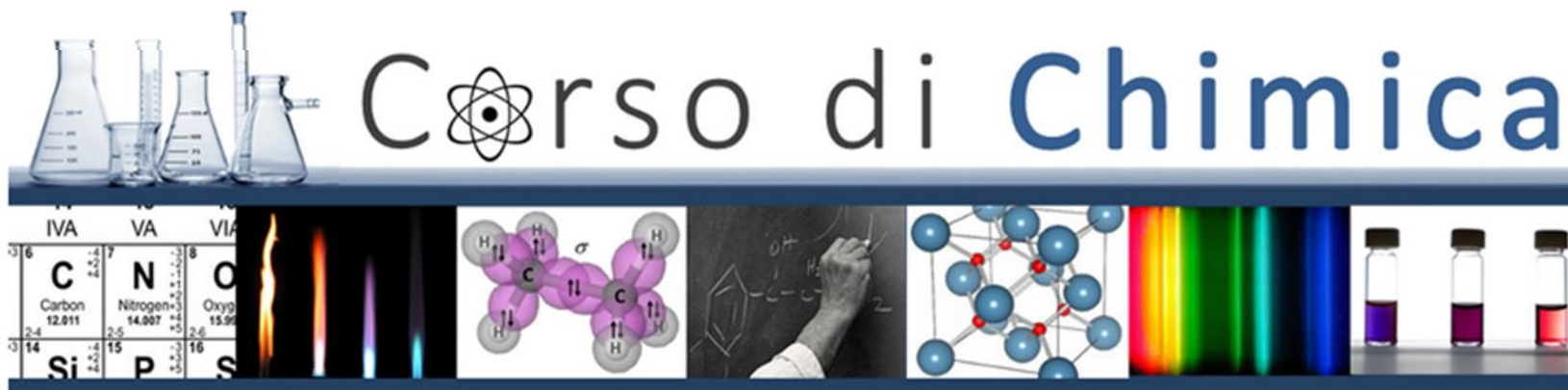




UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI DI TRIESTE

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

Dipartimento di Ingegneria ed Architettura



docente

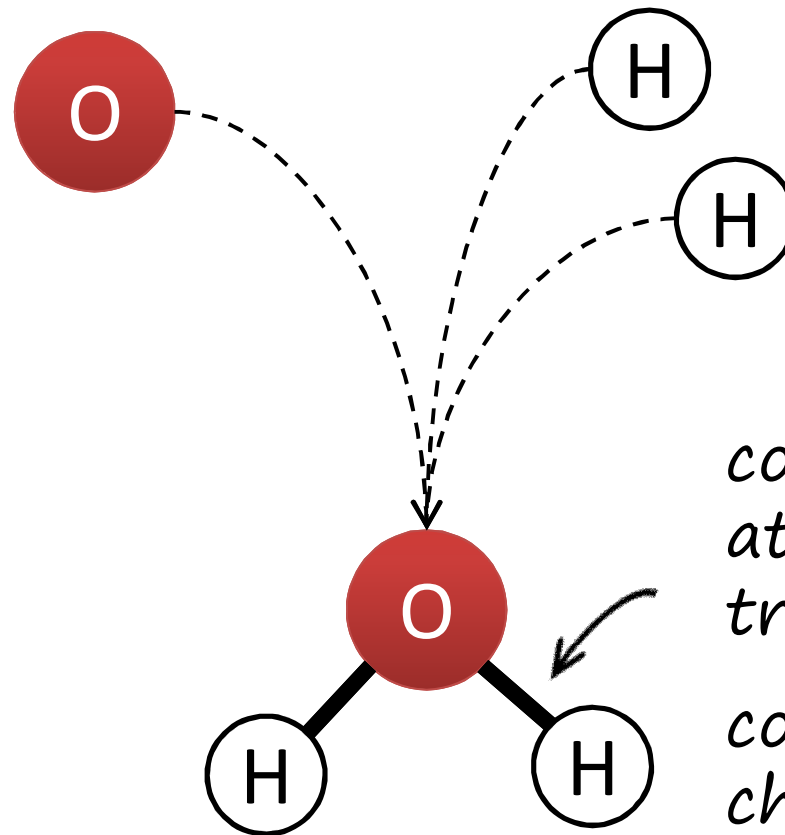
**Alois Bonifacio**

([abonifacio@units.it](mailto:abonifacio@units.it))

## Parte 3: Il legame chimico

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

atomi si legano tra loro per dare origine a **composti**



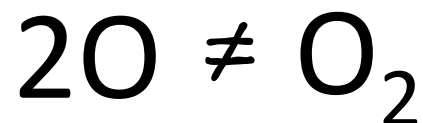
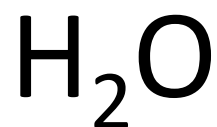
*come e perchè 2  
atomi si legato  
tra loro?*

*cos'è un legame  
chimico?*

# dare un nome ai composti: la nomenclatura chimica

*formula  
chimica*

rappresentazione schematica della  
composizione qualitativa e  
quantitativa di un composto chimico



*attenzione ai coefficienti*

# dare un nome ai composti: la nomenclatura chimica

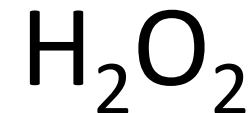
*formula  
chimica*

rappresentazione schematica della  
composizione qualitativa e  
quantitativa di un composto chimico

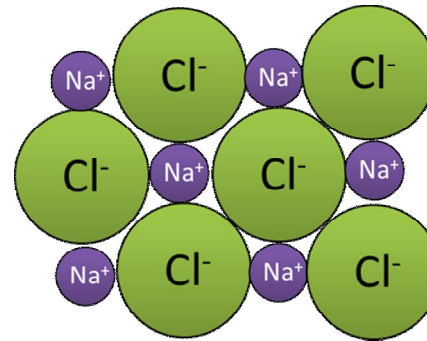
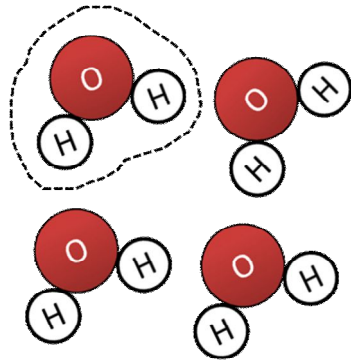
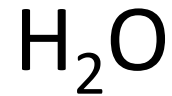
formula minima (o empirica)



formula molecolare (o bruta, o vera)



# formula ed entità molecolare



## **molecola**

unità di materia identificabile composta da due o più atomi in rapporti definiti

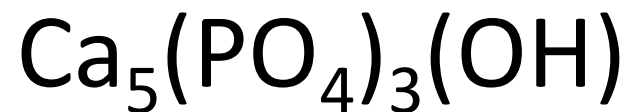
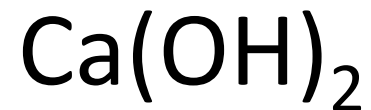
*una formula chimica può riferirsi ad una molecola oppure no*

# dare un nome ai composti: la nomenclatura chimica

*formula  
chimica*

rappresentazione schematica della  
composizione qualitativa e  
quantitativa di un composto chimico

*formule possono essere anche  
anche complesse*



# nomenclatura degli ioni monoatomici

**atomi**, **gruppi di atomi** o **molecole** che hanno acquistato una o più **cariche elettriche** mediante **perdita** od **acquisto** di **elettroni**

CATIONI

$H^+$  ione idrogeno

$Ca^{2+}$  ione calcio

$K^+$  ?

ANIONI

$H^-$  ione idru**ro**

$Cl^-$  ione clor**uro**

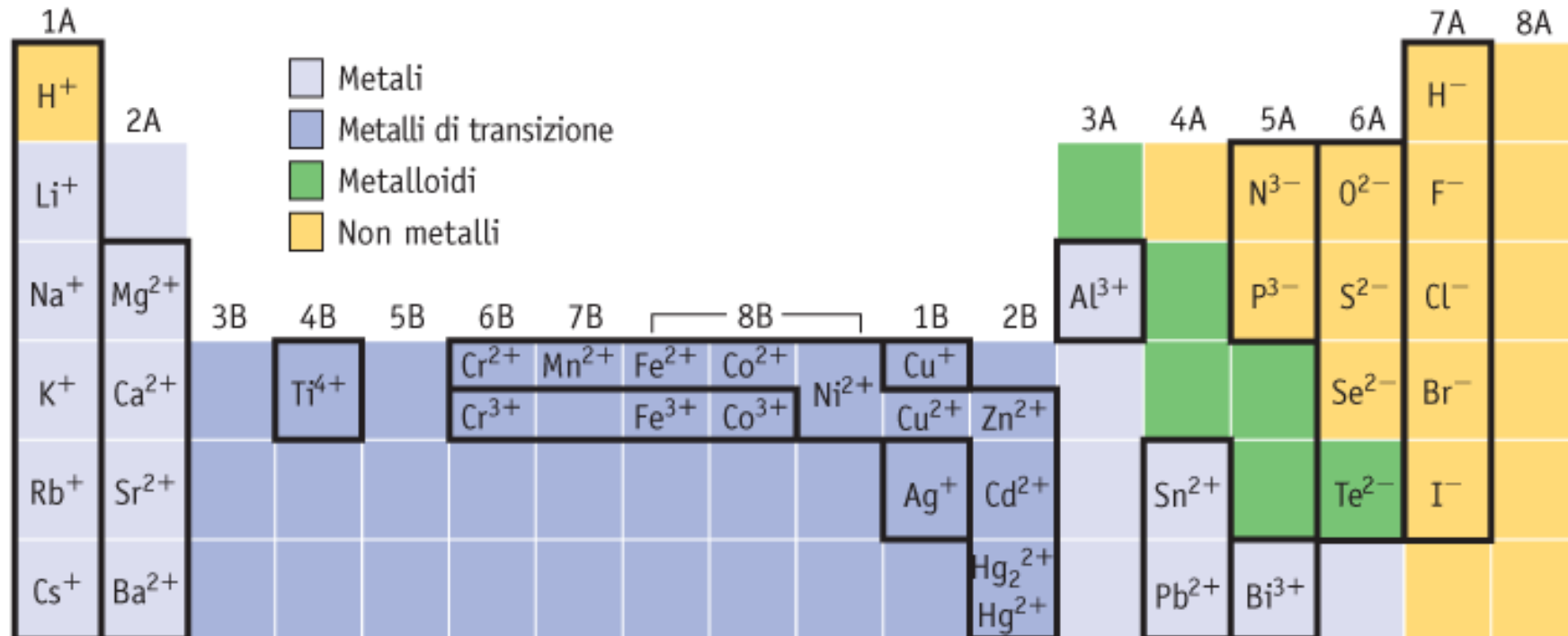
$S^{2-}$  ione sol**furo**

$O^{2-}$  ione **ossido**

$Br^-$  ?

# ioni monoatomici multivalenti

slides delle lezioni  
A. BONI



per un elemento sono possibili più ioni con cariche diverse



ione ferro (2+) (ione *ferroso*) , ione ferro (3+) (ione *ferrico*)

Università di Trieste  
2020-21  
A. A.

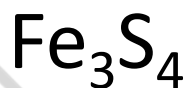
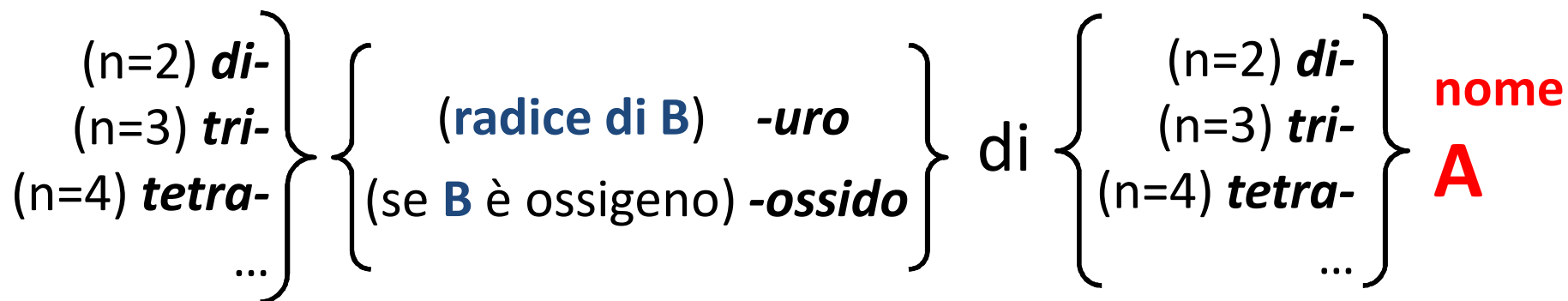


# nomenclatura dei composti binari

(formati da  
2 elementi)

A è un  
metallo  
o semi-metallo  
(oppure H)

B è un  
non-metallo  
(oppure H)



prefisso radice suffisso  
**tetra** - **solf** - **uro** di

**tri** - **ferro**

# idracidi (particolari composti binari)

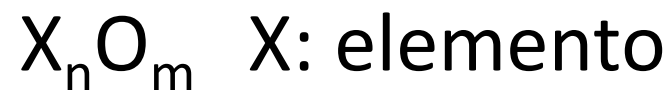
$H_nX$  X: alogeni, S, Se, pseudoalogeni

***composti binari dell'idrogeno con alogeni ed  
altri non-metalli***

(nome tradizionale)

HF	fluor <b>uro</b> di idrogeno	acido fluor <b>idrico</b>
HCl	clor <b>uro</b> di idrogeno	acido clor <b>idrico</b>
HBr	brom <b>uro</b> di idrogeno	acido brom <b>idrico</b>
HI	iod <b>uro</b> di idrogeno	acido iod <b>idrico</b>
H <sub>2</sub> S	sol <b>furo</b> di <b>di</b> idrogeno	acido sol <b>fidrico</b>
H <sub>2</sub> Se	seleni <b>uro</b> di <b>di</b> idrogeno	acido selen <b>idrico</b>
HCN	cian <b>uro</b> di idrogeno	acido cian <b>idrico</b>

# ossidi composti binari dell'ossigeno



## *con metalli*

$Li_2O$  ossido di **dilitio**

$CaO$  ossido di calcio

$Fe_2O_3$  **triossido di diferro**

$FeO$  ossido di ferro

## *con non-metalli*

(anidridi)

$SO_3$  **triossido di zolfo**

$Cl_2O_5$  **pentossido di dicloro**

$CO_2$  **diossido di carbonio**

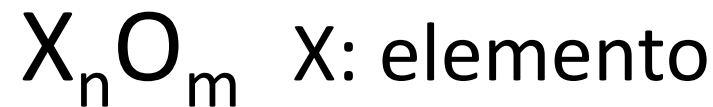
$CO$  monossido di carbonio

## *con semi-metalli*

$Al_2O_3$  **triossido di dialluminio**

$SiO_2$  **diossido di silicio**

# ossidi composti binari dell'ossigeno



## *con metalli*

$Li_2O$  ossido di *dilitio*

$CaO$  ossido di calcio

$Fe_2O_3$  *triossido di diferro*

$FeO$  ossido di ferro

## *con non-metalli*

(anidridi)

$SO_3$  *triossido di zolfo*

$Cl_2O_5$  *pentossido di dicloro*

$CO_2$  *diossido di carbonio*

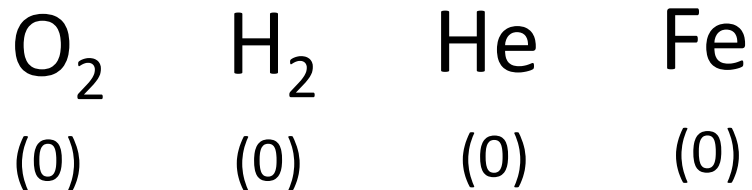
$CO$  ossido di carbonio

*lo stesso elemento si  
combina con l'ossigeno in  
diverse proporzioni !*

→ concetto di **stato** (o numero) **di ossidazione**

*numero che misura il grado di ossidazione di un atomo in un composto. E' definito secondo certe regole prestabilite*

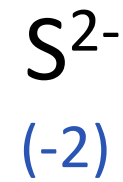
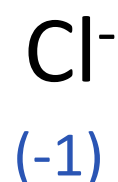
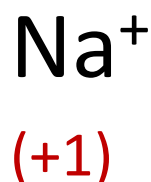
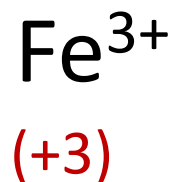
1. lo s.o. di un atomo allo stato elementare è 0



## → concetto di **stato** (o numero) **di ossidazione**

*numero che misura il grado di ossidazione di un atomo in un composto. E' definito secondo certe regole prestabilite*

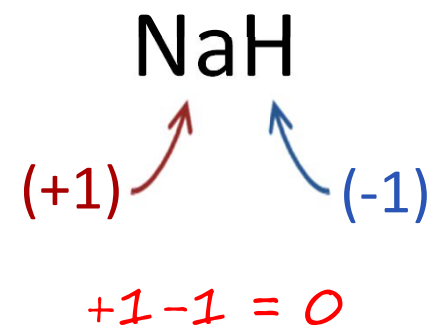
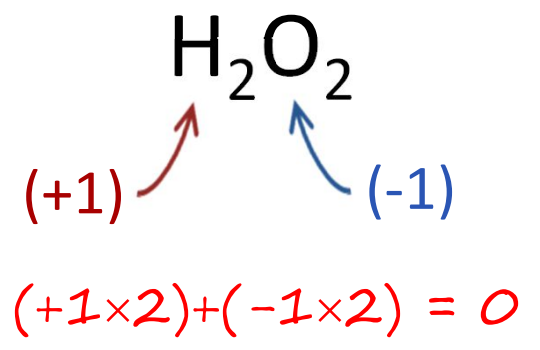
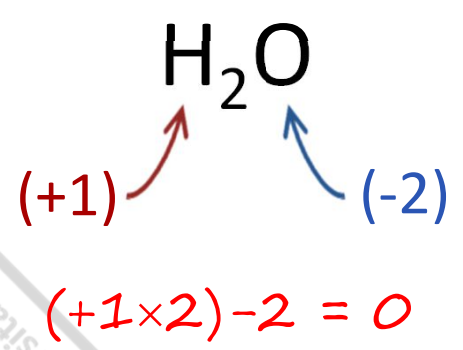
1. lo s.o. di un atomo allo stato elementare è 0
2. per uno ione monoatomico, lo s.o. corrisponde alla carica dello ione



## → concetto di **stato** (o numero) **di ossidazione**

*numero che misura il grado di ossidazione di un atomo in un composto. E' definito secondo certe regole prestabilite*

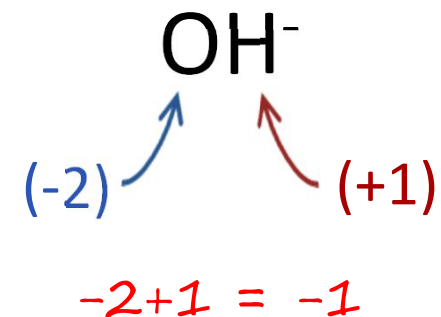
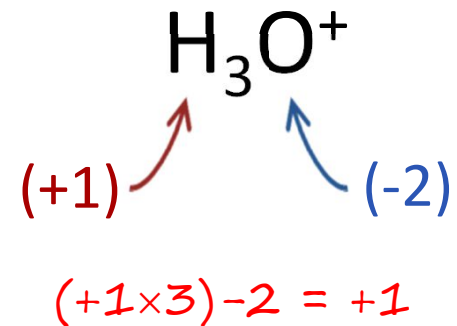
1. lo s.o. di un atomo allo stato elementare è 0
2. per uno ione monoatomico, lo s.o. corrisponde alla carica dello ione
3. l'H ha uno s.o. di 1 e l'O di -2 (con eccezione di **idruri** (H<sup>-</sup>), **perossidi** (O<sup>2-</sup>) )



## → concetto di **stato** (o numero) **di ossidazione**

*numero che misura il grado di ossidazione di un atomo in un composto. E' definito secondo certe regole prestabilite*

1. lo s.o. di un atomo allo stato elementare è 0
2. per uno ione monoatomico, lo s.o. corrisponde alla carica dello ione
3. l'H ha uno s.o. di 1 e l'O di -2 (con eccezione di idruri ( $H^{-1}$ ), perossidi ( $O^{-1}$ ))
4. La somma algebrica degli s.o. di tutti gli atomi di una molecola neutra deve essere zero, di uno ione deve essere pari alla carica dello ione





→ concetto di **stato** (o numero) **di ossidazione**

*utile per prevedere in che rapporti si combinano  
gli elementi per formare i composti*

*numeri di  
ossidazione  
sulla tavola  
periodica*

16	-2
S	+4
Sulfur	+6
32.07	

zolfo      ossigeno

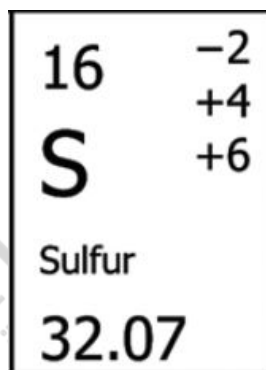
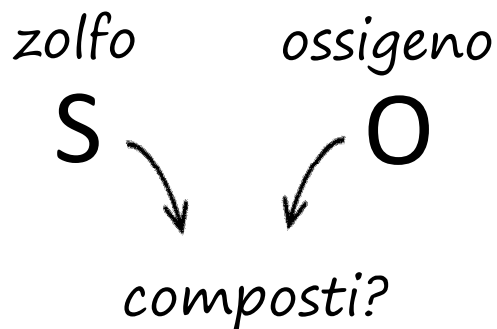
S      O

composti?

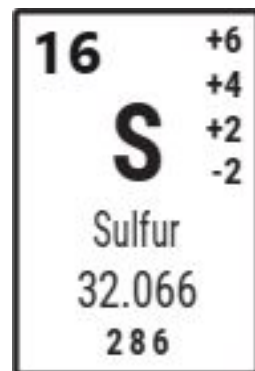


→ concetto di **stato** (o numero) **di ossidazione**

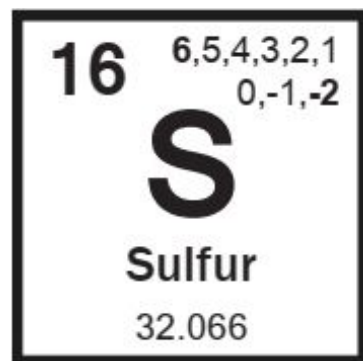
*utile per prevedere in che rapporti si combinano gli elementi per formare i composti*



(-2,+4,+6)



(-2,+2,+4,+6)



(-2,-1,+1,+2,+3,+4,+5,+6)

**ATTENZIONE!**  
*alcuni numeri di ossidazione più comuni di altri*

→ concetto di stato (o numero) di ossidazione

(+3)  $\text{Fe}_2\text{O}_3$       **triossido di *diferro***

(+2)  $\text{FeO}$       ossido di ferro

(+4)  $\text{SO}_2$       **diossido di zolfo**

(+6)  $\text{SO}_3$       **triossido di zolfo**

(+1)  $\text{Cl}_2\text{O}$       ossido di **dicloro**

(+3)  $\text{Cl}_2\text{O}_3$       **triossido di *dicloro***

(+5)  $\text{Cl}_2\text{O}_5$       **pentaossido di *dicloro***

(+7)  $\text{Cl}_2\text{O}_7$       **eptaossido di *dicloro***

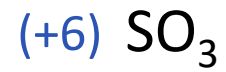
→ concetto di stato (o numero) di ossidazione  
*nomenclatura tradizionale*



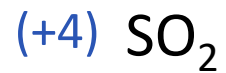
ossido ferrico



ossido ferroso



anidride solforica



anidride solforosa

stato  
ossidazione  
maggiore

stato  
ossidazione  
minore

suffisso



(radice) - *ico*

(radice) - *oso*



*ossidi di  
non-metalli*

→ concetto di stato (o numero) di ossidazione

## *nomenclatura tradizionale*

(+7)  $\text{Cl}_2\text{O}_7$  anidride perclorica

(+5)  $\text{Cl}_2\text{O}_5$  anidride clorica

(+3)  $\text{Cl}_2\text{O}_3$  anidride clorosa

(+1)  $\text{Cl}_2\text{O}$  anidride ipoclorosa

prefisso      suffisso  
↓                      ↓  
*per* - (radice) - *ico*

(radice) - *ico*

(radice) - *oso*

*ipo* - (radice) - *oso*

→ concetto di stato (o numero) di ossidazione

	<i>nome</i>	<i>nomenclatura</i>
$\text{Fe}_2\text{O}_3$ ( $\text{Fe}^{\text{III}}_2\text{O}_3$ )	<b>triossido di <i>diferro</i></b>	IUPAC
	ossido di ferro (III)	Stock
	ossido ferr <u><i>ico</i></u>	tradizionale

# ossoanioni

$X_nO_m^{z-}$  X: non-metalli, semi-metalli, alcuni metalli

(+6)  $SO_4^{2-}$  ione solf**ato**

(+4)  $SO_3^{2-}$  ione solf**ito**

(+5)  $NO_3^-$  ione nitr**ato**

(+3)  $NO_2^-$  ione nitr**ito**

(+5)  $PO_4^{3-}$  ione fosf**ato**

(+3)  $PO_3^{3-}$  ione fosf**ito**

(+4)  $CO_3^{2-}$  ione carbon**ato**

$OH^-$  ione idrossido

stato  
ossidazione  
maggiore

suffisso  
↓  
(radice) - **ato**

stato  
ossidazione  
minore

(radice) - **ito**

# ossoanioni

$X_n O_m^{z-}$  X: non-metalli, semi-metalli, alcuni metalli

(+7)  $ClO_4^-$  ione **perclorato**

(+5)  $ClO_3^-$  ione **clorato**

(+3)  $ClO_2^-$  ione **clorito**

(+1)  $ClO^-$  ione **ipoclorito**

prefisso      suffisso  
↓                      ↓  
*per* - (radice) - *ato*

(radice) - *ato*

(radice) - *ito*

*ipo* - (radice) - *ito*



# ossoanioni

$X_nO_m^{z-}$  X: non-metalli, semi-metalli, alcuni metalli

*altri ossoanioni  
comuni*

(+7)  $MnO_4^-$  ione **permanganato**

(+6)  $CrO_4^{2-}$  ione **cromato**

(+6)  $Cr_2O_7^{2-}$  ione **bicromato**

prefisso      suffisso  
↓                      ↓  
*per* - (radice) - *ato*

(radice) - *ato*

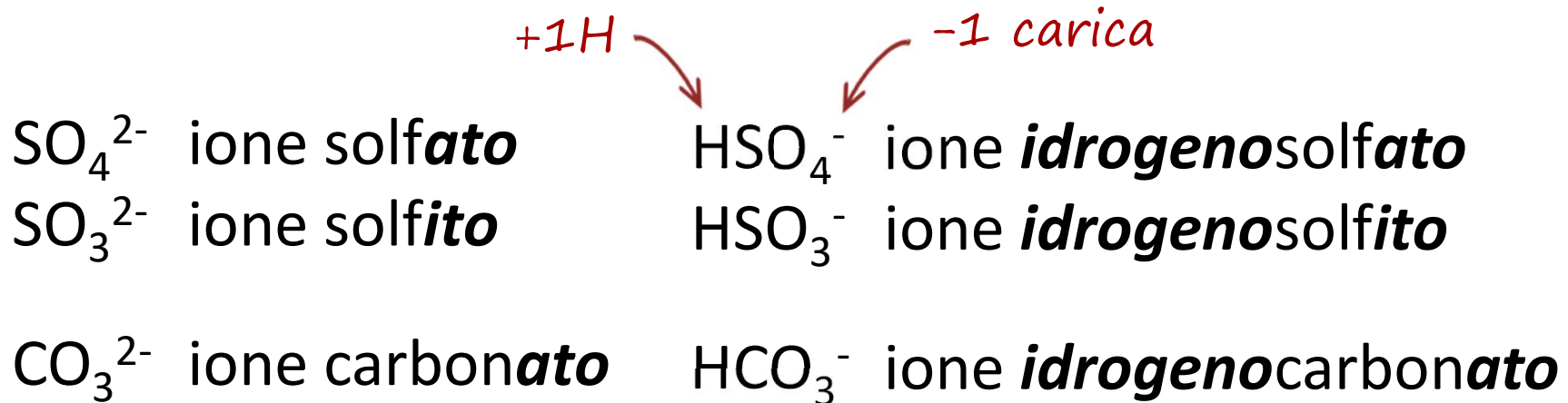
(radice) - *ito*

*ipo* - (radice) - *ito*

# ossoanioni

$X_n O_m^{z-}$  X: non-metalli, semi-metalli, alcuni metalli

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



anche detti:

- bicarbonato, bisolfato, etc.
- carbonato acido, solfato acido, etc.



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# ossiacidi

$H_k X_n O_m$  X: non-metalli, semimetalli, alcuni metalli

$H_2SO_4$	acido solforico	$SO_4^{2-}$	ione solfato
$H_2SO_3$	acido solforoso	$SO_3^{2-}$	ione solfito
$HNO_3$	acido nitrico	$NO_3^-$	ione nitrato
$HNO_2$	acido nitroso	$NO_2^-$	ione nitrito
$H_3PO_4$	acido fosforico	$PO_4^{3-}$	ione fosfato
$H_2CO_3$	acido carbonico	$CO_3^{2-}$	ione carbonato
$HClO$	acido ipocloroso	$ClO^-$	ione ipoclorito
$HClO_2$	acido cloroso	$ClO_2^-$	ione clorito
$HClO_3$	acido clorico	$ClO_3^-$	ione clorato
$HClO_4$	acido perclorico	$ClO_4^-$	ione perclorato

**per-(...)-ico**  
**(...)-ico**  
**(...)-oso**  
**ipo-(...)-oso**

↑  
stato ossidaz.

# idrossidi (o idrati)



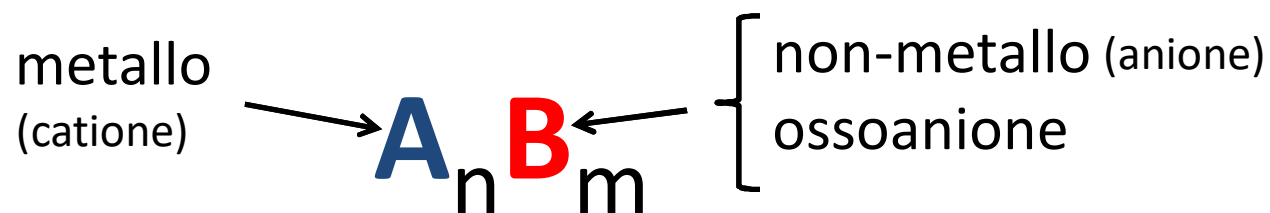
KOH      idrossido di potassio

Ca(OH)<sub>2</sub>    **di**idrossido di calcio

Fe(OH)<sub>2</sub>    **di**idrossido di ferro

Fe(OH)<sub>3</sub>    **tri**idrossido di ferro

# sali

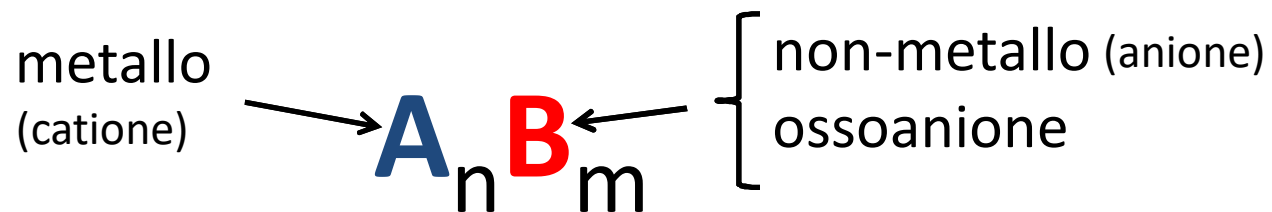


*come per  
composti binari*

NaCl cloruro di sodio  
KI ioduro di potassio  
CaF<sub>2</sub> **difluoruro** di calcio  
LiBr bromuro di litio  
CuCl<sub>2</sub> **dicloruro** di rame

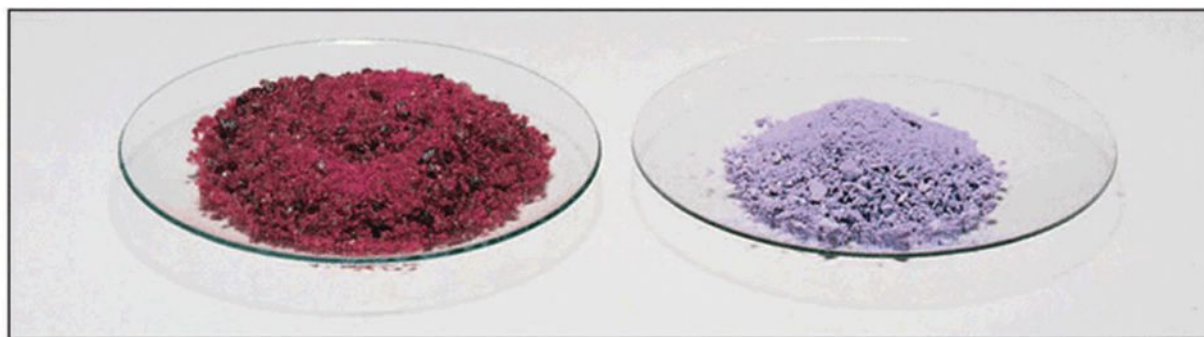
Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> solfato di sodio  
CaSO<sub>3</sub> solfito di calcio  
KNO<sub>3</sub> nitrato di potassio  
Fe(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub> **trinitrito** di ferro  
Ca<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> **difosfato** di calcio  
CaCO<sub>3</sub> carbonato di calcio  
NaHCO<sub>3</sub> bicarbonato di sodio  
NaClO **ipoclorito** di sodio

# sali



$\text{CaCl}_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  cloruro di calcio **esaidrato**

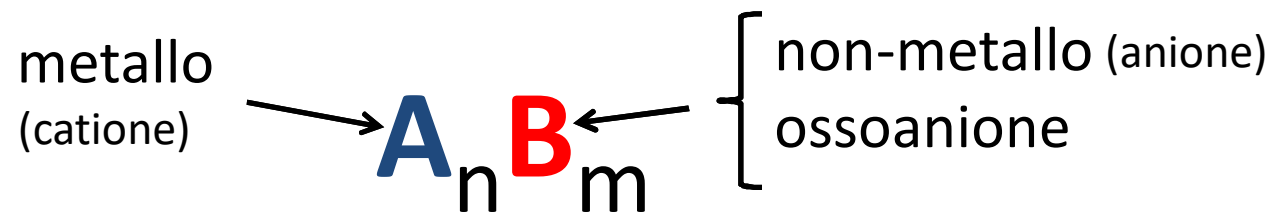
*acqua di cristallizzazione*



$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

$\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

# sali

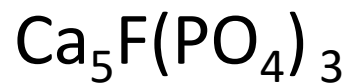


## *sali misti*

### *due cationi*



carbonato di potassio e sodio



fluoruro *trifosfato* di *pentacalcio*

### *due anioni*

# altri nomi di composti comuni

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

*ioni  
poliatomici*

$\text{NH}_4^+$  ione ammonio

$\text{CN}^-$  ione cianuro

$\text{H}_3\text{O}^+$  idrossonio  
(o catione ossonio)

$\text{CH}_3\text{COOH}$  acido acetico

$\text{CH}_3\text{COO}^-$  ione acetato

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste



# il concetto di "valenza"

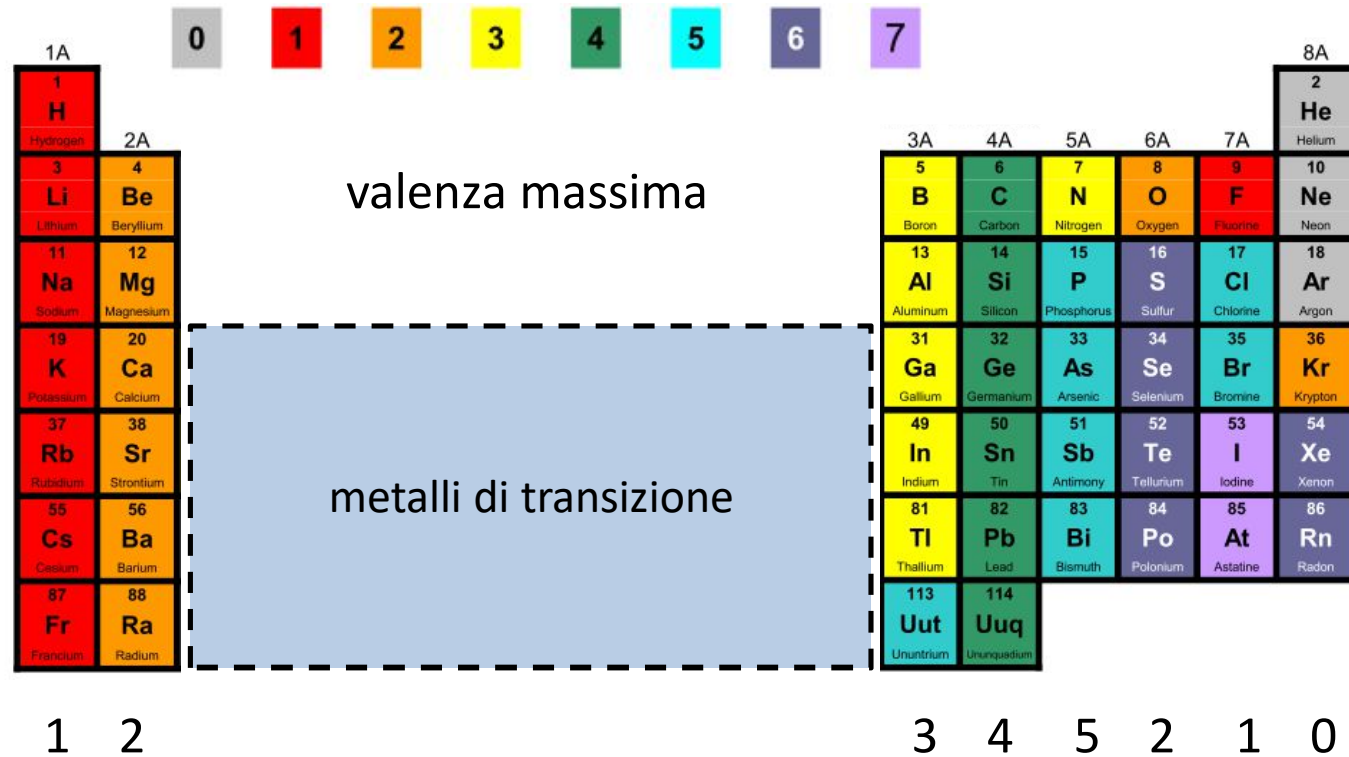
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

*"il numero massimo di atomi di H o Cl che possono combinarsi con un determinato atomo" (IUPAC)*

(misura della capacità di un atomo di formare legami)

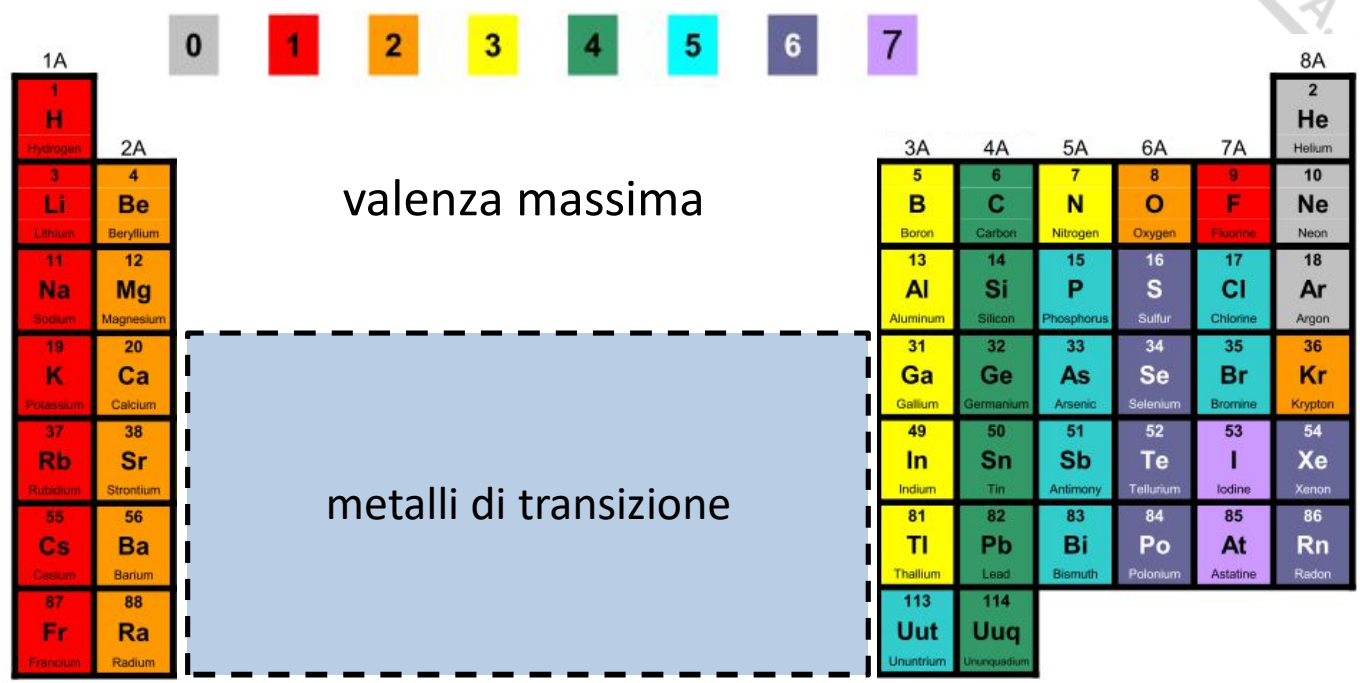
esempi

- 1 LiH
- 2 MgCl<sub>2</sub>
- 3 AlCl<sub>3</sub>
- 4 CH<sub>4</sub>
- 5 PCl<sub>5</sub>
- (...)

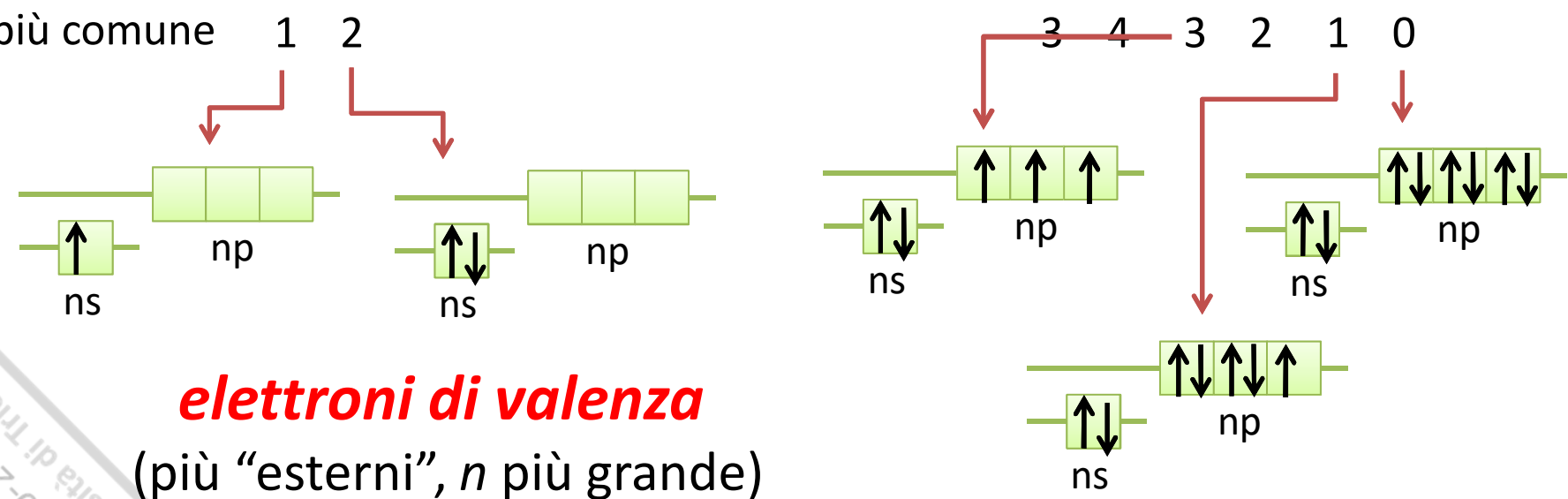


**relazione col numero di elettroni nel guscio più esterno !!!**

A. A. Università di Trieste  
2020-21



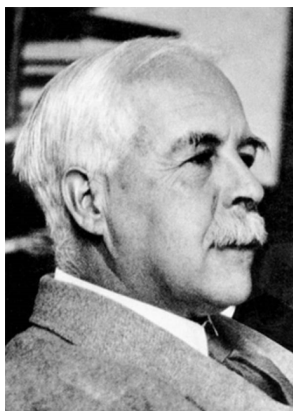
valenza più comune



# il legame covalente come condivisione di elettroni

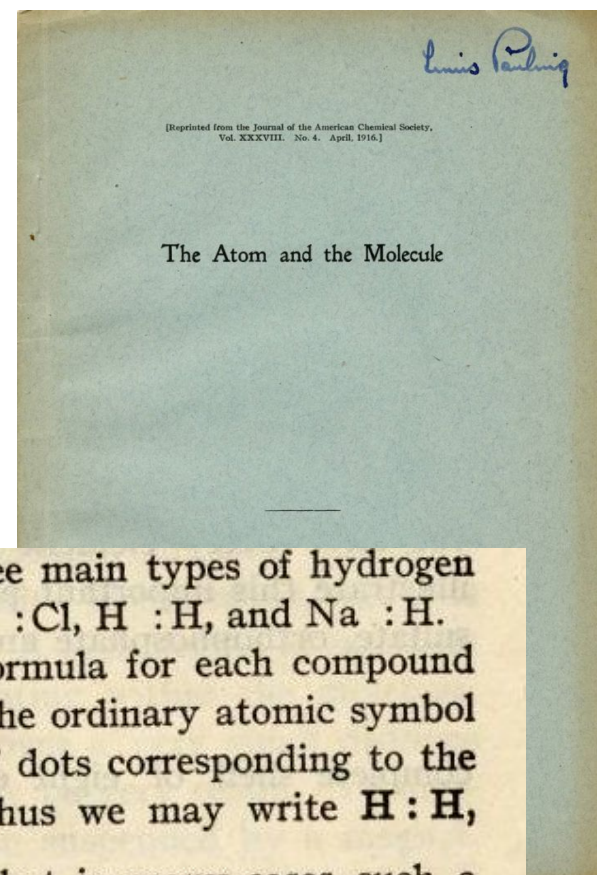
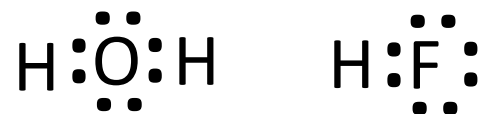
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

G.N.Lewis



1916

diagrammi di Lewis



H<sub>2</sub> is far less polar even than Cl<sub>2</sub>. The three main types of hydrogen compounds may be represented therefore by H :Cl, H :H, and Na :H.

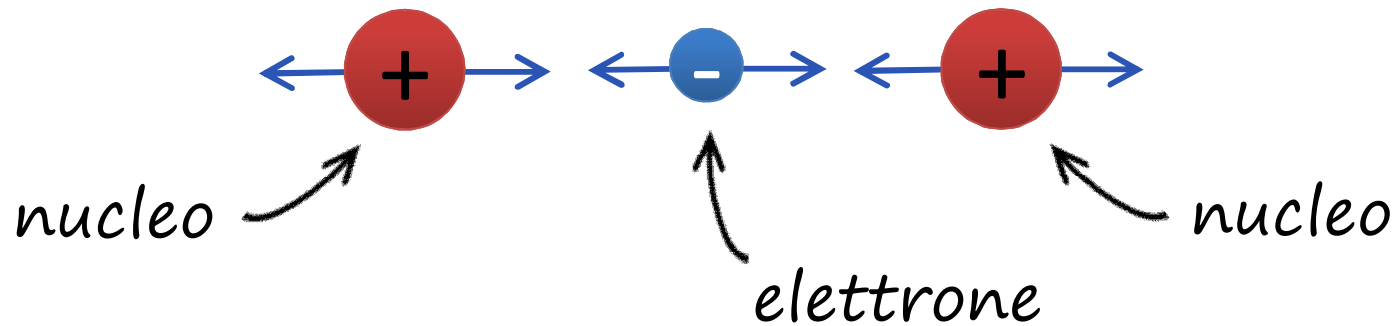
We may go further and give a complete formula for each compound by using the symbol of the kernel instead of the ordinary atomic symbol and by adjoining to each symbol a number of dots corresponding to the number of electrons in the atomic shell. Thus we may write **H : H**,  $\text{H}:\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{O}}}: \text{H}$ ,  $\text{H}:\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{I}}}:$ ,  $:\overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{I}}}: \overset{\cdot\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{I}}}:$ , but we shall see that in many cases such a formula represents only one of the numerous extreme tautomeric forms.

