

Dessiner une molécule en 3D : le modèle de Gillespie (VSEPR)

Le modèle de Gillespie prédit la forme d'une molécule en se basant sur le principe de répulsion des paires électroniques de la couche de valence (valence shell electron pairs repulsion). Ainsi, les paires électroniques autour d'un atome occupent l'espace dans des directions qui minimisent leurs forces répulsives mutuelles (cette règle implique aussi les électrons célibataires, mais leur influence est moindre). Les angles exacts sont également influencés par les facteurs suivants :

- La répulsion due à une paire libre est plus grande que la répulsion due à une paire liante.
- La répulsion due à une liaison double est plus grande que la répulsion due à une liaison simple.

Le tableau ci-dessous permet de trouver la géométrie des molécules et ions complexes respectant la règle de l'octet.

Nombre d'atomes liés à l'atome central	Nombre de paires libres sur l'atome central	Exemples	Nom de la géométrie Angle VSEPR
2	0	
3	0		trigonale plane angle $\approx 120^\circ$
2	1	 angle $\approx 105^\circ$
4	0	 angle $\approx 109^\circ$
3	1	 angle $\approx 107^\circ$
2	2	 angle $\approx 105^\circ$