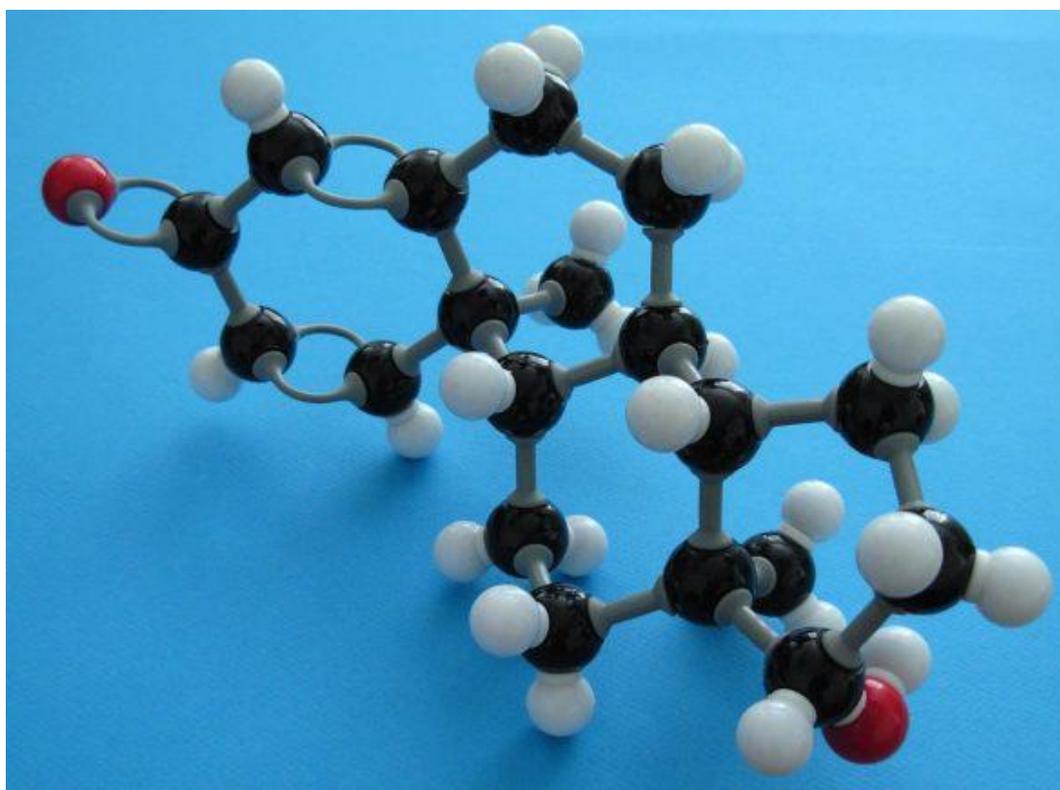


Giuseppe Buzzanca

GEOMETRIA DELLE MOLECOLE



QUADERNI DI CHIMICA

Teoria VSEPR

La **teoria VSEPR** (acronimo dall'inglese *Valence Shell Electron Pair Repulsion*, cioè *repulsione delle coppie elettroniche nel guscio di valenza*, occasionalmente pronunciata “vesper”) è usata come metodo per valutare la disposizione geometrica degli atomi di una molecola e si basa sul fatto che i dominî elettronici tendono a disporsi il più lontano possibile fra loro. Ciò è in accordo con la legge di Coulomb, secondo la quale cariche elettriche di segno uguale si respingono.

Tale teoria si basa sull'ipotesi che la distribuzione dei legami attorno ad un atomo dipende dal numero totale di coppie di elettroni che lo circondano, sia quelle che sono coinvolte in legami chimici sia quelle che non sono coinvolte in nessun legame chimico (dette coppie solitarie). Tali coppie di elettroni si dispongono nello spazio in modo da minimizzare le forze di repulsione reciproca. Le forze di repulsione tra due coppie di non legame sono più forti rispetto alle forze di repulsione tra una coppia di non legame e coppia di legame, che sono a loro volta più forti delle forze di repulsione 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 è considerato come una sfera sulla cui superficie sono localizzati gli elettroni, che manterranno la massima distanza tra loro;
4. Un legame multiplo è considerato come una singola coppia di elettroni, quindi 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 e coppia di elettroni di legame (lp-bp).