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# spiegazione classica del legame covalente

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

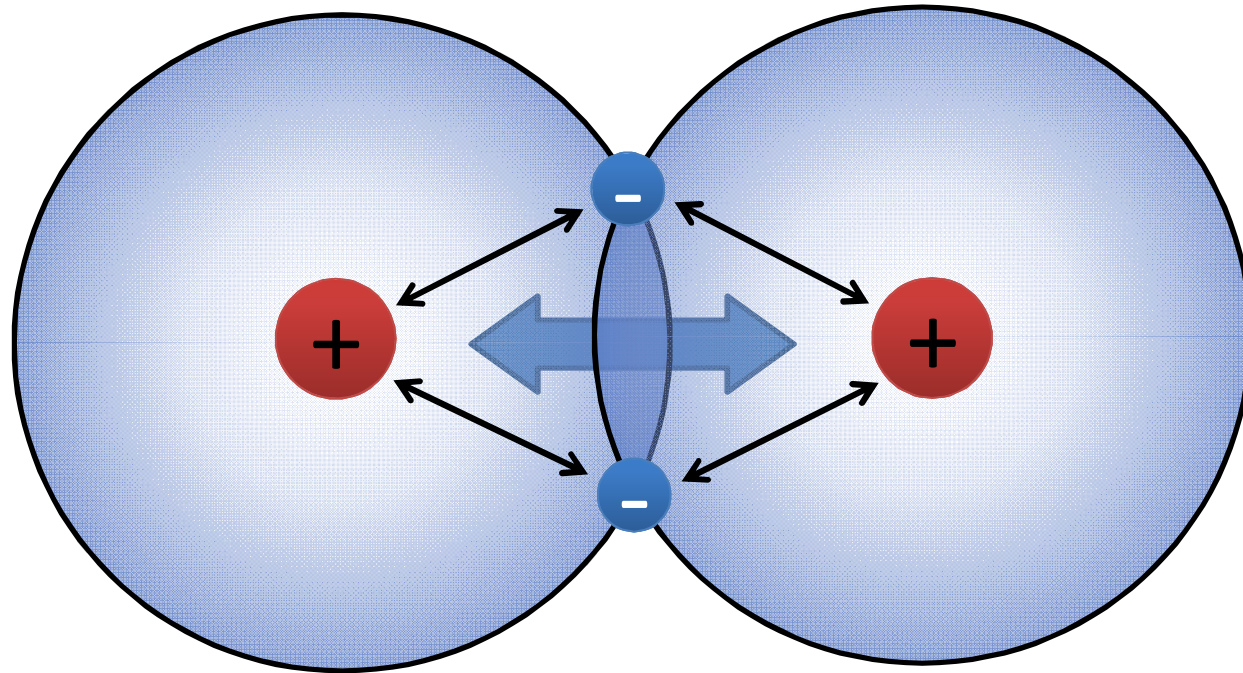
*equilibrio tra  
attrazione elettrone - nucleo  
e  
repulsione nucleo - nucleo*



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# spiegazione classica del legame covalente

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

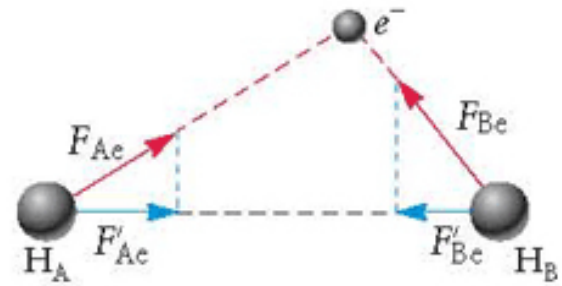


*elettroni tra i nuclei come colla  
che li tiene insieme*

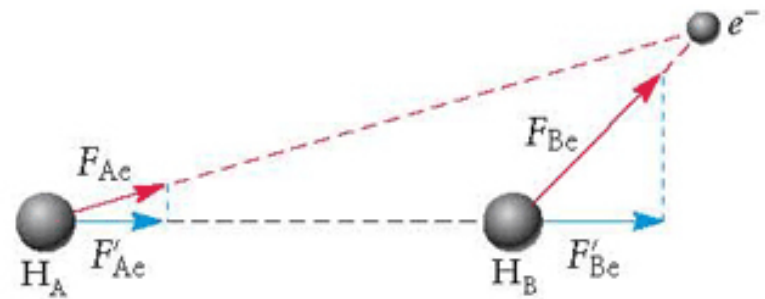
A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# spiegazione classica del legame covalente

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



*in termini di  
vettori*



Università di Trieste  
2020-21  
A. A.

# spiegazione classica del legame covalente

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

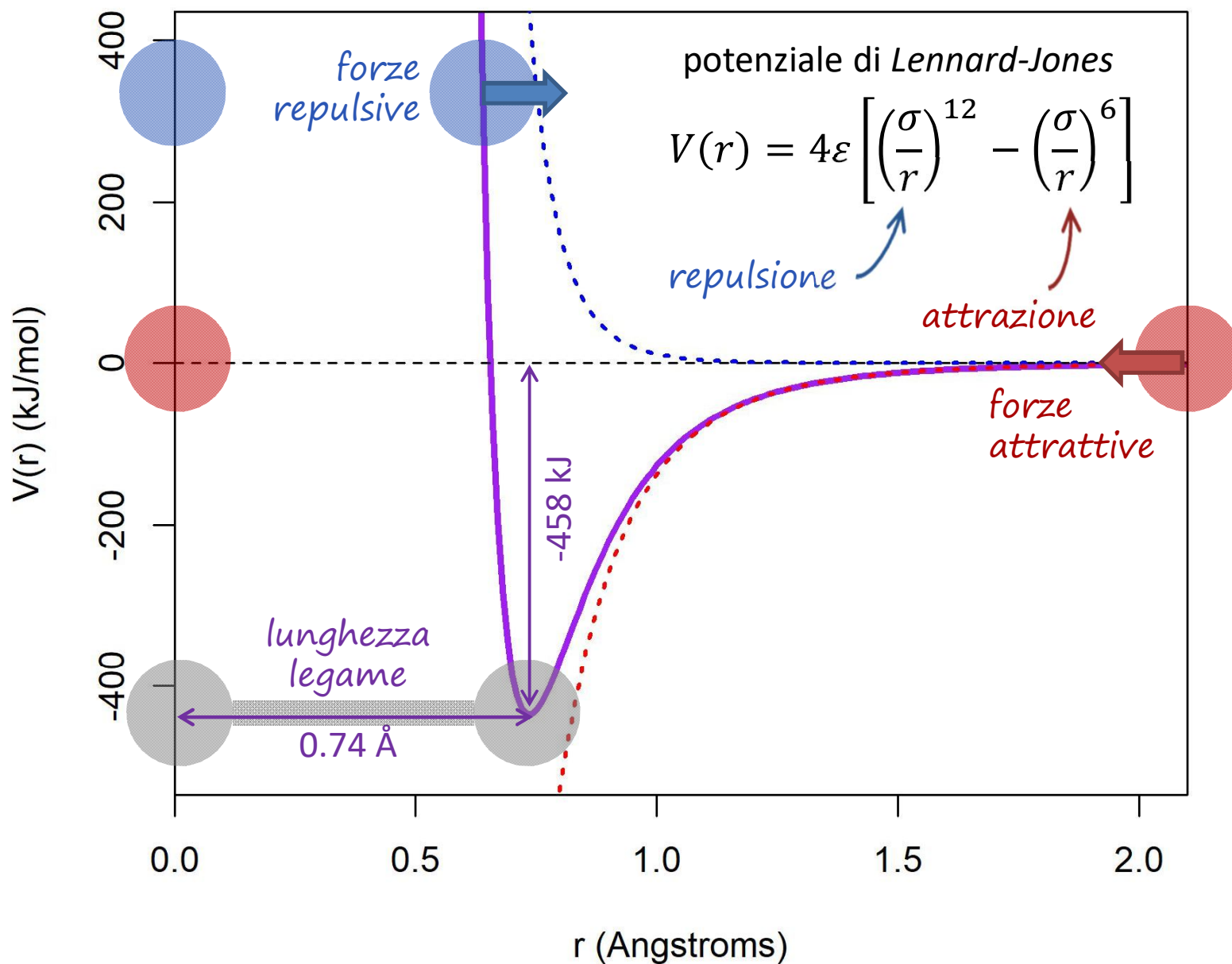
regione dove  
gli elettroni  
NON causano  
attrazione tra  
i nuclei



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# energia potenziale per la molecola di idrogeno

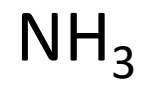
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



A.A. 2020-21  
di Trieste



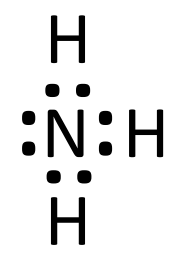
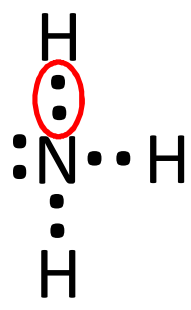
valenza 3



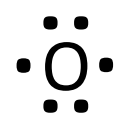
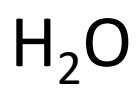
5 elettroni  
di valenza  
[He]  $2s^2 2p^3$



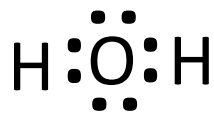
1 elettrone  
di valenza  
 $1s^1$



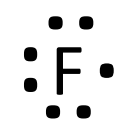
valenza 2



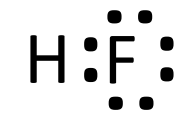
6 elettroni  
[He]  $2s^2 2p^4$



valenza 1

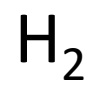


7 elettroni  
[He]  $2s^2 2p^5$

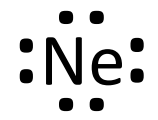


**valenza 0**

**gusci elettronici completi**



2 elettroni  
di valenza  
 $1s^2$

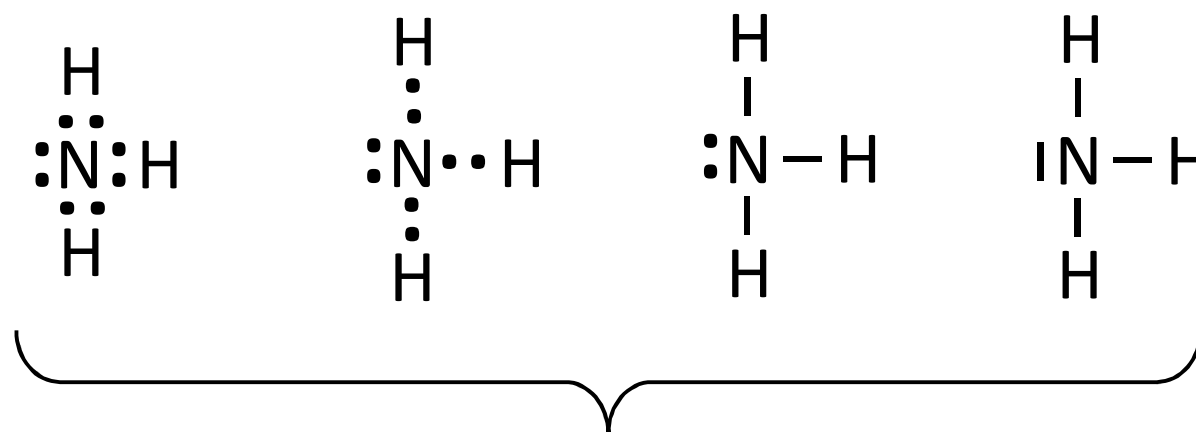


8 elettroni  
di valenza  
[He]  $2s^2 2p^6$

**legame covalente**

*condivisione di elettroni*

fino a raggiungere  
configurazione stabile  
(regola "ottetto")



## *strutture o diagrammi di Lewis*

servono a rappresentare  
come sono legati gli atomi tra loro  
attraverso la **condivisione di elettroni di valenza**

# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

1. *calcolare il totale di elettroni di valenza (V),  
aggiungendo o sottraendo elettroni nel caso  
di ioni*

O [He]  $2s^2 2p^4$  (6 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot$

N [He]  $2s^2 2p^3$  (5 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$

H  $1s^1$  (1 elettrone di valenza) H $\cdot$

$$V = (6 \times 3) + 5 + 1 = 24$$

# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

2. *calcolare il numero totale (T) di elettroni necessario affinché ciascun atomo abbia 8 elettroni (l'idrogeno 2)*

O [He]  $2s^2 2p^4$  (6 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot$

N [He]  $2s^2 2p^3$  (5 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$

H  $1s^1$  (1 elettrone di valenza) H $\cdot$

$$V = 24$$

$$T = (8 \times 3) + 8 + 2 = 34$$

# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

3. *calcolare il numero di legami L (i.e. 2 elettroni condivisi) come  $(T-V) / 2$*

O [He]  $2s^2 2p^4$  (6 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot$

N [He]  $2s^2 2p^3$  (5 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$

H  $1s^1$  (1 elettrone di valenza) H $\cdot$

$$V = 24$$

$$T = 34$$

$$\text{N}^\circ \text{ legami} = (T-V) / 2 = (34-24) / 2 = 5$$

# strutture di Lewis

? HNO<sub>3</sub> ?

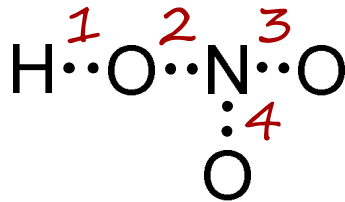
4. assegnare i legami (i.e. coppie di elettroni di valenza) tra gli atomi della molecola prendendoli da V



V = 24

T = 34

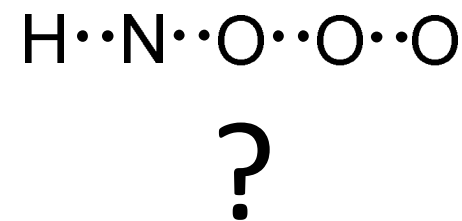
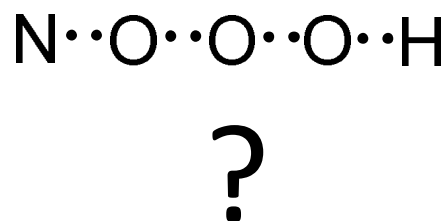
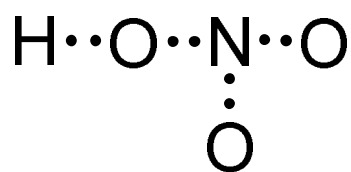
N° legami = 5



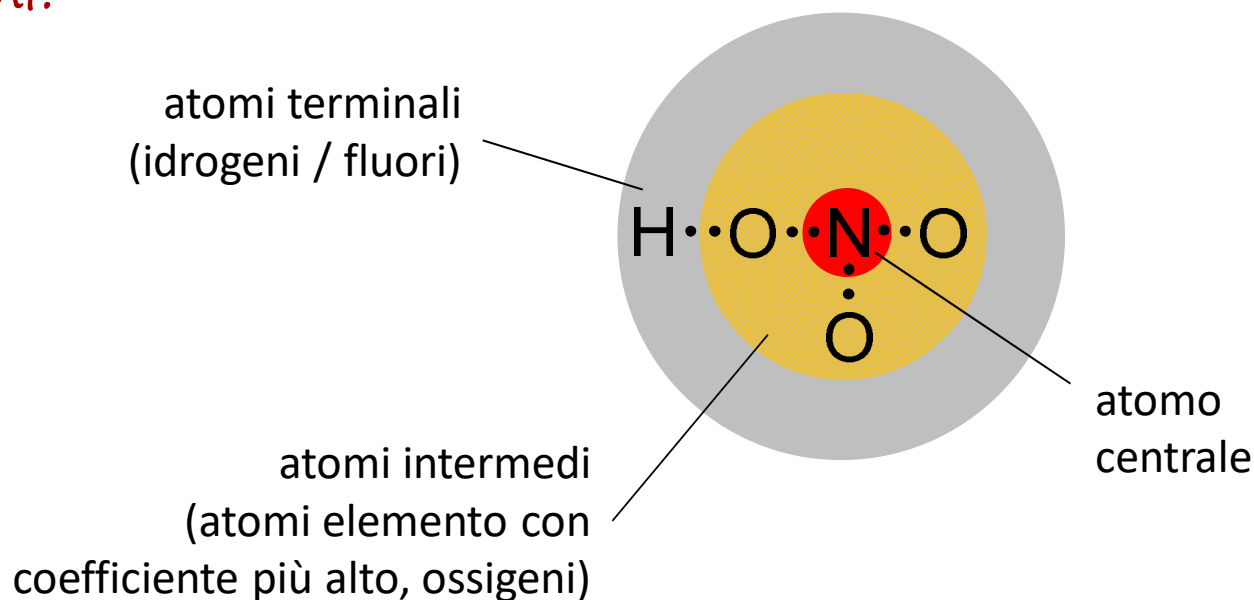
4 legami  
(8 elettroni)  
e<sup>-</sup> rimanenti: 16

# strutture di Lewis

*passaggio più difficile: come sistemare / connettere gli atomi?*



*per anidridi, ossiacidi  
e ossoanioni:*



# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

5. se rimangono ancora legami da assegnare, assegnare legami doppi (4 coppie) o tripli (6 coppie) tra C,N,O,S, prendendoli da V

O [He]  $2s^2 2p^4$  (6 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot$

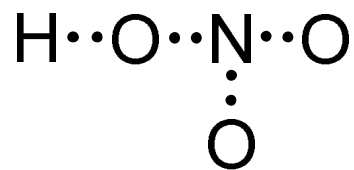
N [He]  $2s^2 2p^3$  (5 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$

H  $1s^1$  (1 elettrone di valenza) H $\cdot$

$$V = 24$$

$$T = 34$$

$$N^\circ \text{ legami} = 5$$



4 legami  
(8 elettroni)



# ordine di legame

*legami multipli comuni per legami  
che coinvolgono 2 tra C, N, O, S*



**ordine** di  
legame  
numero di  
coppie condivise

**energia** di  
legame  
energia richiesta per  
rompere il legame

**lunghezza** di  
legame  
distanza tra i  
due nuclei

	ordine	energia (kJ/mol)	lunghezza (pm)
C••C	1	347	154
C::C	2	614	134
C:::C	3	839	120

# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

5. se rimangono ancora legami da assegnare, assegnare legami doppi (4 coppie) o tripli (6 coppie) tra C,N,O,S, prendendoli da V

O [He]  $2s^2 2p^4$  (6 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot$

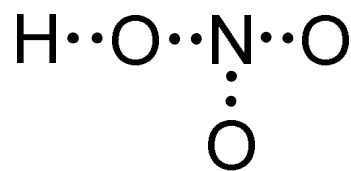
N [He]  $2s^2 2p^3$  (5 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$

H  $1s^1$  (1 elettrone di valenza) H $\cdot$

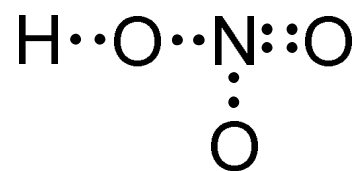
$$V = 24$$

$$T = 34$$

$$N^\circ \text{ legami} = 5$$



4 legami  
(8 elettroni)



5 legami  
(10 elettroni)  
 $e^-$  rimanenti: 14

# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

6. se rimangono ancora elettroni di valenza, sistemarli come coppie di non-legame, in modo che tutti gli atomi abbiano 8 elettroni\*

\* tranne H

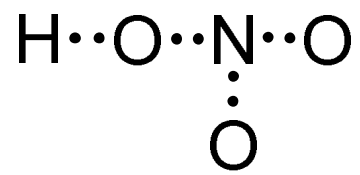


**REGOLA  
DELL' OTTETTO**

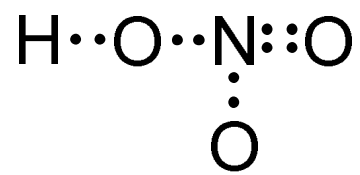
$V = 24$

$T = 34$

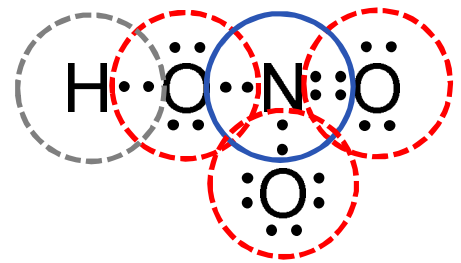
$N^\circ \text{ legami} = 5$



4 legami  
(8 elettroni)



5 legami  
(10 elettroni)



5 legami +  
7 coppie  
(24 elettroni)

# strutture di Lewis

? HNO<sub>3</sub> ?

7. *calcolare la carica formale (= elettroni di valenza - elettroni nella struttura di Lewis, equamente divisi per ciascun atomo)*

O [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>4</sup> (6 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot \cdot\ddot{\text{O}}\cdot$

N [He] 2s<sup>2</sup> 2p<sup>3</sup> (5 elettroni di valenza)  $\cdot\ddot{\text{N}}\cdot$

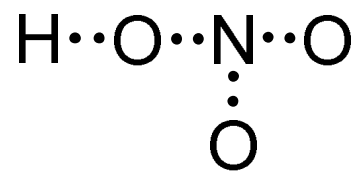
H 1s<sup>1</sup> (1 elettrone di valenza) H·

*somma delle cariche formali  
= carica molecola o ione*

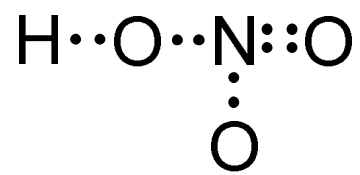
*V = 24*

*T = 34*

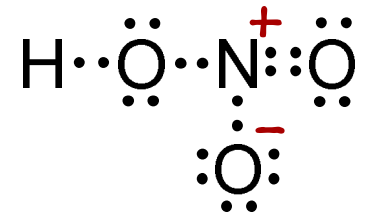
*N° legami = 5*



*4 legami  
(8 elettroni)*



*5 legami  
(10 elettroni)*



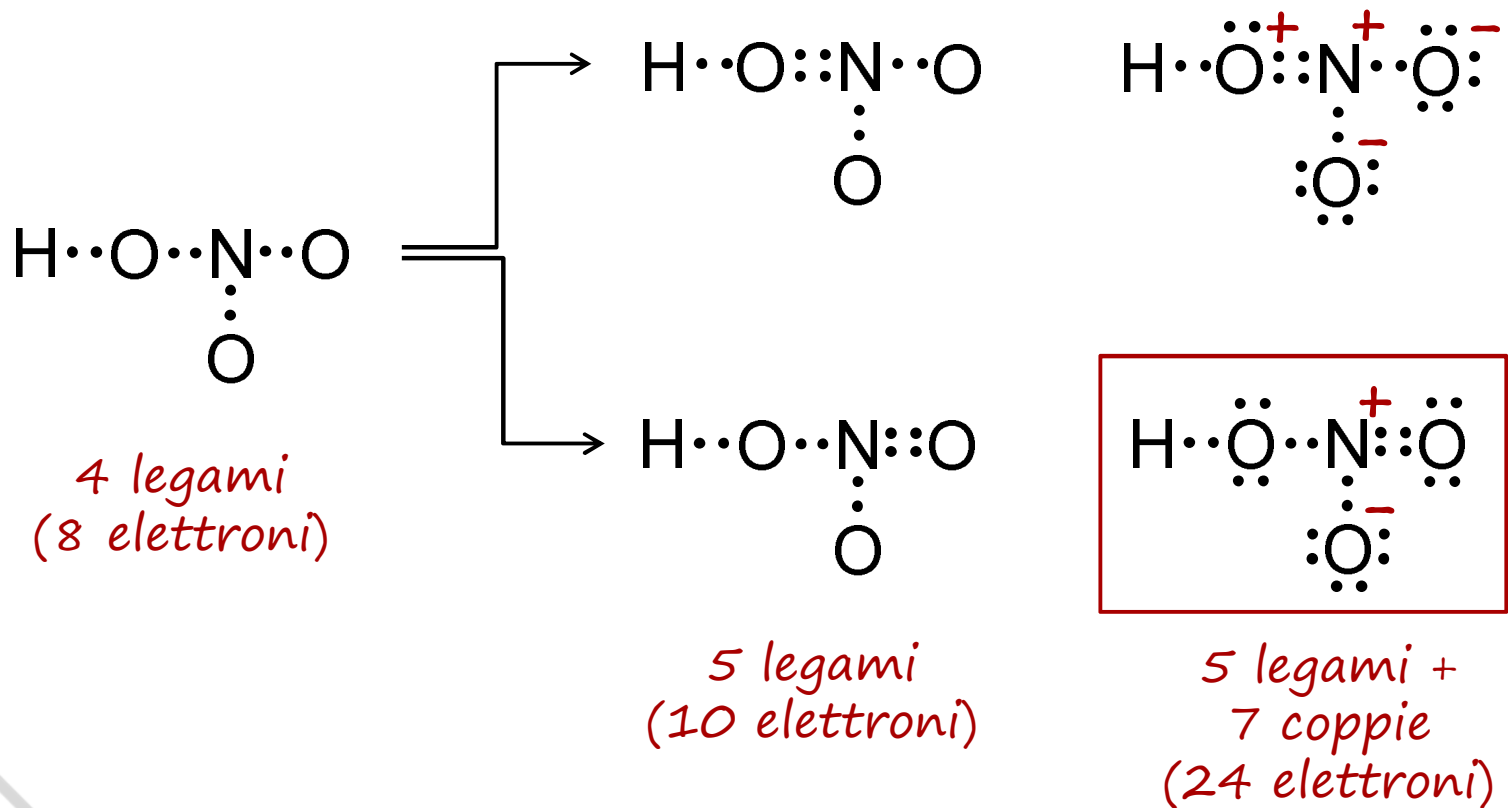
*5 legami +  
7 coppie  
(24 elettroni)*

# strutture di Lewis

?  $\text{HNO}_3$  ?

$N^\circ$  legami = 5

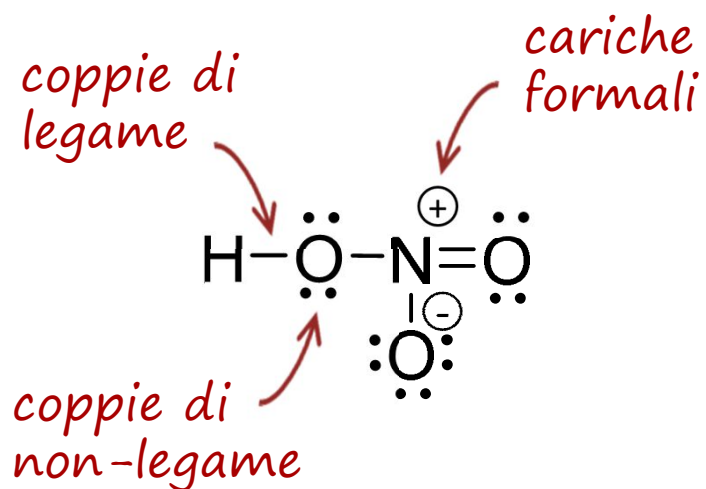
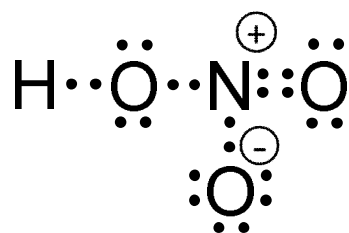
8. *in caso di più strutture possibili, scegliere quella col minor numero di cariche formali*



# strutture di Lewis

? HNO<sub>3</sub> ?

*struttura di Lewis più corretta*



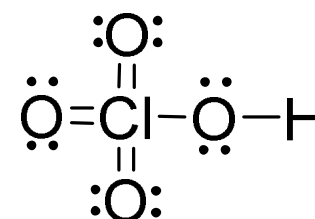
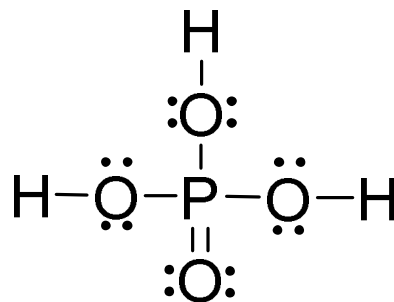
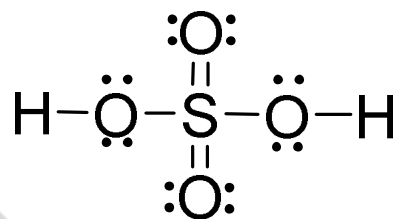
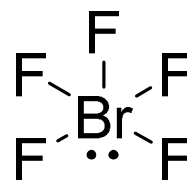
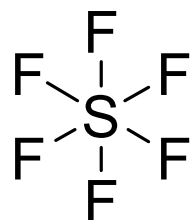
# eccezioni alla regola dell'ottetto\*

\* possibili più o meno di 8 elettroni condivisi

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

1. espansione del guscio di valenza  
(più di 8 elettroni condivisi)

comune per S, P, alogeni (F, Cl, Br, I)

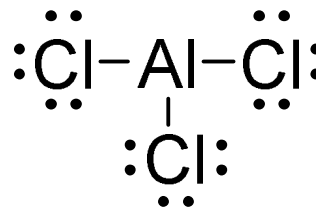
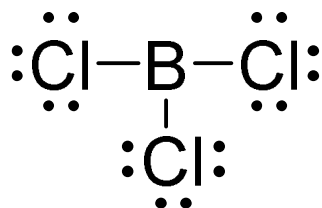


# eccezioni alla regola dell'ottetto\*

\* possibili più o meno di 8 elettroni condivisi

**2.** ottetto incompleto  
(meno di 8 elettroni condivisi)

comune per H, B, Al





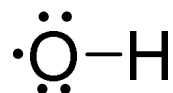
# eccezioni alla regola dell'ottetto\*

\* possibili più o meno di 8 elettroni condivisi

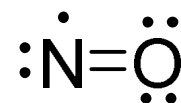
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

## 3. numero dispari di elettroni (*radicali*) (7 elettroni condivisi)

comune per N, O ed altri



(radicale ossidrile,  
idrossile o ossidrile)

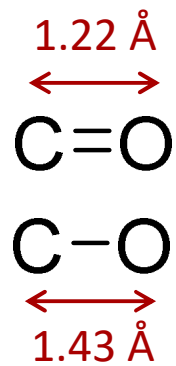
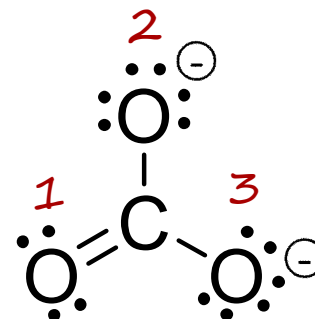
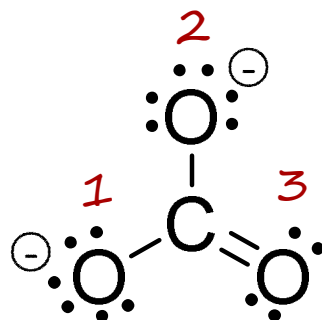
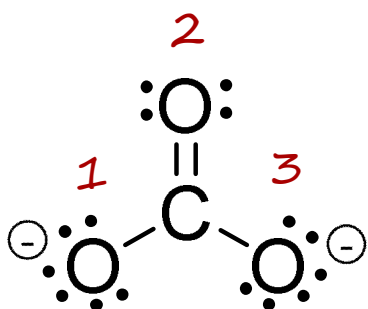
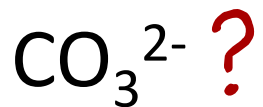


(monossido  
di azoto)

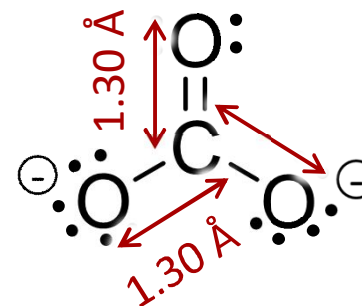
ROS (Reactive Oxygen Species)

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

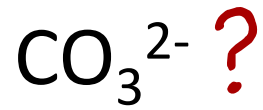
# mesomeria (o risonanza)



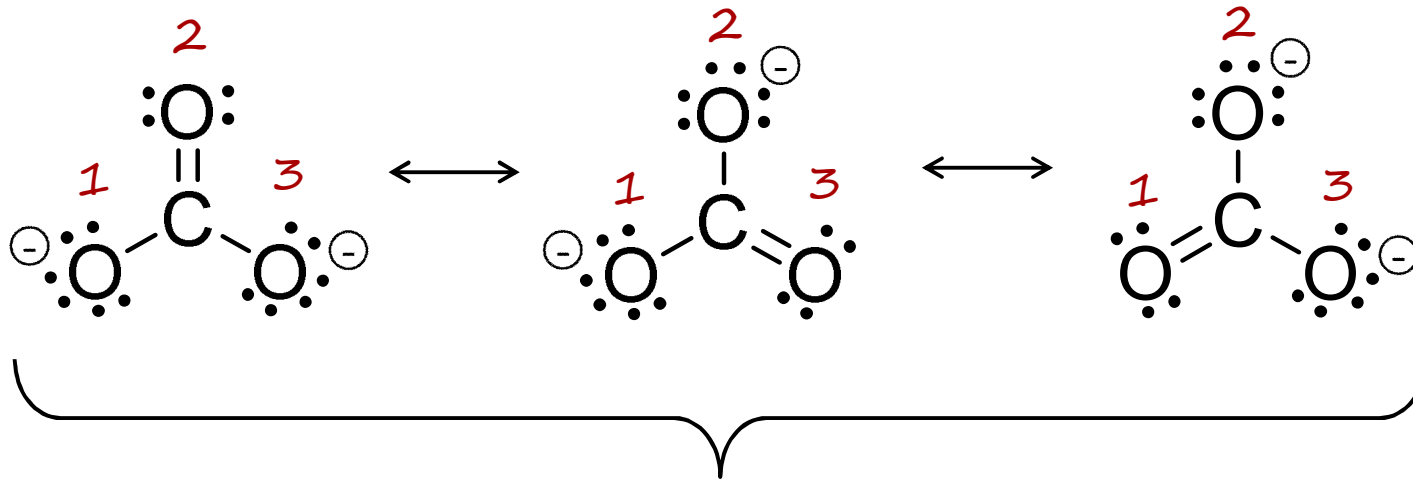
distanza tra C e O  
misurata nel  $\text{CO}_3^{2-}$ :  
1.30 Å !!!



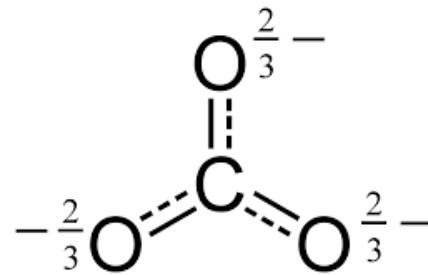
# mesomeria (o risonanza)



strutture LIMITE



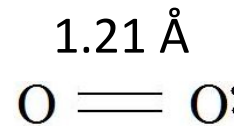
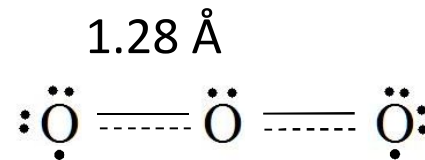
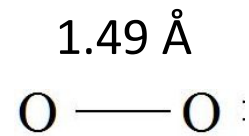
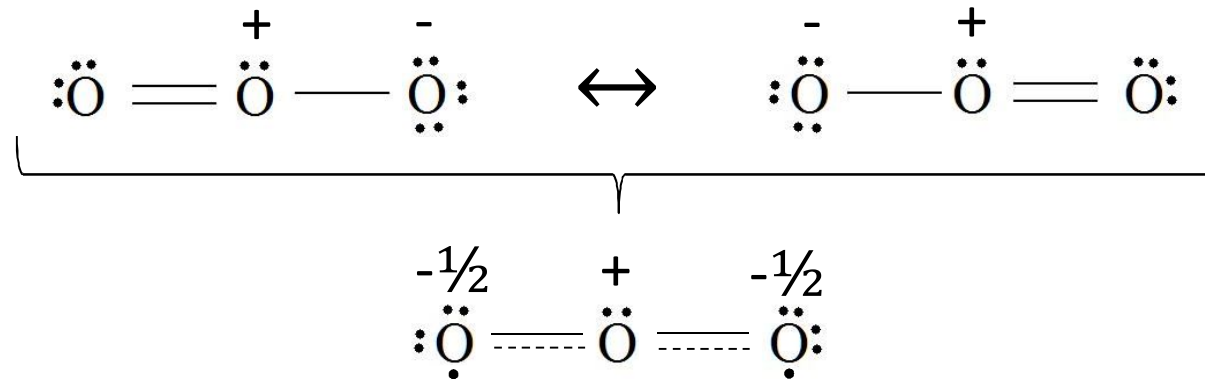
limite del  
formalismo  
di Lewis



IBRIDO di risonanza

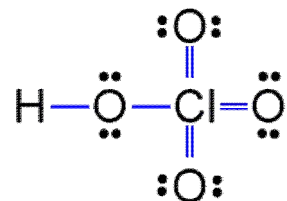
# mesomeria (o risonanza)

O<sub>3</sub> ?  
ozono

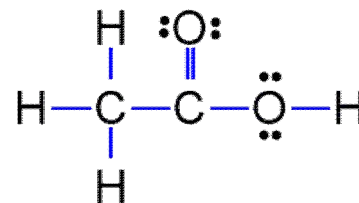


# Strutture di Lewis di altri composti importanti

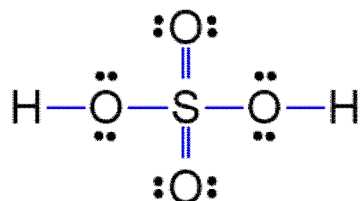
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



acido  
perclorico



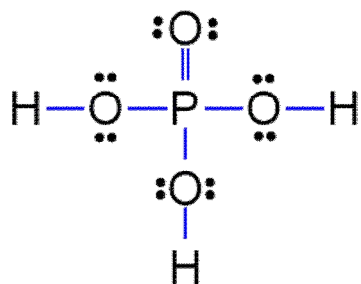
acido  
acetico



acido  
solforico



acido  
cianidrico



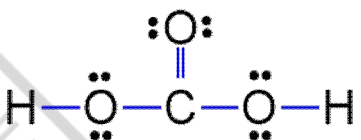
acido  
fosforico



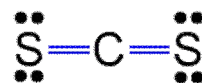
ossigeno molecolare



azoto molecolare



acido  
carbonico

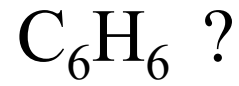


disolfuro di carbonio

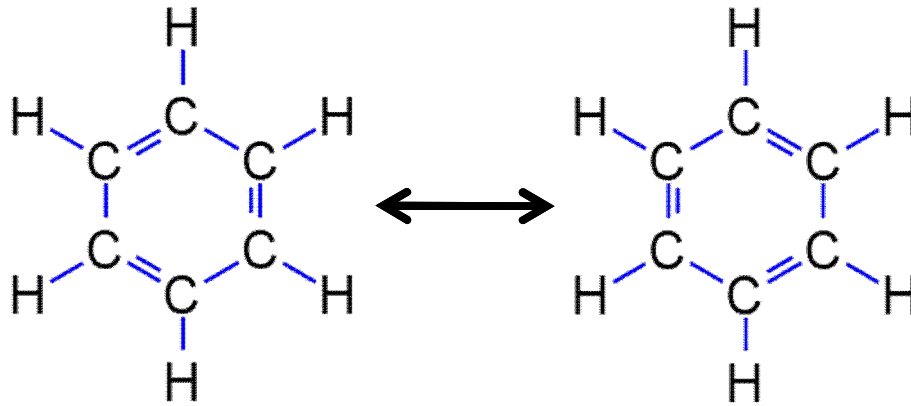
A.A.  
2020-21  
Università di Trieste

# la struttura del benzene

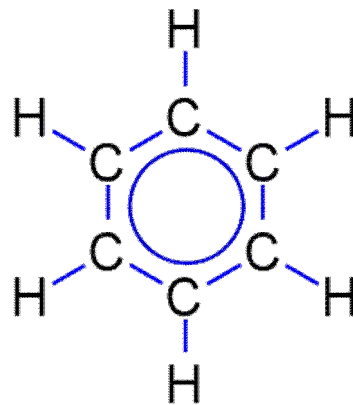
F.A. Kekulé



1865



ibrido di  
risonanza



# rappresentazione di molecole

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

diagramma  
di Lewis

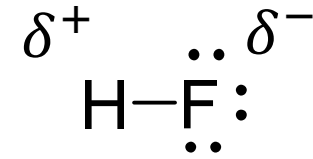
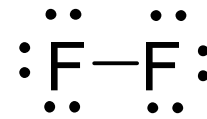
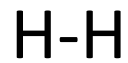
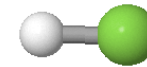
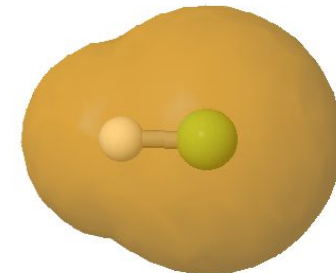
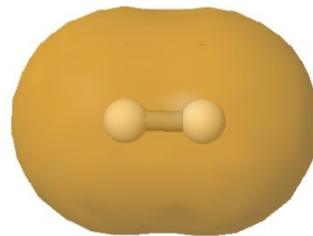


diagramma  
sfere e bastoncini



superficie  
molecolare

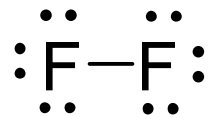
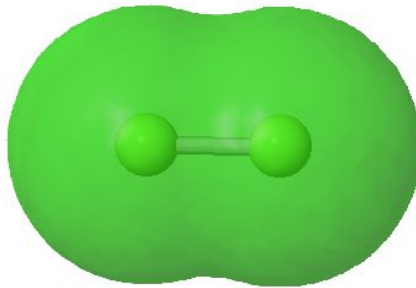


A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

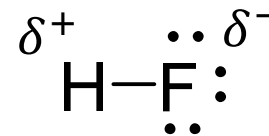
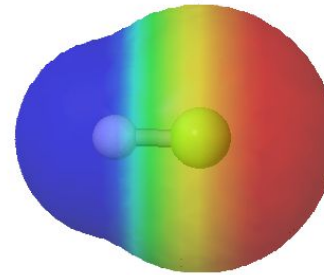
# rappresentazione di molecole

## Molecular Electrostatic Potential (MEP)

condivisione  
equa



condivisione  
NON equa



*excesso di  
carica  
negativa*

$\delta^-$



$\delta^+$

*excesso di  
carica  
positiva*



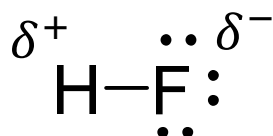
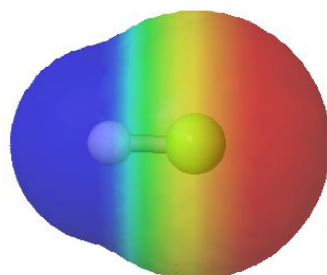
**affinità elettronica**  
ed  
**energia di ionizzazione**  
sono diverse per H e F



**elettronegatività**  
**(Mullikan)**

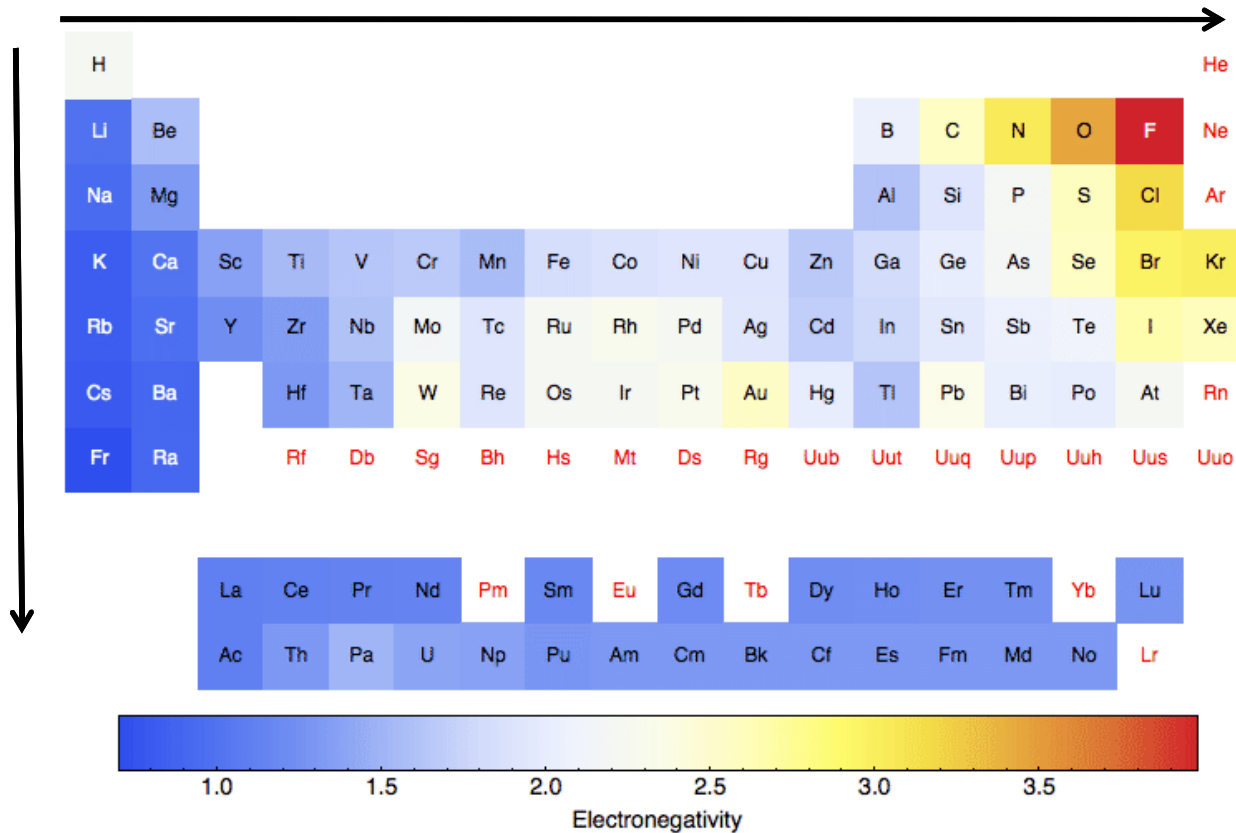
media aritmetica di affinità  
elettronica ed energia di  
ionizzazione

