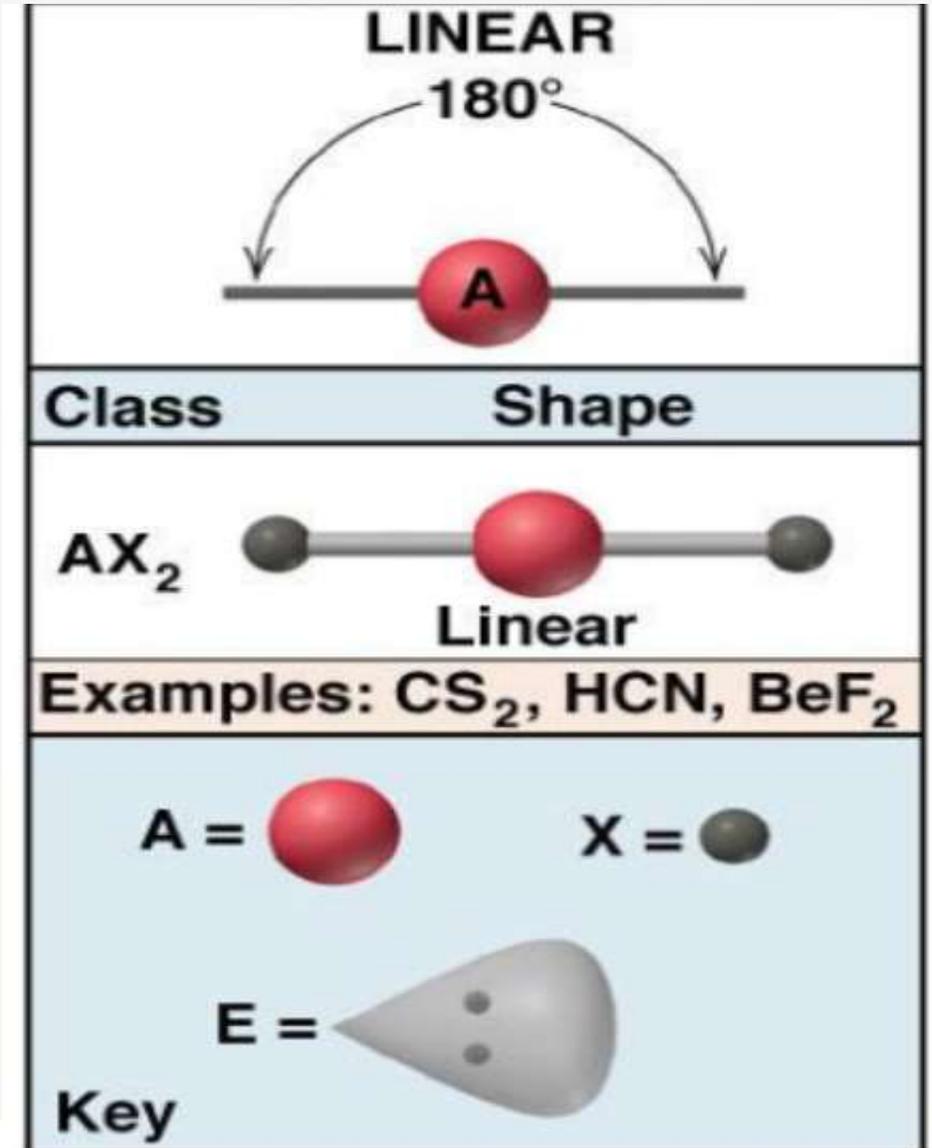
La forme linéaire

$m + n = 2$ (et m est forcément deux pour le cas non

trivial)

afin de minimiser la répulsion entre les deux

liaisons, on les place à 180 degré l'un de l'autre

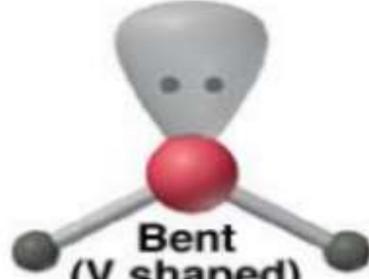


La forme trigonale plane

$$m + n = 3$$

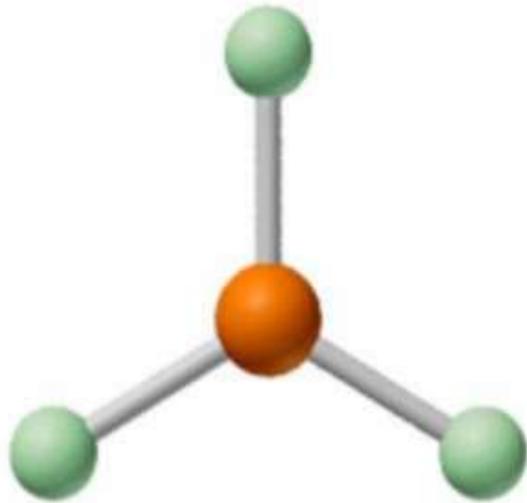
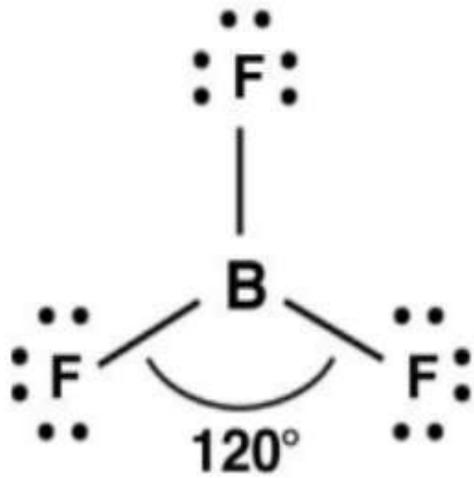
afin de minimiser la répulsion entre les liaisons et les doublets

