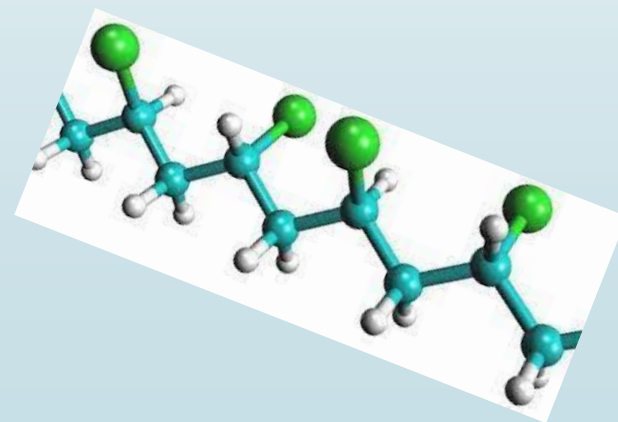
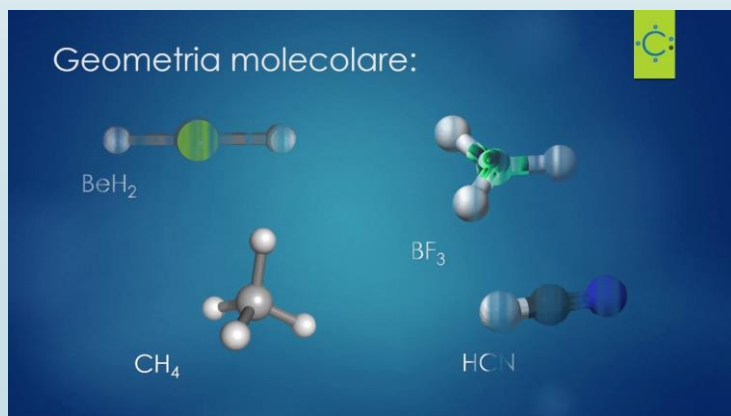
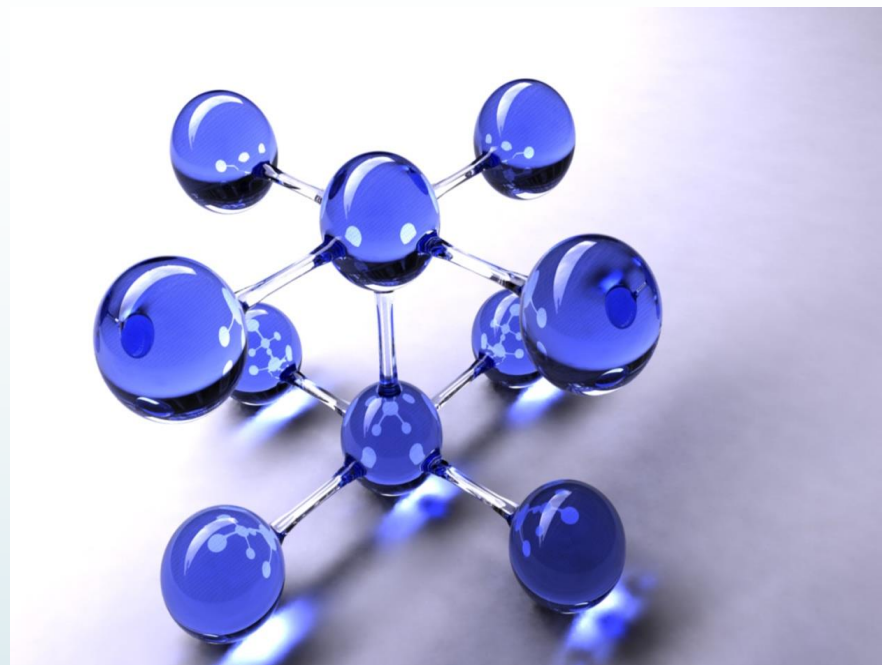


Teoria VSEPR e Legami intermolecolari e Polimeri

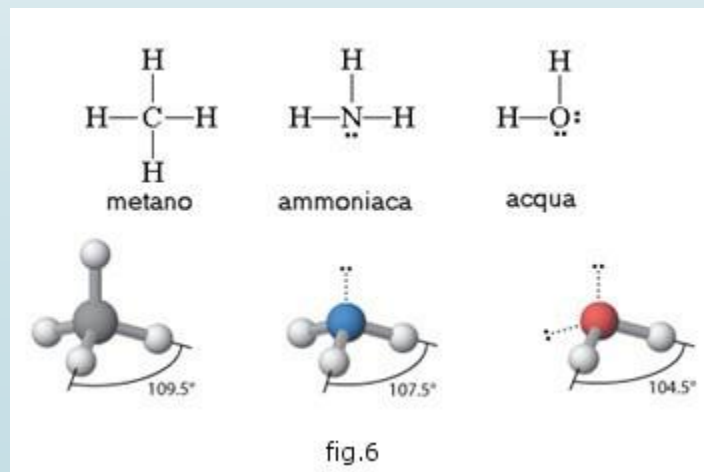


TEORIA VSEPR:

VALENCE SHELL ELECTRON PAIR REPULSION

La disposizione geometrica dei legami intorno a un atomo dipende dal numero totale di coppie elettroniche, di legame e solitarie, che lo circondano.

Tali coppie si dispongono nello spazio in modo da minimizzare la loro mutua repulsione.



