

Geometria molecolare, VSEPR

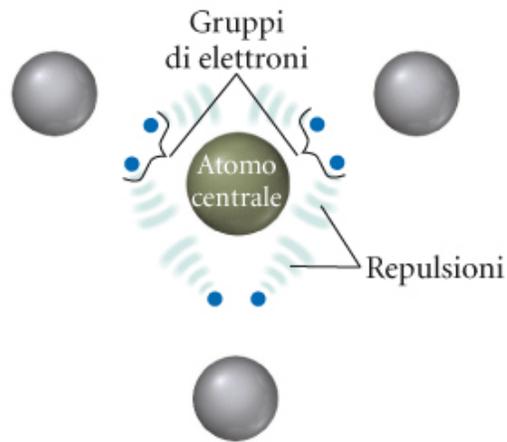
Cap. 10



N. J. Tro
Chimica - II Ed.
EdiSES

La forma delle molecole

Il modello **VSEPR** (valence shell electron pair repulsion) è basato sull'idea che le repulsioni tra le coppie di elettroni determinano la geometria molecolare.



▲ **FIGURA 10.1** La repulsione tra gruppi di elettroni L'idea fondamentale della teoria VSEPR è che le repulsioni tra gruppi di elettroni determinano la geometria molecolare.

Devo valutare le coppie di elettroni attorno ad un atomo.

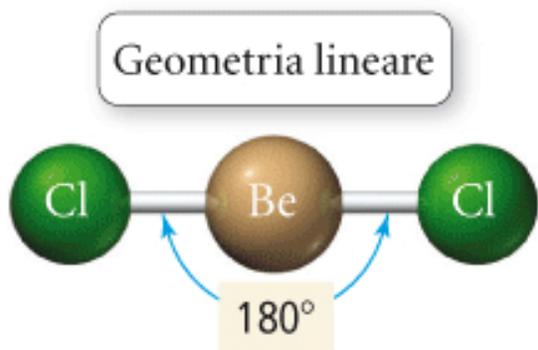
Quali conto?

Quelle di legame σ e quelle di non legame (o solitarie)

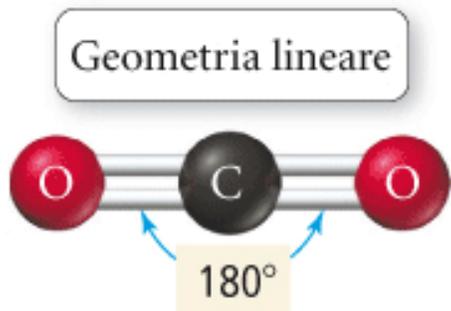
Esse tenderanno a stare il più possibile distanti fra loro per minimizzare la repulsione.

Due coppie di elettroni: geometria lineare

Atomo centrale: 2 coppie di legame σ , nessuna coppia solitaria (di non legame)



Un legame doppio conta come un gruppo di elettroni.



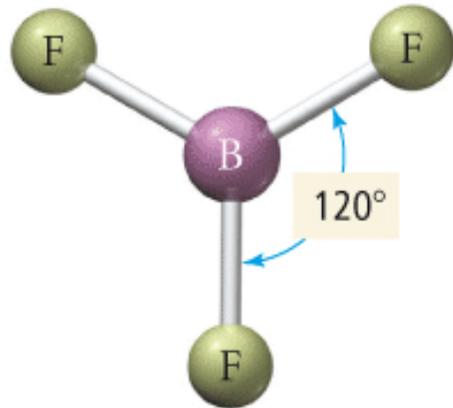
BeCl_2 : Molecola che non segue la regola dell'ottetto



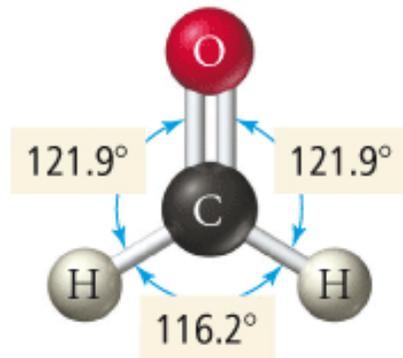
Tre coppie di elettroni: geometria triangolare planare

Atomo centrale: 3 legami covalenti σ , nessuna coppia solitaria

Geometria trigonale planare



BF₃: Geometria trigonale planare regolare, angoli di 120°



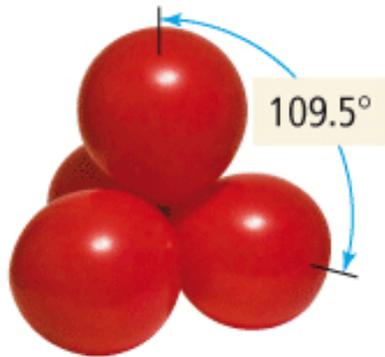
Angolo HCO > HCH.

