

Legame chimico

*E' un dato di fatto sperimentale che le molecole sono costituite da due o più atomi, che possono essere di diversi elementi, **legati** tra loro. Nelle reazioni chimiche, alcuni legami si spezzano mentre altri si formano.*

Configurazione dell'**ottetto**: Configurazione elettronica **stabile**, in cui gli atomi raggiungono un numero di elettroni pari a 8 nel **guscio di valenza** (orbitali s e p più esterni)

Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$ → 8 elettroni

Gas nobili: $ns^2 np^6$

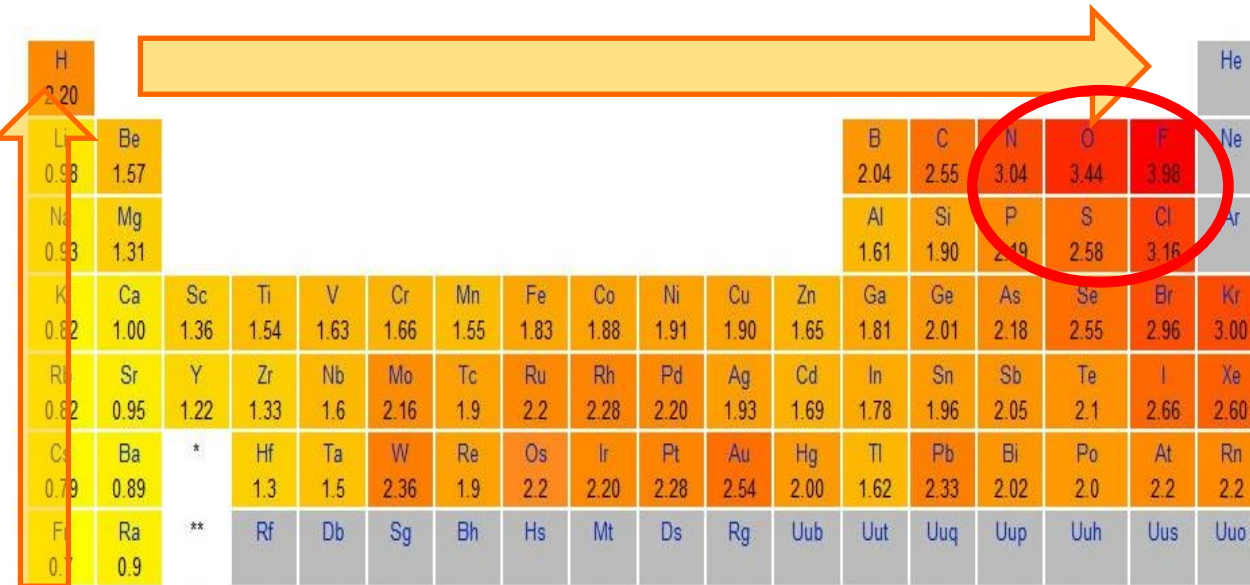
Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ → 7 elettroni Cl⁻: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ → 8 elettroni Riduzione

Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ → 1 elettrone Na⁺: $1s^2 2s^2 2p^6$ → 8 elettroni Ossidazione

Per raggiungere questa configurazione, gli atomi reagiscono tra loro creando **legami chimici** in cui ciascun atomo raggiunge l'ottetto.

I legami possono essere **covalenti** o **ionici**.

Proprietà periodiche: elettronegatività



H 2.20																																He
Li 0.98	Be 1.57																															Ne
Na 0.93	Mg 1.31																															Ar
K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00															
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60															
Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2															
Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo															

Elettronegatività:

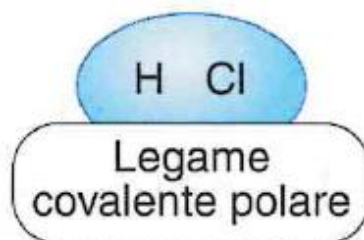
Capacità di un atomo ad attrarre gli elettroni di legame

Cresce nel periodo
Diminuisce nel gruppo

Quando la differenza di elettronegatività tra due atomi è $> 1.8 - 2$, il legame è sostanzialmente ionico



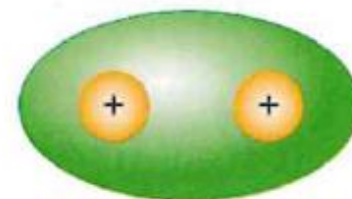
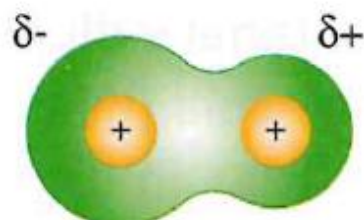
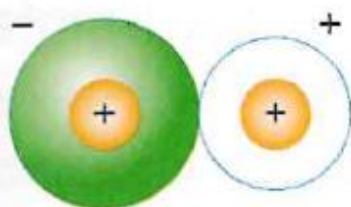
$$\Delta_{\text{EN}} \sim 2$$



