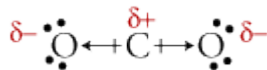


POLARITA' E GEOMETRIA DELLE MOLECOLE, TEORIA VSEPR

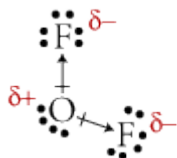
Un dipolo si forma quando due cariche di uguale intensità ma di segno opposto sono collocate a una certa distanza d . Al dipolo è associato un certo momento dipolare (μ) dato dal prodotto tra l'intensità di carica Q e la distanza r : $\mu = Q \cdot r$

In molecole poliatomiche, i dipoli di ogni singolo legame covalente polare possono essere rappresentati con dei vettori. **La somma dei vettori determina il dipolo associato alla molecola.** Pertanto, **dire che una molecola ha legami covalenti polari non significa dire che molecola sia polare**: la polarità dipende infatti anche dalla geometria della molecola. Invece, **se nella molecola sono presenti solo legami covalente non polari, la molecola sarà sicuramente non polare.**

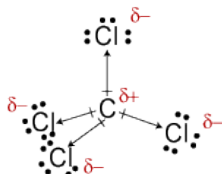
La molecola dell'anidride carbonica CO_2 è apolare poichè i due dipoli sono opposti e si annullano a vicenda:



La molecola di OF_2 (e H_2O) è polare perché i legami covalenti sono polari, e disposti in maniera da non annullarsi:



La molecola di CCl_4 (e CH_4) è apolare perché i quattro dipoli dei legami $\text{C}-\text{Cl}$ si annullano per la simmetria molecolare:



Nella **teoria VSEPR** bisogna tenere conto di tutte le coppie di elettroni del guscio di valenza, sia quelle coinvolte nella formazione di legami chimici (**doppietti condivisi**), sia quelle che non partecipano alla formazione di alcun legame (**doppietti solitari**). I legami covalenti doppi e i legami covalenti tripli sono considerati alla stregua di semplici legami e la geometria della molecola dipende quindi unicamente dal numero di legami.

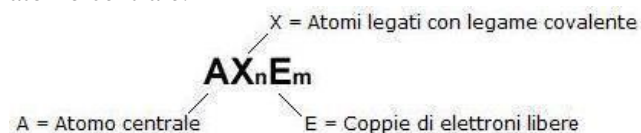
Inoltre secondo tale teoria i doppietti solitari tendono ad occupare un volume maggiore rispetto ai doppietti condivisi ed esercitano quindi una forza repulsiva di maggiore intensità. In linea di massima la forza repulsiva tra coppie di elettroni varia nel seguente modo:

repulsione tra doppietti solitari > repulsione tra doppietti solitari e doppietti condivisi > repulsione tra doppietti condivisi

Per determinare la geometria molecolare bisogna calcolare il valore del numero sterico

NS sommando il numero di atomi (X) legati all'atomo centrale (A) e il numero di coppie di elettroni libere presenti sull'atomo centrale (E).

Ogni molecola potrà essere rappresentata con la formula generica AX_nE_m in cui A rappresenta l'atomo centrale, X il numero di atomi legati all'atomo centrale ed E le coppie di elettroni solitarie presenti sull'atomo centrale.



$$\text{NUMERO STERICO} = n + m$$

NS = 2 ; geometria lineare

Per molecole con struttura AX_2 , a geometria lineare $\text{X}-\text{A}-\text{X}$. Sono apolari, i due legami si dispongono a 180° l'uno dall'altro.

Sono molecole il cui atomo centrale presenta due legami chimici e nessun doppietto solitario.

I legami doppi o tripli valgono come singoli legami e pertanto molecole come l'idruro di berillio BeH_2

($\text{H}-\text{Be}-\text{H}$), l'anidride carbonica CO_2 ($\text{O}=\text{C}=\text{O}$) e il cianuro di idrogeno HCN ($\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}$) presentano tutte geometria lineare.

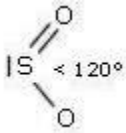
NS = 3 ; geometria trigonale planare

Per molecole con struttura AX₃, AX₂E.