Il legame doppio C=O ha maggiore densità elettronica rispetto al legame singolo.

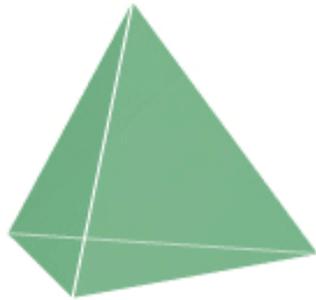
Quando le coppie di elettroni sono impegnate in modo diverso, si hanno scostamenti dall'angolo di legame ideale.

Quattro coppie di elettroni: geometria tetraedrica

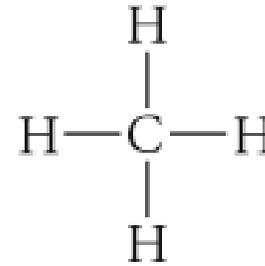
Atomo centrale: 4 legami covalenti σ , nessuna coppia solitaria



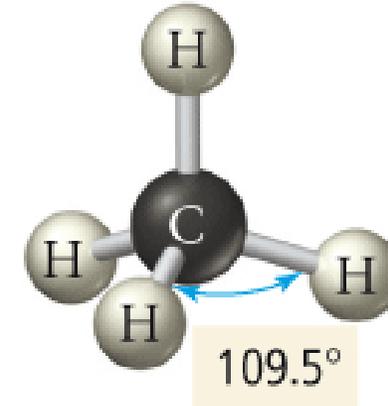
Geometria tetraedrica



Tetraedro



Nel piano-
quadrato
l'angolo di
legame è
solo di 90°

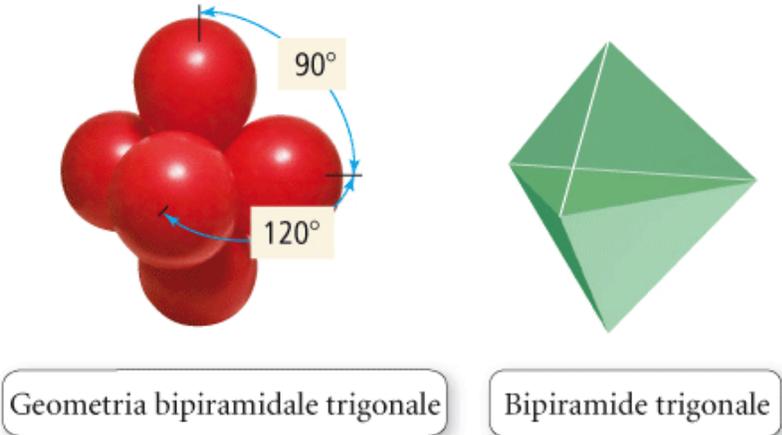


Geometria tetraedrica

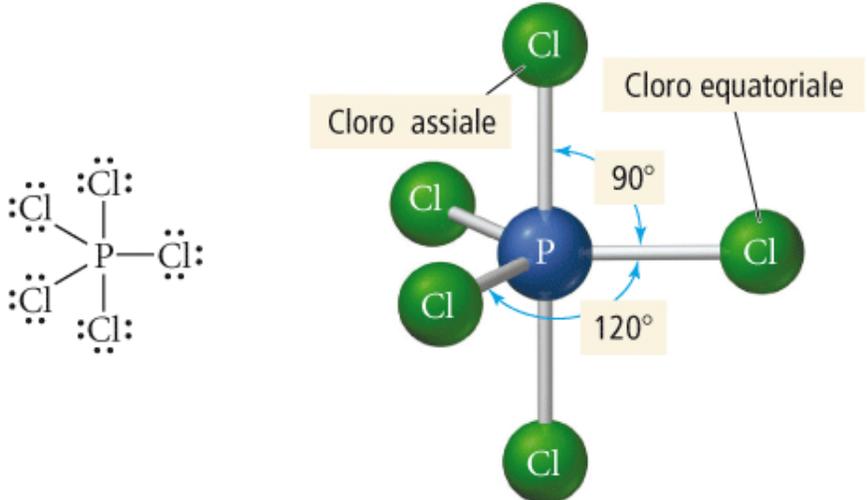
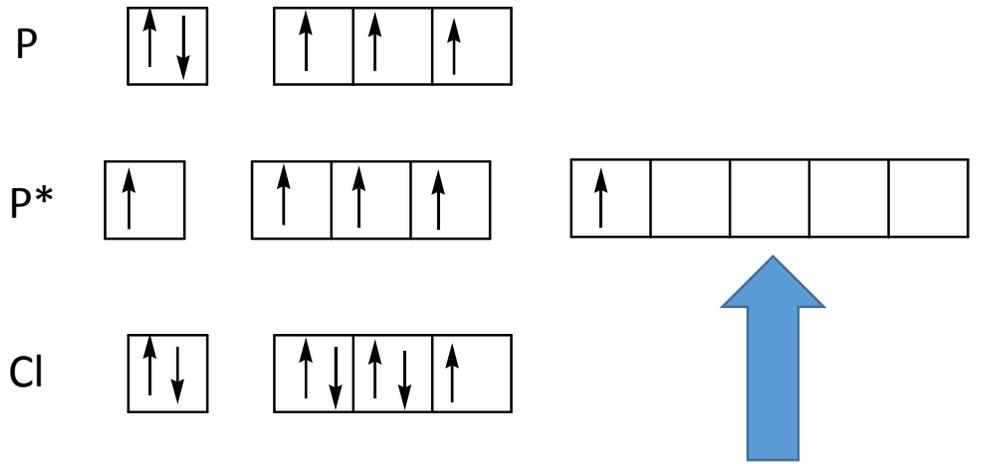
