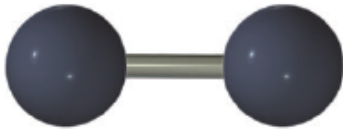
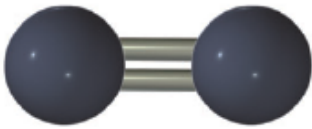
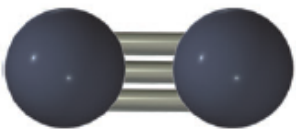


IL LEGAME COVALENTE

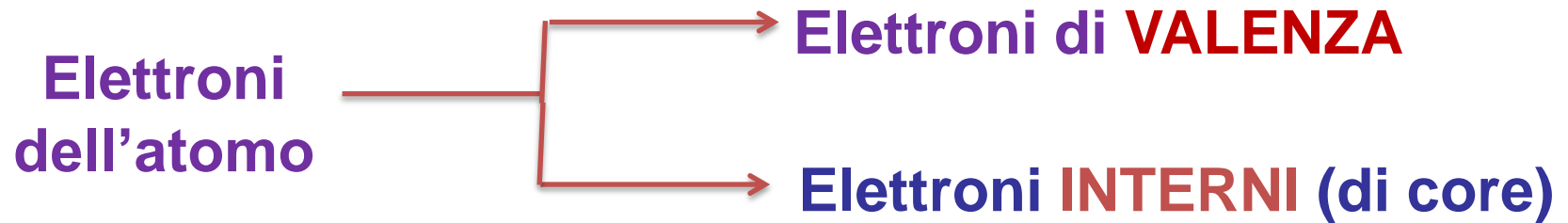
Tabella 7.1 Strutture di Lewis degli atomi che formano comunemente legami covalenti

Gruppo:	1	2	13	14	15	16	17	18
N. di e ⁻ di valenza	1	2	3	4	5	6	7	8
	H·							
		·Be·	·B·	·C·	·N·	·O·	·F·	
				·Si·	·P·	·S·	·Cl·	
				·Ge·	·As·	·Se·	·Br·	·Kr·
					·Sb·	·Te·	·I·	·Xe·

IL LEGAME COVALENTE

	Legame singolo σ	Legame doppio $\sigma+\pi$	Legame triplo $\sigma+2\pi$
			
Distanza di legame (Å)	1.54 Å	1.34 Å	1.21 Å
		Legami più corti	
Energia di legame (kJ/mol)	346	602	835
		Legami più forti	

LE FORMULE DI LEWIS



LA REGOLA DELL'OTTETTO

Nella maggior parte dei composti covalenti gli elementi raggiungono la configurazione elettronica dei gas nobili (8 elettroni nel guscio più esterno)

Le strutture di Lewis **NON** danno informazioni sulla **GEOMETRIA** delle molecole!

COME SI DISEGNANO LE STRUTTURE DI LEWIS

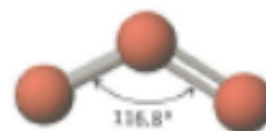
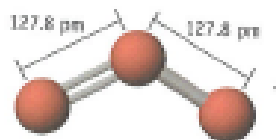
Regole per costruire le strutture di Lewis:

1. Riconoscere l'**atomo centrale** a cui sono legati gli altri atomi;
2. Trovare il **numero totale di elettroni di valenza**;
3. Si consideri ogni legame come un **legame singolo** e determinare il numero di **coppie di legame**;
4. Determinare il numero di **coppie solitarie (lone pair)**;
5. Disegnare la molecola disponendo: 1. le **coppie di legame**, 2. le **coppie solitarie** sugli **atomi terminali** per i quali è sempre soddisfatta la regola dell'ottetto;
6. Se l'atomo centrale ha **meno di 8 elettroni**, una o più coppie solitarie degli atomi terminali vengono trasformate in coppie di legame.

