

Teoria VSEPR

La **teoria VSEPR** viene usata come metodo per valutare la disposizione geometrica degli atomi di una molecola.

L'acronimo **VSEPR** abbrevia l'espressione inglese *Valence Shell Electron Pair Repulsion*, cioè *repulsione delle coppie elettroniche nel guscio di valenza*; tale repulsione consente di fare ipotesi sulla geometria finale della molecola.

L'ipotesi di questa teoria è che la distribuzione dei legami attorno ad un atomo dipende dal numero totale di coppie di elettroni, sia di non legame (*lone pair* = coppie solitarie) che di legame, che lo circondano: queste coppie si dispongono nello spazio geometrico in modo da minimizzare la loro reciproca repulsione. Le repulsioni tra due coppie di non legame sono maggiori che tra una coppia di non legame e coppia di legame a loro volta maggiori delle repulsioni tra due coppie di legame.

Punti principali della teoria

1. Le coppie di elettroni nel guscio di valenza dell'atomo centrale si respingono a vicenda.
2. Queste coppie di elettroni tendono a occupare la posizione più adatta per minimizzare la repulsione, massimizzando quindi lo spazio interposto tra gli elettroni.
3. Il guscio di valenza viene considerato come una sfera sulla cui superficie sono localizzati gli elettroni, che manterranno la massima distanza tra loro.
4. Un legame multiplo viene considerato come una singola coppia di elettroni, mentre due o tre coppie di elettroni di un legame multiplo si considerano come una *super* coppia di elettroni.
5. Il modello VSEPR è applicabile quando due o più strutture di risonanza possono rappresentare una molecola.

Si prendono in considerazione tre tipi di repulsione tra gli elettroni di una molecola:

- La repulsione tra coppia solitaria e coppia solitaria (dall'inglese *lone pair-lone pair*, lp-lp).
- La repulsione tra coppia solitaria e coppia di elettroni di legame (*lone pair-bonding pair*, lp-bp).
- La repulsione tra coppia di elettroni di legame e coppia di elettroni di legame (*bonding pair-bonding pair*, bp-bp).

Una molecola deve minimizzare e stabilizzare ogni tipo di repulsione elettronica; quando ciò non è possibile, è preferibile prendere in considerazione una *repulsione debole* (che causa una lieve deviazione dalla configurazione ideale).

La repulsione tra coppia solitaria e coppia solitaria (lp-lp) è considerata più forte di quella tra coppia solitaria e coppia di elettroni di legame (lp-bp): infatti la repulsione tra coppia di elettroni di legame e coppia di elettroni di legame (bp-bp) è più debole e quindi più stabile della repulsione tra coppia solitaria e coppia solitaria (lp-lp) o tra coppia solitaria ed coppia di elettroni di legame (lp-bp).

Confronto con altre teorie e sviluppi

La teoria VSEPR viene spesso comparata e messa in contrasto con la teoria del legame di valenza (anche se non viene considerata come una parte di quest'ultima), che definisce la geometria molecolare tramite l'analisi degli orbitali che sono energeticamente adeguati per intraprendere un legame. La teoria del legame di valenza riguarda la formazione di legami sigma e pi greco.

La teoria degli orbitali molecolari è invece un altro modello che consente di prevedere la disposizione spaziale di atomi ed elettroni che costituiscono molecole e ioni poliatomici.

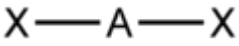
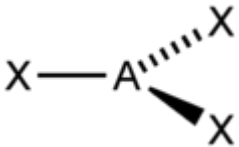
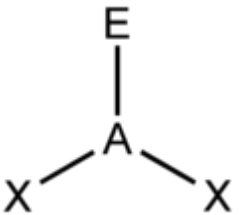





