

Insegnamento **BIOCHIMICA e CHIMICA (40 ore, 4 CFU)**

Docente: Eleonora Marsich

email: emarsich@units.it

tel: 040 558 8733

Dipartimento Scienze della Vita, via Giorgieri 5, ed.Q, primo piano

Testo consigliato: Principi di chimica generale e organica
E.Santaniello, M.Alberghina, M. Coletta, F. Malatesta, S.Marini.
Ed. Piccin

LE BASI DELLA BIOCHIMICA

Autori: CHAMPE, HARVEY, FERRIER

Ed. Zanichelli

Modalità d'esame: Esame scritto della durata di tre ore, con quesiti e esercizi di chimica
Possibilità di implementare il voto dello scritto con un esame orale
solo se allo scritto si è ricevuto un voto superiore o uguale a 18/30

Il voto del corso integrato verrà calcolato come media del voto ricevuto in ciascun insegnamento

Appelli: 15 gennaio- 28 febbraio

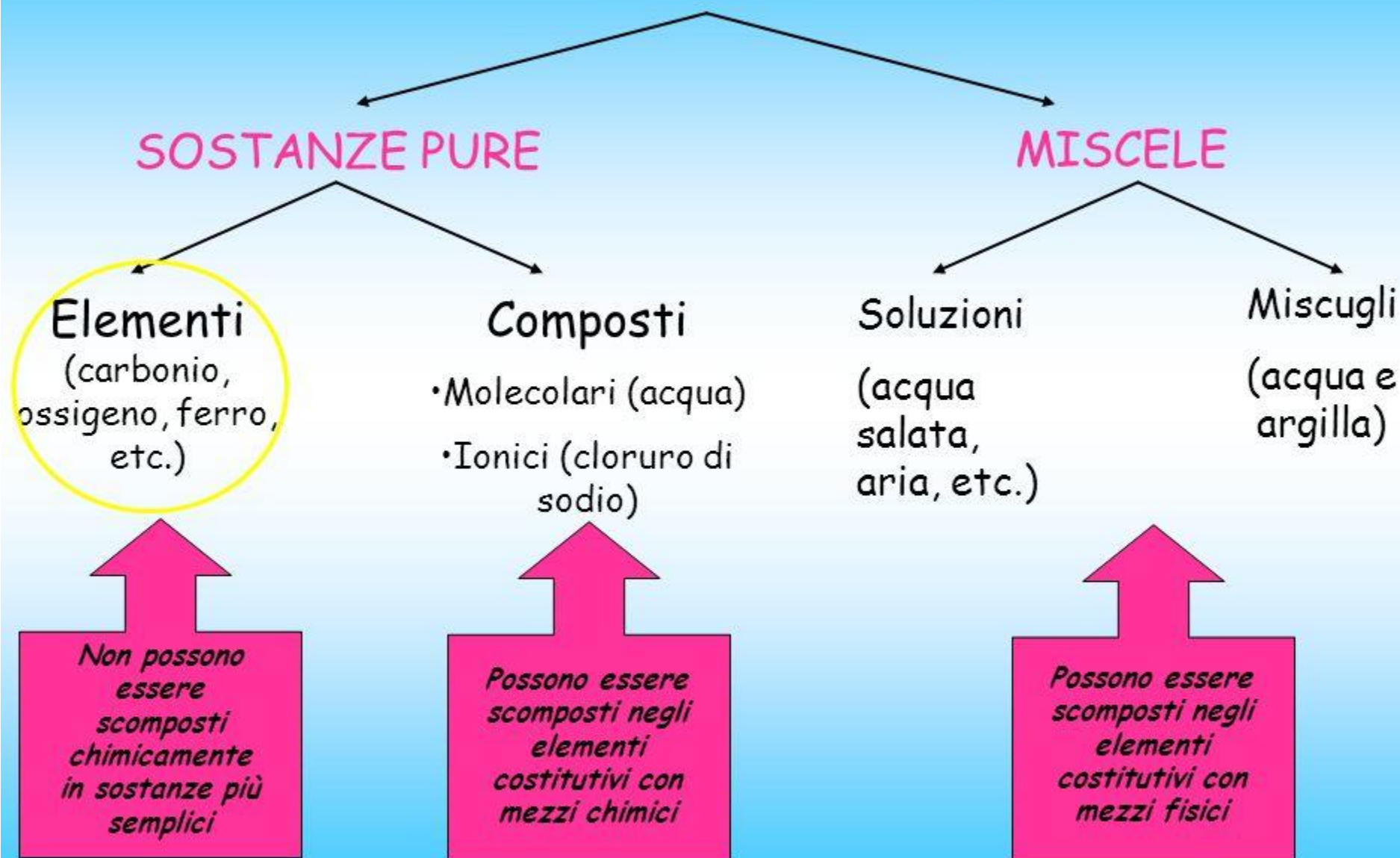
15 giugno- 31 luglio settembre

LA CHIMICA

- Studia la struttura, le proprietà e le trasformazioni di tutta la materia che ci circonda e di cui siamo fatti.



COMPOSIZIONE DELLA MATERIA



Elementi

- Ogni elemento ha un nome e un simbolo (una o due lettere, la prima maiuscola).

Oro



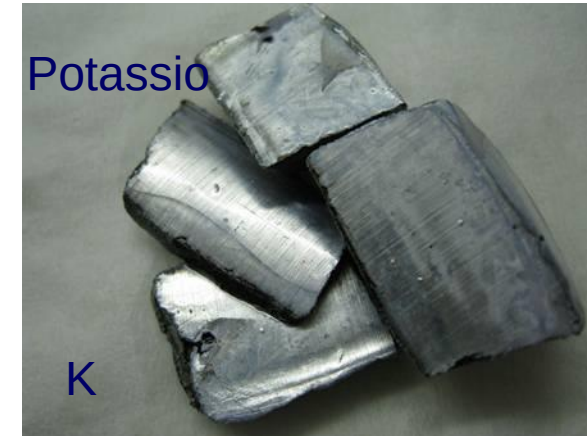
Au

Carbonio



C

Potassio

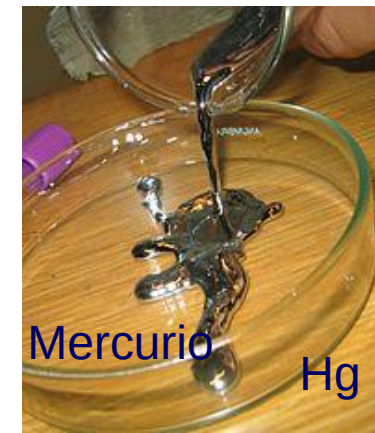


K

Alluminio



Al



Mercurio

Hg

atomic number

atomic weight

symbol:

black solid
blue liquid
red gas
white synthetically prepared
most stable isotope

name

alkali metals

alkaline earth metals

transitional metals

other metals

nonmetals

noble gases

1 1.01 H Hydrogen

3 6.94 Li Lithium

4 9.01 Be Beryllium

11 22.99 Na Sodium

12 24.31 Mg Magnesium

19 39.10 K Potassium

20 40.08 Ca Calcium

21 44.96 Sc Scandium

22 47.88 Ti Titanium

23 50.94 V Vanadium

24 58.93 Cr Chromium

25 54.94 Mn Manganese

26 55.85 Fe Iron

27 58.93 Co Cobalt

28 58.93 Ni Nickel

29 63.55 Cu Copper

30 65.39 Zn Zinc

31 69.72 Ga Gallium

32 72.64 Ge Germanium

33 74.92 As Arsenic

34 78.96 Se Selenium

35 79.90 Br Bromine

36 83.80 Kr Krypton

37 85.47 Rb Rubidium

38 87.62 Sr Strontium

39 88.91 Y Yttrium

40 91.22 Zr Zirconium

41 92.91 Nb Niobium

42 95.94 Mo Molybdenum

43 98 Tc Technetium

44 101.07 Ru Ruthenium

45 102.91 Rh Rhodium

46 106.42 Pd Palladium

47 107.87 Ag Silver

48 112.41 Cd Cadmium

49 114.82 In Indium

50 118.71 Sn Tin

51 127.30 Sb Antimony

52 127.60 Te Tellurium

53 126.91 I Iodine

54 131.30 Xe Xenon

55 132.91 Cs Cesium

56 137.33 Ba Barium

57 138.91 La Lanthanum

58 140.91 Ce Cerium

59 140.91 Pr Praseodymium

60 140.91 Nd Neodymium

61 140.91 Pm Promethium

62 150.36 Sm Samarium

63 151.96 Eu Europium

64 157.25 Gd Gadolinium

65 162.50 Tb Terbium

66 164.93 Dy Dysprosium

67 167.26 Ho Holmium

68 175.04 Er Erbium

69 175.04 Tm Thulium

70 173.04 Yb Ytterbium

71 175.04 Lu Lutetium

72 173.04 Yb Ytterbium

73 175.04 Lu Lutetium

74 175.04 Lu Lutetium

75 175.04 Lu Lutetium

76 175.04 Lu Lutetium

77 175.04 Lu Lutetium

78 175.04 Lu Lutetium

79 175.04 Lu Lutetium

80 175.04 Lu Lutetium

81 175.04 Lu Lutetium

82 175.04 Lu Lutetium

83 175.04 Lu Lutetium

84 175.04 Lu Lutetium

85 175.04 Lu Lutetium

86 175.04 Lu Lutetium

87 175.04 Lu Lutetium

88 175.04 Lu Lutetium

89 175.04 Lu Lutetium

90 175.04 Lu Lutetium

91 175.04 Lu Lutetium

92 175.04 Lu Lutetium

93 175.04 Lu Lutetium

94 175.04 Lu Lutetium

95 175.04 Lu Lutetium

96 175.04 Lu Lutetium

97 175.04 Lu Lutetium

98 175.04 Lu Lutetium

99 175.04 Lu Lutetium

100 175.04 Lu Lutetium

101 175.04 Lu Lutetium

102 175.04 Lu Lutetium

103 175.04 Lu Lutetium

104 175.04 Lu Lutetium

105 175.04 Lu Lutetium

106 175.04 Lu Lutetium

107 175.04 Lu Lutetium

108 175.04 Lu Lutetium

109 175.04 Lu Lutetium

110 175.04 Lu Lutetium

111 175.04 Lu Lutetium

112 175.04 Lu Lutetium

113 175.04 Lu Lutetium

114 175.04 Lu Lutetium

115 175.04 Lu Lutetium

116 175.04 Lu Lutetium

117 175.04 Lu Lutetium

118 175.04 Lu Lutetium

119 175.04 Lu Lutetium

120 175.04 Lu Lutetium

121 175.04 Lu Lutetium

122 175.04 Lu Lutetium

123 175.04 Lu Lutetium

124 175.04 Lu Lutetium

125 175.04 Lu Lutetium

126 175.04 Lu Lutetium

127 175.04 Lu Lutetium

128 175.04 Lu Lutetium

129 175.04 Lu Lutetium

130 175.04 Lu Lutetium

131 175.04 Lu Lutetium

132 175.04 Lu Lutetium

133 175.04 Lu Lutetium

134 175.04 Lu Lutetium

135 175.04 Lu Lutetium

136 175.04 Lu Lutetium

137 175.04 Lu Lutetium

138 175.04 Lu Lutetium

139 175.04 Lu Lutetium

140 175.04 Lu Lutetium

141 175.04 Lu Lutetium

142 175.04 Lu Lutetium

143 175.04 Lu Lutetium

144 175.04 Lu Lutetium

145 175.04 Lu Lutetium

146 175.04 Lu Lutetium

147 175.04 Lu Lutetium

148 175.04 Lu Lutetium

149 175.04 Lu Lutetium

150 175.04 Lu Lutetium

151 175.04 Lu Lutetium

152 175.04 Lu Lutetium

153 175.04 Lu Lutetium

154 175.04 Lu Lutetium

155 175.04 Lu Lutetium

156 175.04 Lu Lutetium

157 175.04 Lu Lutetium

158 175.04 Lu Lutetium

159 175.04 Lu Lutetium

160 175.04 Lu Lutetium

161 175.04 Lu Lutetium

162 175.04 Lu Lutetium

163 175.04 Lu Lutetium

164 175.04 Lu Lutetium

165 175.04 Lu Lutetium

166 175.04 Lu Lutetium

167 175.04 Lu Lutetium

168 175.04 Lu Lutetium

169 175.04 Lu Lutetium

170 175.04 Lu Lutetium

171 175.04 Lu Lutetium

172 175.04 Lu Lutetium

173 175.04 Lu Lutetium

174 175.04 Lu Lutetium

175 175.04 Lu Lutetium

176 175.04 Lu Lutetium

177 175.04 Lu Lutetium

178 175.04 Lu Lutetium

179 175.04 Lu Lutetium

180 175.04 Lu Lutetium

181 175.04 Lu Lutetium

182 175.04 Lu Lutetium

183 175.04 Lu Lutetium

184 175.04 Lu Lutetium

185 175.04 Lu Lutetium

186 175.04 Lu Lutetium

187 175.04 Lu Lutetium

188 175.04 Lu Lutetium

189 175.04 Lu Lutetium

190 175.04 Lu Lutetium

191 175.04 Lu Lutetium

192 175.04 Lu Lutetium

193 175.04 Lu Lutetium

194 175.04 Lu Lutetium

195 175.04 Lu Lutetium

196 175.04 Lu Lutetium

197 175.04 Lu Lutetium

198 175.04 Lu Lutetium

199 175.04 Lu Lutetium

200 175.04 Lu Lutetium

201 175.04 Lu Lutetium

202 175.04 Lu Lutetium

203 175.04 Lu Lutetium

204 175.04 Lu Lutetium

205 175.04 Lu Lutetium

206 175.04 Lu Lutetium

207 175.04 Lu Lutetium

208 175.04 Lu Lutetium

209 175.04 Lu Lutetium

210 175.04 Lu Lutetium

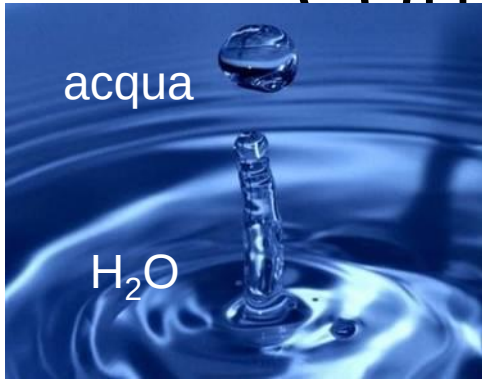
211 175.04 Lu Lutetium

212 175.04 Lu Lutetium

2

Copyright © 2009 Oxford University

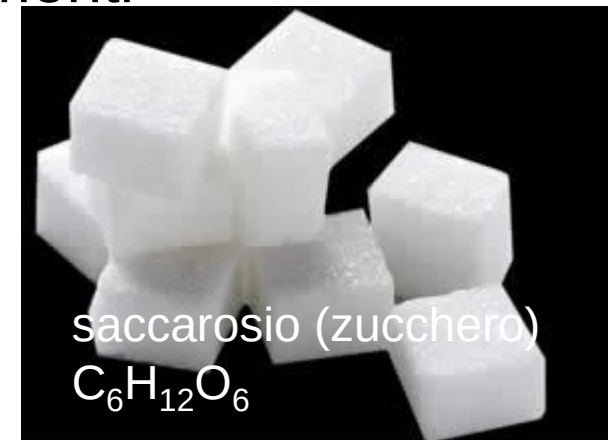
Composti



- I composti derivano dalla combinazione chimica di due o più elementi.



- Un composto si forma mediante una reazione chimica.
- Hanno una composizione fissa (stessa percentuale in massa degli elementi)



Le proprietà dei composto sono molto diverse da quelle degli elementi

Sodio



Na

Cloro



Cl

Cloruro di sodio



NaCl

Miscele eterogenee

insieme di due o più
composti mescolati tra loro, ma tali da conservare ciascuno le proprie caratteristiche,
identità chimica e per questo separabili e distinguibili

- Miscuglio solido: più sostanze solide, esempio la sabbia.
- Sospensione: solidi in liquidi o gas, esempio terra in acqua.
- Emulsione: due o più liquidi non miscibili, esempio acqua e olio.



Alcune sostanze formano miscele omogenee: le soluzioni

- Cosa accade se mescoliamo acqua e zucchero?

L'acqua e lo zucchero formano una soluzione omogenea, cioè le particelle delle due sostanze, pur conservando le loro caratteristiche, formano una miscela in cui non sono più distinguibili l'una dall'altra e non si separano facilmente.