**H 3.06 F 4.42**



# elettronegatività di Pauling (1931)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



## elettronegatività ( $\chi$ )

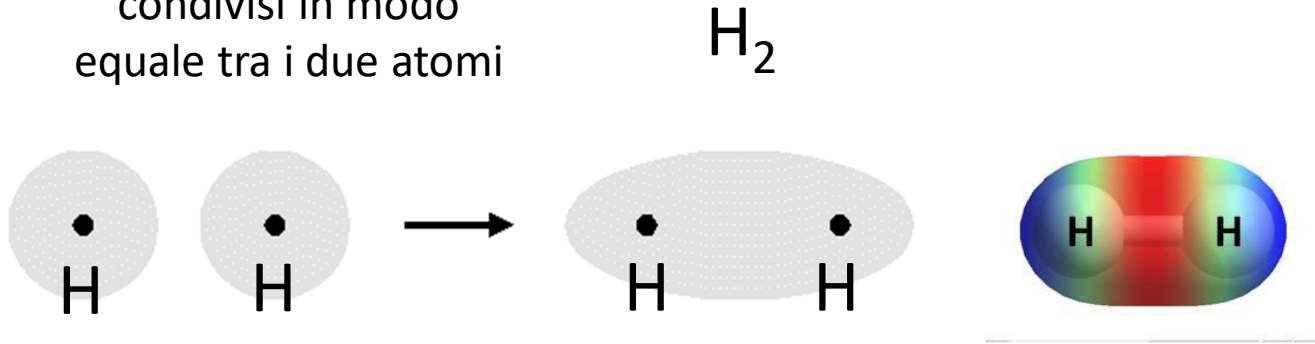
misura della tendenza di un atomo ad attrarre verso di sé gli elettroni di legame

$$|\chi_A - \chi_B| = k\sqrt{\Delta}$$

$$\Delta = E_{(A-B)} - \frac{1}{2}[E_{(A-A)} + E_{(B-B)}]$$

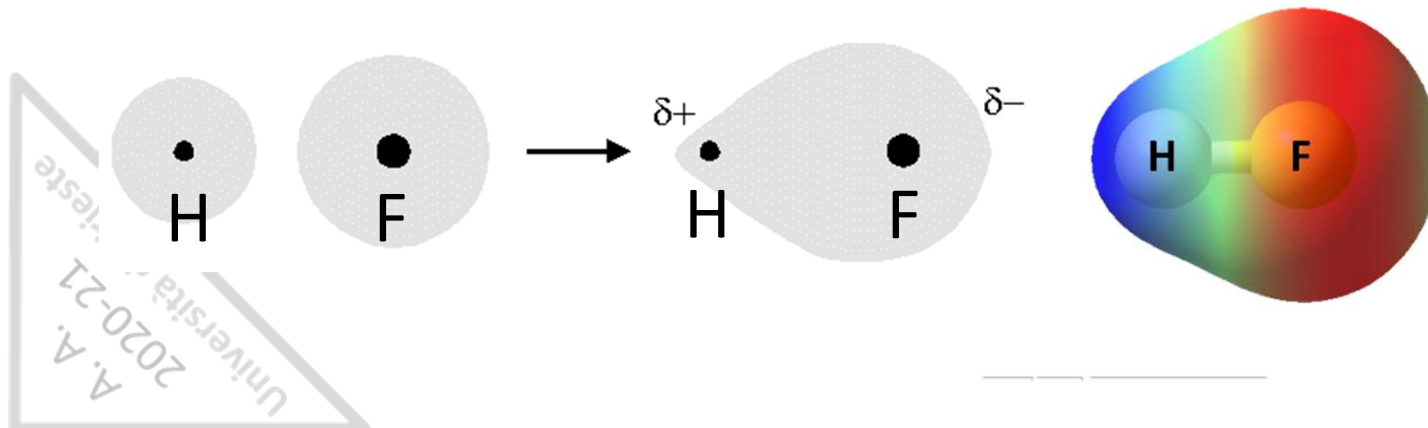
A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

elettroni di legame sono  
condivisi in modo  
eguale tra i due atomi



legame  
**COVALENTE**  
“puro”

elettroni di legame **NON**  
sono condivisi in modo  
eguale tra i due atomi



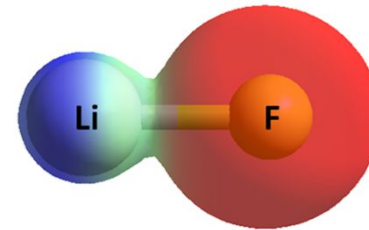
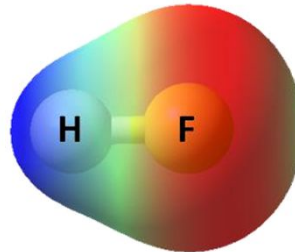
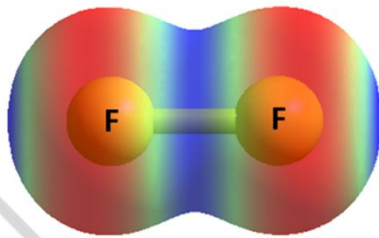
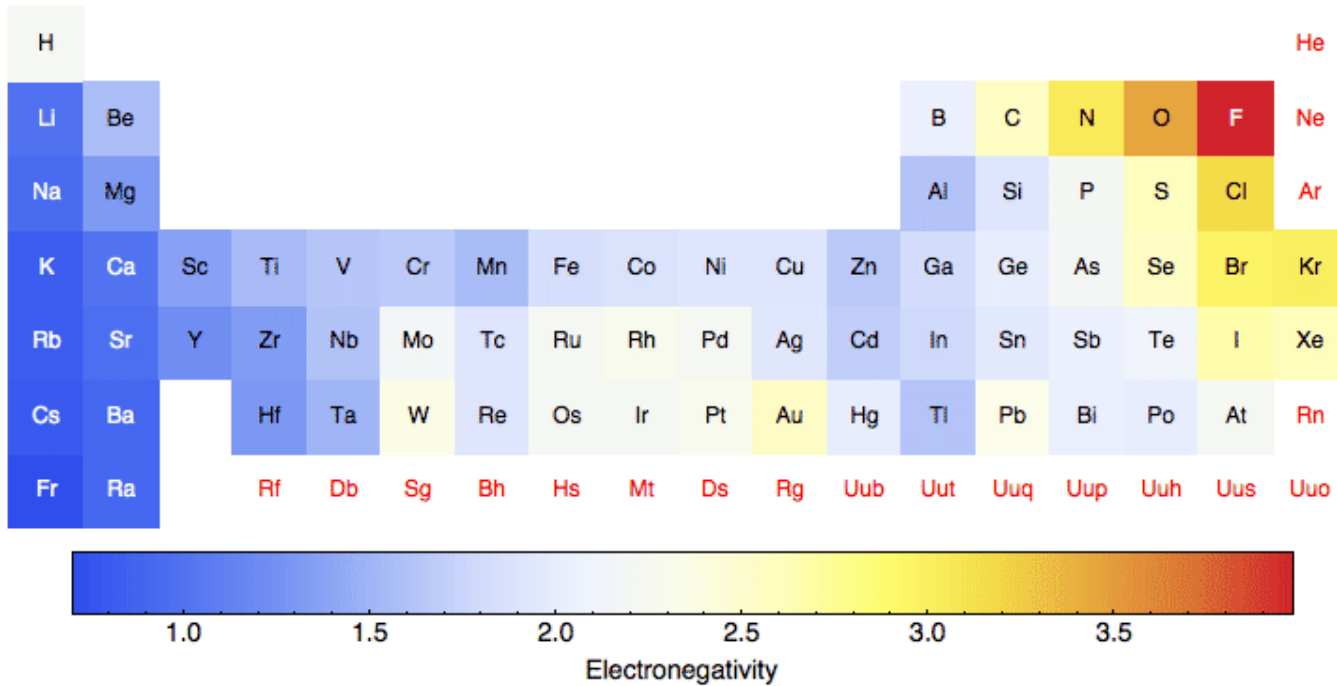
legame  
**COVALENTE**  
**polare**

differenza di  
elettronegatività



natura polare  
del legame

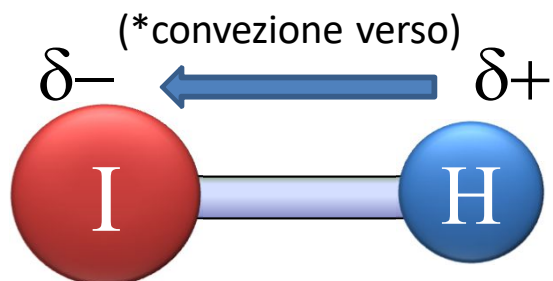
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



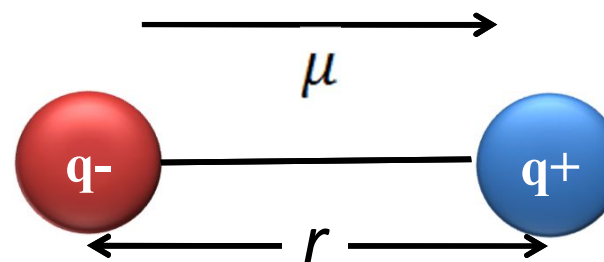
A.A.  
2020-21  
Università di Trieste

# momento di dipolo elettrico

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



Lo iodio attrae  
maggiormente gli elettroni  
(più elettronegativo)



$$\mu = Qr$$

momento di dipolo

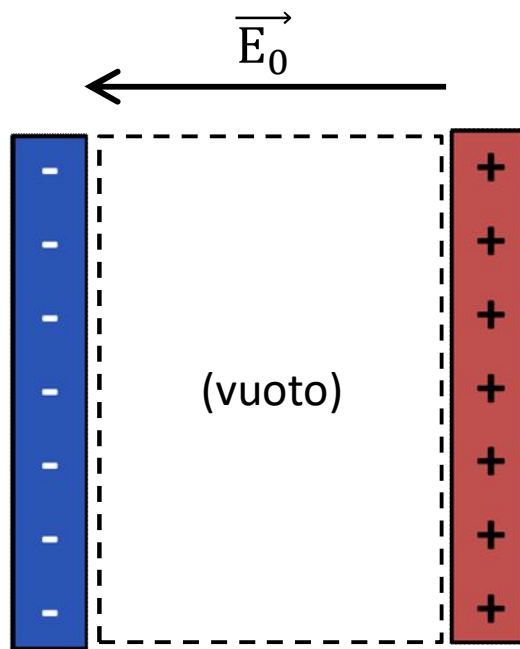
(Debye  $1D = 3.34 \cdot 10^{-30} \text{ C m}$ )

# misura del momento di dipolo

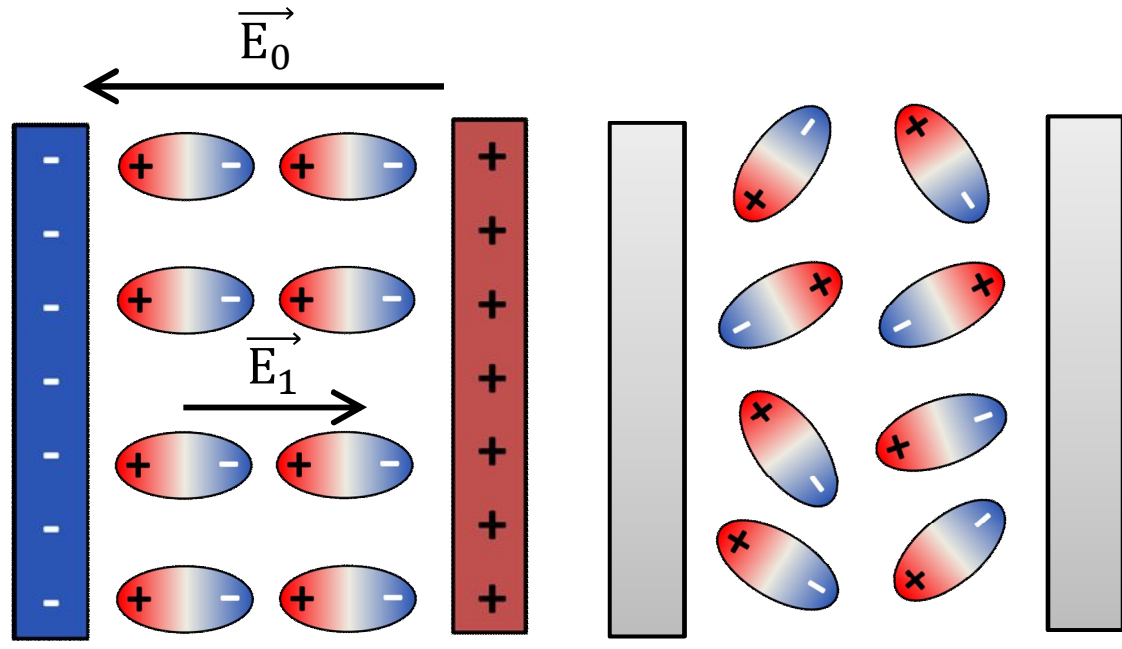
da misure di  
capacità  
elettrica

$$C \propto \frac{1}{|E|}$$

capacità inversamente  
proporzionale al  
campo tra le piastre



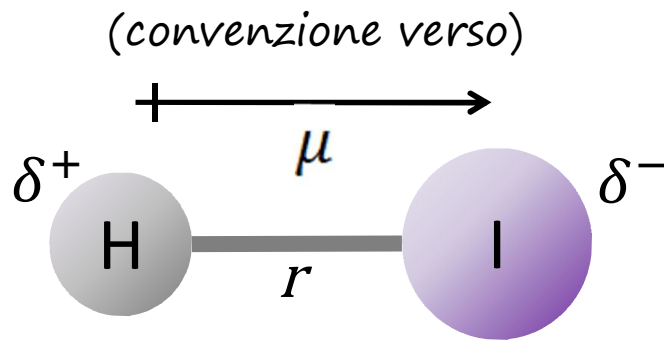
$$\vec{E} = \vec{E}_0$$



$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_1$$

↓ diminuzione  $E$   
↑ aumento  $C$

# momento di dipolo elettrico

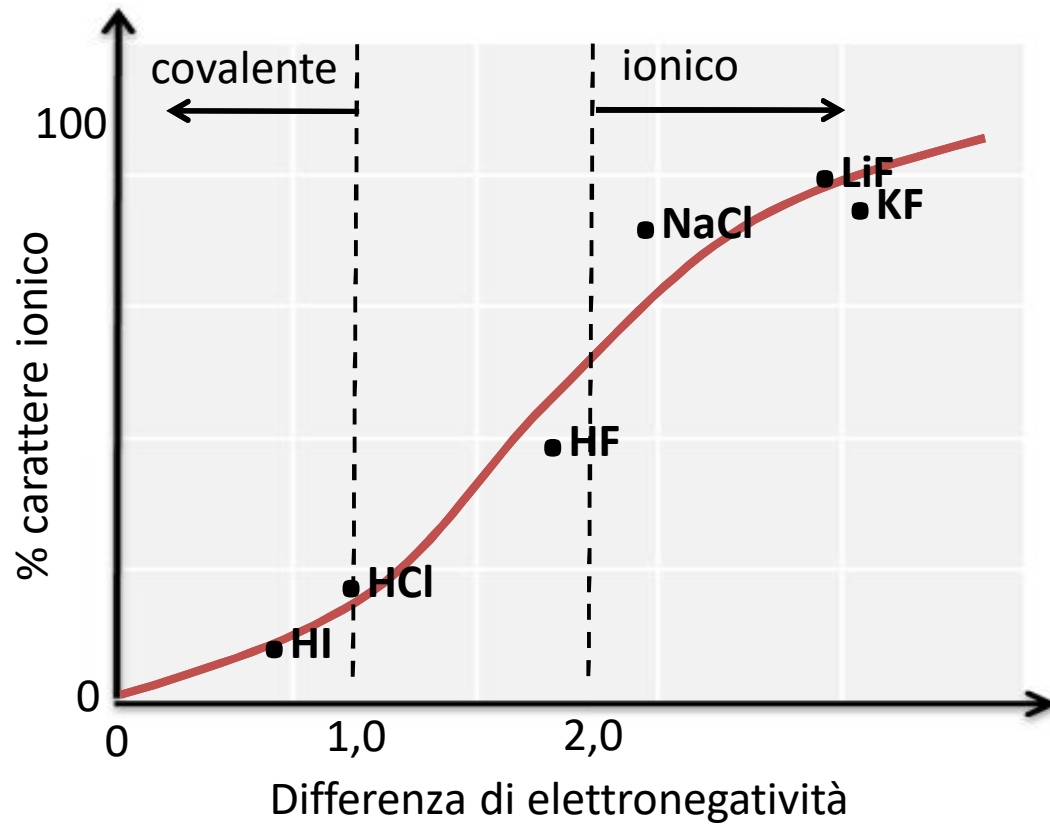


$$\mu = Qr$$

se conosco  $\mu$  e  $r$  posso ricavare  $Q$   
(frazione di carica, ossia  $\delta^+$ ,  $\delta^-$ )

$$\% \text{ carattere ionico} = 100\% \cdot \frac{\mu_{\text{reale}}}{\mu_{\text{ionico}}}$$

*misurato* ←  
← *teorico*

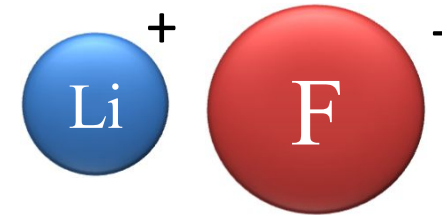


$$\mu = Qr$$

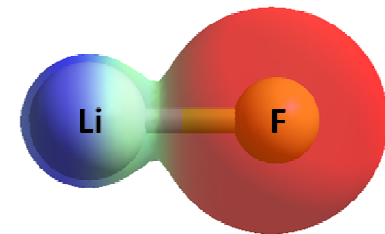
se conosco momento  
dipolare e distanza di  
legame posso ricavare Q  
(frazione di carica)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

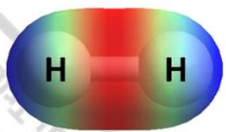
legame ionico  
catione      anione



LiF ionico  
Δχ = 3.0



H<sub>2</sub> covalente puro



Δχ = 0

HF covalente polare

Δχ = 1.8

Aumento del carattere ionico

A. A. Università di Trieste  
2020-21



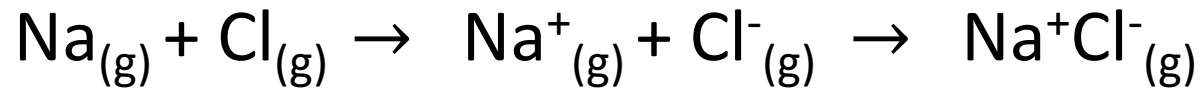
# il legame ionico

$$\Delta\chi > 2.0$$

elevata differenza  
in elettronegatività



“spostamento” di uno o più  
elettroni dall'atomo meno  
elettronegativo a quello più  
elettronegativo



# legame chimico

condivisione o trasferimento di elettroni

elettroni condivisi  
equamente

elettroni condivisi  
iniquamente

elettroni trasferiti  
(attrazione coulombiana)

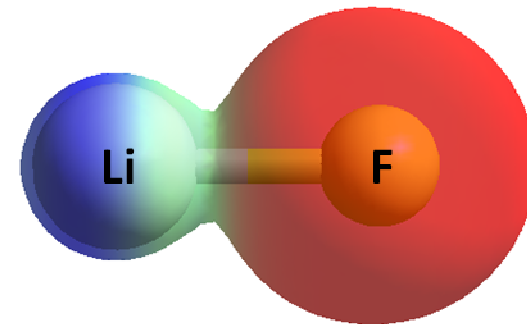
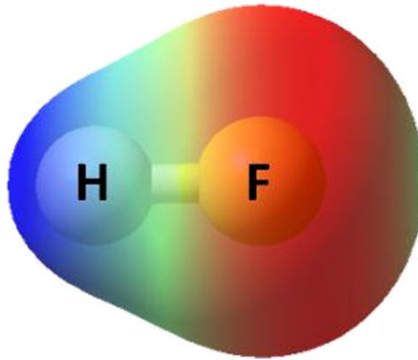
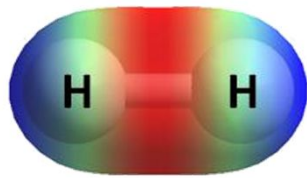
**covalente**

**covalente polare**

**ionico**



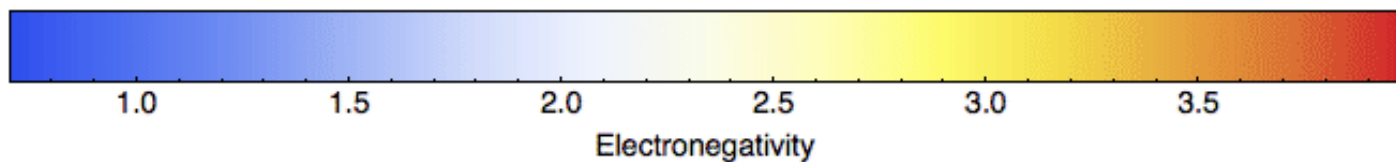
Aumento del carattere ionico



$\chi$

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

slides  
delle lezioni  
ONIFACIO



NaF ?      Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ?      H<sub>2</sub>O ?

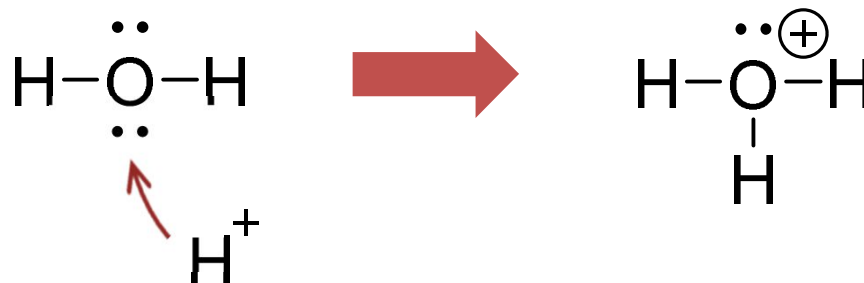
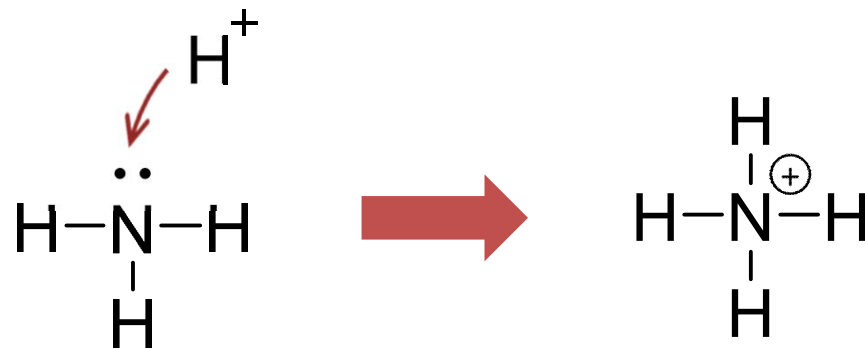
CH<sub>4</sub> ?      TiO<sub>2</sub> ?      CaO ?      SiO<sub>2</sub> ?



A.A. 2020-21  
Università di Trieste

# legame covalente dativo (o di coordinazione)

*quando entrambi gli elettroni di legame sono messi a disposizione da un atomo*

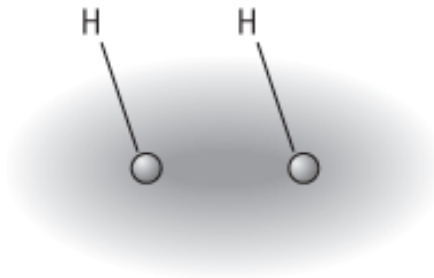


# legame chimico

condivisione o trasferimento di elettroni

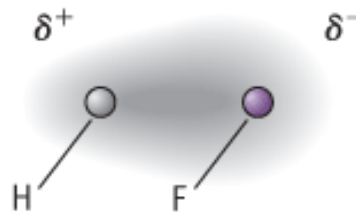
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

elettroni condivisi  
equamente



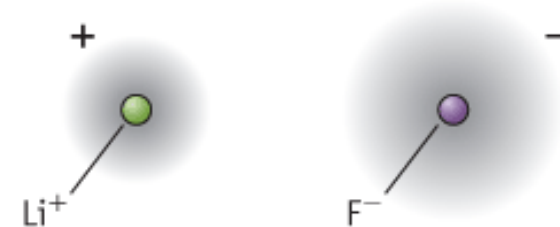
**covalente**

elettroni condivisi  
iniquamente



**covalente polare**

elettroni trasferiti  
(attrazione coulombiana)



**ionico**

—————→  
(dativo)                      Aumento del carattere ionico

*... e per i metalli puri?  
(maggioranza degli elementi)*

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

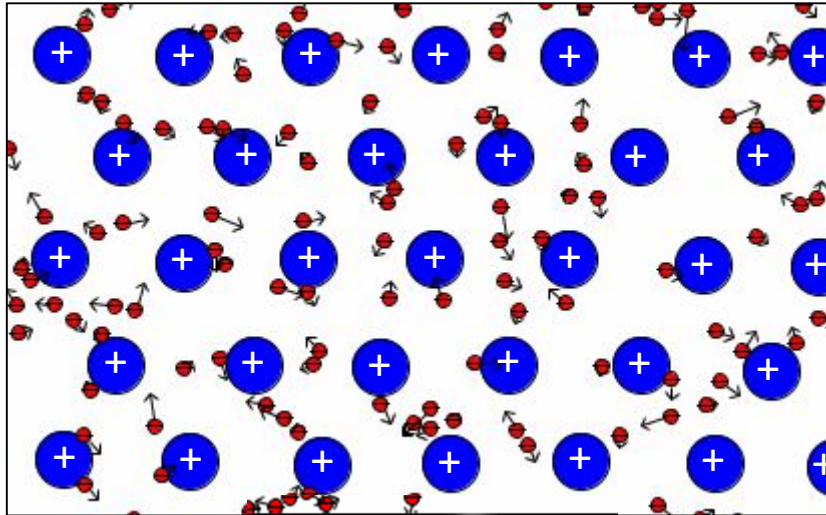
# il legame metallico (parte I)



## *caratteristiche dei metalli*

- **elevata conducibilità elettrica**
- elevata conducibilità termica
- **lucentezza**
- **malleabilità e duttilità**
- effetto fotoelettrico

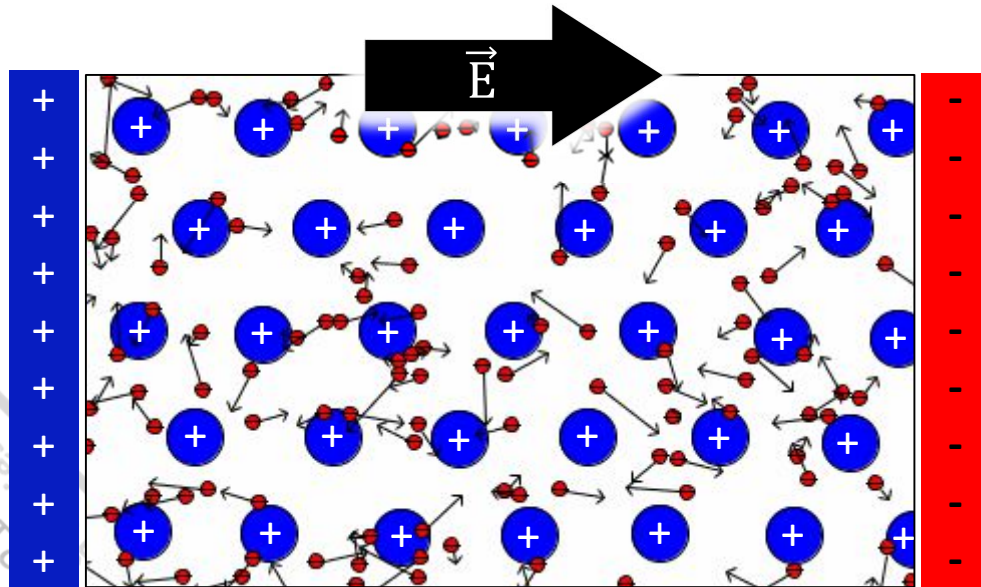
# il modello di Drude-Lorentz



delocalizzazione  
degli elettroni di legame  
su più nuclei (bassa E.N.)

*(“mare o gas di elettroni”)*

- ⊕ ioni positivi (nuclei ed gusci interni)
- ⊙ elettroni esterni (di valenza)

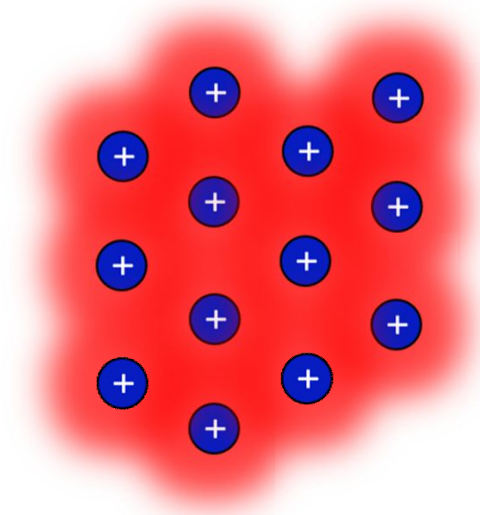
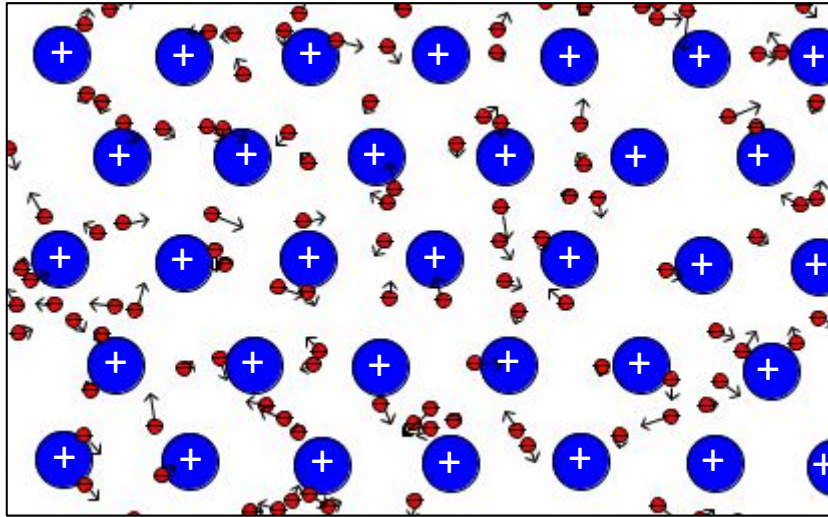


*se applichiamo un  
campo elettrico esterno,  
elettroni liberi di muoversi*

*spiega*

- conducibilità elettrica*
- lucentezza*
- effetto fotoelettrico*

# il modello di Drude-Lorentz



*modello molto semplice,  
utile per spiegare alcuni fenomeni*

*esiste teoria più complessa  
(teoria della struttura a bande...)*

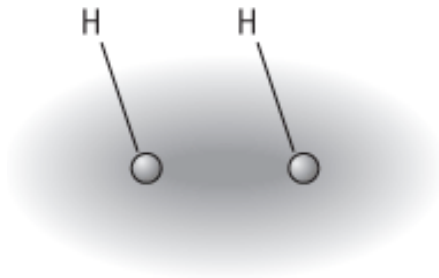


# legame chimico

condizione o trasferimento di elettroni

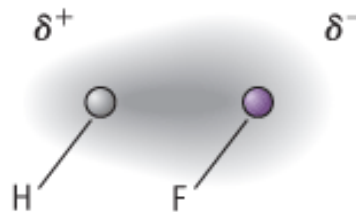
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

elettroni condivisi  
equamente



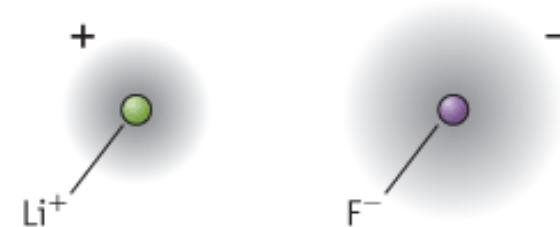
**covalente**

elettroni condivisi  
iniquamente



**covalente polare**

elettroni trasferiti  
(attrazione coulombiana)



**ionico**



Aumento del carattere ionico

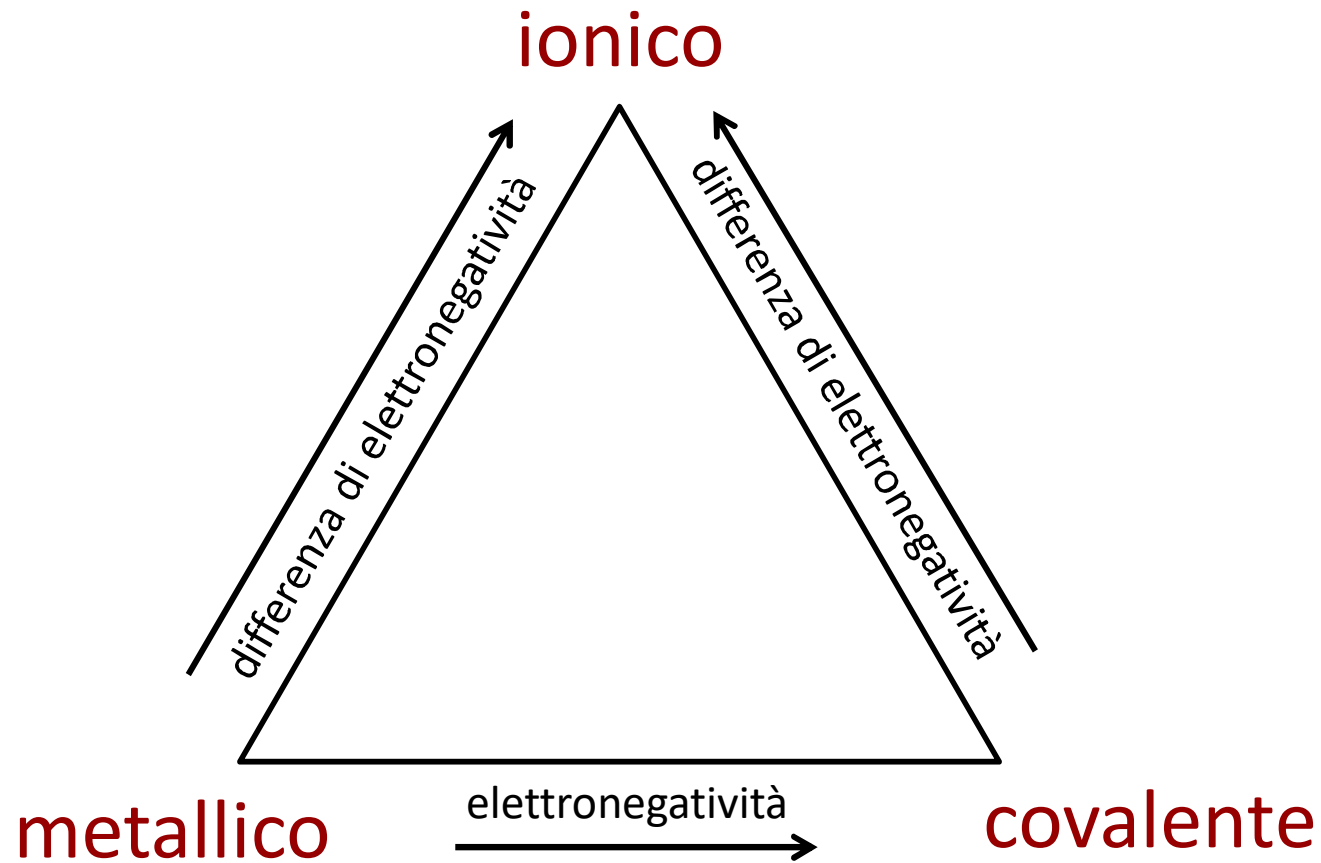
(dativo)

**legame  
metallico**

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# diagramma di van Arkel - Ketelaar

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# numeri di ossidazione

1A

+1 -1

2A

+1 +2

+1 +2

+1 +2

+1 +2

+1 +2

utili per prevedere  
i rapporti atomici  
nei composti

3A

4A

5A

6A

7A

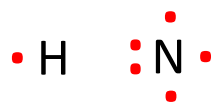
8A

+3	-4 +4 +2	-3 +5 +3	-2	-1	
+3	-4 +4 +2	-3 +5 +3	-2 +6 +4	-1 +7 +5 +3 +1	
+3	-4 +4 +2	-3 +5 +3	-2 +6 +4	-1 +7 +5 +3 +1	
+3	+2	-3 +5 +3	-2 +6 +4	-1 +7 +5 +3 +1	
+3	+2				

gruppo	configurazione elettronica		n° elettroni di valenza	differenza con gas nobile precedente	differenza con gas nobile successivo	numeri di ossidazione	ioni più comuni
-	1s <sup>1</sup> (H)	↑	1	-1	+1	-1, +1	1+
1A	ns <sup>1</sup>	↑	1	-1	+7	+1	1+
2A	ns <sup>2</sup>	↑↓	2	-2	+6	+2	2+
3A	ns <sup>2</sup> np <sup>1</sup>	↑↓ ↑	3	-3	+5	+3	3+
4A	ns <sup>2</sup> np <sup>2</sup>	↑↓ ↑ ↑	4	-4	+4	-4, +4, +2	2+
5A	ns <sup>2</sup> np <sup>3</sup>	↑↓ ↑ ↑ ↑	5	-5	+3	-3, +5, +3	3-
6A	ns <sup>2</sup> np <sup>4</sup>	↑↓ ↑↓ ↑ ↑	6	-6	+2	-2, +6, +4	2-
7A	ns <sup>2</sup> np <sup>5</sup>	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑	7	-7	+1	-1, +7, +5, +3, +1	1-
8A	ns <sup>2</sup> np <sup>6</sup>	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	8	0	0	0	0

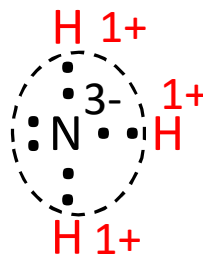
## elett. di valenza

elettroni del guscio più esterno (n più grande)



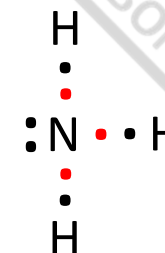
## numero di ossidazione

carica ipotetica di un atomo in un composto considerando tutti i legami come 100% ionici



## valenza

n° di elettroni che un atomo usa per instaurare legami con altri atomi



= n° elettroni di valenza

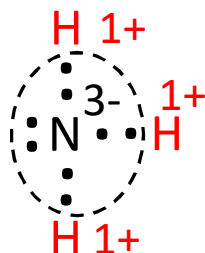
- n° elettroni di non legame

gruppo	configurazione elettronica		<i>n° elettroni di valenza</i>	differenza con gas nobile precedente	differenza con gas nobile successivo	<i>numeri di ossidazione</i>	ioni più comuni	<i>valenza</i>
-	1s <sup>1</sup> (H)	↑	<b>1</b>	-1	+1	<b>-1, +1</b>	1+	<b>1</b>
1A	ns <sup>1</sup>	↑	<b>1</b>	-1	+7	<b>+1</b>	1+	<b>1</b>
2A	ns <sup>2</sup>	↑↓	<b>2</b>	-2	+6	<b>+2</b>	2+	<b>2</b>
3A	ns <sup>2</sup> np <sup>1</sup>	↑↓ ↑	<b>3</b>	-3	+5	<b>+3</b>	3+	<b>3</b>
4A	ns <sup>2</sup> np <sup>2</sup>	↑↓ ↑ ↑	<b>4</b>	-4	+4	<b>-4, +4, +2</b>	2+	<b>4</b>
5A	ns <sup>2</sup> np <sup>3</sup>	↑↓ ↑ ↑ ↑	<b>5</b>	-5	+3	<b>-3, +5, +3</b>	3-	<b>3, 5</b>
6A	ns <sup>2</sup> np <sup>4</sup>	↑↓ ↑↓ ↑ ↑	<b>6</b>	-6	+2	<b>-2, +6, +4</b>	2-	<b>2, 6</b>
7A	ns <sup>2</sup> np <sup>5</sup>	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑	<b>7</b>	-7	+1	<b>-1, +7, +5, +3, +1</b>	1-	<b>1, 5, 7</b>
8A	ns <sup>2</sup> np <sup>6</sup>	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓	<b>8</b>	0	0	<b>0</b>	0	<b>0</b>

slides delle lezioni  
A. BONIFACIO

A.A. Università  
2020-21

## numero di ossidazione



carica ipotetica di un atomo in un composto considerando tutti i legami come 100% ionici, assegnando gli elettroni all'elemento più elettronegativo

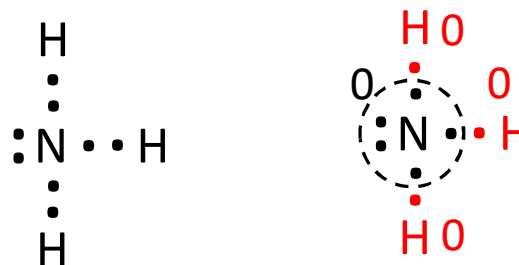
**significato fisico**

*solo per composti ionici: corrisponde alla carica degli ioni*

**utilità**

*bilanciamento reazioni di ossido-riduzione; calcolo rapporti atomici nei composti*

## carica formale



carica ipotetica di un atomo in un composto considerando tutti i legami come 100% covalenti, dividendo equamente gli elettroni di legame tra gli atomici coinvolti

*nessuno*

*valutazione stabilità strutture di Lewis*

come prevedere i rapporti in cui si legano gli atomi nei composti?



considerare i **numeri di ossidazione**, la cui somma algebrica deve essere pari alla carica complessiva del composto (zero per composti neutri)



**formula molecolare**

come prevedere come sono legati gli atomi in un composto?



per gli elementi dei gruppi principali, considerare gli elettroni di valenza e quindi la **struttura di Lewis**



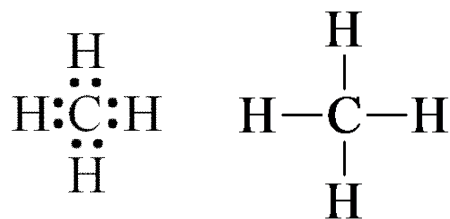
**formula di struttura**

# geometria molecolare

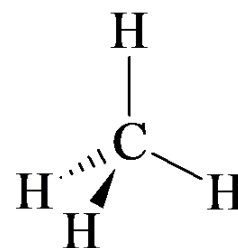
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



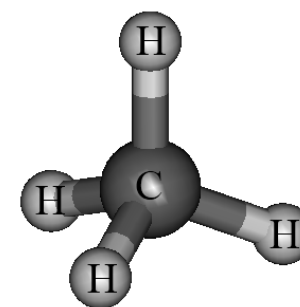
formula  
molecolare



strutture  
di Lewis



disegno  
in prospettiva



modello a sfere  
e bastoncini

# teoria VSEPR

(Valence Shell Electron Pair Repulsion)

le **coppie elettroniche del guscio di valenza** (i.e. elettroni di legame o di non legame) attorno ad un atomo centrale tendono a disporsi in modo da rendere massima la loro distanza e quindi minima la loro **repulsione**

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

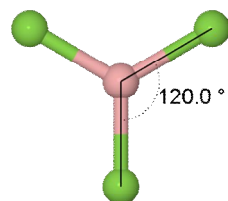
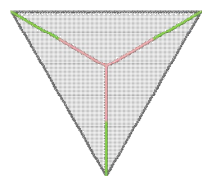
Lineare



**AX<sub>2</sub>**

Esempio BeF<sub>2</sub>

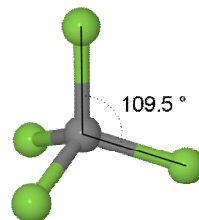
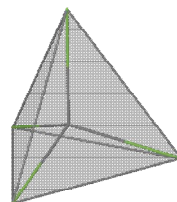
Trigonale planare



**AX<sub>3</sub>**

Esempio BF<sub>3</sub>

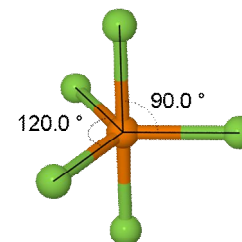
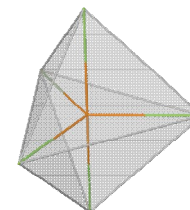
Tetraedrica



**AX<sub>4</sub>**

Esempio CF<sub>4</sub>

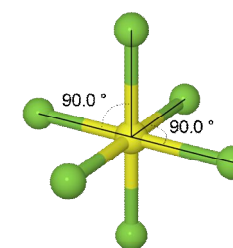
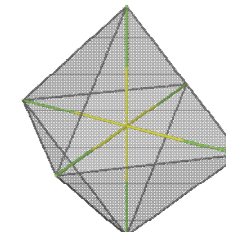
Bipiramide trigonale



**AX<sub>5</sub>**

Esempio PF<sub>5</sub>

Ottaedrica



**AX<sub>6</sub>**

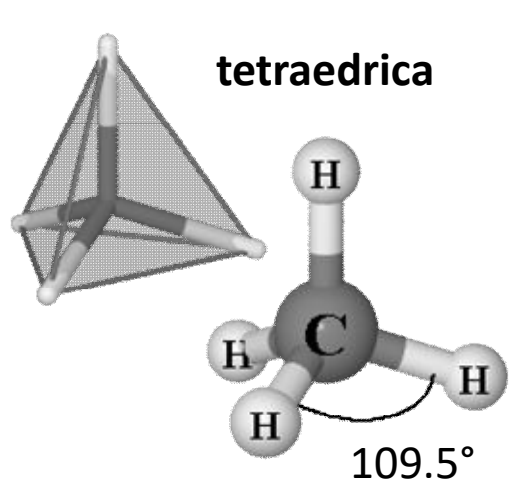
Esempio SF<sub>6</sub>

Università di Trieste  
2020-21  
A.A.