LA RISONANZA

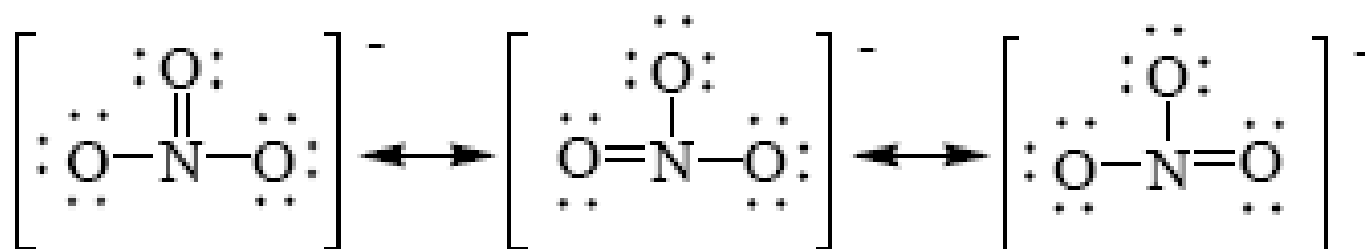
Risonanza = combinazione di strutture nelle quali gli atomi sono ugualmente collocati, mentre la disposizione degli elettroni è differente.

La molecola di O_3



LA RISONANZA

Lo ione nitrato



La freccia \leftrightarrow non indica una “reversibilità” ma che la reale struttura dello ione NO_3^- è una struttura intermedia tra le tre raffigurate. I dati sperimentali riportano che non è possibile distinguere nella struttura legami singoli e doppi ma tutti e tre i legami hanno una distanza intermedia tra il singolo e il doppio \Rightarrow gli elettroni di legame sono **delocalizzati** e l’energia del sistema si abbassa.

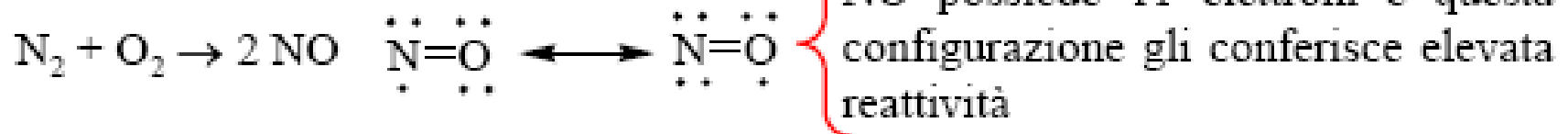
Delocalizzazione = la densità elettronica in più dovuta alla seconda coppia di e^- di un doppio legame non viene condivisa da una coppia in particolare ma si distribuisce tra più atomi

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

1. Molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni
2. Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha meno di un ottetto di elettroni di valenza
3. Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha più di un ottetto di elettroni di valenza

Molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni

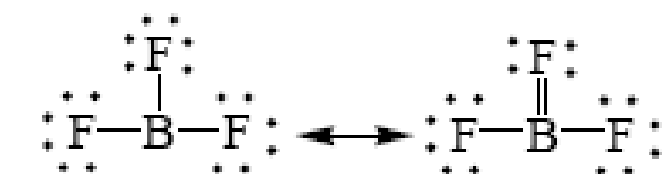
Le molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni sono denominati radicali. Per le specie radicaliche non è mai possibile raggiungere la configurazione dell'ottetto



ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha meno di un ottetto di elettroni di valenza

La maggior parte degli elementi del gruppo IIIA non raggiungono la configurazione dell'ottetto poiché posseggono solo 3 elettroni nel guscio di valenza. Formano quindi tre legami covalenti e raggiungono la configurazione elettronica di 6



struttura di
risonanza più
probabile

struttura di risonanza che prevede che per raggiungere la configurazione dell'ottetto dell'atomo di boro il fluoro, elemento molto elettronegativo, metta in compartecipazione un doppietto di elettroni. Questa forma di risonanza è quindi poco rilevante

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

Molecole e ioni poliatomici in cui un atomo ha più di un ottetto di elettroni di valenza

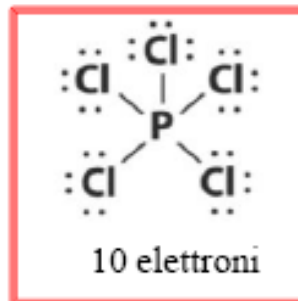
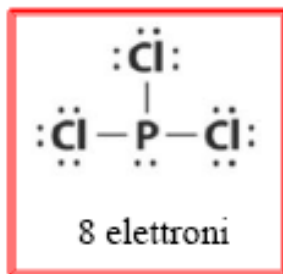


TABELLA 8.6 Strutture di Lewis di molecole in cui vi sono più di otto elettroni attorno all'atomo centrale