$$\Delta_{\text{EN}} \sim 1$$

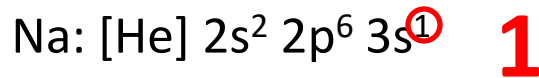


$$\Delta_{\text{EN}} \sim 0$$

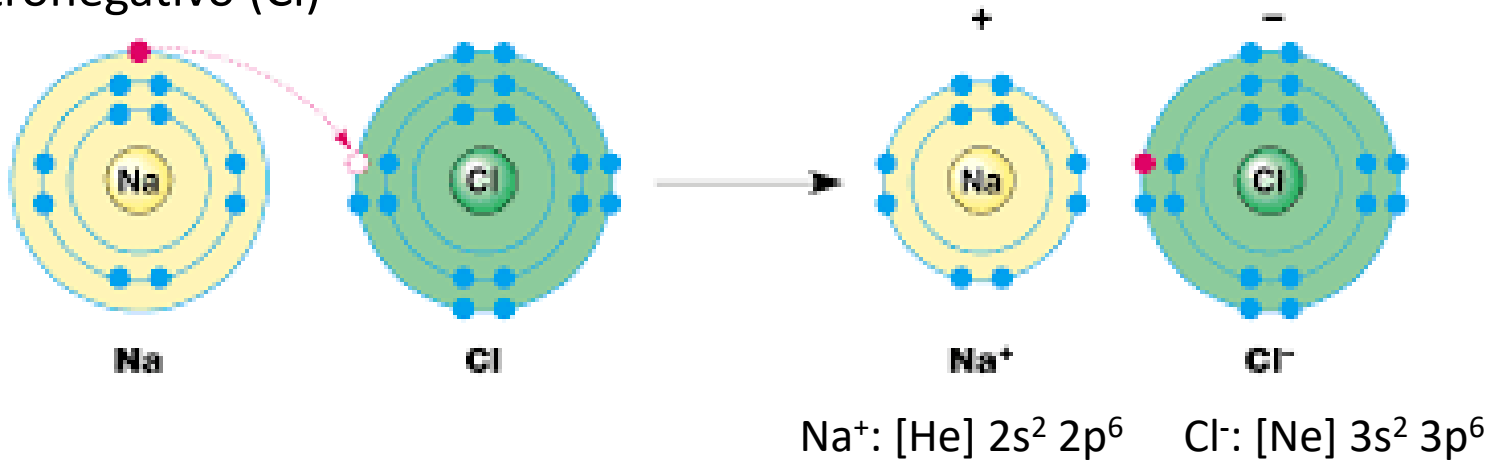


Legame ionico

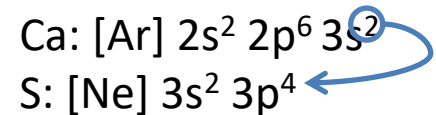
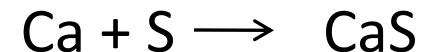
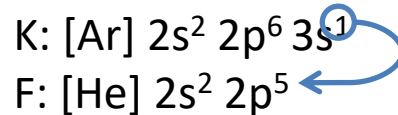
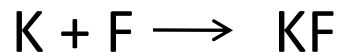
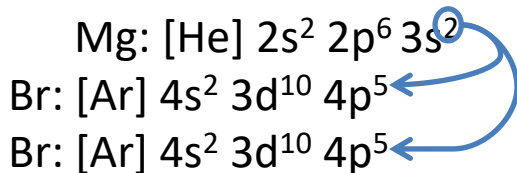
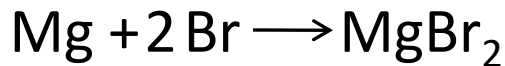
E' il legame che si forma tra uno ione positivo e uno ione negativo, basato sull'attrazione elettrostatica.