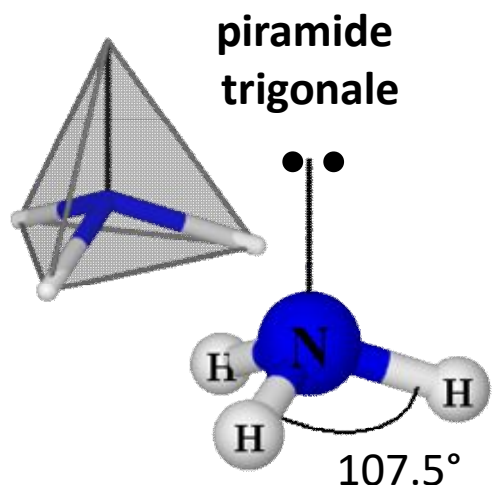


lo spazio occupato da una **coppia solitaria** di elettroni è maggiore dello spazio occupato da una **coppia di legame**

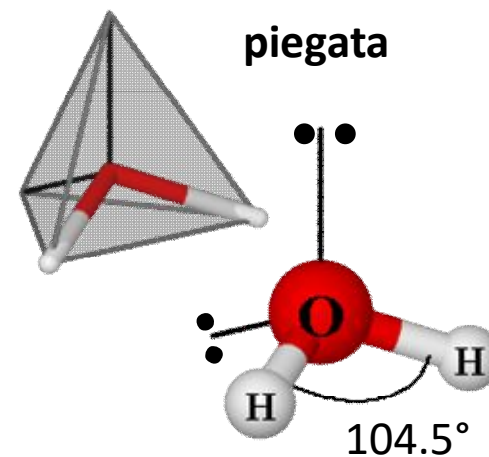
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



**Metano, CH<sub>4</sub>**  
4 coppie di legame  
nessuna coppia solitaria



**Ammoniaca, NH<sub>3</sub>**  
3 coppie di legame  
1 coppia solitaria

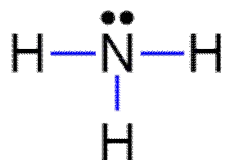


**Acqua, H<sub>2</sub>O**  
2 coppie di legame  
2 coppie solitarie

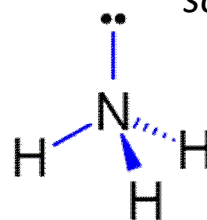
*per il nome della geometria, contano solo gli atomi e non le coppie solitarie*

Università di Trieste  
2021

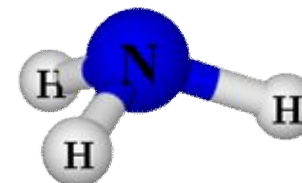
NH<sub>3</sub>



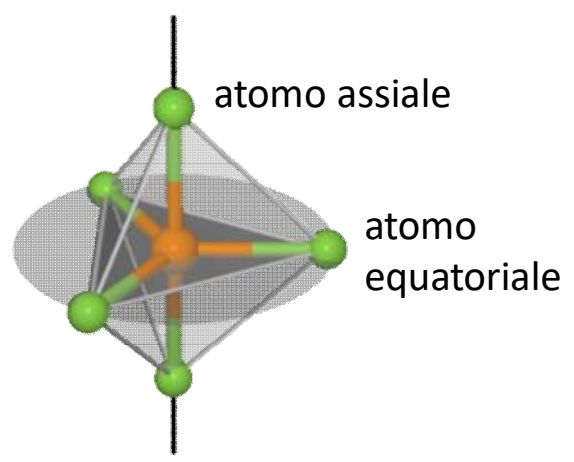
Struttura di Lewis



Geometria delle  
Coppie elettroniche

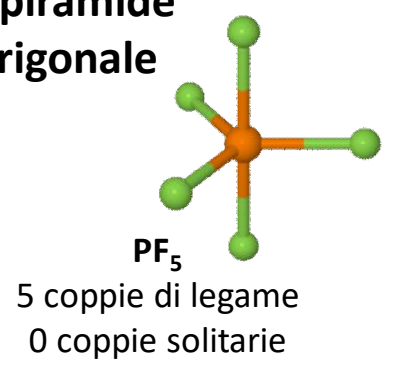


Geometria  
molecolare

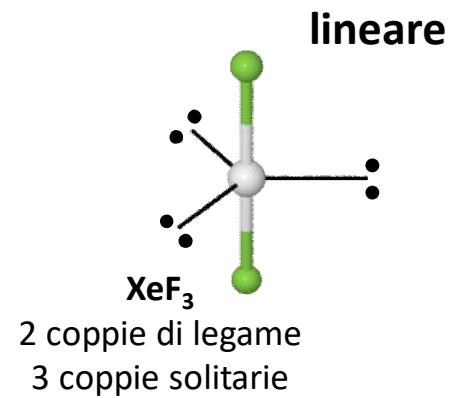
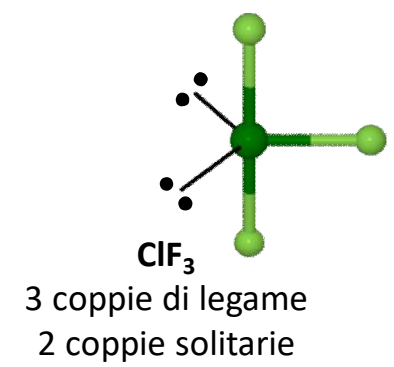
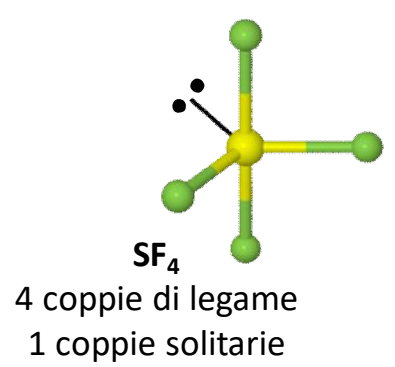


posizioni **assiali** ed **equatoriali** non sono equivalenti: le coppie solitarie tendono ad occupare posizioni che rendono minima la repulsione con altre coppie elettroniche

**bipiramide trigonale**

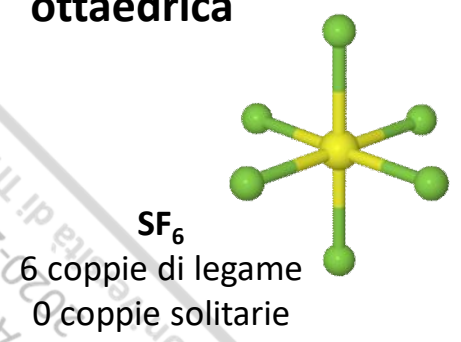


**5 COPPIE ELETTRONICHE**

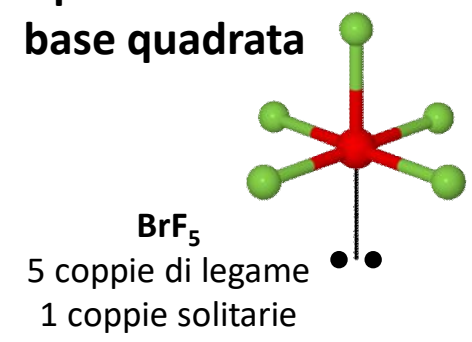


**6 COPPIE ELETTRONICHE**

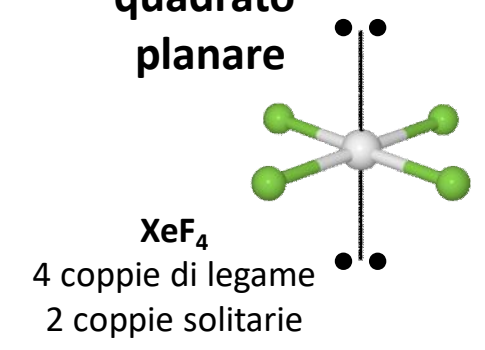
**ottaedrica**



**piramide a base quadrata**

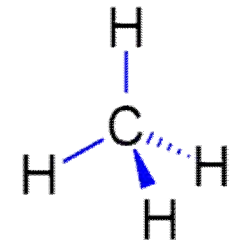
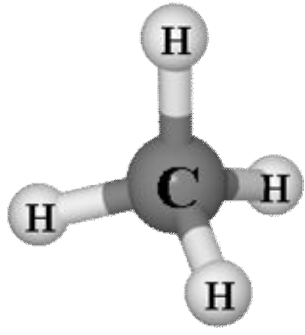


**quadrato planare**

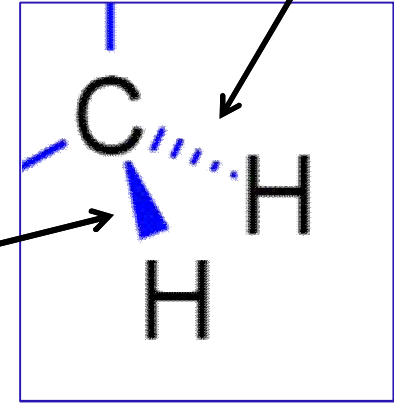


# modi corretti di **rappresentare graficamente** le geometrie molecolari

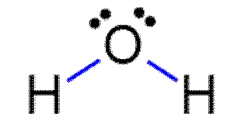
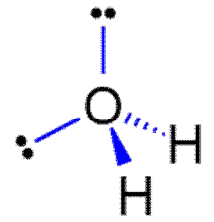
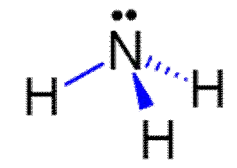
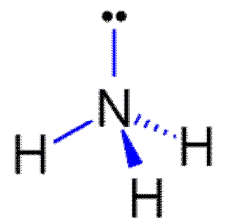
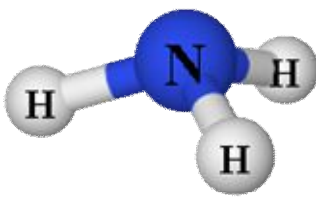
slides  
delle lezioni  
BONIFACIO



legame che  
"entra" oltre al  
piano del foglio



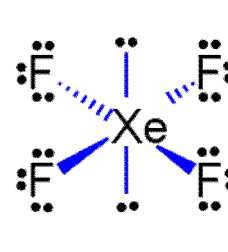
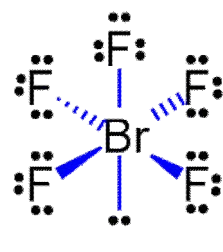
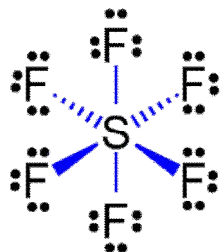
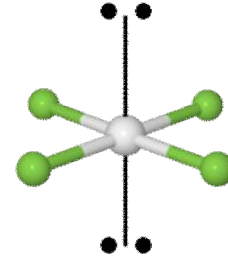
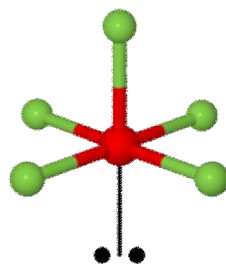
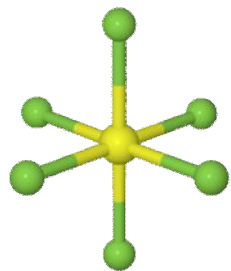
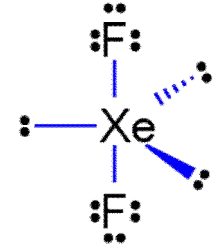
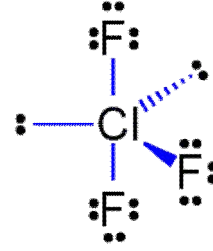
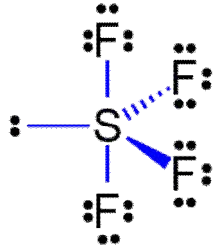
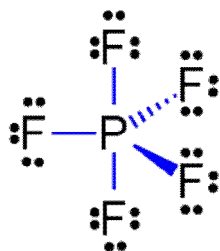
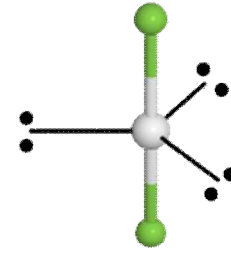
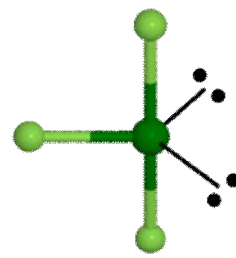
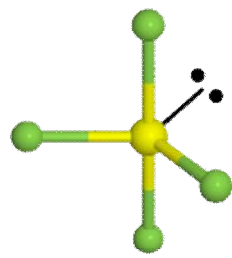
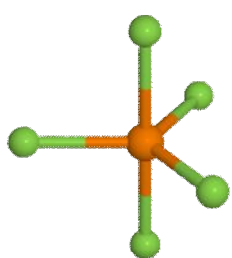
legame che "esce"  
dal piano del foglio



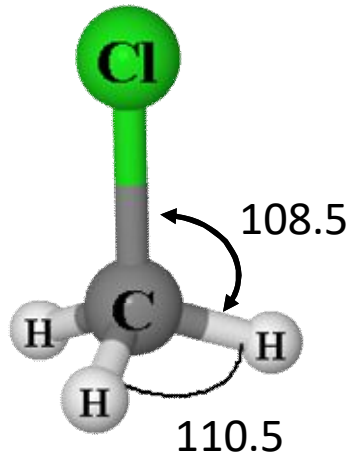
A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

modi corretti di **rappresentare graficamente** le geometrie molecolari

slides  
delle lezioni  
BONIFACIO

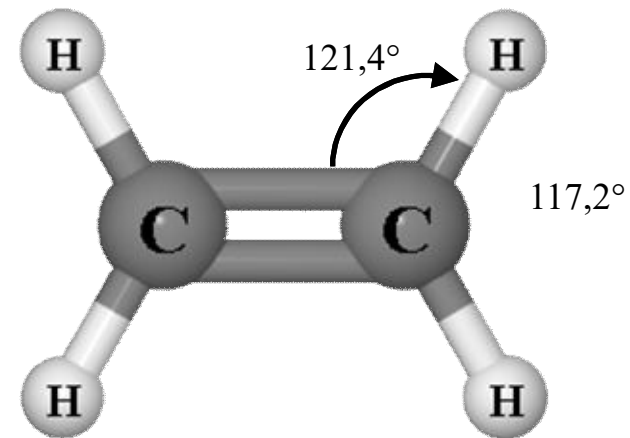


Università di Trieste  
2020-21  
A. A.



lo spazio occupato da una coppia di elettroni di legame diminuisce all'aumentare dell'elettronegatività degli atomi legati all'atomo centrale

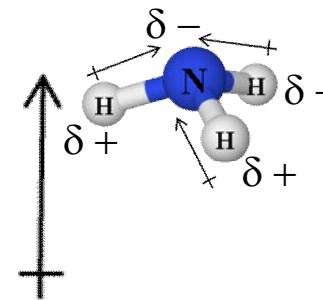
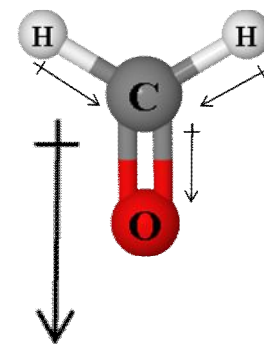
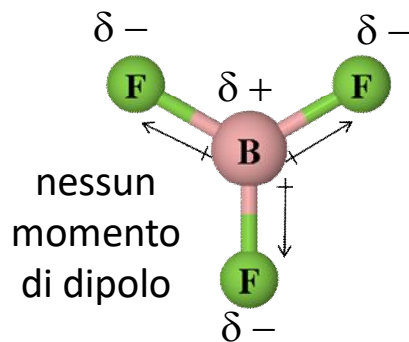
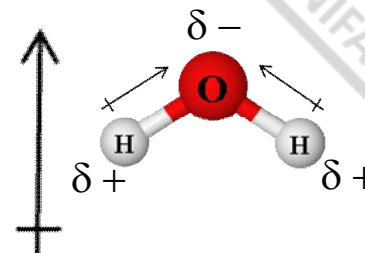
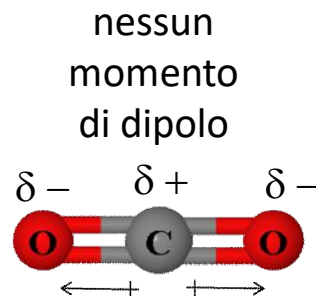
le due coppie di elettroni di un legame doppio o le tre coppie di un legame triplo occupano uno spazio un po' più grande di una coppia di elettroni di un legame singolo



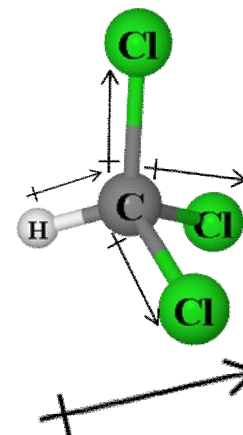
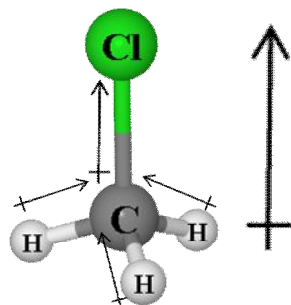
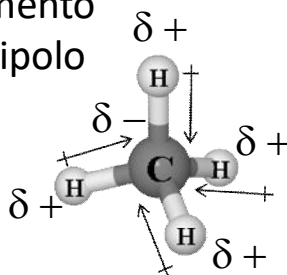
# momento di dipolo elettrico

di molecole poliatomiche

una volta nota la geometria, possiamo calcolare il momento di dipolo elettrico



nessun momento di dipolo



slides delle lezioni  
A. BONIFACIO

Università di Trieste  
2020-21  
A. A.

# limiti teoria VSEPR



è una teoria semplice da applicare, con ottime capacità predittive



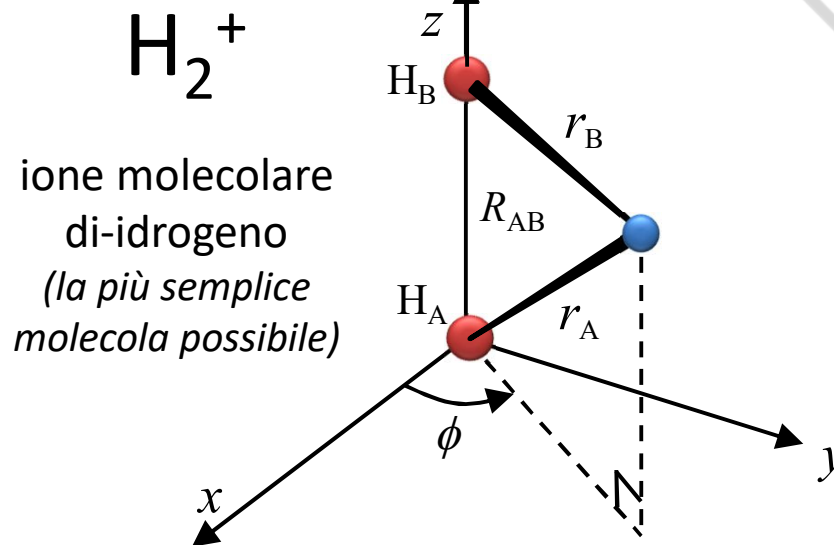
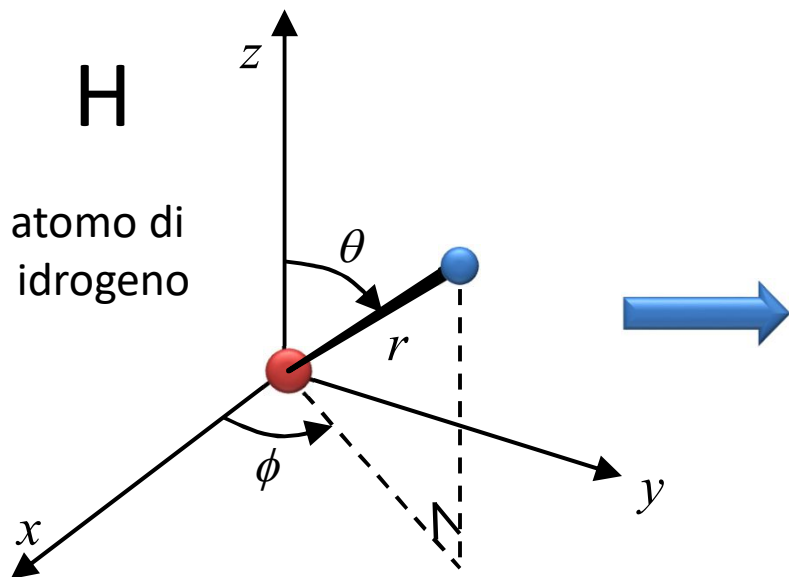
fornisce previsioni qualitative e non quantitative



non funziona per i composti dei metalli di transizione e per alcuni altri composti:

- alcuni idruri del V gruppo ( $\text{PH}_3$ ,  $\text{AsH}_3$ ) e del VI gruppo ( $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{H}_2\text{Se}$ ), con angoli H-A-H di circa  $90^\circ$
- alcuni alogenuri del II gruppo ( $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{BaCl}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ,  $\text{BaBr}_2$ ) che presentano geometrie non lineari

# trattazione quantomeccanica del legame chimico



$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$E_n \Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$$

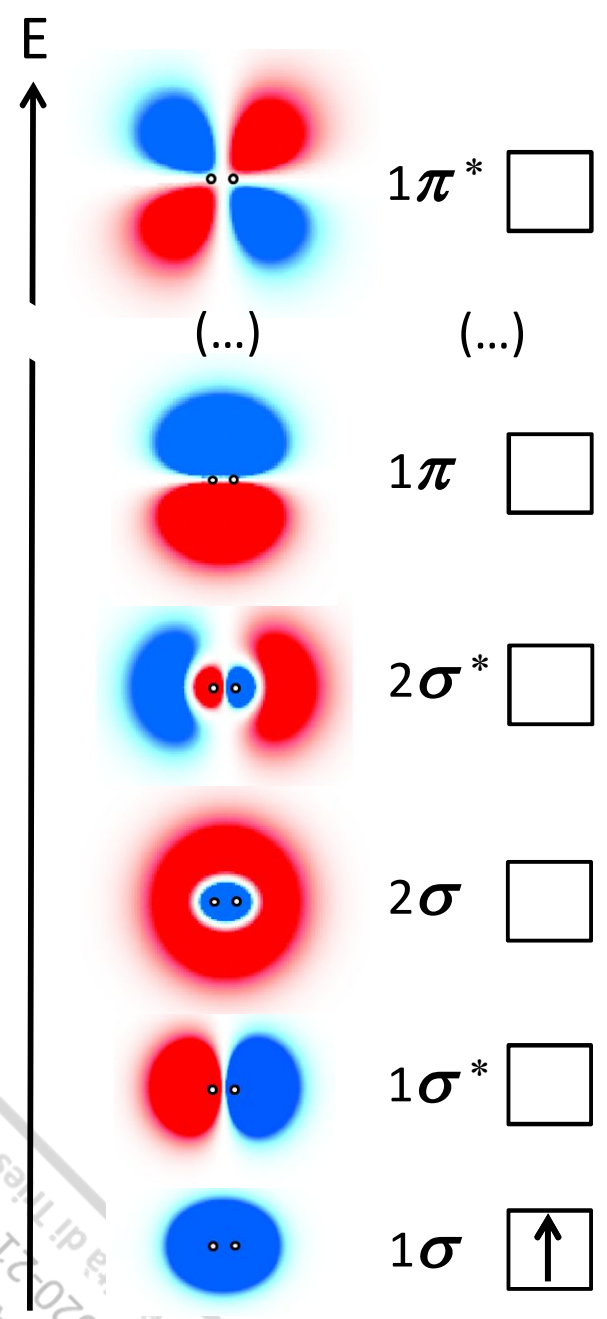
**orbitali atomici**

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$E_n \Psi_{nlm}(r_A, r_B, \phi; R_{AB})$$

**orbitali molecolari**

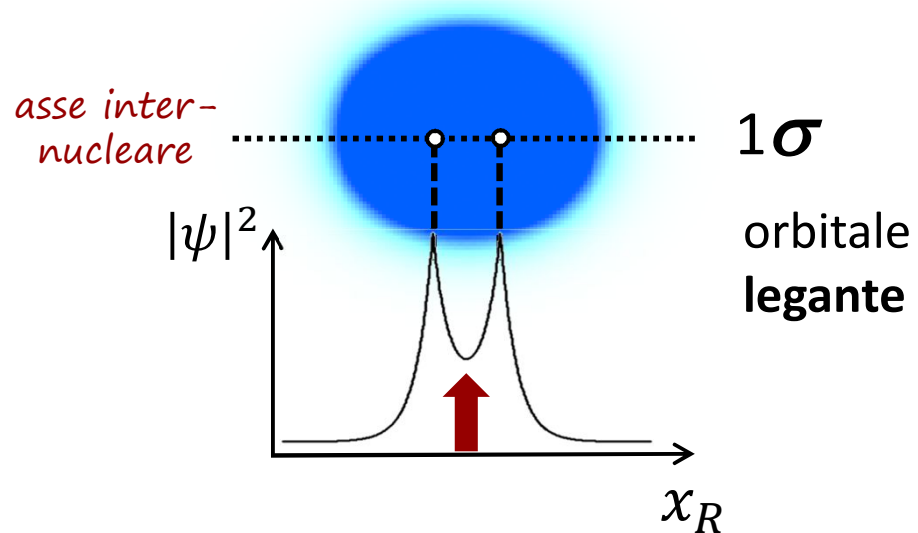
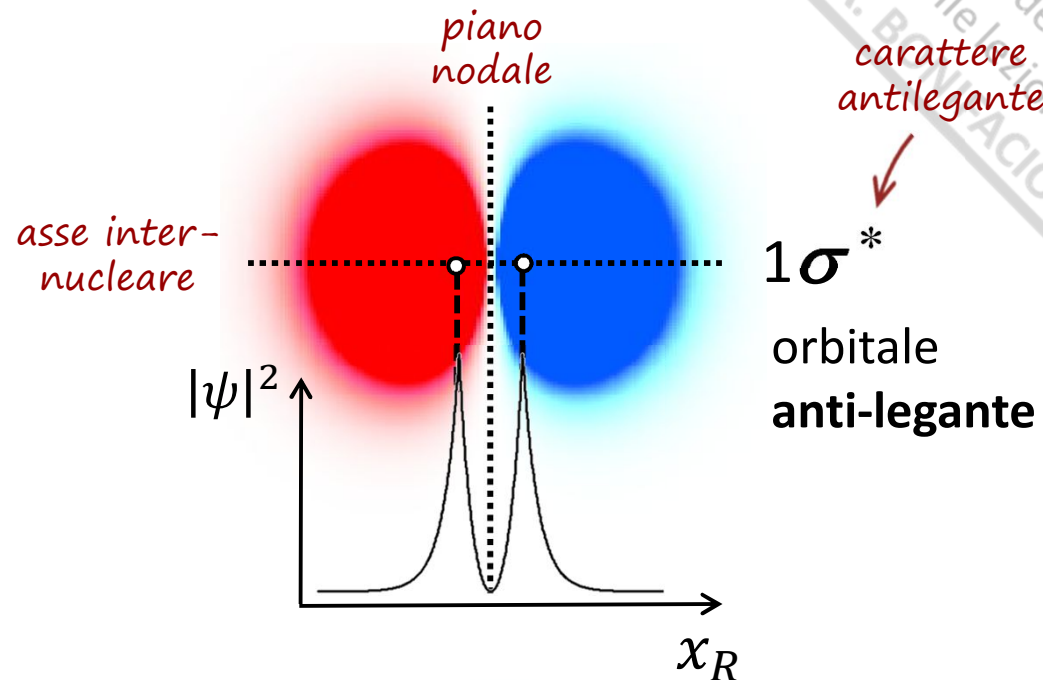
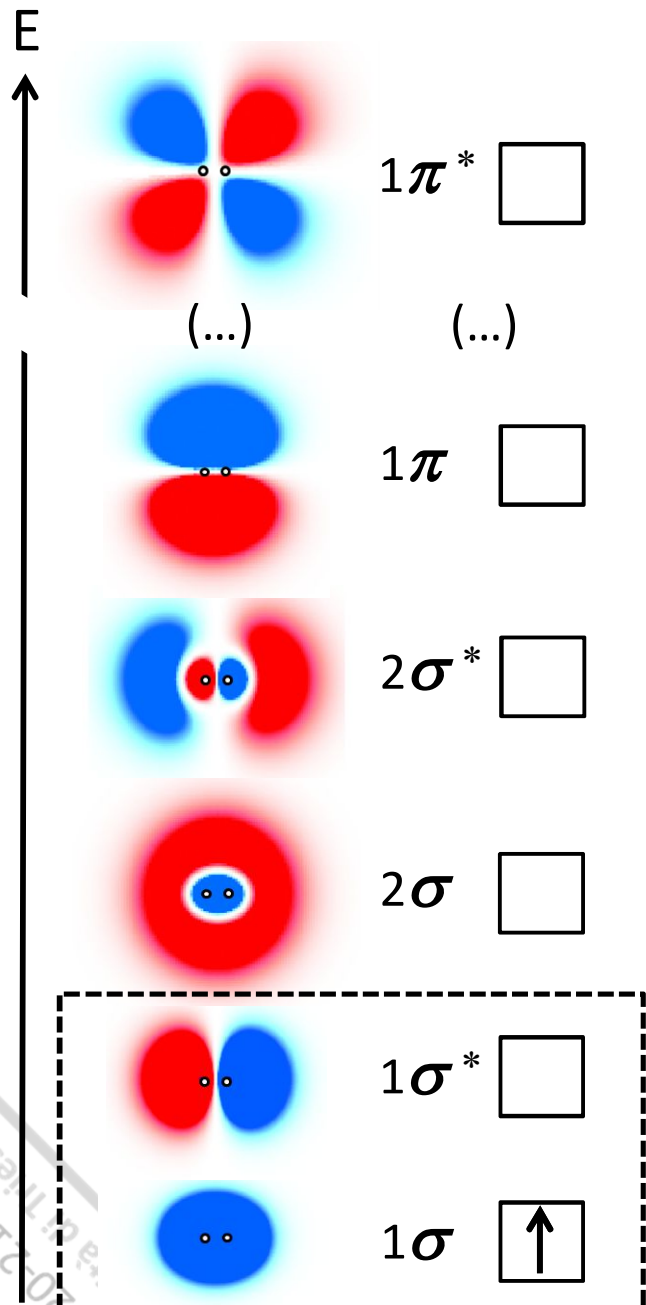




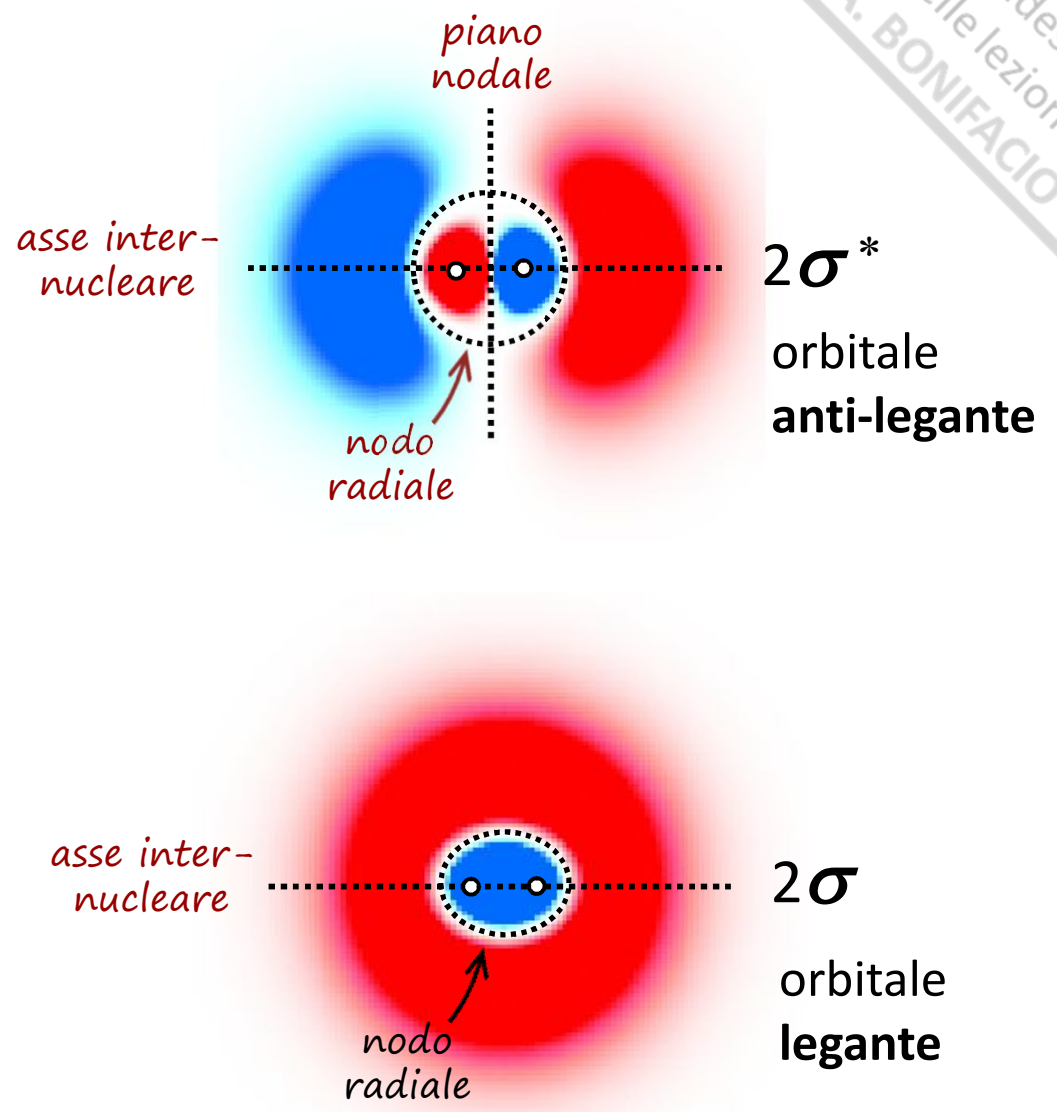
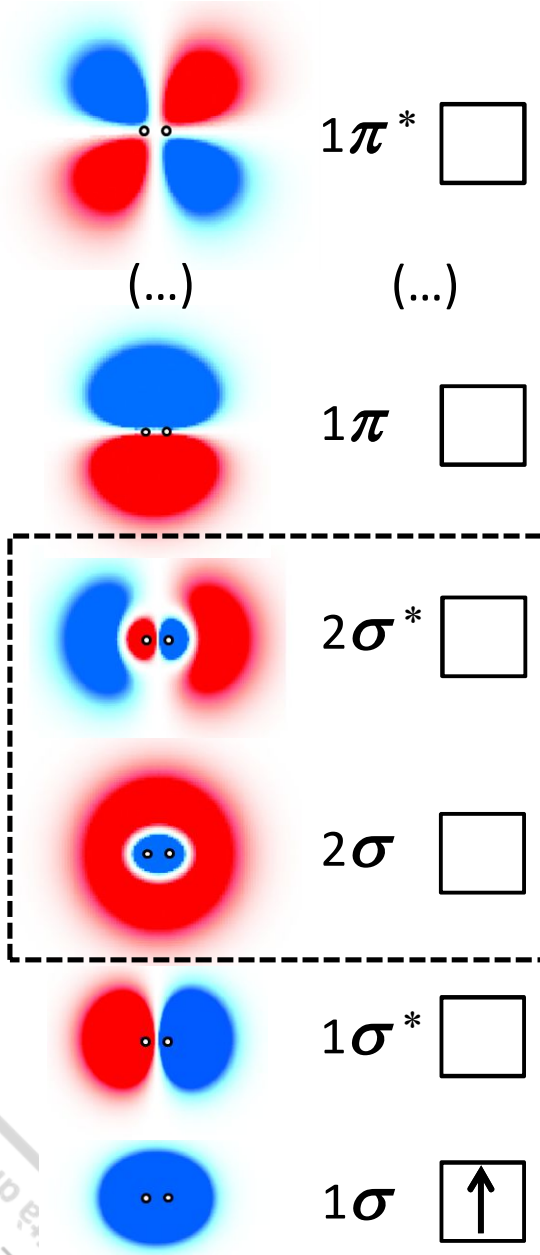
soluzioni **esatte** dell'equazione di Schrödinger per lo ione molecolare  $H_2^+$

$$\Psi_{nlm}(r_A, r_B, \phi; R_{AB})$$

*(orbitali molecolari)*

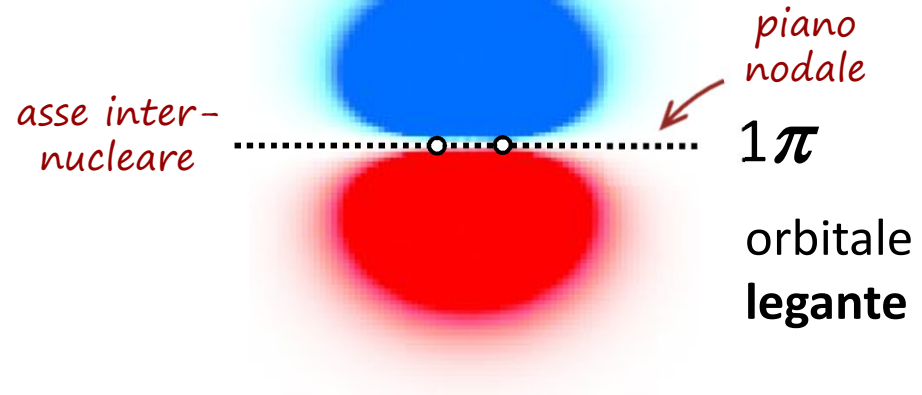
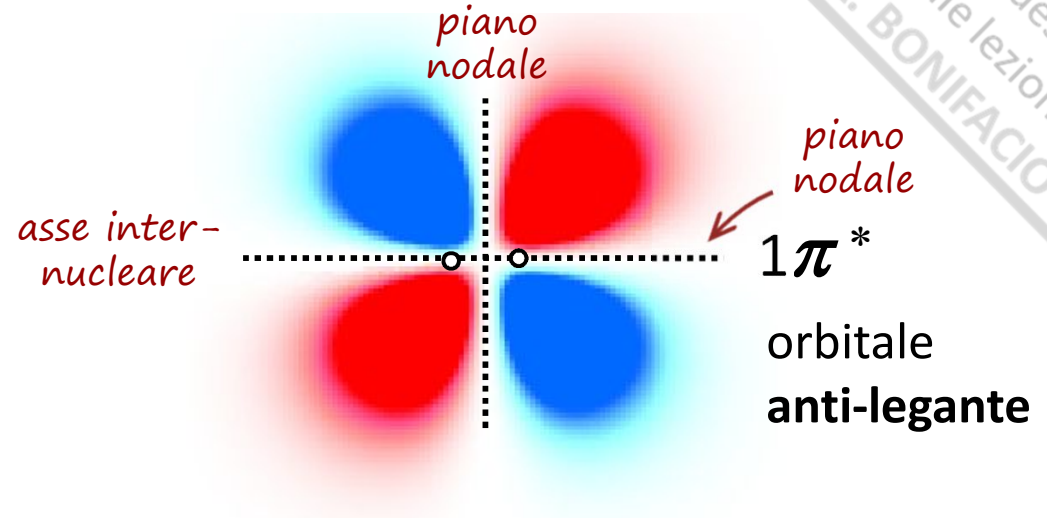
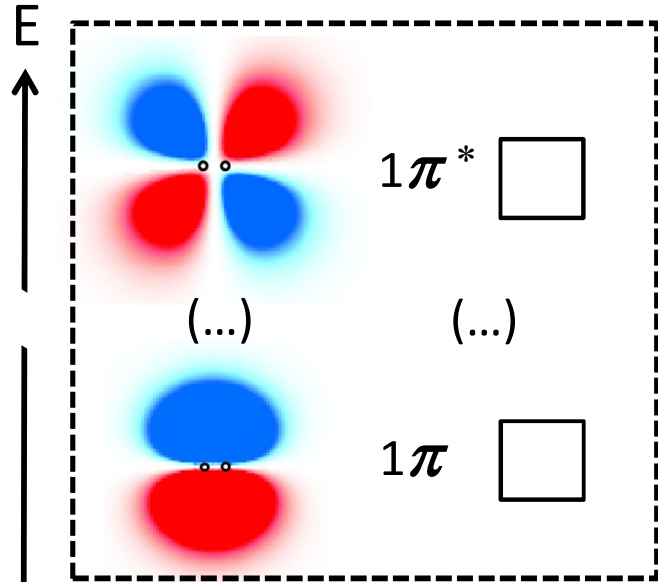


E ↑



slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

Univ. di Trieste  
2020-21  
A. A.



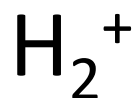
**1 elettrone**



atomo di idrogeno

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

**orbitali atomici**



ione molecolare di-idrogeno

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

**orbitali molecolari**

**2 elettroni**



molecola di idrogeno

~~$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$~~

**non risolvibile**

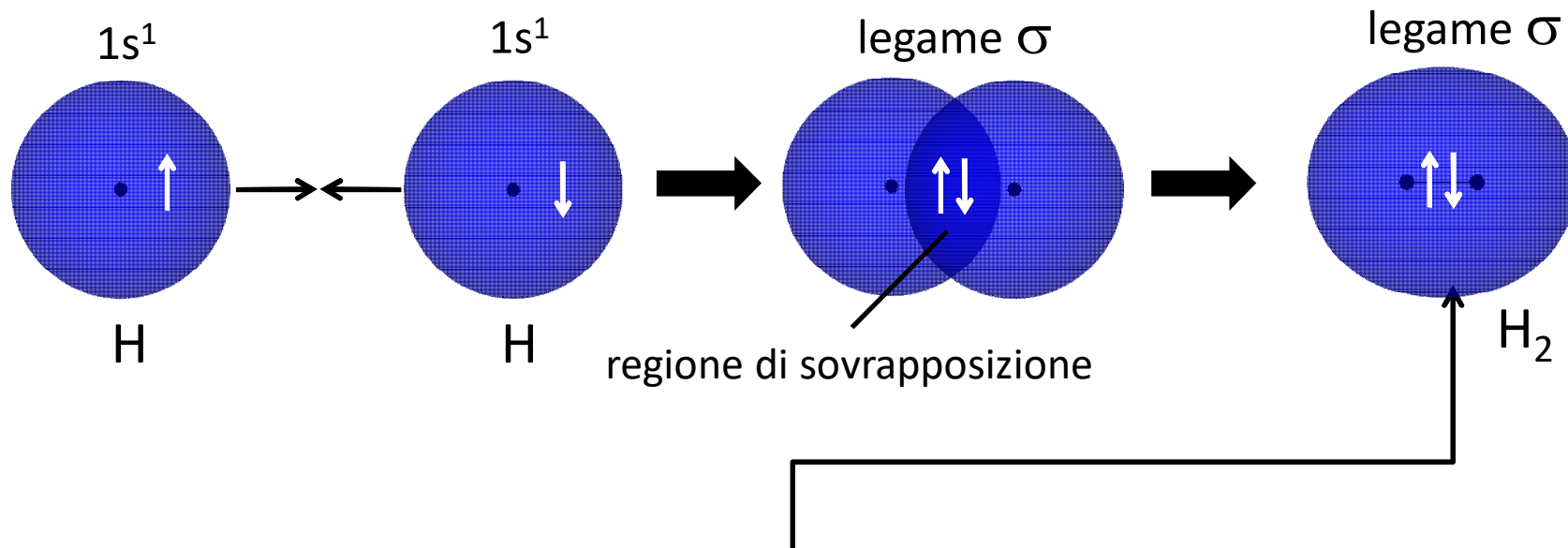
**approssimazioni (VBT, MO-LCAO)**

slides delle lezioni  
A. BONIFACIO

A. A. 2020-21  
Università di Trieste

# teoria del legame di valenza (VBT)

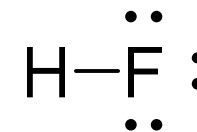
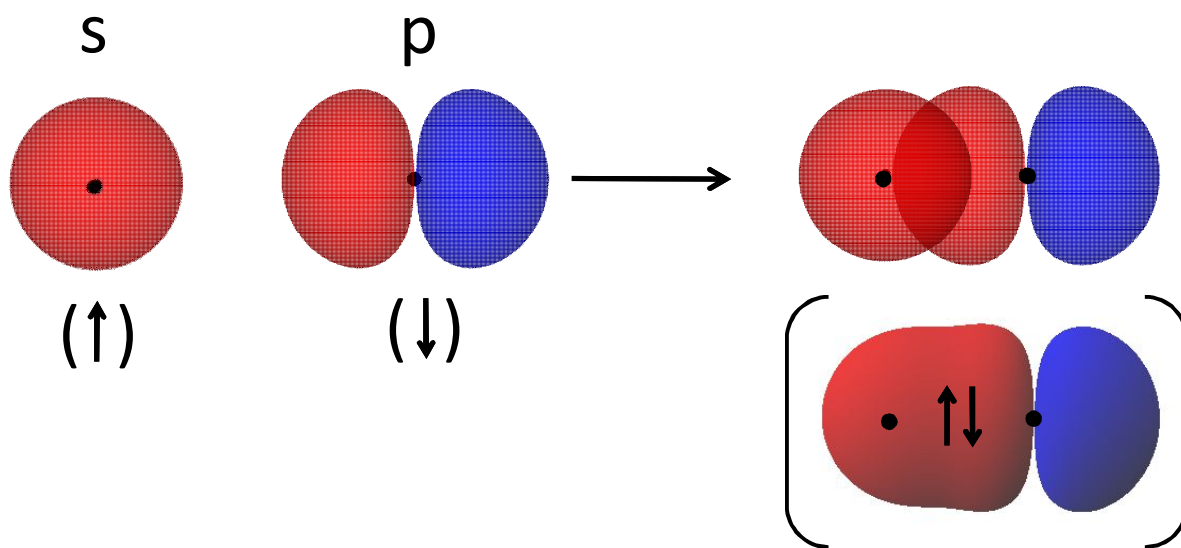
legame covalente come **sovrapposizione** tra due orbitali atomici aventi elettroni spaiati, **localizzata** tra i due nuclei



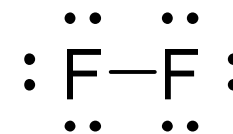
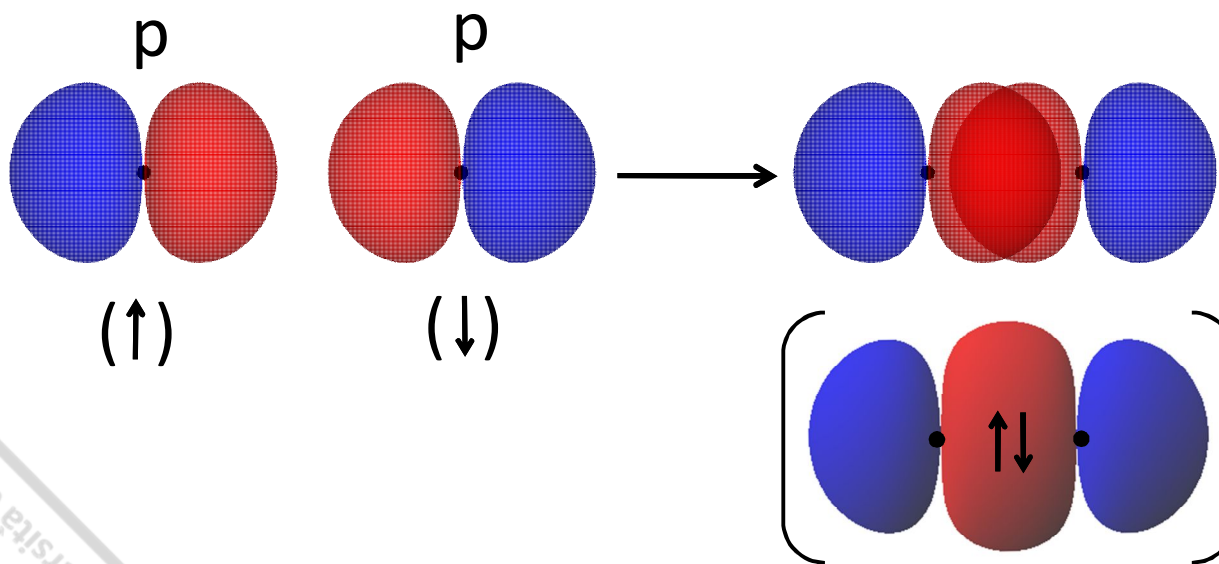
funzione d'onda risultante come **prodotto** di due funzione d'onda monoelettroniche localizzate sugli atomi che formano il legame

# esempi VBT per molecole bi-atomiche

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



funzione d'onda  
bi-elettronica

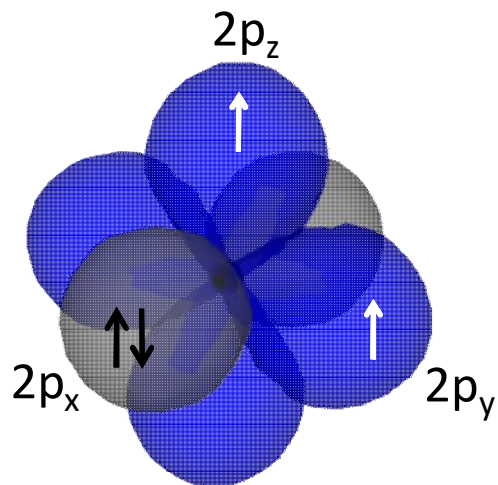
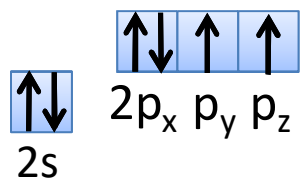


funzione d'onda  
bi-elettronica

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# ossigeno molecolare $O_2$

ossigeno

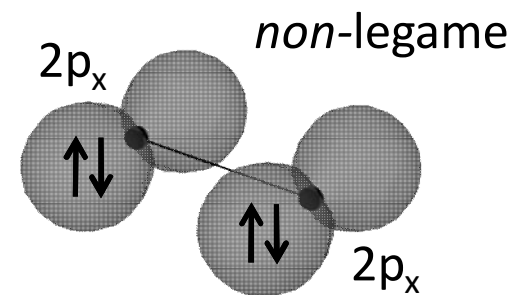
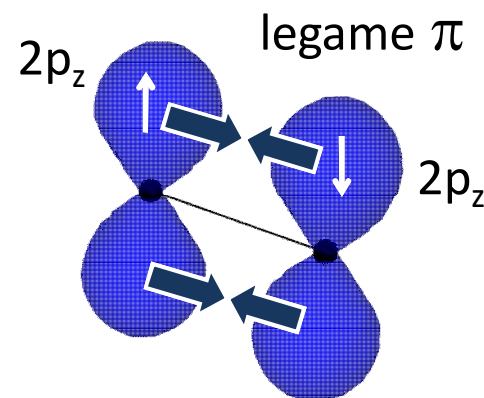
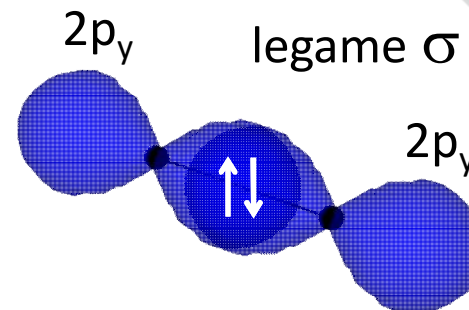
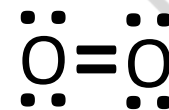


orbitali p  
nell'ossigeno

sovrapposizione  
lungo asse internucleare  
"testa a testa"

sovrapposizione  
sopra e sotto asse  
internucleare  
"laterale"

nessuna  
sovrapposizione  
orbitali già occupati  
orbitali di "non-legame"