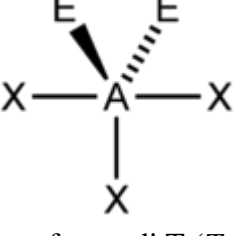

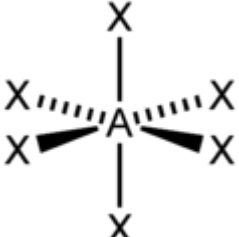
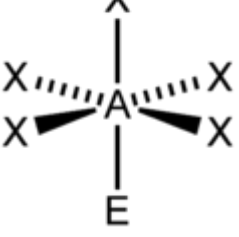
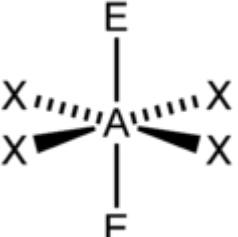
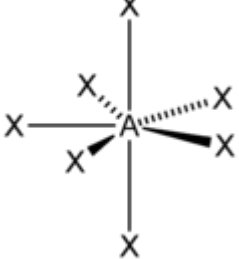
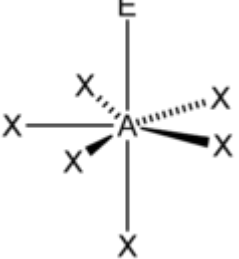
La teoria VSEPR è stata tuttavia spesso criticata per non avere riscontri quantitativi, anche se strutturalmente accurati per le molecole formate da legami covalenti.





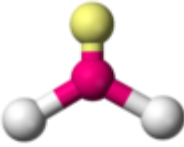
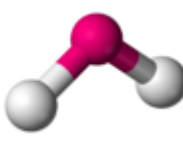
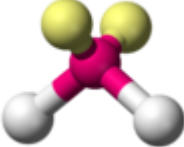
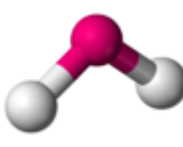
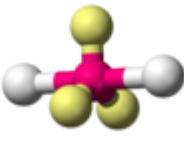
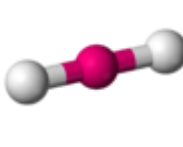
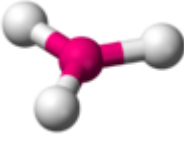
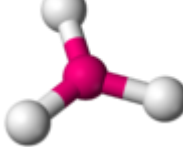
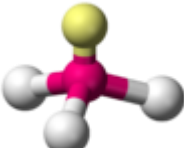
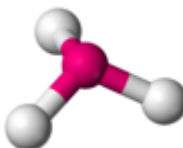
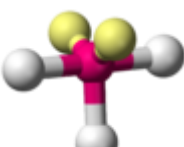
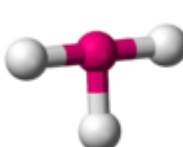



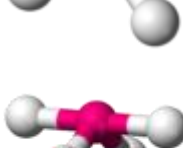

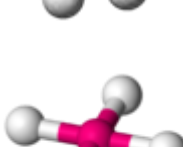
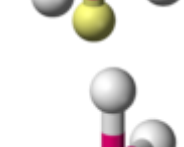

Inoltre sono state sviluppate delle teorie sui campi di forza molecolare basati sulla teoria VSEPR.