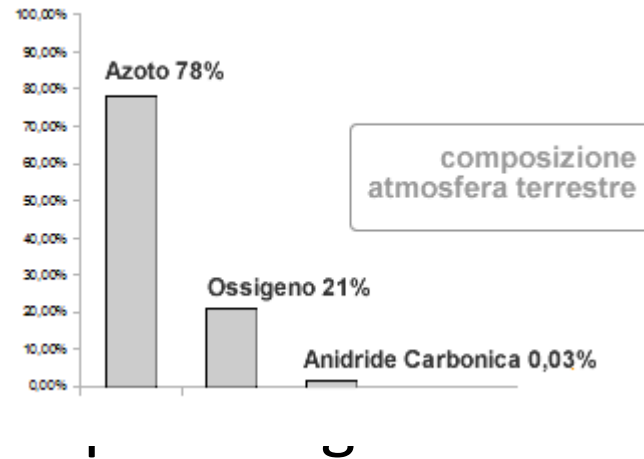
Il solvente e il soluto



- In una soluzione (o miscela omogenea) la sostanza che è presente in maggiore quantità si chiama solvente, mentre quella che si disperde nel solvente, si chiama soluto.
- L'acqua è il solvente più diffuso in natura ed è indispensabile per il funzionamento di tutti gli organismi viventi.

Altri tipi di soluzioni

- Soluzioni gassose: esempio l'aria.



Soluzioni solide: es . , e che.

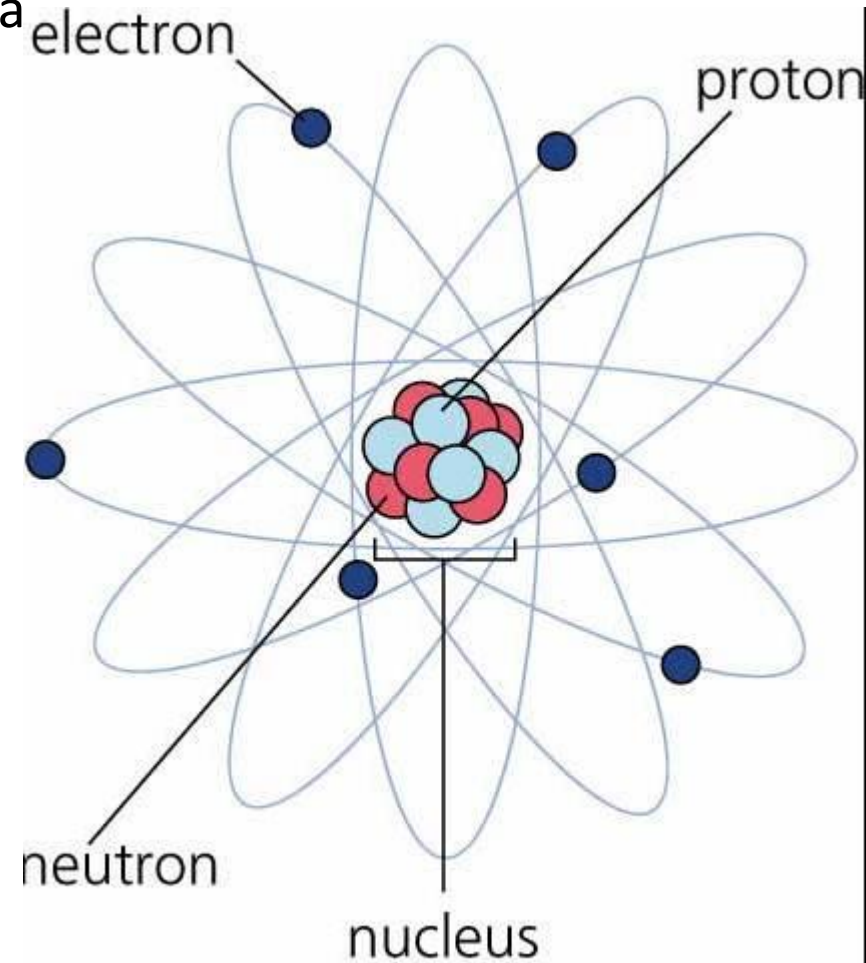
L'acciaio è una lega di ferro e carbonio.

Il bronzo è una lega di rame e stagno.

Una lega è una soluzione di due o più metalli mescolati quando si trovano allo stato fuso e lasciati poi solidificare.

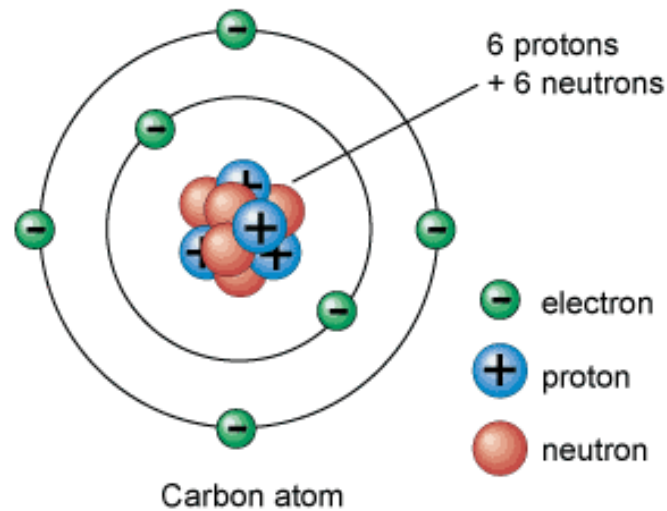
La struttura dell'atomo (modello atomico della materia)

- Atomo...dal greco *atomos* che significa indivisibile...in realtà...
- È composto da tre particelle:
 - elettroni;
 - protoni;
 - neutroni.
- Neutroni e protoni formano il nucleo.



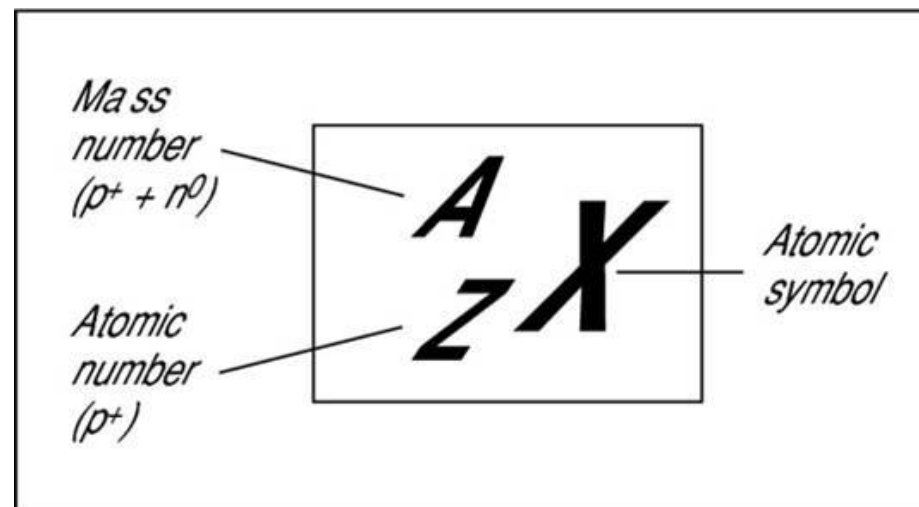
La carica elettrica della materia

- Il neutrone è neutro.
- Il protone è carico positivamente.
- L'elettrone è carico negativamente.



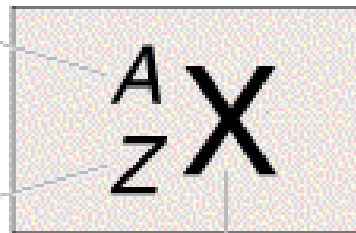
Il numero atomico e di massa

- Il numero atomico di un atomo è il numero dei protoni contenuti nel suo nucleo e si indica con la lettera Z .
- Il numero di massa di un atomo è il numero di protoni e neutroni contenuti nel suo nucleo e si indica con la lettera A .

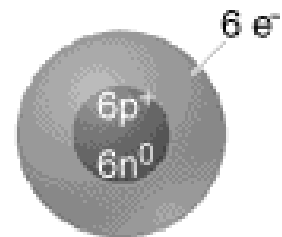


numero
di massa
($p^+ + n^0$)

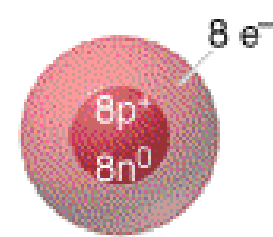
numero
atomico
(p^+)



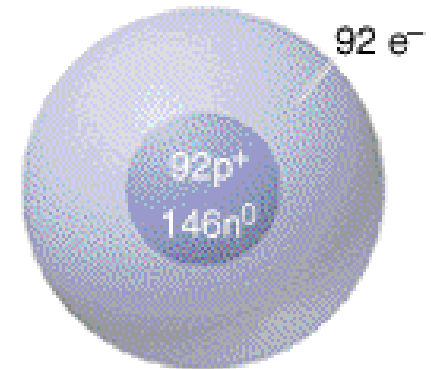
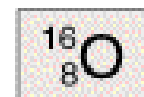
simbolo
chimico



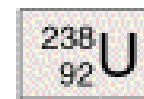
Carbonio-12



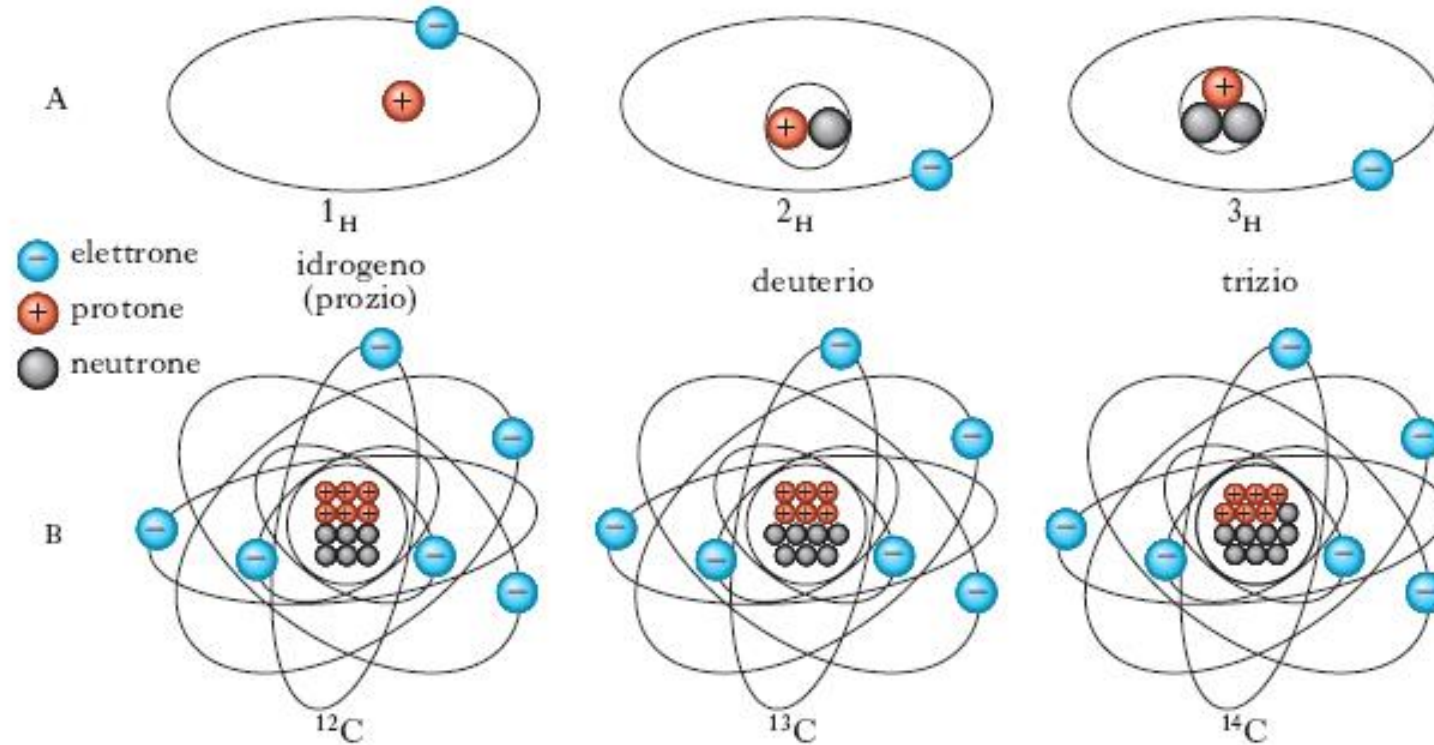
Ossigeno-16



Uranio-238



**ISOTOPI-ugual numero atomico Z
ma diverso numero
di massa (A - perché diverso numero di neutroni)**



Abbondanza isotopica (%)