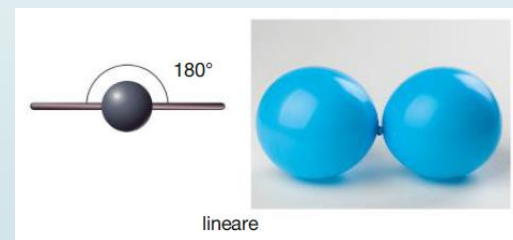
La teoria VSEPR

Ronald Gillespie nel 1957 mise a punto la teoria **VSEPR** (*Valence Shell Electron-Pair Repulsion*):

- gli atomi in una molecola si dispongono in base al numero di coppie di elettroniche di valenza che circondano l'atomo centrale
- le coppie elettroniche si collocano il più lontano possibile tra loro

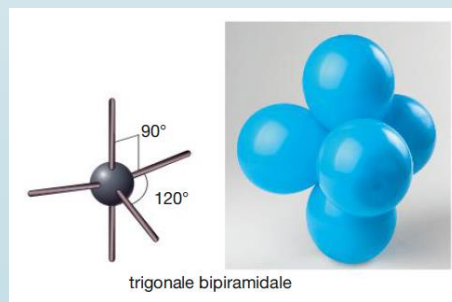
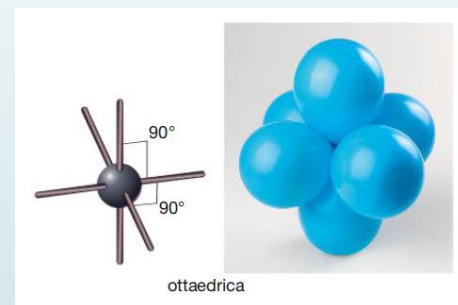
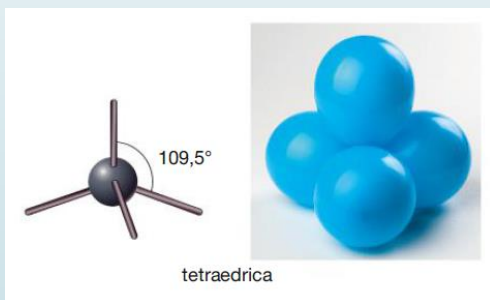
La teoria VSEPR ci permette di determinare la geometria della gran parte delle molecole in base al numero delle coppie elettroniche intorno all'atomo centrale:

- 2 coppie → geometria **lineare**
- 3 coppie → geometria **triangolare planare**



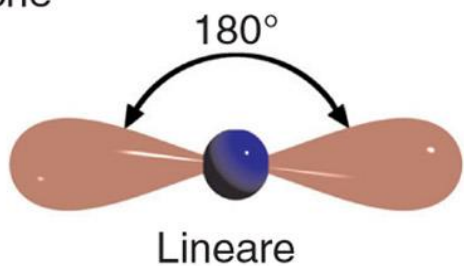
La teoria VSEPR

- 4 coppie → geometria **tetraedrica**
- 5 coppie → geometria **trigonale bipyramidale**
- 6 coppie → geometria **ottaedrica**

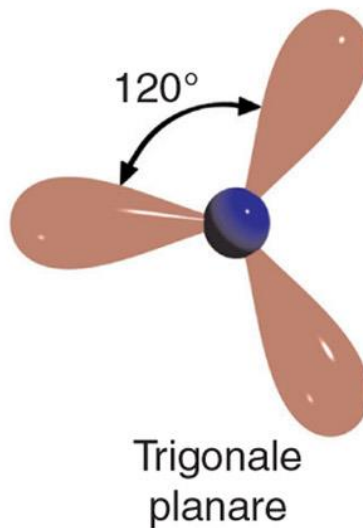


Numero
coppie
elettroniche

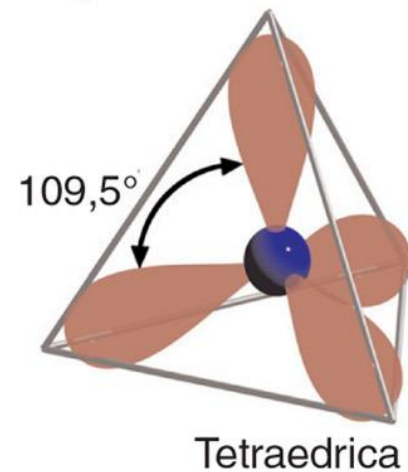
2



3

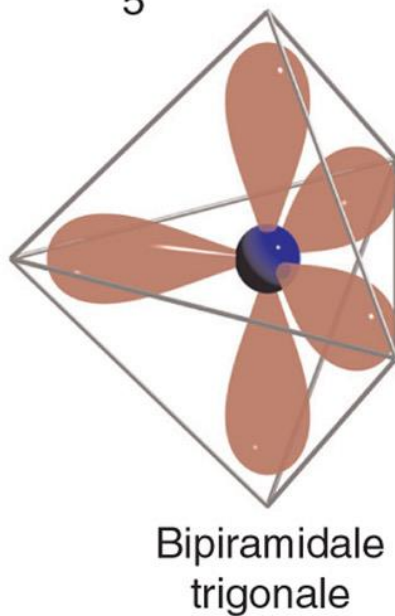


4

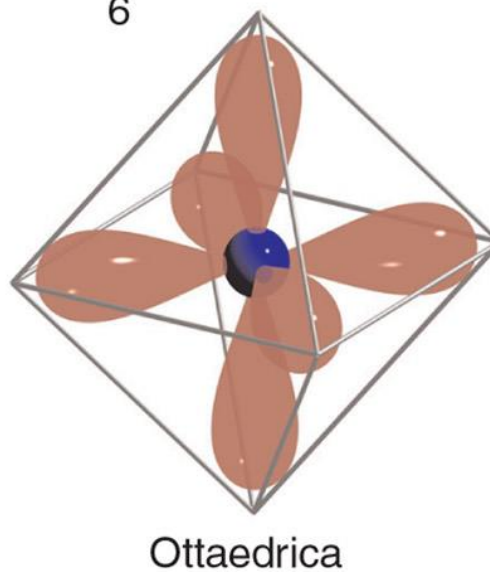


Geometria molecolare VSEPR

5

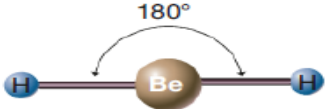
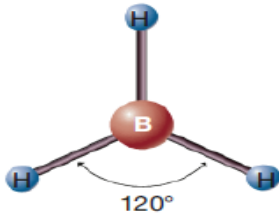
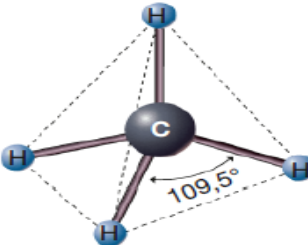


6



La teoria VSEPR

La forma di alcune molecole in cui l'atomo centrale ha tutti gli elettroni di valenza impegnati in legami.


