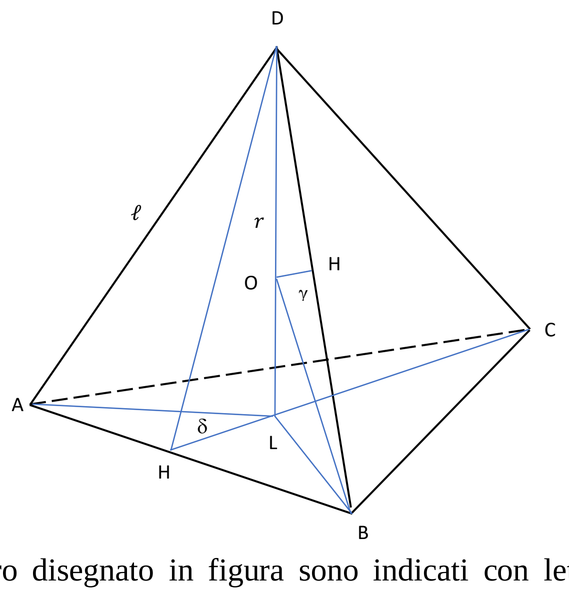
Tetrahedron

Ovvero la formula dell'angolo di legame in molecole tetraedriche regolari

Alessandro Lenzi
Museo di Storia Naturale di Rosignano - MuSNa
Via Eduardo De Filippo 6, 57016 Rosignano Marittimo (LI)
alessandro.lenzi.esc@gmail.com

Una delle questioni che riguarda la strutturistica chimica è la valutazione e misura dell'angolo di legame ed uno degli esempi più noti è costituito dall'angolo di legame di una struttura tetraedrica come il metano, l'ammoniaca o l'acqua. Negli ultimi due casi la molecola non identifica un tetraedro ma possiamo sempre dire che i doppietti di legame stanno ai vertici di un tetraedro distorto a cause della diversa repulsione tra doppietti liberi e doppietti del legame N-H e O-H ma pure sempre un tetraedro. A questo punto ci viene detto che l'angolo di legame in un tetraedro puro come nell'esempio de legame H-C-H del metano è 109°. Studenti diligenti imparano subito a memoria tale valore e passano oltre nello studio delle varie teorie di valenza VSEPR VB-theory etc. trascurando da dove tale valore scaturisca. In questo esempio calcoleremo tale angolo scoprendo che la matematica di cui avremo bisogno è la semplice geometria e di n particolare la trigonometria. Cominciamo intanto a disegnare il nostro tetraedro ed individuare subito le quantità conosciute che saranno ad esempio le distanze di legame C-H. Nella trattazione che segue immagineremo noto il lato del tetraedro e vedremo che da esso si potrà calcolare il legame C-H che corrisponde alla distanza tra il centro geometrico del tetraedro ed uno dei suoi vertici



Nel tetraedro disegnato in figura sono indicati con lettere maiuscole i vertici dei segmenti che corrispondono ai lati o alle altezze dei triangoli inscritti nel tetraedro mentre sono indicati con lettere minuscole, in alfabeto ordinario o greco, le lunghezze dei segmenti trattati nella dimostrazione che segue. Scopo del nostro calcolo sarà ricavare il valore dell'angolo formato da due legami CH della molecola del metano che abbiamo preso come modello ed esempio.

Dato che si tratta di un tetraedro regolare il triangolo di vertici ABD è un triangolo equilatero. Questo ci permette di ricavare, utilizzando il teorema di Pitagora la lunghezza del segmento $\overline{DH}$ cioè l'Apotema della piramide a base triangolare che costituisce il nostro tetraedro:

$$\overline{DH} = \sqrt{\ell^2 - \left(\frac{\ell}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\ell$$

Ora passiamo a calcolare il segmento δ . Considerando che ancora il triangolo di vertici ABC è equilatero e che l'area del triangolo ABL è pari ad 1/3 dell'area del triangolo ABC si ha:

$$\frac{1}{2}\ell\frac{\sqrt{3}}{2}\,\ell = 3 \times \left(\frac{1}{2}\ell\delta\right)$$