libres, on les place à 120° l'un de l'autre, dans un plan

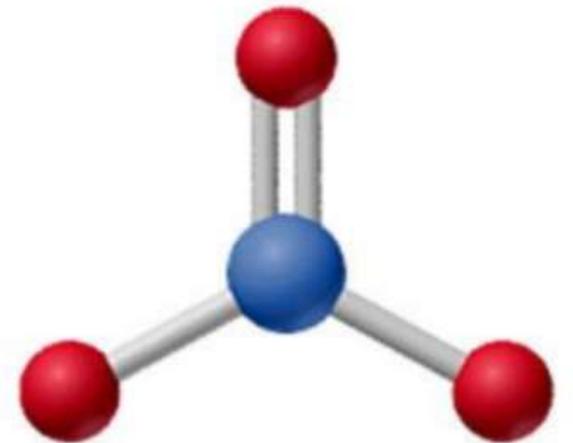
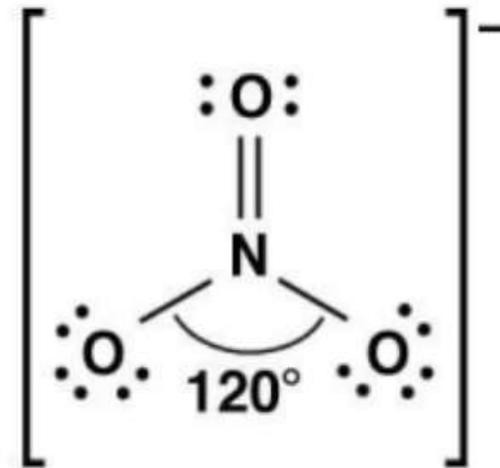
TRIGONAL PLANAR	
Class	Shape
AX_3	 <p>Trigonal planar</p>
Examples: SO_3 , BF_3 , NO_3^- , CO_3^{2-}	
AX_2E	 <p>Bent (V shaped)</p>
Examples: SO_2 , O_3 , $PbCl_2$, $SnBr_2$	

La forme trigonale plane

F—B—F angle is 120° :



Trigonal Planar Arrangement of NO_3^-



Remarques

en général, les forces répulsives décroissent dans l'ordre suivant:

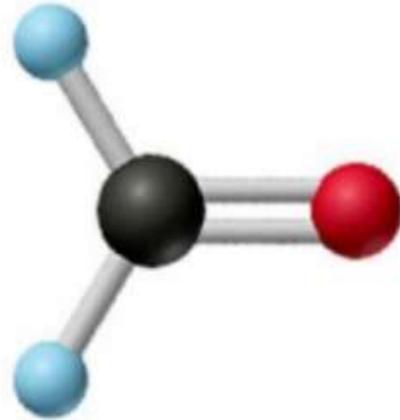
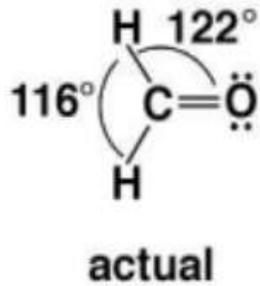
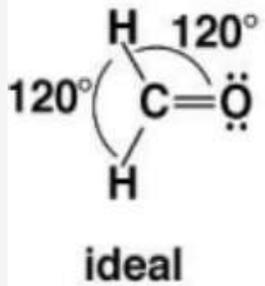
- répulsion doublet libre-doublet libre
- répulsion doublet libre-doublet liant
- répulsion doublet liant-doublet liant

autrement dit, les doublets libres sont plus diffus que les doublets liants et demandent "plus d'espace"

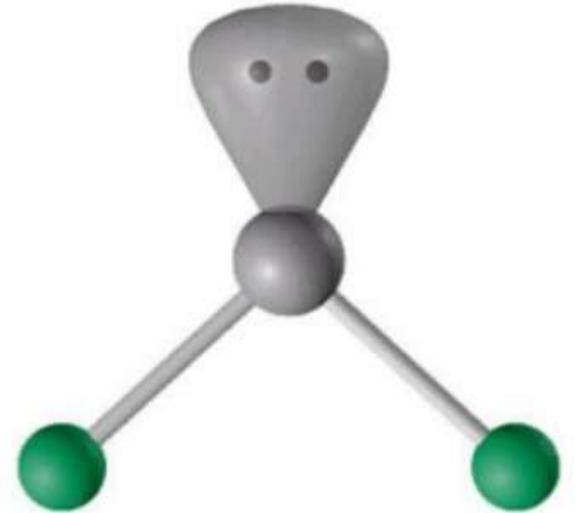
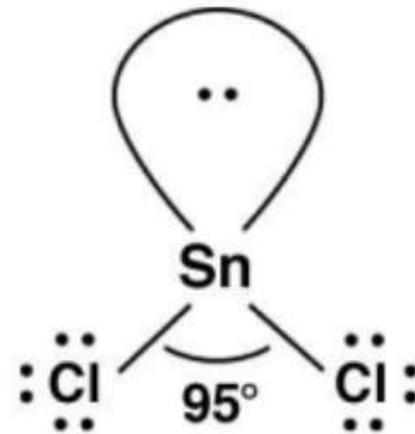
- le doublet liant est plus compact car les deux noyaux attirent ces électrons (plutôt que seulement un noyau dans le cas d'un doublet libre)
- une liaison triple est légèrement plus diffuse qu'une liaison double qui est à son tour plus diffuse qu'une liaison simple

