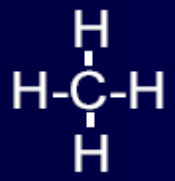
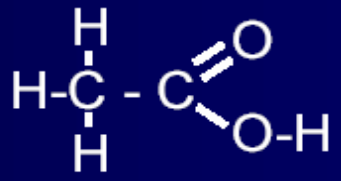
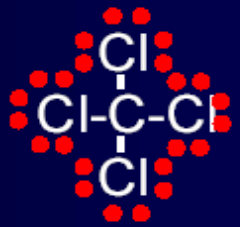
STRUTTURE DI LEWIS DI ALCUNE MOLECOLE

CH_4 Metano





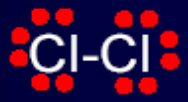
$C_2H_4O_2$ Acido Acetico



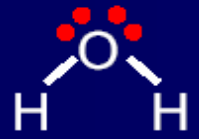
CCl_4 Tetracloruro di Carbonio

$:C \equiv O:$

CO Monossido di Carbonio



Cl_2 Cloro



H_2O Acqua

STRUTTURE DI LEWIS

- Violazione regola ottetto:
  - BF_3 : difetto di elettroni
  - PCl_5 : eccesso di elettroni

- Carica formale (CF) per decidere tra più strutture di Lewis possibili: N_2O

$$CF = V - (S + \tfrac{1}{2} L)$$

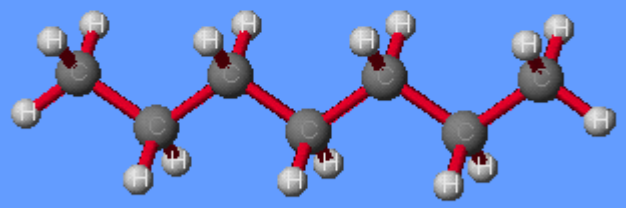
FORMA DELLE MOLECOLE

- Che forma hanno le molecole?
- Perché ci interessa questo aspetto?

N.O. = 0

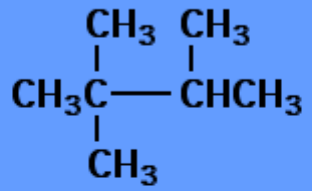
$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$

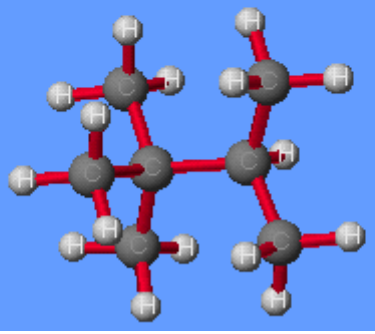
$CH_3(CH_2)_5CH_3$



n-eptano C_7H_{16}

N.O. = 100





2,2,3 trimetil-butano
C_7H_{16}

POLARITA' DEL LEGAME COVALENTE

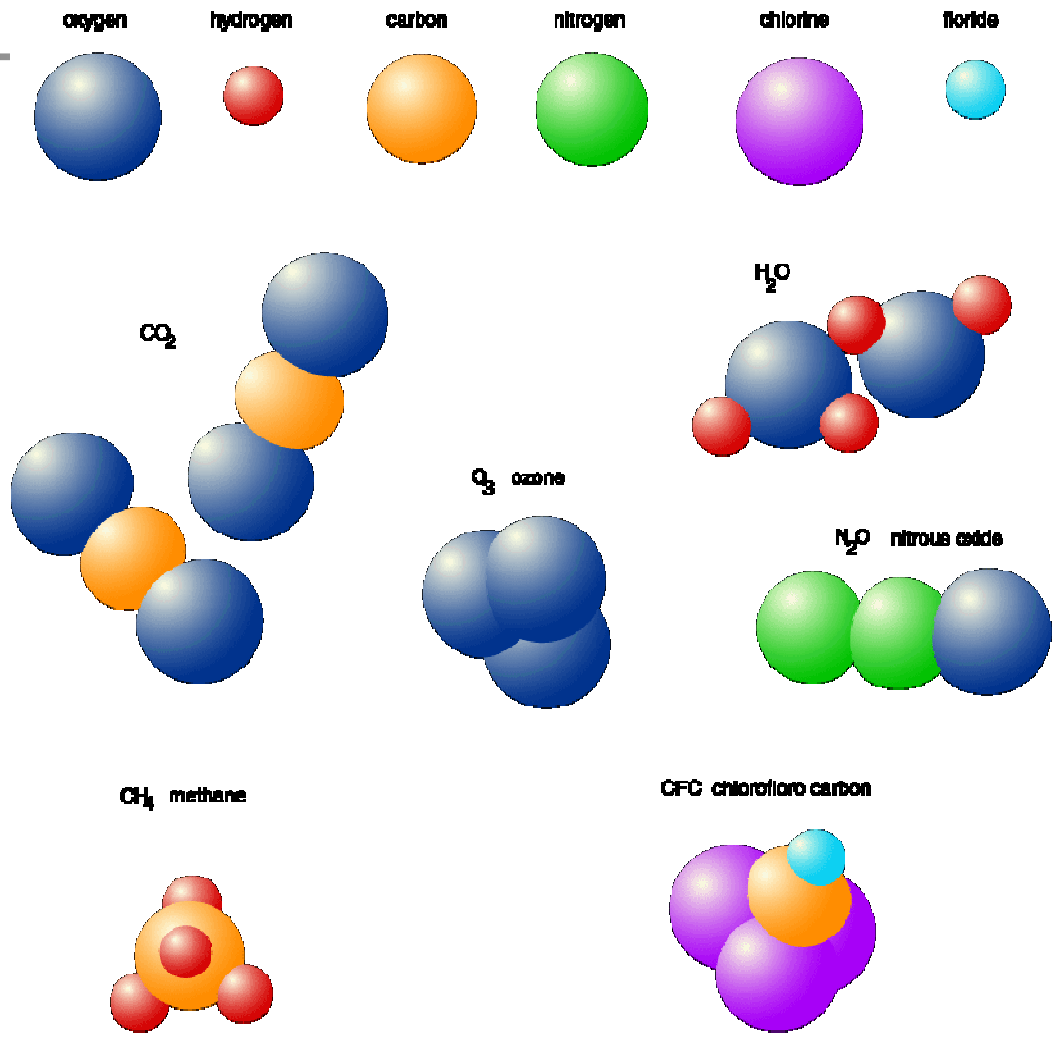
- Aspetto di interesse: polarità delle molecole
- Carica parziale:

$\chi = 2.1 \longrightarrow H–F \longleftarrow \chi = 4.0$

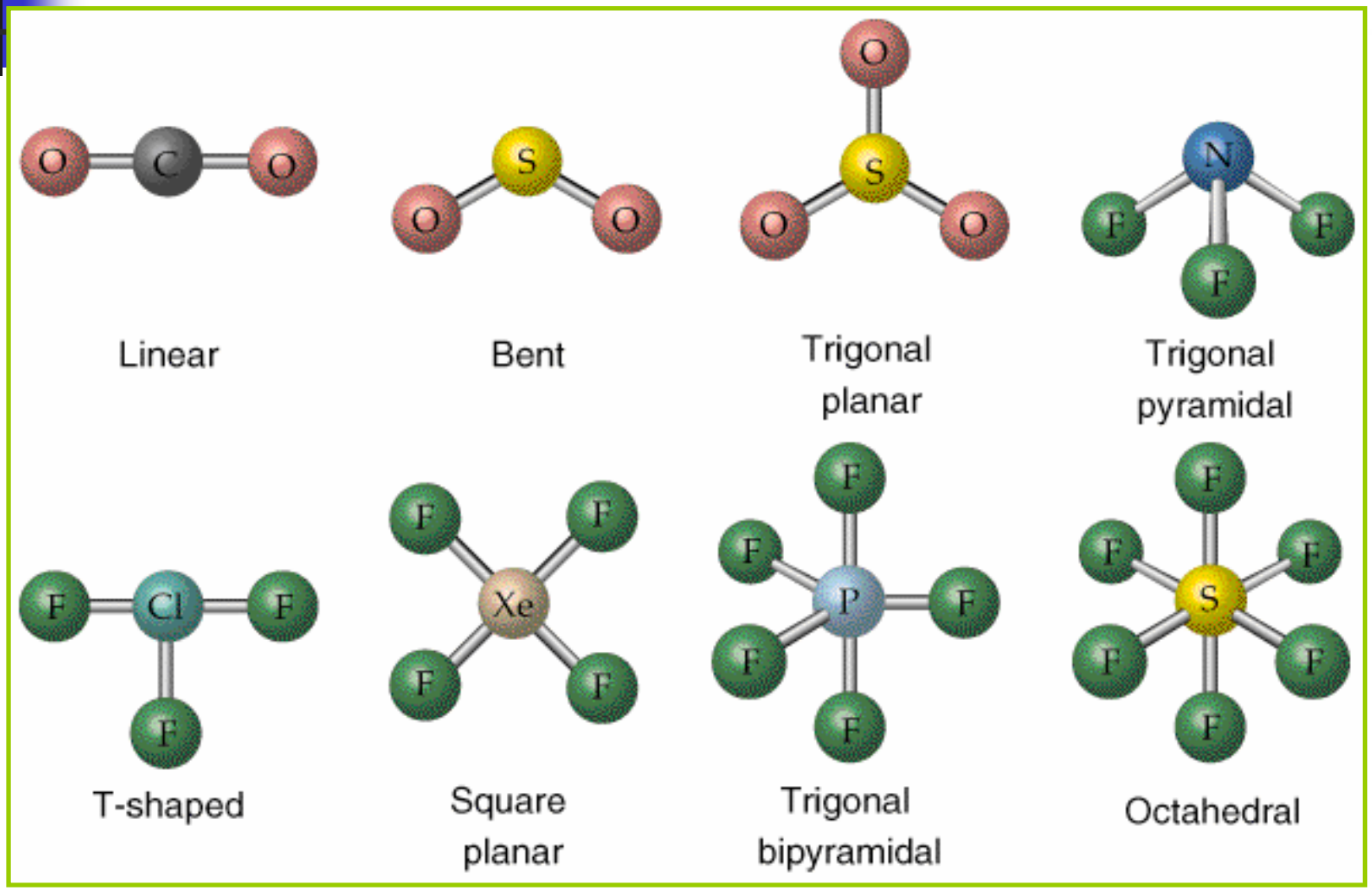
$+\delta H–F^{-\delta}$ ⟵ Carica parziale

FORMA DELLE MOLECOLE

- Forma di alcune comuni molecole



GEOMETRIE DI ALCUNE MOLECOLE



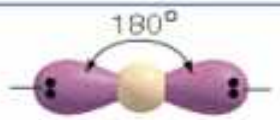
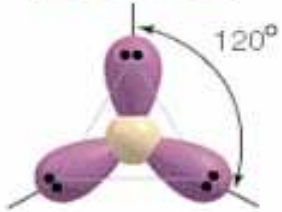
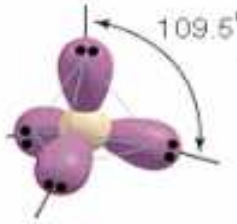
TEORIA VSEPR

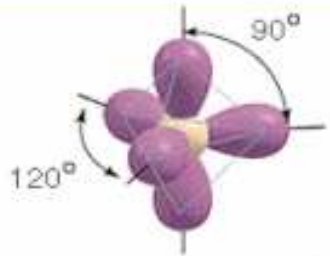
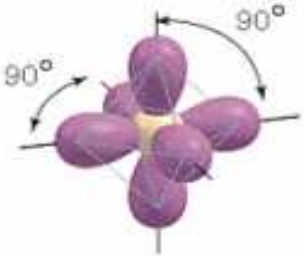
- Valence Shell Electron Pair Repulsion.
- Repulsione delle coppie di elettroni di valenza (sia le coppie di legame che quelle solitarie).
- La geometria della molecola sarà tale da minimizzare tale repulsione.

COME PREDIRE LA GEOMETRIA

- Coppie di elettroni di legame (domini di legame) e coppie solitarie (domini di non legame).
- Si definisce la geometria 3D di tutte le coppie di elettroni (di legame e solitarie).
- La geometria che minimizza la repulsione dipende dal numero delle coppie da disporre.