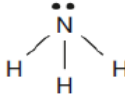
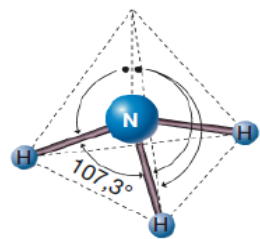


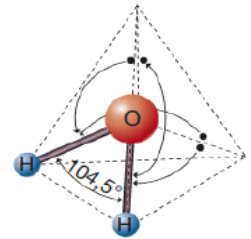
Molecola	Struttura di Lewis	Forma	Struttura geometrica	Angolo di legame	Modello
BeH ₂	H : Be : H	lineare	H — Be — H	180°	
BH ₃	<pre> H : B : H : H</pre>	triangolare planare	<pre> H B / \ H H</pre>	120°	
CH ₄	<pre> H : H : C : H : H</pre>	tetraedrica	<pre> H C / \ H H H</pre>	109,5°	

La teoria VSEPR

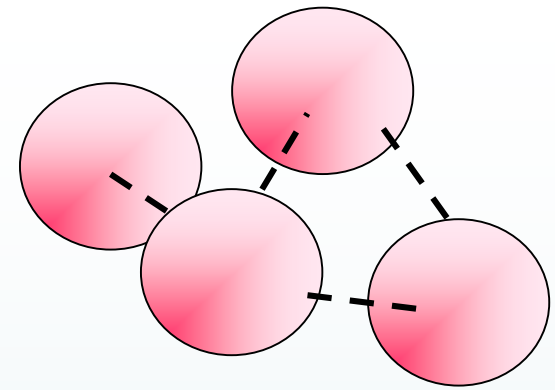
La repulsione

tra due **coppie elettroniche libere** > tra una coppia di **elettroni liberi** e una condivisa, > tra due coppie di **elettroni condivisi**.

Le molecole con coppie di elettroni liberi sull'atomo centrale, quindi, hanno *angoli di legame diversi* dalle molecole in cui l'atomo centrale è circondato esclusivamente da doppietti elettronici di legame.

Molecola	Struttura di Lewis	Forma	Struttura geometrica	Angolo di legame	Modello
NH ₃		piramidale triangolare		107,3°	
H ₂ O		piegata		104,5°	

Generalità



- I legami secondari
 - Sono sempre interazioni elettrostatiche
 - Sono interazioni **inter**molecolari
 - Possiamo spiegare quindi il comportamento di sostanze molecolari e macromolecolari
 - Sono interazioni di tipo fisico
 - **Reversibili**: si formano e si rompono con poca spesa energetica e non modificano la natura intima della materia
- Spiegano il comportamento e le caratteristiche di moltissimi materiali e sostanze

INTERAZIONI TRA MOLECOLE E TRA IONI E MOLECOLE

Sono attrazioni più deboli dei legami veri e propri, poiché si instaurano fra molecole che già possiedono legami capaci di esistere in forma stabile.

Sono importanti nel determinare le proprietà fisiche delle sostanze (stati di aggregazione, temperature di fusione, ebollizione,...).

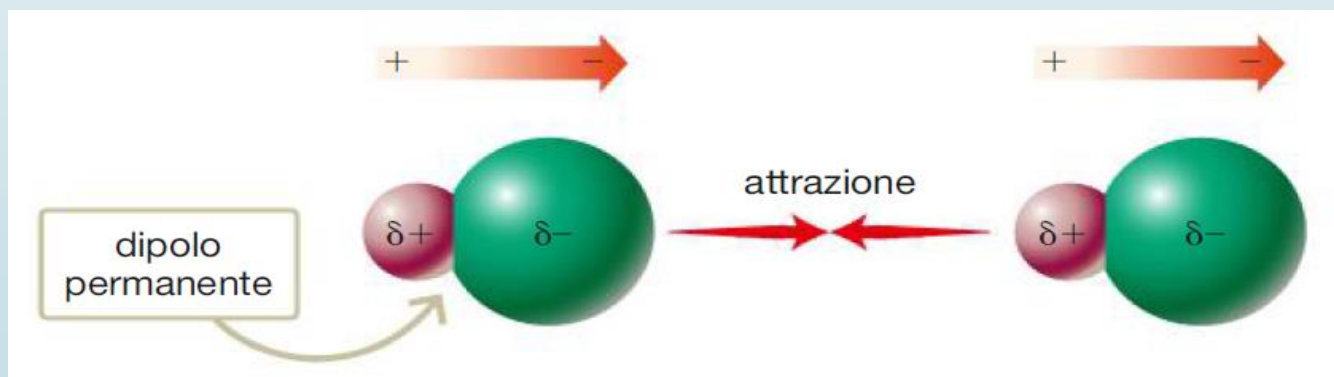
Sono di natura elettrostatica e si dividono in:

1. **Forze di van der Waals** (dipolo-dipolo)
2. **Legami a idrogeno** (o a ponte di idrogeno)
3. **Forze di London** (dipolo indotto e dipolo istantaneo)
4. **Interazioni tra molecole polari** (ione-dipolo).

Le forze intermolecolari

I legami elettrostatici tra *dipoli permanenti* (molecole polari) sono chiamati **forze dipolo-dipolo**.

Sono interazioni deboli *a corto raggio*, cioè significative solo a brevi distanze.



Le forze intermolecolari

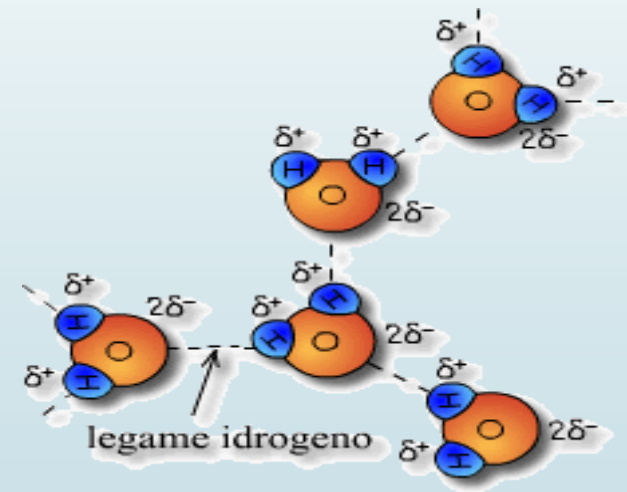
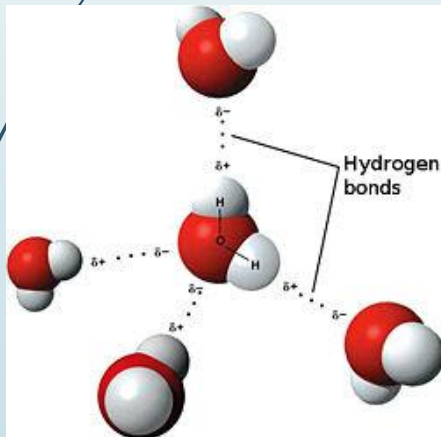
I legami elettrostatici tra dipoli permanenti o temporanei sono chiamati **forze di van der Waals**.