Forme trigonale plane

Trigonal Planar Arrangement of CH_2O

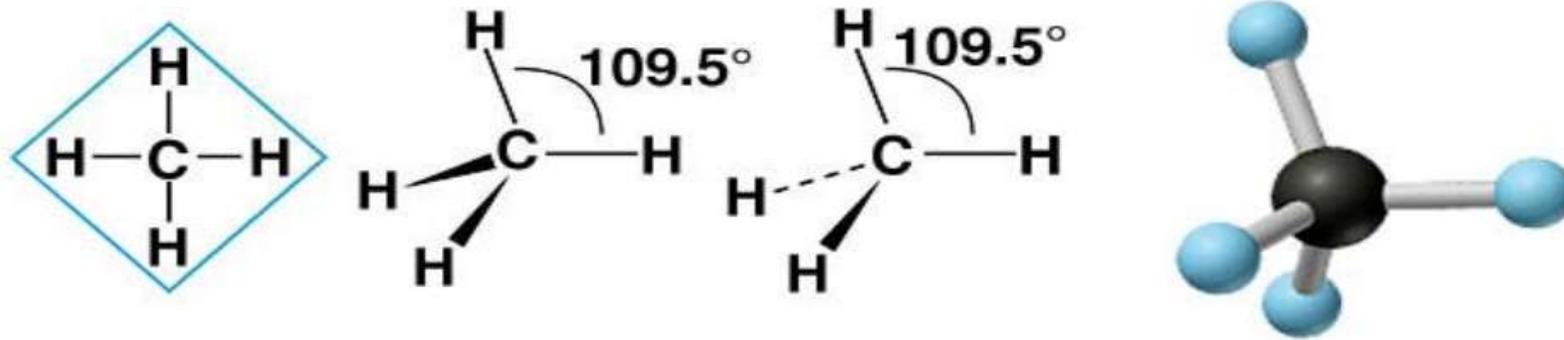


Bent (V shaped) Arrangement of SnCl_2



La forme tétraédrique

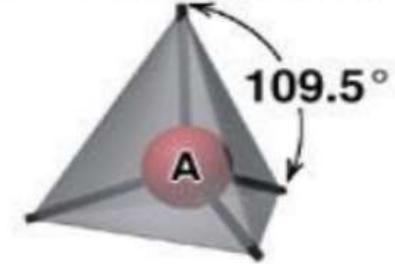
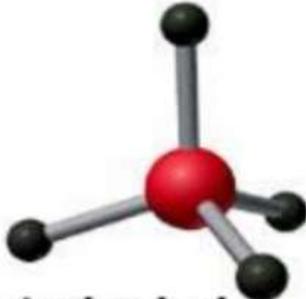
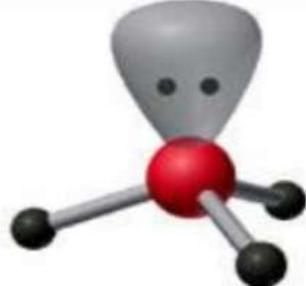
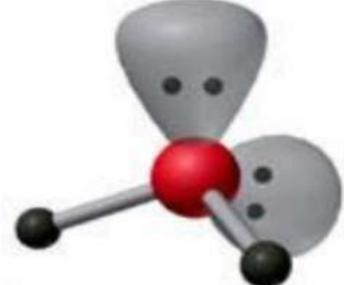
Tetrahedral Arrangement of Methane



- $m + n = 4$
- afin de minimiser la répulsion entre les liaisons et les doublets libres, on les place à 109.5° l'un de l'autre, dans les coins d'un tétraèdre

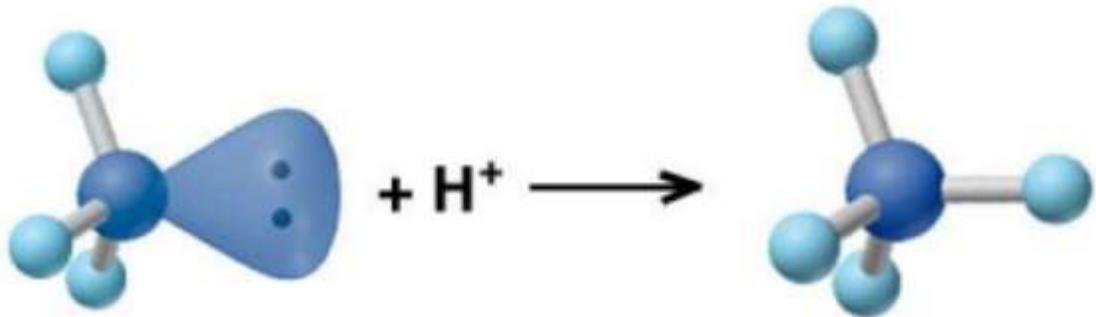
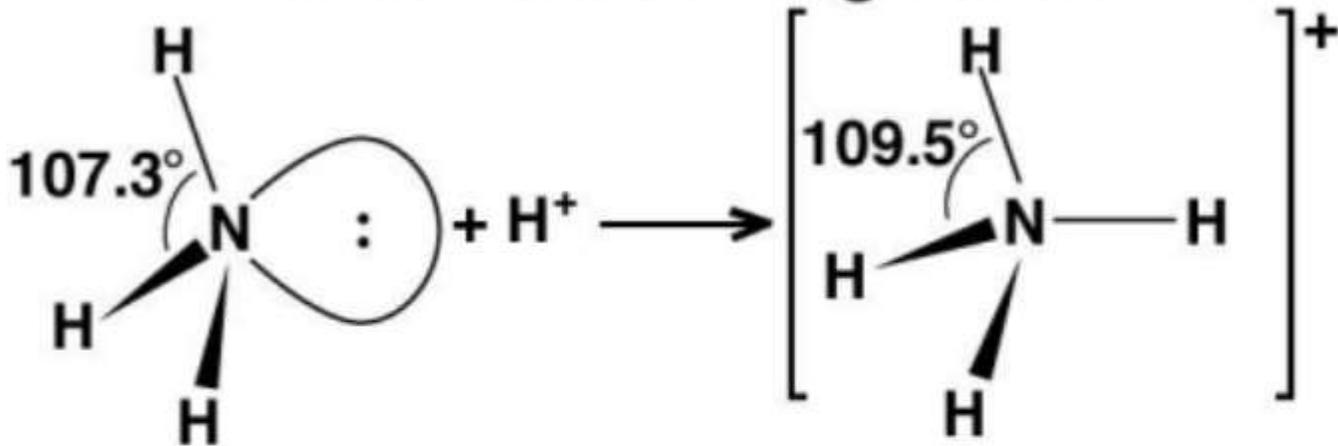
La forme tétraédrique