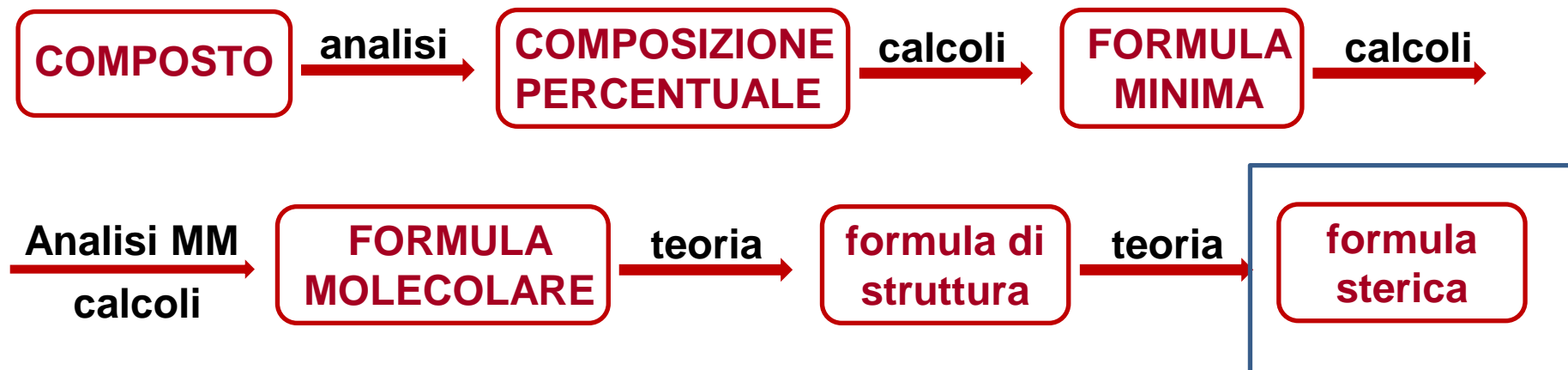
Gruppo 4A	Gruppo 5A	Gruppo 6A	Gruppo 7A	Gruppo 8
SiF_5^- 	PF_5 	SF_4 	ClF_3 	XeF_2
SiF_6^{2-} 	PF_6^- 	SF_6 	BrF_5 	XeF_4

LA MOLE E LA MASSA

Noto il peso molecolare o il peso formula del composto, conosciamo la sua massa molare e quindi possiamo convertire il numero di moli in massa o la massa in numero di moli.

$$n = \frac{m}{MM}$$

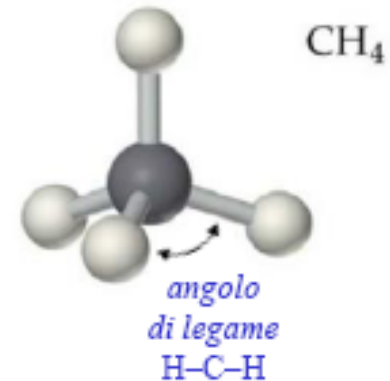
LE FORMULE DEI COMPOSTI



LA GEOMETRIA DELLE MOLECOLE

Geometria molecolare = disposizione relativa nello spazio degli atomi costituenti una molecola o un composto covalente a struttura infinita

Angoli di legame = gli angoli individuati dagli assi di due legami che hanno un atomo in comune

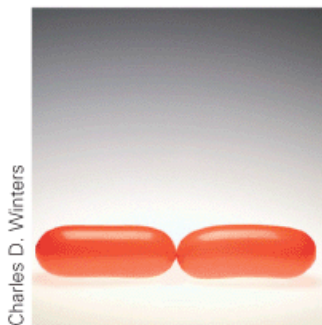


IL MODELLO VSEPR

(Valence Shell Electron Pair Repulsion)
(Repulsione delle Coppie di Elettroni del Guscio di Valenza)

Le coppie di elettroni del guscio di valenza dell'atomo centrale si respingono tra loro, pertanto nello spazio si dispongono in modo tale da essere il più lontano possibile le une dalle altre.

Esiste una sola possibile geometria che soddisfa questo requisito.



