

## Concept d'hybridation d'orbitales atomiques

L'hybridation correspond à la combinaison d'orbitales atomiques de valence d'un atome, et la formation de nouvelles orbitales atomiques de même énergie (orbitales dégénérées).

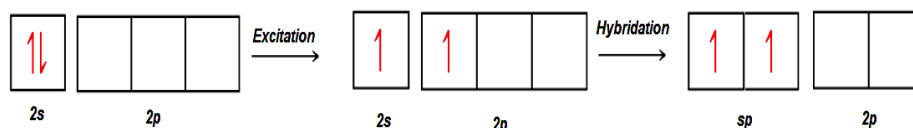
Le nombre d'orbitales atomiques hybrides formées est le même que celui des orbitales atomiques pures combinées.

La répartition des électrons de valence sur les orbitales hybrides se fait conformément à la règle de Hund et au principe d'exclusion de Pauli.

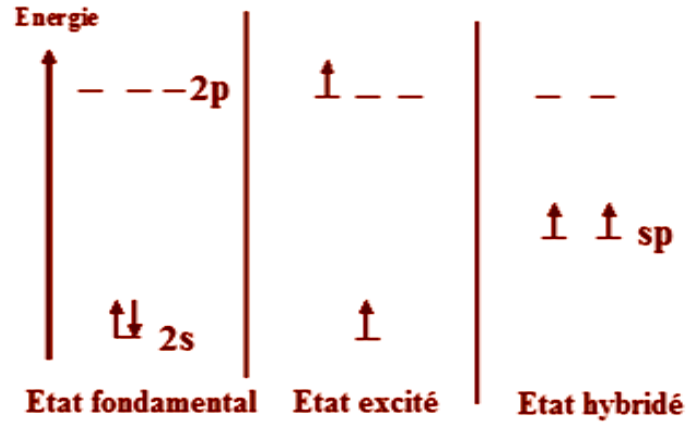
### Hybridation $sp$ – Cas de $\text{BeH}_2$

La configuration électronique de  ${}^4\text{Be}$  ( $1s^2 2s^2$ ) pris à l'état fondamental ne permet pas d'expliquer la formation de deux liaisons comme par exemple dans le cas de la molécule  $\text{BeH}_2$ .

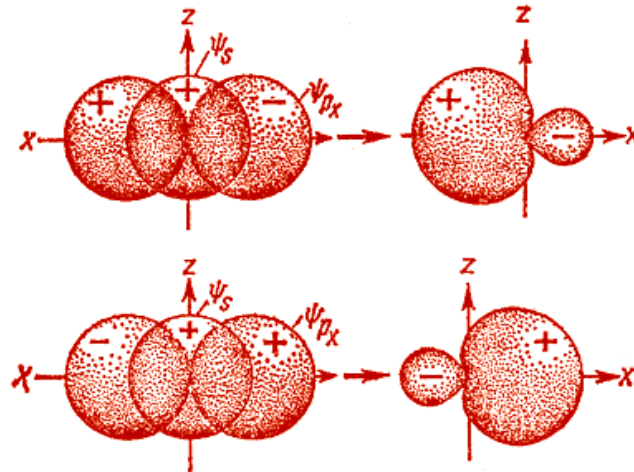
L'état hybridé des OA de valence de Be permet bien d'expliquer la formation de deux liaisons identiques.



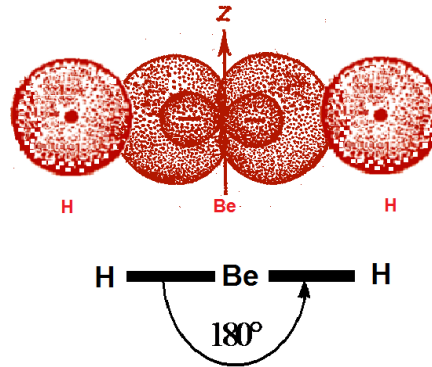
Les positions relatives des niveaux énergétiques des électrons de valence de l'atome Be, pris dans les états fondamental, excité et hybridé sont comme suit :



L'état hybridé de Be se caractérise par la présence de deux électrons célibataires de même énergie. Chacun des électrons occupe une orbitale atomique hybride sp, qui résulte de la combinaison de l'orbitale atomique 2s et d'une orbitale atomique de la sous-couche 2p ( $2p_x$  par exemple), comme le montre la représentation suivante.