MINIMIZZAZIONE DELLA REPULSIONE

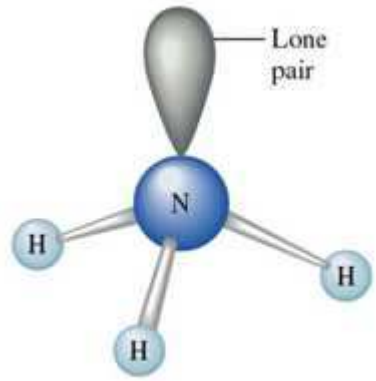
Number of Electron Pairs	Arrangement of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Predicted Bond Angles
2		Linear	180°
3		Trigonal planar	120°
4		Tetrahedral	109.5°

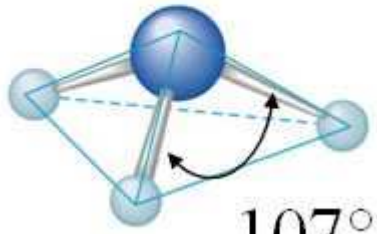
Number of Electron Pairs	Arrangement of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Predicted Bond Angles
5		Trigonal bipyramidal	120° 90°
6		Octahedral	90° 180°

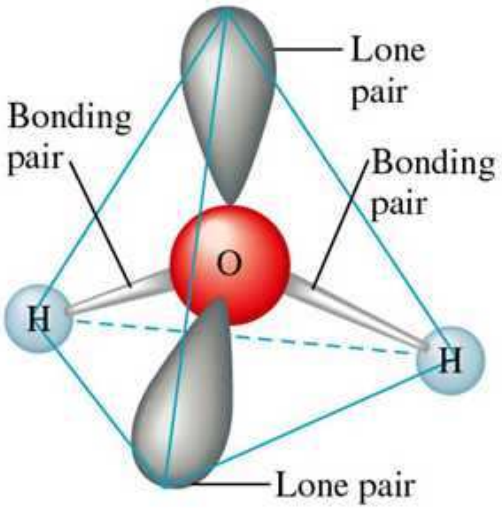
EFFETTO DEI DOMINI DI NON LEGAME

- I domini di non legame (su 1 atomo) più estesi dei domini di legame (su 2 atomi).
- Casi con 4 coppie (tra legame e non legame) → la maggiore estensione spaziale dei domini di non legame provoca una distorsione degli angoli di legame.