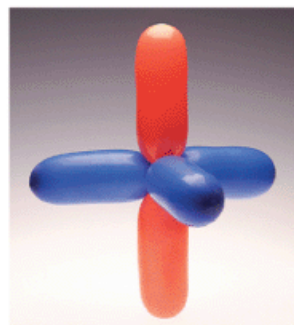
Lineare



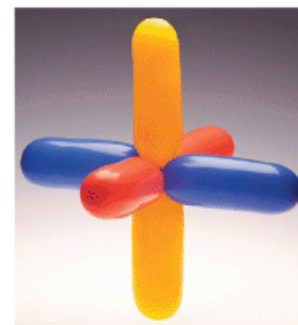
Trigonale planare



Tetraedrica



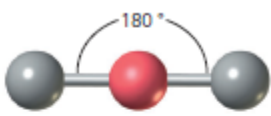
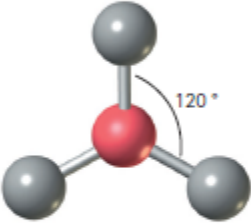
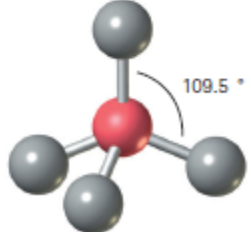
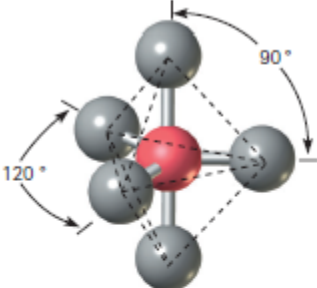
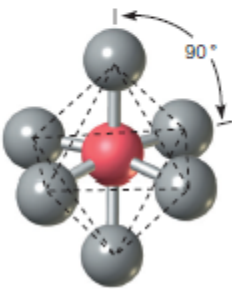
Trigonale bipiramidale



Ottaedrica


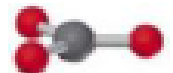



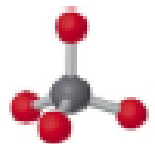
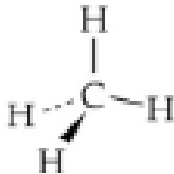
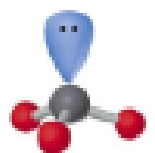
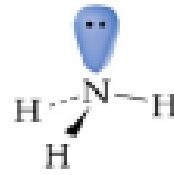
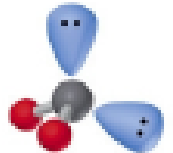
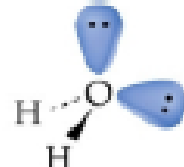
Il numero sterico = numero di doppietti elettronici di valenza presenti attorno all'atomo centrale.

**GEOMETRIE
PREVISTE DAL
MODELLO VSEPR**

NS	Tipo di specie	Orientazione delle coppie elettroniche	Angoli di legame previsti	Esempio	Modello ball and stick	Ibrid.
2	AX_2	Lineare	180°	BeF_2		sp
3	AX_3	Trigolare planare	120°	BF_3		sp^2
4	AX_4	Tetraedro	109.5°	CH_4		sp^3
5	AX_5	Bipiramide trigonale	90° 120° 180°	PF_5		sp^3d
6	AX_6	Ottaedro	90° 180°	SF_6		sp^3d^2

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

NS

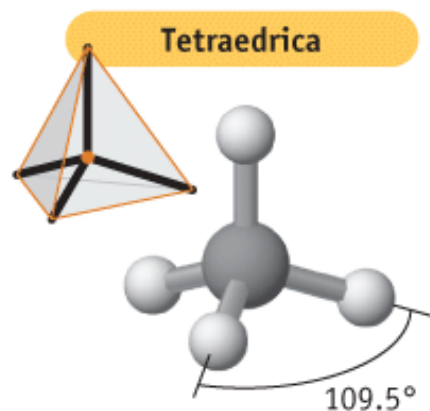
	n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
2	2	0	2 (AX ₂)	lineare (180°)		O=C=O
3	3	0	3 (AX ₃)	planare triangolare (120°)		
	2	1	3 (AX ₂ E)	piegata (< 120°)		
4	4	0	4 (AX ₄)	tetraedrica (109.5°)		
	3	1	4 (AX ₃ E)	piramidale trigonale (< 109.5°)		
	2	2	4 (AX ₂ E ₂)	piegata (< 109.5°)		

DISTORSIONE CAUSATA DALLE COPPIE SOLITARIE

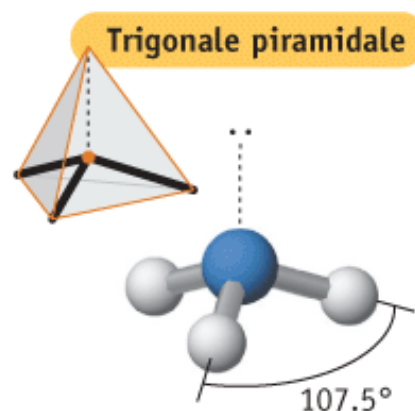
n legami	n coppie solitarie	n sfere elettroniche	geometria molecolare
4	0	4 (AX ₄)	tetraedrica (109.5°)
3	1	4 (AX ₃ E)	piramidale trigonale (<109.5°)
2	2	4 (AX ₂ E ₂)	piegata (<109.5°)