4 legami uguali =>
tetraedro regolare,
nessuna distorsione,
angoli di 109.5°

Cinque coppie di elettroni: geometria bipiramidale a base triangolare

Atomo centrale: 5 legami covalenti σ , nessuna coppia solitaria



Es. PCl_5

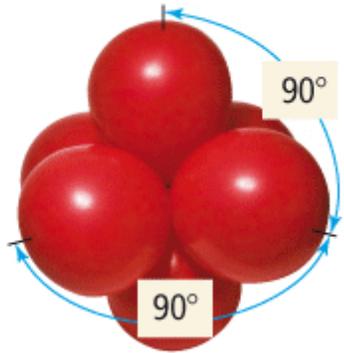


Per P: possibilità di utilizzare orbitali d ad energia accessibile

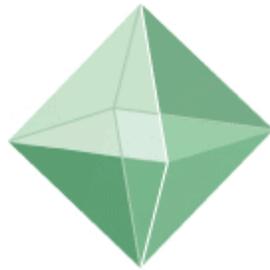
Gli angoli non sono tutti uguali!!

Sei coppie di elettroni: geometria ottaedrica

Atomo centrale: 6 legami covalenti σ , nessuna coppia solitaria

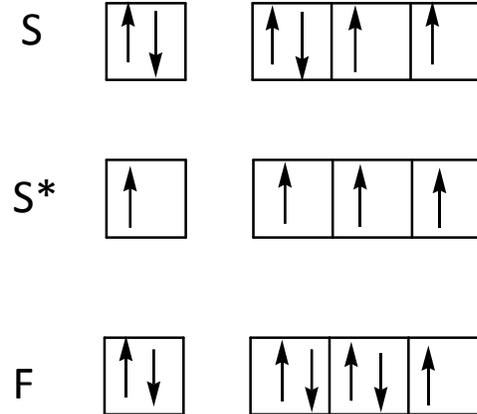


Geometria ottaedrica



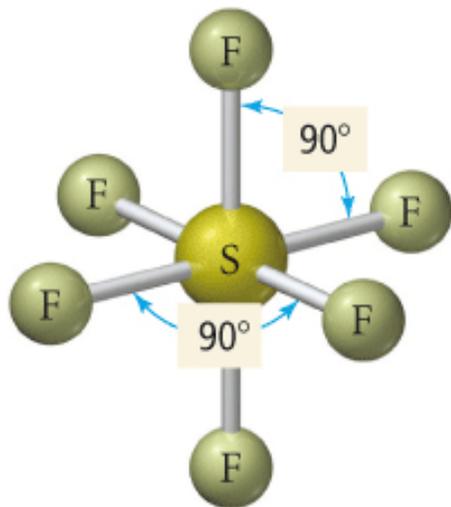
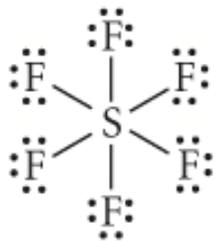
Ottaedro

