

Due modelli matematici

Con l'avvento della meccanica quantistica, i chimici hanno dovuto modificare anche le teorie di legame. La teoria di Lewis e la teoria VSEPR spiegano in modo convincente e approssimato i legami tra molecole nella fisica classica.

Le due teorie di legame che invece utilizzano la meccanica quantistica sono la teoria del legame di valenza (VB) di Linus Pauling e quella degli orbitali molecolari (MO) di Friedrich Hund e Robert Mulliken.

Delle due, la teoria VB è la più semplice e intuitiva, e per questo è quella più utilizzata.

La teoria del legame di valenza (VB) ritiene che gli atomi, nel for-

mare la molecola, conservino intatta la loro struttura interna. Questi atomi si legano tra loro coinvolgendo solo gli elettroni del guscio di valenza. La teoria degli orbitali molecolari (MO), invece ammette che la molecola si formi ponendo insieme tutti gli orbitali degli atomi che ne fanno parte, che andranno a occupare i nuovi orbitali molecolari.

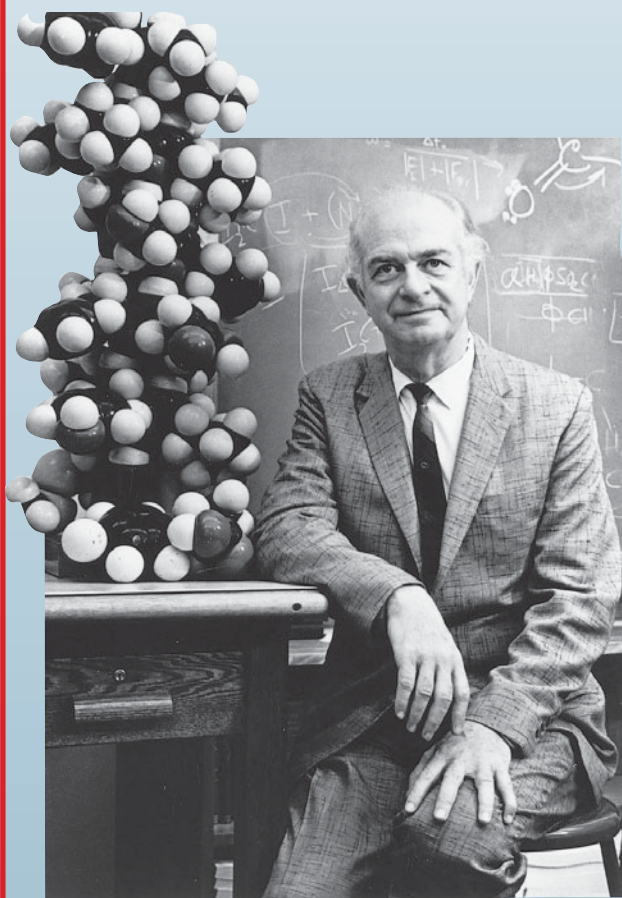
In pratica, la differenza principale tra le due teorie è che la teoria di Pauling si occupa soltanto degli elettroni più esterni, mentre la teoria di Mulliken tiene conto di tutti gli elettroni degli atomi costituenti la molecola.

Quale delle due teorie è miglio-

re? A questa domanda non è facile rispondere.

Fra il 1940 e il 1950, l'intervento autorevole di famosi scienziati, come Charles Coulson, Christopher Longuet-Higgins, Huckel, riuscì a convincere le nuove generazioni di ricercatori della superiore capacità interpretativa della teoria MO, per esempio nel chiarire la struttura dei complessi.

La teoria di Pauling (VB) è migliore per la sua semplicità, ma la teoria degli orbitali molecolari (MO) è migliore per la sua accuratezza. Oggi i ricercatori considerano migliore una combinazione delle due teorie.



Linus Pauling (Portland, 28 febbraio 1901 - Big Sur, 19 agosto 1994) si è dedicato alla chimica quantistica con cui ha interpretato i legami chimici.