^1H 99.985

^2H 0.015

^3H tracce

^{12}C 98,89

^{13}C 1.11

^{14}C tracce

^{14}N 99.63

^{15}N 0.36

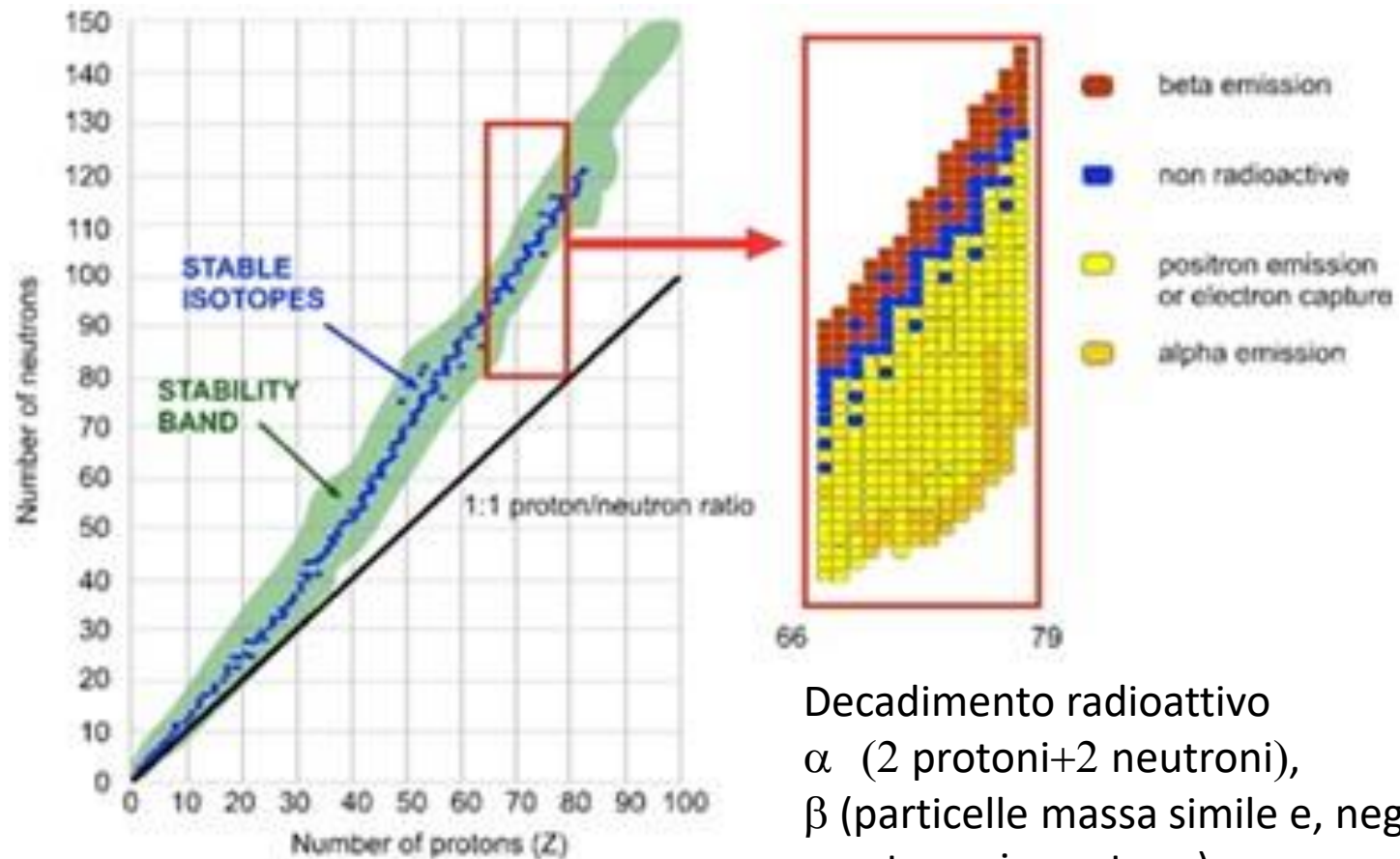
^{16}O 99.76

^{17}O 0.03

^{18}O 0.20

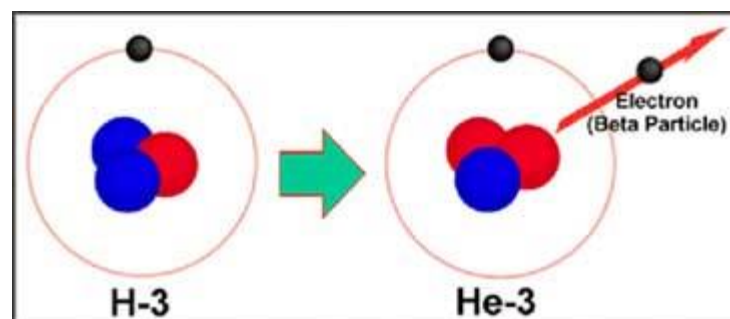
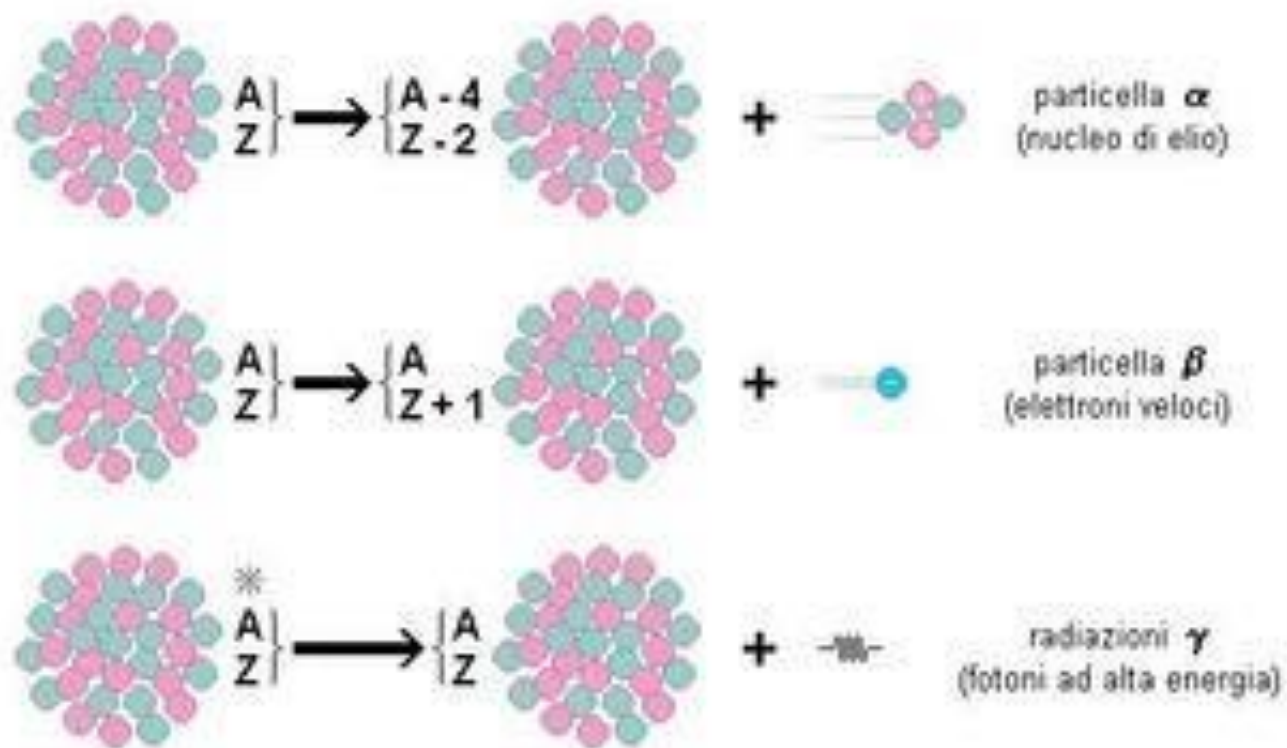
Isotopi stabili ed instabili (267 stabili, 60 instabili)

Banda di stabilità dei nuclidi

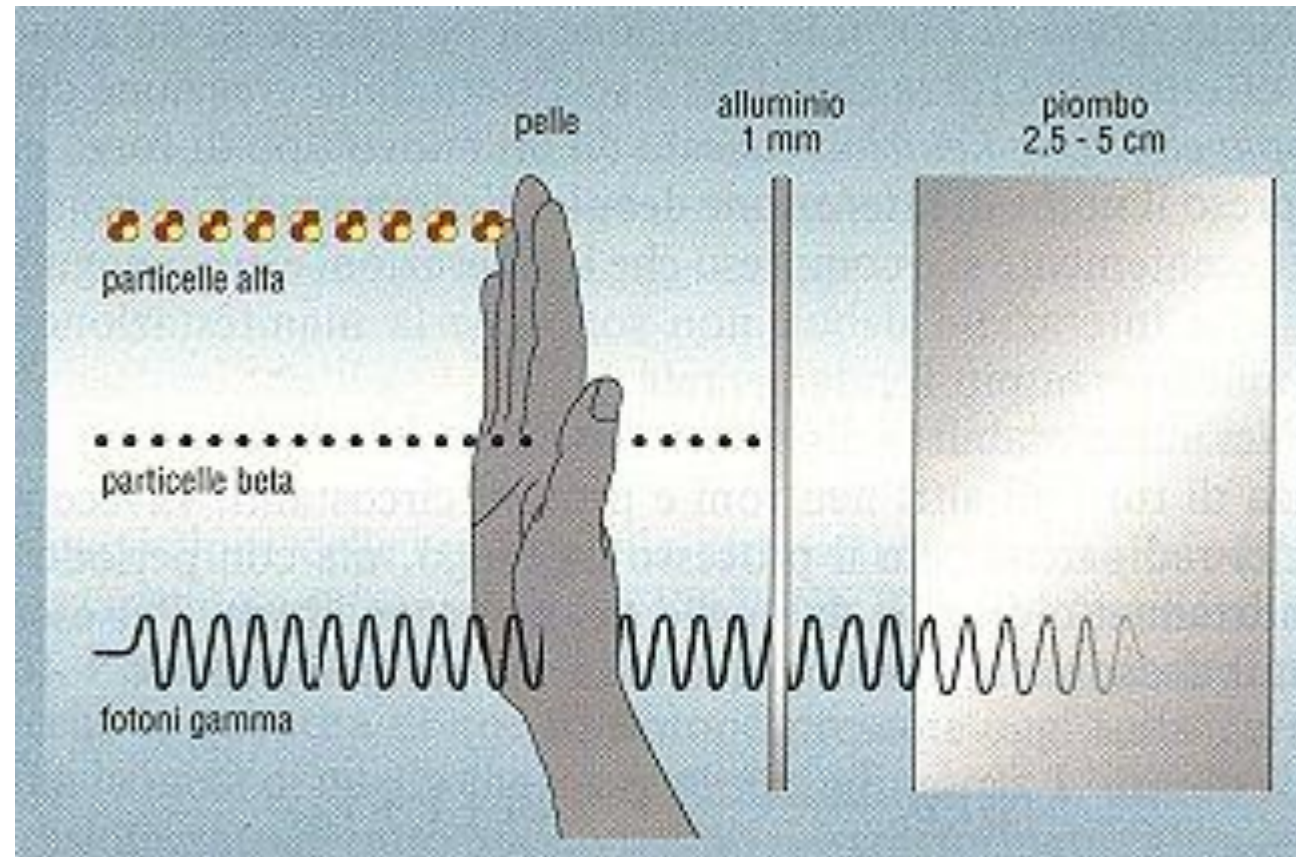


Decadimento radioattivo
 α (2 protoni+2 neutroni),
 β (particelle massa simile e, neg. e pos.,
neutrone in protone)
 γ (radiazioni elettromagnetiche)

Emissioni dei nuclei radioattivi



Potere penetrante delle particelle radioattive



Emivita (o tempo di dimezzamento) di un isotopo radioattivo è definita come il tempo occorrente perché la metà degli atomi di un campione puro dell'isotopo decadano in un altro elemento. L'emivita è una misura della stabilità di un isotopo: più breve è l'emivita, meno stabile è l'atomo

L'emivita dei materiali radioattivi varia da frazioni di secondo per i più instabili, fino a miliardi di anni per quelli che sono solo leggermente instabili

Serie	Isotopo di partenza	Emivita (in anni)	Isotopo stabile finale
radio	uranio-238	$4,47 \times 10^9$	piombo-206
attinio	uranio-235	$7,04 \times 10^8$	piombo-207
torio	torio-232	$1,41 \times 10^{10}$	piombo-208

Massa atomica relativa ed assoluta

- **Massa atomica assoluta** (o peso atomico assoluto) tra 10^{-22} e 10^{-23} gr

Difetto di massa (differenza tra la somma delle masse dei protoni e neutroni e la massa effettiva del nucleo)

- **Unità di misura di massa atomica** (u.m.a).-

1 uma è la massa equivalente alla dodicesima parte della massa del nucleo del $^{12}\text{C} = 1,660538 \cdot 10^{-24}$

- **Massa atomica relativa** = *massa atomica assoluta (g) / $1,660538 \cdot 10^{-24}$ (g)* (peso atomico relativo o peso atomico)

PERIODI

GRUPPI

Periodic Table of the Elements

atomic number atomic weight

14 28.09

Si symbol: Silicon

black solid
blue liquid
red gas
white synthetically prepared
most stable isotope

alkali metals
alkaline earth metals
transitional metals
other metals
nonmetals
noble gases

1 H Hydrogen 1.01	2 He Helium 4.003
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.01
11 Na Sodium 22.99	12 Mg Magnesium 24.31
19 K Potassium 39.10	20 Ca Calcium 40.08
37 Rb Rubidium 85.47	38 Sr Strontium 87.62
55 Cs Cesium 132.91	56 Ba Barium 137.33
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)
21 Sc Scandium 44.96	22 Ti Titanium 47.88
39 Y Yttrium 88.91	40 Zr Zirconium 91.22
57 La Lanthanum 138.91	58 Ce Cerium 140.12
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium (232)
23 V Vanadium 50.94	24 Cr Chromium 51.996
41 Nb Niobium 92.91	42 Mo Molybdenum 95.94
73 Ta Tantalum 180.95	74 W Tungsten 183.85
105 Rf Rutherfordium (261)	106 Db Dubnium (262)
25 Mn Manganese 54.94	26 Fe Iron 55.85
43 Tc Technetium (98)	44 Ru Ruthenium 101.07
75 Re Rhenium 186.21	76 Os Osmium 190.2
107 Bh Bohrium (262)	108 Hs Hassium (265)
27 Co Cobalt 58.93	28 Ni Nickel 58.70
45 Rh Rhodium 102.91	46 Pd Palladium 106.40
77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.09
109 Mt Meitnerium (266)	110 Ds Darmstadtium (271)
29 Cu Copper 63.55	30 Zn Zinc 65.37
47 Ag Silver 107.87	48 Cd Cadmium 112.41
79 Au Gold 196.97	80 Hg Mercury 200.59
111 Rg Roentgenium (272)	112 Cn Copernicium (277)
31 Ga Gallium 69.72	32 Ge Germanium 72.59
49 In Indium 114.82	50 Sn Tin 118.69
81 Tl Thallium 204.37	82 Pb Lead 207.19
113 Nh Nihonium (278)	114 Fl Flerovium (285)
33 P Phosphorus 30.97	34 S Sulfur 32.06
51 Sb Antimony 121.75	52 Te Tellurium 127.60
83 Bi Bismuth 208.98	84 Po Polonium (209)
115 Mc Moscovium (288)	116 Lv Livermorium (293)
35 Cl Chlorine 35.45	36 Ar Argon 39.95
53 I Iodine 126.90	54 Xe Xenon 131.30
85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)
117 Ts Tennessine (294)	118 Og Oganesson (294)

Copyright: © 2009 Oxford Labs

Gruppo: atomi di uguale comportamento chimico

Tavola Periodica degli Elementi

1 1A		Nuovo Originale																18 VIIIA																			
1 H Idrogeno 1.00784		2 He Elio 4.002602																																			
3 Li Litio 6.941		4 Be Berillio 9.012182																		5 B Boro 10.811		6 C Carbonio 12.0107		7 N Azoto 14.00674		8 O Ossigeno 15.9994		9 F Fluoro 18.9984032		10 Ne Neon 20.1797							
11 Na Sodio 22.989770		12 Mg Magnesio 24.3050		3 IIIB		4 IVB		5 VB		6 VIB		7 VIIB		8		9 VIII		10		11 IB		12 IIB		13 IIIA		14 IVA		15 VA		16 VIA		17 VIIA		18 VIIIA			
19 K Potassio 39.0983		20 Ca Calcio 40.078		21 Sc Scandio 44.955910		22 Ti Titanio 47.887		23 V Vanadio 50.9415		24 Cr Cromo 51.9961		25 Mn Manganese 54.938049		26 Fe Ferro 55.8457		27 Co Cobalto 58.933200		28 Ni Nichel 58.6934		29 Cu Rame 63.546		30 Zn Zinco 65.409		31 Ga Gallio 69.723		32 Ge Germanio 72.64		33 As Arsenico 74.92160		34 Se Selenio 78.96		35 Br Bromo 79.904		36 Kr Kripton 83.798			
37 Rb Rubidio 85.4678		38 Sr Stronzio 87.62		39 Y Ittrio 88.90585		40 Zr Zirconio 91.224		41 Nb Niobio 92.90638		42 Mo Molibdeno 95.94		43 Tc Tecnezio (98)		44 Ru Rutenio 101.07		45 Rh Rodio 102.90550		46 Pd Palladio 106.42		47 Ag Argento 107.8682		48 Cd Cadmio 112.411		49 In Indio 114.818		50 Sn Stagno 118.710		51 Sb Antimonio 121.760		52 Te Tellurio 127.60		53 I Iodio 126.90447		54 Xe Xeno 131.293			
55 Cs Cesio 132.90545		56 Ba Bario 137.327		57 to 71		72 Hf Hafnio 178.49		73 Ta Tantalio 180.9479		74 W Tungsteno 183.84		75 Re Renio 186.207		76 Os Osmio 190.23		77 Ir Iridio 192.217		78 Pt Platino 195.078		79 Au Oro 196.96655		80 Hg Mercurio 200.59		81 Tl Tallio 204.3833		82 Pb Piombo 207.2		83 Bi Bismuto 208.98038		84 Po Polonio (209)		85 At Astato (210)		86 Rn Radon (222)			
87 Fr Francio (223)		88 Ra Radio (226)		89 to 103		104 Rf Rutherfordio (261)		105 Db Dubnio (262)		106 Sg Seaborgio (266)		107 Bh Bohrio (264)		108 Hs Hassio (269)		109 Mt Meitnerio (268)		110 Ds Darmstadtio (271)		111 Rg Roentgenio (272)		112 Uub Ununbio (285)		113 Uut Ununtrio (284)		114 Uuq Ununquadio (289)		115 Uup Ununpentio (288)		116 Uuh Ununhexio (292)		117 Uus Ununseptio (294)		118 Uuo Ununoctium (294)			

Le masse atomiche tra sono quelle degli isotopi più stabili o più comuni.

Design Copyright © 1997 Michael Dayah (michael@dayah.com), <http://www.dayah.com/periodic/>

Nota: il sotto gruppo dei numeri 1-18 è stato adottato nel 1984 dalla International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). I nomi degli elementi 112-118 sono gli equivalenti latini di quei nomi.