Confronto con altre teorie e sviluppi

La teoria VSEPR è spesso comparata e messa in contrasto con la teoria del legame di valenza (anche se non è 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.

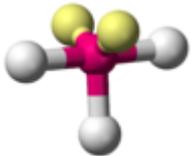
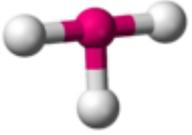
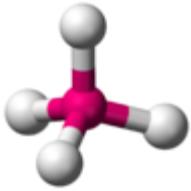
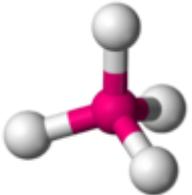
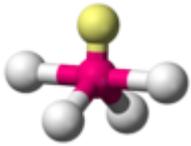
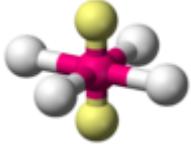
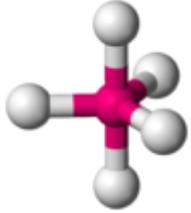
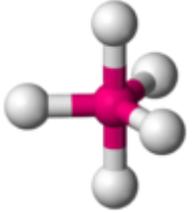
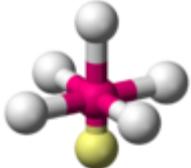
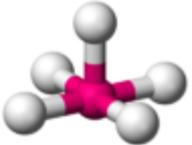
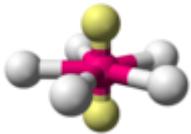
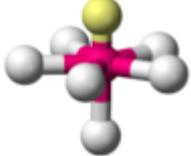
Metodo AXE

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 sottinteso 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 solitarie di elettroni (*lone pair*) 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.

Numero sterico	Geometria molecolare con			
	0 coppie solitarie	1 coppia solitaria	2 coppie solitarie	3 coppie solitarie
2				
	Lineare			
3				
	Triangolare (piana)	Angolare		
4				
	Tetraedrica	Piramide triangolare	Angolare	
5				
	Bipiramide triangolare	Seesaw (ad altalena)	T-shaped (a forma di T)	Lineare

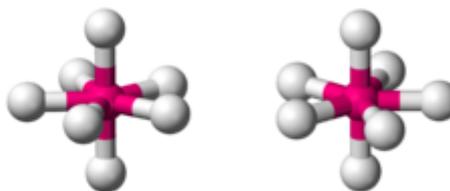
6				
	Ottaedrica	Piramide a base quadrata	Quadrata (piana)	
7				
	Bipiramide a base pentagonale	Piramide a base pentagonale	Pentagonale	

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

AX₃E₂	a forma di T			ClF ₃ , BrF ₃
AX₄E₀	Tetraedrica			CH ₄ , PO ₄ ³⁻ , SO ₄ ²⁻ , ClO ₄ ⁻
AX₄E₁	Seesaw (ad altalena)			SF ₄
AX₄E₂	Quadrato (piana)			XeF ₄
AX₅E₀	Bipiramide trigonale			PCl ₅
AX₅E₁	Piramide a base quadrata			ClF ₅ , BrF ₅
AX₅E₂	Pentagonale			XeF ₅ ⁻
AX₆E₀	Ottaedrica			SF ₆
AX₆E₁	Piramide a base pentagonale			XeF ₆

AX_7E_0

Bipiramide a base pentagonale

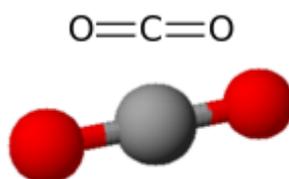


IF_7

(*) La disposizione degli elettroni include le coppie solitarie, colorate in giallo
 (***) Geometria osservata (escludendo le coppie solitarie 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 dispongono 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 coppie solitarie 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	 Linear				
3	 Trigonal Planar	 Bent or Angular			
4	 Tetrahedral	 Trigonal Pyramid	 Bent or Angular		
5	 Trigonal Bipyramid	 Sawhorse or Seesaw	 T-shape	 Linear	
6	 Octahedral	 Square Pyramid	 Square Planar	 T-shape	 Linear

Angoli di legame per alcune molecole