Una coppia solitaria risiede più vicino al nucleo degli elettroni di legame perché risente della forza attrattiva di un solo atomo

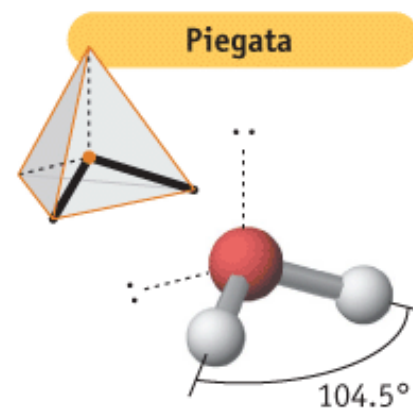
QUATTRO COPPIE ELETTRONICHE
Geometria delle coppie = tetraedrica



Metano, CH₄
4 coppie di legame
nessuna coppia solitaria




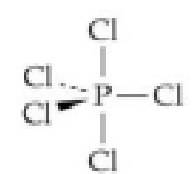
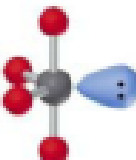
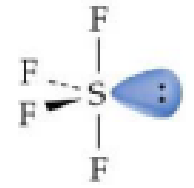
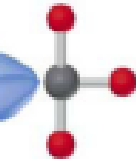
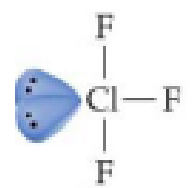
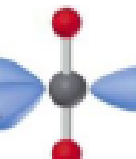
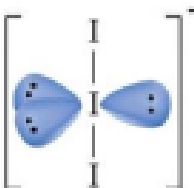
Ammoniaca, NH₃
3 coppie di legame
1 coppia solitaria



Acqua, H₂O
2 coppie di legame
2 coppie solitarie

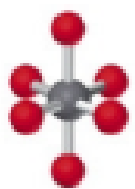
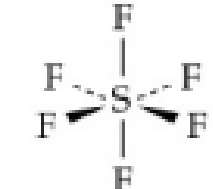
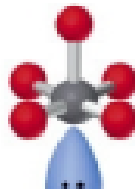
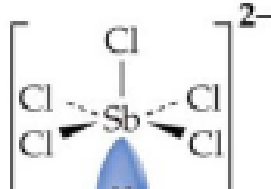
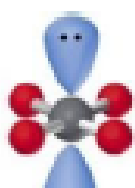
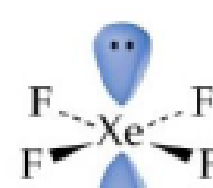
La forza repulsiva varia nell'ordine: CS-CS > CS-CL > CL-CL
CS = coppia solitaria;
CL = coppia di legame

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
5	0	5 (AX ₅)	bipiramidale triangolare (90-120-180)		
4	1	5 (AX ₄ E)	a sella (<90, <120)		
3	2	5 (AX ₃ E ₂)	a T (< 90)		
2	3	5 (AX ₂ E ₃)	lineare (180)		

Nella geometria bipiramidale trigonale una (o più) coppia solitaria in posizione equatoriale stabilizza maggiormente le struttura

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
6	0	6 (AX ₆)	ottaedrica (90°)		
5	1	6 (AX ₅ E ₁)	piramidale quadrata (90°)		
4	2	6 (AX ₄ E ₂)	planare quadrata (90°)		

Nella geometria elettronica ottaedrica, le 2 coppie solitarie si dispongono normalmente in trans (posizioni opposte). In generale le coppie solitarie distorcono la forma della molecola per diminuire la repulsione che esercitano sugli altri elettroni

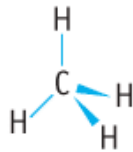
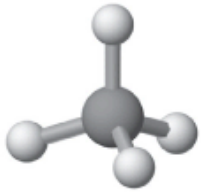
PROPRIETA' DEL LEGAME

Ordine di legame

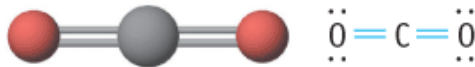
Distanza di legame

Energia di legame

ORDINE DI LEGAME



Ordine di legame
1



Ordine di legame
2



Ordine di legame
3



Ordine di legame
1.5