The Three Molecular Shapes of the Tetrahedral Electron-Group Arrangement

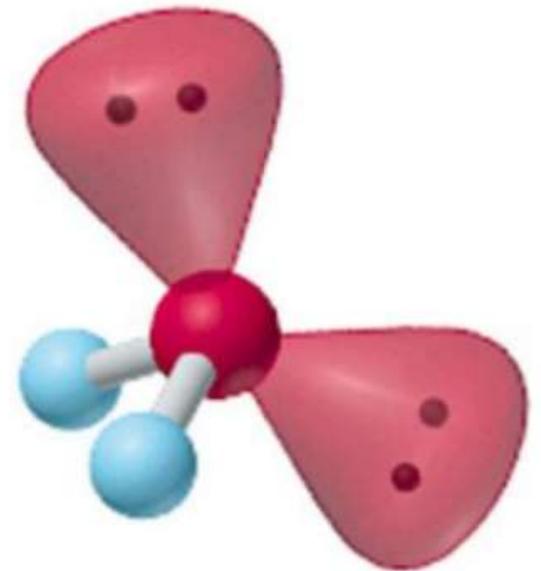
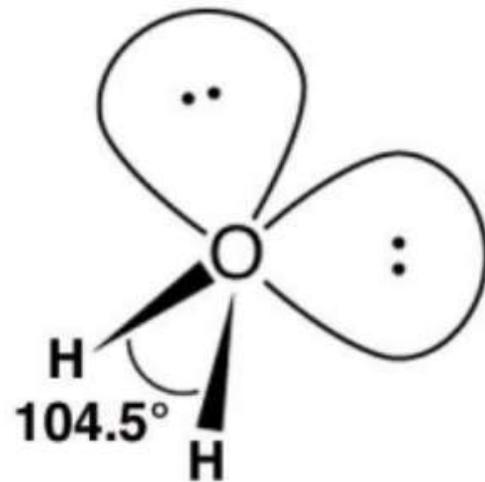
Class	Shape
	
AX_4	 Tetrahedral
Examples: CH_4 , $SiCl_4$, SO_4^{2-} , ClO_4^-	
AX_3E	 Trigonal pyramidal
Examples: NH_3 , PF_3 , ClO_3 , H_3O^+	
AX_2E_2	 Bent (V shaped)
Examples: H_2O , OF_2 , SCl_2	

La forme tétraédrique

Trigonal Pyramidal Shape of Tetrahedral Arrangement



Bent or V Shaped Tetrahedral Arrangement



La forme trigonale bipyramidale

$$m + n = 5$$

afin de minimiser la répulsion entre les liaisons

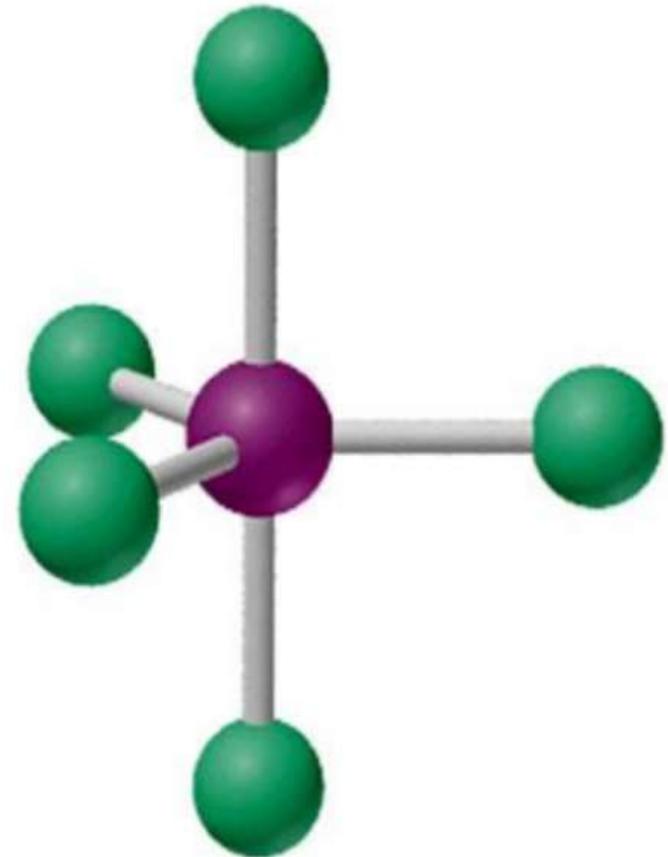
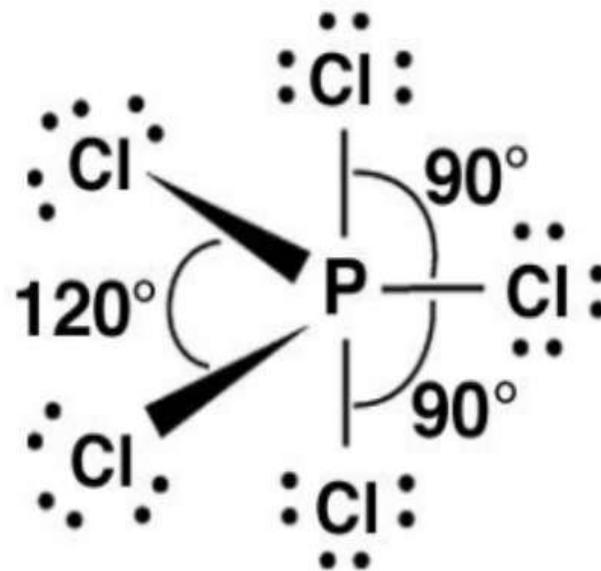
et les doublets libres, on adopte la forme

trigonale bipyramidale il y a deux types distincts

de positions, soient les deux positions axiales et

les trois positions équatoriales

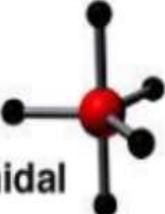
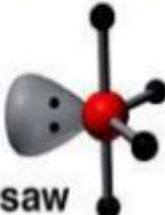
Trigonal Bipyramidal Arrangement of PCl_5

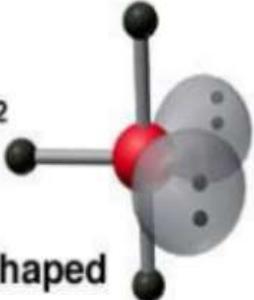
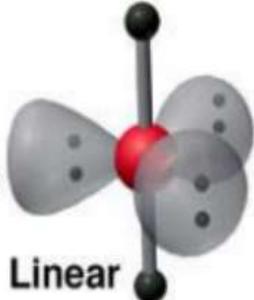


