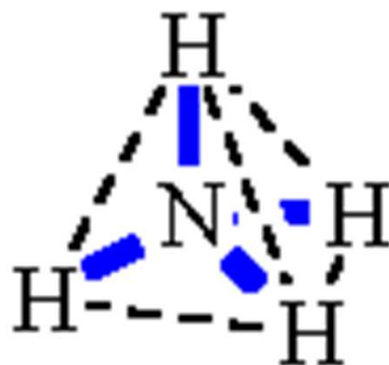


Geometria molecolare

Le molecole possono essere rappresentate disponendo gli atomi in posizioni definite nello spazio in modo da costruire una figura geometrica



Il modo più semplice per assegnare la geometria ad una molecola è basato sulle formule di Lewis ed è chiamato

VSEPR = Valence-Shell Electron-Pair Repulsion

Repulsione tra Coppie Elettroniche del Guscio di Valenza

Modello VSEPR

Le coppie elettroniche di valenza di un atomo si dispongono nello spazio in modo da minimizzare le repulsioni elettriche tra loro

Per determinare la geometria di una molecola si assegna la distribuzione spaziale delle coppie elettroniche (di legame e di non legame) del guscio di valenza dell'atomo centrale e dalla loro posizione si desume la geometria molecolare

Regole per l'applicazione del metodo VSEPR

Per una molecola AX_n , dove A è l'atomo centrale e X sono altri atomi:

1. Scrivere la formula di Lewis e determinare il numero di coppie elettroniche che circondano l'atomo centrale. I legami doppi o tripli contano come un'unica coppia di elettroni
2. Disporre le coppie elettroniche nello spazio in modo da avere la minore repulsione
3. Dedurre la geometria molecolare dalla disposizione delle coppie elettroniche

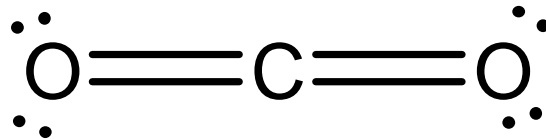
Due coppie di elettroni

Esempio: CO_2

Il C ha due coppie di doppi legami che si disporranno a **180°** lungo un asse che passa per il nucleo

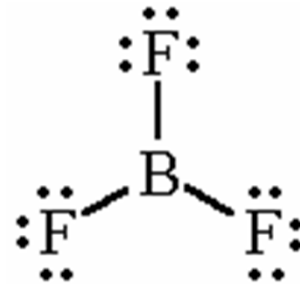
La geometria sarà **lineare**

Ogni legame doppio conta come una sola coppia di elettroni anche se **occupa più spazio**

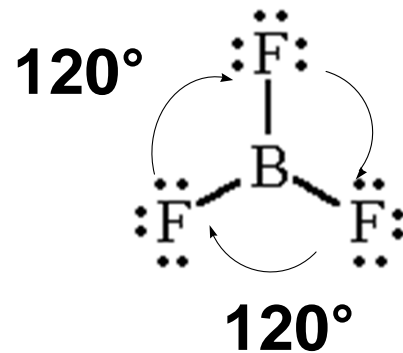


Tre coppie di elettroni

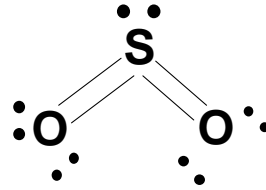
Consideriamo BF_3 :



Il boro ha tre coppie di legame che si disporranno a **120°** secondo una geometria **trigonale planare**



Prendiamo SO_2



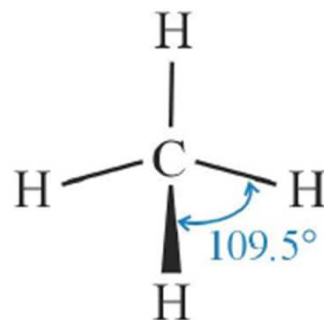
Geometria **trigonale planare distorta** perché gli angoli non sono tutti uguali. La coppia di non legame forma infatti con lo zolfo un angolo maggiore di 120° costringendo i due atomi di ossigeno a stare più vicini