Le recouvrement de chacune des deux orbitales hybrides  $sp$  de Be avec l'orbitale atomique  $1s$  de l'hydrogène donne lieu à une liaison covalente Be-H, comme le montre le schéma suivant.

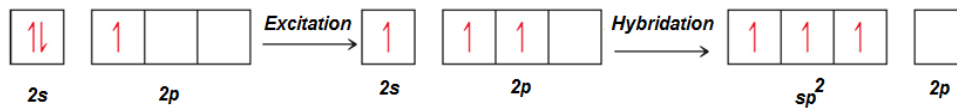


La géométrie de la molécule est linéaire.

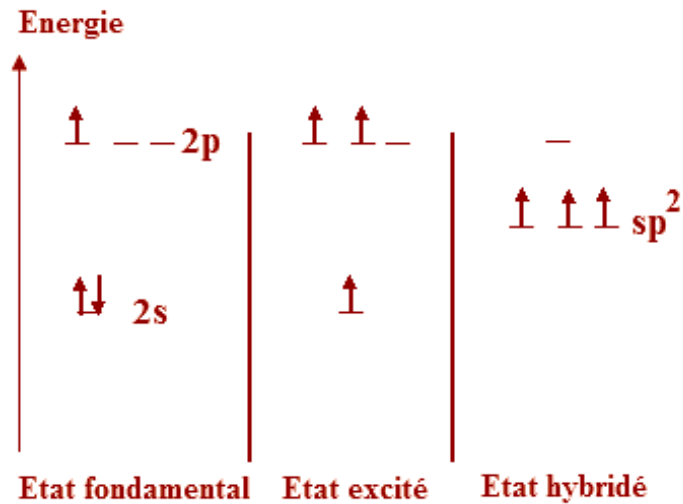
### Hybridation $sp^2$ - Cas de $BH_3$

La configuration électronique de  ${}_5B$  ( $1s^2 2s^2 2p^1$ ) à l'état fondamental ne permet pas de prévoir l'établissement de trois liaisons, comme dans le cas de  $BH_3$ .

L'établissement d'autant de liaisons autour de B s'explique bien en considérant l'état hybridé.

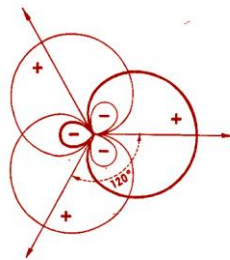


Les positions relatives des énergies des électrons de valence de B, pris dans l'état fondamental, excité et hybridé, sont montrées dans la figure suivante.

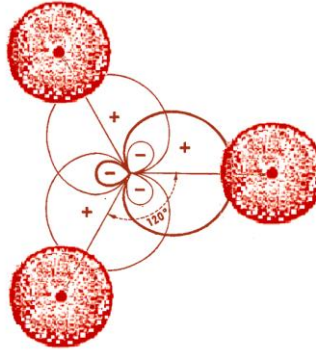


Par comparaison avec l'état fondamental, l'état hybridé de B se caractérise par la présence de trois électrons célibataires de même énergie. Chacun de ces électrons occupe une orbitale hybride  $sp^2$ .

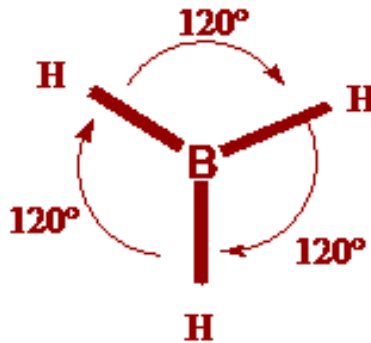
Les trois orbitales hybrides ( $sp^2$ ) de B sont formées par la combinaison des orbitales atomiques 2s,  $2p_x$  et  $2p_y$  (ou  $2p_z$ ) et se schématisent ainsi :



Le recouvrement des orbitales hybrides avec les orbitales 1s des atomes d'hydrogène se fait de la manière suivante :