1) Per molecole con **struttura AX₃**: hanno **geometria trigonale planare** con i legami disposti su un unico piano a 120° l'uno dall'altro. **Sono apolari**, con tre legami e nessun doppietto solitario sull'atomo centrale. Presentano questa geometria il tricloruro di boro (BCl₃) e la formaldeide (H₂CO):



2) Per molecole con **struttura AX₂E** (E rappresenta la coppia di elettroni presente sull'atomo centrale): hanno **geometria angolata** derivata dalla geometria trigonale planare. **Sono polari**, e per la maggior repulsione della coppia solitaria sulle coppie di legame, l'angolo di legame risulta inferiore a 120°. Presenta questa geometria l'anidride solforosa SO₂:



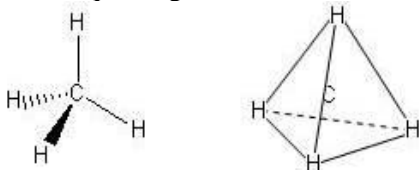
Riassumendo: NS = 3:

| | |
|--|--|
| Numero coppie solitarie = 0 Geometria: trigonale planare. Molecola apolare | |
| Numero coppie solitarie = 1 Geometria: angolata. Molecola polare. | |

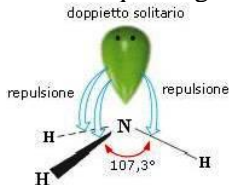
NS = 4 ; geometria tetraedrica

Per molecole con struttura AX₄, AX₃E, AX₂E₂.

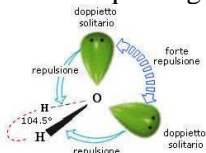
1) Per molecole con **struttura AX₄**: Hanno **geometria tetraedrica** con i quattro legami disposti a 109,5° l'uno dall'altro e nessun doppietto solitario sull'atomo centrale. **Sono apolari**. Presenta questa geometria il metano (CH₄).



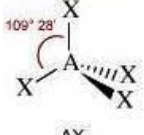
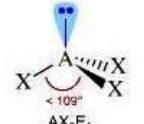

2) Per molecole con **struttura AX₃E**: Hanno **geometria piramidale** (derivata dalla geometria tetraedrica) con tre legami e una coppia di elettroni solitaria sull'atomo centrale. A causa della maggior repulsione della coppia solitaria sulle coppie di legame, l'angolo di legame risulta essere inferiore a 109,5°. **Sono polari**. Presenta questa geometria la molecola dell'ammoniaca NH₃, con angoli di legame di 107,3°



3) Per molecole con **struttura AX₂E₂**: Hanno **geometria angolata** (derivata dalla geometria tetraedrica) con due legami e due coppie di elettroni solitarie sull'atomo centrale. Le due coppie solitarie occupano due vertici del tetraedro ed esercitando una forte repulsione nei confronti degli elettroni di legame, comprimono l'angolo di legame a valori inferiori rispetto a quelli caratteristici della geometria piramidale. **Sono polari**. Presenta questa geometria la molecola dell'acqua H₂O nella quale gli angoli di legame sono di 104,5°:



Riassumendo: NS = 4

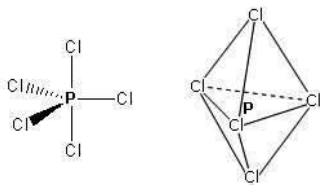
| | |
|---|--|
| <p>1) Numero coppie solitarie = 0 Geometria: tetraedrica. Molecola apolare.</p> |  <p style="text-align: center;">AX₄</p> |
| <p>2) Numero coppie solitarie = 1 Geometria: piramidale trigonale. Molecola polare.</p> |  <p style="text-align: center;">AX₃E₁</p> |
| <p>3) Numero coppie solitarie = 2 Geometria: angolata Molecola polare</p> |  <p style="text-align: center;">AX₂E₂</p> |

NS = 5 ; geometria bipiramidale trigonale

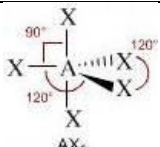
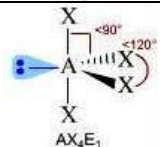
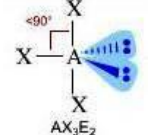
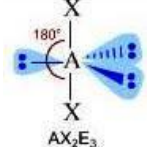
Per molecole con struttura AX₅, AX₄E, AX₃E₂, AX₂E₃.