Sono circa 50 volte più deboli del legame covalente e aumentano al crescere della dimensione e della massa delle molecole.

Alogeno	t_{eb} (°C)	Massa molecolare (MM)	Numero elettroni
F ₂	-188,0	38	18
Cl ₂	-34,5	70,90	34
Br ₂	58,8	159,82	70
I ₂	185,2	253,8	106

Il **LEGAME A IDROGENO**: attrazione che si esercita fra una atomo di idrogeno, legato covalentemente ad una atomo N, O, F (fortemente elettronegativi) di una molecola e un atomo di N, O, F, di un'altra molecola.

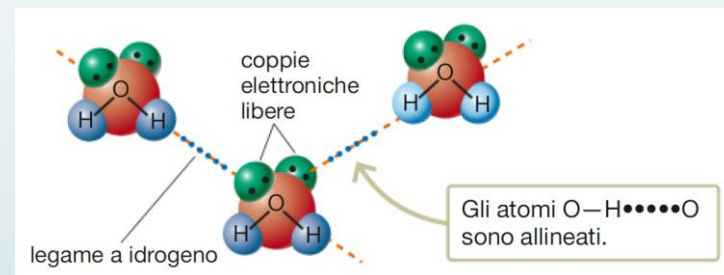
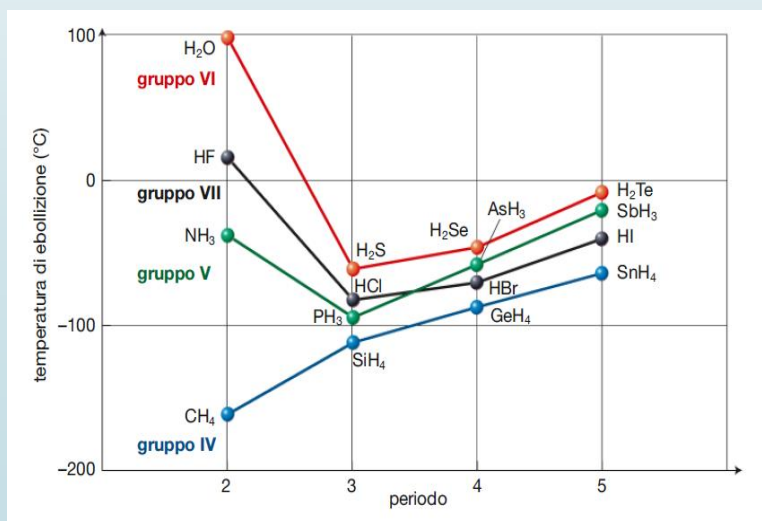
Esempi: fra molecole d'acqua, fra molecole di ammoniaca, fra molecole di alcol e nei legami intramolecolari di proteine, polisaccaridi o acidi nucleici.



A causa della presenza del legame idrogeno, l'acqua ha un punto di ebollizione maggiore rispetto a composti aventi lo stesso peso molecolare o poco maggiore (H_2S).

Per formare un **legame a idrogeno**, i due atomi elettronegativi e l'idrogeno che fa da ponte devono essere tutti allineati. Le molecole quindi devono distanziarsi.

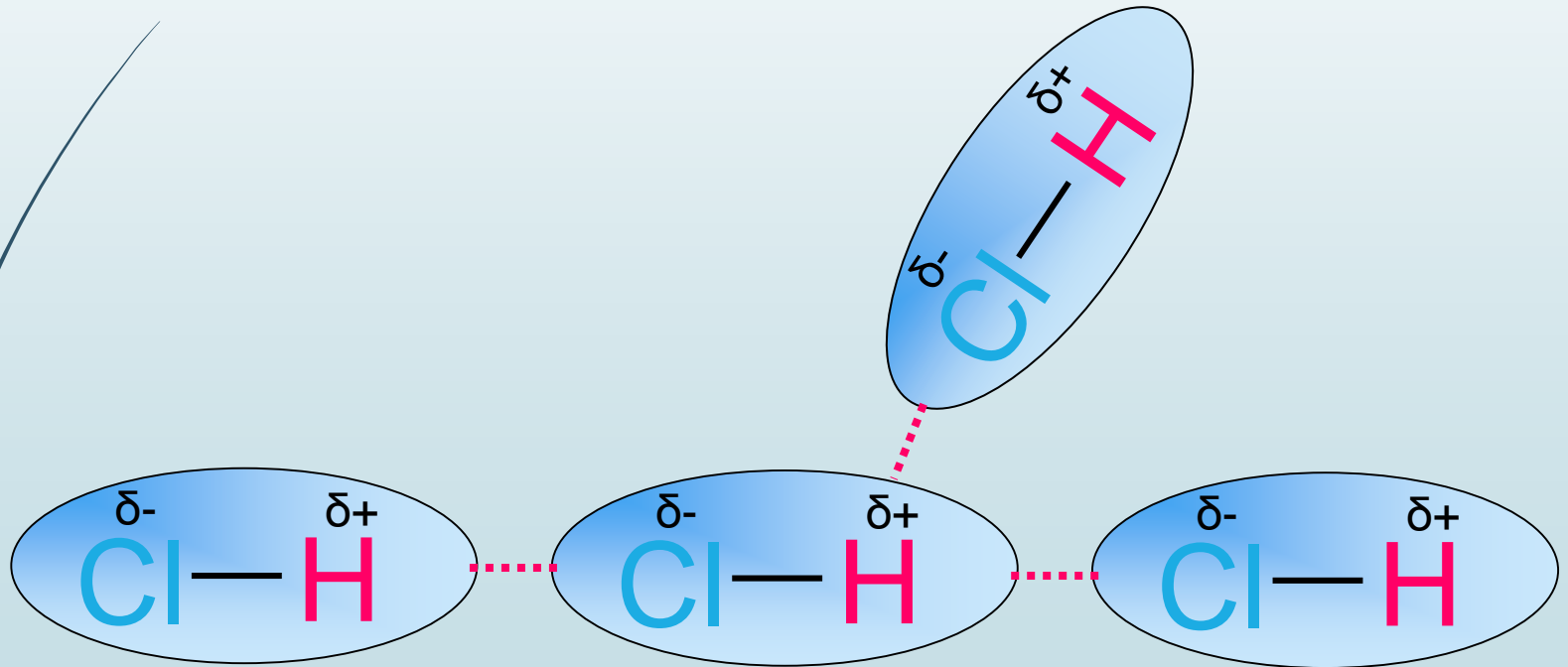
Nell'acqua allo stato solido le molecole sono bloccate in questa geometria e restano molti spazi vuoti. È per questo che il ghiaccio ha un volume maggiore e una densità minore dell'acqua liquida.