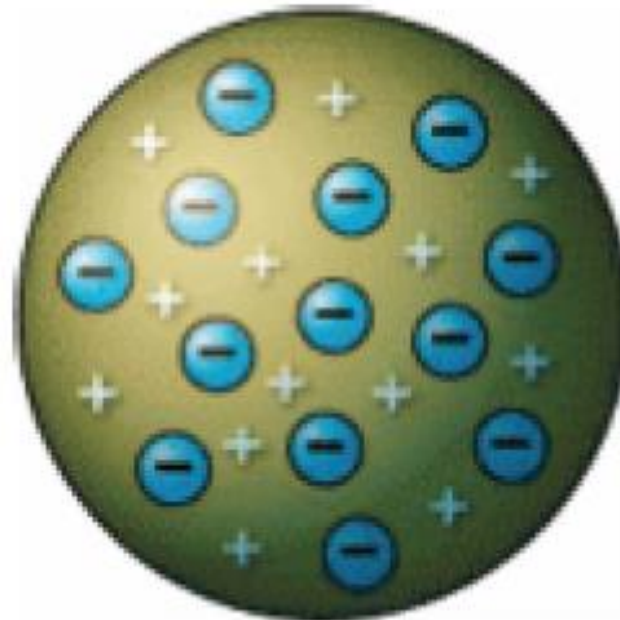
57 La Lantanio 138.9055	58 Ce Cerio 140.116	59 Pr Praseodimio 140.90765	60 Nd Neodimio 144.24	61 Pm Promezio (145)	62 Sm Samario 150.36	63 Eu Europio 151.964	64 Gd Gadolinio 157.25	65 Tb Terbio 158.92534	66 Dy Disprosio 162.500	67 Ho Olmio 164.93032	68 Er Erbio 167.259	69 Tm Tulio 168.93421	70 Yb Itterbio 173.04	71 Lu Lutezio 174.967
89 Ac Attinio (227)	90 Th Torio 232.0381	91 Pa Protoattinio 231.03588	92 U Uranio 238.02891	93 Np Nettunio (237)	94 Pu Plutonio (244)	95 Am Americio (243)	96 Cm Curio (247)	97 Bk Berkelio (247)	98 Cf Californio (251)	99 Es Einsteinio (252)	100 Fm Fermio (257)	101 Md Mendelevio (258)	102 No Nobelio (259)	103 Lr Laurenzio (262)

Struttura dell'atomo

- Thomson (1904)



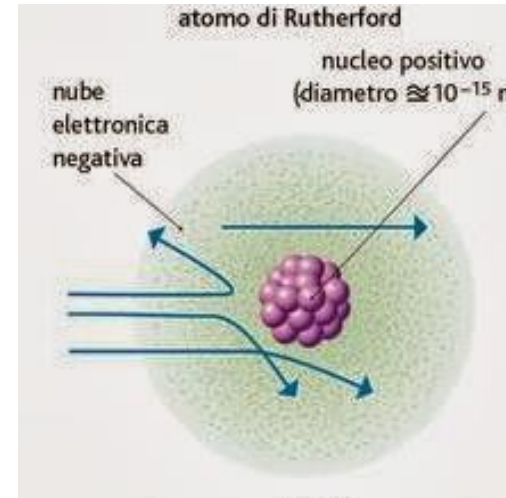
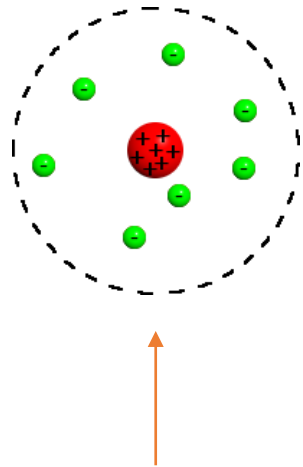
Joseph John Thomson



Thomson atom model

Struttura dell'atomo

- Ruolo chiave gli studi di Rutherford (1919-1920)
 - ✓ fasci di particelle α che bombardano una lastra sottile di oro



Atomo di Rutherford: tutta la carica + e la massa concentrata in una zona piccolissima (nucleo), resto del volume spazio vuoto in cui si muovono elettroni

Teoria quantistica: Planck

Oggetto: studio delle leggi che regolano gli scambi di energia tra corpi di dimensione atomica e subatomica

Basata sul concetto che quando nel corso di un evento due corpo si scambiano energia questa non può essere mai inferiore ad una certa quantità minima (QUANTO) e pari a suoi multipli.

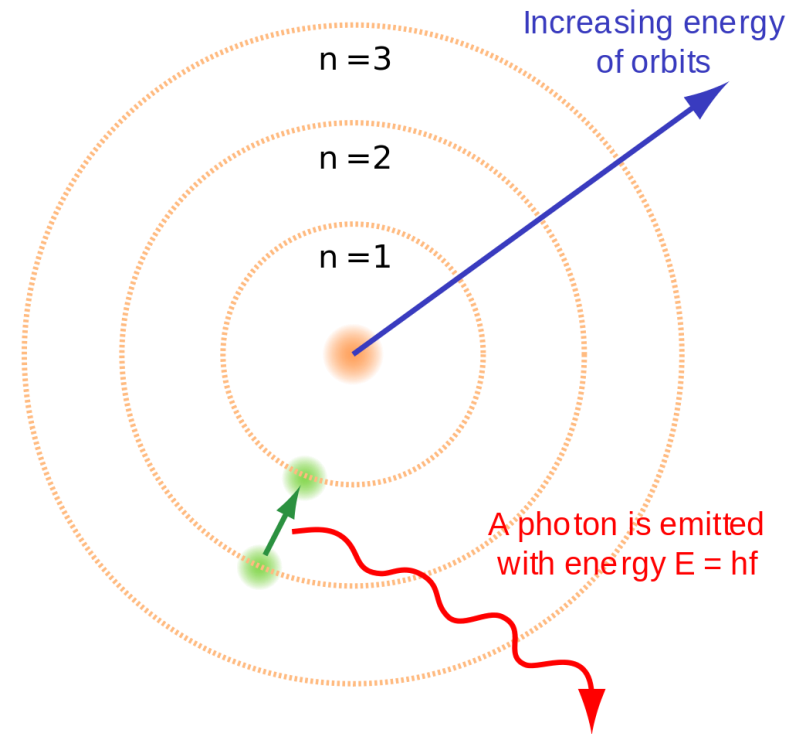
$$\Delta E = h\nu; 2 h\nu; 3 h\nu \dots n h\nu$$

h costante di Planck $6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$

Modello atomico di Bohr

(introduzione concetto della natura quantica dell'energia degli elettroni nell'atomo)

- ✓ Orbite circolari designate da numero quantico principale (n)
- ✓ Ad ogni orbita corrisponde un determinato valore di energia
- ✓ Ammessi solo determinati valori di energia e quindi può muoversi solo in determinate orbite- stato energetico permesso
- ✓ In assenza di energia radiante gli elettroni non si possono muovere dal loro orbitale (stato fondamentale e stato eccitato)
- ✓ Energia radiante: passaggio da un orbitale ad un altro solo se $\Delta E = h\nu$



Il passaggio di un elettrone da un orbita all'altra è accompagnato dal rilascio o assorbimento di una quantità discreta e ben definita di energia (quanti di energia).

Spettro di ASSORBIMENTO dell'idrogeno



Oggi atomo descritto dalla **meccanica ondulatoria o quanto-meccanica**

Natura dualistica dell'energia radiante: a seconda delle circostanze sperimentali l'energia radiante può esibire carattere ondulatorio (onda elettromagnetica) o corpuscolare (fasci di fotoni).

De Broglie- esteso il concetto anche all'atomo

Se energia si può comportare come una particella allora anche una particella può avere proprietà ondulatorie.

AD OGNI ELETTRONE IN MOTO SI PUO' ASSOCIARE UNA LUNGHEZZA D'ONDA
(onde di materia)

$$\lambda = h/mv$$

mv momento o quantità di moto

Dopo pochi anni proprietà ondulatorie dell'elettrone dimostrate sperimentalmente

Il principio di indeterminazione (Heisengerg)

Non è intrinsecamente possibile conoscere con il medesimo grado di precisione la quantità di moto della particella e la sua posizione nello spazio.

Non è realistico immaginare gli elettroni ruotanti attorno al nucleo in traiettorie circolari.

Ipotesi di De Broglie e principio di indeterminazione hanno creato le basi per la moderna concezione della struttura dell'atomo

Teoria quanto meccanica atomo

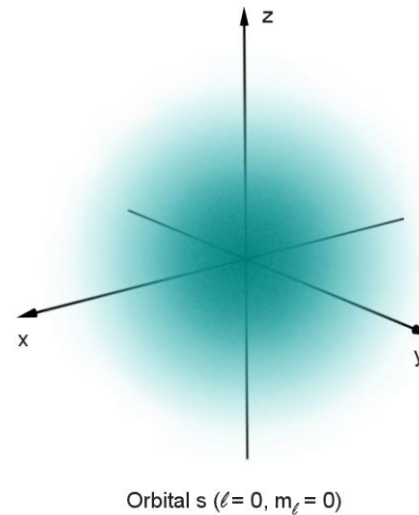
In meccanica quantistica l'**equazione di Schrödinger** è un'equazione differenziale con infinite soluzioni. Le soluzioni sono dette **funzioni d'onda ψ** .

La funzione d'onda informa circa la posizione dell'elettrone nello spazio quando esso si trova in un determinato stato di energia.

Il quadrato di ψ esprime la probabilità che l'elettrone si trovi in una determinata regione dello spazio perinucleare.

Un **orbitale atomico** corrisponde a una zona dello spazio contrassegnata da un valore di energia definita attorno al nucleo dove l'elettrone può trovarsi con elevata probabilità.

Visivamente, tale orbitale può essere meglio rappresentato mediante una nuvola la cui intensità è proporzionale alla *densità di probabilità* di trovare l'elettrone in quel punto e con forme tali da comprendere il 95% della probabilità elettronica



Ogni orbitale possiede un certo contenuto di energia e una forma e una orientazione caratteristica caratteristica

La dimensione, l'orientamento e la forma dell'orbitale sono descritti dai **numeri quantici**.

I numeri quantici sono tre:

- numero quantico principale;
- numero quantico secondario;
- numero quantico magnetico.

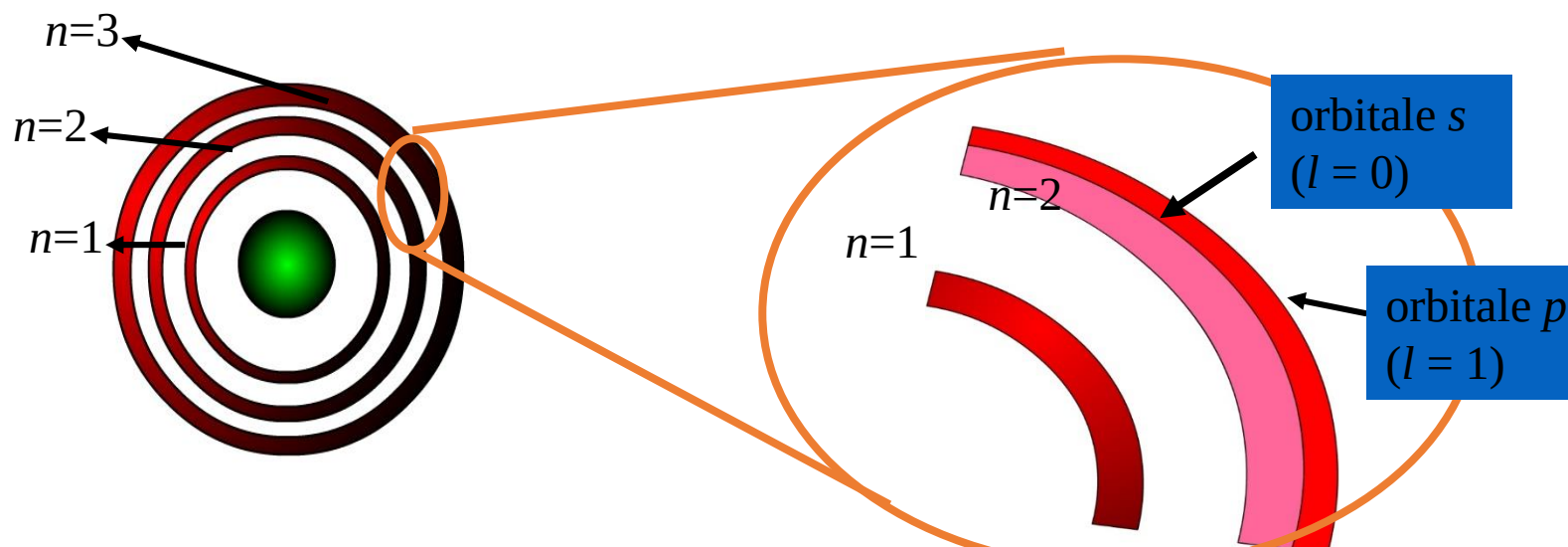
Un quarto numero quantico

- numero quantico di spin

descrive invece una proprietà dell'elettrone.

Numeri Quantici

- **Numero Quantico Principale n**
(orbitali con stesso n sono un livello elettronico)
- Rappresenta i livelli energetici principali
- $n = 1, \dots, 7$
- Descrive la distanza dal nucleo
- Maggiore è n , maggiore è l'energia
- **Numero Quantico Angolare l**
- Rappresenta i livelli sub-energetici
- $l = 0, \dots, n-1$
- Descrive la geometria orbitale
- Rappresentato dalle lettere s, p, d e f .



Se $n = 1$

$l = 0 \rightarrow$ orbitale di tipo s

Ciò significa che nel primo livello di energia vi è un solo orbitale che è di tipo sferico, indicata con $l = 0$, o anche con la lettera "s".

Se $n = 3$

$l = 0 \rightarrow$ orbitale di tipo s

$l = 1 \rightarrow$ orbitale di tipo p

$l = 2 \rightarrow$ orbitale di tipo d

Se $n = 4$

$l = 0 \rightarrow$ orbitale di tipo s

$l = 1 \rightarrow$ orbitale di tipo p

$l = 2 \rightarrow$ orbitale di tipo d

$l = 3 \rightarrow$ orbitale di tipo f

A seconda del valore assunto dal numero quantico secondario l , l'orbitale assume una determinata forma.

Per $l = 0$ l'orbitale è sferico (orbitale s). Al centro della sfera c'è il nucleo.

Per $l = 1$ l'orbitale è a due lobi (orbitale p). Il nucleo dell'atomo sta al centro dei due lobi.

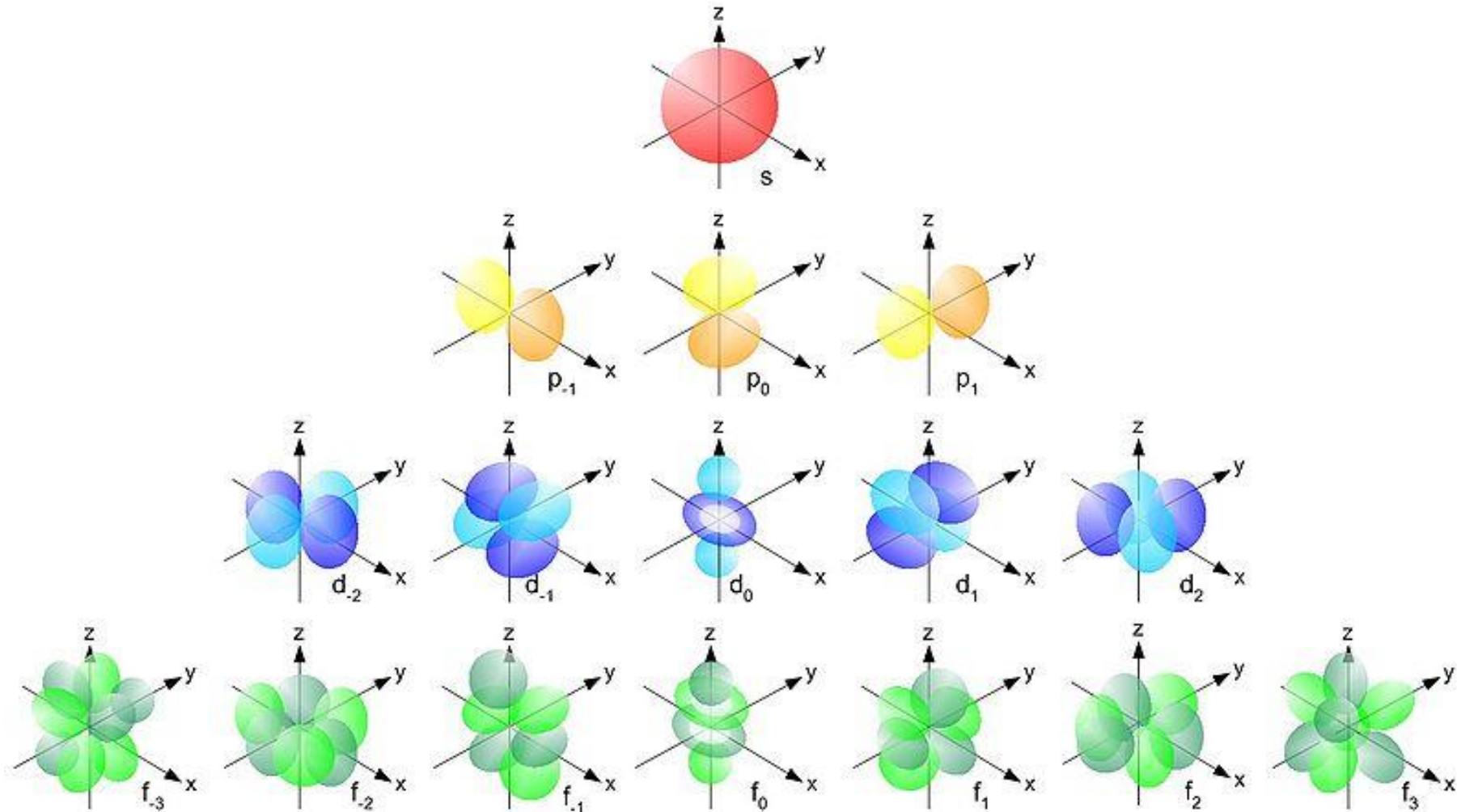
Per $l = 2$ l'orbitale è a quattro lobi (orbitale d). Il nucleo dell'atomo sta al centro dei quattro lobi.