1) Per molecole con **struttura AX₅**: Hanno **geometria bipiramidale trigonale** con tre legami equatoriali disposti su un unico piano a 120° l'uno dall'altro e altri due legami disposti sopra e sotto il piano dei legami equatoriali e nessun doppietto solitario sull'atomo centrale. **Sono apolari.**

Presenta questa geometria la molecola del pentacloruro di fosforo PCl₅:



Di seguito tutti i vari casi:

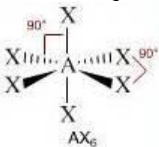
| | |
|---|--|
| <p>1) Per molecole con struttura AX₅ Numero coppie solitarie = 0 Geometria: bipiramidale trigonale. Molecola apolare</p> |  <p style="text-align: center;">AX₅</p> |
| <p>2) Per molecole con struttura AX₄E Numero coppie solitarie = 1 Geometria ad altalena o cavalletto Molecola polare</p> |  <p style="text-align: center;">AX₄E₁</p> |
| <p>3) Per molecole con struttura AX₃E₂ Numero coppie solitarie = 2 Geometria: forma a T Molecola polare</p> |  <p style="text-align: center;">AX₃E₂</p> |
| <p>4) Per molecole con struttura AX₂E₃ Numero coppie solitarie = 3 Geometria lineare Molecola apolare</p> |  <p style="text-align: center;">AX₂E₃</p> |

NS = 6 ; geometria ottaedrica

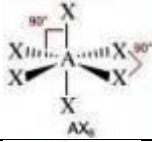
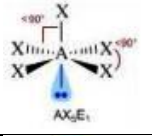

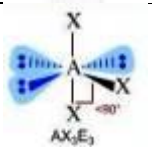
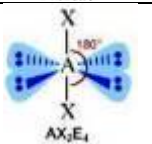
Per molecole con struttura AX₆, AX₅E, AX₄E₂, AX₃E₃, AX₂E₄

1) Per molecole con struttura AX₆: hanno **geometria ottaedrica** con quattro legami equatoriali disposti su un unico piano a 90° l'uno dall'altro e due legami assiali disposti rispettivamente sopra e sotto il piano dei legami equatoriali. Hanno sei legami e nessun doppietto solitario sull'atomo centrale. **Sono apolari.**

Presenta questa geometria la molecola dell'esafluoruro di zolfo SF₆:



Di seguito tutti i vari casi:

| | |
|---|---|
| 1) Per molecole con struttura AX ₆ Numero coppie solitarie = 0 Geometria ottaedrica Molecola apolare |  |
| 2) Per molecole con struttura AX ₅ E Geometria: piramidale quadrata Numero coppie solitarie = 1 Molecola polare |  |
| 3) Per molecole con struttura AX ₄ E ₂ Geometria: planare quadrata Numero coppie solitarie = 2 Molecola non polare |  |
| 4) Per molecole con struttura AX ₃ E ₃ Geometria: forma a T Numero coppie solitarie = 3 Molecola polare |  |
| 5) Per molecole con struttura AX ₂ E ₄ Geometria: lineare Numero coppie solitarie = 4 Molecola non polare |  |

NS = 7 ; geometria bipyramidale pentagonale

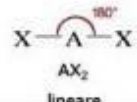
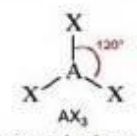




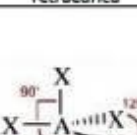
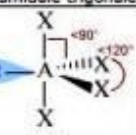
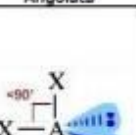
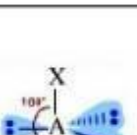
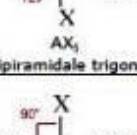
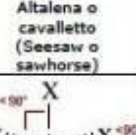

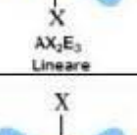
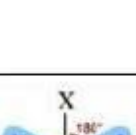
Per molecole con struttura AX₇, AX₆E, AX₅E₂, AX₄E₃, AX₃E₄, AX₂E₅

1) Per molecole con struttura AX₇: hanno **geometria bipyramidale pentagonale** con cinque legami equatoriali disposti su un unico piano a 72° l'uno dall'altro e due legami assiali disposti rispettivamente sopra e sotto il piano dei legami equatoriali. Hanno sette legami e nessun doppietto solitario sull'atomo centrale.

Sono apolari.

Presenta questa geometria la molecola dell'eptafluoruro di iodio (IF₇)

Riassumendo

| Geometrie VSEPR | | | | | |
|-----------------|---|--|---|--|--|
| | Coppie solitarie | | | | |
| | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| NS=2 |  lineare | | | | |
| NS=3 |  Trigonale planare |  Angolata | | | |
| NS=4 |  Tetraedrica |  Piramidale trigonale |  Angolata | | |
| NS=5 |  Bipiramidale trigonale |  Altalena o cavalletto (Seesaw o sawhorse) |  a forma di T |  Lineare | |
| NS=6 |  Ottaedrica |  Piramidale quadrata |  Planare quadrata |  a forma di T |  Lineare |