Es. SF₆



Orbitali 3d

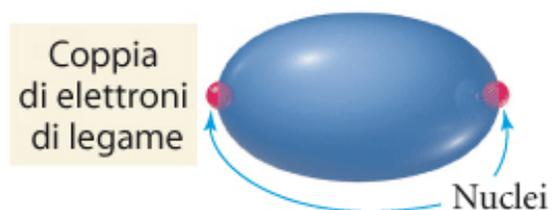
Per S: possibilità di utilizzare orbitali d ad energia accessibile



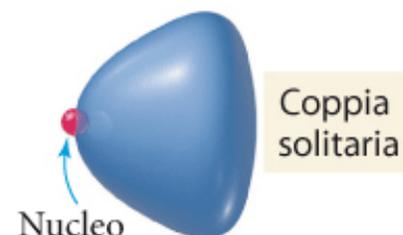
Molecola simmetrica,
i sei legami sono equivalenti

Effetto delle coppie solitarie o di non legame

Per stabilire la geometria delle coppie di elettroni attorno ad un atomo devo sommare il numero di quelle che fanno legame covalente σ più le coppie solitarie



Coppia di elettroni di legame è condivisa fra due atomi



Coppia solitaria di elettroni è localizzata su un atomo e occupa uno spazio più grande

NH₃, Ammoniaca

H 1s¹

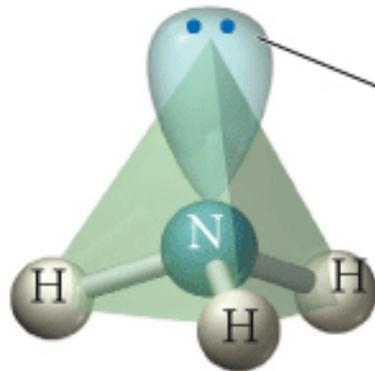


N 2s²2p³



VSEPR

4 coppie di elettroni,
di cui 3 di legame e
una solitaria.

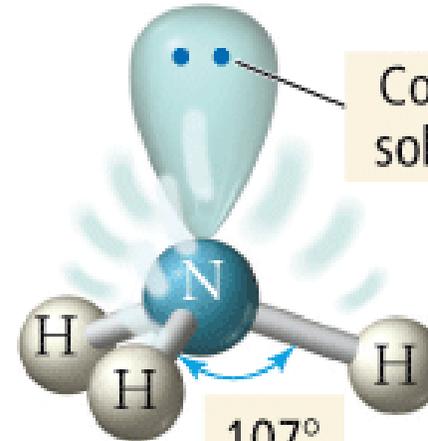


Coppia solitaria

Geometria elettronica:
tetraedrica



Geometria molecolare:
trigonale piramidale



Coppia solitaria

107°

Geometria
molecolare reale

Angolo di legame
HNH è un po'
inferiore a 109°

H₂O, Acqua

H 1s¹



O 2s²2p⁴

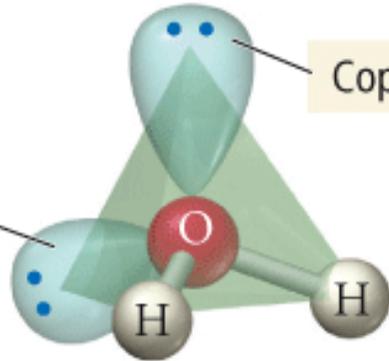


VSEPR

4 coppie di elettroni,
di cui 2 di legame e 2
solitarie.