Per $l = 3$ l'orbitale è a otto lobi (orbitale f).

Numero quantico magnetico m_l

$(-l \dots 0 \dots l)$

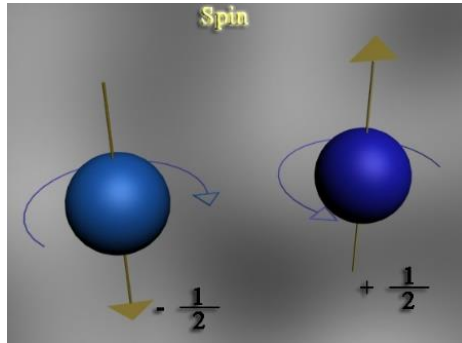
Numero di orientazioni di un orbitale nello spazio-ORBITALI DEGENERI



Numeri quantici e orbitali

	$s (l=0)$	$p (l=1)$			$d (l=2)$					$f (l=3)$						
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=\pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_{z(x^2-y^2)}$	$f_{x(x^2-3y^2)}$	$f_{y(3x^2-y^2)}$
$n=1$																
$n=2$																
$n=3$																
$n=4$																
$n=5$										...	...	...	...	...	...	...
$n=6$					...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$n=7$		...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

Numero quantico di spin (m_s)



Il numero quantico di spin è il quarto numero quantico. Esso riguarda l'elettrone, viene indicato con la lettera m_s e può assumere soltanto due valori: $m_s = +\frac{1}{2}$ e $m_s = -\frac{1}{2}$.

Nel novembre del 1925 due fisici olandesi, G.E. Uhlenbeck e S.A.

Goudsmit, formularono l'ipotesi che l'elettrone avesse la possibilità di ruotare attorno al proprio asse proprio come fa la Terra.

Come si distribuiscono gli elettroni negli orbitali ?

Configurazione elettronica

Principio di esclusione di Pauli: in un atomo di un elemento, due elettroni non possono avere la stessa serie di quattro numeri quantici. **Ciascun orbitale può ospitare al massimo due elettroni con spin opposti**

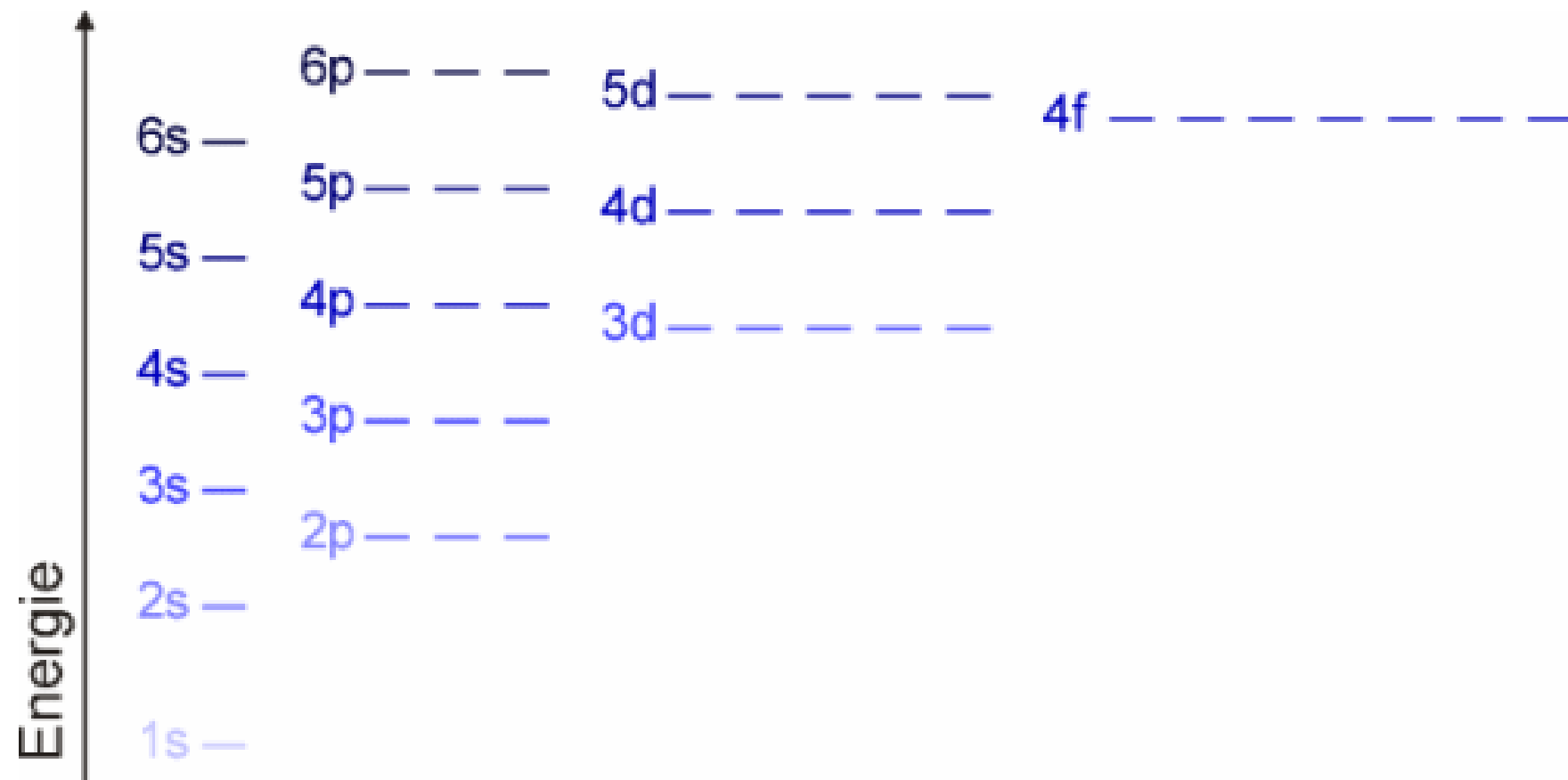
Principio di Hund: orbitali degeneri occupati da un solo elettrone finché tutti non contengano almeno un elettrone; in questo caso hanno tutti spin paralleli

Configurazione elettronica: come sono distribuiti gli elettroni nei vari livelli, sottolivelli, ed orbitali

Come si rappresenta la configurazione elettronica?

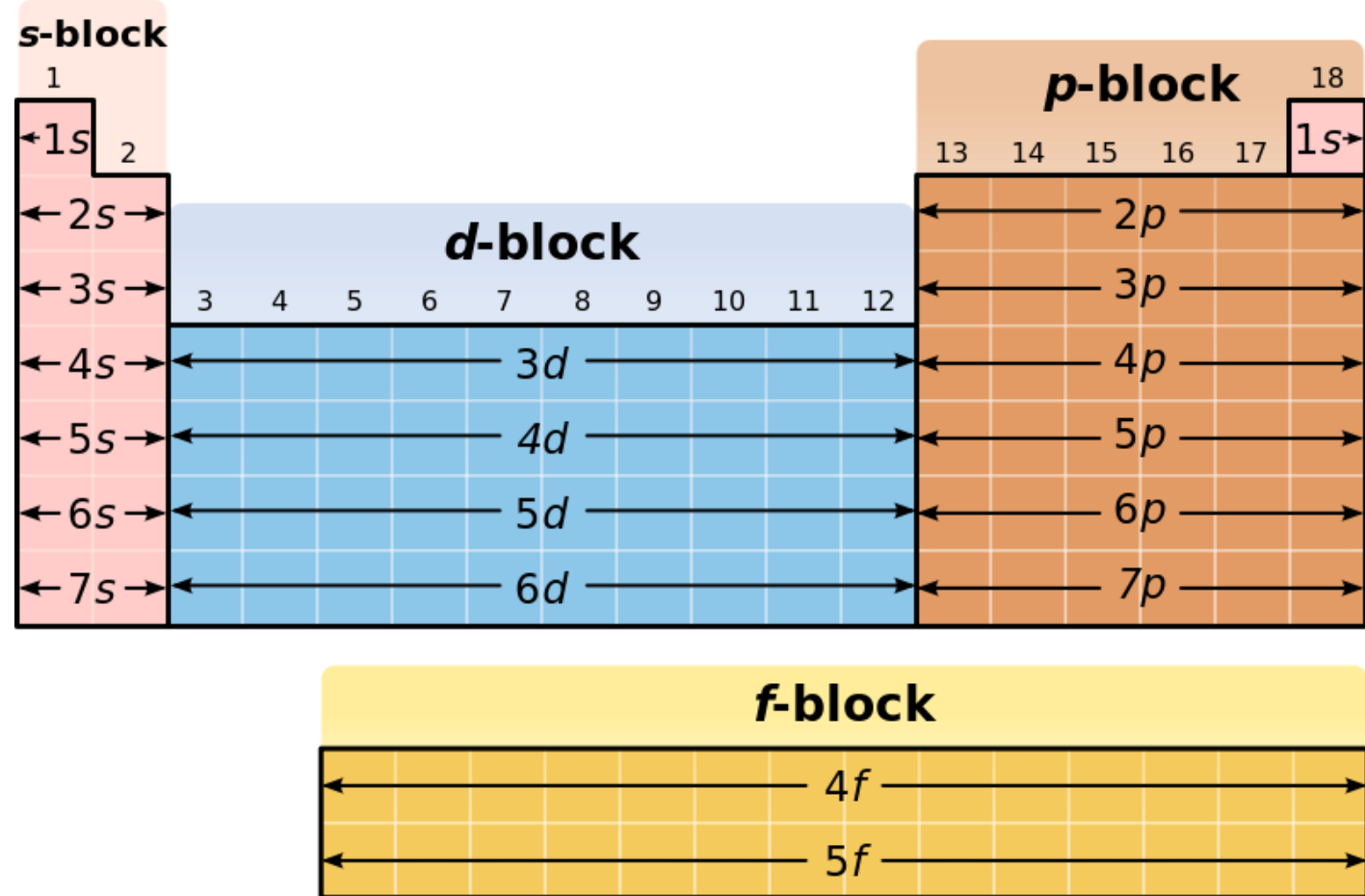
9 elettroni (Fluoro-F) $1s^2 2s^2 2p^5$ 10 elettroni (Neon-Ne) $1s^2 2s^2 2p^6$

11 elettroni (Sodio-Na) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$



Group number																		18			
		1															18				
		1A															8A				
Periods	1	1 H $1s^1$	2											13	14	15	16	17	2		
		2A											3A	4A	5A	6A	7A	$1s^2$			
	2	3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$											5 B $2s^22p^1$	6 C $2s^22p^2$	7 N $2s^22p^3$	8 O $2s^22p^4$	9 F $2s^22p^5$	10 Ne $2s^22p^6$		
	3	11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B		10 10B	11 1B	12 2B	13 Al $3s^23p^1$	14 Si $3s^23p^2$	15 P $3s^23p^3$	16 S $3s^23p^4$	17 Cl $3s^23p^5$	18 Ar $3s^23p^6$		
	4	19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $3d^14s^2$	22 Ti $3d^24s^2$	23 V $3d^34s^2$	24 Cr $3d^54s^1$	25 Mn $3d^54s^2$	26 Fe $3d^64s^2$	27 Co $3d^74s^2$	28 Ni $3d^84s^2$	29 Cu $3d^{10}4s^1$	30 Zn $3d^{10}4s^2$	31 Ga $4s^24p^1$	32 Ge $4s^24p^2$	33 As $4s^24p^3$	34 Se $4s^24p^4$	35 Br $4s^24p^5$	36 Kr $4s^24p^6$		
	5	37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $4d^15s^2$	40 Zr $4d^25s^2$	41 Nb $4d^45s^1$	42 Mo $4d^55s^1$	43 Tc $4d^55s^2$	44 Ru $4d^75s^1$	45 Rh $4d^85s^1$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $4d^{10}5s^1$	48 Cd $4d^{10}5s^2$	49 In $5s^25p^1$	50 Sn $5s^25p^2$	51 Sb $5s^25p^3$	52 Te $5s^25p^4$	53 I $5s^25p^5$	54 Xe $5s^25p^6$		
	6	55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	57 *La $5d^16s^2$	72 Hf $5d^26s^2$	73 Ta $5d^36s^2$	74 W $5d^46s^2$	75 Re $5d^56s^2$	76 Os $5d^66s^2$	77 Ir $5d^76s^2$	78 Pt $5d^96s^1$	79 Au $5d^{10}6s^1$	80 Hg $5d^{10}6s^2$	81 Tl $6s^26p^1$	82 Pb $6s^26p^2$	83 Bi $6s^26p^3$	84 Po $6s^26p^4$	85 At $6s^26p^5$	86 Rn $6s^26p^6$		
7	87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	89 †Ac $6d^17s^2$	104 Rf $6d^27s^2$	105 Db $6d^37s^2$	106 Sg $6d^47s^2$	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 (271.15)	111 (272.15)	112 (277)		114 (285)		116 (289)					
				s-block elements d-block elements												p-block elements f-block elements					

Lanthanides	58 Ce $4f^26s^2$	59 Pr $4f^36s^2$	60 Nd $4f^46s^2$	61 Pm $4f^56s^2$	62 Sm $4f^66s^2$	63 Eu $4f^76s^2$	64 Gd $4f^75d^16s^2$	65 Tb $4f^96s^2$	66 Dy $4f^{10}6s^2$	67 Ho $4f^{11}6s^2$	68 Er $4f^{12}6s^2$	69 Tm $4f^{13}6s^2$	70 Yb $4f^{14}6s^2$	71 Lu $4f^{14}5d^16s^2$
Actinides	90 Th $6d^27s^2$	91 Pa $5f^26d^17s^2$	92 U $5f^36d^17s^2$	93 Np $5f^46d^17s^2$	94 Pu $5f^67s^2$	95 Am $5f^77s^2$	96 Cm $5f^76d^17s^2$	97 Bk $5f^97s^2$	98 Cf $5f^{10}7s^2$	99 Es $5f^{11}7s^2$	100 Fm $5f^{12}7s^2$	101 Md $5f^{13}7s^2$	102 No $5f^{14}7s^2$	103 Lr $5f^{14}6d^17s^2$



Gli elementi dei gruppi 1 e 2 riempiono un sottolivello s

Gli elementi dei gruppi dal 13 al 18 riempiono i sottolivelli p

Gli elementi dei gruppi 3 al 12 riempiono i sottolivelli d

Gli elementi nel blocco separato presentano occupati i sottolivelli f

Le proprietà chimiche degli elementi dipendono dal numero di elettroni nel guscio esterno.

Sono questi elettroni ad essere coinvolti nelle reazioni chimiche.

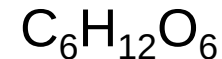
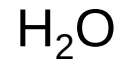
Tutti gli elementi di uno stesso gruppo hanno le stesse proprietà chimiche perché hanno lo stesso numero di elettroni nel guscio più esterno.