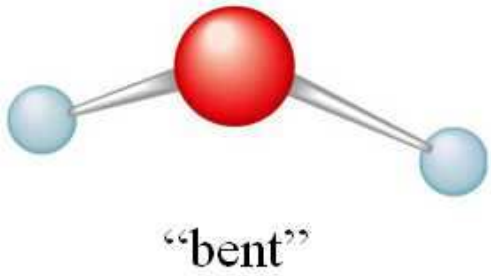
Tipo: AX_3E





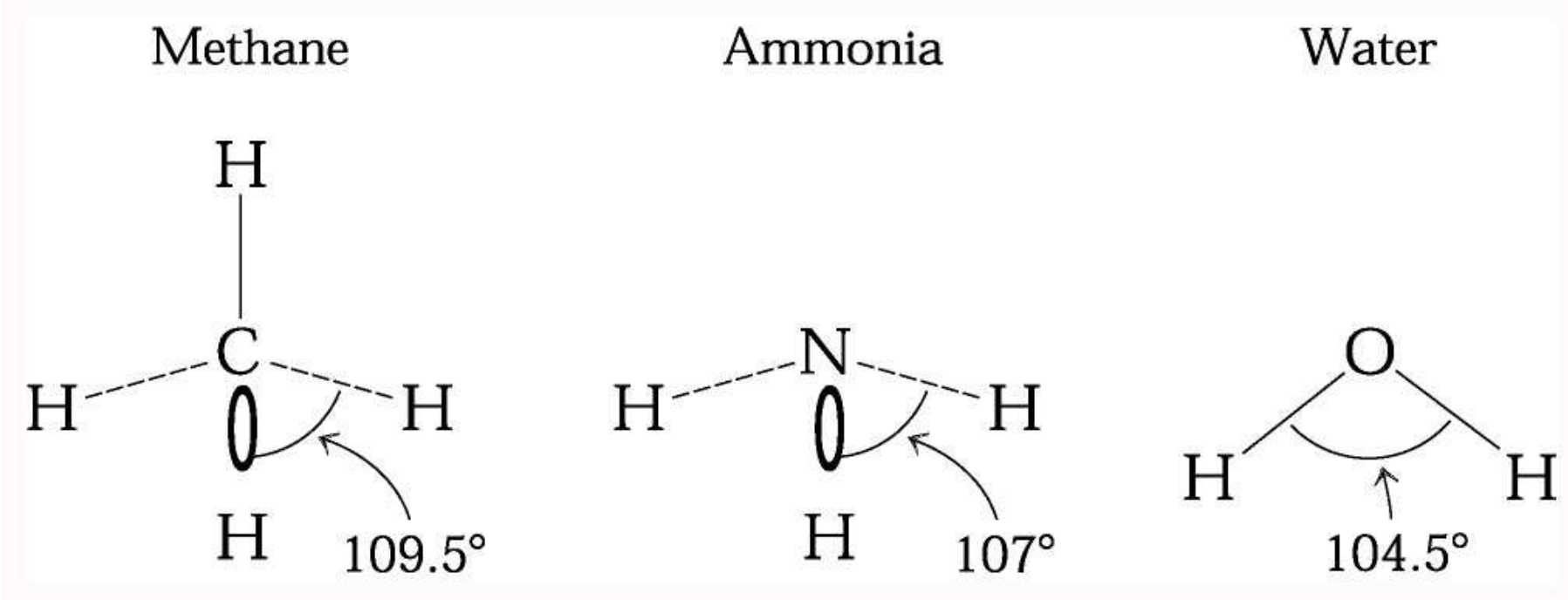


Tipo: AX_2E_2



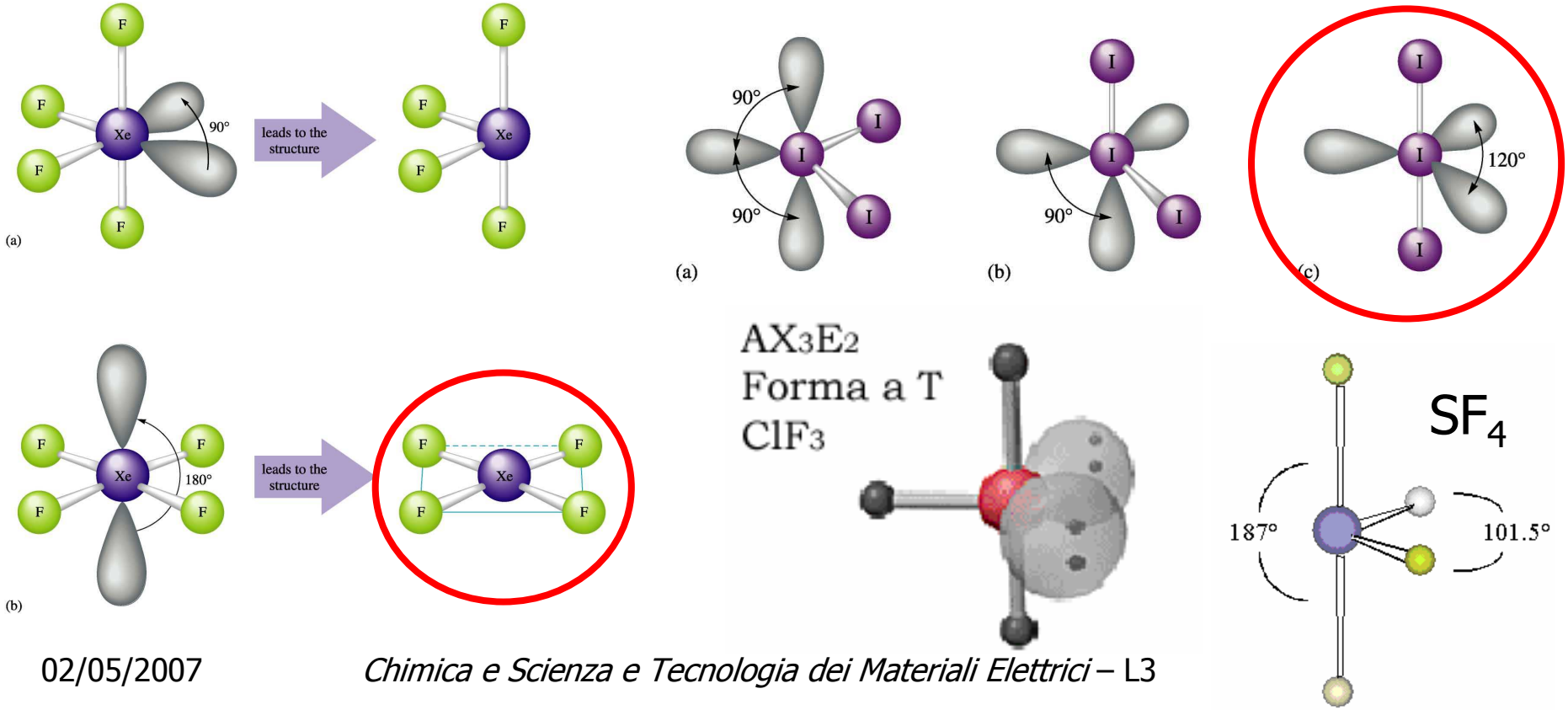
EFFETTO DEI DOMINI DI NON LEGAME

- Come si modificano gli angoli di legame



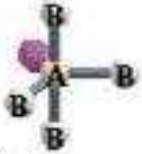
EFFETTO DEI DOMINI DI NON LEGAME

- Casi con più di 4 coppie (tra legame e non legame) → coppie solitarie max forza repulsiva.



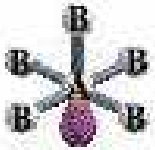
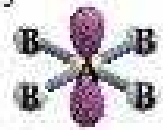
OTTETTO ESPANSO