Il legame a idrogeno è la più intensa forza attrattiva intermolecolare, ma è circa 10 volte più debole del legame covalente.

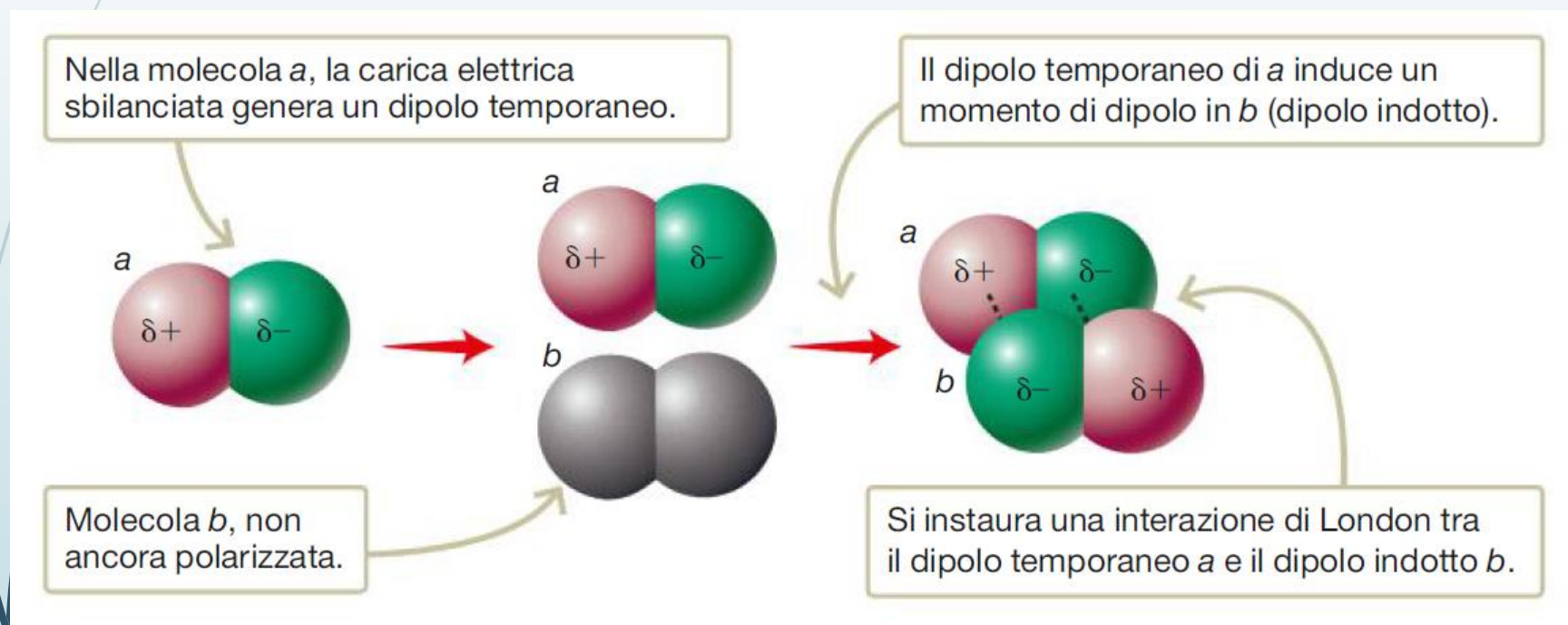
Legami dipolo-dipolo

- Il legame a idrogeno è una versione particolarmente forte e speciale di legame dipolo-dipolo
- Tutte le molecole polari possono formare interazioni dipolo-dipolo con intensità variabile
- Sono responsabili dello stato fisico di molti materiali



Le forze intermolecolari

I legami elettrostatici tra *dipoli temporanei* (molecole apolari) sono chiamati **forze di London**.