MOLECOLE

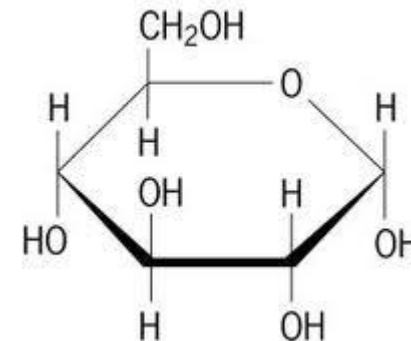
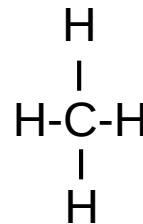
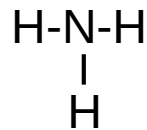
Formate dall'associazione di due o più atomi, tenuti insieme da legami covalenti, che consistono nella condivisione di elettroni. Le molecole di una sostanza sono tutte uguali fra loro.

- Una formula chimica indica quali e quanti atomi sono presenti in una molecola.
- I simboli degli elementi si scrivono uno di seguito all'altro; accanto ai simboli, al pedice, si scrive il numero di atomi di ogni tipo; 1 è sottinteso.

Formule molecolari (brute)



Formule strutturali



Il legame covalente e la regola dell'ottetto (di Lewis)

I gas nobili hanno massima stabilità e sono caratterizzati dal possedere 8 elettroni
Nello strato più esterno cioè configurazione s^2p^6

Struttura di Lewis
(elettroni di valenza)

Lewis Periodic Table Showing Outer Shell (Valence) Electrons

1	2	3	4	5	6	7	8
H•							•He•
Li•	•Be•	•B•	•C•	•N•	•O•	•F•	•Ne•
Na•	•Mg•	•Al•	•Si•	•P•	•S•	•Cl•	•Ar•
K•	•Ca•	•Ga•	•Ge•	•As•	•Se•	•Br•	•Kr•
Rb•	•Sr•	•In•	•Sn•	•Sb•	•Te•	•I•	•Xe•
Cs•	•Ba•						

Regola dell'otteto: ogni atomo tende ad acquistare, perdere o mettere in compartecipazione elettroni fino a raggiungere una condizione di stabilità corrispondente ad una configurazione elettronica esterna costituita da otto elettroni, uguale a quella del gas nobile più vicino nella tavola periodica

La regola dell'otteto permette di prevedere la reattività chimica di un elemento sulla base della sua posizione nella tavola periodica.

Group number																			
		1															18		
		1A															8A		
Periods	1	1 H 1s ¹	2											13	14	15	16	17	2
			2A											3A	4A	5A	6A	7A	He 1s ²
	2	3 Li 2s ¹	4 Be 2s ²											5	6	7	8	9	10
														B 2s ² 2p ¹	C 2s ² 2p ²	N 2s ² 2p ³	O 2s ² 2p ⁴	F 2s ² 2p ⁵	Ne 2s ² 2p ⁶
	3	11 Na 3s ¹	12 Mg 3s ²	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
				3B	4B	5B	6B	7B	8B			1B	2B	Al 3s ² 3p ¹	Si 3s ² 3p ²	P 3s ² 3p ³	S 3s ² 3p ⁴	Cl 3s ² 3p ⁵	Ar 3s ² 3p ⁶
	4	19 K 4s ¹	20 Ca 4s ²	21 Sc 3d ¹ 4s ²	22 Ti 3d ² 4s ²	23 V 3d ³ 4s ²	24 Cr 3d ⁵ 4s ¹	25 Mn 3d ⁵ 4s ²	26 Fe 3d ⁶ 4s ²	27 Co 3d ⁷ 4s ²	28 Ni 3d ⁸ 4s ²	29 Cu 3d ¹⁰ 4s ¹	30 Zn 3d ¹⁰ 4s ²	31 Ga 4s ² 4p ¹	32 Ge 4s ² 4p ²	33 As 4s ² 4p ³	34 Se 4s ² 4p ⁴	35 Br 4s ² 4p ⁵	36 Kr 4s ² 4p ⁶
5	37 Rb 5s ¹	38 Sr 5s ²	39 Y 4d ¹ 5s ²	40 Zr 4d ² 5s ²	41 Nb 4d ⁴ 5s ¹	42 Mo 4d ⁵ 5s ¹	43 Tc 4d ⁵ 5s ²	44 Ru 4d ⁷ 5s ¹	45 Rh 4d ⁸ 5s ¹	46 Pd 4d ¹⁰	47 Ag 4d ¹⁰ 5s ¹	48 Cd 4d ¹⁰ 5s ²	49 In 5s ² 5p ¹	50 Sn 5s ² 5p ²	51 Sb 5s ² 5p ³	52 Te 5s ² 5p ⁴	53 I 5s ² 5p ⁵	54 Xe 5s ² 5p ⁶	
6	55 Cs 6s ¹	56 Ba 6s ²	57 *La 5d ¹ 6s ²	72 Hf 5d ² 6s ²	73 Ta 5d ³ 6s ²	74 W 5d ⁴ 6s ²	75 Re 5d ⁵ 6s ²	76 Os 5d ⁶ 6s ²	77 Ir 5d ⁷ 6s ²	78 Pt 5d ⁹ 6s ¹	79 Au 5d ¹⁰ 6s ¹	80 Hg 5d ¹⁰ 6s ²	81 Tl 6s ² 6p ¹	82 Pb 6s ² 6p ²	83 Bi 6s ² 6p ³	84 Po 6s ² 6p ⁴	85 At 6s ² 6p ⁵	86 Rn 6s ² 6p ⁶	
7	87 Fr 7s ¹	88 Ra 7s ²	89 †Ac 6d ¹ 7s ²	104 Rf 6d ² 7s ²	105 Db 6d ³ 7s ²	106 Sg 6d ⁴ 7s ²	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 (271.15)	111 (272.15)	112 (277)		114 (285)		116 (289)			

Lanthanides

58 Ce 4f ² 6s ²	59 Pr 4f ³ 6s ²	60 Nd 4f ⁴ 6s ²	61 Pm 4f ⁵ 6s ²	62 Sm 4f ⁶ 6s ²	63 Eu 4f ⁷ 6s ²	64 Gd 4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	65 Tb 4f ⁹ 6s ²	66 Dy 4f ¹⁰ 6s ²	67 Ho 4f ¹¹ 6s ²	68 Er 4f ¹² 6s ²	69 Tm 4f ¹³ 6s ²	70 Yb 4f ¹⁴ 6s ²	71 Lu 4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²
--	--	--	--	--	--	--	--	---	---	---	---	---	---

Actinides

90 Th 6d ² 7s ²	91 Pa 5f ² 6d ¹ 7s ²	92 U 5f ³ 6d ¹ 7s ²	93 Np 5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	94 Pu 5f ⁶ 7s ²	95 Am 5f ⁷ 7s ²	96 Cm 5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	97 Bk 5f ⁹ 7s ²	98 Cf 5f ¹⁰ 7s ²	99 Es 5f ¹¹ 7s ²	100 Fm 5f ¹² 7s ²	101 Md 5f ¹³ 7s ²	102 No 5f ¹⁴ 7s ²	103 Lr 5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²
--	--	---	--	--	--	--	--	---	---	--	--	--	--

Li $1s^2 2s^1$ per raggiungere la configurazione dell'He
perde l'elettrone più esterno (in catione)

Be $1s^2 2s^2$ perde 2 elettroni (in catione bivalente)

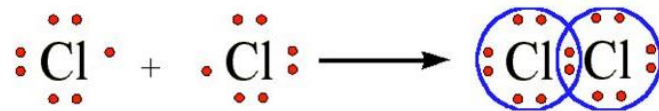
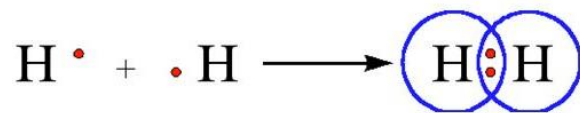
F $1s^2 2s^2 p^5$ ha un solo elettrone in meno rispetto al gas
nobile Neon ($1s^2 2s^2 p^6$) tenderà o ad acquistare un elettrone
oppure a dividerne il suo con un altro

Na $1s^2 2s^2 p^6 3s^1$ un elettrone in più rispetto gas nobile Neon
forte tendenza a perdere due elettroni ; trasformandosi in
catione

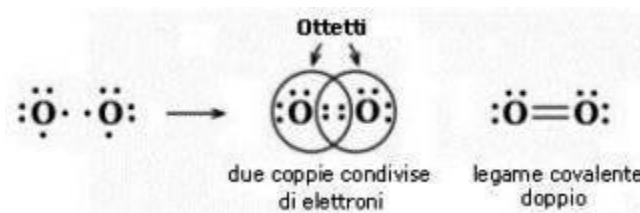
O $1s^2 2s^2 p^4$ ha due elettroni in meno rispetto al gas nobile
Neon tenderà o ad acquistare due elettroni oppure a
dividerne due.

Cl $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^5$ ha un solo elettrone in meno rispetto al gas nobile Argon ($1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^6$) tenderà o ad acquistare un elettrone (ione positivo monovalente) oppure a dividerne il suo con un altro

C $1s^2 2s^2 p^2$ gli mancano 4 elettroni per raggiungere la configurazione del gas nobile che lo segue il neon quindi condivisione di quattro elettroni con altri atomi



Covalente puro
(apolare)

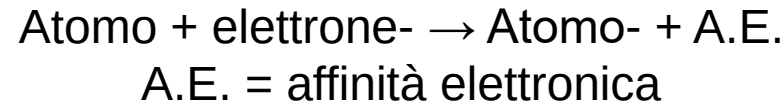


Legame covalente polare: si forma tra atomi diversi con **differente elettronegatività**



indica il potere di attrazione di un atomo nei confronti degli elettroni del legame con un altro atomo (scala di Pauling, definito una scala arbitraria assegnando il valore minimo (0,7) al francio e massimo (4) al fluoro). Dipende dall'affinità elettronica e dall'energia di ionizzazione

L'affinità elettronica viene definita come l'energia, espressa in Kcal/mol (o KJ/mol), liberata da una mole di atomi neutri allo stato gassoso quando si trasforma in una mole di anioni monovalenti.



Andamento dell'affinità elettronica nella tavola periodica

Associabile alle dimensioni dell'atomo: è tanto maggiore quanto più piccolo è il volume atomico. Infatti più piccolo è un atomo, tanto più vicino al nucleo si collocherà l'elettrone acquistato, liberando maggiori quantità di energia.

Pertanto: **l'affinità elettronica aumenta dal basso verso l'alto in un gruppo e da sinistra a destra in un periodo.**

Affinità Elettronica (kJ mol⁻¹)

1	H 73																		He
2	Li 60	Be											B 27	C 122	N 7	O 141	F 328		Ne
3	Na 53	Mg											Al 42	Si 134	P 72	S 200	Cl 349		Ar
4	K 48	Ca 2	Sc 18	Ti 8	V 51	Cr 65	Mn 15	Fe 64	Co 112	Ni 119	Cu 41	Zn 119	Ga 41	Ge 119	As 79	Se 195	Br 353		Kr
5	Rb 47	Sr 5	Y 30	Zr 41	Nb 86	Mo 72	Tc 53	Ru 101	Rh 110	Pd 54	Ag 126	Cd 39	In 107	Sn 101	Sb 190	Te 295	I 295		Xe
6	Cs 45	Ba 14	La 45	Hf 31	Ta 79	W 14	Re 104	Os 151	Ir 205	Pt 223	Au 36	Hg 35	Tl 91	Pb 183	Bi 270	Po 270	At 270		Rn
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus		Uuo

Energia di ionizzazione

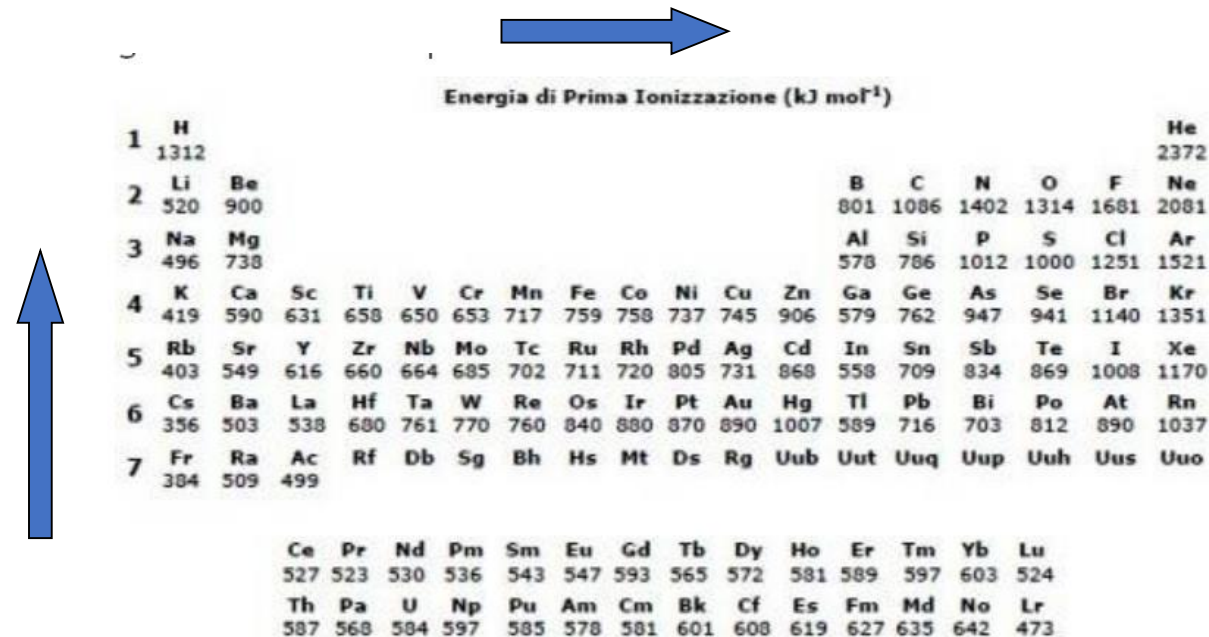
Energia, espressa in Kcal/mol (o KJ/mol), necessaria ad una mole di atomi allo stato gassoso per trasformarla in una mole di cationi monovalenti.

L'atomo che perde l'elettrone, mantiene inalterato il numero di protoni del nucleo e assume una carica positiva. Si forma uno ione positivo, o catione.

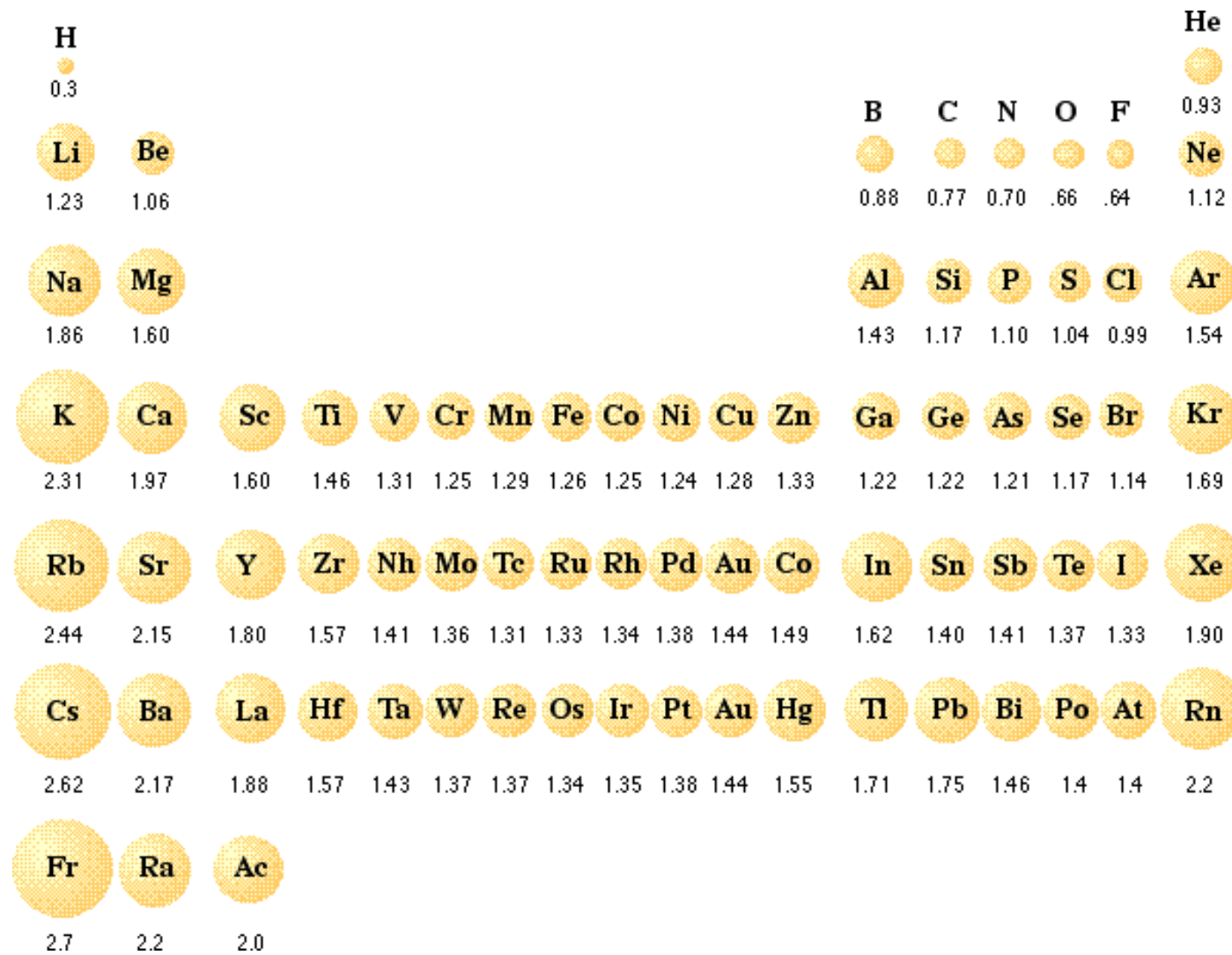


Andamento dell'energia di ionizzazione nella tavola periodica

l'energia di ionizzazione aumenta dal basso verso l'alto in un gruppo e da sinistra a destra in un periodo.



