

Géométrie des molécules

Règles de Gillespie

Règle 1	La géométrie dépend de l'ensemble des doublets électroniques de la couche de valence de chaque atome
Règle 2	Les doublets de la couche de valence se disposent autour de l'atome de façon à s'éloigner le plus possible l'un de l'autre
Règle 3	Les doublets non partagés exercent des répulsions plus grandes que les doublets de liaison et les répulsions exercées par ces derniers sont d'autant plus faible que l'atome lié est plus électronégatif
Règle 4	Les liaisons multiples ne sont considérées que comme un seul centre de répulsion.

Méthode pour déterminer les formes

Etape 1	Trouvez le nombre de doublets de l'atome central Ecrire la structure de Lewis Traiter les liaisons multiples comme un doublet unique
Etape 2	Identifier l'agencement des doublets électroniques
Etape 3	Placer les atomes et nommer le forme de la molécule
Etape 4	Laisser la molécule se déformer de façon à ce que les doublets libres soient les plus possibles les uns des autres et le plus loin possible des doublets liants. Ordre de répulsion : Doublets libres - doublets libres > Doublets libres – doublets liants > Doublets liant – doublets liants



n+m	géométrie des paires	angles (°)
2	ligne	180
3	triangle	120
4	tétraèdre	109,47
5	bipyramide trigonale	120 et 90
6	octaèdre	90

$n+m = 2$: Ligne

Type	Géométrie particulière	Angles	Exemples
AX_2	Linéaire	180°	$BeCl_2$ CO_2 HCN N_2O BeF_2 GeO_2
AXE	Linéaire		Molécules diatomiques : O_2

$n+m = 3$: Triangle

Type	Géométrie particulière	Angles	Exemples
AX_3	Triangulaire	120°	BF_3 SO_3 NO_3^- CO_3^{--} R_3C^+ InF_2 TeO_3
AX_2E	Coudée	< 120°	SO_2 O_3 NO_2^- $SnCl_2$ GeF_2 $PbCl_2$ $PbBr_2$

$n+m = 4$: Tétraèdre

Type	Géométrie particulière	Angles	Exemples
AX₄	Tétraèdre	109,5°	CH_4 NH_4^+ BF_4^- PO_4^{3-} $S_2O_3^{2-}$ SiF_4 CF_4 IO_4^- SiH_4 ClO_4^- SO_4^{2-} XeO_4
AX₃E	Pyramide triangulaire	< 109,5°	NH_3 H_3O^+ SO_3^{2-} R_3C^- PCl_3 AsF_3 TeO_3^{2-} ClO_3^- PF_3 ClO_3^- XeO_3 $AsCl_3$
AX₂E₂	Coudée	< 109,5°	H_2O SF_2 ClO_2^- SCl_2 TeF_2 OF_2

$n+m = 5$: Bipyramide trigonale

Type	Géométrie particulière	Angles	Exemples
AX₅	Bipyramide trigonale	120° et 90°	PCl_5 SOF_4 $(CH_3)_2PF_3$ AsF_5
AX₄E	« Papillon »	< 120° et > 90°	SF_4 $IO_2F_2^{2-}$ SeF_4 XeO_2F_2 IF_4^+
AX₃E₂	« en T »	< 90°	ClF_3 IF_3 BrF_3
AX₂E₃	Linéaire		XeF_2 I_3^- IF_2^- KrF_2

$n+m = 6$: Octaèdre

Type	Géométrie particulière	Angles	Exemples
AX₆	Octaèdre	90°	<i>SF₆</i> <i>H₅IO₆</i> <i>IOF₅</i>
AX₅E	Pyramide à base carrée	>90°	<i>BrF₅</i> <i>XeOF₄</i> <i>IF₅</i> <i>ClF₅</i> <i>TeF₅^{−−}</i>
AX₄E₂	Carrée	90°	<i>XeF₄</i> <i>ICl₄[−]</i> <i>IF₄[−]</i> <i>KrF₄</i>