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH FIVE AND SIX ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
5 pairs	 Trigonal bipyramidal	5	0	 Trigonal bipyramidal	$PC1_5$
		4	1	 Seesaw	SF_4
		3	2	 T-shaped	$C1F_3$
		2	3	 Linear	XeF_2

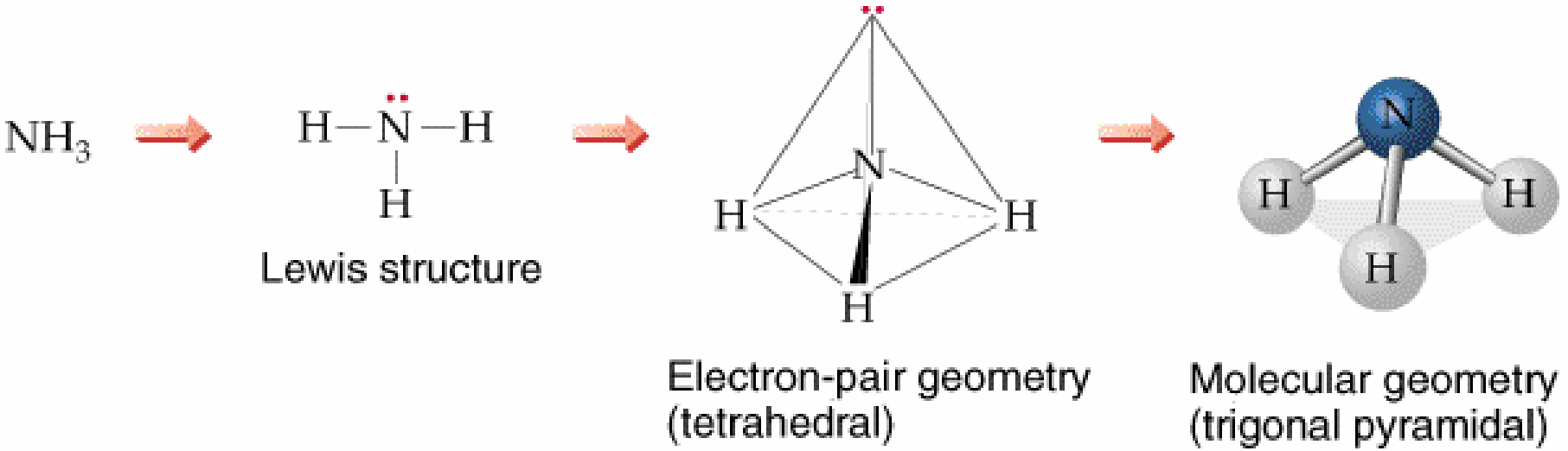
OTTETTO ESPANSO

ELECTRON-PAIR GEOMETRIES AND MOLECULAR SHAPES FOR MOLECULES WITH FIVE AND SIX ELECTRON PAIRS ABOUT THE CENTRAL ATOM

Number of Electron Pairs	Electron-Pair Geometry	Bonding Pairs	Nonbonding Pairs	Molecular Geometry	Example
6 pairs	 Octahedral	6	0	 Octahedral	SF_6
		5	1	 Square pyramidal	BrF_5
		4	2	 Square planar	XeF_4