Da cui si ricava:

$$\delta = \ell\frac{\sqrt{3}}{6}$$

Si ricava quindi la lunghezza del segmento $\overline{DL}$:

$$\overline{DL} = \sqrt{\overline{DH}^2 - \overline{HL}^2} = \sqrt{\frac{3}{4}\ell^2 - \frac{3}{36}\ell^2} = \sqrt{\frac{2}{3}}\,\ell$$

Si calcola poi l'altezza γ del triangolo DOB:

$$\overline{OH'} = \gamma = \sqrt{r^2 - \left(\frac{\ell}{2}\right)^2}$$

Questa grandezza dipende dal rapporto r/ℓ e quindi dall'angolo $\widehat{DOB}$ che è l'incognita che stiamo cercando. Sarà quindi necessario trovare una relazione che leghi assieme il parametro r ed il parametro l per esprimerne il rapporto. Tale relazione deriva dall'eguagliare l'area del triangolo DLB calcolata conoscendo i lati LB e DL e come somma dei triangoli DOB e OLB. Si ha quindi:

$$\overline{DB} \times \overline{OH'} \times \frac{1}{2} + \overline{LB} \times (\overline{DL} - \overline{OD}) \times \frac{1}{2} = \overline{LB} \times \overline{LD} \times \frac{1}{2}$$

$$\ell \times \sqrt{r^2 - \frac{\ell^2}{4}} \times \frac{1}{2} + \ell \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \left(\ell \times \sqrt{\frac{2}{3}} - r\right) \times \frac{1}{2} = \ell \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \ell \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \frac{1}{2}$$

$$\ell^2 \times \sqrt{\frac{r^2}{\ell^2} - \frac{1}{4}} \times \frac{1}{2} + \ell^2 \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \left(\sqrt{\frac{2}{3}} - \frac{r}{\ell}\right) \times \frac{1}{2} = \ell^2 \times \frac{1}{\sqrt{3}} \times \sqrt{\frac{2}{3}} \times \frac{1}{2}$$

E semplificando per $\frac{\ell^2}{2}$ si ha:

$$\sqrt{\frac{r^2}{\ell^2}-\frac{1}{4}}+\sqrt{\frac{2}{9}-\frac{r}{\ell}\times\frac{1}{\sqrt{3}}}=\sqrt{\frac{2}{9}}$$

$$\sqrt{\frac{r^2}{\ell^2}-\frac{1}{4}}=\frac{r}{\ell}\times\frac{1}{\sqrt{3}}$$

Ponendo $t=\frac{r}{\ell}$ si ha:

$$t^2-\frac{1}{4}=t^2\times\frac{1}{3}$$

Che risolta da:

$$t=\sqrt{\frac{3}{8}}=\frac{r}{\ell}$$

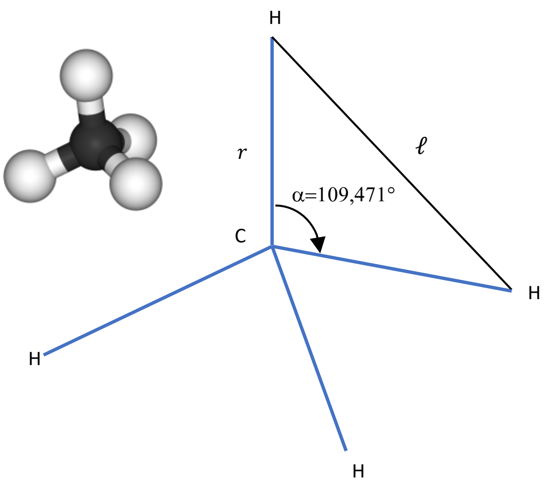
Ricordando che l'angolo $\widehat{ODB}$ è tale che:

$$\cos\widehat{ODB}=\frac{\frac{\ell}{2}}{r}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8}{3}}=\sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\widehat{ODB}=\cos^{-1}\sqrt{\frac{2}{3}}=35{,}264^{\circ}$$

$$\widehat{DOB}=2\times\left(90^{\circ}-35{,}26^{\circ}\right)=109{,}471^{\circ}$$

Questo è il famigerato angolo di legame presente in tutte le strutture tetraedriche regolari.



Alessandro Lenzi, 10 gennaio 2022