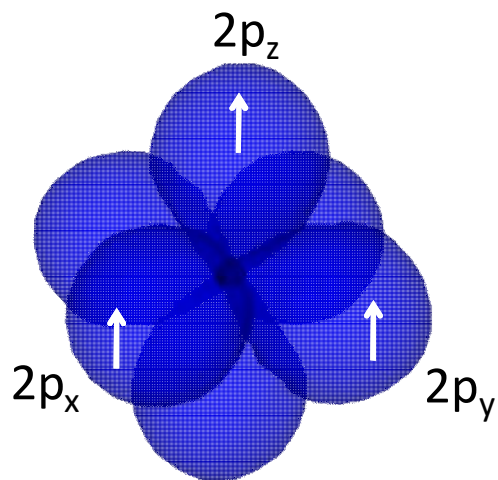
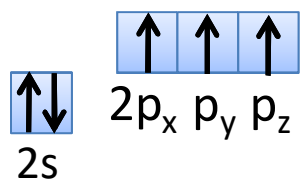
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste



# azoto molecolare $N_2$

azoto

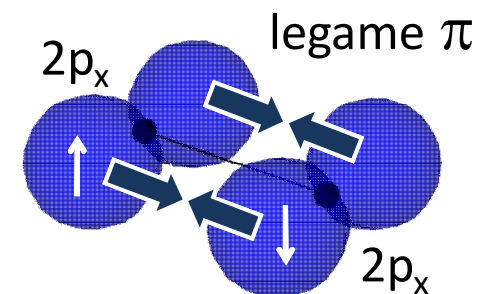
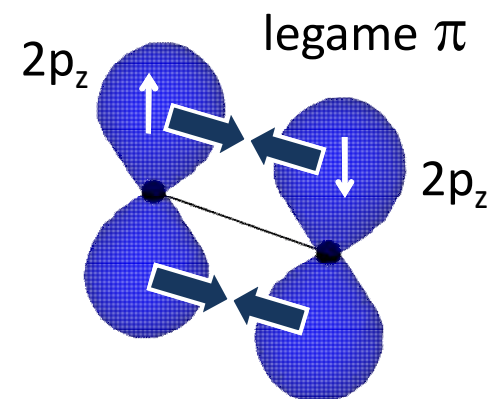
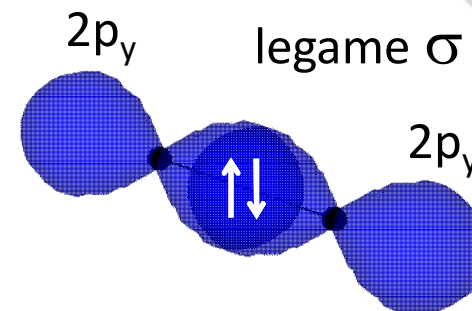


orbitali p  
nell'azoto

sovrapposizione  
lungo asse internucleare  
"testa a testa"

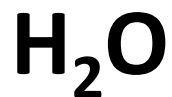
sovrapposizione  
sopra e sotto asse  
internucleare  
"laterale"

sovrapposizione  
destra e sinistra asse  
internucleare  
"laterale"

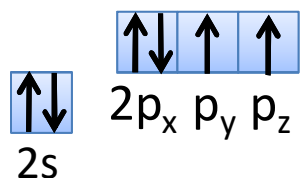


# molecole poliatomiche

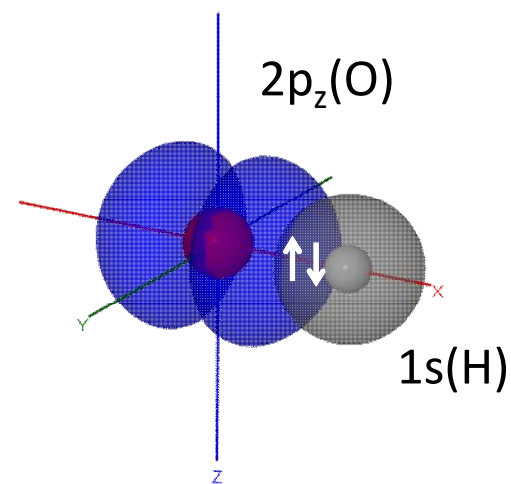
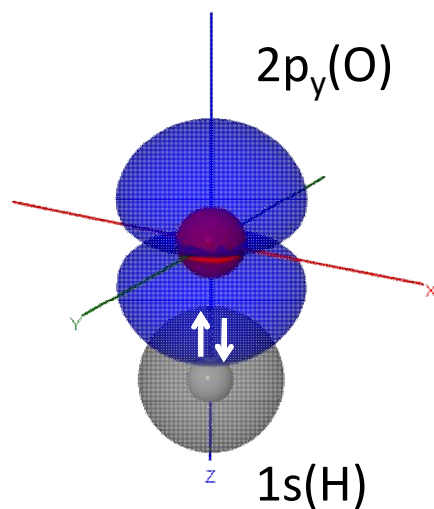
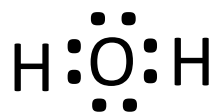
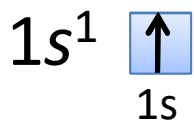
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



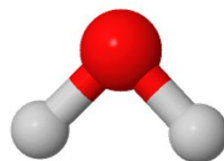
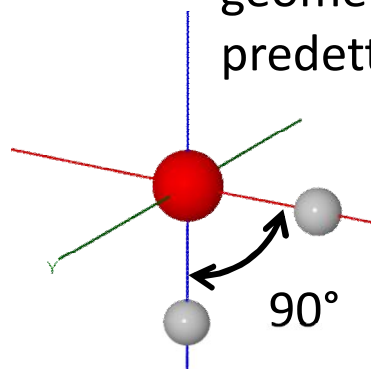
*ossigeno*



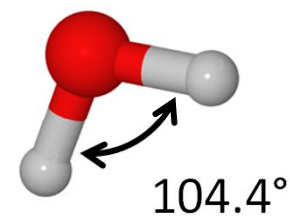
*idrogeno*



geometria  
predetta



geometria  
reale



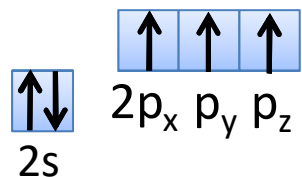
A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# molecole poliatomiche

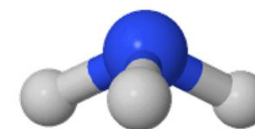
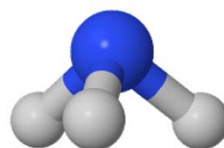
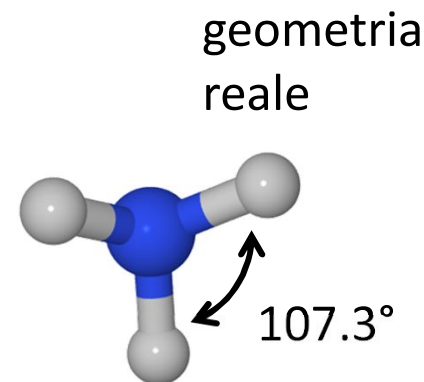
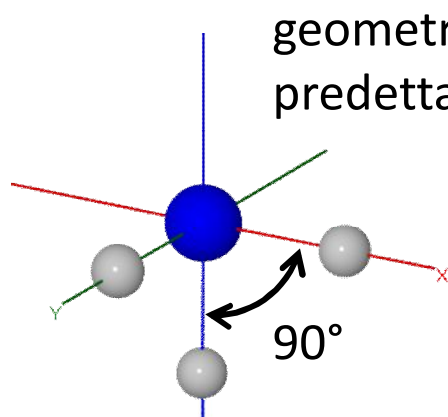
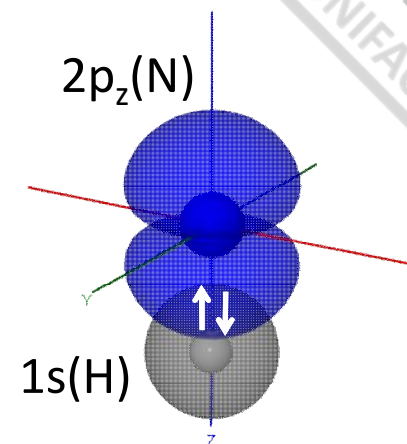
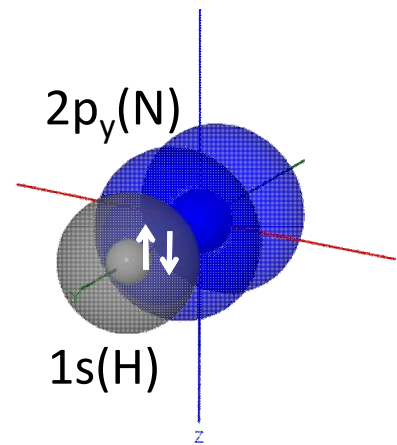
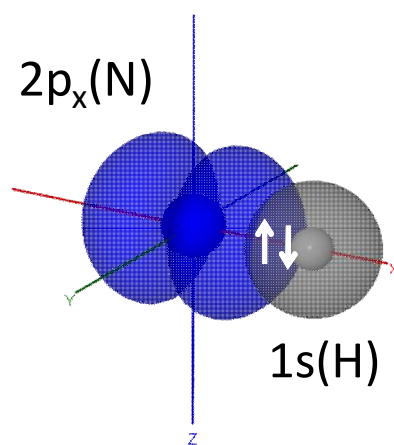
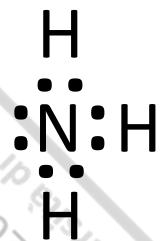
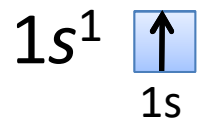
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



azoto



idrogeno



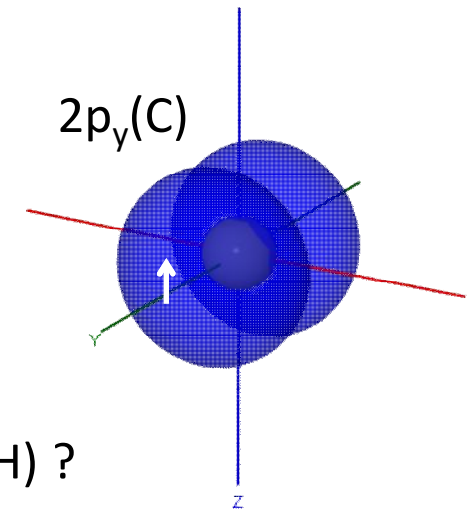
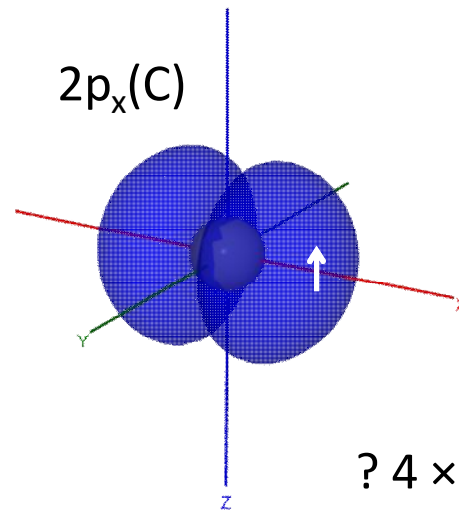
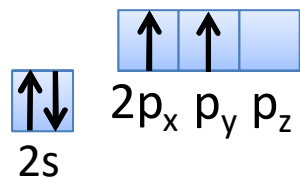
A. A. Università di Trieste  
2020-21

# molecole poliatomiche

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

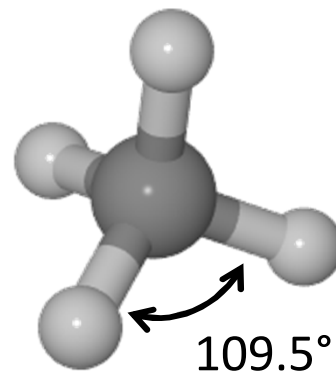
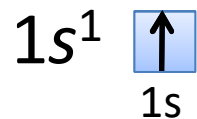


carbonio

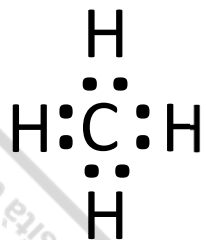


? 4 × 1s(H) ?

idrogeno



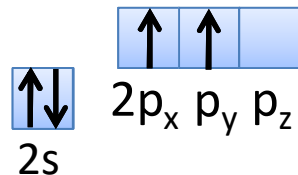
1. come faccio a sistemare **4 elettroni 1s** (dei 4 H) se il C ha solo **2 elettroni 2p**?
2. come spiego l'angolo sperimentale di **109.5°**?



A. A. Università di Trieste  
2020-21

# possibile spiegazione

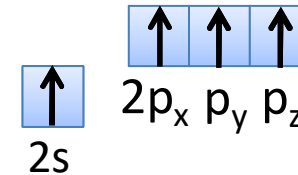
*carbonio*



*stato  
fondamentale*



*carbonio*



*stato  
eccitato*

**(1) promozione** elettroni a stato eccitato  
ad E più alta

*(“conto energetico” pagato  
dalla formazione di legami)*

# possibile spiegazione

(2)

gli **orbitali atomici di valenza** di un determinato atomo sono **descrivibili in modi diversi** a seconda che questo si trovi come

**atomo isolato**

oppure

**legato ad altri atomi**

in una molecola

# possibile spiegazione

*(proprietà degli operatori lineari)*

Se  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  sono soluzioni di  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  allora  
anche

*combinazione  
lineare* →

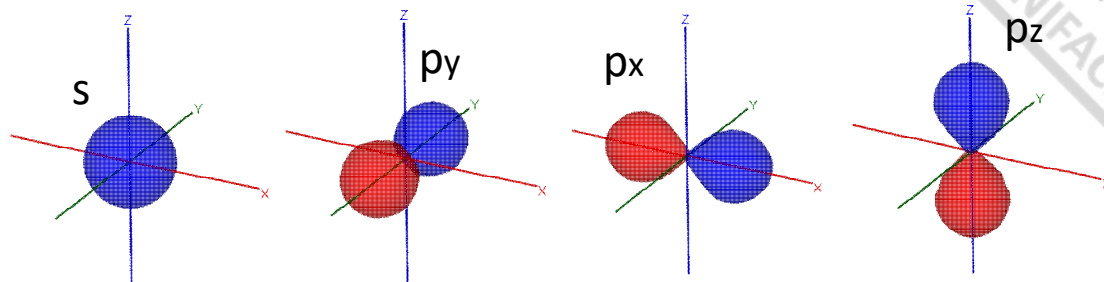
$$a \cdot \Psi_1 + b \cdot \Psi_2$$

è una soluzione.

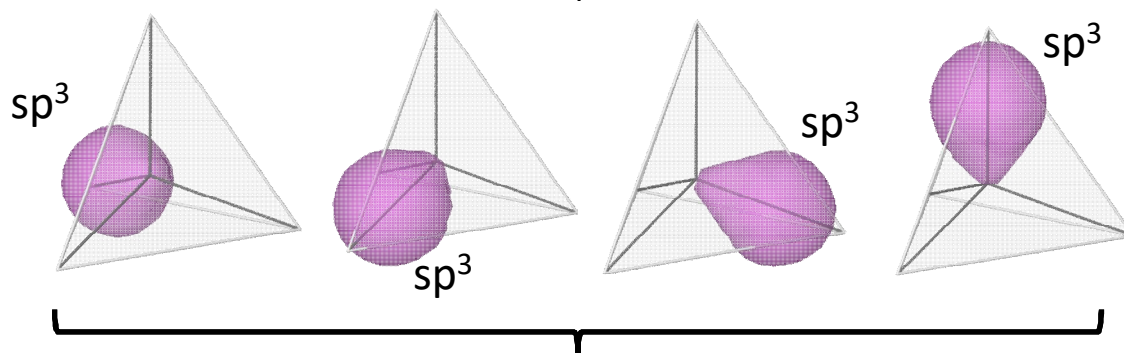
# gli orbitali ibridi

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

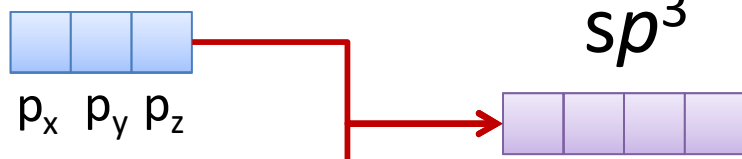
orbitali  $p$  ed  $s$   
aventi energie simili  
si combinano tra  
loro per formare  
nuovi orbitali detti  
"orbitali ibridi"



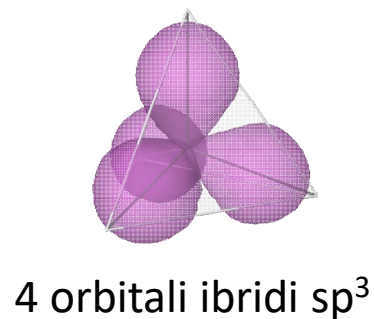
Si ibridizzano tra loro per formare 4 orbitali ibridi  $sp^3$



ibridizzazione  $sp^3$



$$1s + 3p = 4sp^3$$

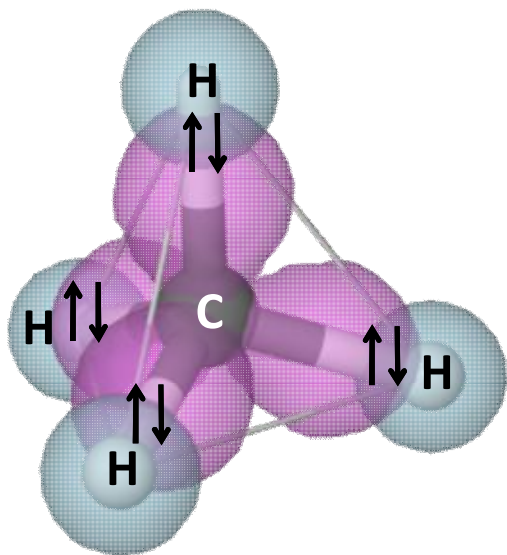


A. A. Università del  
2020-21  
Fisica

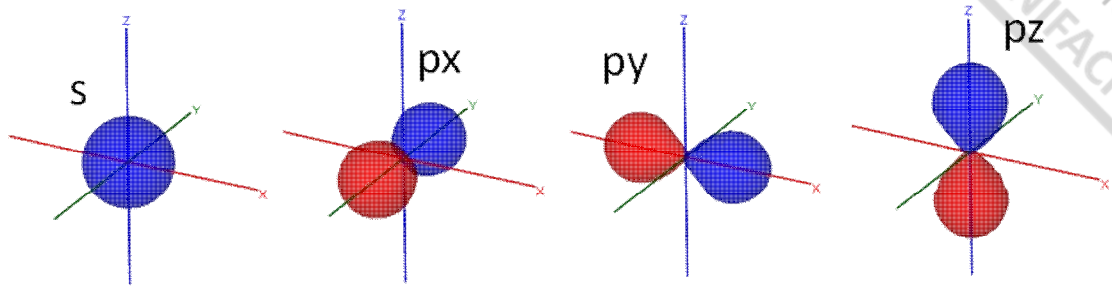
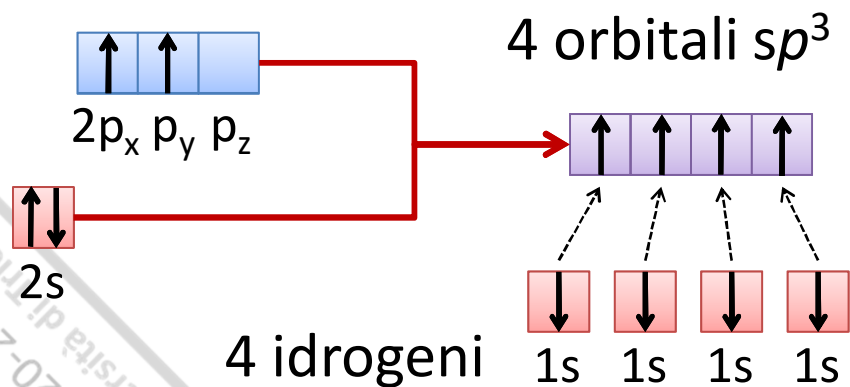


# gli orbitali ibridi

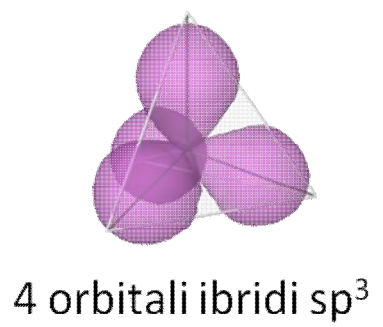
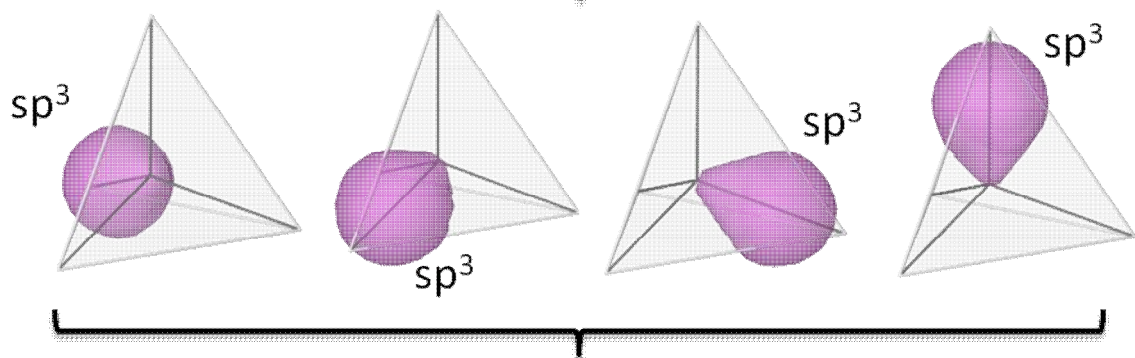
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



carbonio



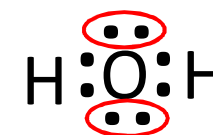
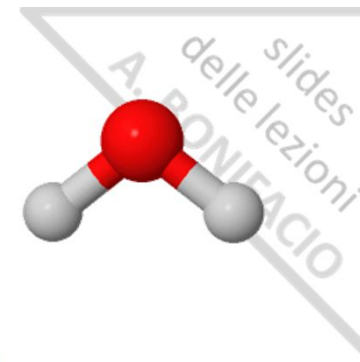
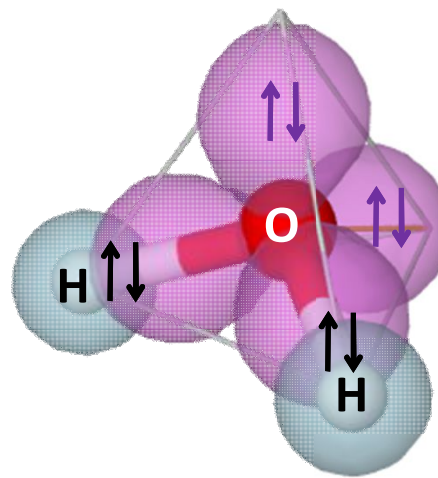
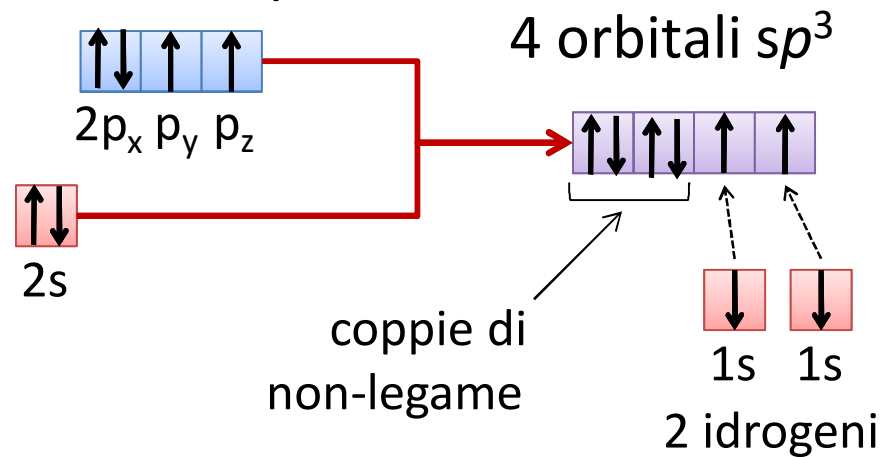
Si ibridizzano tra loro per formare 4 orbitali ibridi  $sp^3$



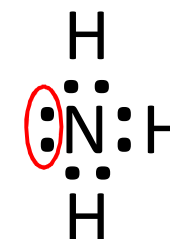
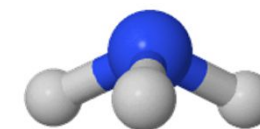
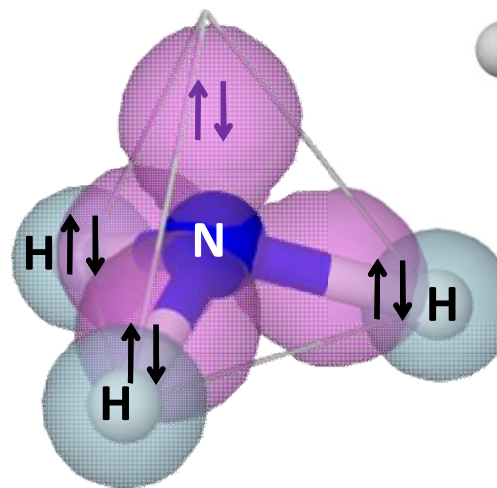
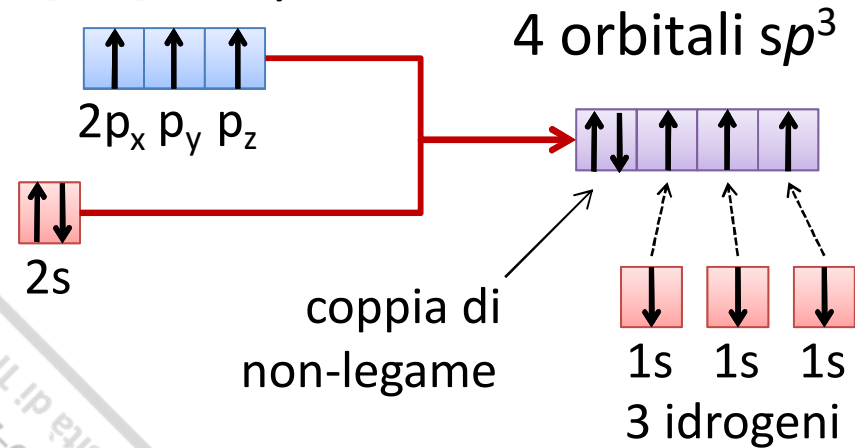
4 orbitali ibridi  $sp^3$

A. A. Università di Trieste  
2020-21

ossigeno

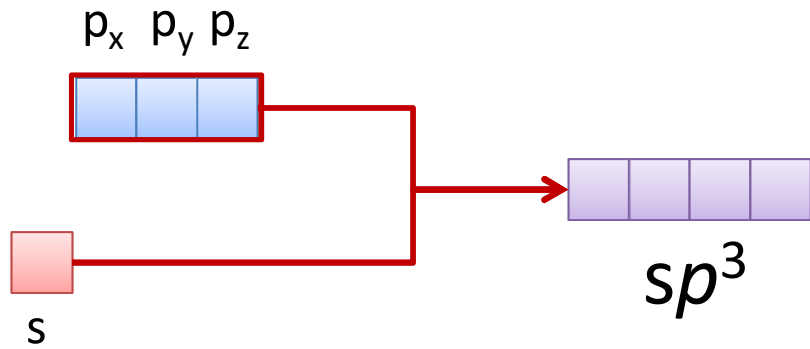


azoto

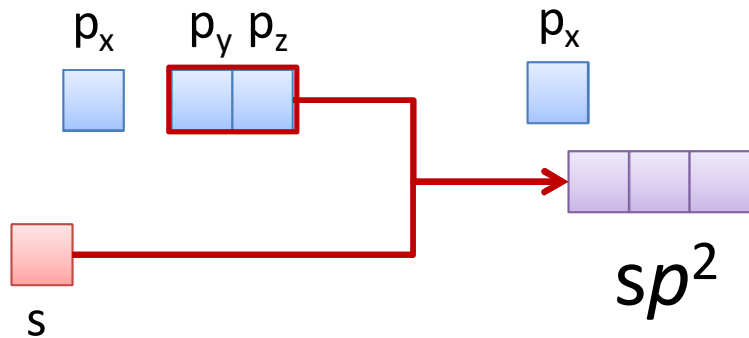


altri tipi di ibridazione:

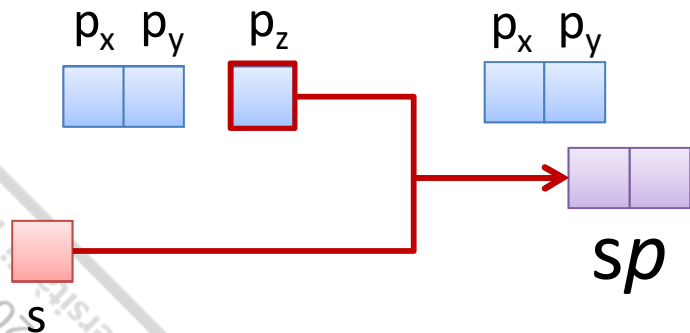
**$n^\circ$  di orbitali ibridi =  $n^\circ$  di orbitali combinati**



$$1s + 3p = 4sp^3$$

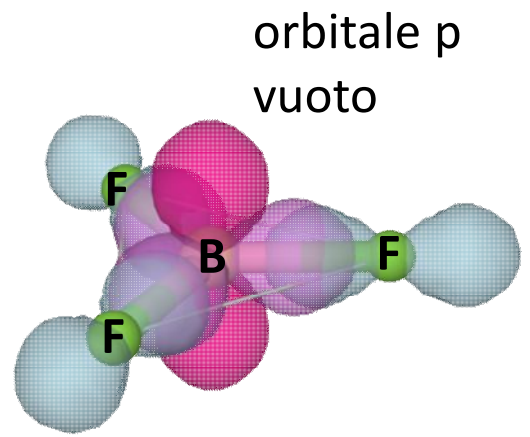
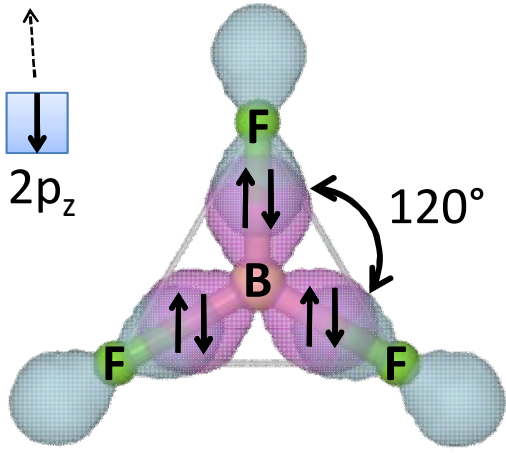
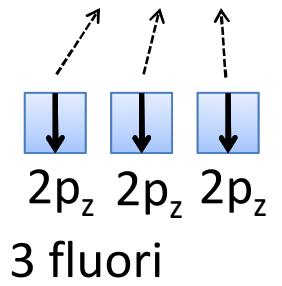
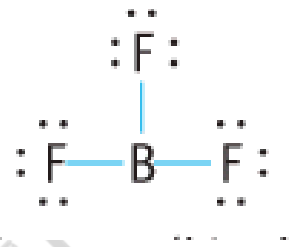
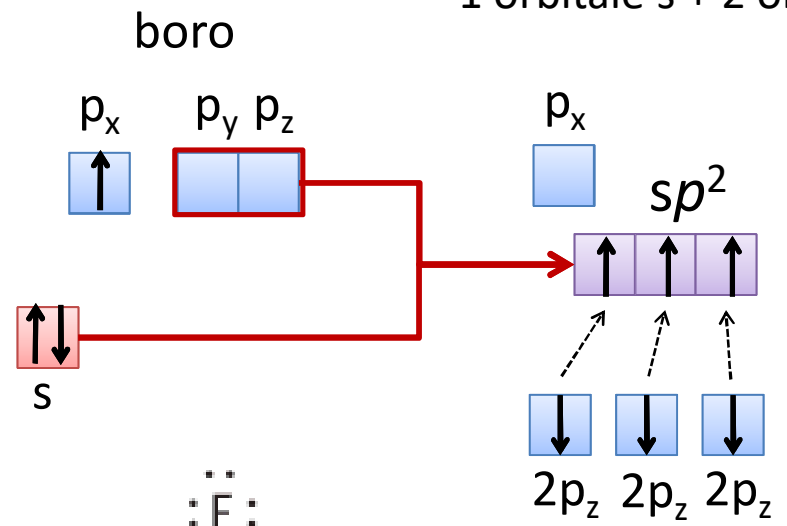
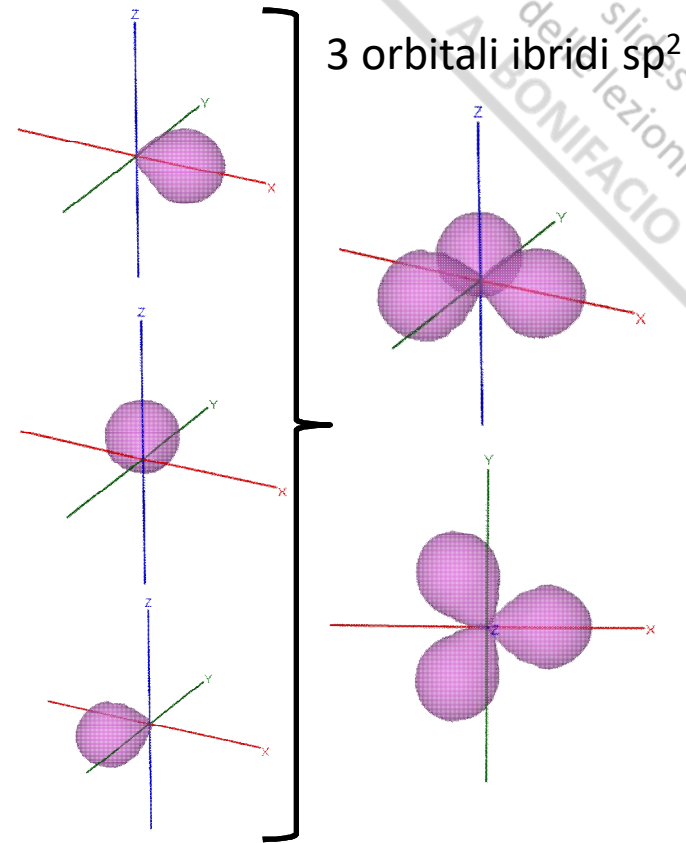
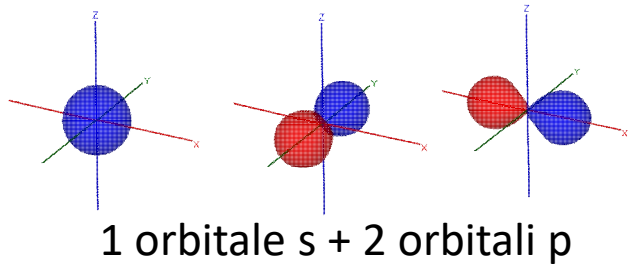
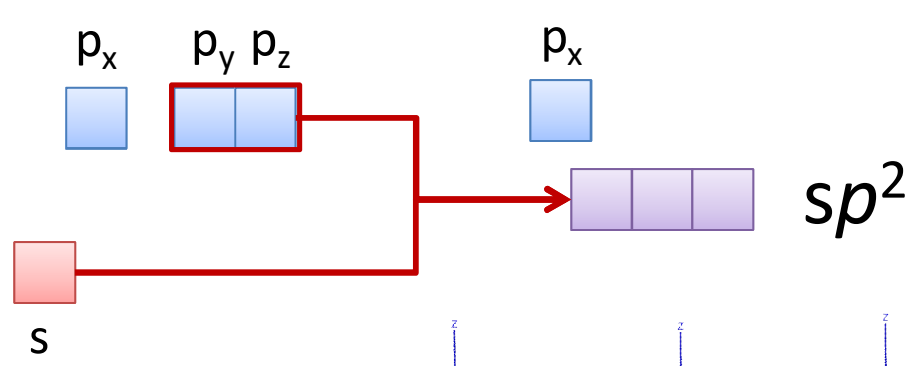


$$1s + 2p = 3sp^2$$

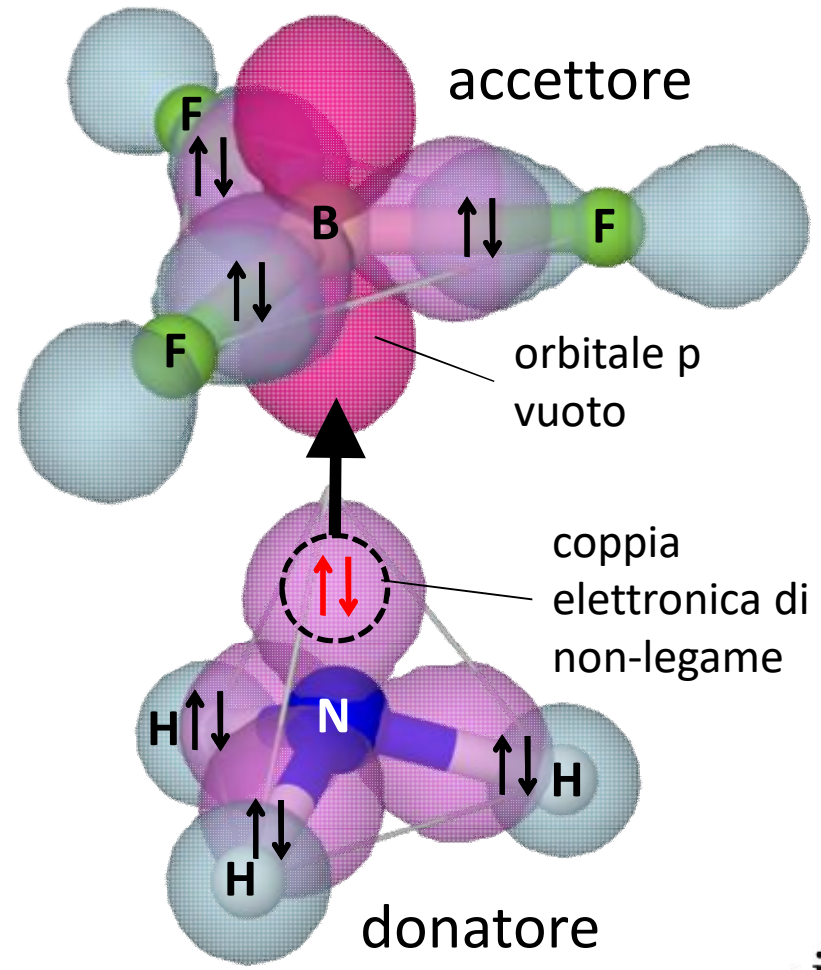


$$1s + 1p = 2sp$$

alcuni orbitali p non partecipano alla combinazione, rimanendo disponibili per elettroni di legame o non-legame

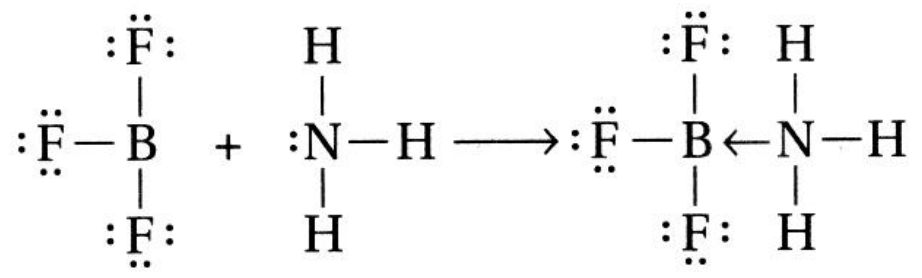


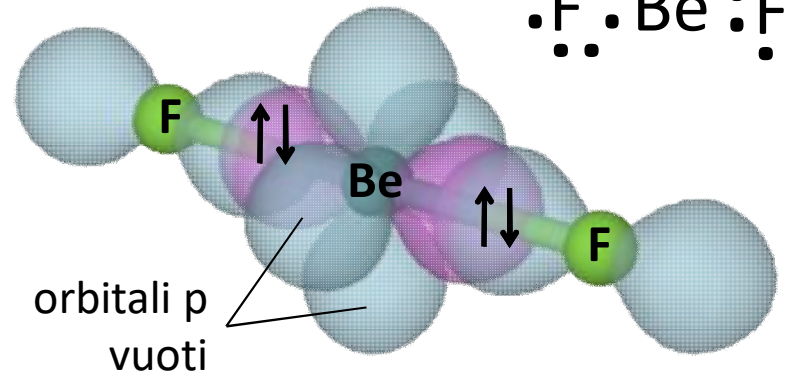
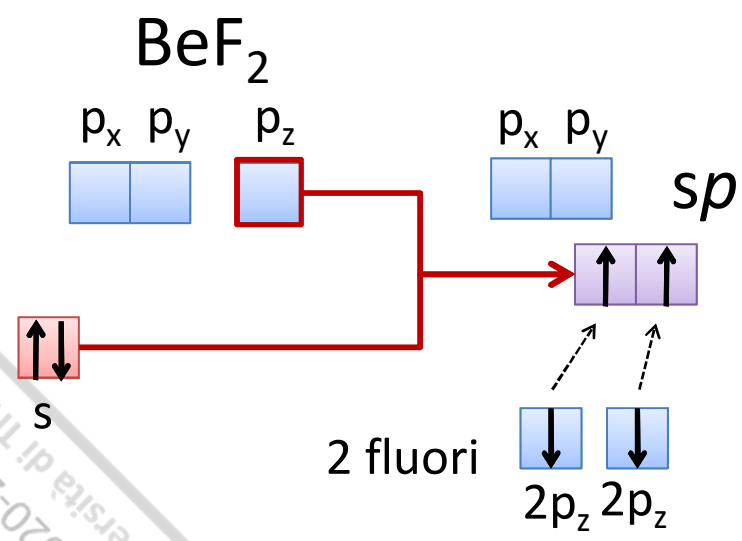
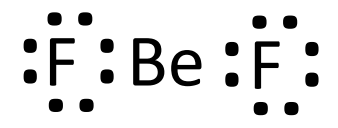
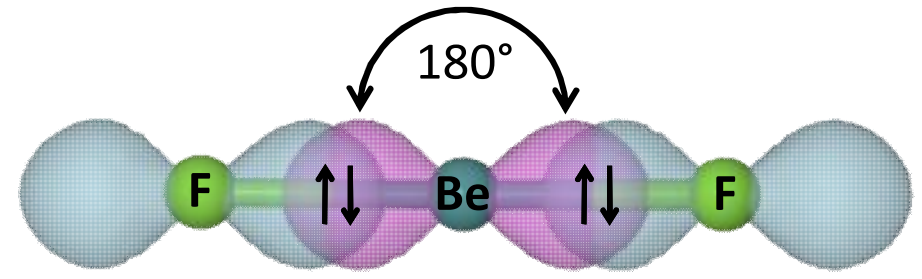
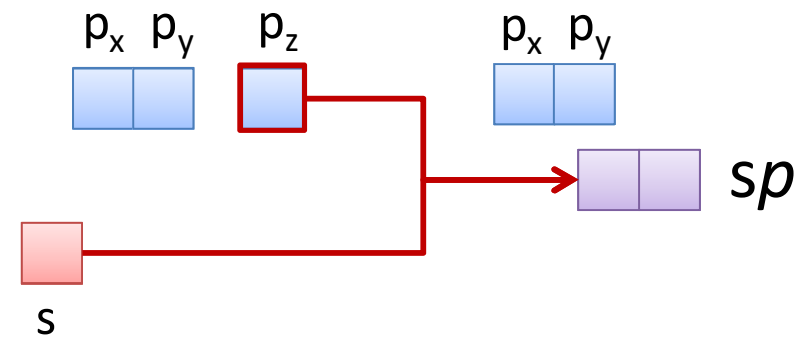
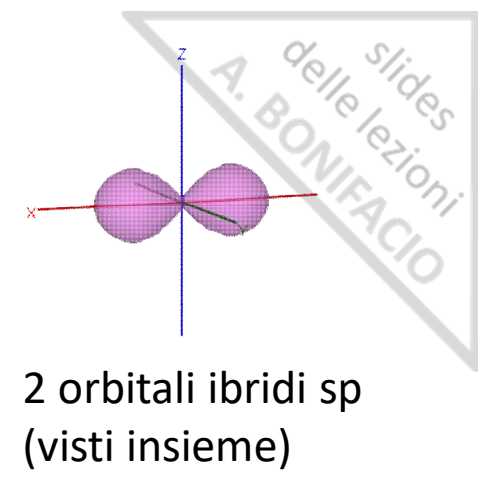
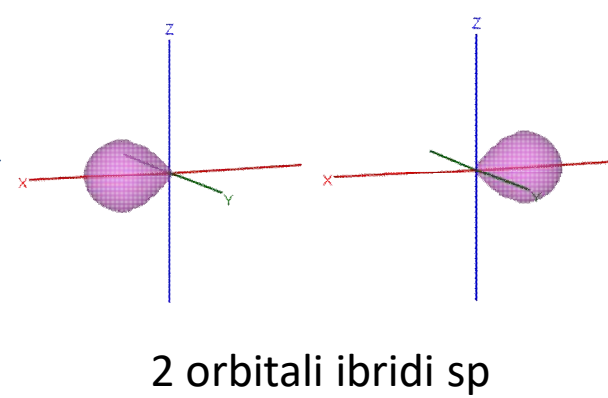
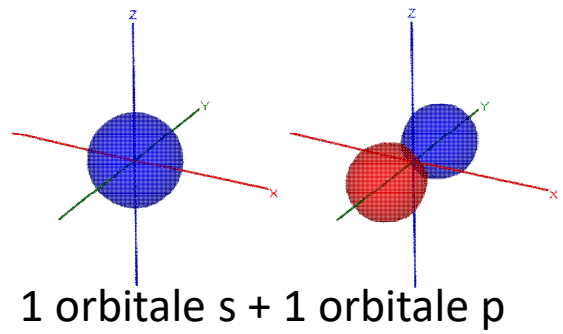
orbitale p vuoto