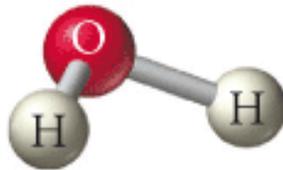


Coppia solitaria

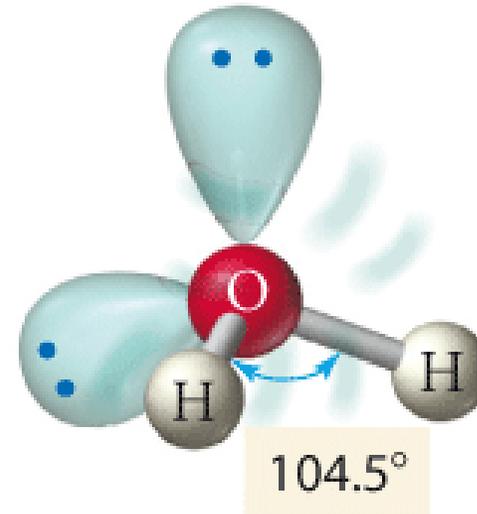


Geometria elettronica:
tetraedrica

Coppia solitaria



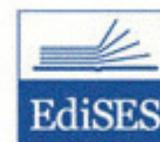
Geometria molecolare:
angolare



Geometria
molecolare reale

Angolo di legame
è ancora più
piccolo di quello
dell'ammoniaca.
Perché?

Effetto delle coppie solitarie sulla geometria molecolare

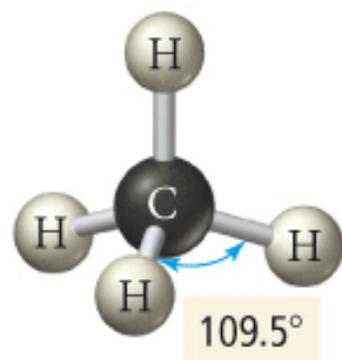


N. J. Tro
Chimica - II Ed.
EdiSES

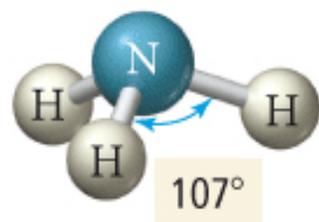
Nessuna coppia solitaria

Una coppia solitaria

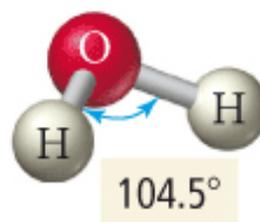
Due coppie solitarie



CH₄



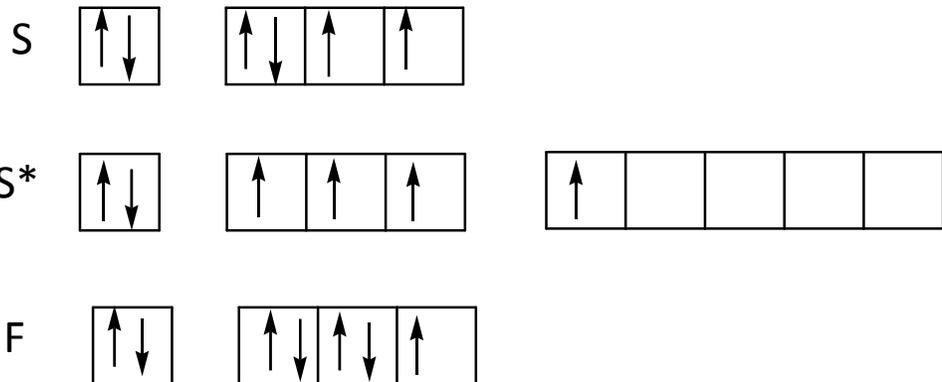
NH₃



H₂O

◀ **FIGURA 10.4** Effetto delle coppie solitarie sulla geometria molecolare. Gli angoli di legame diventano progressivamente più piccoli all'aumentare del numero di coppie solitarie sull'atomo centrale da zero in CH₄, a una in NH₃, a due in H₂O.