Raggio atomico nella tavola periodica



L'elettronegatività **aumenta dal basso verso l'alto** nei gruppi e **da sinistra a destra** in un periodo. Per questo motivo gli elementi più elettronegativi si trovano a destra in alto e quelli meno elettronegativi in basso a sinistra




Elettronegatività (Pauling)																		
H 2.20																		He
Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne	
Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar	
K 0.82	Ca 1.0	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 2.9	
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.80	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6	
Cs 0.79	Ba 0.89	La 1.10	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 1.87	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn	
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	

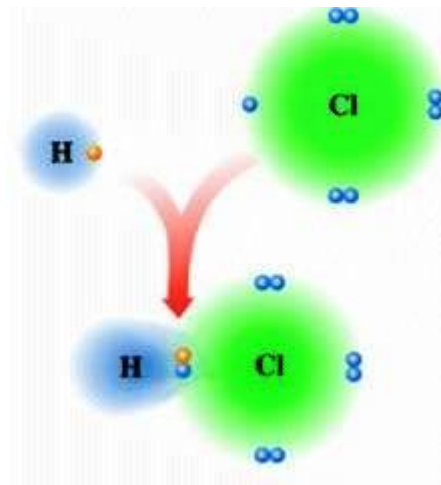
Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.14	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.29	Tb 1.2	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27
Th 1.1	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.3	Cm 1.3	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr

Quanto maggiore è la differenza di elettronegatività fra i due atomi che formano il legame, tanto più elevata è la polarità del legame. Quando la **differenza di elettronegatività fra i due elementi che intendono legarsi è superiore a 1.9**, avviene un trasferimento di elettroni dall'atomo meno elettronegativo all'atomo più elettronegativo. Si realizza in questo caso un legame ionico.

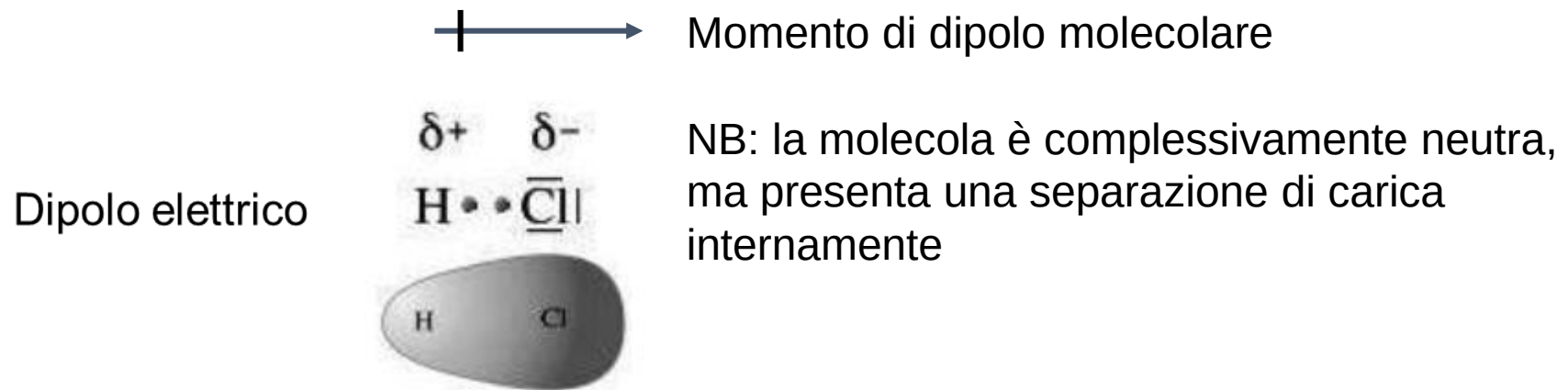
Legame covalente polare

Quando il legame covalente si forma tra atomi che presentano un diverso valore di elettronegatività, la nube elettronica degli elettroni che costituiscono il legame covalente è concentrata sull'atomo più elettronegativo. Si parla in questo caso di **legame covalente polare**.

Abbiamo visto che nel legame covalente puro, gli elettroni vengono condivisi tra atomi dello stesso elemento. Ciascun atomo li attrae con la medesima elettronegatività e pertanto non c'è ragione di pensare che si possa avere un addensamento di **carica elettrica** negativa prevalentemente su uno o sull'altro dei due nuclei. In altri casi però gli atomi che formano il legame covalente appartengono ad elementi diversi che presentano una diversa elettronegatività. Consideriamo ad esempio la molecola dell'acido Cloridrico (HCl) nella quale H e Cl condividono una coppia di elettroni.



La coppia di elettroni che costituisce il legame covalente risulta spostata verso l'atomo più elettronegativo (in questo caso il Cl). Quest'ultimo acquista quindi una carica parzialmente negativa (δ^-), mentre l'altro atomo (nel nostro caso H) assume una carica parzialmente positiva (δ^+). Si viene a creare pertanto un **dipolo** (due poli) ed il legame corrispondente viene chiamato **legame covalente polare**.

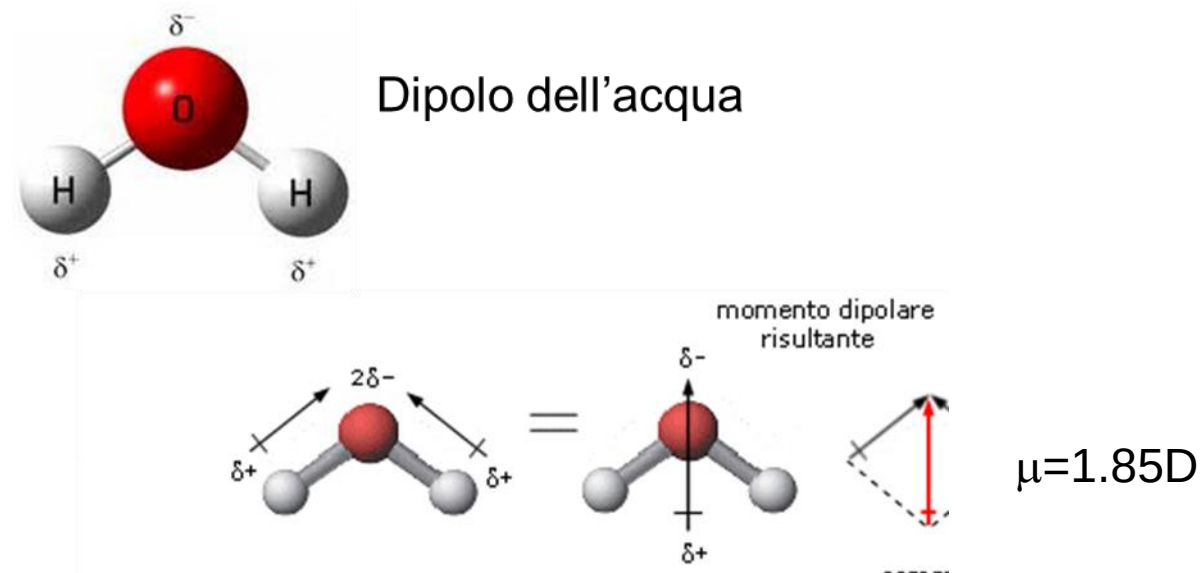


il momento dipolare di un simile dipolo viene definito dal prodotto della carica elettrica δ positiva o negativa per la distanza r dei centri delle due cariche elettriche e cioè:

momento dipolare o dipolo elettrico $= \mu = \delta \times r$ (debye, D; SI, Coulomb * metro)

momento di dipolo, è una grandezza vettoriale con verso diretto verso il polo negativo

è una **grandezza vettoriale additiva** - il momento di dipolo di una molecola intera è la somma vettoriale dei singoli momenti dipolari

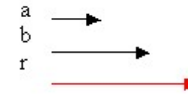


Il momento dipolare totale è uguale alla somma vettoriale dei momenti dipolari dei singoli legami

Somma di vettori

1.

◆ *Stessa direzione e verso*



Il vettore somma avrà ◆ la stessa direzione e lo stesso verso dei primi due e per modulo la somma dei due moduli.

2.

◆ *Stessa direzione, ma verso opposto*

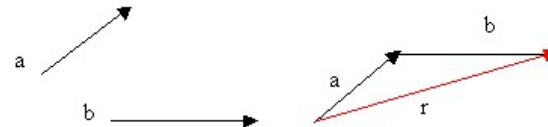


Il vettore somma avrà ◆ la stessa direzione dei due vettori, come verso quello con intensità ◆ maggiore e come modulo la differenza dei moduli.

3.

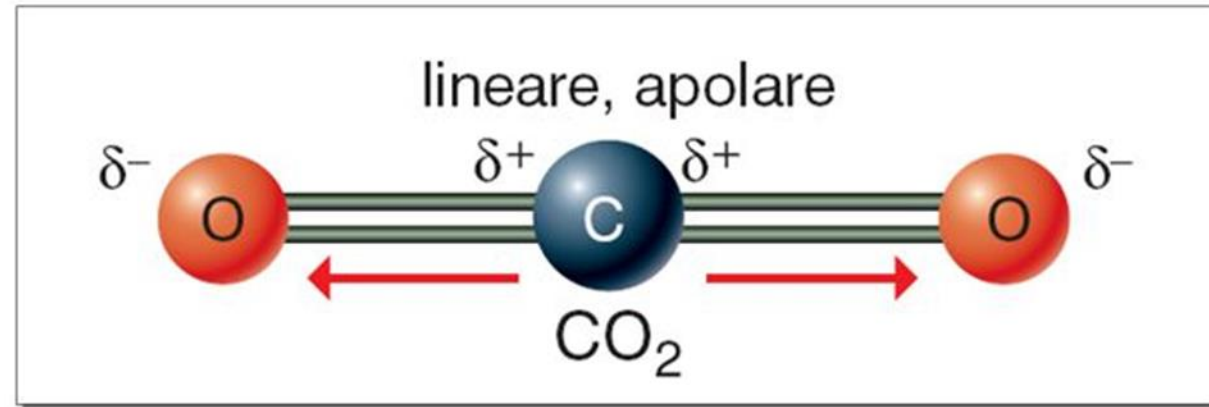
◆ *Direzione diversa*

3. Regola del triangolo:



Si fa coincidere il primo estremo di ◆ b ◆ con il secondo di ◆ a ◆. Il terzo lato che serve a completare il triangolo sarà ◆ il vettore somma.

La polarità di una molecola dipende sia dalla presenza di legami covalenti sia dalla geometria



Distanza (lunghezza) di legame

- Tanti più elettroni partecipano al legame, tanto minore
- Al diminuire della distanza di legame, aumenta energia di legame
- Dipende anche dalla natura degli atomi
- Unità di misura: angstrom ($\text{\AA}$) 10^{-10} m

Legami semplici		Doppi legami		Tripli legami	
H-C	109	C=C	135	C $\equiv$ C	120
H-N	100	C=N	130	C $\equiv$ N	116
H-O	96	C=O	122		
C-C	154				
C-N	147				
C-O	143				
C-Cl	176				
C-Br	194				
C-I	214				

Energia di legame

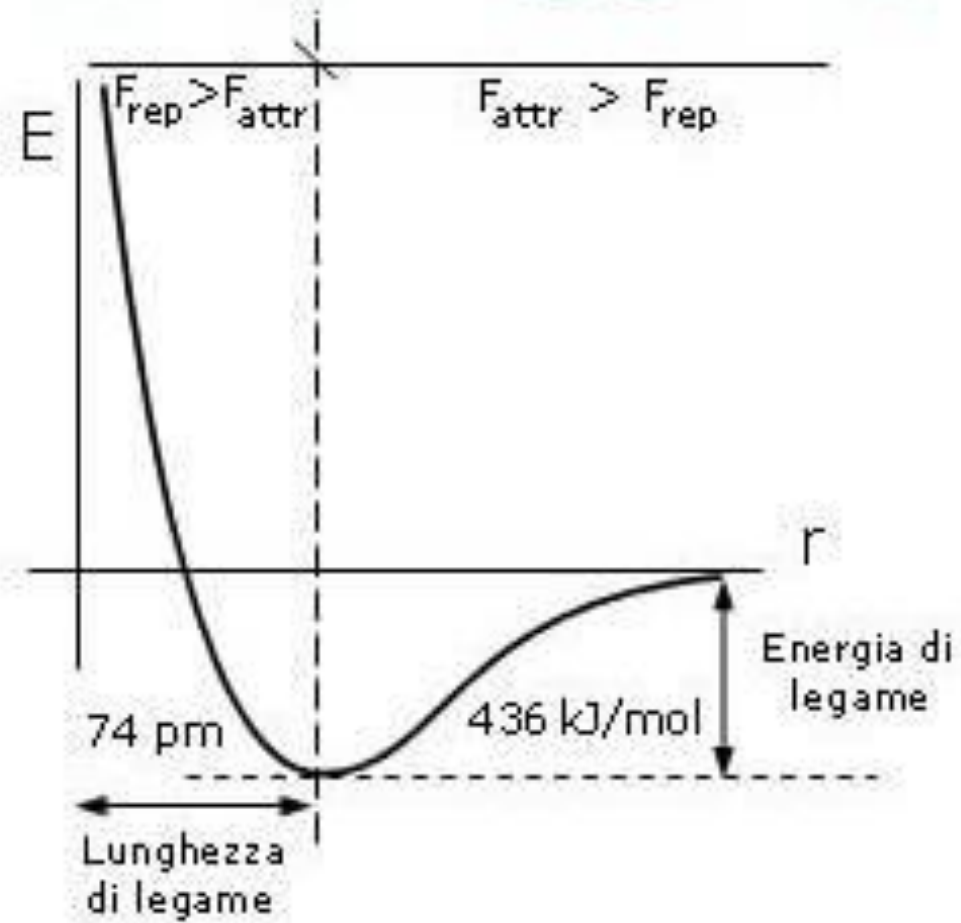
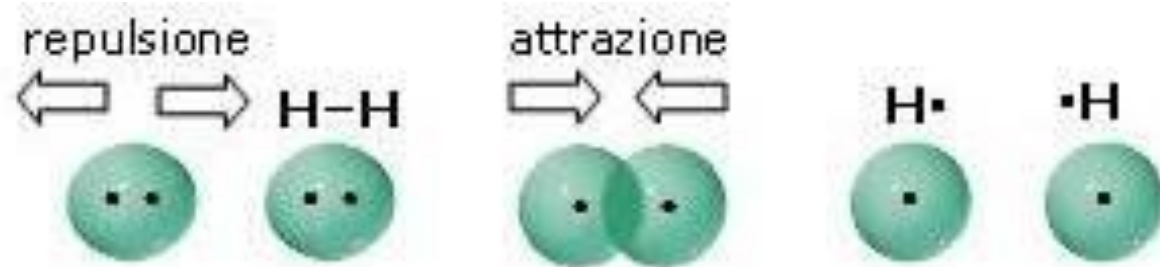
Legame - maggiore stabilità *energetica* (il contenuto energetico del composto finale è inferiore a quello complessivo degli atomi di partenza)

