

Méthode V.S.E.P.R. de détermination de la géométrie des molécules : calcul du nombre d'électrons libres de l'atome central

par Françoise SOULIÉ
Lycée Pierre de Fermat
Parvis des Jacobins - 31068 Toulouse Cedex

La méthode V.S.E.P.R. - répulsion des paires électroniques de la couche de valence - permet de prévoir la géométrie d'une molécule ou d'un ion polyatomique. Il faut connaître au préalable :

- la nature de l'atome central A,
- le nombre p d'atomes X liés à l'atome central (la méthode est applicable que les p atomes périphériques soient identiques ou non),
- le nombre q de doublets libres portés par l'atome central et symbolisés par la lettre E*.

En utilisant la notation classique AX_pE_q , les valeurs de p et q permettent de prévoir la géométrie de l'entité étudiée (voir bibliographie).

Le calcul du nombre d'électrons libres est souvent plein d'embûches pour les élèves, d'autant plus qu'ils croient trouver la solution en proposant des formules de Lewis, très souvent incorrectes, dont ils ne maîtrisent pas l'écriture. Dans les lignes qui suivent, je propose donc de calculer le nombre d'électrons libres de l'atome central A **sans écrire, à aucun moment**, de schémas de Lewis.

* La notation AX_pE_q a le défaut d'exclure le cas d'électrons non appariés de l'atome central.

1. FORMULE UTILISÉE

Le nombre y d'électrons libres de l'atome central A est donné par la relation :

$$y = a - b - \sum_i n_i \cdot v_i$$

avec :

a : nombre d'électrons de valence de l'atome central (nombre d'électrons dans la dernière couche),

b : charge de l'entité étudiée (algébrique),

n_i : nombre d'atomes ou de groupements identiques X_i reliés à l'atome central,

v_i : «nombre de valence» de X_i . v_i ne concerne que des atomes ou des groupements simples reliés à l'atome central. J'associe à ce terme v_i une idée très élémentaire accessible par référence aux molécules les plus simples connues des élèves. A l'oral je préfère remplacer l'expression «nombre de valence» par l'expression «l'atome X_i compte pour v_i électrons».

Tableau de valeurs de v_i :

X_i (atome ou groupement)	H	R	O	O de OH	N	N de NH ₂	F, Cl, Br, I	S
v_i	1	1	2	1	3	1	1	2

et cela suffit en général.

Remarque : quelle que soit la démarche suivie (écriture de formules de Lewis ou non), il faudra nécessairement préciser, par exemple, que l'hydrogène de HNO_3 n'est pas relié à l'atome d'azote central, ou que l'ozone n'est pas cyclique,...

2. EXEMPLES

Atome central dans l'entité considérée	y
P dans POCl_3	$5 - 0 - 2 - 3x(1) = 0$
O dans O_3	$6 - 0 - 2x(2) = 2$
S dans SO_2	$6 - 0 - 4 = 2$
SO_3	$6 - 0 - 6 = 0$

SO_3^{2-}	$6 + 2 - 6 = 2$
SO_4^{2-}	$6 + 2 - 8 = 0$
H_2SO_3	$6 - 0 - 1x(2) - 2x(1) = 2$
H_2SO_4	$6 - 0 - 2x(2) - 2x(1) = 0$
Cl dans ClO_3^-	$7 + 1 - 6 = 2$
N dans NO_2	Voir *
NO_2^+	$5 - 1 - 4 = 0$
HNO_3	$5 - 0 - 4 - 1 = 0$
NH_2^-	$5 + 1 - 2 = 4$
I dans I_3^-	$7 + 1 - 2 = 6$
Xe dans XeF_4	$8 - 0 - 4 = 4$
C dans un carbocation	$4 - 1 - 3 = 0$
* : Pour N dans NO_2 , : $y = 5 + 0 - 4 = 1$; c'est donc un radical. Cet électron célibataire confère à cette molécule la géométrie trigonale, comme pour l'ion nitrite NO_2^- pour lequel $y = 2$. On peut donc admettre que lorsqu'on obtient une valeur impaire de y , la géométrie est du même type que celle que confère la valeur paire immédiatement supérieure.	

etc..

Le calcul de q étant résolu sans problème ($q = y/2$), la prévision de la géométrie devient une simple formalité ; nous renvoyons pour cela aux articles déjà parus dans le B.U.P. (voir bibliographie) ou aux livres d'enseignement supérieur.

3. CONCLUSION

Avec cette méthode simple de calcul du nombre d'électrons non liants de l'atome central, je souhaite :

- affirmer qu'il s'agit bien de **prévoir** et donc d'utiliser un nombre minimal de données initiales,
- bien montrer aux élèves que l'écriture de formules de Lewis est tout à fait **inutile** dans le cadre strict de la méthode V.S.E.P.R.

REMERCIEMENTS

Merci aux collègues toulousains qui ont testé auprès de leurs élèves cette approche de l'utilisation des critères généraux de la méthode V.S.E.P.R.

BIBLIOGRAPHIE

- J. SALA-PALA - Géométrie des ions et molécules : aspect statique, relation avec les propriétés, aspect dynamique, B.U.P. **1982**, n° 648, 201.
- G. FONTAINE - Préviation de la géométrie des molécules par la méthode V.S.E.P.R., B.U.P. **1977**, n° 591, 559.
- R. GILLESPIE - *J. Chem. Educ.*, **1970**, 47, 18.
- R. GILLESPIE - *Multiple Bonds and the V.S.E.P.R. Model J. Chem. Educ.*, **1982**, 69, 116.
- P. ATKIN - Chimie Générale, Interédition **1992**, ch 9, p. 253-263.
- Mac QUARRIE et ROCK - Chimie Générale, trad de P. DEPOVERE ; De Boeck éditions **1992** Ch. 11 et 12 p. 375-433.