APPLICAZIONE DELLA VSEPR

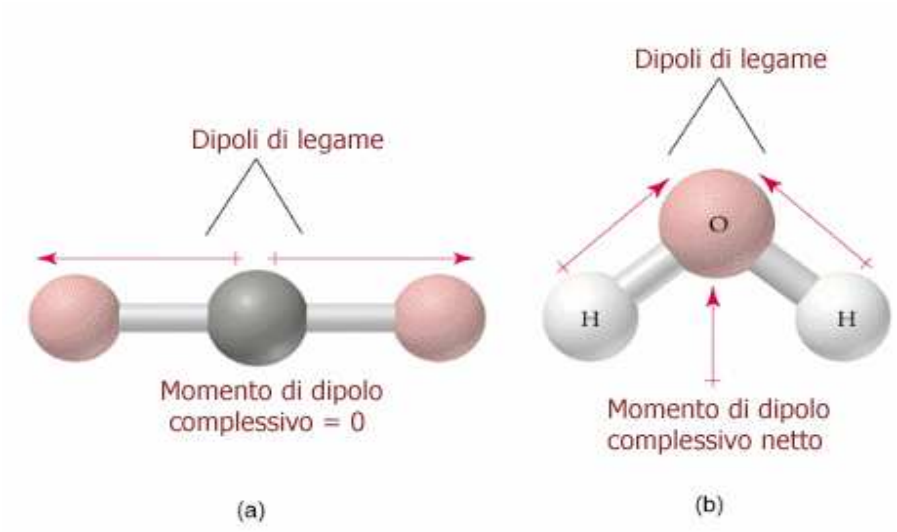
- Applicazione all' ammoniaca (NH_3).

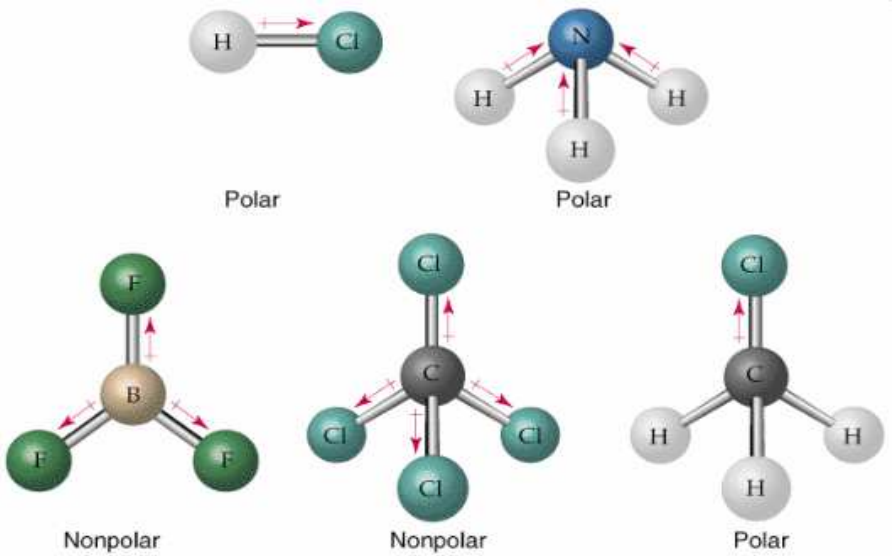


POLARITÁ DELLE MOLECOLE

Polarità del legame covalente

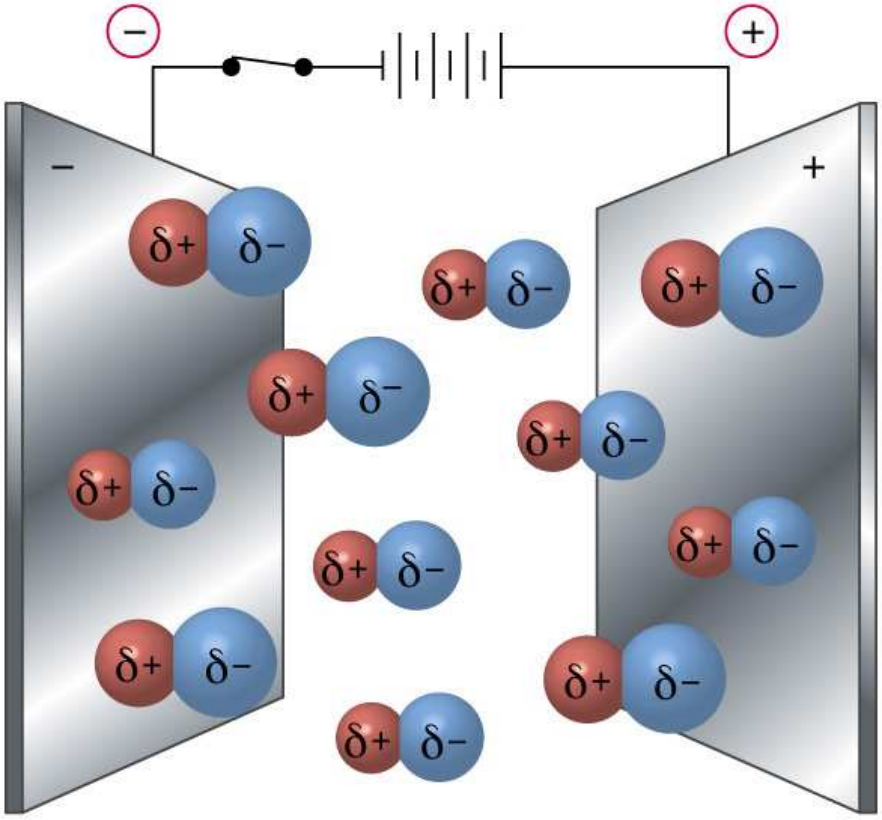
Geometria della molecola





POLARITÁ DELLE MOLECOLE

Comportamento elettrico delle molecole polari



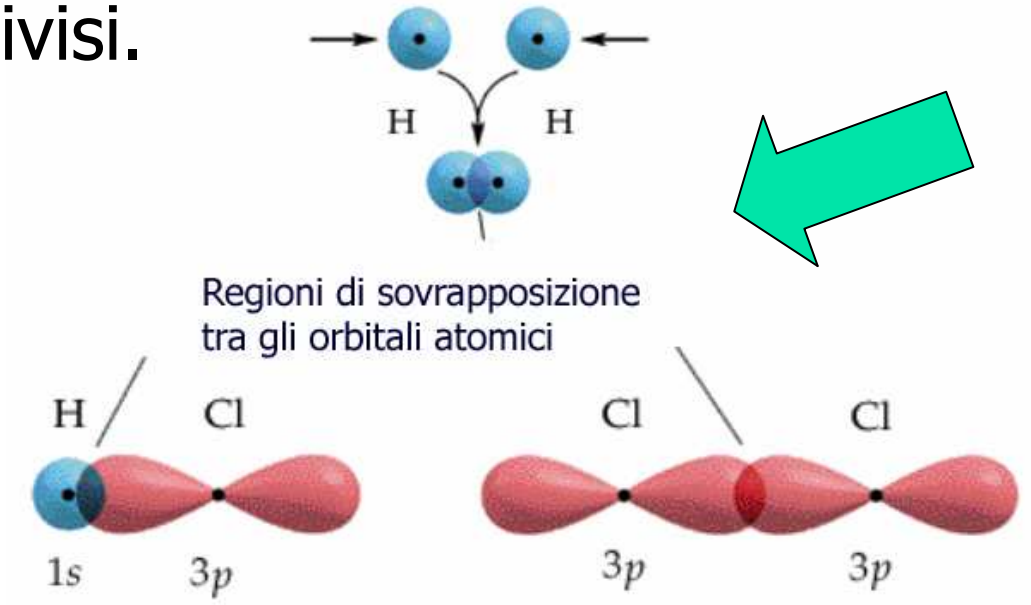
(b)