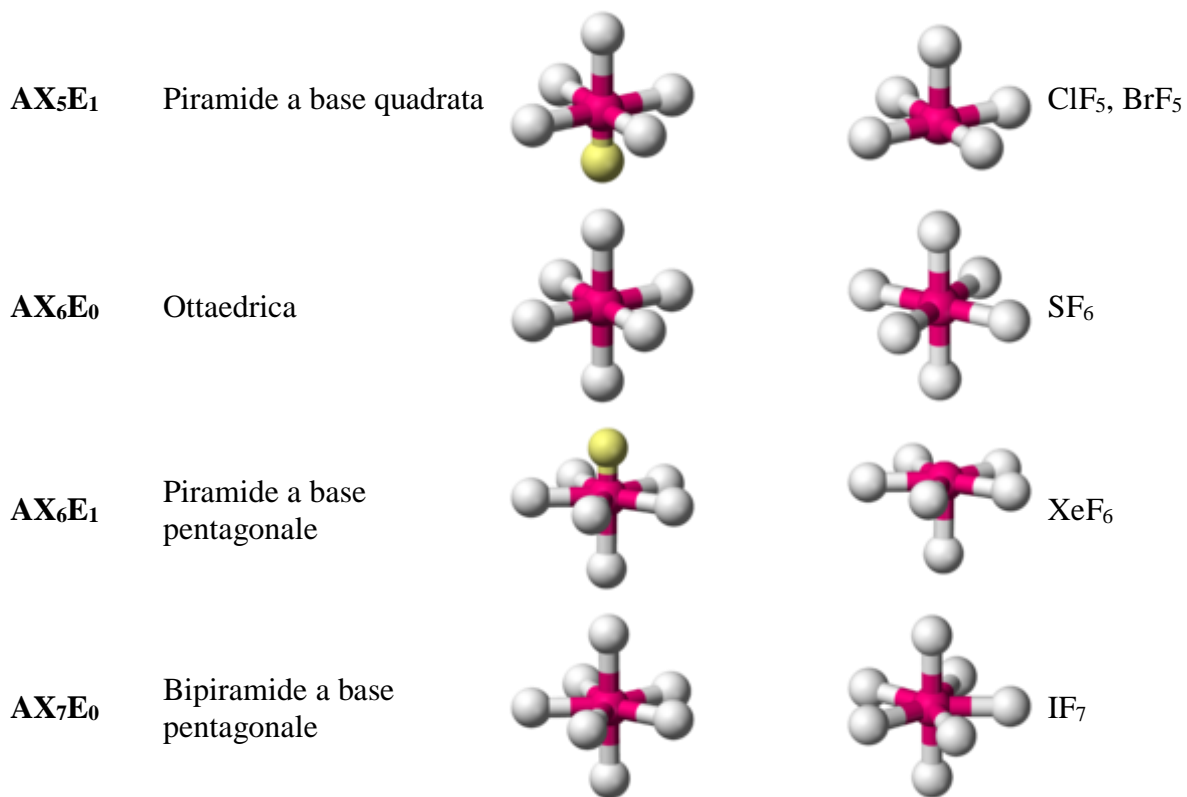
Metodo AXE

Il metodo *AXE* di conteggio degli elettroni è comunemente usato per l'applicazione della teoria VSEPR. La sigla *AXE* rappresenta con la lettera *A* l'atomo centrale e ha sempre come valore sottointeso 1. La *X* rappresenta quanti legami sigma si formano tra l'atomo centrale e gli atomi ad esso legati. I legami covalenti multipli (doppi, tripli, etc) contano come un *X*. Infine la *E* rappresenta il numero di coppie singole di elettroni (*lone pairs*) presenti nel guscio di valenza dell'atomo centrale. La somma di *X* ed *E*, definita come numero sterico, è associata anche al numero totale di orbitali ibridati considerati dalla teoria del legame di valenza.

Geometria molecolare

Numero sterico	con 0 coppie singole di elettroni	1 coppia singola	2 coppie singole	3 coppie singole
2	 Lineare			
3	 Triangolare (piana)	 Angolare		
4	 Tetraedrica	 Piramide trigonale	 Angolare	
5	 Bipiramide trigonale	 <i>Seesaw</i> (ad altalena)	 a forma di T (<i>T-shaped</i>)	 Lineare
6	 Ottaedrica	 Piramide a base quadrata	 Quadrata (piana)	
7	 Bipiramide a base pentagonale	 Piramide a base pentagonale		

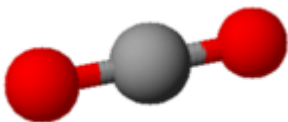
Tipo di molecola	Forma	disposizione degli elettroni [†]	Geometria [‡]	Esempi
AX_1E_n	Diatomica			HF, O ₂
AX_2E_0	Lineare			BeCl ₂ , HgCl ₂ , CO ₂
AX_2E_1	Angolare			NO ₂ ⁻ , SO ₂ , O ₃
AX_2E_2	Angolare			H ₂ O, OF ₂
AX_2E_3	Lineare			XeF ₂ , I ₃ ⁻
AX_3E_0	Triangolare (piana)			BF ₃ , CO ₃ ²⁻ , NO ₃ ⁻ , SO ₃
AX_3E_1	Piramide trigonale			NH ₃ , PCl ₃
AX_3E_2	a forma di T			ClF ₃ , BrF ₃
AX_4E_0	Tetraedrica			CH ₄ , PO ₄ ³⁻ , SO ₄ ²⁻ , ClO ₄ ⁻
AX_4E_1	Seesaw (ad altalena)			SF ₄
AX_4E_2	Quadrato (piana)			XeF ₄
AX_5E_0	Bipiramide trigonale			PCl ₅