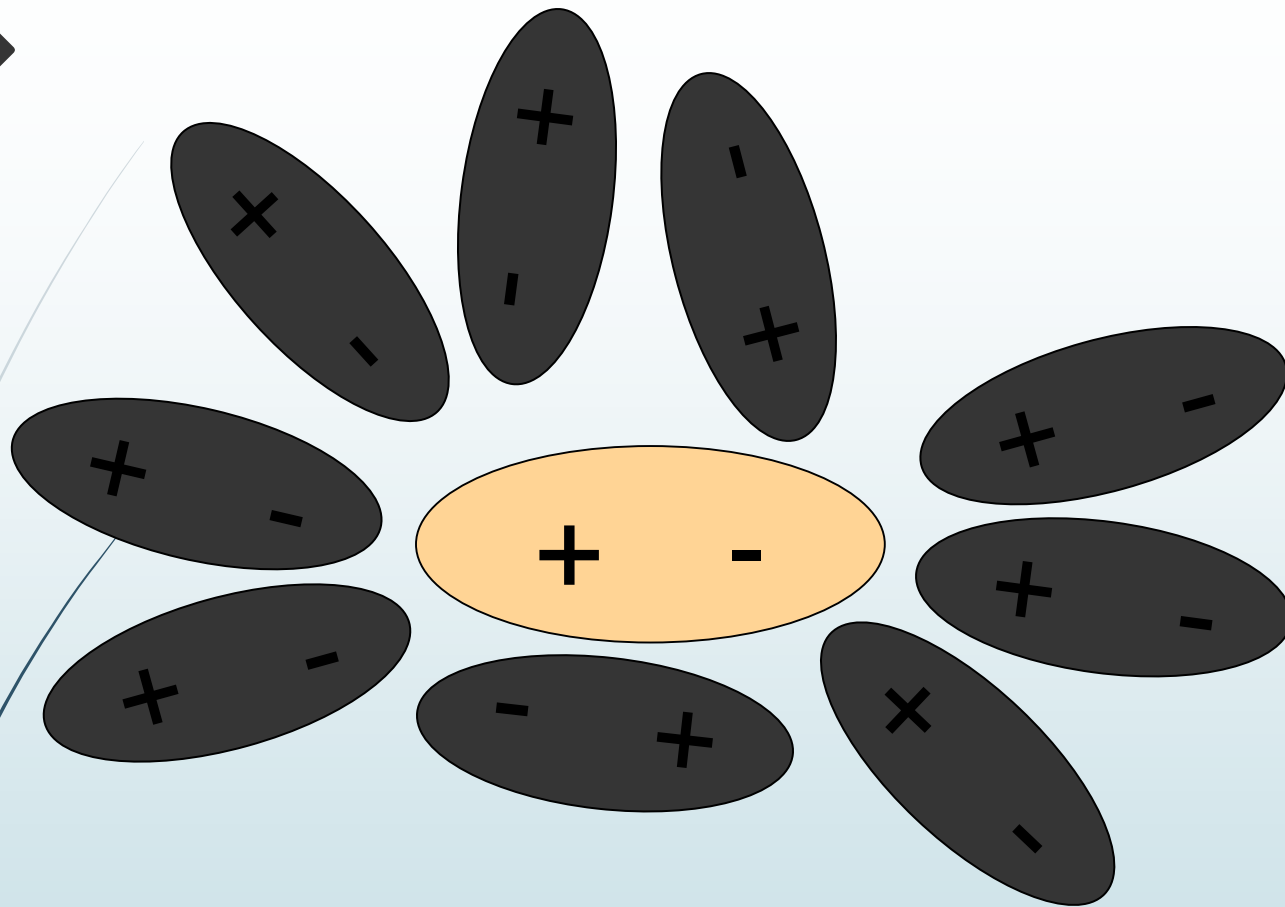
Interazioni dipolo istantaneo-dipolo indotto

- Molte molecole sono considerate apolari
 - N_2 , H_2 , CH_4 , Cl_2 , I_2 , F_2 , CO_2
- Eppure è possibile ottenere lo stato liquido e solido anche da queste sostanze
 - Cl_2 è gassoso ma Br_2 è liquido e I_2 è solido alla temperatura ambiente
- Come mai?
- Cosa cambia tra le 3 molecole?
- Come si crea un dipolo temporaneo?



Come interagiscono le molecole apolari

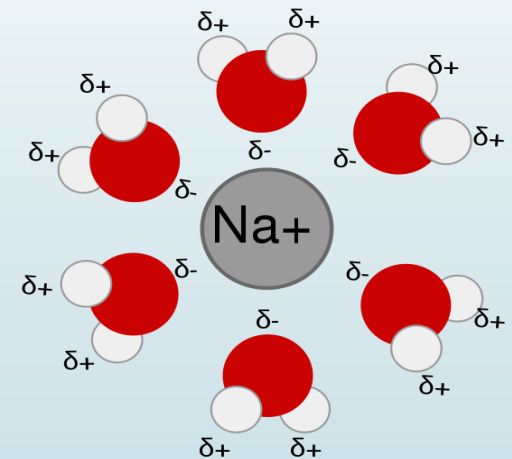
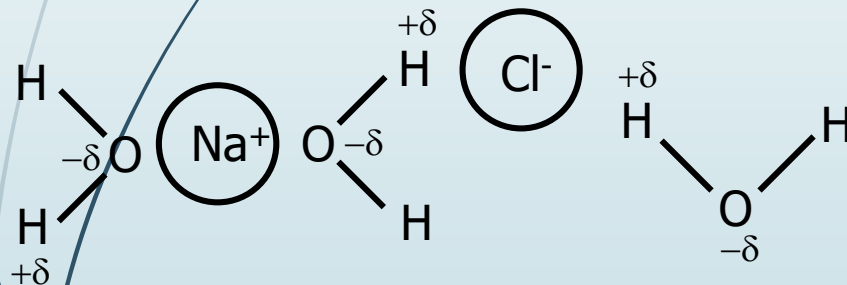
- La massa atomica aumenta notevolmente
- Aumentano molto le dimensioni della nuvola elettronica esterna e il numero di elettroni
 - Cioè la nuvola elettronica esterna è molto lontana dal nucleo e sente poca attrazione protonica
 - Le nuvole elettroniche diventano più plastiche, meno rigide
- Gli elettroni di valenza a volte si distribuiscono in maniera asimmetrica anche in molecole apolari
 - Questo fenomeno è denominato dipolo temporaneo
 - Avviene casualmente su un numero limitato di molecole (probabilità statistica)



Dipolo temporaneo
Distribuzione asimmetrica temporanea degli elettroni di legame

Le **INTERAZIONI FRA IONI E MOLECOLE POLARI**: forze elettrostatiche che si esercitano fra uno ione e più molecole polari.