La forme trigonale bipyramidale

- les angles entre deux positions équatoriales sont de 120 degré
- les angles entre une position axiale et une position équatoriale sont de 90 degré
- un doublet libre préfère occuper une position équatoriale

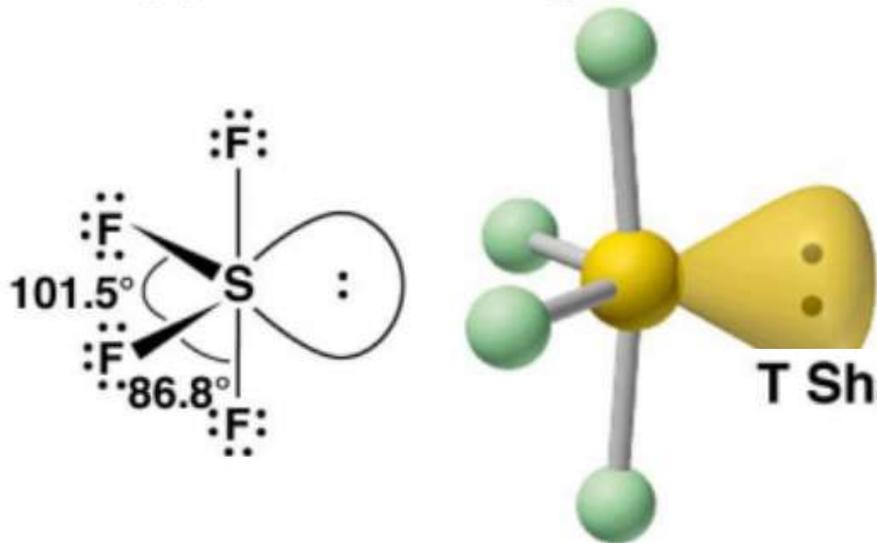
The Four Molecular Shapes of the Trigonal Bipyramidal Electron-Group Arrangement

TRIGONAL BIPYRAMIDAL	
	
Class	Shape
AX ₅ Trigonal bipyramidal	
Examples: PF ₅ , AsF ₅ , SOF ₄	
AX ₄ E Seesaw	
Examples: SF ₄ , XeO ₂ F ₂ , IF ₄ ⁺ , IO ₂ F ₂ ⁻	

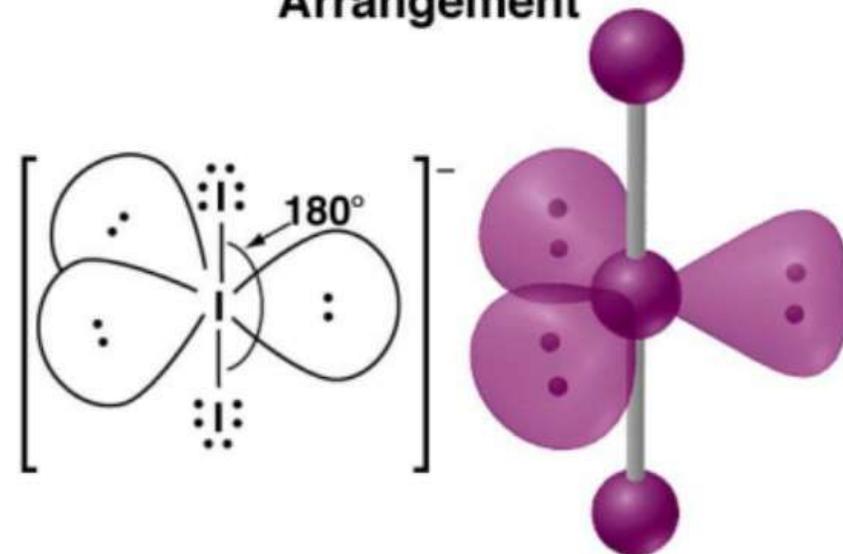
AX ₃ E ₂ T-shaped	
Examples: ClF ₃ , BrF ₃	
AX ₂ E ₃ Linear	
Examples: XeF ₂ , I ₃ ⁻ , IF ₂ ⁻	

La forme trigonale bipyramidale

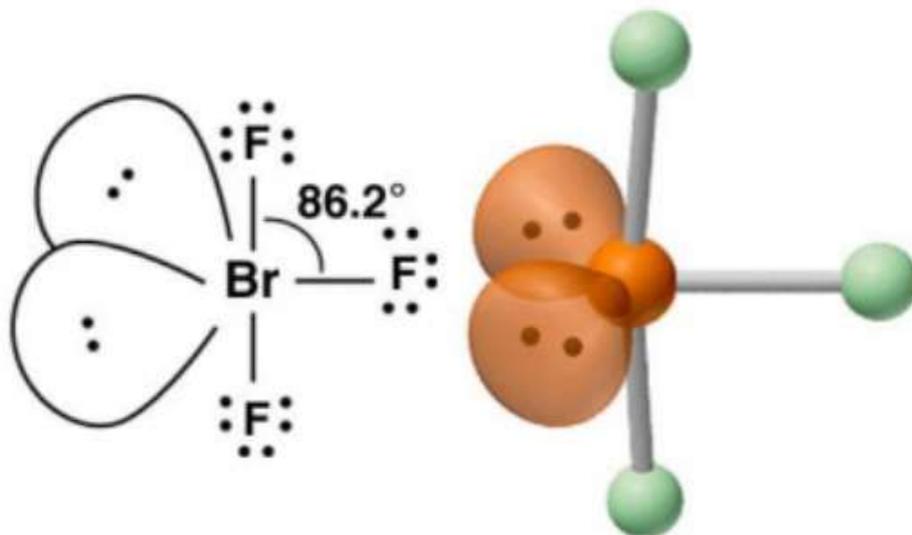
Seesaw Shape of Trigonal Bipyramidal Arrangement