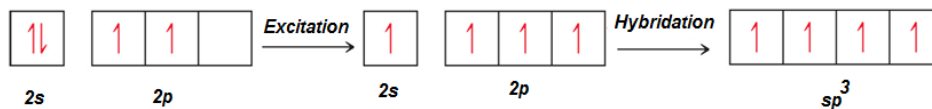
Il s'ensuit la formation de trois liaisons identiques placées de la manière suivante :



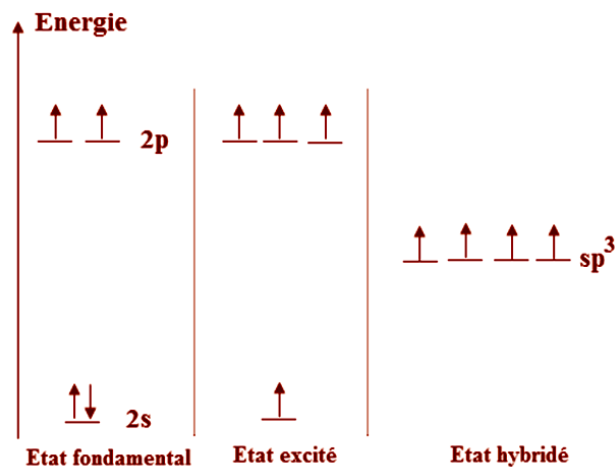
La molécule présente une géométrie trigonale.

### Hybridation $sp^3$ – Cas de $CH_4$

La structure électronique de  ${}_4C$  ( $1s^2 2s^2 2p^2$ ), pris à l'état fondamental, ne permet pas de prévoir la formation de la molécule  $CH_4$ . La formation d'un tel édifice chimique est expliquée par l'état hybridé de C.

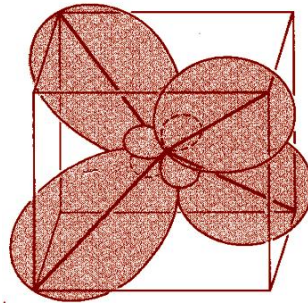


Les positions relatives des niveaux énergétiques des électrons de valence de l'atome de carbone pris à l'état fondamental, excité et hybridé sont comme suit :

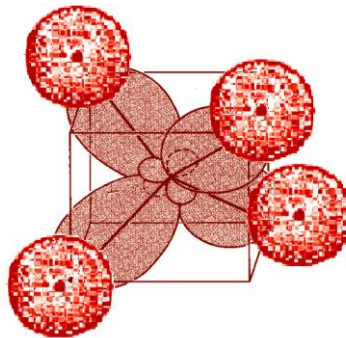


A l'état hybridé, l'atome dispose de 4 électrons à spins parallèles, placé chacun sur une orbitale hybride  $sp^3$ . Les orbitales hybrides sont le

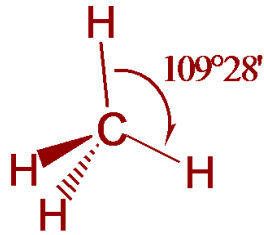
résultat de la combinaison de l'orbitale atomique 2s avec les trois OA de la sous-couche 2p, et sont disposées dans l'espace de la manière suivante :



Le recouvrement des orbitales sp<sup>3</sup> avec les orbitales atomiques 1s de l'hydrogène est comme suit :



Il en dérive la formation de quatre liaisons C-H identiques comme le montre la figure ci-après.



La géométrie de la molécule est tétraédrique.

Remarques :

- les états d'hybridation de type:  $sp^3d$ ,  $sp^3d^2$  et  $sp^3d^3$  peuvent avoir lieu. A titre d'exemples, les atomes P, S et I, formant les molécules  $PCl_5$ ,  $SF_6$  et  $IF_7$ , sont respectivement dans des états d'hybridation  $sp^3d$ ,  $sp^3d^2$  et  $sp^3d^3$ .
- La géométrie d'une molécule dépend de l'état d'hybridation de l'atome central. Les atomes centraux des molécules linéaire, triangulaire et tétraédrique sont respectivement dans des états d'hybridation  $sp$ ,  $sp^2$  et  $sp^3$ .