

TEORIA VSEPR

Perché è importante conoscere la forma delle molecole???

La forma delle molecole ne determina il sapore, l'odore e l'azione farmacologica, e riveste un ruolo fondamentale nelle reazioni indispensabili alla vita. Influisce anche sulle proprietà dei materiali intorno a noi, per esempio sul loro stato di aggregazione e sulla loro solubilità.

L'idea del modello VSEPR fu proposta inizialmente dai chimici britannici Nevil Sidgwick e Herbert Powell, ed è stata poi elaborata dal chimico canadese Ronald Gillespie nel 1957.

VSEPR è un acronimo che sta per *Valence Shell Electron-Pair Repulsion*, in italiano teoria della repulsione delle coppie elettroniche dello strato di valenza.

Il modello VSEPR estende la teoria di Lewis aggiungendo regole che giustificano la forma delle molecole/ioni poliatomici e spiegano gli angoli di legame, assumendo che gli elementi legati o i doppietti elettronici isolati, respingendosi, si dispongano alla massima distanza consentita.

ANGOLO DI LEGAME: è

l'angolo formato dagli assi congiungenti i nuclei degli atomi legati.

REGOLA 1: le regioni ad alta densità elettronica (coppie di legame e coppie solitarie sull'atomo centrale) si respingono a vicenda e, per ridurre al minimo le repulsioni, si dispongono il più possibile lontane le une dalle altre, pur mantenendo la stessa distanza dall'atomo centrale.

REGOLA 2: un legame multiplo viene trattato come una singola regione a elevata concentrazione elettronica.

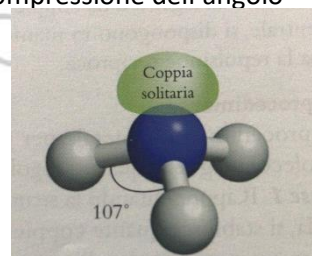
REGOLA 3: la forma della molecola è determinata soltanto dalla posizione degli atomi.

REGOLA 4: le intensità delle repulsioni sono nell'ordine:

coppia solitaria-coppia solitaria > coppia solitaria-coppia di legame > coppia di legame-coppia di legame.

Perché le coppie solitarie hanno un effetto repulsivo maggiore rispetto alle coppie di legame?

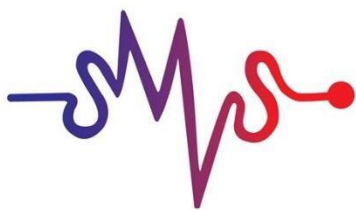
La coppia solitaria è meno vincolata rispetto a quella di legame, quindi si appropria di uno spazio maggiore; le coppie di legame (insieme con i loro atomi) si allontanano dalla coppia solitaria per attenuare la repulsione di cui risentono e ciò comporta una moderata compressione dell'angolo di legame.



Esempio: Ammoniaca NH_3

In pratica, per applicare la teoria VSEPR:

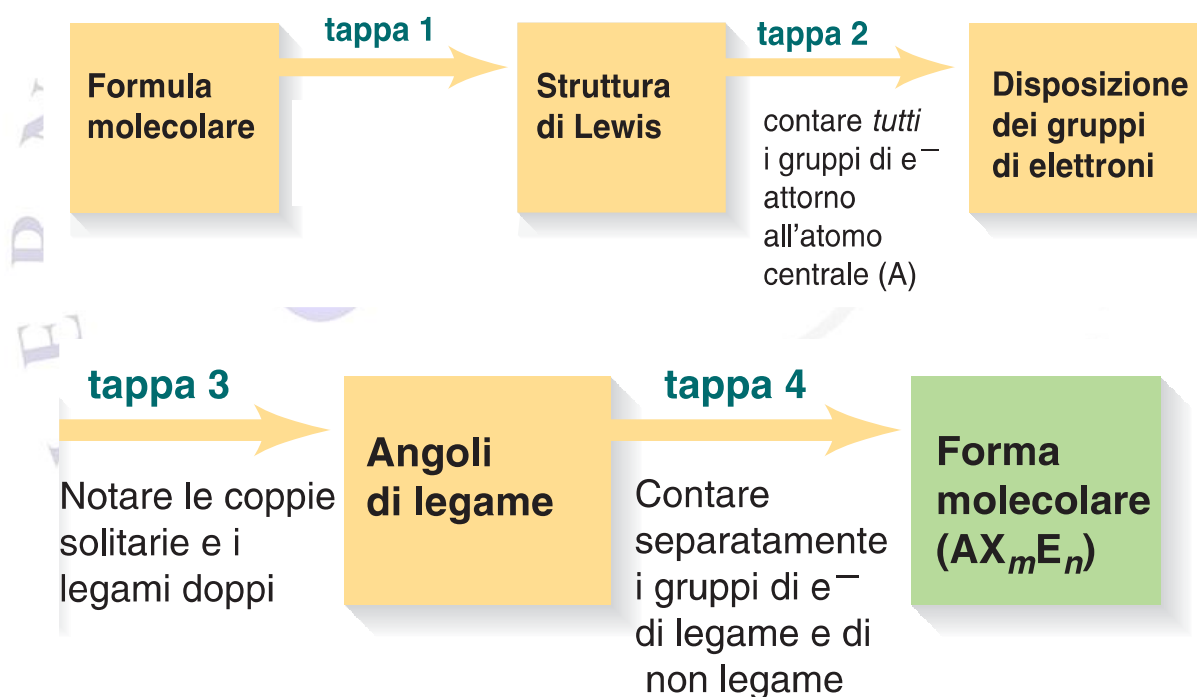
1. Disegnare la struttura di Lewis della molecola;
2. Tenere in considerazione se sono presenti eventuali doppietti elettronici solitari attorno l'atomo centrale.
3. Controllare che possibilmente tutti gli atomi periferici presenti nella molecola abbiano raggiunto l'ottetto/duetto



4. Stabilire la geometria e l'angolo di legame
5. Stabilire se l'ibridazione dell'atomo centrale, la quale si determina sommando il numero dei legami σ ed il numero di doppietti elettronici solitari nell'atomo centrale.

SOMMA	IBRIDAZIONE
2	sp
3	sp ²
4	sp ³
5	sp ³ d
6	sp ³ d ²

LE QUATTRO TAPPE PER CONVERTIRE UNA FORMULA MOLECOLARE IN UNA STRUTTURA MOLECOLARE



La forma molecolare può essere classificata con la notazione



A = atomo centrale

X = atomo circostante

E = gruppo di e⁻ di valenza di non legame

m e *n* = numeri interi



NUMERO STERICO	IBRIDAZIONE	TIPO DI MOLECOLE	ANGOLO DI LEGAME	STRUTTURA GEOMETRICA	GEOMETRIA
2	sp	AX ₂ E ₀	180°	X – A – X	LINEARE
3	sp ²	AX ₃ E ₀	120°		TRIANGOLARE PLANARE
3	sp ²	AX ₂ E ₁	<120°		PIEGATA O ANGOLATA
4	sp ³	AX ₄ E ₀	109,5°		TETRAEDRICA
4	sp ³	AX ₃ E ₁	107,3°		TRIANGOLARE PIRAMIDALE
4	sp ³	AX ₂ E ₂	104,5		PIEGATA O ANGOLATA
5	sp ³ d	AX ₅ E ₀	120° e 90°		TRIANGONALE BIPIRAMIDALE
5	sp ³ d	AX ₄ E ₁	120° e 90°		A CAVALLETTO
5	sp ³ d	AX ₃ E ₂	90°		A T
5	sp ³ d	AX ₂ E ₃	180°		LINEARE
6	sp ³ d ²	AX ₆ E ₀	90°		OTTAEDRICA



6	sp^3d^2	AX_5E_1	90°		PIRAMIDALE QUADRATA
6	sp^3d^2	AX_4E_2	90°		PLANARE QUADRATA
6	sp^3d^2	AX_3E_3	90°		A T
6	sp^3d^2	AX_2E_4	180°		LINEARE