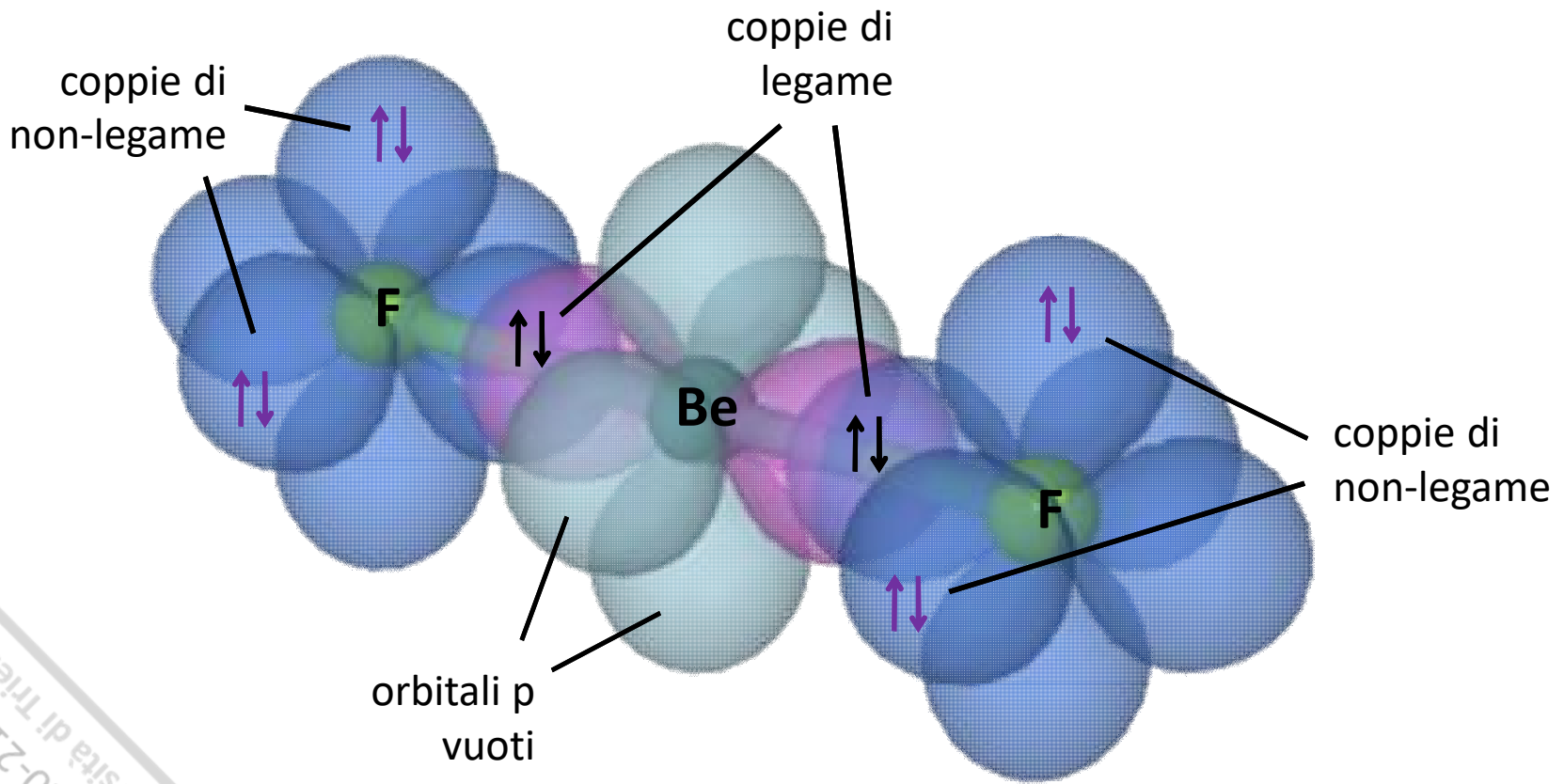
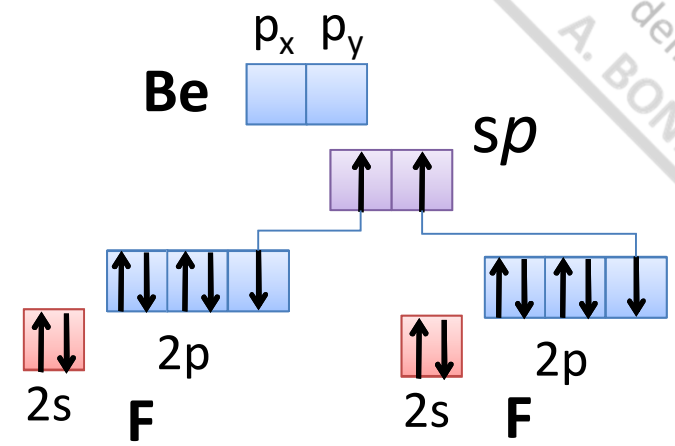
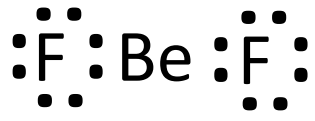


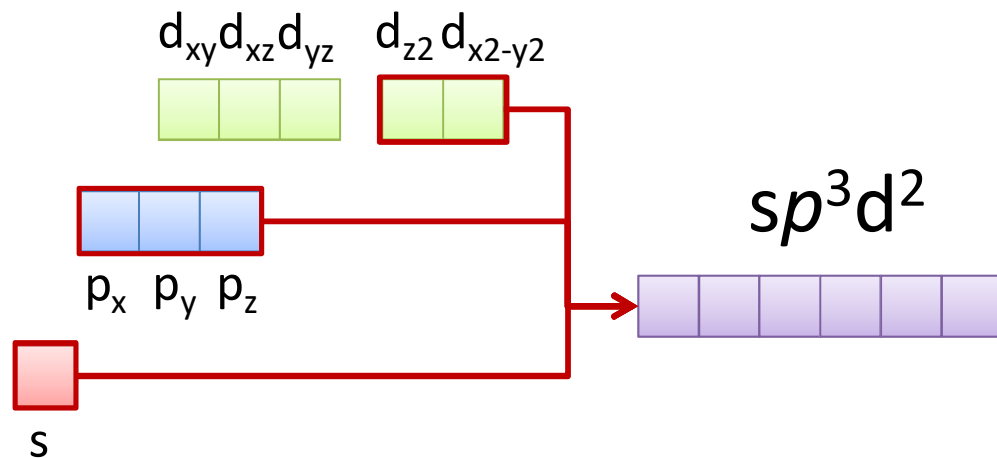
formazione legame  
***covalente coordinato***  
("di coordinazione" o "dativo")

quando un atomo forma un  
legame "donando" una coppia  
solitaria originariamente di  
non legame





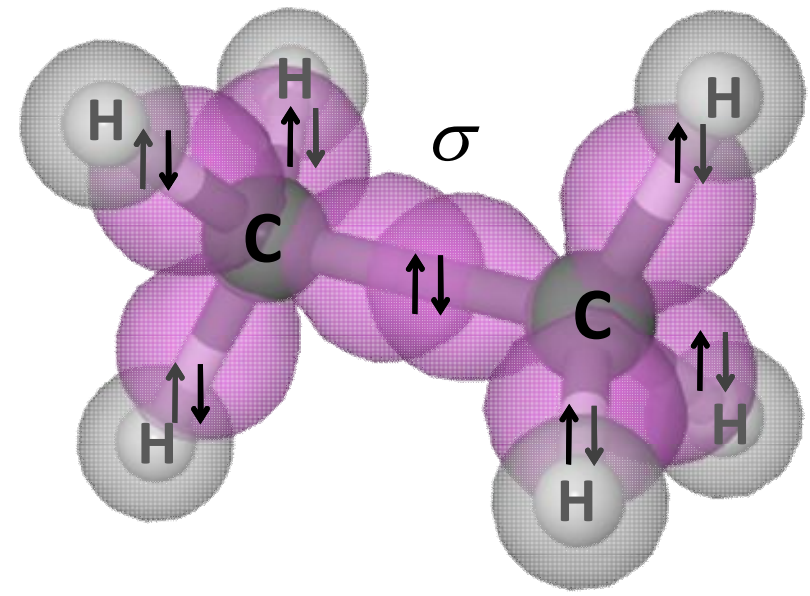
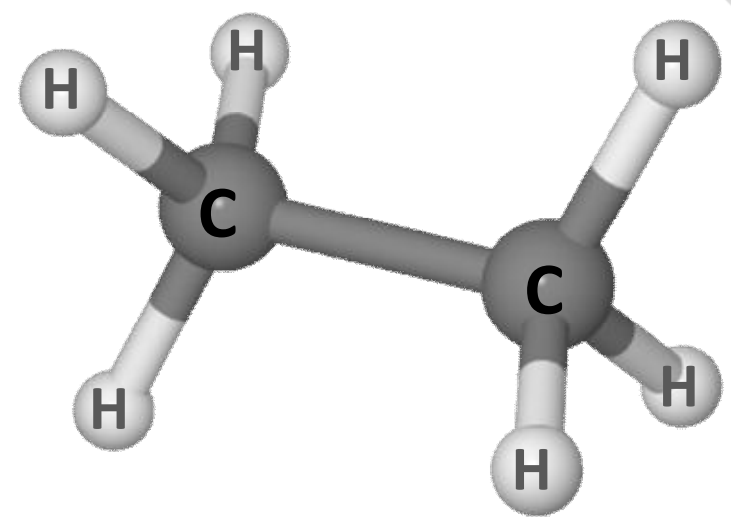
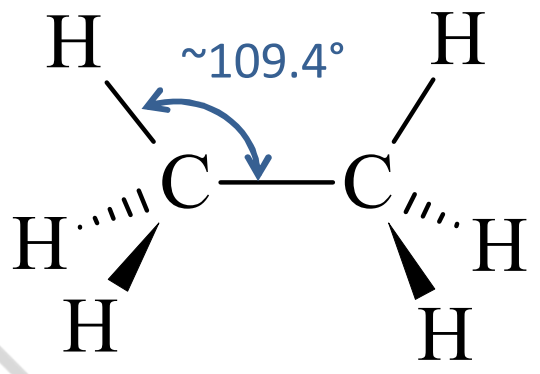
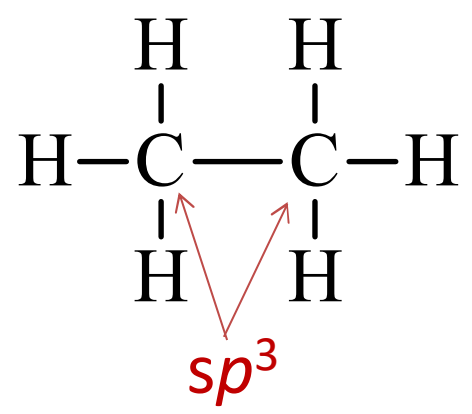




per composti del tipo  $AB_5$  (es.  $PF_5$ ) e  $AB_6$  (es.  $SF_6$ ) esiste la possibilità di usare gli **orbitali d** per l'ibridazione con gli s e p



$C_2H_6$  **etano**



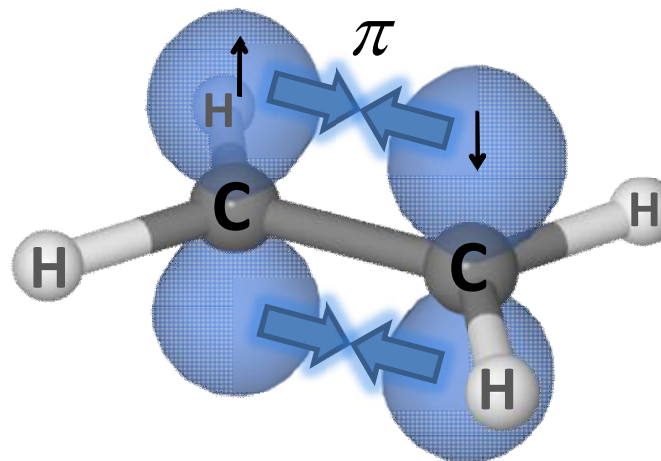
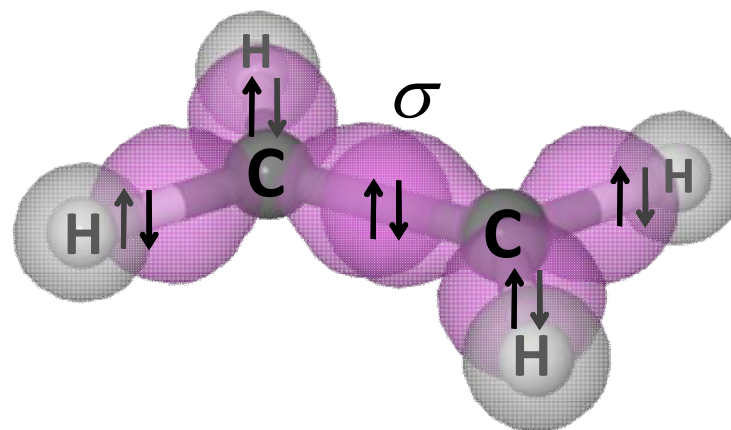
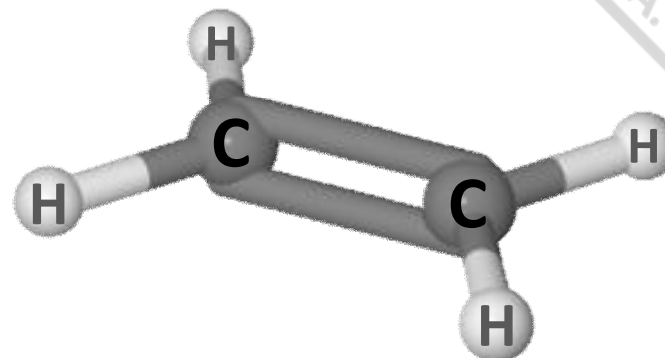
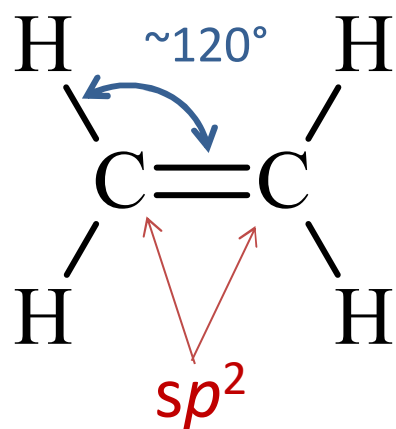
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste



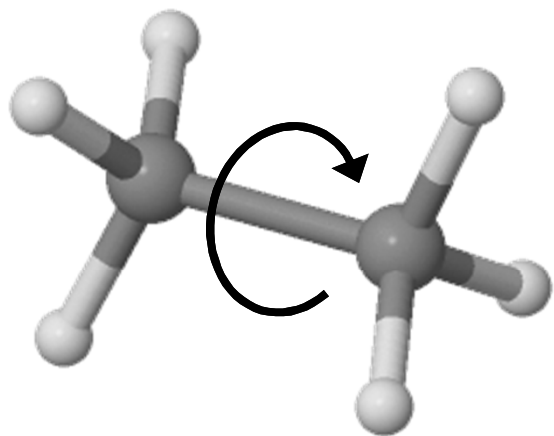
**etilene**

(o etene)

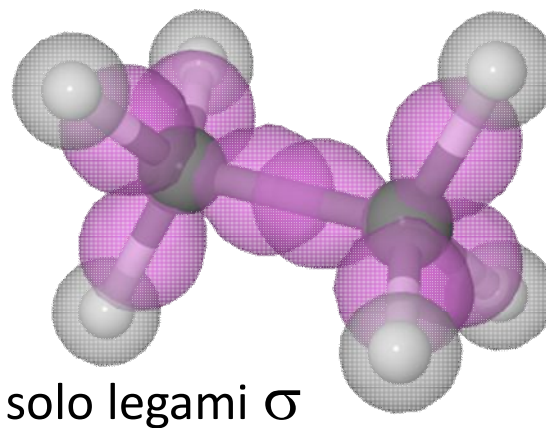


slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

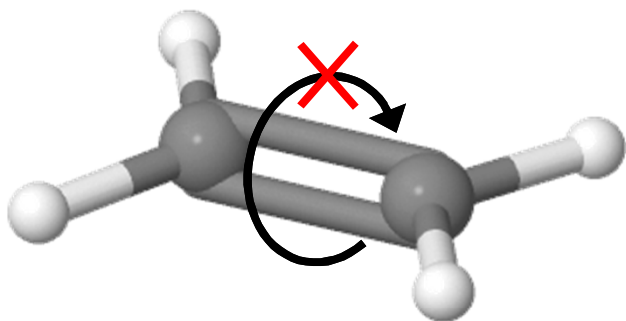
A. A.  
2020-21  
Università di Trieste



rotazione **libera** attorno al legame

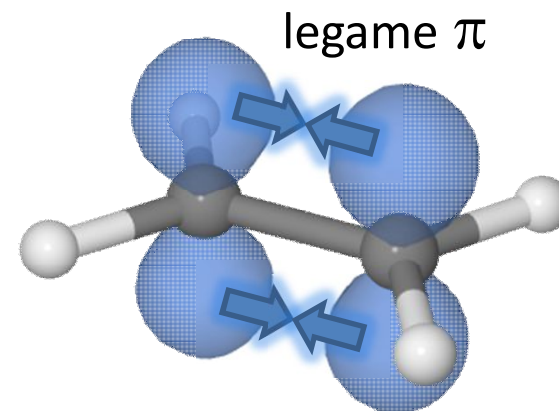


solo legami  $\sigma$

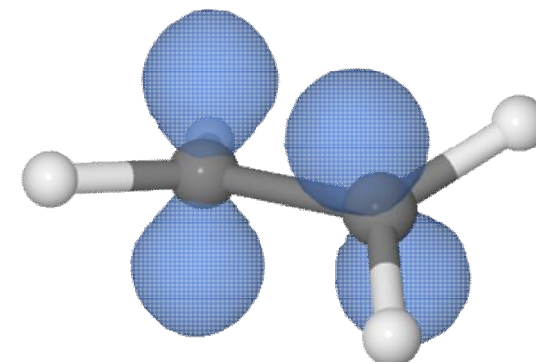


rotazione **molto sfavorita**

rotazione  
diminuisce la  
*sovrapposizione*  
tra orbitali *p*



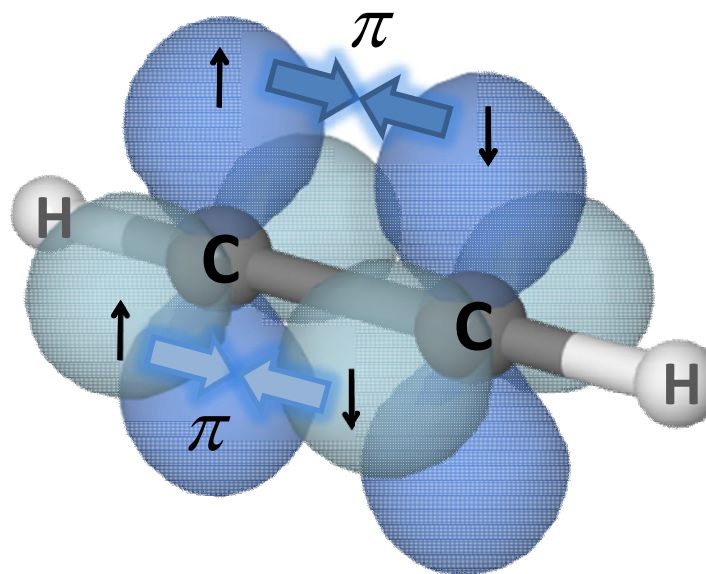
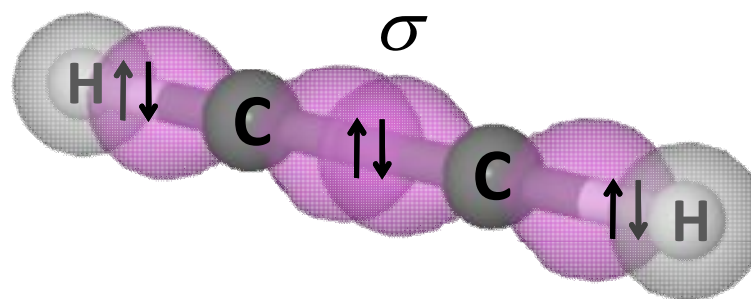
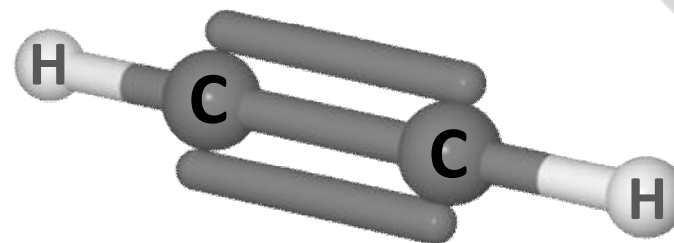
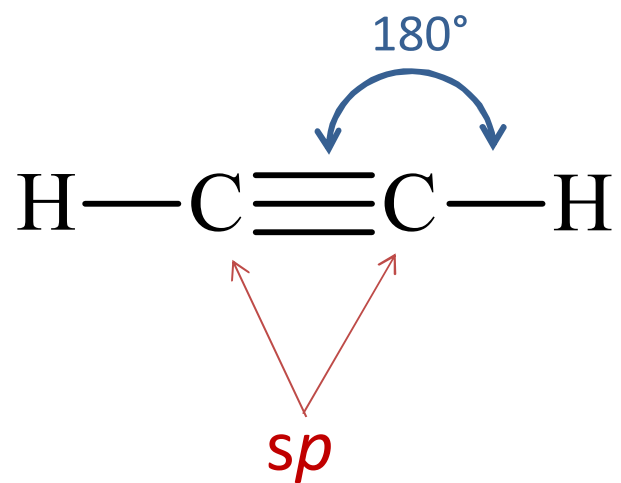
legame  $\pi$





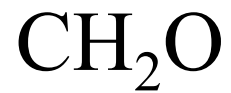
**acetilene**

(o etino)

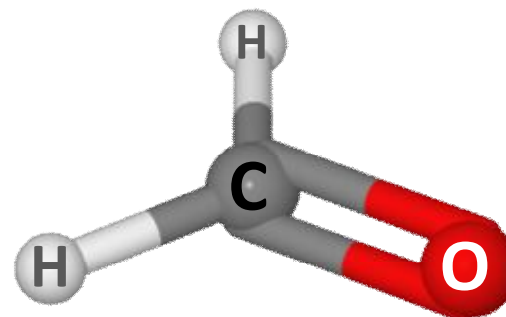
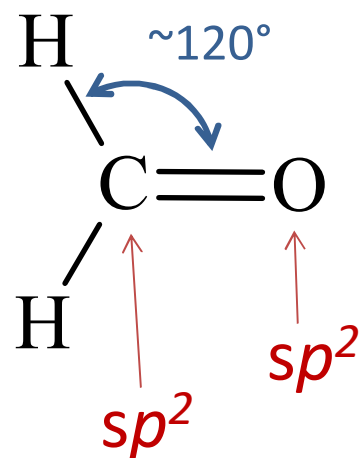


slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

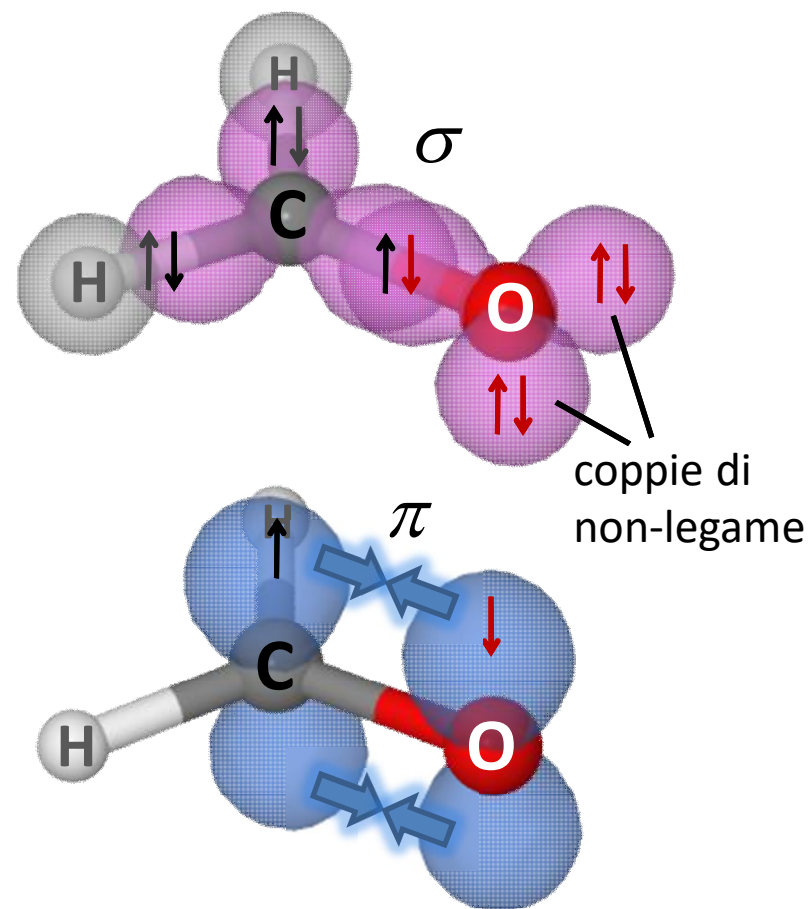
A. A.  
2020-21  
Università di Trieste



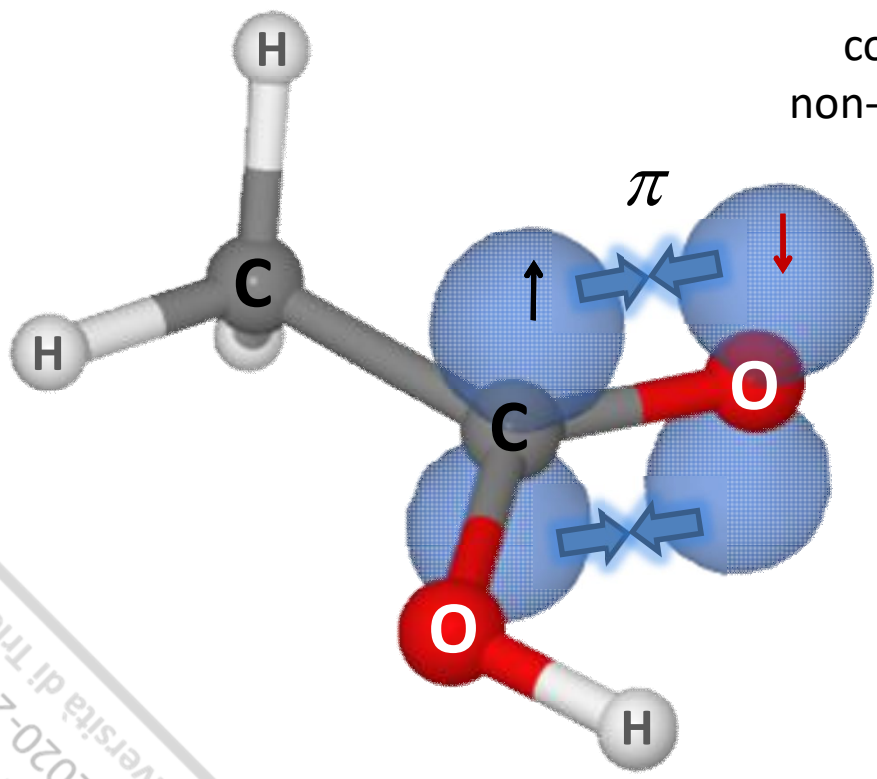
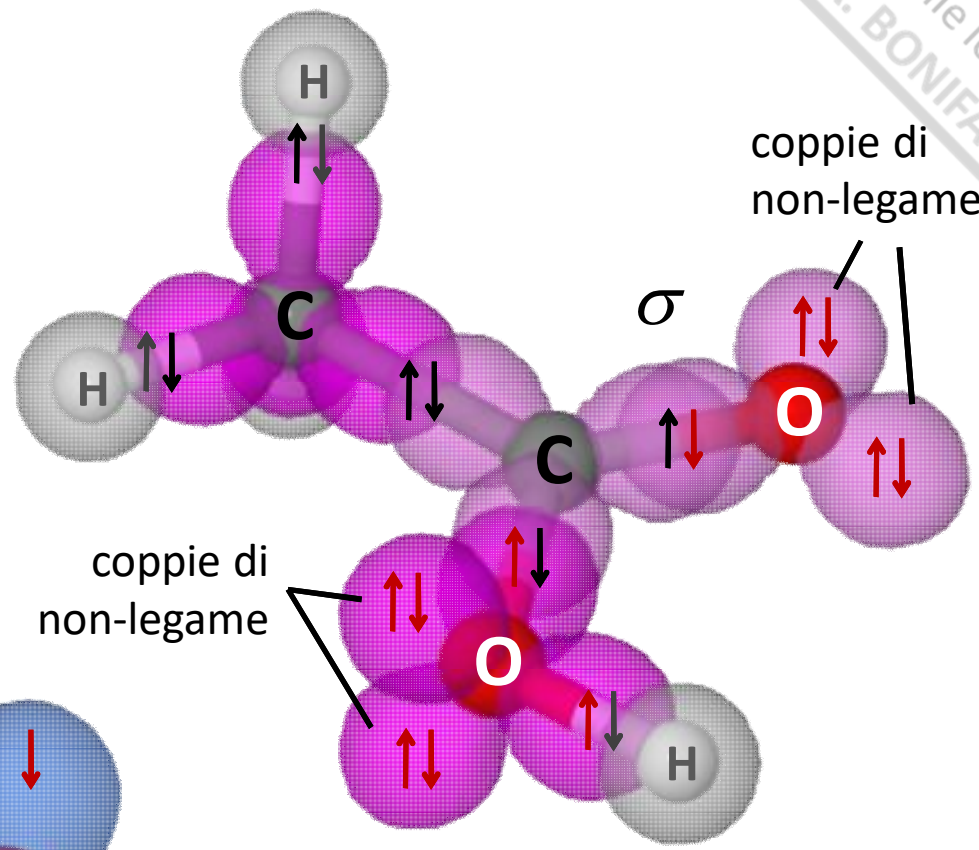
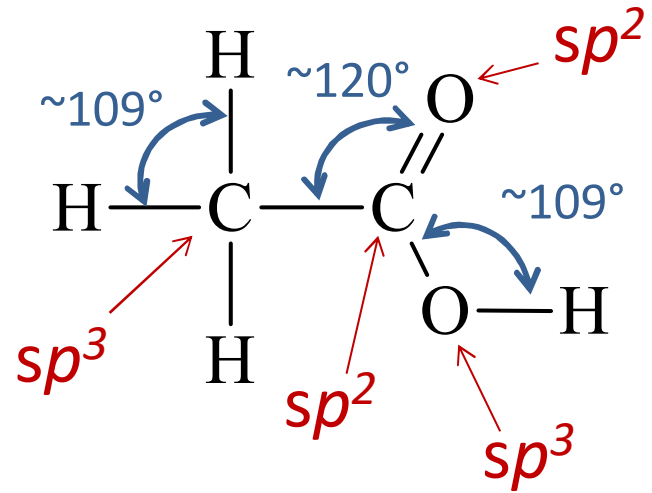
# formaldeide



slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

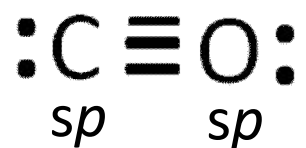


A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

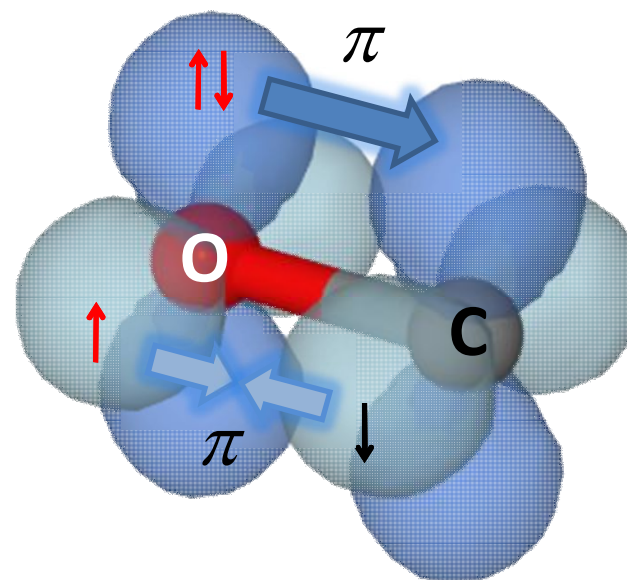
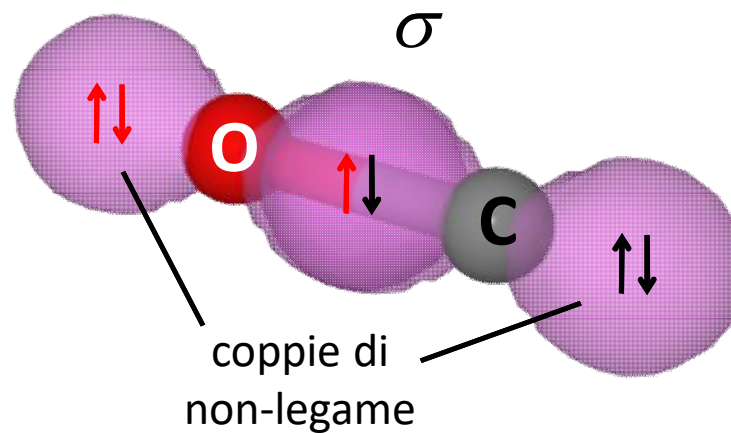


**acido acetico**  
 $\text{CH}_3\text{COOH}$

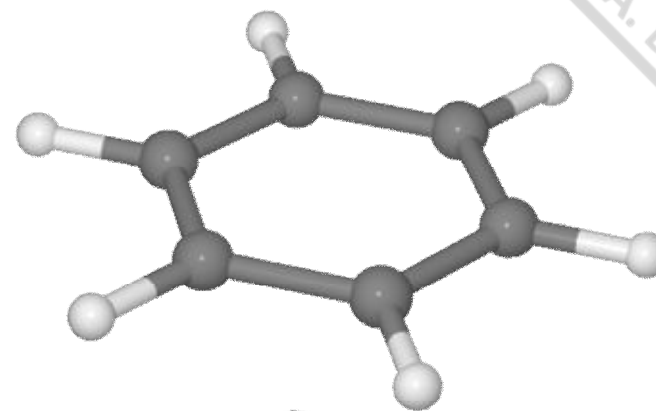
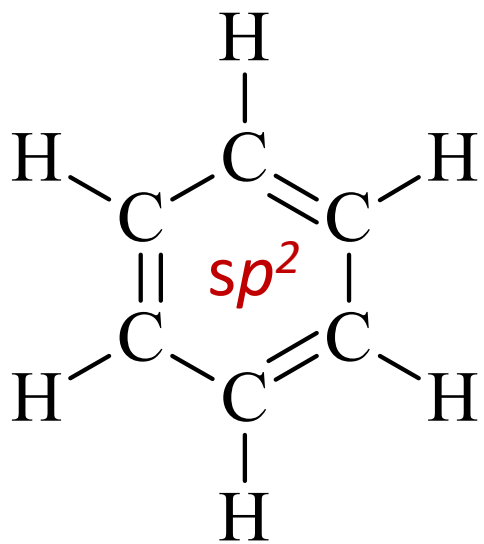
# monossido di carbonio



particolarità:  
l'ossigeno  
contribuisce con 2  
elettroni ad uno dei  
due legami  $\pi$

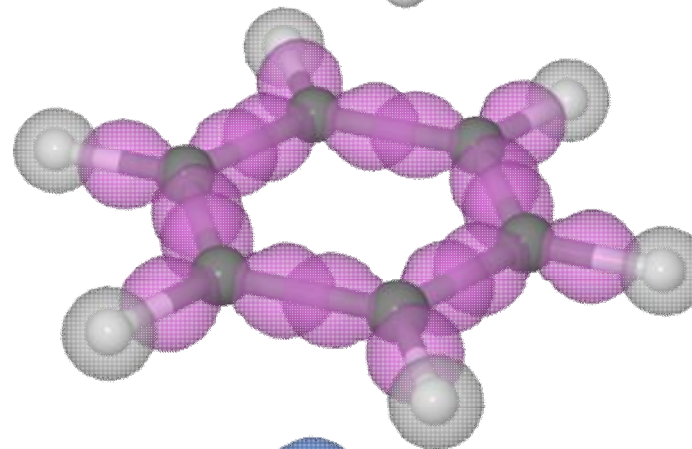


$C_6H_6$  **benzene**

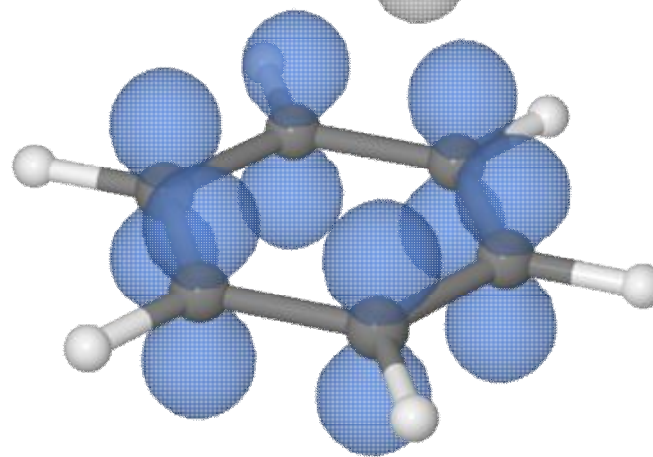


slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

$\sigma$



$\pi$





# diamagnetismo e paramagnetismo

**sostanze**

**diamagnetiche**

debolmente respinte

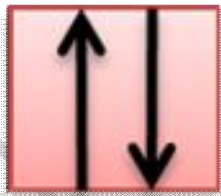
da un campo

magnetico

*(effetto trascurabile)*

presente in sostanze con tutti gli

***elettroni accoppiati***



**sostanze**

**paramagnetiche**

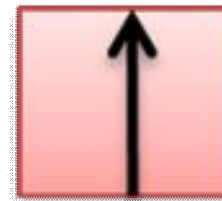
fortemente attratte

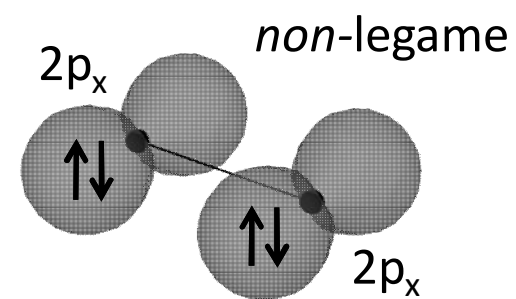
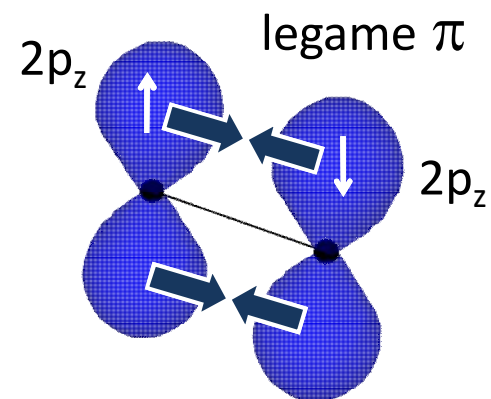
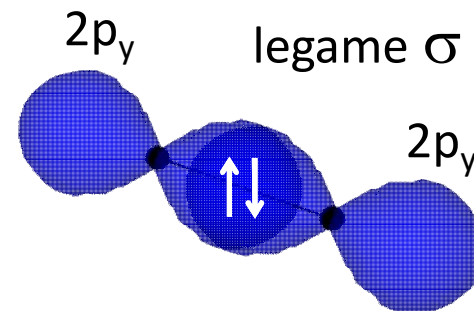
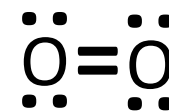
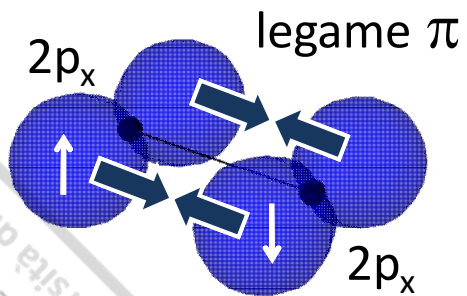
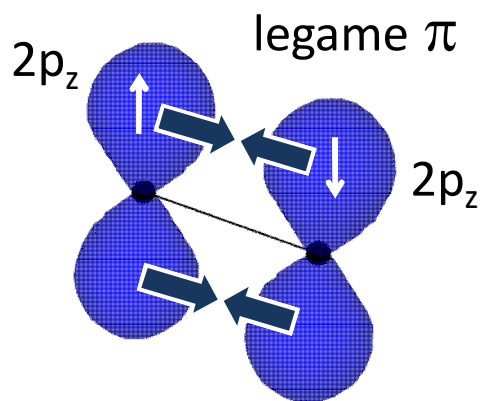
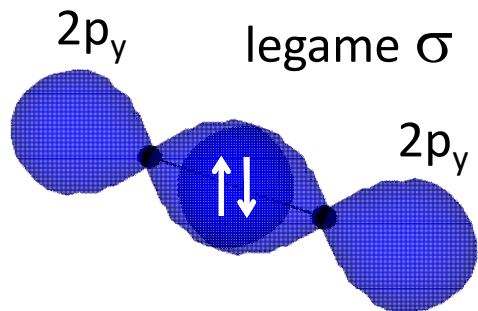
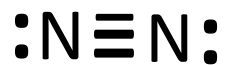
da un campo

magnetico

presente in sostanze con

***elettroni spaiati***





secondo la VBT

$\text{N}_2$  e  $\text{O}_2$   
*diamagnetici*

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# teoria degli orbitali molecolari (MO-LCAO)

slides  
delle lezioni  
A. ABRONIFACIO

**M**olecular

*Orbitali*

**O**rbital as

*Molecolari come*

**L**inear

*Combinazione*

**C**ombination of

*Lineare di*

**A**tomic

*Orbitali*

**O**rbitali

*Atomici*

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

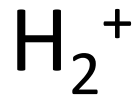
**1 elettrone**



atomo di idrogeno

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

**orbitali atomici**

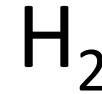


ione molecolare di-idrogeno

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

**orbitali molecolari**

**2 elettroni**



molecola di idrogeno

~~$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$~~

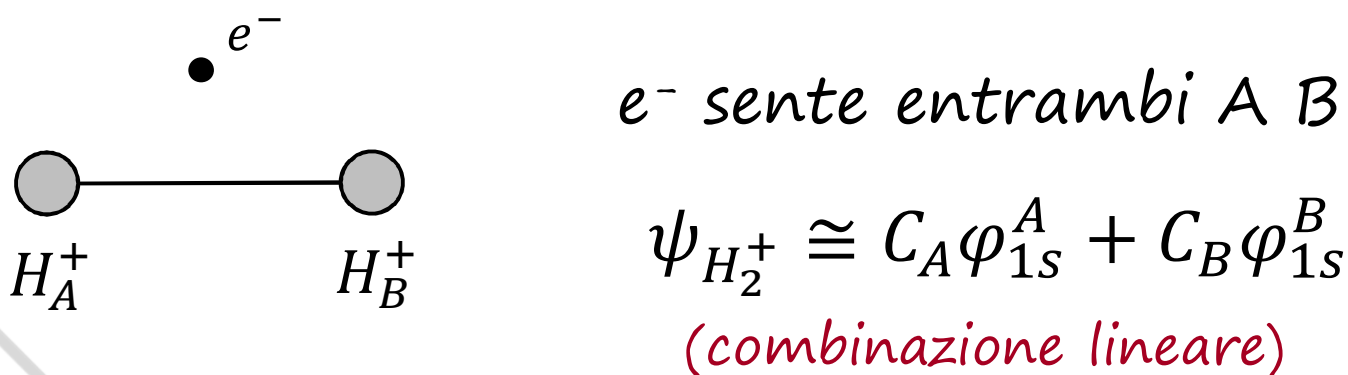
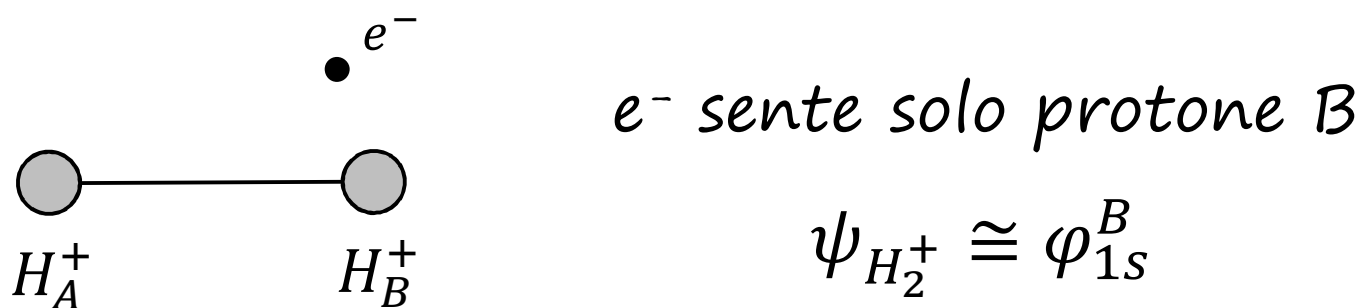
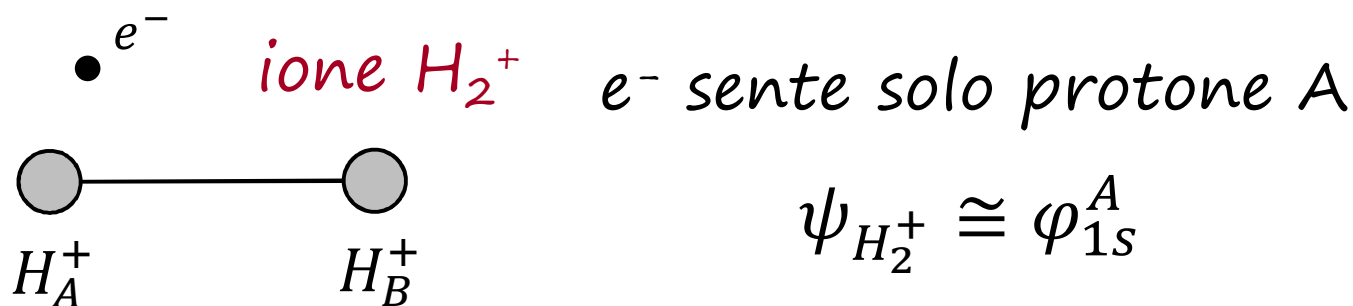
**non risolvibile**

**approssimazioni (VBT, MO-LCAO)**

slides delle lezioni  
A. BONIFACIO

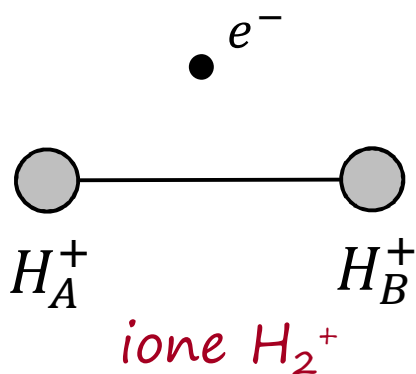
A. A. 2020-21  
Università di Trieste

# teoria MO-LCAO - fondamentali



# teoria MO-LCAO - fondamentali

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



$$\psi_{H_2^+} = C_A \varphi_{1s}^A + C_B \varphi_{1s}^B$$

*ipotesi centrale*

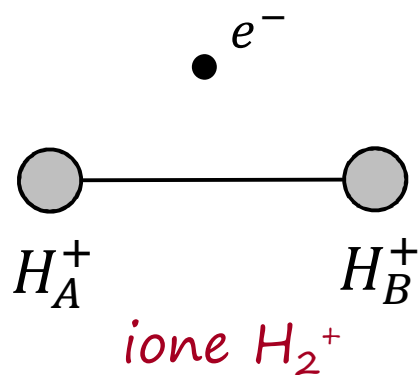
*orbitale  
molecolare*

funzione d'onda molecolare  
approssimabile come  
combinazione lineare di  
orbitali atomici

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# teoria MO-LCAO - fondamentali

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



$$\psi_{H_2^+} = C_A \varphi_{1s}^A + C_B \varphi_{1s}^B$$



$$|C_A| = |C_B|$$

*(orbitali su A e B identici)*

$$C_A = C_B \text{ oppure } C_A = -C_B$$

$$\psi_{\sigma_{1s}} = C \varphi_{1s}^A + C \varphi_{1s}^B = C(\varphi_{1s}^A + \varphi_{1s}^B)$$

$$\psi_{\sigma_{1s}^*} = C \varphi_{1s}^A - C \varphi_{1s}^B = C(\varphi_{1s}^A - \varphi_{1s}^B)$$

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# teoria MO-LCAO - fondamentali

$$\psi_{\sigma_{1s}} = C(\varphi_{1s}^A + \varphi_{1s}^B)$$

*coefficienti si determinano  
imponendo la condizione di  
normalizzazione*

$$\int_{V=\infty} |\psi_{\sigma_{1s}}|^2 dV = 1$$

$$\int_{V=\infty} |C(\varphi_{1s}^A + \varphi_{1s}^B)|^2 dV = 1$$

$$\int_{V=\infty} C^2 \left[ (\varphi_{1s}^A)^2 + (\varphi_{1s}^B)^2 + 2\varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B \right] dV = 1$$