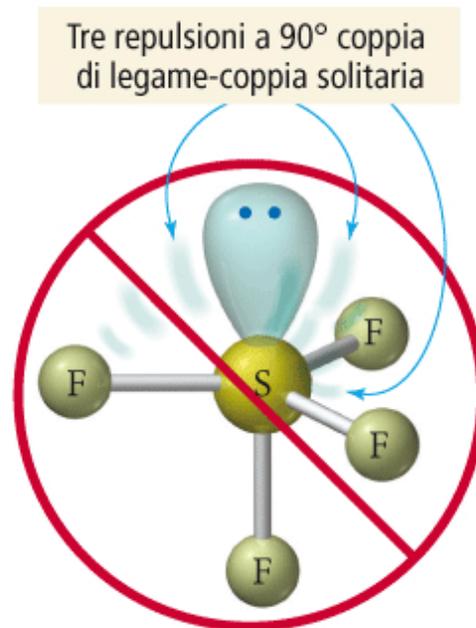
Es. SF₄



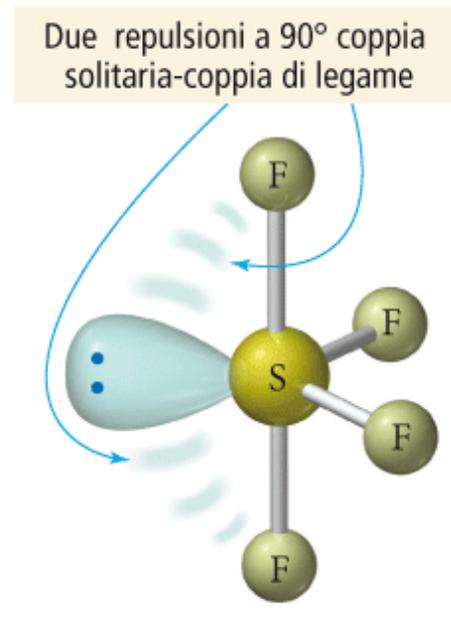
4 legami σ
1 doppietto solitario

Totale 5 coppie => bipiramide a base triangolare

Dove colloco il doppietto solitario?



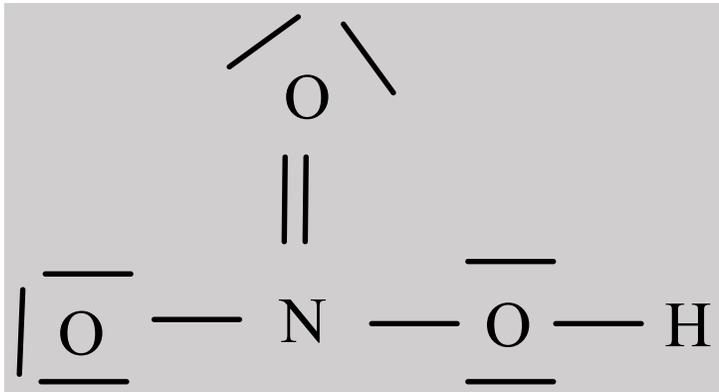
Coppia solitaria in posizione assiale
Non si verifica



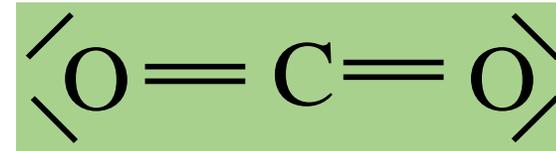
Coppia solitaria equatoriale

LEGAMI MULTIPLI o Π

La loro presenza NON influenza la forma globale delle molecole, poiché devono rimanere nella regione di spazio tra i due nuclei, dove già c'è la coppia di elettroni del legame singolo.



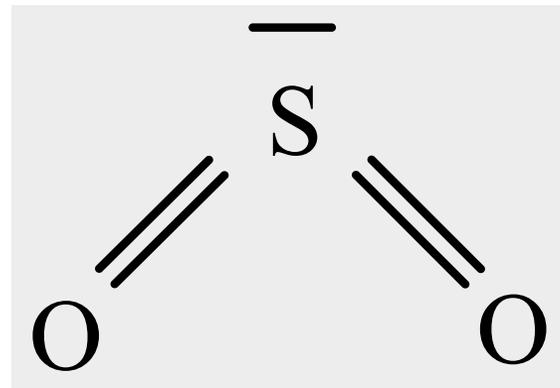
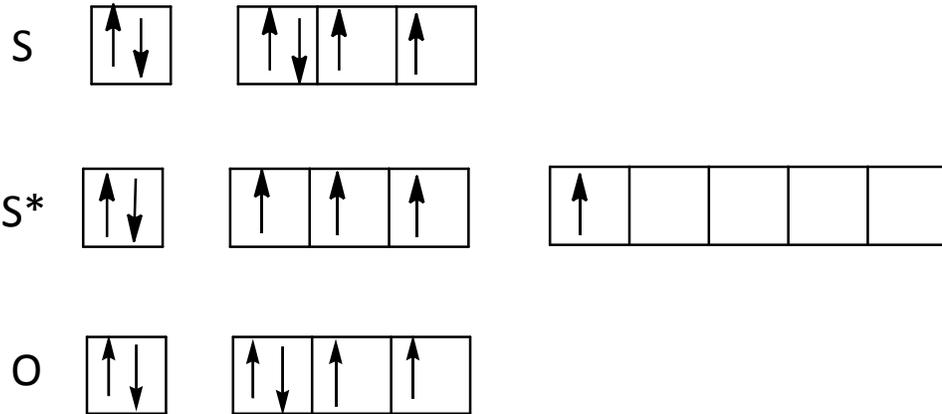
Attorno a N ho 3 coppie di elettroni di legame (σ) => geometria triangolare planare