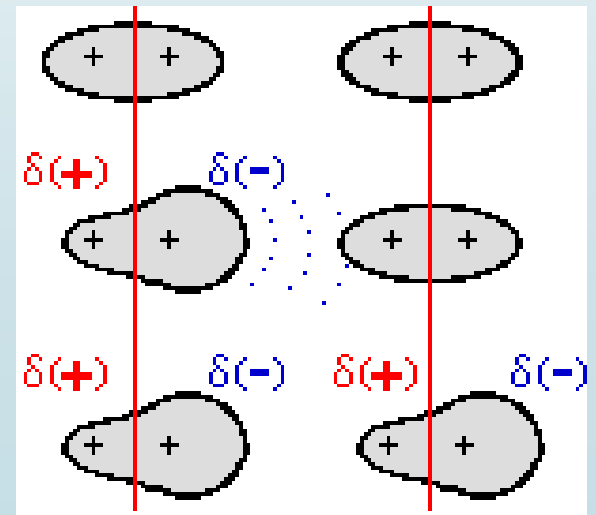
Un esempio classico è l'idratazione degli ioni del sale da cucina NaCl sciolto in acqua: in soluzione, gli ioni sono circondati da molecole d'acqua che rivolgono la loro estremità polarizzata di segno opposto alla carica dello ione:



Si dice che in acqua gli ioni non sono nudi, ma circondati da un guscio di molecole d'acqua legate con interazione ione-dipolo.

Concludendo:

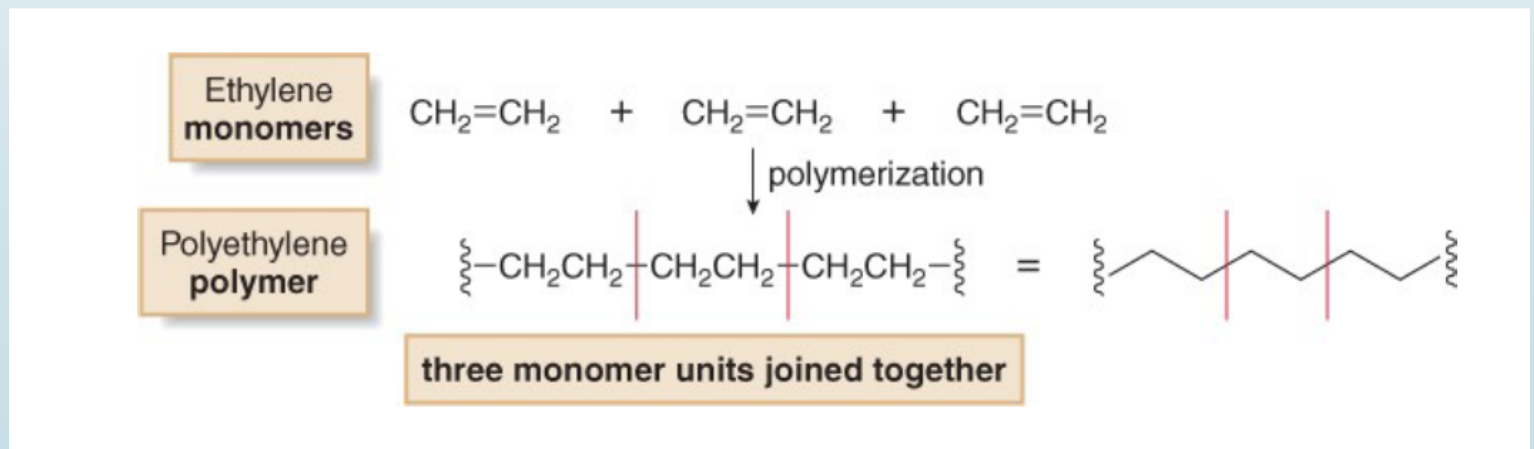
- Il legame a ponte d'idrogeno è quello relativamente più forte
- Seguono le interazioni fra molecole polari e poi quelle fra molecole apolari
- I punti di ebollizione e fusione sono tanto più elevati quanto più intense sono le interazioni fra le molecole di una sostanza



POLIMERI

- I **Polimeri** sono **macromolecole** costituite da una successione di unità ripetitive chiamate **monomeri**.
Ci sono importanti **polimeri biologici** e **polimeri sintetici** come polietilene, polivinilcloruro (PVC) e polistirene.
- La **polimerizzazione** è la reazione con cui i monomeri si legano l'uno all'altro. Ad esempio la polimerizzazione dell'**etilene** (etene) porta al **polietilene**, usato per bottiglie e borse di plastica.

I polimeri hanno pesi molecolari compresi fra 10000 – 1.000.000 dalton

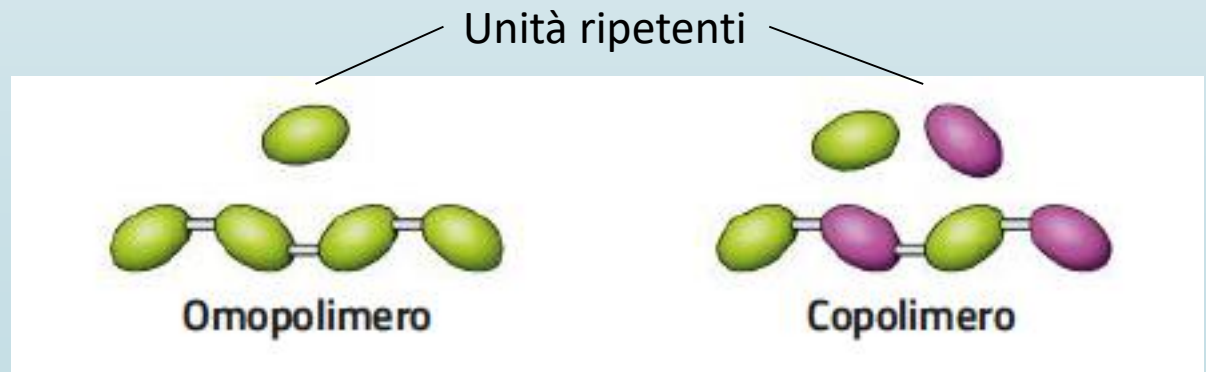


Diversi tipi di polimeri

I polimeri si rappresentano attraverso l'**unità ripetente**, che corrisponde al gruppo di atomi che si ripete n volte lungo la catena polimerica e costituisce l'unità strutturale fondamentale di una macromolecola.

Le catene possono essere formate da uno o più tipi di monomero:

- un solo tipo di monomero forma un **omopolimero**;
- monomeri diversi formano un **copolimero**.