# teoria MO-LCAO - fondamentali

$$\psi_{\sigma_{1s}} = C(\varphi_{1s}^A + \varphi_{1s}^B)$$

*coefficienti si determinano imponendo la condizione di normalizzazione*

*integrale di sovrapposizione*

$$C^2 \int_{V=\infty}^1 (\varphi_{1s}^A)^2 dV + C^2 \int_{V=\infty}^1 (\varphi_{1s}^B)^2 dV + 2C^2 \int_S \varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B dV = 1$$

$$\int_{V=\infty} C^2 \left[ (\varphi_{1s}^A)^2 + (\varphi_{1s}^B)^2 + 2\varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B \right] dV = 1$$

# teoria MO-LCAO - fondamentali

$$\psi_{\sigma_{1s}} = C(\varphi_{1s}^A + \varphi_{1s}^B)$$

*coefficienti si determinano imponendo la condizione di normalizzazione*

$$C^2 \int (\varphi_{1s}^A)^2 dV + C^2 \int (\varphi_{1s}^B)^2 dV + 2C^2 \int \varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B dV = 1$$

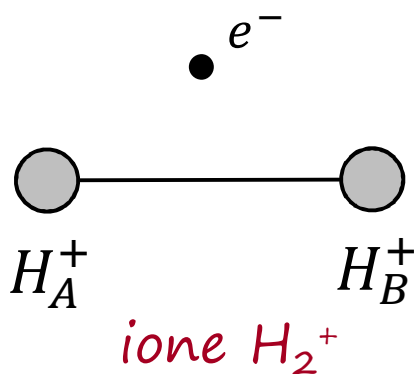
*integrale di sovrapposizione*

$$2C^2 + 2C^2 S = 1$$

$$2C^2(1 + S) = 1$$

$$C = \sqrt{\frac{1}{2(1 + S)}} \sim \frac{1}{\sqrt{2}}$$

# teoria MO-LCAO - fondamentali



$$\psi_{\sigma_{1s}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{1s}^A + \varphi_{1s}^B)$$

$$\psi_{\sigma_{1s}^*} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{1s}^A - \varphi_{1s}^B)$$

*densità di  
probabilità*

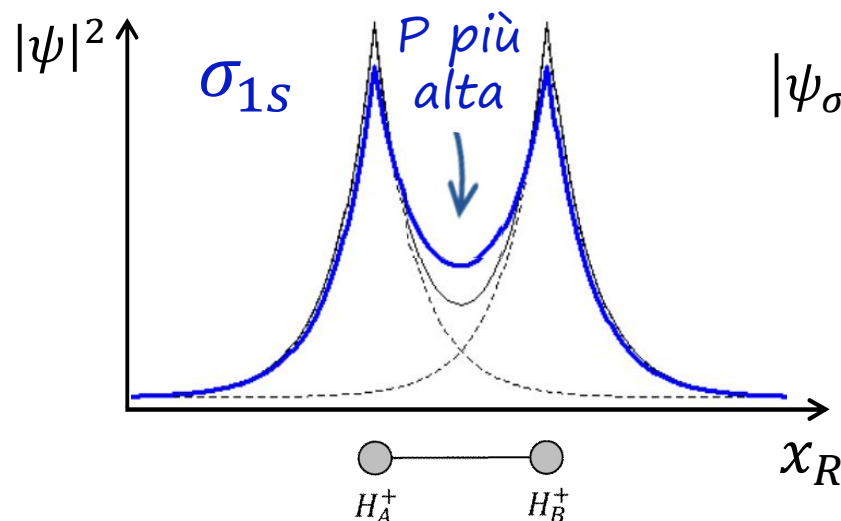
*↓*

$$|\psi_{\sigma_{1s}}|^2 = \frac{1}{2} \left[ (\varphi_{1s}^A)^2 + (\varphi_{1s}^B)^2 + 2\varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B \right]$$

$$|\psi_{\sigma_{1s}^*}|^2 = \frac{1}{2} \left[ (\varphi_{1s}^A)^2 + (\varphi_{1s}^B)^2 - 2\varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B \right]$$

# teoria MO-LCAO - fondamentali

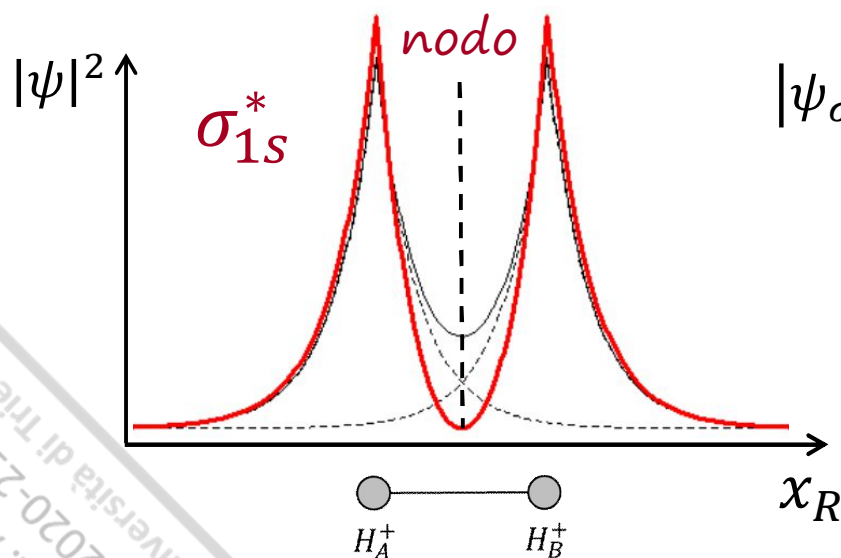
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



$$|\psi_{\sigma_{1s}}|^2 = \frac{1}{2} \left[ (\varphi_{1s}^A)^2 + (\varphi_{1s}^B)^2 + 2\varphi_{1s}^A\varphi_{1s}^B \right]$$

maggiore probabilità di trovare  $e^-$  tra i 2 nuclei

ORBITALE LEGANTE



$$|\psi_{\sigma_{1s}^*}|^2 = \frac{1}{2} \left[ (\varphi_{1s}^A)^2 + (\varphi_{1s}^B)^2 - 2\varphi_{1s}^A\varphi_{1s}^B \right]$$

zero probabilità di trovare  $e^-$  tra i 2 nuclei (nodo)

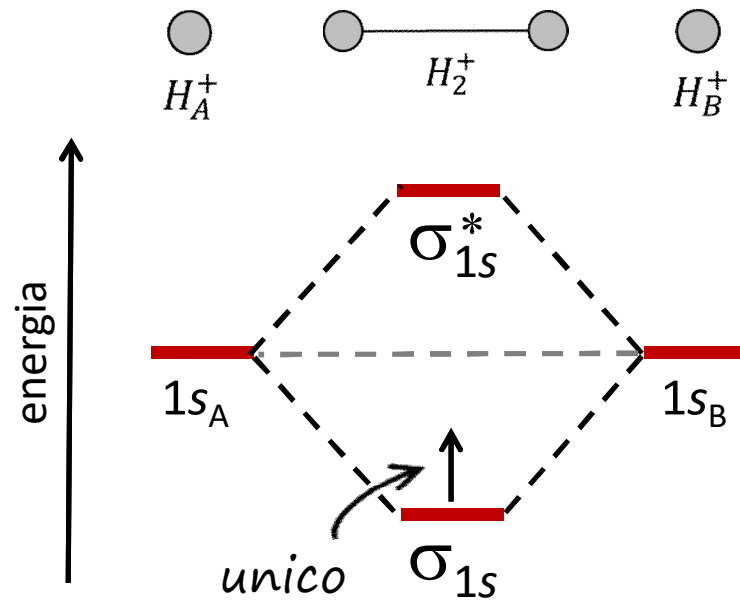
ORBITALE ANTI-LEGANTE

# teoria MO-LCAO - fondamentali

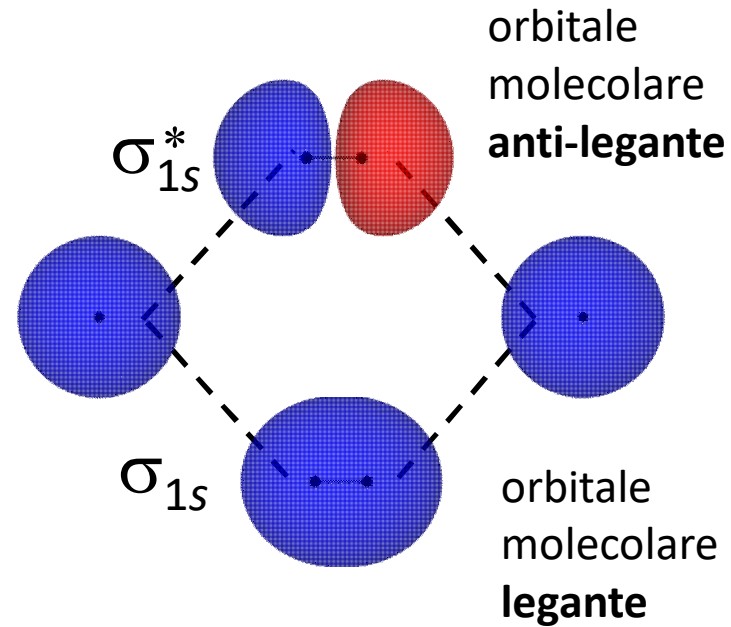
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

diagramma di  
**correlazione**

*diagramma qualitativo delle  
energie relative degli AO e MO*



*unico  
elettrone  
inserito  
secondo  
aufbau*



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# teoria MO-LCAO - fondamentali

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

*parallelismo*

## atomi

approssimazione della  
funzione d'onda  
dell'**atomo** come  
prodotto di

**orbitali atomici**

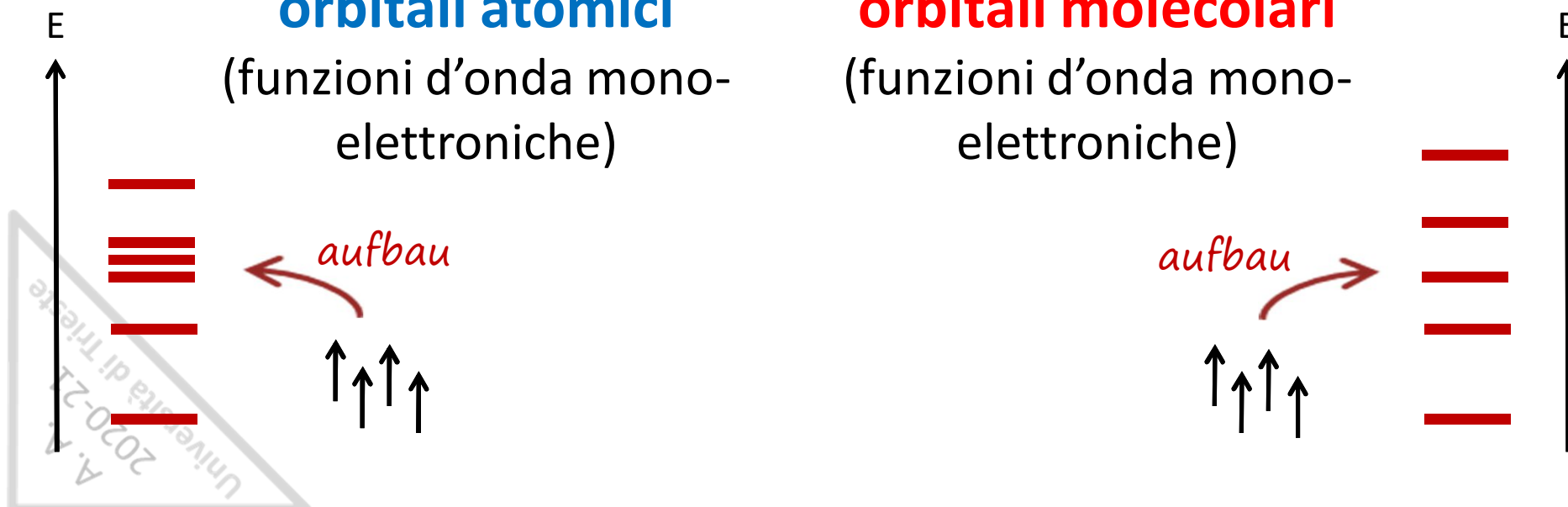
(funzioni d'onda mono-  
elettroniche)

## molecole

approssimazione della  
funzione d'onda  
della **molecola** come  
prodotto di

**orbitali molecolari**

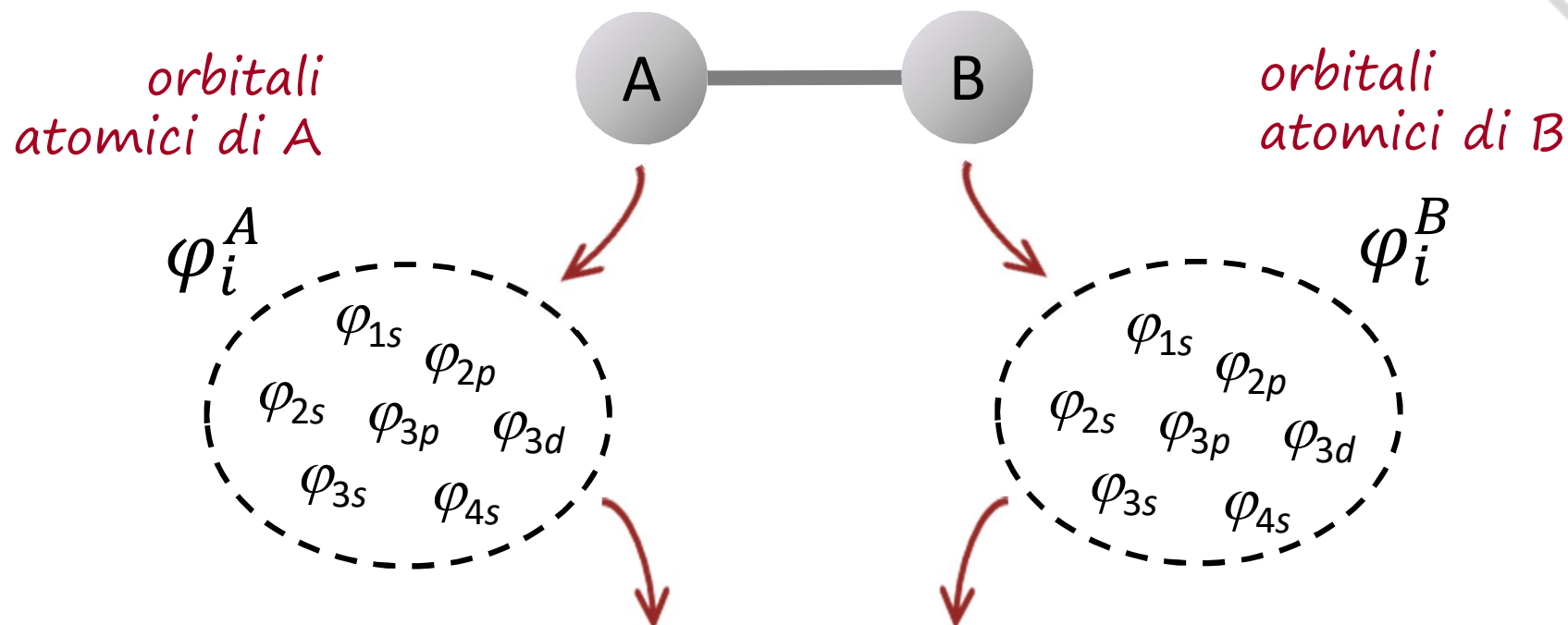
(funzioni d'onda mono-  
elettroniche)



A. M.  
2020-21  
Università di Trieste

# teoria MO-LCAO – metodo generale

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



**combinazione lineare**

di orbitali atomici

$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B$$

$$\left( \psi_{MO} = \sum_{i,k} C_k \varphi_i^k \right)$$

Università di Trieste  
2020-21  
A. A.

# teoria MO-LCAO – metodo generale

**combinazione lineare**  
di orbitali atomici

$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B$$

*fatti importanti:*

A. Il numero di MO = numero di AO combinati

$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B \left\{ \begin{array}{l} \psi_{MO} = C(\varphi_i^A - \varphi_i^B) \\ \psi_{MO}^* = C(\varphi_i^A + \varphi_i^B) \end{array} \right.$$

*2 orbitali  
atomici*

*2 orbitali molecolari*



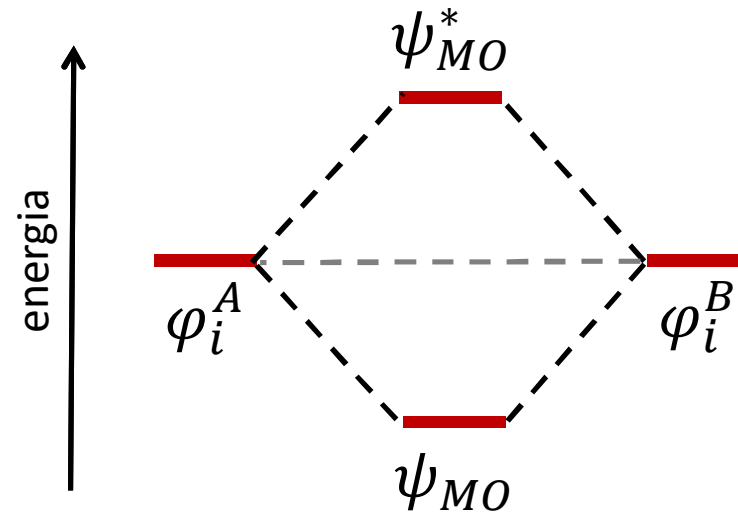
# teoria MO-LCAO – metodo generale

**combinazione lineare**  
di orbitali atomici

$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B$$

*fatti importanti:*

B.  $E$  orbitali leganti  $<$   $E$  orbitali antileganti



# teoria MO-LCAO – metodo generale

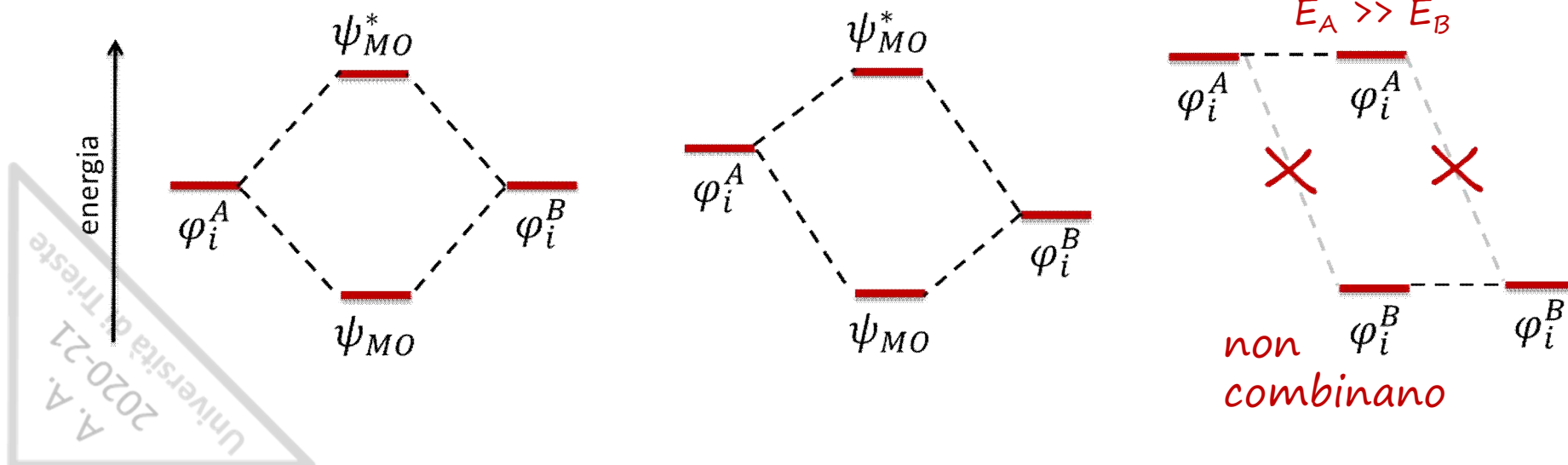
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

**combinazione lineare**  
di orbitali atomici

$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B$$

*combinazione possibile solo se  
verificate alcune condizioni:*

1.  $\varphi_i^A$  e  $\varphi_i^B$  devono avere **energie simili**



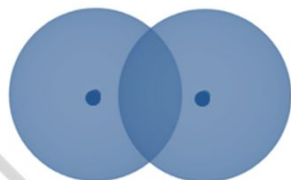
# teoria MO-LCAO – metodo generale

**combinazione lineare**  
di orbitali atomici

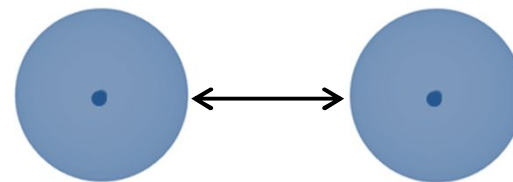
$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B$$

*combinazione possibile solo se  
verificate alcune condizioni:*

1.  $\varphi_i^A$  e  $\varphi_i^B$  devono avere **energie simili**
2.  $\varphi_i^A$  e  $\varphi_i^B$  devono avere un **integrale di sovrapposizione S** non trascurabile



$$S = \int \varphi_{1s}^A \varphi_{1s}^B dV$$



# teoria MO-LCAO – metodo generale

**combinazione lineare**  
di orbitali atomici

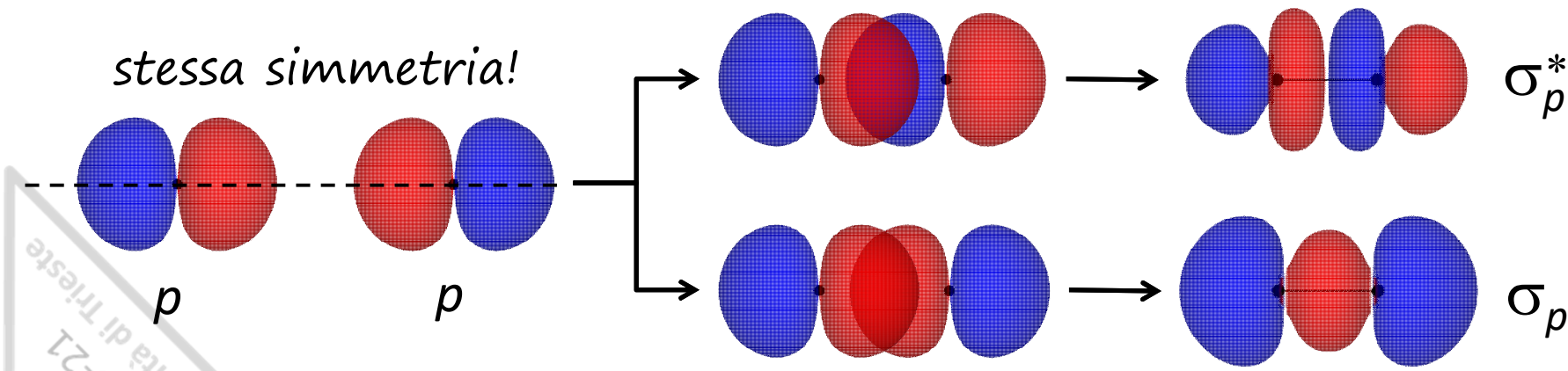
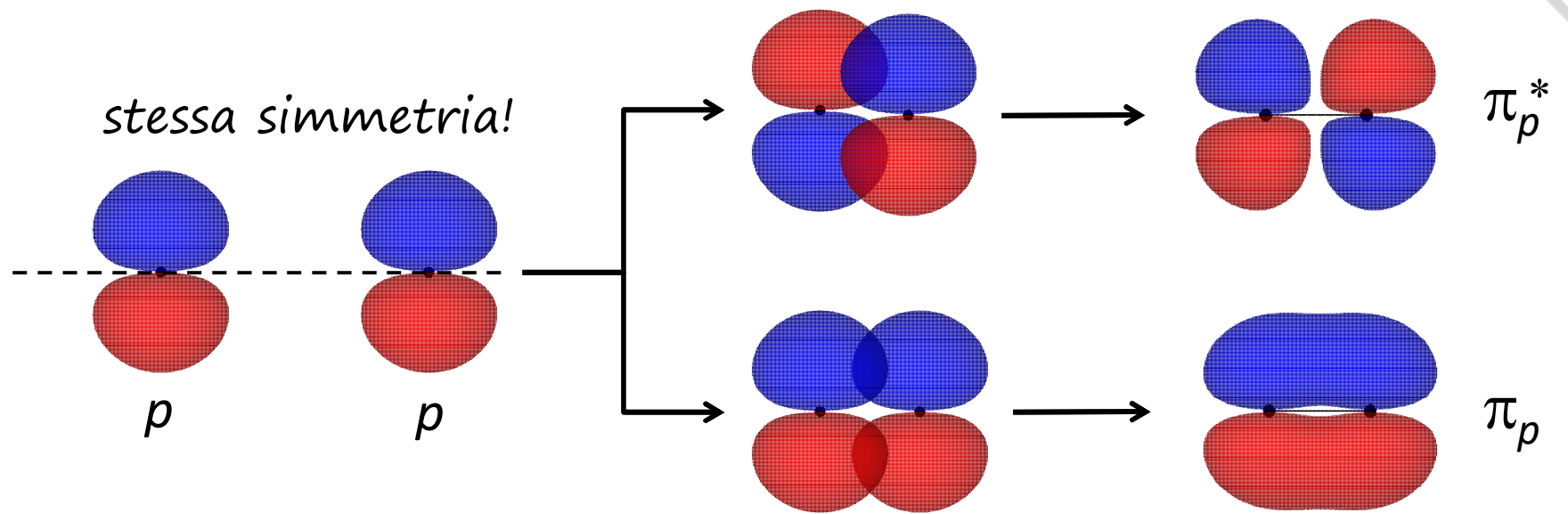
$$\psi_{MO} = C_A \varphi_i^A + C_B \varphi_i^B$$

*combinazione possibile solo se  
verificate alcune condizioni:*

1.  $\varphi_i^A$  e  $\varphi_i^B$  devono avere **energie simili**
2.  $\varphi_i^A$  e  $\varphi_i^B$  devono avere un **integrale di sovrapposizione S** non trascurabile
3.  $\varphi_i^A$  e  $\varphi_i^B$  devono avere la **stessa simmetria** rispetto all'asse inter-nucleare

# teoria MO-LCAO – metodo generale

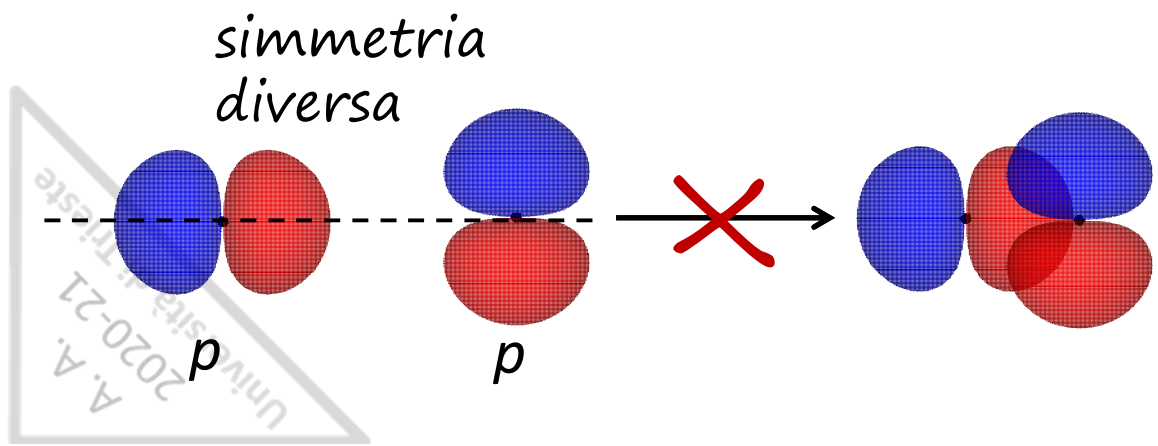
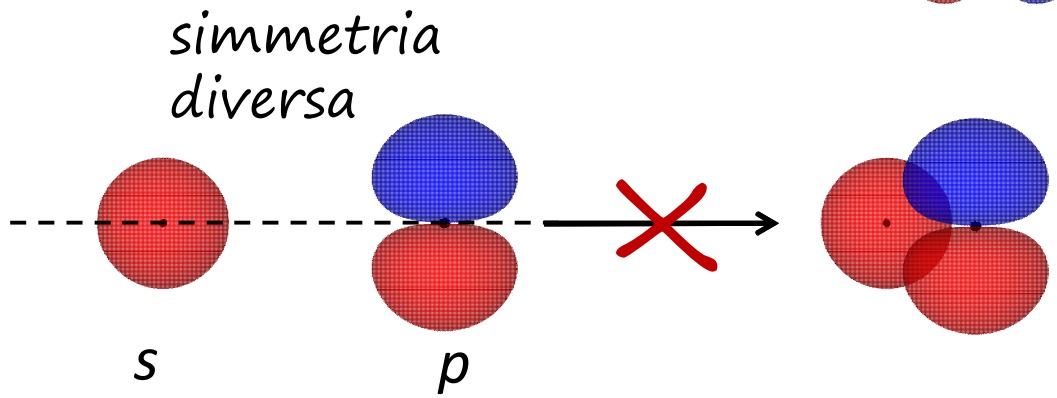
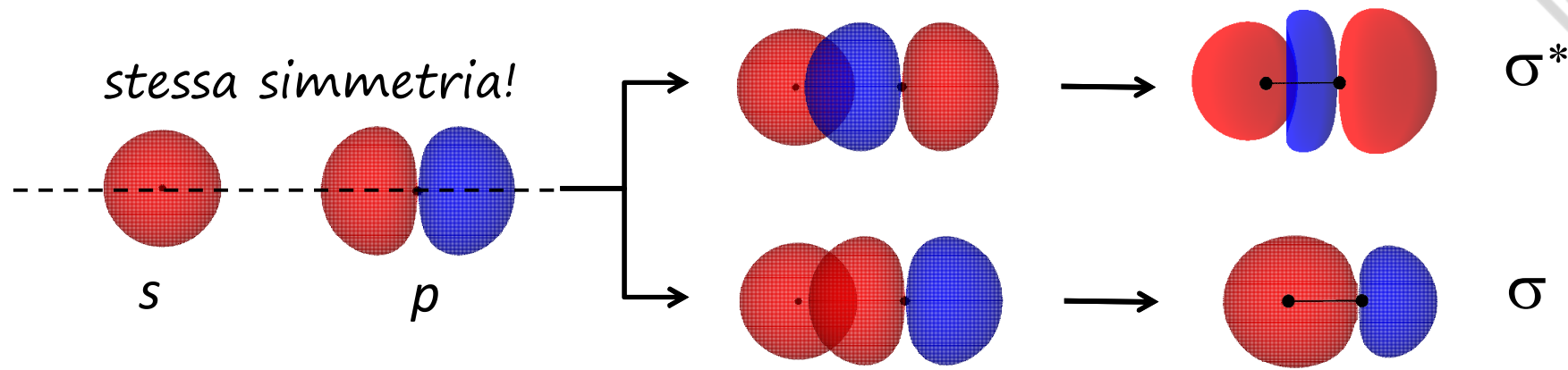
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# teoria MO-LCAO – metodo generale

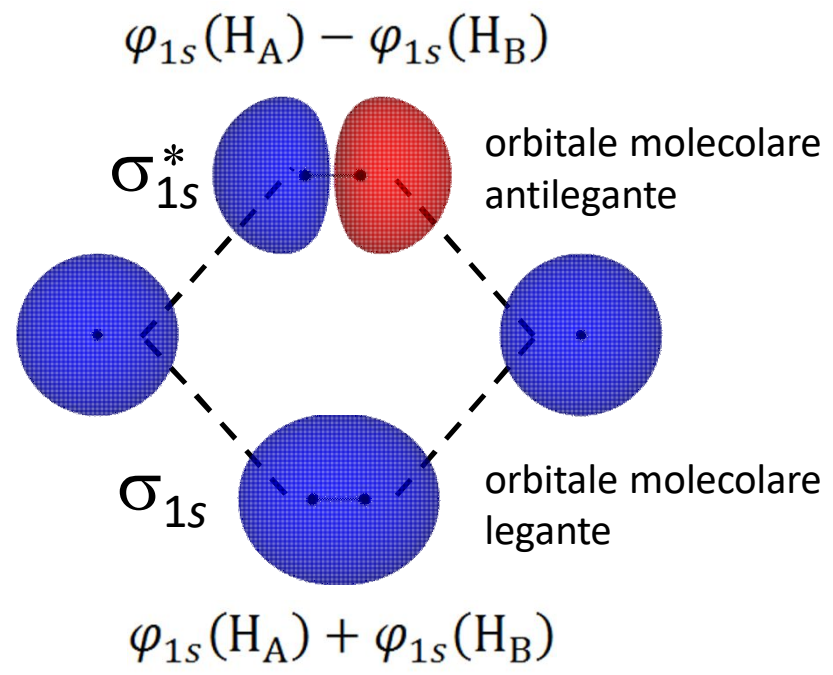
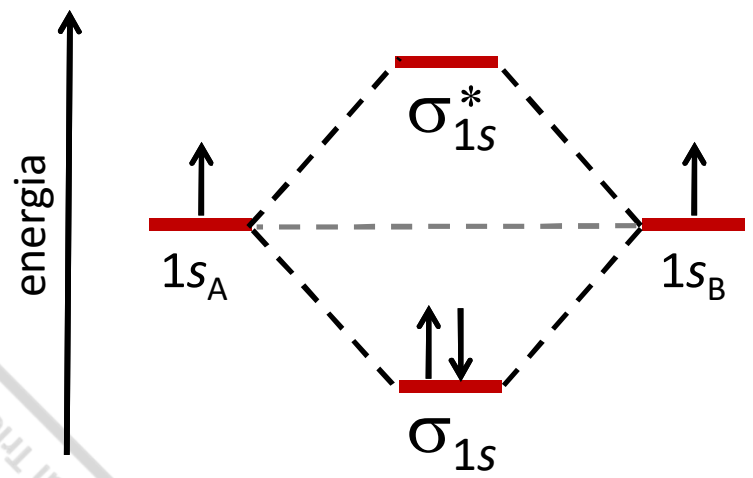
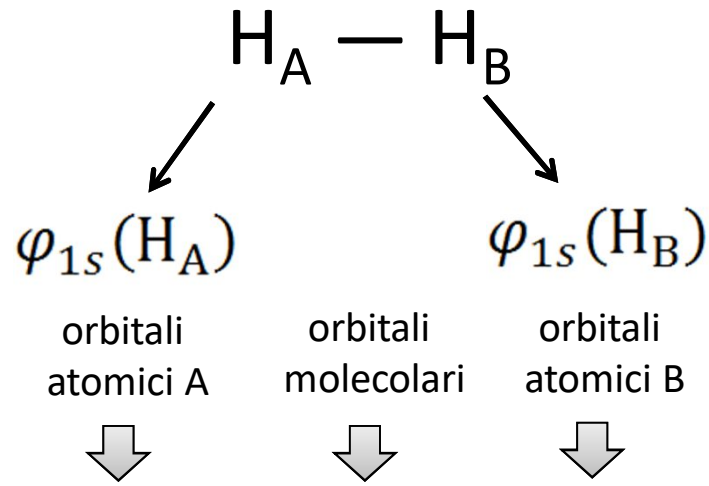
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



A. A. 2020-21  
Università Trieste

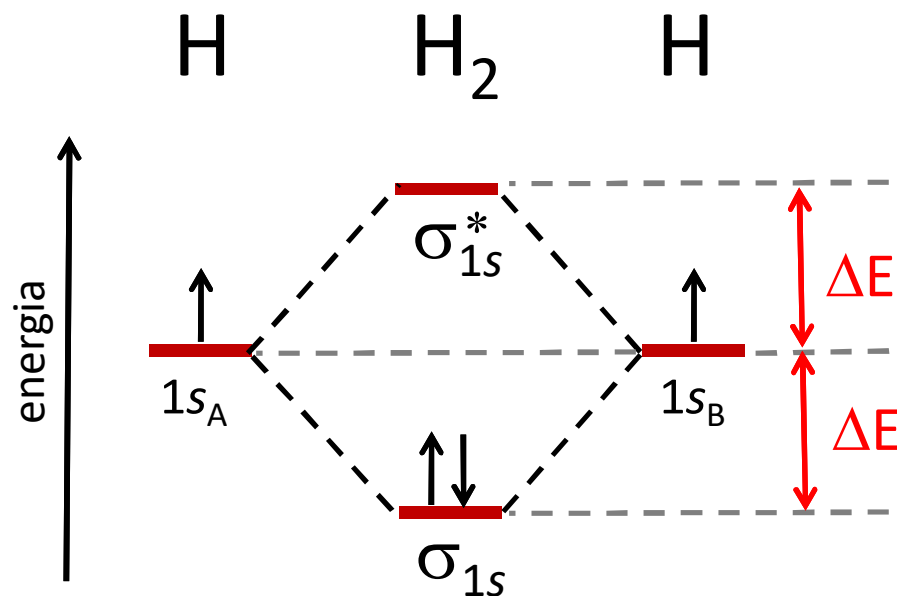
# MO-LCAO per molecola di di-idrogeno H<sub>2</sub>

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

## energia di legame

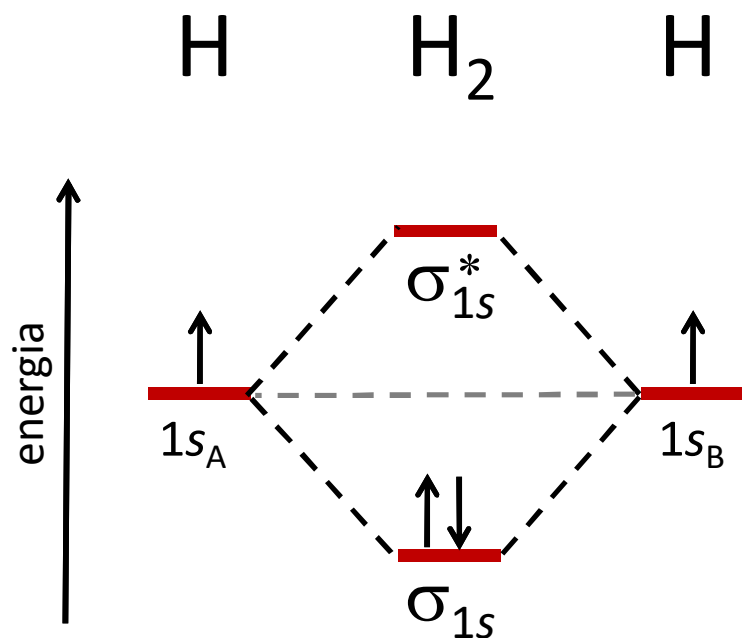


l'energia della molecola bi-atomica è più bassa di  $2 \cdot \Delta E$  rispetto agli atomi isolati (i.e. la molecola è più stabile degli atomi isolati)



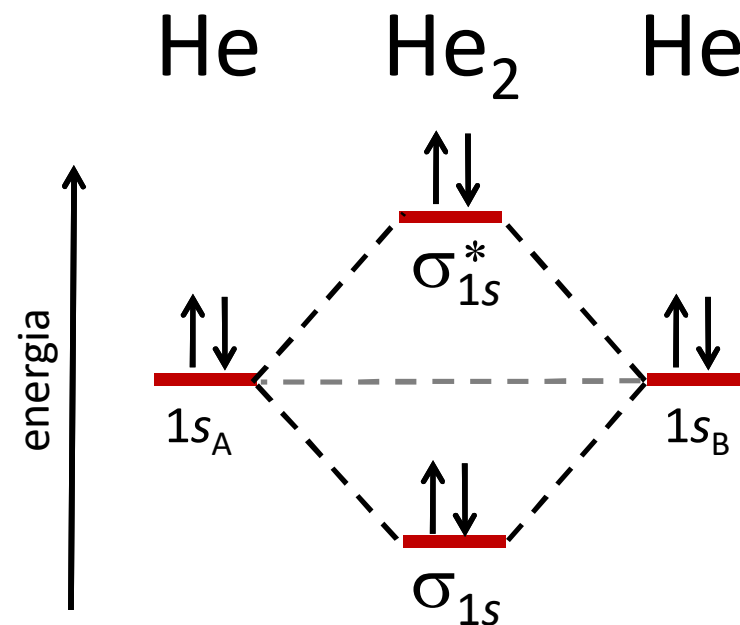
## ordine di legame

$\frac{1}{2}$  (elettroni in OM leganti - elettroni in OM antileganti)



ordine di legame

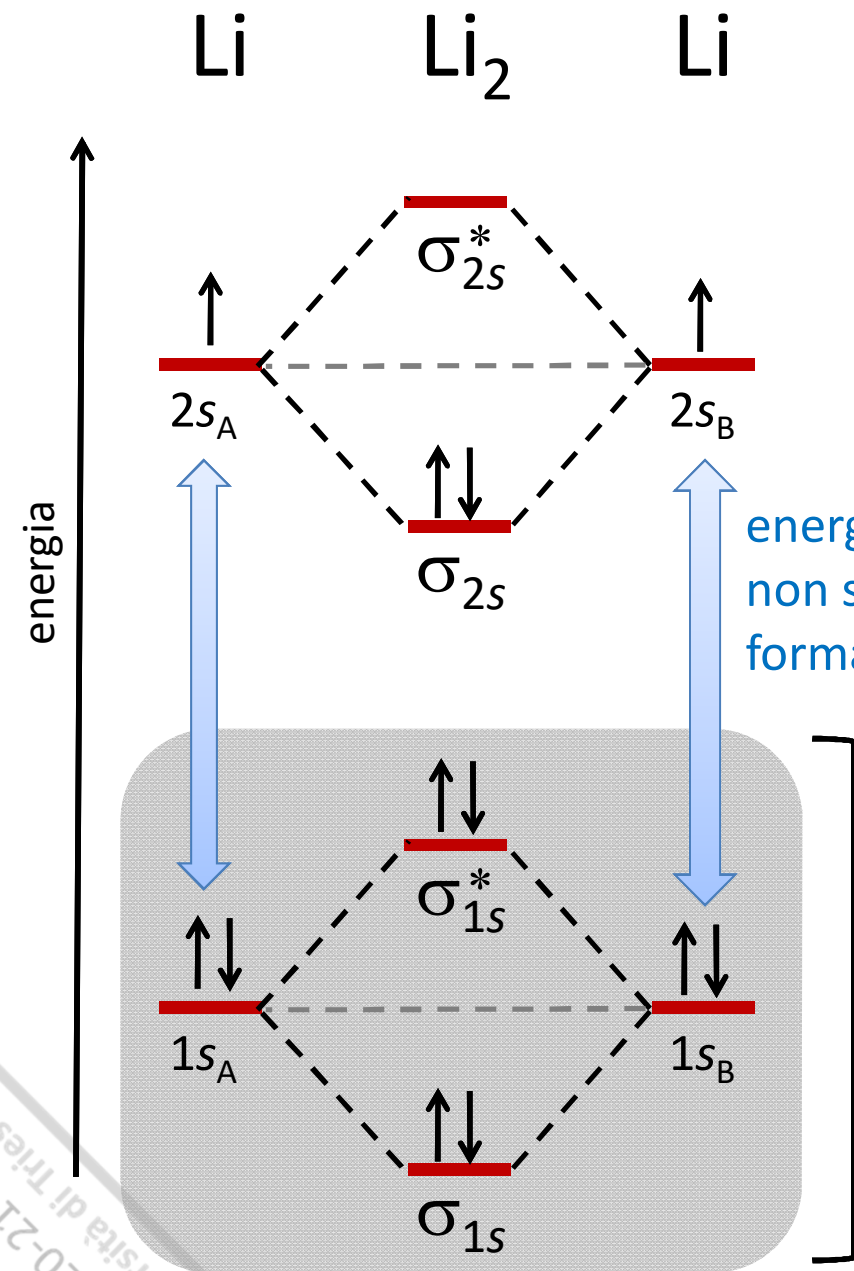
$$\frac{1}{2} (2-0) = 1$$



ordine di legame

$$\frac{1}{2} (2-2) = 0$$

non c'è legame,  
He esiste in forma atomica



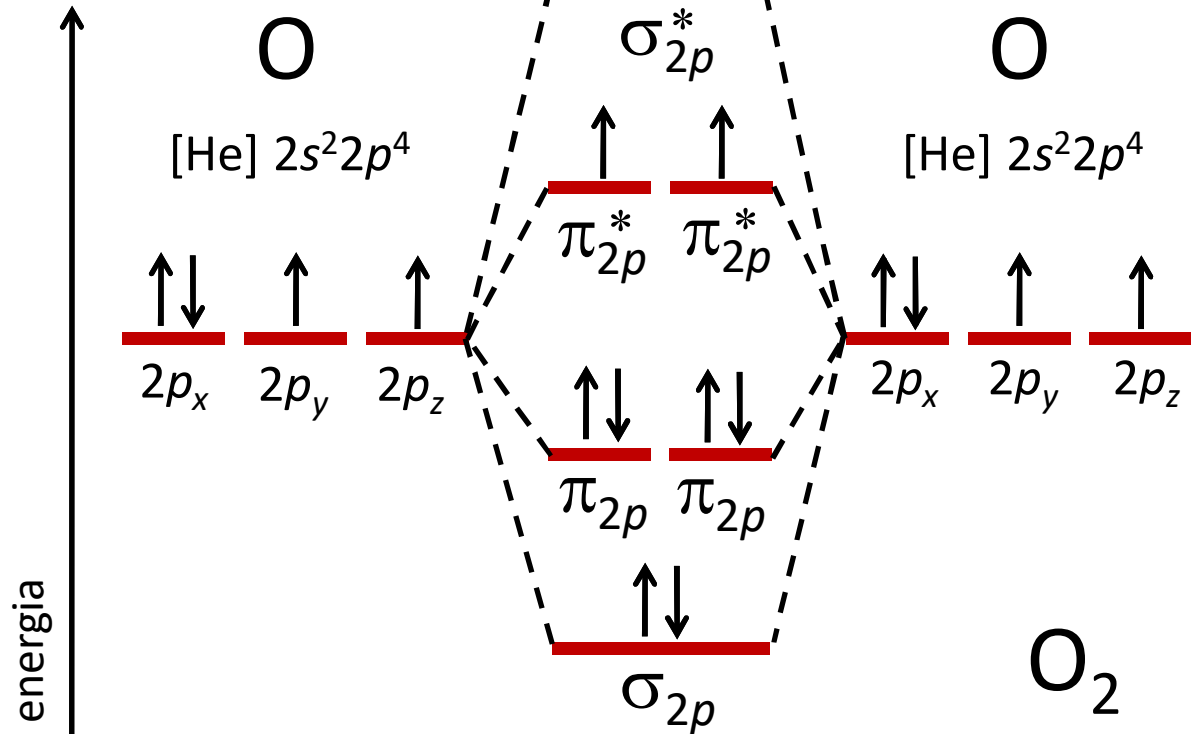
energia troppo diversa  
non si combinano per  
formare OM

4. *gli OA si combinano per formare OM tanto più efficacemente quanto più simile è l'energia da essi posseduta*