Linear Shape of Trigonal Bipyramidal Arrangement



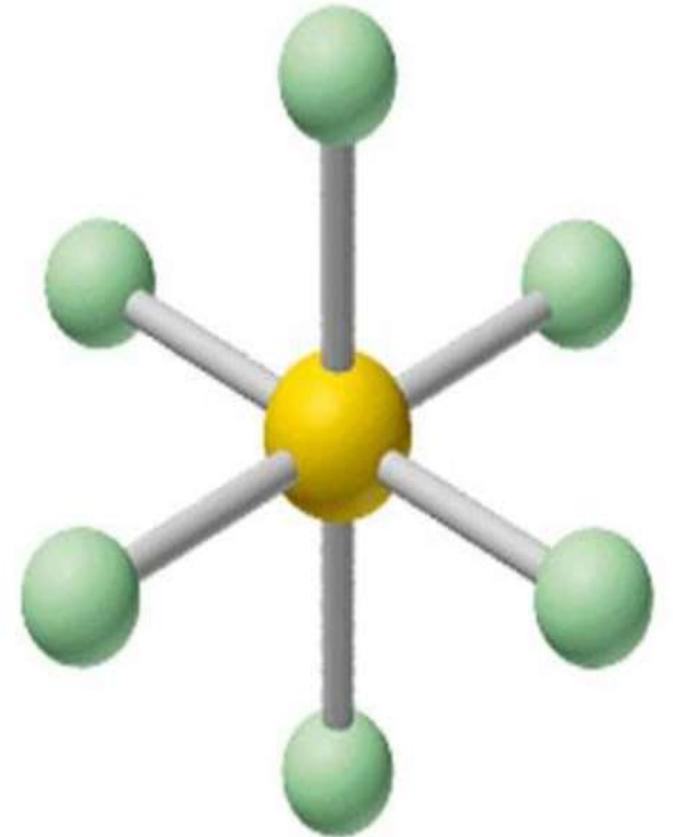
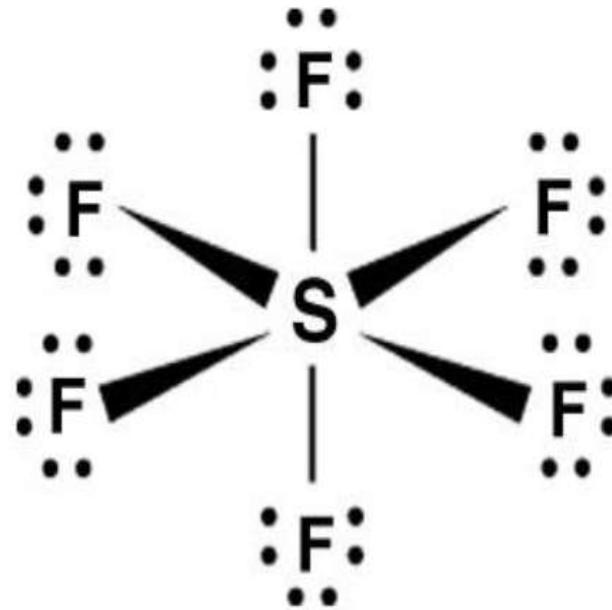
T Shape of Trigonal Bipyramidal Arrangement



La forme octaédrique

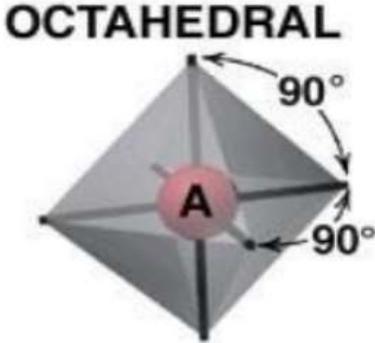
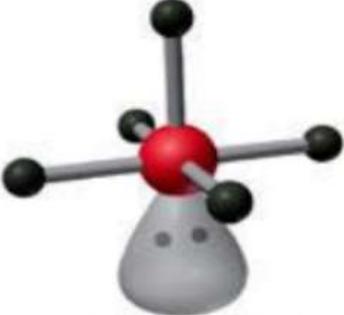
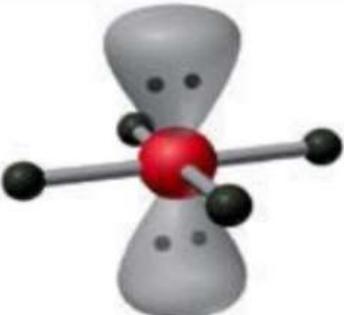
- $m + n = 6$
- afin de minimiser la répulsion entre les liaisons et les doublets libres, on les place à 90° l'un de l'autre dans les coins d'un octaèdre