Le coppie elettroniche di non legame tendono ad occupare più spazio di quelle leganti

Quattro coppie di elettroni

Consideriamo CH_4

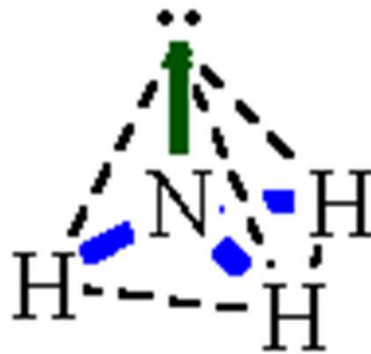
Quattro coppie elettroniche tutte di legame: **geometria tetraedrica** con angoli di **$109,5^\circ$**



metano
(tetraedrica)

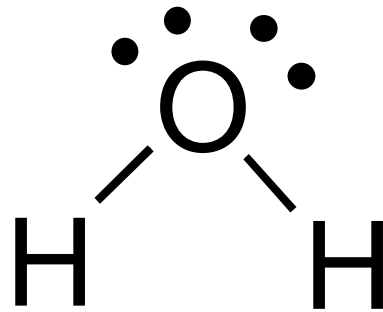
Prendiamo in esame NH_3

Abbiamo tre coppie di elettroni di legame ed una di non legame: **geometria tetraedrica distorta (= piramidale con angoli di 107°)**



Consideriamo l'acqua:

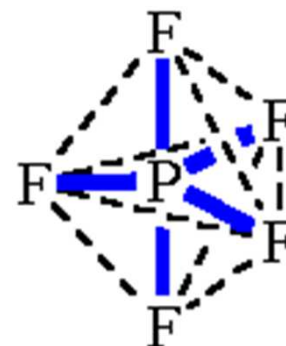
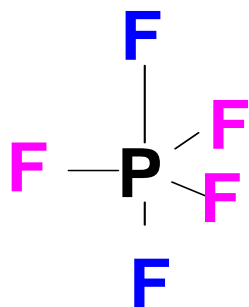
Abbiamo due coppie di elettroni di legame e due di non legame: **geometria tetraedrica distorta** (= **piegata** con angoli di 105°)



Cinque coppie di elettroni

Consideriamo PF_5

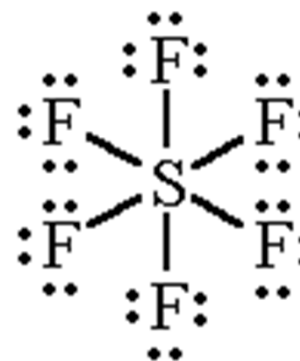
Il fosforo possiede 5 coppie di elettroni di legame:
geometria trigonale bipyramidale.



Due direzioni dette **assiali** formano un angolo di **180°** mentre le altre tre (**equatoriali**) sono a **120°** l'una dall'altra e formano angoli di **90°** con le posizioni assiali

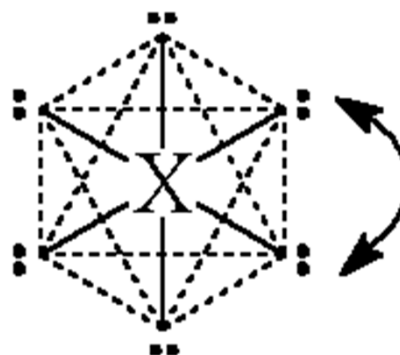
Sei coppie di elettroni

Consideriamo SF_6



Lo zolfo ha 6 coppie di elettroni leganti: **geometria ottaedrica**

All bond angles = 90 degrees
or 180 degrees



Momento dipolare (μ)

Si ha quando il baricentro delle cariche positive in una molecola non coincide con il baricentro delle cariche negative

Queste molecole sono definite **POLARI**

Nelle molecole **biatomiche** dipende solo dalla differenza di **elettronegatività** dei due atomi

Per molecole **poliatomiche** → valutare la **risultante vettoriale** dei momenti di dipolo di ogni legame

Es. CO_2 CH_4 CCl_4 SO_3 Molecole apolari

Es. H_2O CH_2Cl_2 CHCl_3 NH_3 Molecole polari