**COROLLARIO: I gusci interno possono essere ignorati**

ordine di legame  
 $\frac{1}{2} (4-2) = 1$

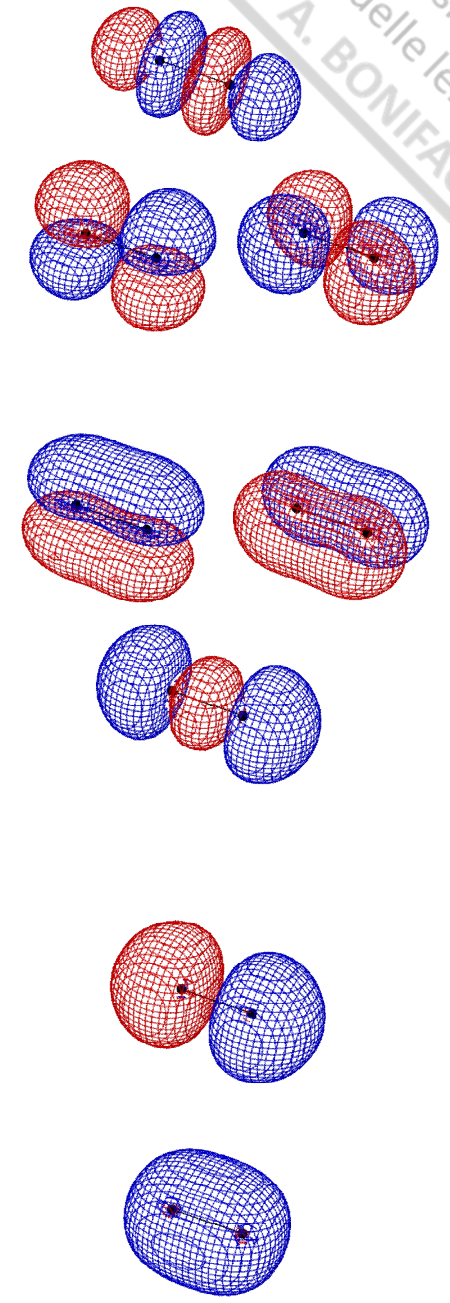
orbitali molecolari  
formati da orbitali  
atomici di gusci interni



$O_2$

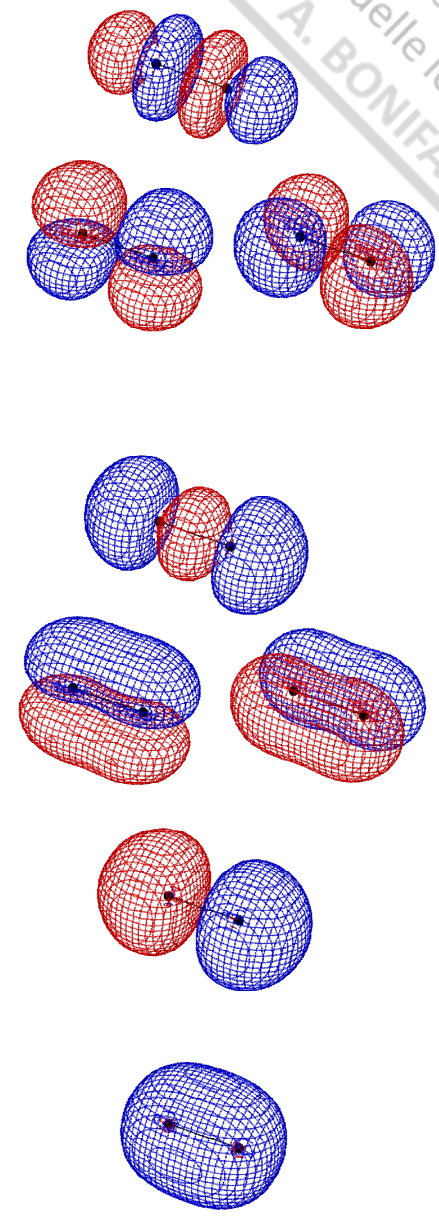
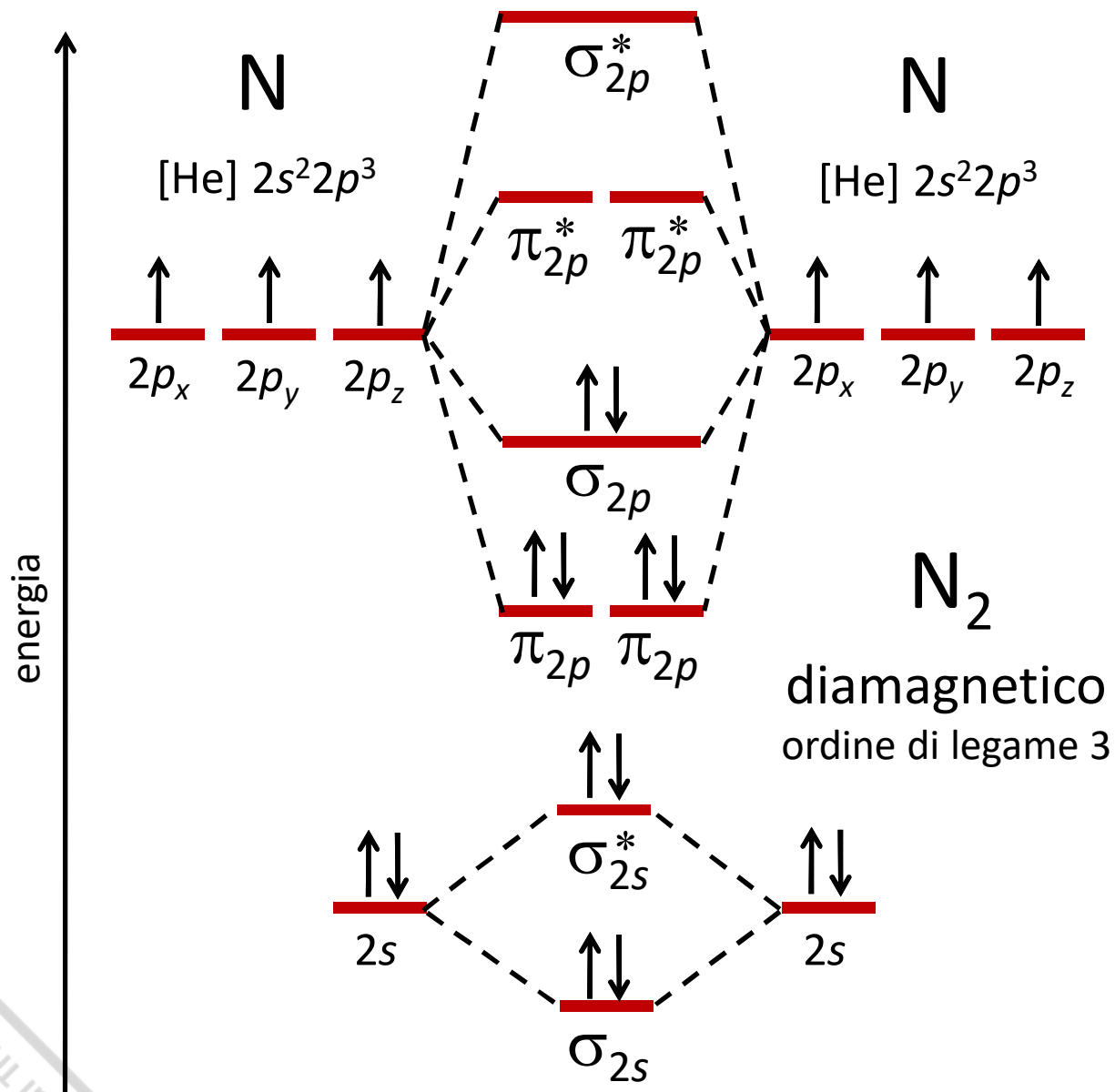
**paramagnetico**

ordine di legame 2



slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

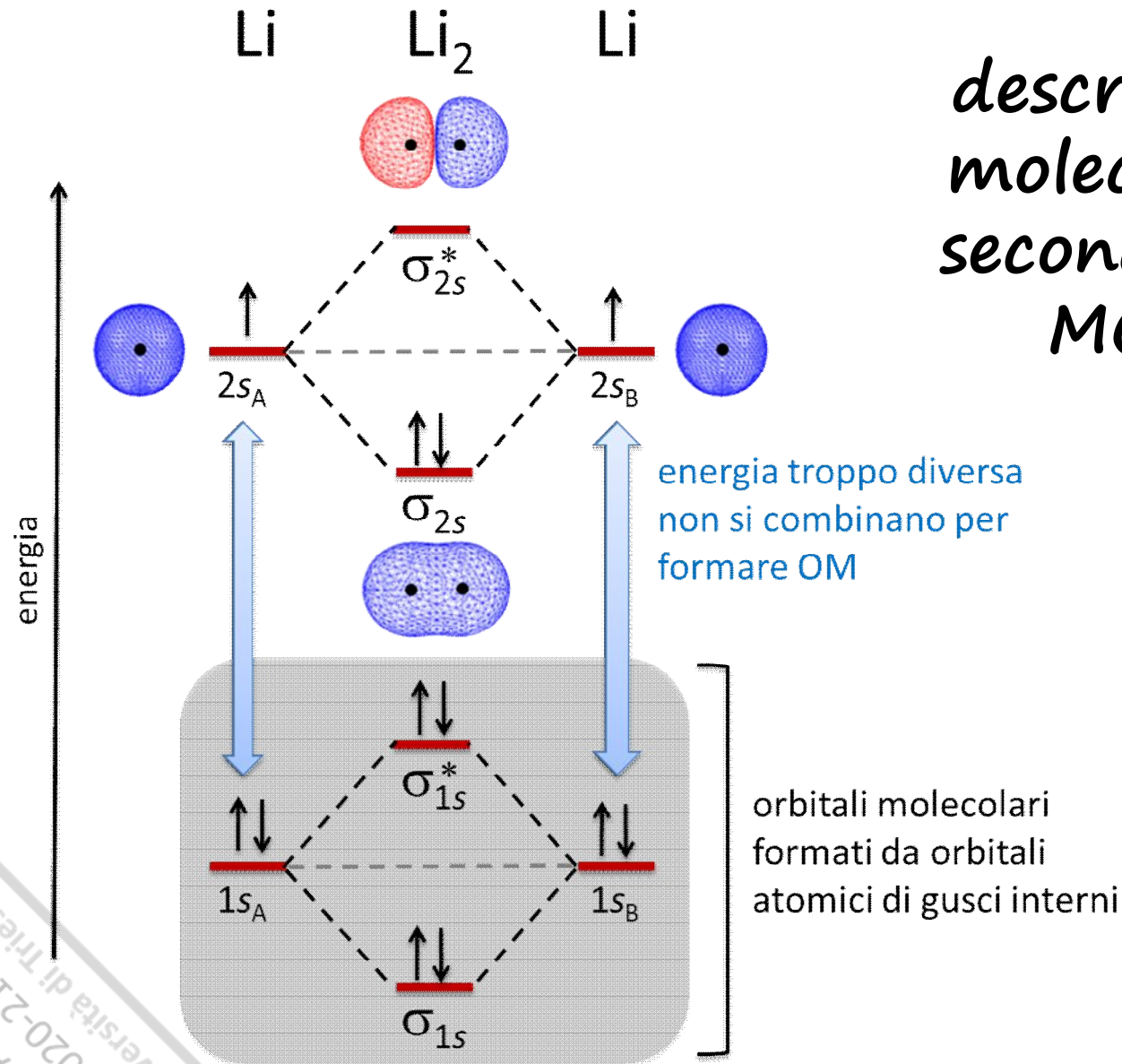




# legame metallico – parte II (teoria delle bande)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

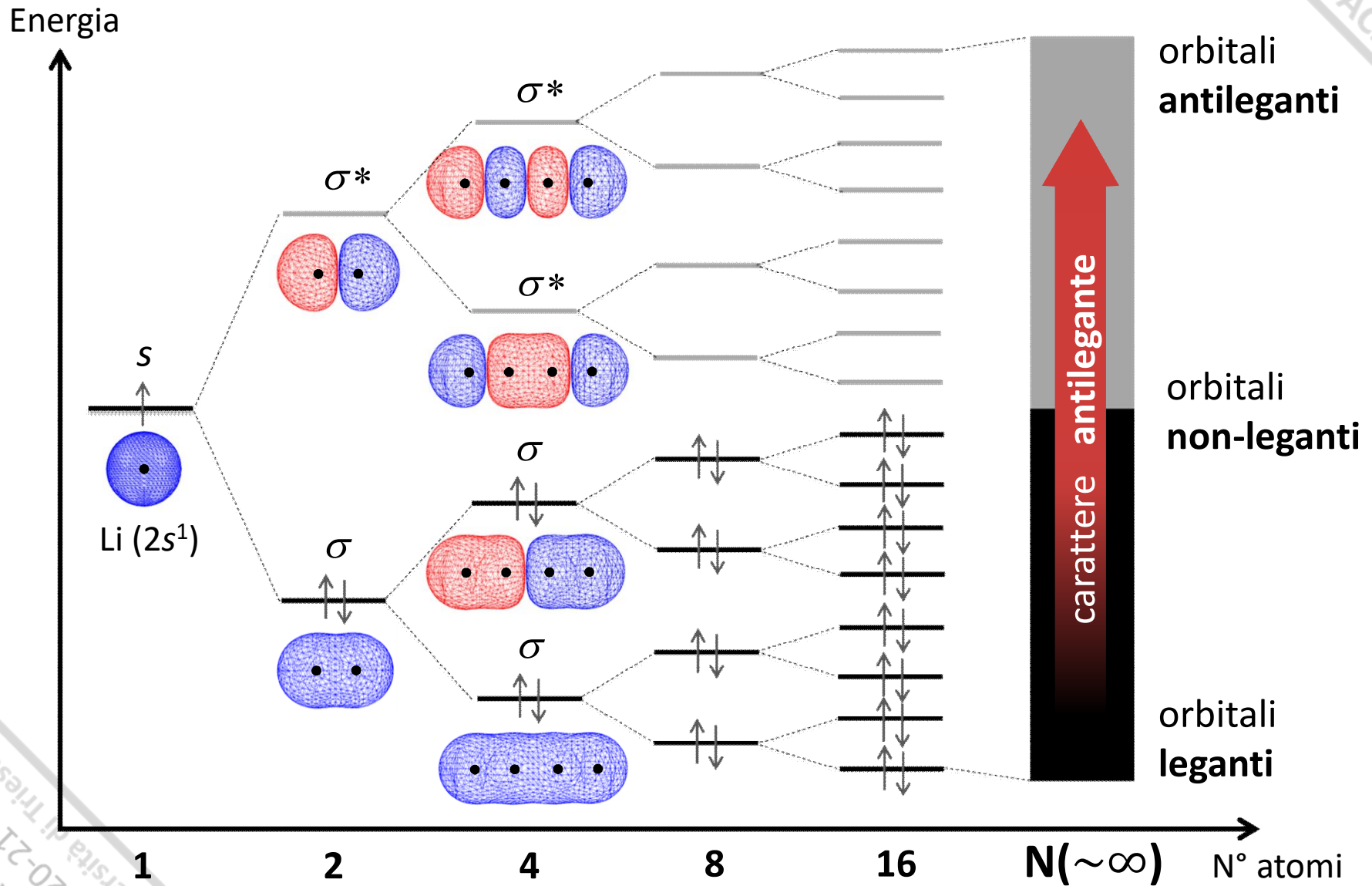
*descrizione della  
molecola di Litio  
secondo la teoria  
MO-LCAO*



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# legame metallico – parte II (teoria delle bande)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

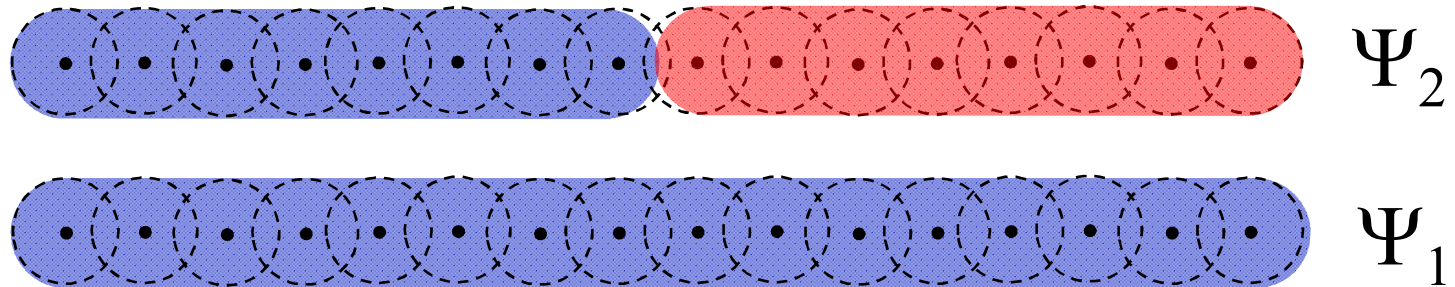


A. A. Università di Trieste  
2020-21

# legame metallico – parte II (teoria delle bande)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

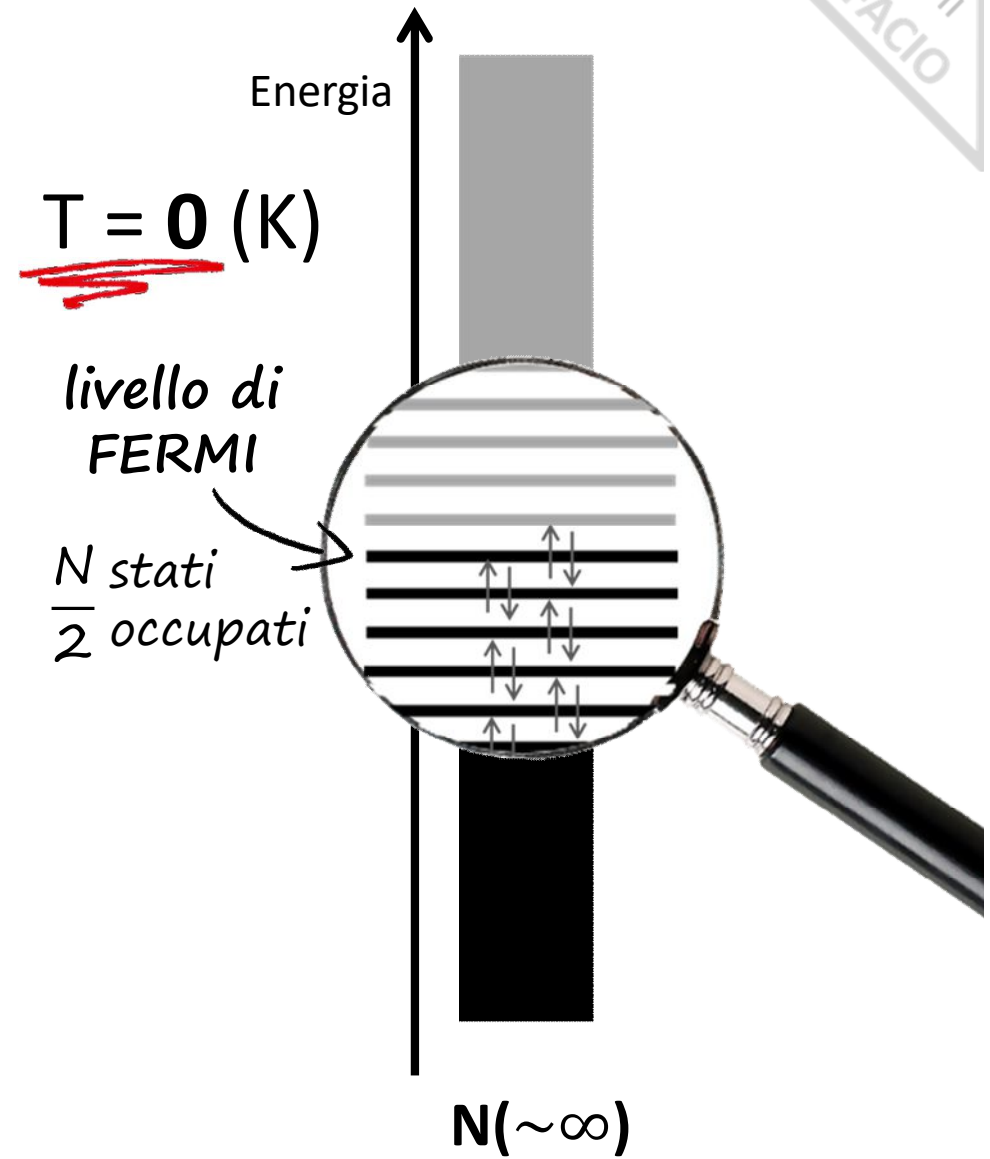
*sistema pensabile come una  
unica grande molecola*



funzioni d'onda di **Bloch**  
(*orbitali molecolari estesi*)



# livello di Fermi

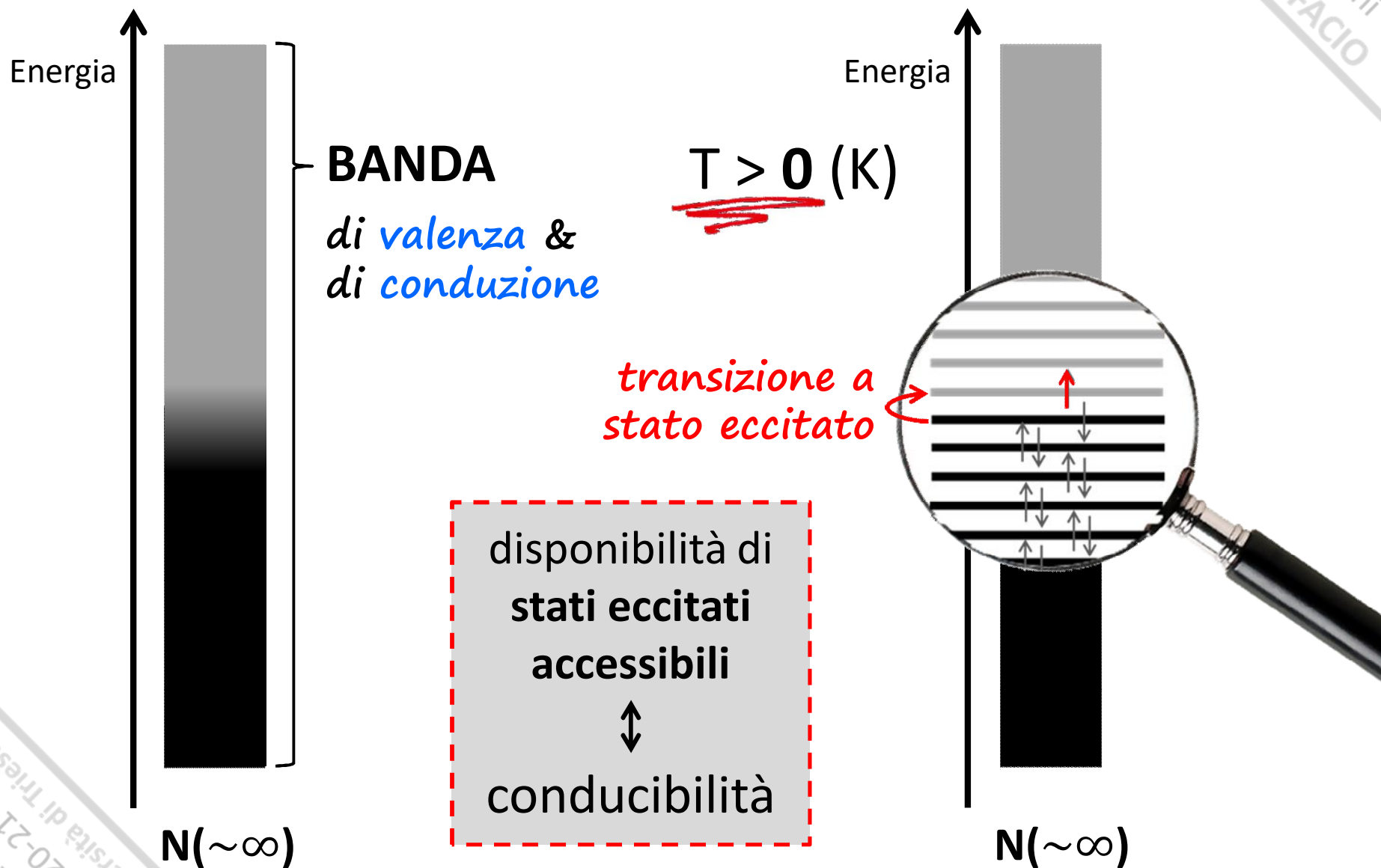


slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# spiegazione conduzione elettrica

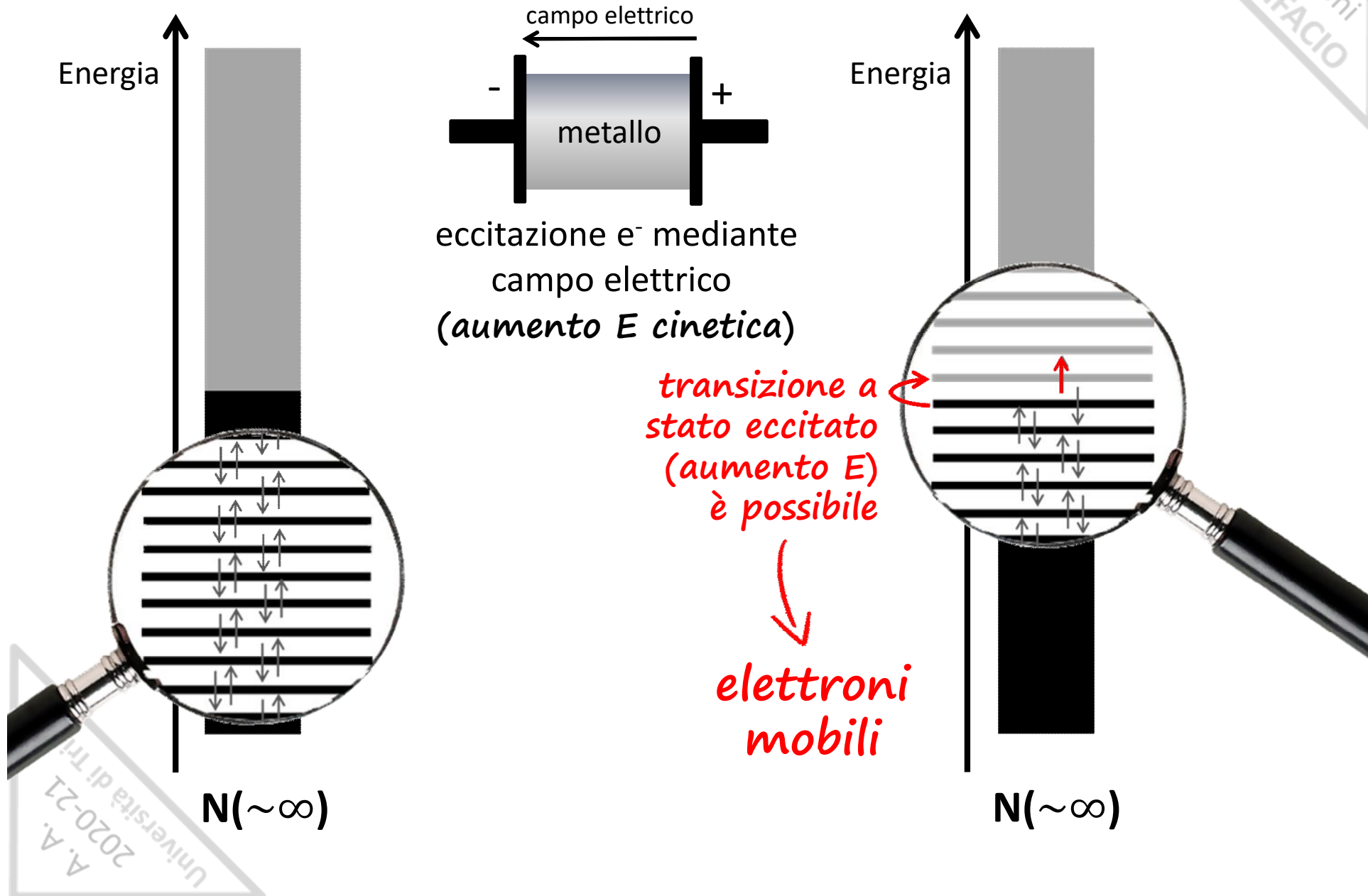
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# spiegazione conduzione elettrica

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

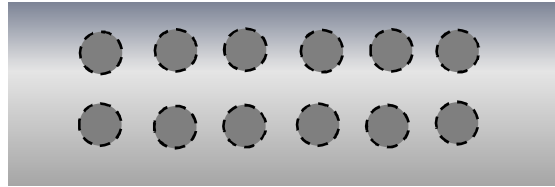


A. A.  
2020-21  
Università di Tri

# spiegazione conduzione elettrica

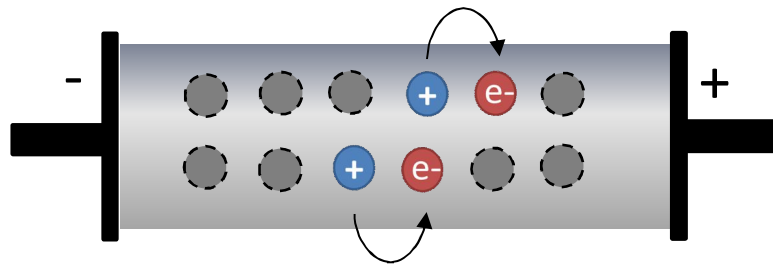
atomi neutri

1



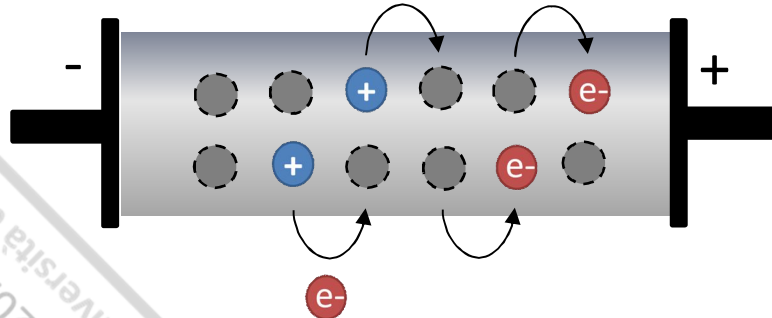
elettrone si muove,  
lasciando un posto (+)

2



altri elettroni  
riempiono il posto

3

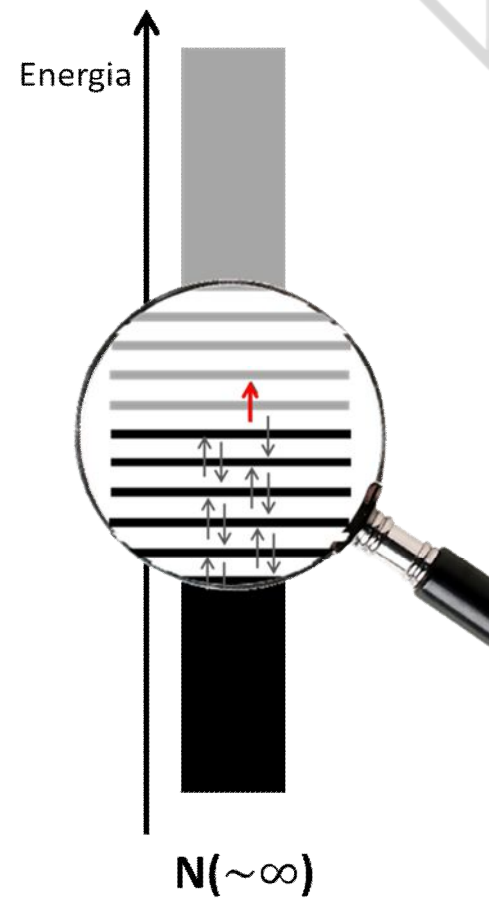
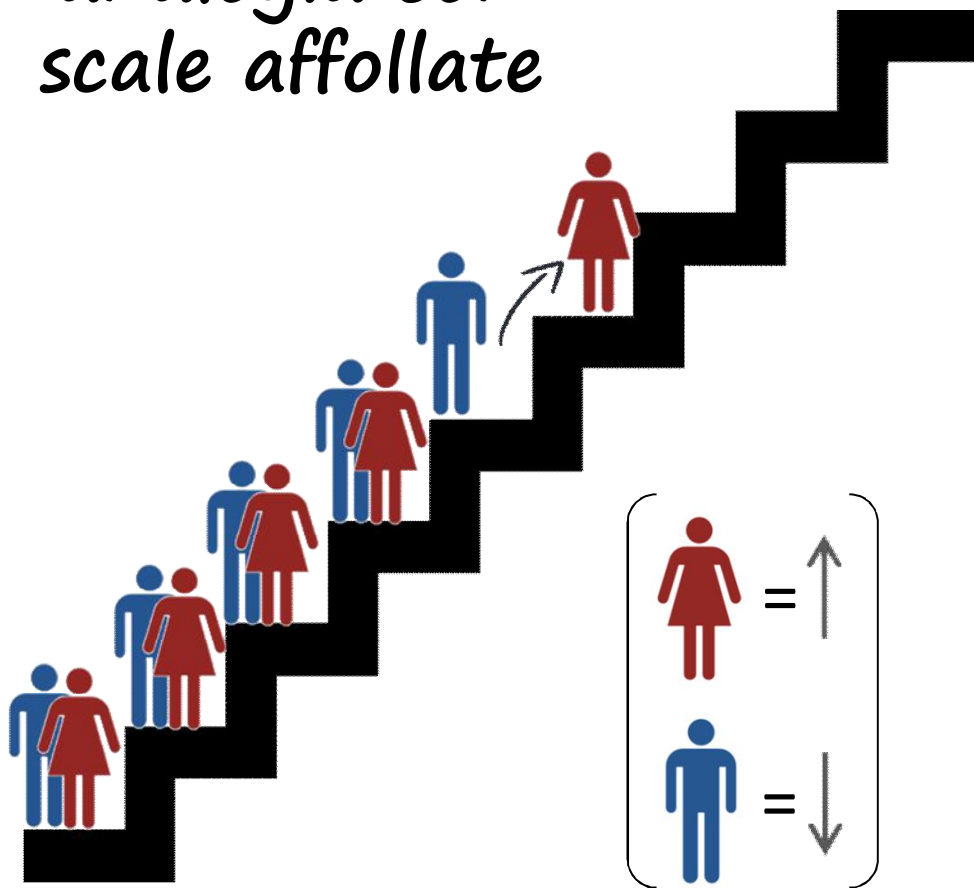
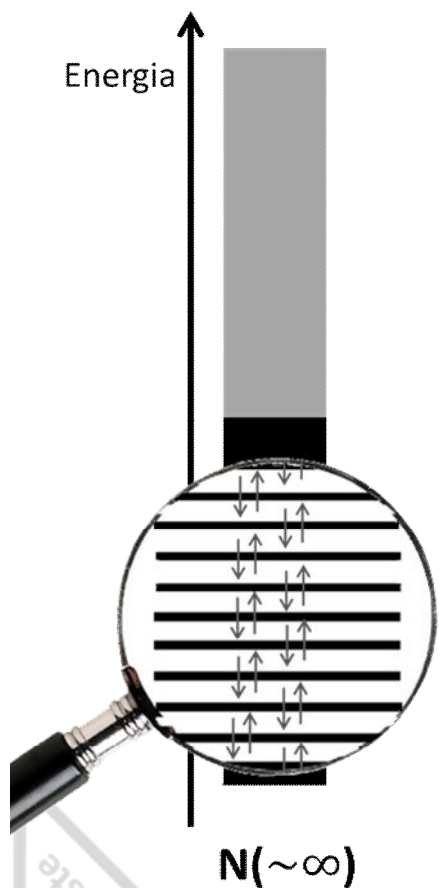


è come se ci fossero  
cariche positive che si  
muovono (lacune),  
oltre a quelle negative  
(elettroni)

# spiegazione conduzione elettrica

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

*analogia con  
scale affollate*



A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

spiegazione conduzione elettrica

*sala  
completamente  
affollata?*



*nessuno si può  
muovere!!!*

# legame metallico – parte II (teoria delle bande)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

*...e nel caso del berillio?*     $\text{Be } (1s^2 2s^2)$

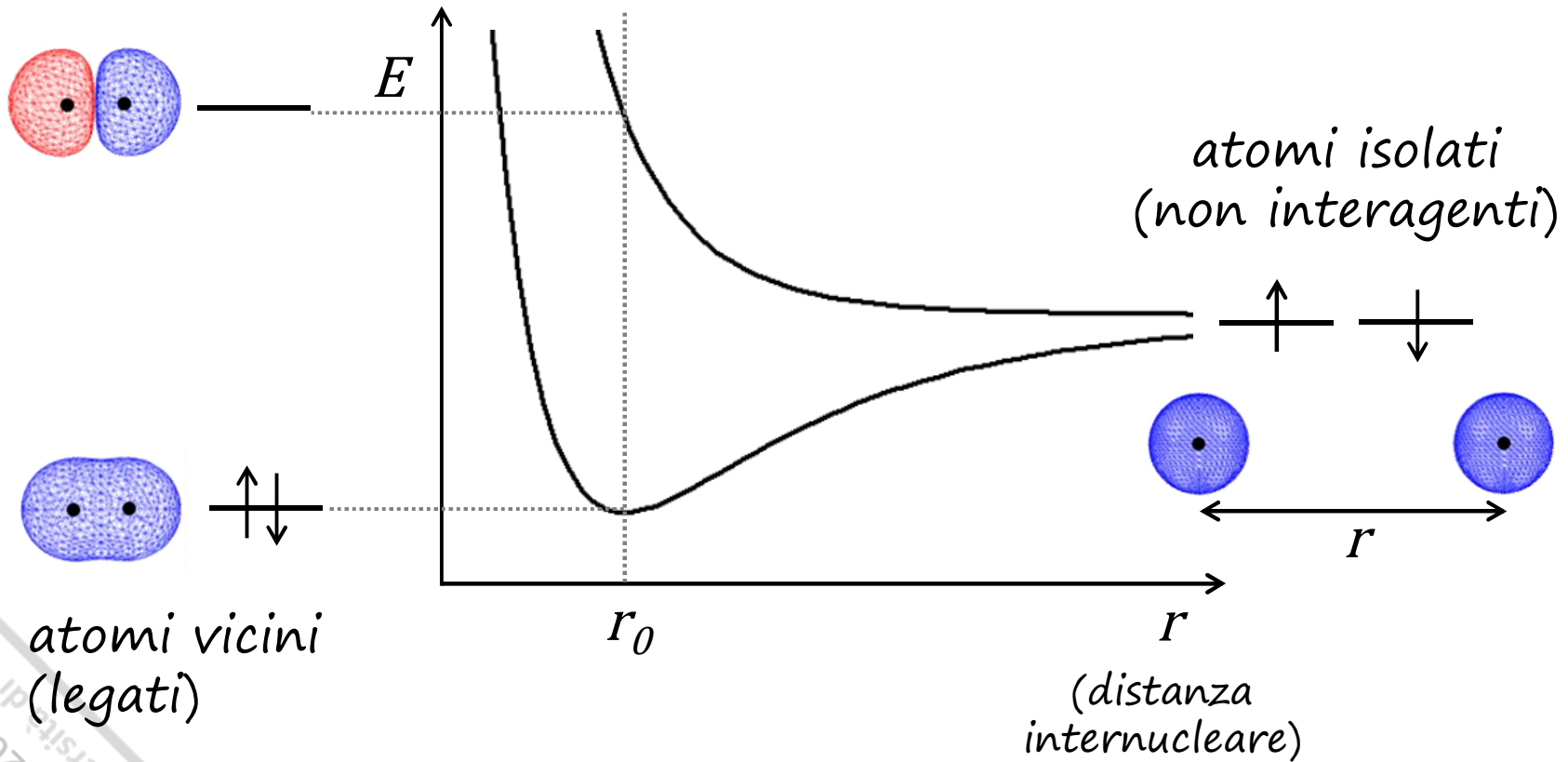


A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

# legame metallico – parte II (teoria delle bande)

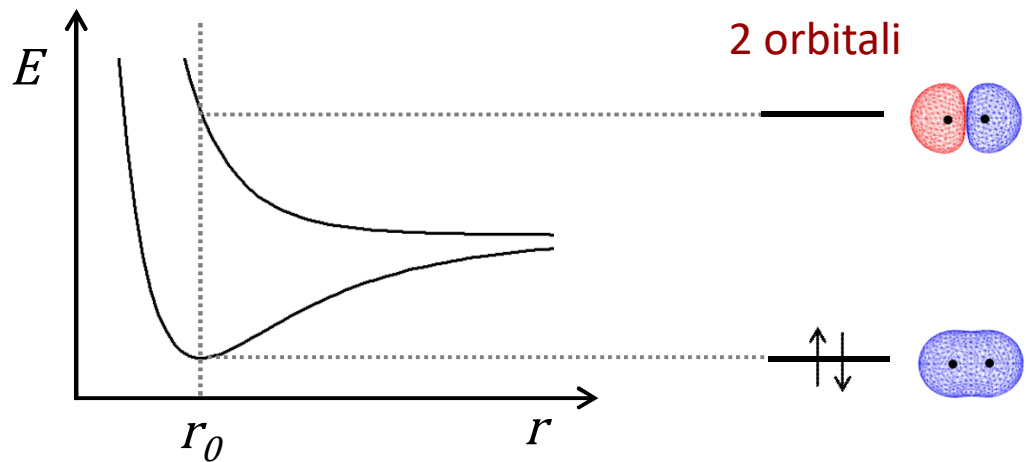
slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

come varia l'energia degli orbitali con la distanza tra i nuclei?

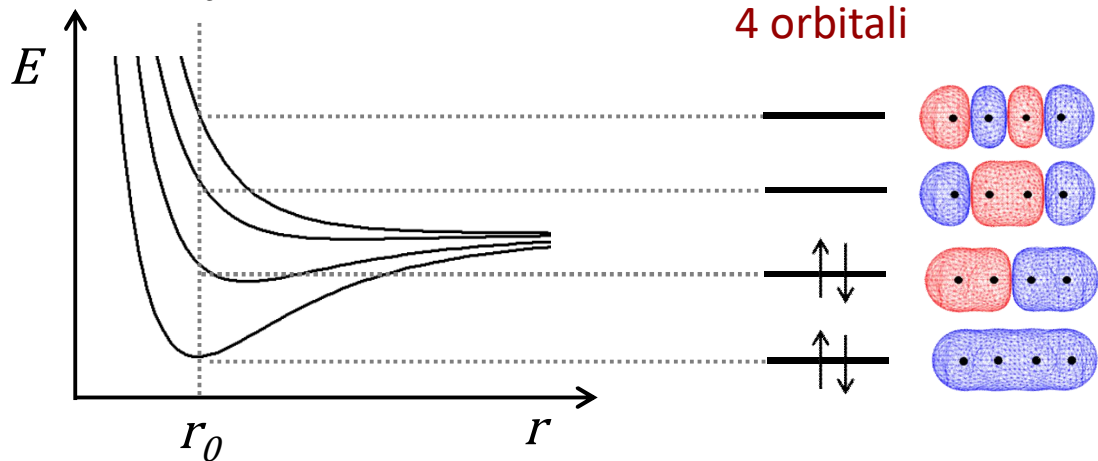


A. A.  
2020-21  
Università di Trieste

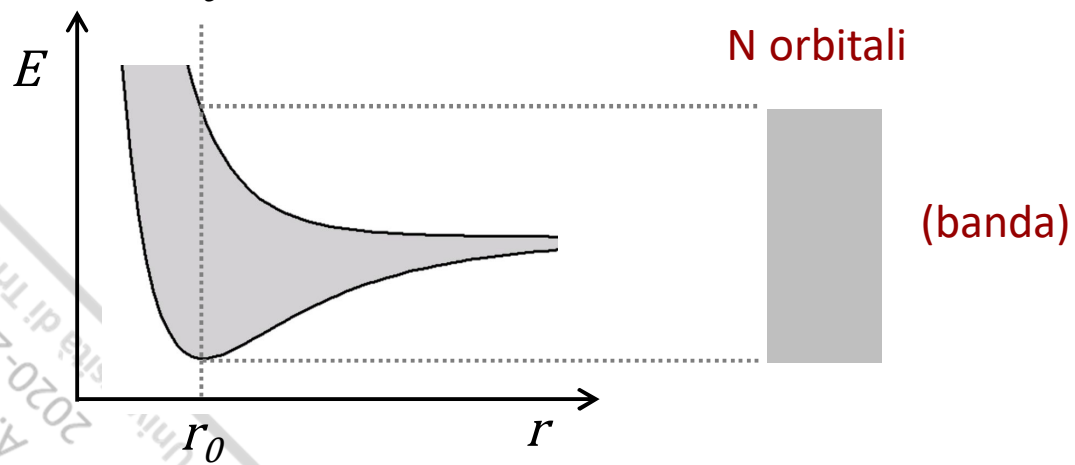




2 atomi



4 atomi

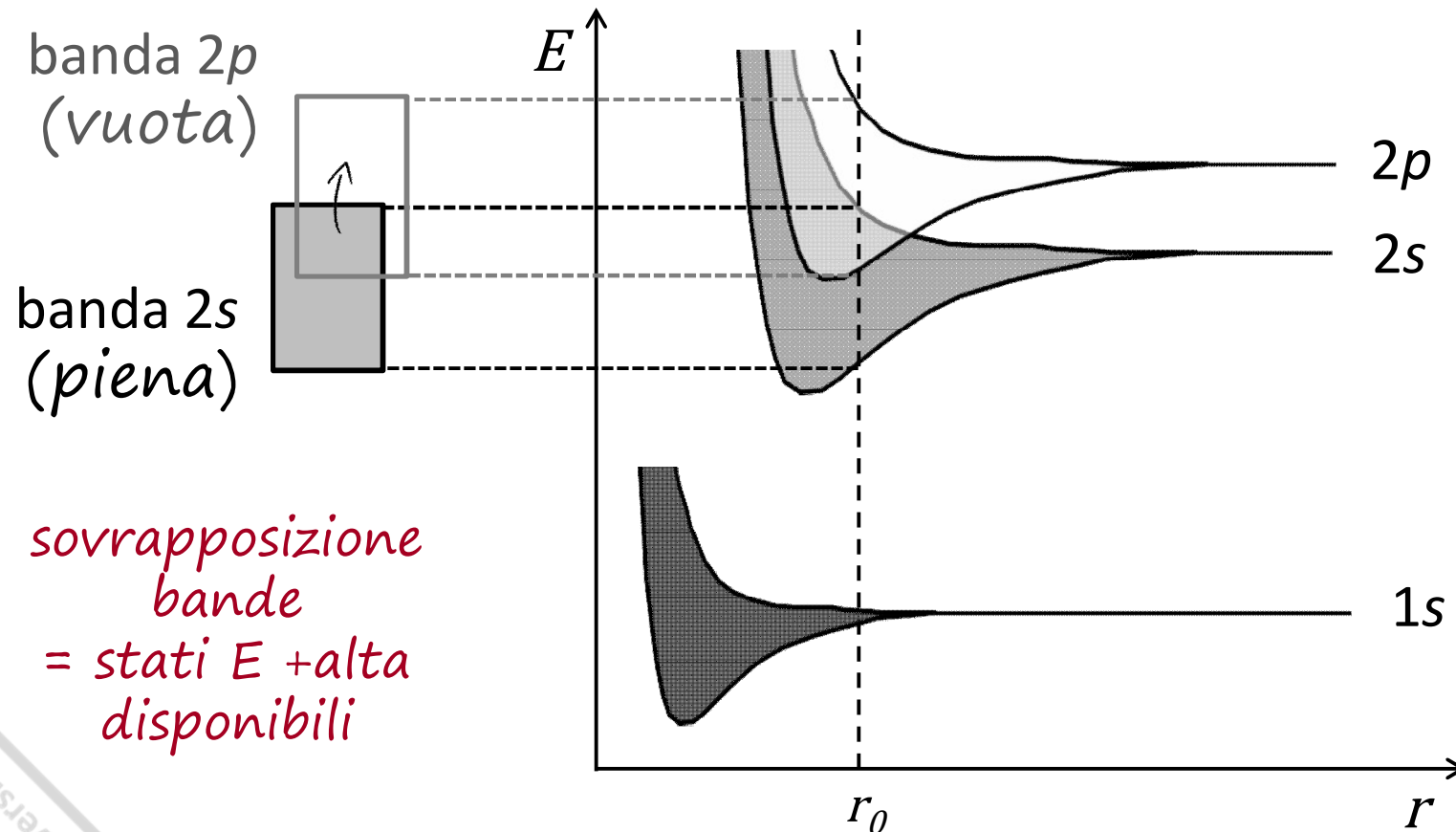


$N$  atomi

# legame metallico – parte II (teoria delle bande)

slides  
delle lezioni  
A. BONIFACIO

*nel caso del berillio  
(e degli altri metalli alcalini terrosi –  $2S^2$ ):*



*sovrapposizione  
bande  
= stati  $E$  + alta  
disponibili*

A. A.  
2020-21  
Università di Trieste