Octahedral Arrangement of SF₆



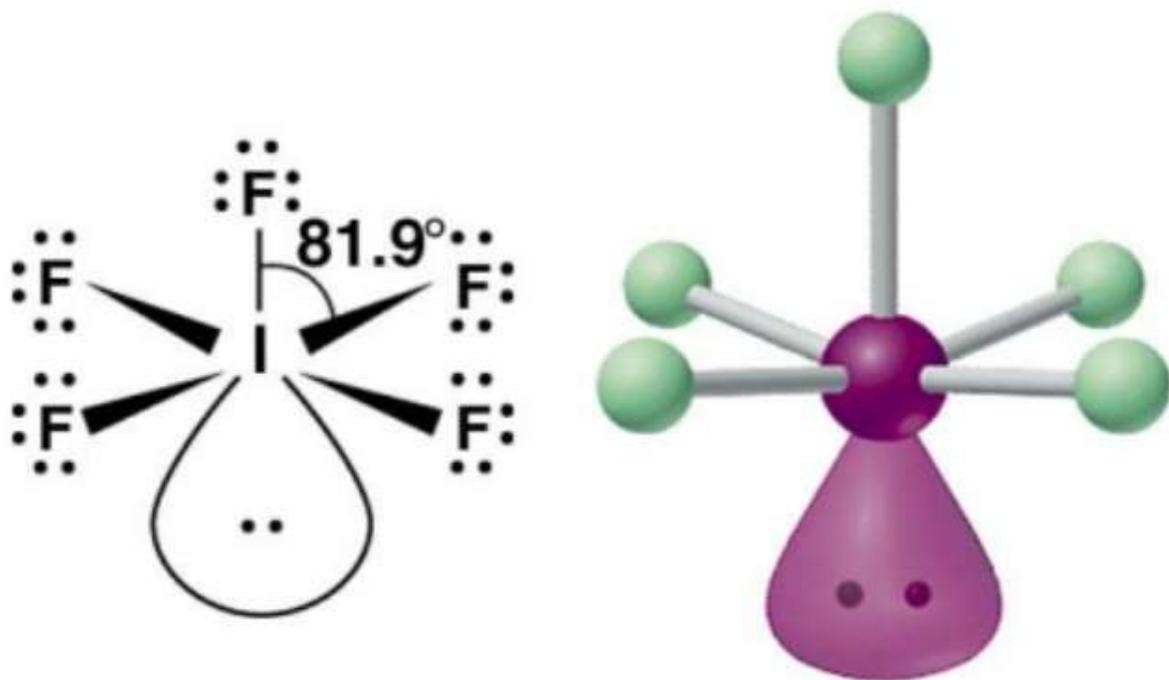
La forme octaédrique

The Three Molecular Shapes of the Octahedral Electron-Group Arrangement

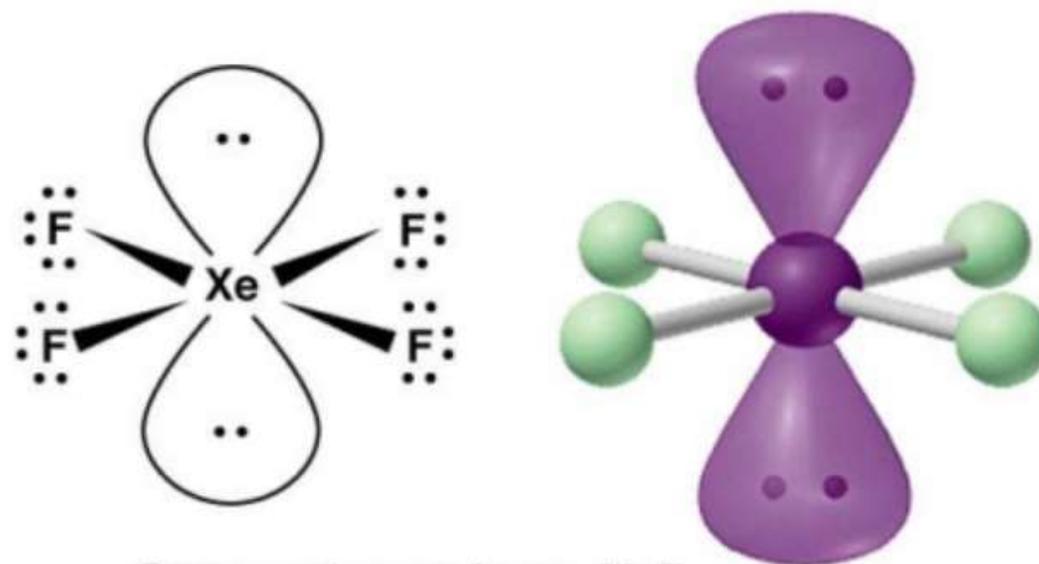
Class	Shape
	
AX₆	Octahedral
Examples: SF₆, IOF₅	
AX₅E	
Square pyramidal	
Examples: BrF₅, TeF₅⁻, XeOF₄	
AX₄E₂	
Square planar	
Examples: XeF₄, ICl₄⁻	

La forme octaédrique

Square Pyramidal Shape of Octahedral Arrangement



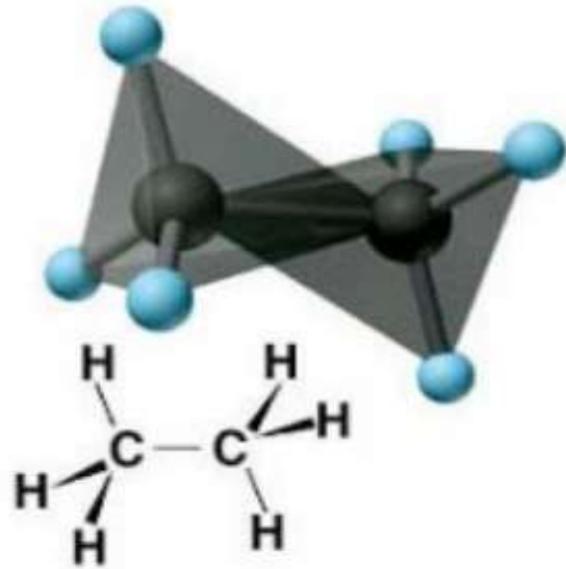
Square Planar Shape of Octahedral Arrangement