La sintesi

I polimeri sono prodotti attraverso due meccanismi:

- polimerizzazione di **addizione** o a catena;
- polimerizzazione di **condensazione** o a stadi.

Il meccanismo di sintesi dipende dalle caratteristiche chimiche dei monomeri di partenza, cioè segue la reattività dei gruppi funzionali presenti nei reagenti.




Un polimero
ottenuto per
addizione



Un polimero
ottenuto per
condensazione

I polimeri di addizione

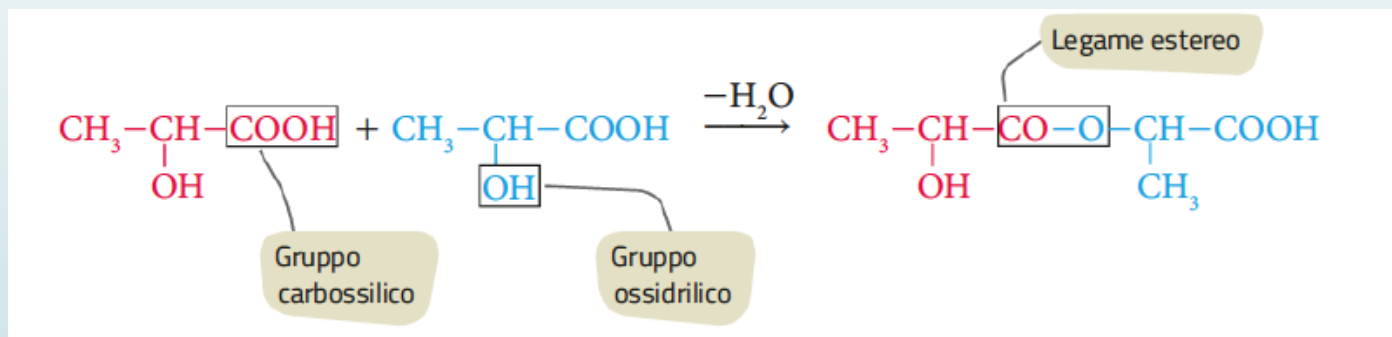
Nella **polimerizzazione per addizione** il polimero si forma per addizioni successive del monomero. Il meccanismo è detto anche *polimerizzazione a catena* perché ogni passaggio dipende da quello precedente.

Monomero	Formula	Polimero	Impieghi
Etilene	$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	Polietilene	Giocattoli e contenitori in plastica, rivestimenti per cavi. 
Stirene	$\text{CH}=\text{CH}_2$ 	Polistirene	Componenti di elettrodomestici, materiale per isolamento e per imballaggi (polistirolo espanso). 

Polimeri di condensazione

Per ottenere **polimeri di condensazione** è necessario che i monomeri coinvolti siano almeno bifunzionali e che la reazione sia accompagnata dall'eliminazione di molecole con massa molecolare ridotta (come l'acqua).

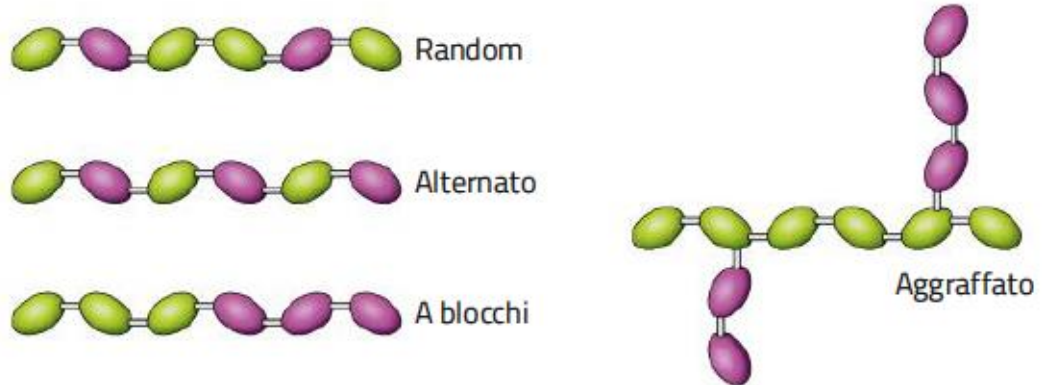
In questo modo si possono ottenere sia omopolimeri sia copolimeri.



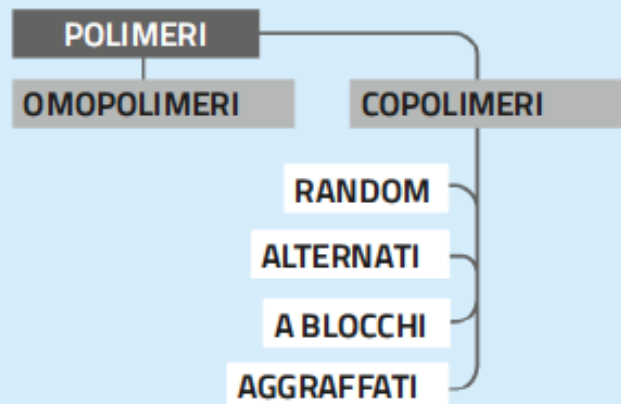
La polimerizzazione di condensazione viene anche detta **a stadi** perché, a differenza dei polimeri di addizione, i monomeri non si addizionano uno alla volta, ma diverse catene in accrescimento si legano tra loro a formare una macromolecola più grande.

I copolimeri

Un **copolimero** è un polimero formato da monomeri diversi; a seconda di come sono legate tra loro le unità monomeriche nella catena, si possono avere quattro tipi di copolimeri.



A colpo d'occhio



le proprietà dei polimeri

Le **proprietà dei polimeri** sono collegate alla disposizione delle macromolecole nello spazio e alle loro interazioni.

I fattori che determinano la struttura microscopica della macromolecola si riflettono nelle caratteristiche macroscopiche del materiale:

- natura dei monomeri;
- presenza di gruppi funzionali;
- grado di polimerizzazione;
- regolarità delle catene;
- processo di polimerizzazione.

Polimeri amorfi e cristallini

Quando le catene di un polimero hanno una disposizione regolare nello spazio, il polimero si dice **cristallino**.

Al contrario, quando le catene sono disposte in modo irregolare il polimero si dice **amorfo**.