† La disposizione degli elettroni include le coppie singole, rappresentate con un giallo chiaro
 ‡ Geometria osservata (escludendo le coppie singole di elettroni)

Esempi

La molecola del biossido di carbonio (CO_2) si disporrà nello spazio in modo lineare (omettendo le 4 coppie di elettroni di non legame) avendo gli ossigeni alle estremità ottenendo così la maggior distanza possibile tra i due doppi legami $C=O$ (e quindi la minor repulsione tra essi) con un angolo di 180° .



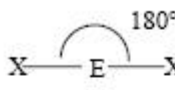
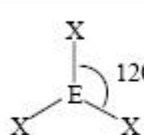
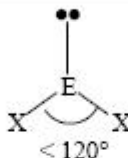
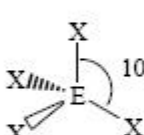
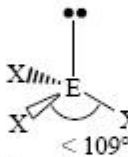
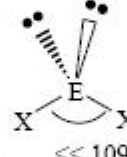
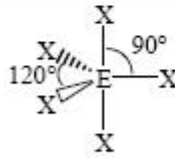
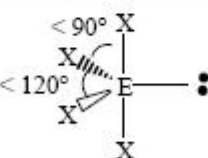
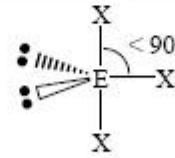
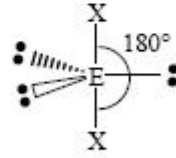
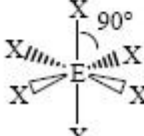
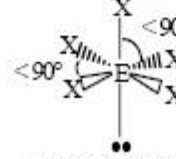
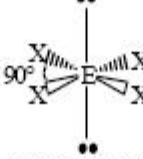
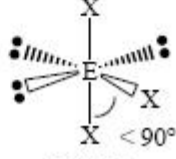
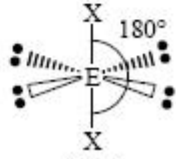
Anche il cloruro di berillio presenta forma lineare.

Nel metano i quattro atomi di idrogeno si disporranno come vertici di un tetraedro regolare con al centro l'atomo di carbonio. Gli angoli di legame risultano di $109,5^\circ$ essendoci infatti quattro coppie di elettroni di legame, le repulsioni sono le stesse per tutti i legami.

Nell'ammoniaca invece si hanno tre coppie di elettroni di legame ed una lone pair, la repulsione lone pair-coppia di legame è maggiore di quella tra le coppie di legame, il tetraedro non è quindi regolare e l'angolo $H-N-H$ diventa di $107,3^\circ$.

Infine nell'acqua si hanno due lone pairs e due coppie di legame, l'angolo $H-O-H$ è di 104° .

VSEPR Geometries

Steric No.	Basic Geometry 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	 <p style="text-align: center;">Linear</p>				
3	 <p style="text-align: center;">Trigonal Planar</p>	 <p style="text-align: center;">Bent or Angular</p>			
4	 <p style="text-align: center;">Tetrahedral</p>	 <p style="text-align: center;">Trigonal Pyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Bent or Angular</p>		
5	 <p style="text-align: center;">Trigonal Bipyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Sawhorse or Seesaw</p>	 <p style="text-align: center;">T-shape</p>	 <p style="text-align: center;">Linear</p>	
6	 <p style="text-align: center;">Octahedral</p>	 <p style="text-align: center;">Square Pyramid</p>	 <p style="text-align: center;">Square Planar</p>	 <p style="text-align: center;">T-shape</p>	 <p style="text-align: center;">Linear</p>