Legame- liberazione di energia (energia di legame - $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$) uguale e di segno opposto a quella necessaria a rompere il legame

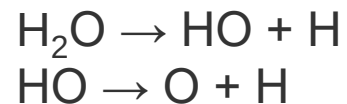
Tanto più alta, tanto più stabile il legame

Molecole biatomiche

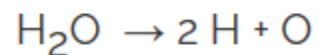
Molecola	Energia di dissociazione
H ₂	104 kcal mol ⁻¹
HF	135 kcal mol ⁻¹
HCl	103 kcal mol ⁻¹
HBr	87 kcal mol ⁻¹
HI	71 kcal mol ⁻¹
F ₂	38 kcal mol ⁻¹
Cl ₂	58 kcal mol ⁻¹
Br ₂	46 kcal mol ⁻¹
I ₂	36 kcal mol ⁻¹
N ₂	225 kcal mol ⁻¹
O ₂	118 kcal mol ⁻¹
Li ₂	26 kcal mol ⁻¹



Molecole poliatomiche che contengono **più legami A-B**



legame O-H: le due energie di dissociazione sono diverse



Si definisce una energia di legame media

1

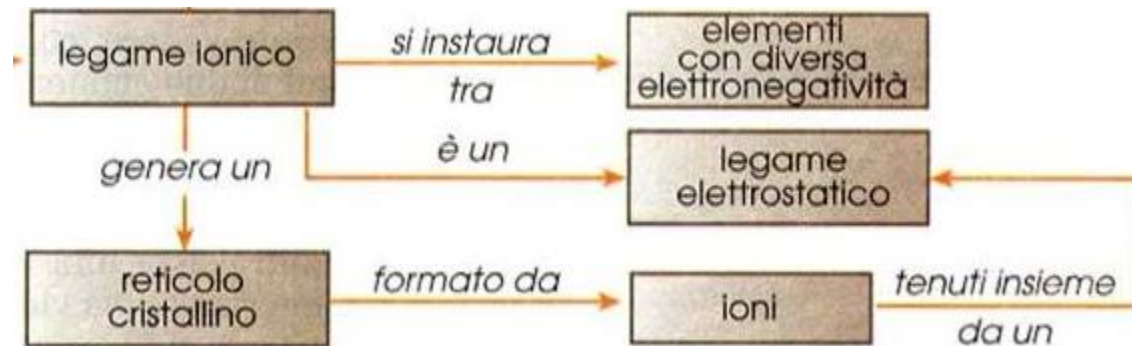
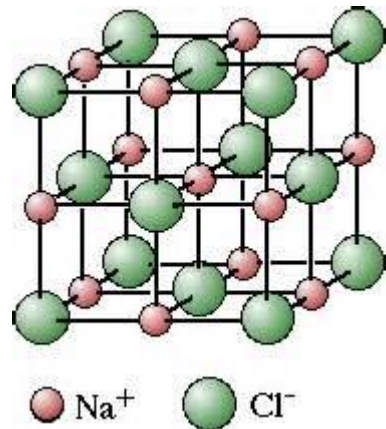
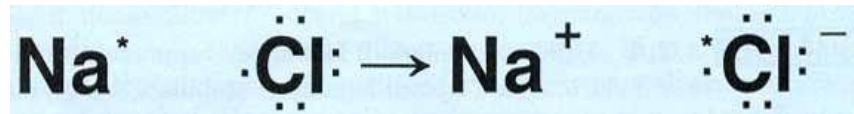
Energie medie di legame

Legame	Energia
H-H	104 kcal mol ⁻¹
C-H	99 kcal mol ⁻¹
N-H	84 kcal mol ⁻¹
S-H	88 kcal mol ⁻¹
C-C	79 kcal mol ⁻¹
C=C	141 kcal mol ⁻¹
C≡C	150 kcal mol ⁻¹
C≡N	161 kcal mol ⁻¹
C=O	160 kcal mol ⁻¹
O-H	110 kcal mol ⁻¹
N≡N	170 kcal mol ⁻¹

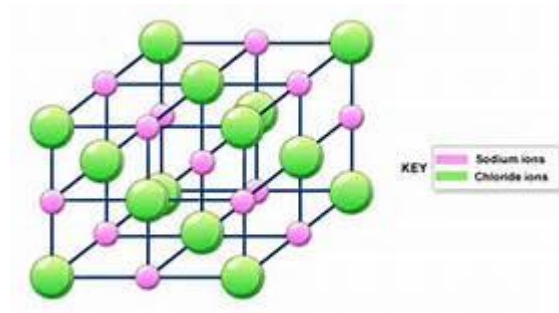
Quanto maggiore è la differenza di elettronegatività fra i due atomi che formano il legame, tanto più elevata è la polarità del legame. Quando la differenza di elettronegatività fra i due elementi che intendono legarsi è superiore a 1.9, avviene un trasferimento di elettroni dall'atomo meno elettronegativo all'atomo più elettronegativo. Si realizza in questo caso un **legame ionico**.

Legame ionico: forza di attrazione elettrostatica che si stabilisce tra due ioni di carica opposta.

- Il legame ionico si forma tra atomi o gruppi di atomi tra i quali sia avvenuto uno scambio di elettroni: l'atomo o il gruppo atomico che cede elettroni si trasforma in ione positivo (catione), l'atomo o il gruppo atomico che acquista elettroni si trasforma in ione negativo (anione).
- Questo legame comporta una forte interazione attrattiva elettrostatica e si definisce **ionico** perché l'attrazione riguarda ioni di segno opposto, che si formano a partire da atomi neutri di elementi diversi con elettronegatività differente



Poichè un campione massivo di materia è elettricamente neutro, i composti contenenti ioni, contengono sempre sia cationi che anioni, in modo da neutralizzare la carica complessiva



NaCl crystal

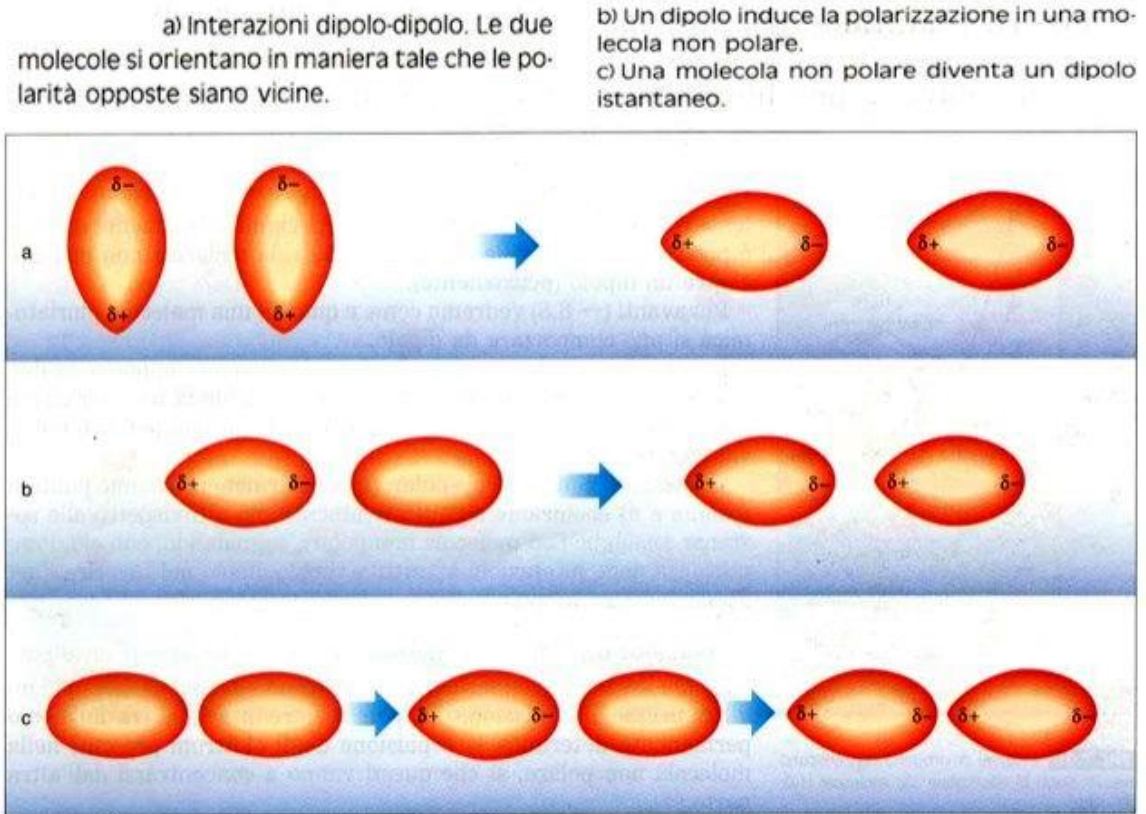
Legami deboli o Forze intermolecolari (di van der Waals)

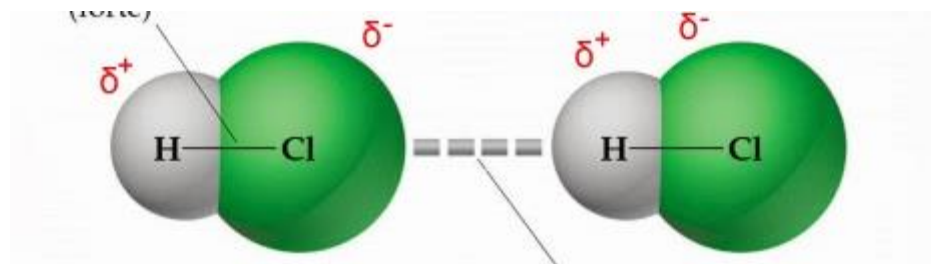
- I legami deboli includono le interazioni tra molecole o molecole-ioni
- legami intermolecolari hanno una forza nettamente inferiore rispetto a quella dei legami interatomici; scisse per innalzamento della temperatura (0.05 e 40 kJ/mol)

• **interazioni dipolo/dipolo:**
tra le estremità opposte delle molecole polari (forze di orientamento o di Keesom)

• **interazioni dipolo/dipolo indotto:** tra molecole con dipolo permanente che inducono la formazione di dipoli. (forze di Debye)

• **Forze di London o dipolo istantaneo:** interazioni tra molecole non polari, dovute a dipoli istantanei





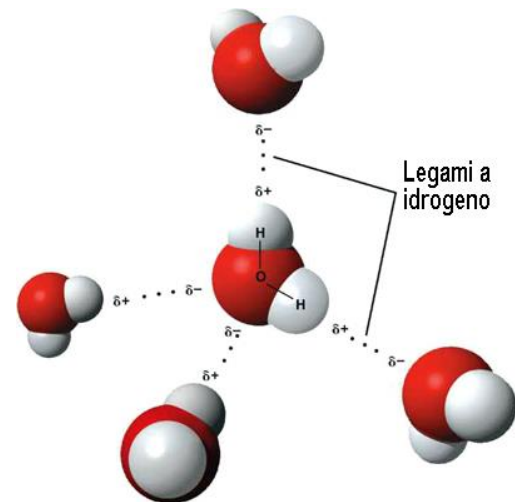
Legame idrogeno

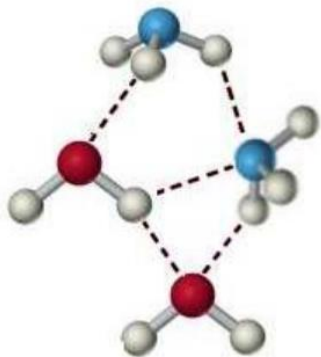
Il **legame a idrogeno** o **ponte a idrogeno** è un caso particolare di forza intermolecolare in cui è implicato un **atomo di idrogeno** coinvolto in un legame covalente con elementi **molto elettronegativi** (come fluoro (F), ossigeno (O), azoto (N)), i quali attraggono a sé gli elettroni di valenza, acquisendo una parziale carica negativa (δ^-) **lasciando l'idrogeno con una parziale carica positiva (δ^+)**. Il legame a idrogeno si forma quando la parziale carica positiva dell'idrogeno viene in contatto con un doppietto elettronico di un elemento fortemente elettronegativo (fluoro, ossigeno o azoto), il quale lega l'H (che viene definito *accettore*, invece l'elemento dove è legato l'H viene definito *donatore*)

Acqua, ammoniaca, fluoruro di idrogeno

Energia di legame (20-50 kJ/mol) superiore a quella delle altre forze intermolecolari

E' un legame altamente direzionale, atomi devono essere allineati lungo lo stesso asse



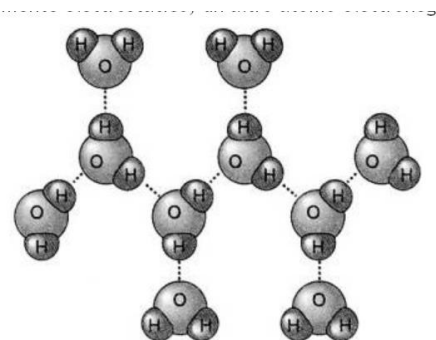


Legami idrogeno tra ammoniaca e acqua

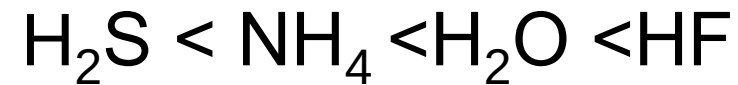
Proprietà fisiche delle sostanze che possono formare legami idrogeno

Mantiene le molecole interessate più distanti fra loro rispetto agli altri tipi di legami-densità.

Allo stato solido una molecola d'acqua è legata con legame idrogeno ad altre quattro molecole, allo stato liquido questa struttura viene demolita e le molecole non sono più costrette in una struttura espansa come quella del solido, è per questo che il ghiaccio è meno denso dell'acqua, la temperatura infatti induce la rottura di alcuni legami idrogeno presenti nel ghiaccio e ciò permette alle molecole di compattarsi



La forza del legame H cresce al crescere dell'elettronegatività
dell'atomo a cui legato l'H

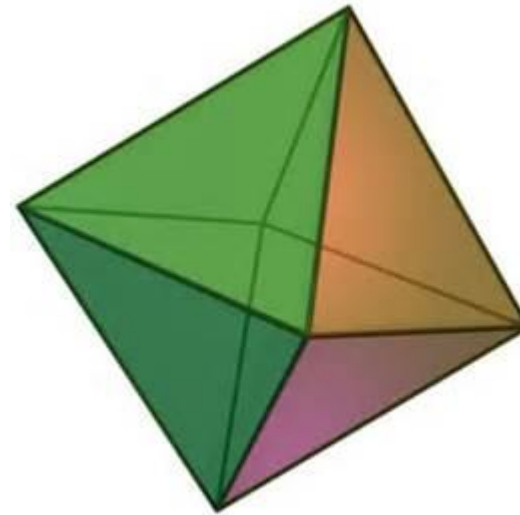
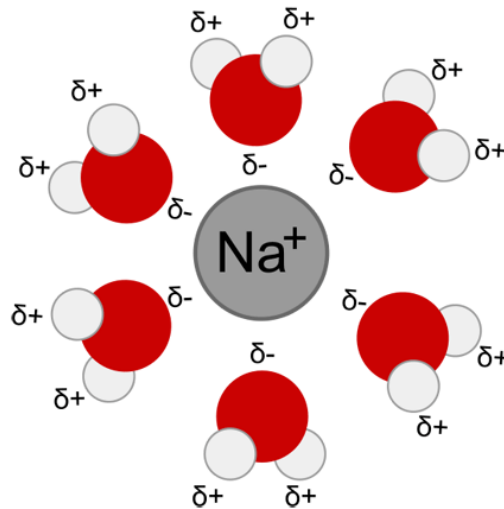


Elettronegatività (Pauling)																	
H 2.20																	He
Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
K 0.82	Ca 1.0	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 2.9
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.80	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.6
Cs 0.79	Ba 0.89	La 1.10	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 1.87	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.14	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.29	Tb 1.2	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27
Th 1.1	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.3	Cm 1.3	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr

Interazioni ione-dipolo

Tra le cariche unitarie di uno ione e la frazione di carica di segno opposto di un dipolo (tra 5 e 60 kJ/mol)



Solvatazione o idratazione dello ione