Attorno a C ho 2 coppie di elettroni di legame (σ) => geometria lineare

Es. SO₂

SO₂ ha formula che assomiglia a CO₂ ma la geometria è triangolare e non lineare... perché?



2 coppie di legame σ
1 doppietto solitario
=> La geometria delle
coppie è triangolare
planare

Riassumendo:

Se due atomi formano tra loro un doppio legame, il primo è σ e il secondo è π .

se due atomi formano un triplo legame, il primo è σ e il secondo ed il terzo sono π .

I legami π hanno un contenuto energetico e una forza inferiore al legame σ .

La lunghezza del legame diminuisce passando dal singolo al doppio al triplo.

Attorno ad un legame semplice c'è possibilità di rotazione.

Attorno ad un legame multiplo (doppio e triplo) NON c'è possibilità di ruotare.

Elementi voluminosi che appartengono ai periodi superiori al secondo incontrano difficoltà nel formare legami multipli =>

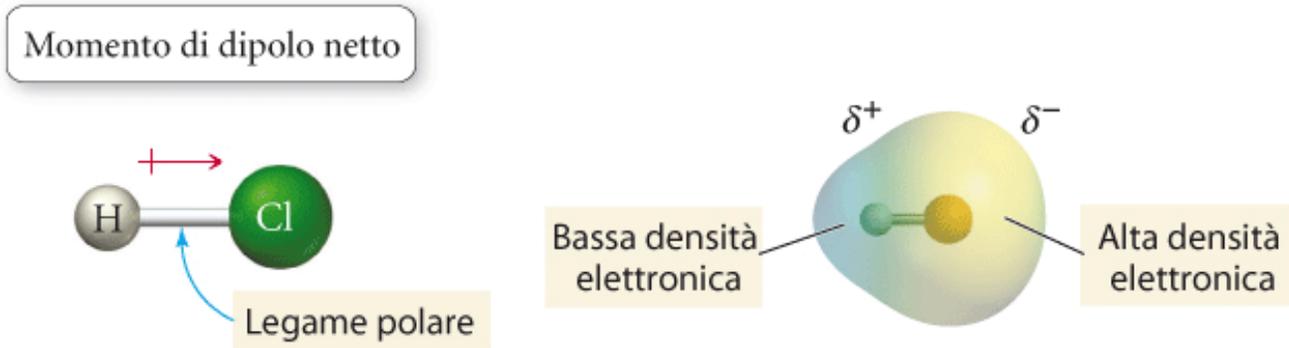
C=C è frequente, mentre Si=Si non lo è;

P=O è frequente, mentre P=S non lo è.

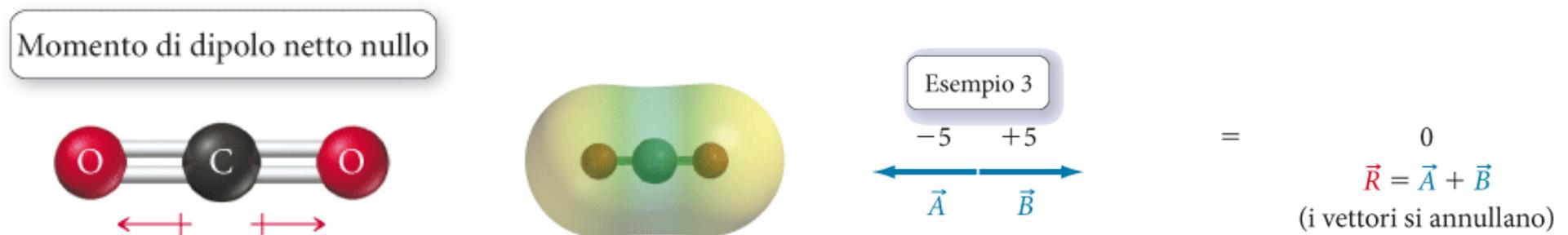
Forma delle molecole e polarità

Legami covalenti polari fra atomi con diversa elettronegatività.

