

Sintesi - Capitolo 12

La geometria molecolare

Teoria VSEPR

Secondo la teoria VSEPR (*Valance Shell Electron Pair Repulsion*, che significa «Repulsione delle Coppie Elettroniche dello Stato di Valenza»), è possibile prevedere la forma geometrica delle molecole seguendo alcuni principi fondamentali.

Le coppie elettroniche di ogni atomo che formano i legami in una molecola, dette **coppie condivise**, tendono a disporsi, per repulsione, il più lontano possibile fra loro.

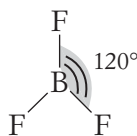
Le **coppie non condivise**, invece, espandendosi nello spazio, provocano una repulsione sulle altre coppie impegnate nei legami cambiandone leggermente l'angolo del legame, appunto.

Forma delle molecole

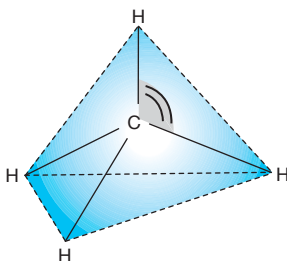
Se sono disponibili solo due coppie elettroniche, come nel cloruro di berillio, BeCl_2 , la forma geometrica è **lineare**:



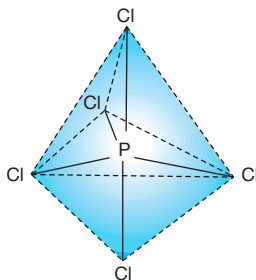
Con tre coppie elettroniche, come nel trifloruro di boro, BF_3 , la struttura diventa **planare**, con angoli di 120° fra gli atomi

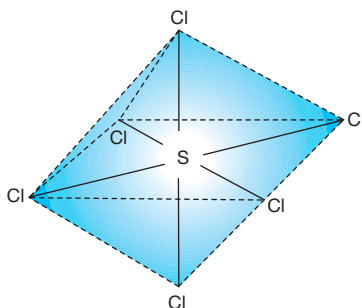


Con quattro coppie elettroniche, come nel metano, CH_4 , la struttura è **tetraedrica**.

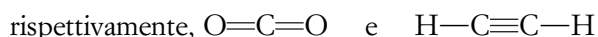


Naturalmente, con l'aumentare del numero delle coppie elettroniche, la geometria della struttura diventa sempre più complicata, come nei seguenti composti: vedi con 5 coppie e 6 coppie elettroniche

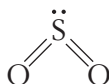




I doppi e i tripli legami si considerano come un legame semplice; quindi, per i composti CO_2 e C_2H_2 si hanno strutture lineari:

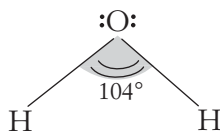


Cosa che non avviene per l'anidride solforosa, SO_2 , in quanto le coppie non condivise provocano sull'atomo di zolfo una forte repulsione fra gli atomi del legame $\text{S}-\text{O}$, e la forma geometrica diventa **angolare**



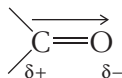
Avendo a disposizione quattro coppie elettroniche, esistono varie possibilità per disegnare la formula di struttura di un composto:

- Se tutte e quattro le coppie sono impegnate a formare i legami, come nel caso di CH_4 , si ha una forma tetraedrica con angoli di $109^\circ 28'$.
- Nel caso dell'ammoniaca, NH_3 , la forma ottenuta somiglia a una piramide a base triangolare, e l'angolo del legame $\text{N}-\text{H}$ diminuisce di poco a causa della repulsione della coppia elettronica non condivisa sull'atomo di azoto (l'angolo del legame diventa di 106°).
- Nella molecola dell'acqua, H_2O , l'angolo del legame si riduce a 104° , perché sull'atomo di ossigeno si trovano due coppie elettroniche non condivise che presentano una forte repulsione fra loro.



Legame polare

Il legame si dice *polare* quando è formato da due atomi di diversa elettronegatività (come nel caso della molecola dell'acqua), per cui si ottengono due cariche parziali, una positiva (δ^+) e una negativa (δ^-), oppure un gruppo, come il $\text{C}=\text{O}$:



In tal modo si viene a creare un **dipolo elettrico**, il cui **momento** risulta uguale a:

$$\mu = \delta \times r$$

dove δ è la carica elettrica e r la distanza fra le due cariche (δ^+) e (δ^-).

Il momento dipolare è un vettore; quindi, ha un modulo, una direzione e un verso. Se i legami sono angolari, come nella molecola dell'acqua, il momento dipolare deriva dalla somma di tutti i vettori dei momenti dipolari dei singoli legami.