LEGAME COVALENTE

- Come si accordano i concetti di coppie di elettroni localizzati con il concetto di orbitale atomico (elettroni delocalizzati)?
- Come è possibile calcolare gli angoli di legame misurati sperimentalmente?
- come si spiega l'esistenza di molecole come B_2H_6?
- Perché l'O_2 è paramagnetico?

LEGAME COVALENTE

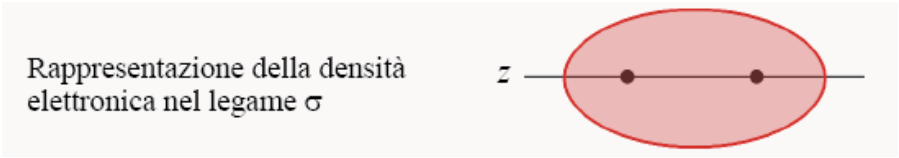
- Teoria del legame di valenza
- Formazione di legame covalente tra due atomi → sovrapposizione degli orbitali atomici a costituire l'orbitale di legame che ospita i due elettroni condivisi.

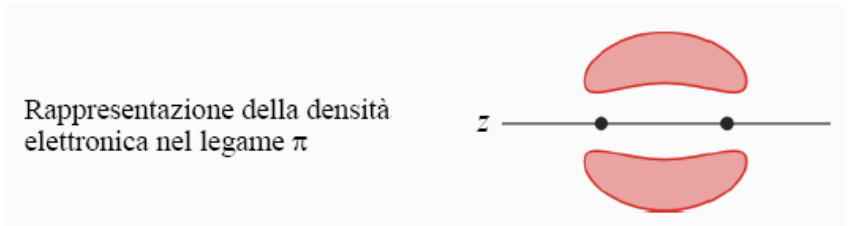


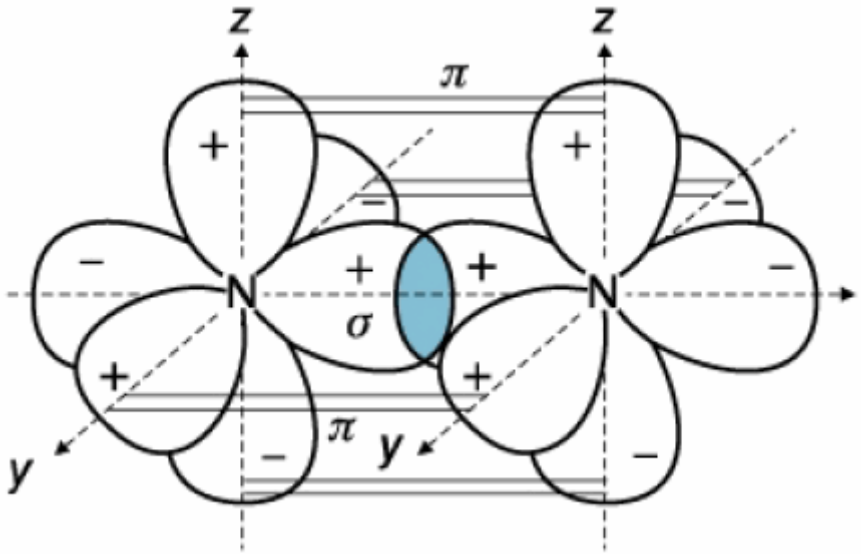
Sono tutti legami σ

LEGAME COVALENTE

- Legami σ e legami π



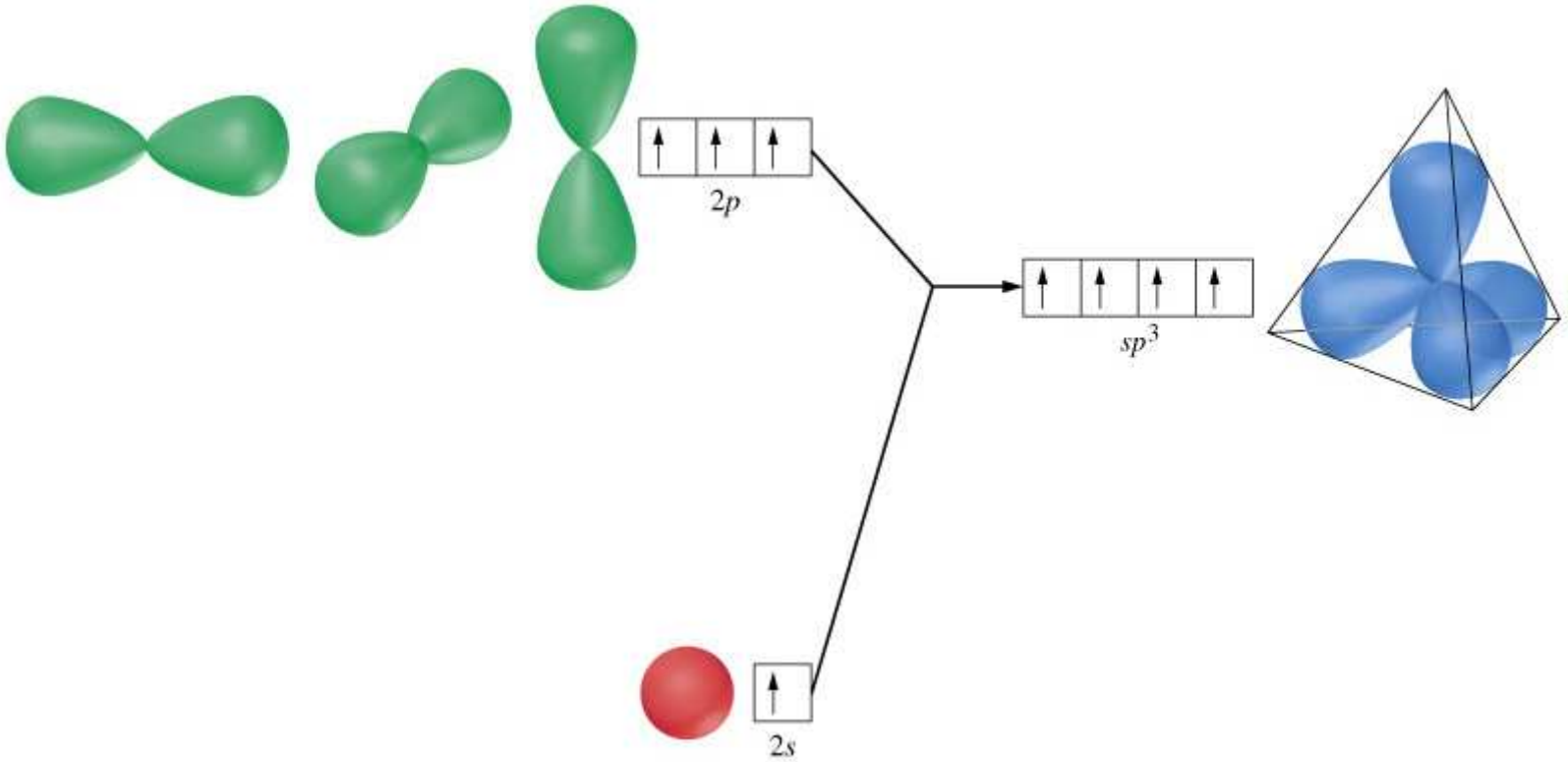




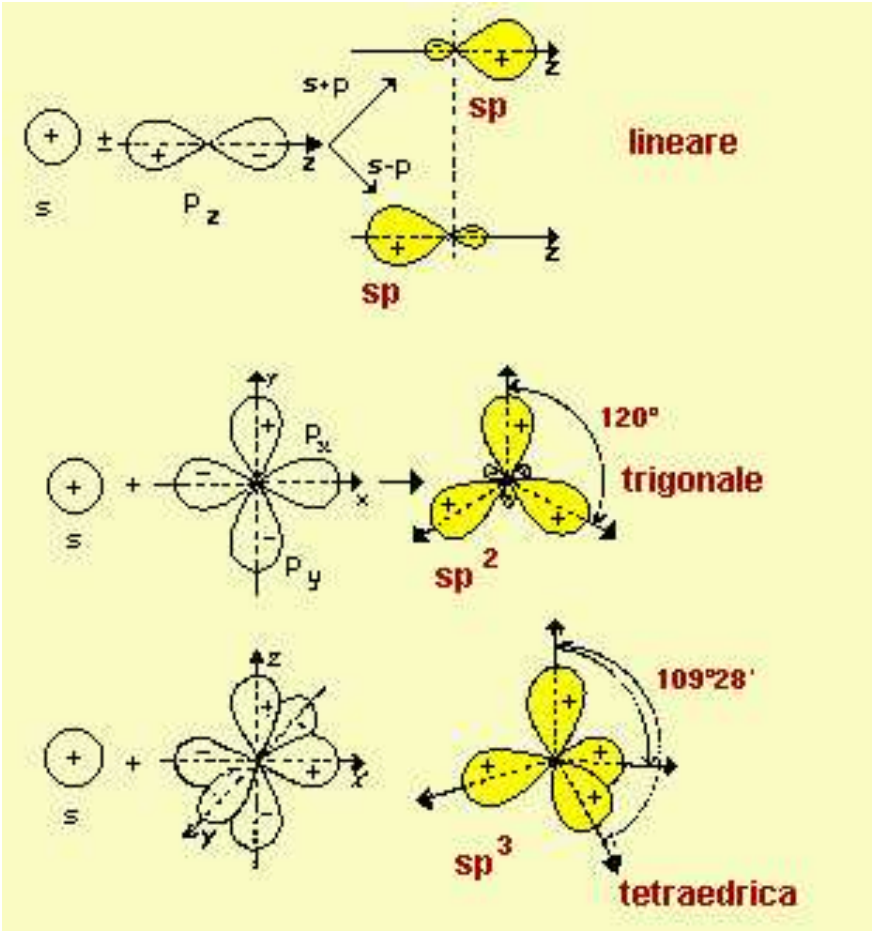
Molecola di azoto N_2 con 1 legame σ e 2 legami π

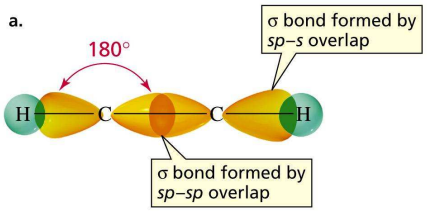
LEGAME COVALENTE

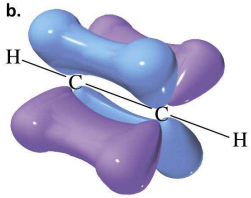
- Ibridizzazione degli orbitali atomici
- L'orbitale *s* si "mescola" coi 3 *p* a formare 4 orbitali ibridi sp^3, con 1 *e* in ognuno