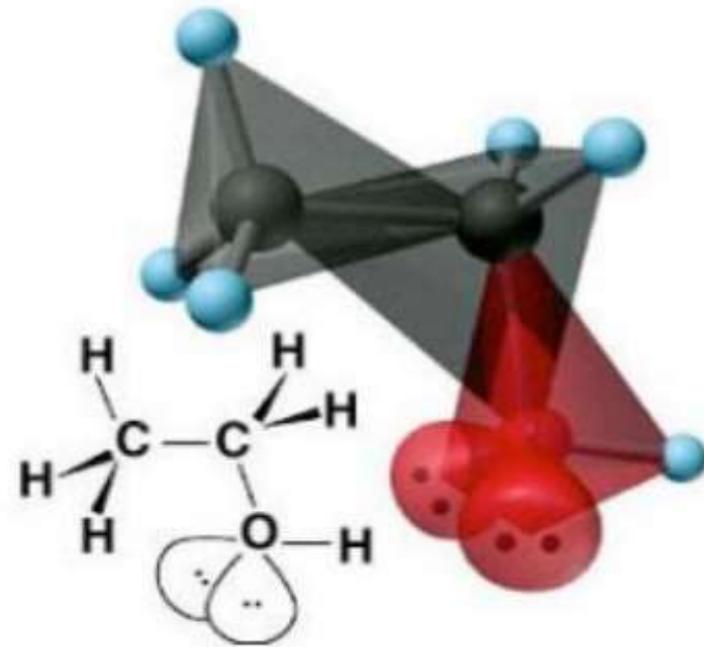
Square planar shape, XeF_4

La forme des molécules qui ont plus d'un atome central

The Tetrahedral Centers of Ethane and of Ethanol



A



B

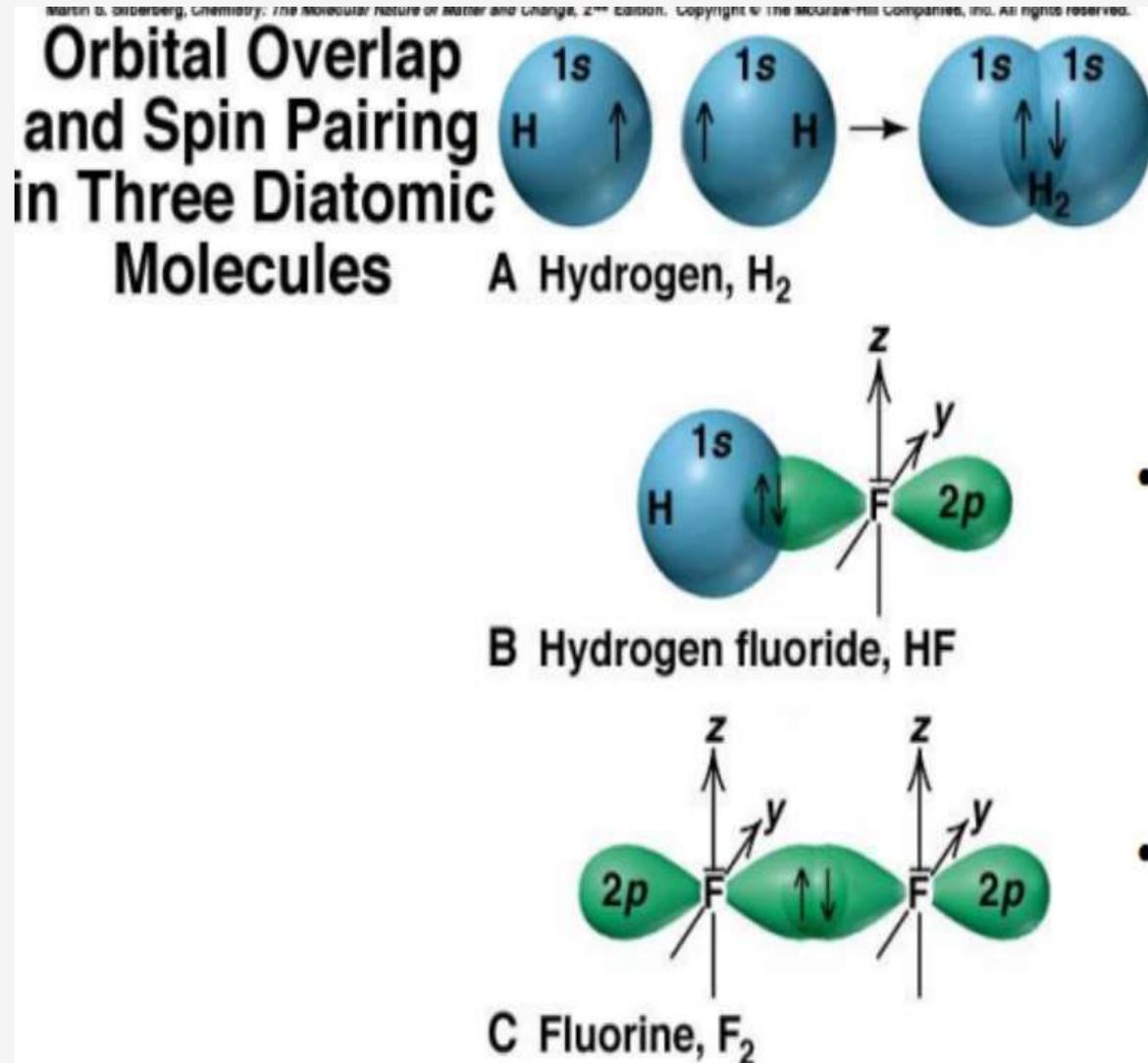
Les règles à suivre pour appliquer le modèle VSEPR

- Ecrire la structure de Lewis de la molécule, tenant compte des doublets d'électrons qui entourent l'atome central (les doublets libres sur un atome terminal n'influencent pas la géométrie)
- Compter les liaisons (m) et les doublets libres (n) autour de l'atome central
- Considérer les liaisons doubles et triples comme des liaisons simples
- Une fois (m+n) déterminée, baser la forme moléculaire sur la forme linéaire si $(m+n)=2$, la forme trigonale si $(m+n)=3$, la forme tétraédrique si $(m+n)=4$,
- Si on a des doublets libres, les placer dans des positions afin de minimiser les répulsions entre les doublets libres et les autres doublets (ex.; une position équatoriale dans la bipyramide trigonale)
- N.B. il est impossible de prédire exactement les angles des liaisons si on a un ou plusieurs doublets libres ou des liaisons qui ne sont pas toutes identiques

– SF₄

Le modèle de la liaison de valence

- les structures de Lewis ne peuvent pas expliquer les forces/longueurs relatives des liaisons covalentes (chaque liaison est tout simplement deux électrons partagés entre deux atomes)
- pour aller au-delà de la théorie de Lewis, on utilise le modèle de la liaison de valence (modèle LV)
- le modèle LV décrit la liaison covalente comme le recouvrement d'orbitales atomiques et les deux électrons (de spins opposés) se situent surtout dans cette région de recouvrement.



Le modèle de la liaison de valence

- pour le H₂, on a le recouvrement de deux orbitales 1s, une de chaque H
- pour le HF, on a le recouvrement d'une orbitale 1s sur l'H et d'une orbitale 2p sur le F
- pour le F₂, on a le recouvrement de deux orbitales 2p, une de chaque F
- la force et la longueur d'une liaison covalente dépendent de la nature des orbitales qui se recouvrent

Orbital Overlap and Spin Pairing in Three Diatomic Molecules