Ci possono essere MOLECOLE POLARI (a seconda della loro forma e della natura dei loro legami)



La geometria molecolare fa sì che i momenti di dipolo dei singoli legami si annullino fra loro

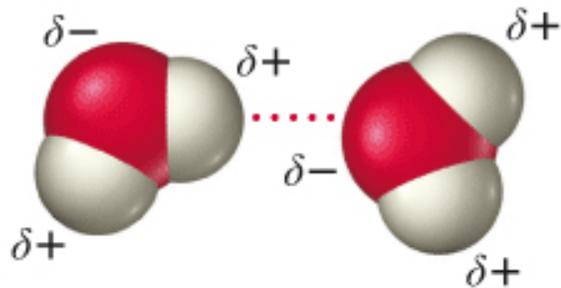
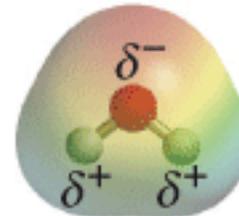
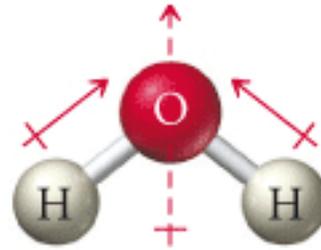


Ogni legame C=O è polare, ma CO₂ nel suo complesso è una molecola apolare!

La molecola di acqua è polare

Se la geometria della molecola di H₂O fosse planare la molecola di acqua sarebbe apolare

Momento di dipolo netto



Cariche parziali opposte sulle molecole si attraggono tra loro.

l'estremità carica positivamente di una molecola attrae l'estremità carica negativamente di un'altra (sebbene le forze coinvolte siano diverse). Come risultato di questa attrazione elettrica, le molecole polari interagiscono fortemente tra loro.

La maggior parte delle sostanze sono composti:
in essi gli elementi si combinano in proporzioni fisse e definite.

«si combinano» significa che gli atomi degli elementi sono tenuti insieme da

LEGAMI CHIMICI

Tipo di atomi	Tipo di legame	Caratteristica del legame
Metalli e non metalli	Ionico	Trasferimento di elettroni
Non metalli e non metalli	Covalente	Condivisione di elettroni
Metalli	Metallico	Delocalizzazione di elettroni

Cap 9.11 del Tro, Edises

Metalli e legame metallico

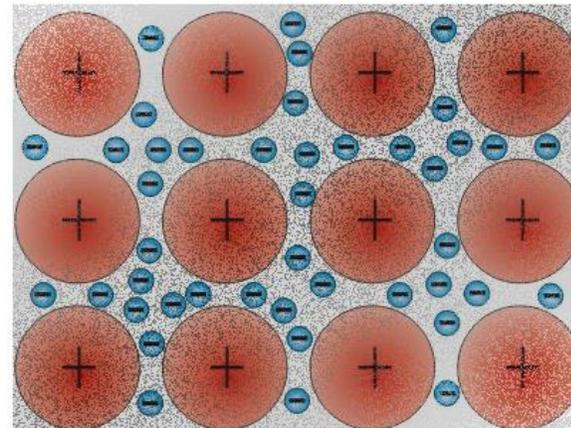
Caratteristiche tipiche dei **METALLI**:

- ottima conducibilità (i metalli sono ottimi **conduttori di energia elettrica e termica**, grazie alla grande **mobilità degli elettroni**)
- duttilità, malleabilità

Sono proprietà **non spiegabili in termini di legame covalente o ionico**, ma con un nuovo tipo di legame, il **legame metallico**.

Per poter comprendere il **legame metallico** dobbiamo immaginare i **nuclei** di un **metallo** immersi in una **nube** (o mare) di **elettroni**.

Questo spiega la mobilità degli elettroni, la non-direzionalità del legame e le proprietà dei metalli come conduttori e come facilmente plasmabili in lamine o fili sottili.



Aggregato di ioni positivi che occupano posizioni ben definite nella struttura del solido con elettroni di valenza mobili delocalizzati all'interno del metallo.

Gli **elementi metallici** nello **stato solido** presentano **strutture compatte**.

Gli **atomi** di un metallo si dispongono secondo le seguenti strutture:
cubica, **cubica a corpo centrato**, **cubica a facce centrate** e **esagonale**.

