

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.

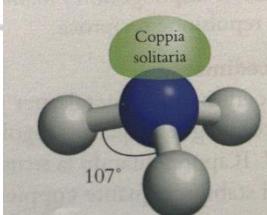
REGOLA 4: le intensità delle repulsioni sono nell'ordine:

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?

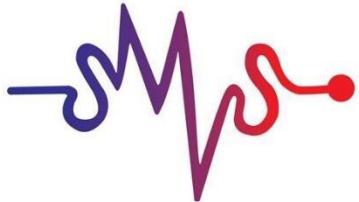
La coppia solitaria è meno vincolata rispetto a quella di legame, quindi si appropria di uno spazio maggiore; le coppie di legame (insieme con i loro atomi) si allontanano dalla coppia solitaria per attenuare la repulsione di cui risentono e ciò comporta una moderata compressione dell'angolo di legame.

Esempio: Ammoniaca NH_3



In pratica, per applicare la teoria VSEPR:

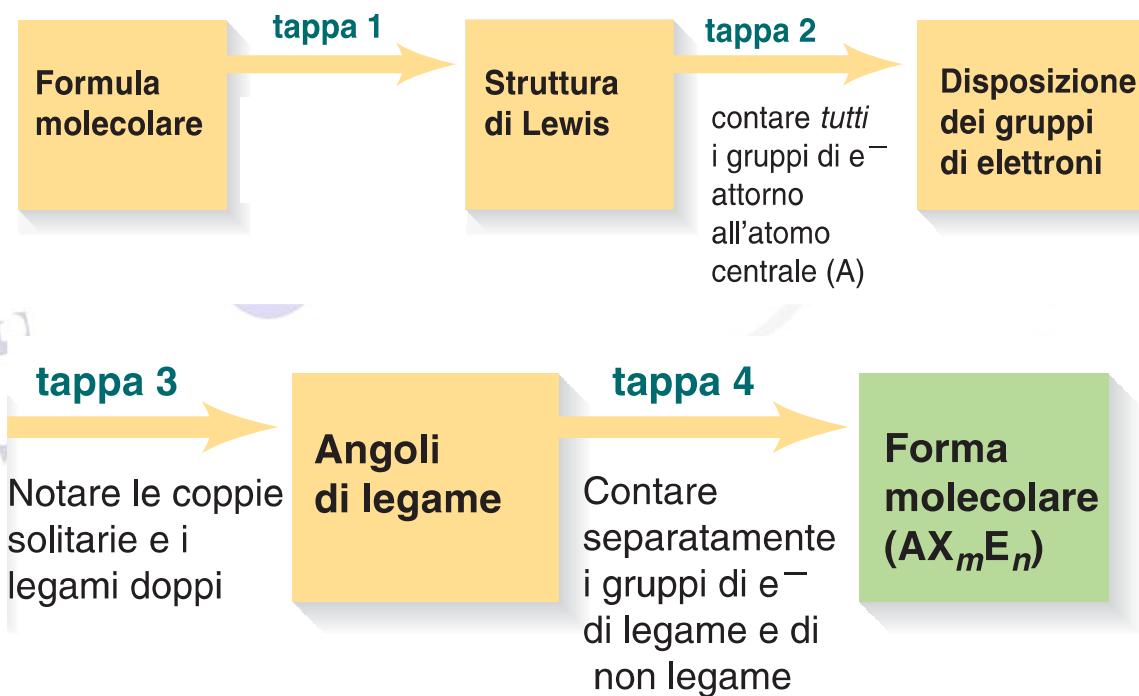
1. Disegnare la struttura di Lewis della molecola;
2. Tenere in considerazione se sono presenti eventuali doppietti elettronici solitari attorno l'atomo centrale.
3. Controllare che possibilmente tutti gli atomi periferici presenti nella molecola abbiano raggiunto l'ottetto/duetto



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^3d
6	sp^3d^2

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



La forma molecolare può essere classificata con la notazione

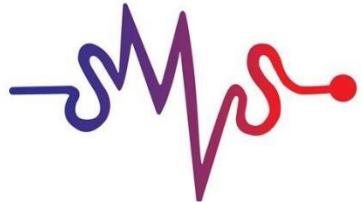
A = atomo centrale

X = atomo circostante

E = gruppo di e⁻ di valenza di non legame

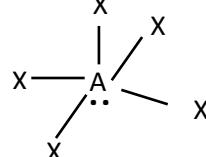
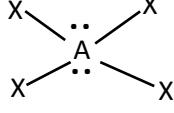
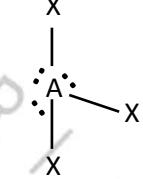
m e *n* = numeri interi

AX_mE_n



NUMERO STERICO	IBRIDAZIONE	TIPO DI MOLECOLE	ANGOLO DI LEGAME	STRUTTURA GEOMETRICA	GEOMETRIA
2	sp	AX_2E_0	180°	$X - A - X$	LINEARE
3	sp^2	AX_3E_0	120°	$ \begin{array}{c} X \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	TRIANGOLARE PLANARE
3	sp^2	AX_2E_1	$<120^\circ$	$ \begin{array}{c} \cdot \cdot \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	PIEGATA O ANGOLATA
4	sp^3	AX_4E_1	$109,5^\circ$	$ \begin{array}{c} X \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	TETRAEDRICA
4	sp^3	AX_3E_1	$107,3^\circ$	$ \begin{array}{c} \cdot \cdot \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	TRIANGOLARE PIRAMIDALE
4	sp^3	AX_2E_2	$104,5$	$ \begin{array}{c} \cdot \cdot \cdot \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	PIEGATA O ANGOLATA
5	sp^3d	AX_5E_0	120° e 90°	$ \begin{array}{c} X \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	TRIANGONALE BIPIRAMIDALE
5	sp^3d	AX_4E_1	120° e 90°	$ \begin{array}{c} X \\ \\ :A: \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	A CAVALLETTO
5	sp^3d	AX_3E_2	90°	$ \begin{array}{c} X \\ \\ :A: \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	AT
5	sp^3d	AX_2E_3	180°	$ \begin{array}{c} X - :A: - X \\ \cdot \cdot \cdot \\ \\ X \end{array} $	LINEARE
6	sp^3d^2	AX_6E_0	90°	$ \begin{array}{c} X \\ \\ A \\ / \quad \backslash \\ X \quad X \end{array} $	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°		AT
6	sp^3d^2	AX_2E_4	180°		LINEARE