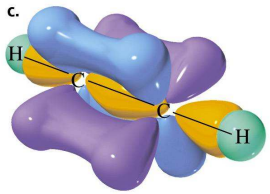


ORBITALI IBRIDI



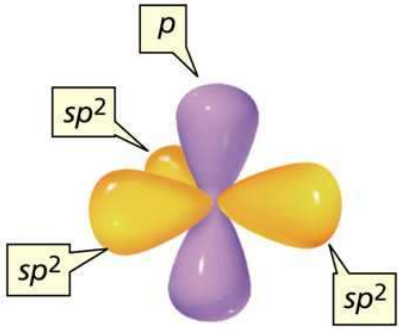




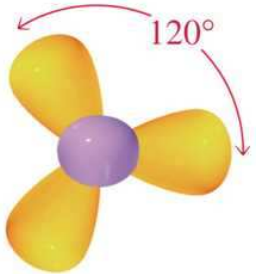


C_2H_2

acetilene

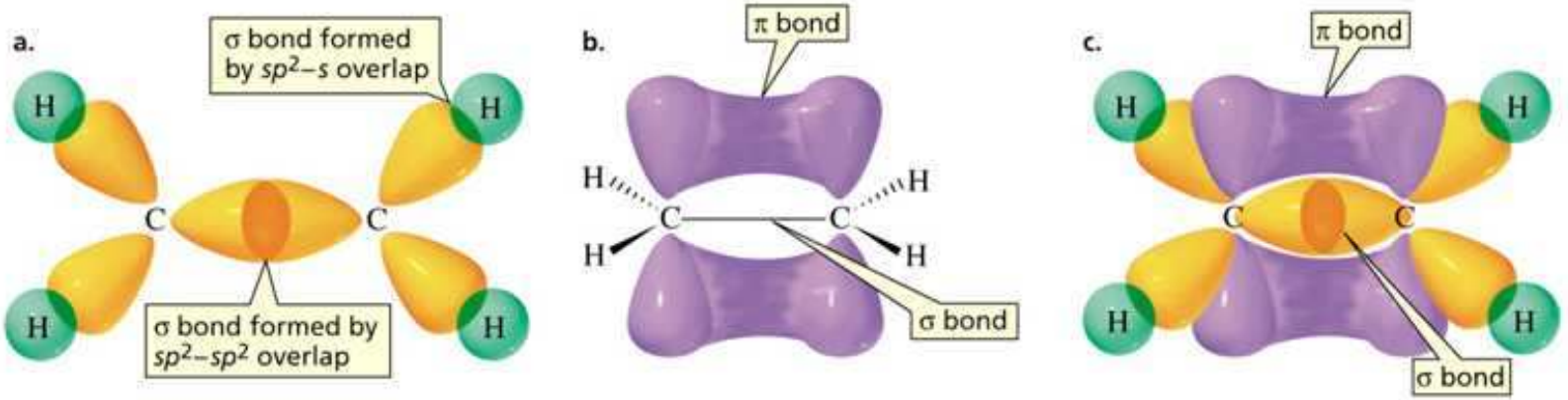


side view



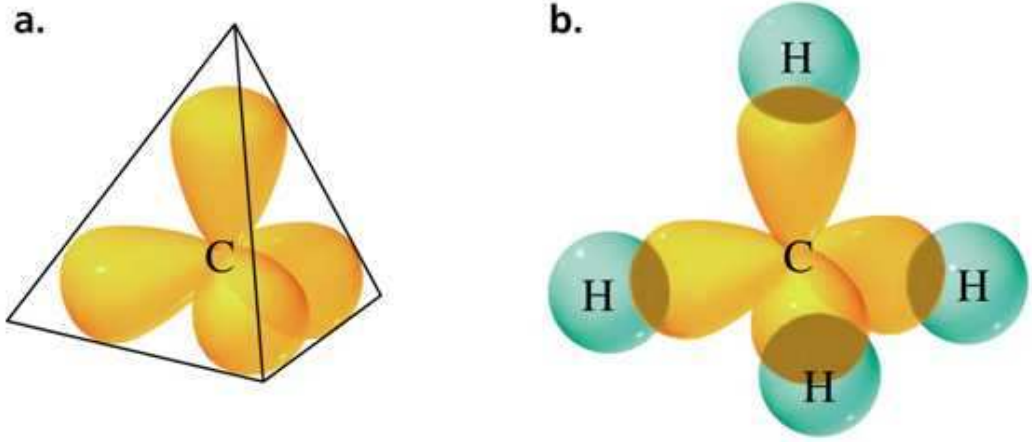
top view

ORBITALI IBRIDI



C_2H_4

etilene

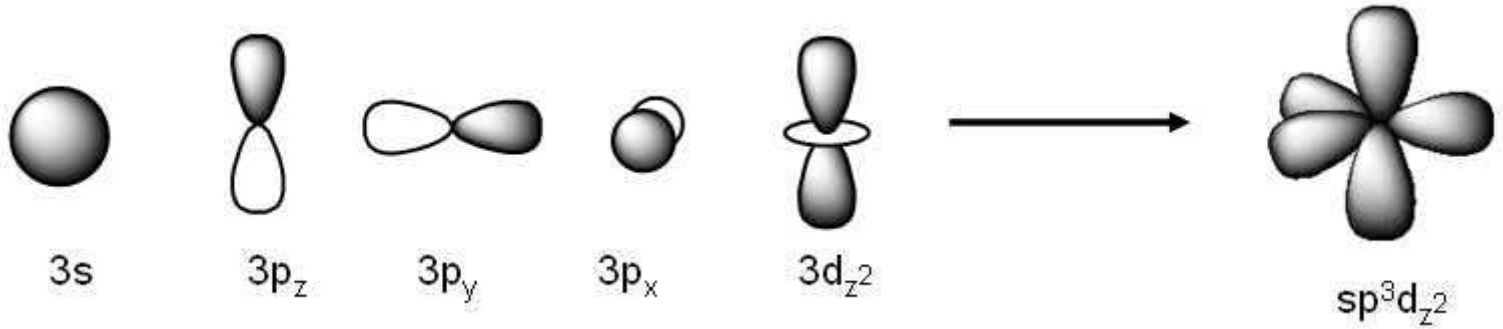


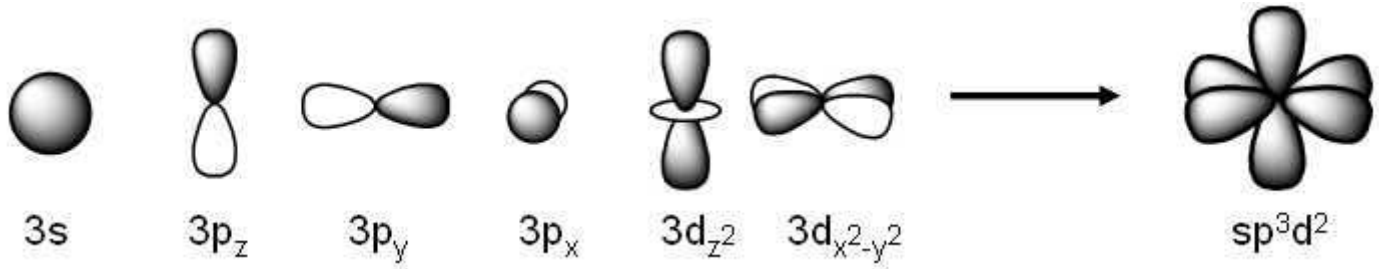
CH_4

metano

CENNI TEORIA ORBITALE MOLECOLARE

- Ibridizzazioni più complesse:





CENNI TEORIA ORBITALE MOLECOLARE

- Teoria più avanzata: spiega anche perché O_2 è paramagnetico. Ne illustreremo la applicazione solo per molecole biatomiche E_2 del secondo periodo.
- Orbitali molecolari: regioni spaziali estese sull'intera molecola occupati dagli elettroni di valenza; essi derivano dalla combinazione lineare degli orbitali atomici degli atomi (somma e sottrazione).