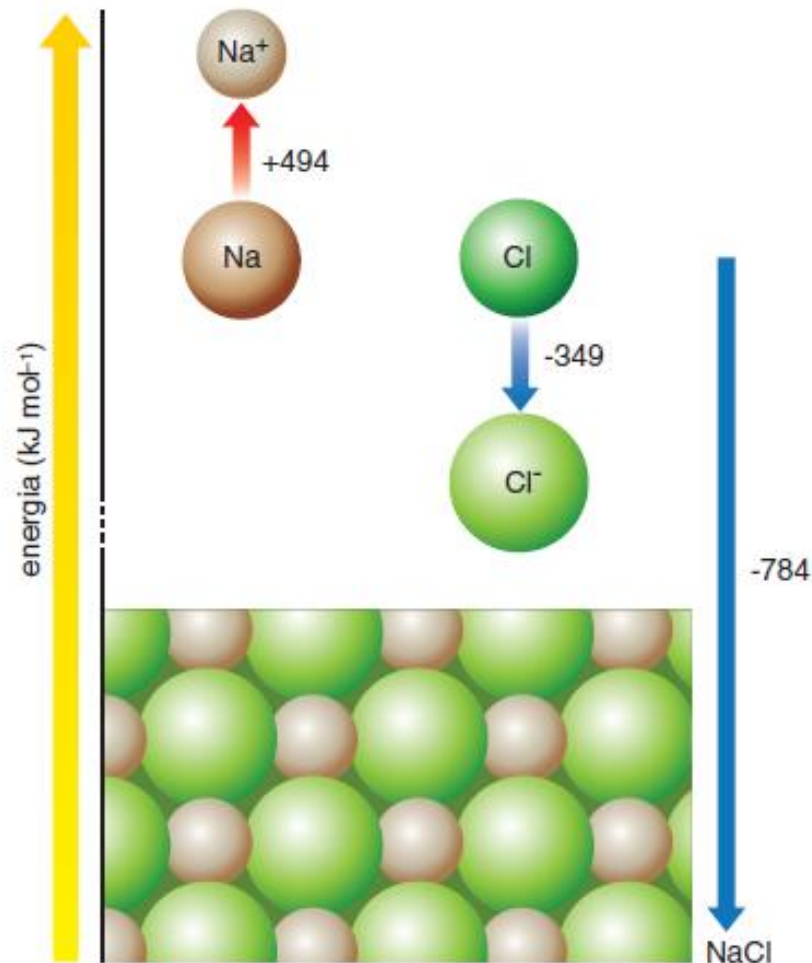
L'atomo meno elettronegativo (Na) cede un elettrone all'atomo più elettronegativo (Cl)



Esempi di composti in cui è presente un legame ionico:

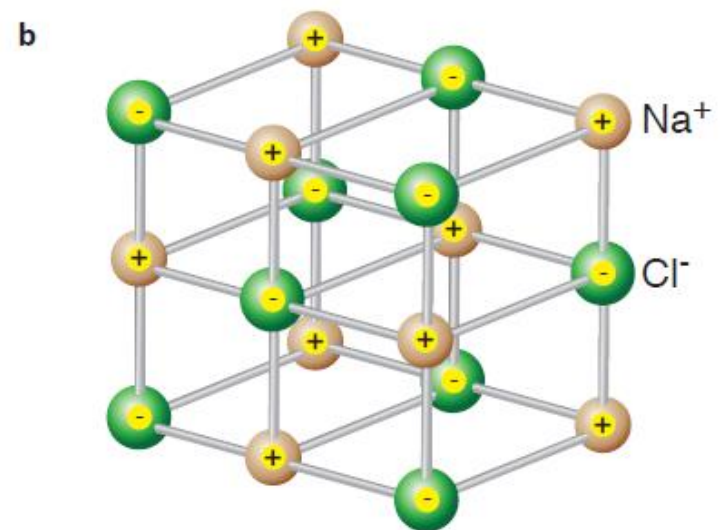
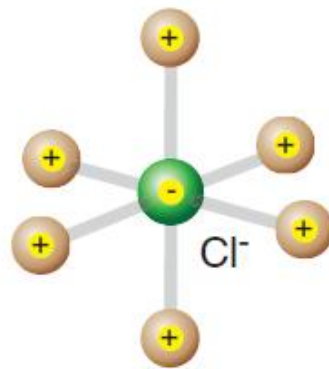
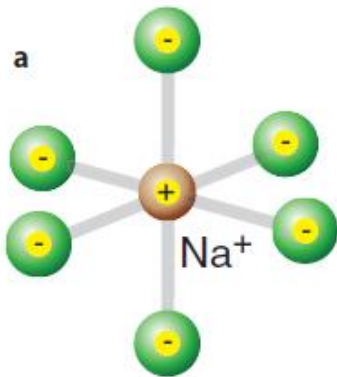


Energia reticolare



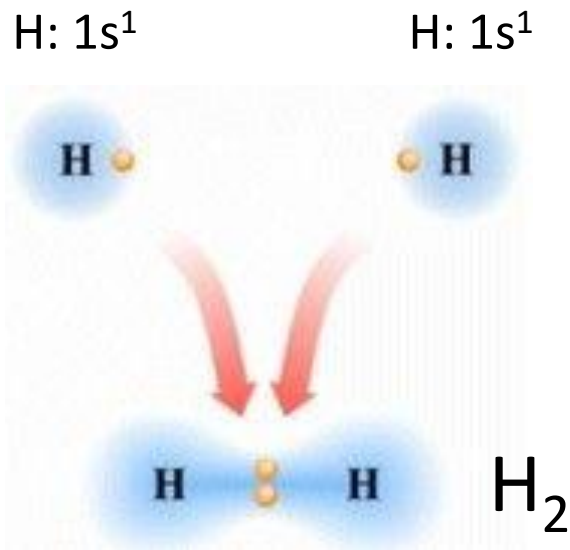
*I composti ionici non formano molecole discrete,
ma solidi cristallini*

Il legame ionico non è direzionale

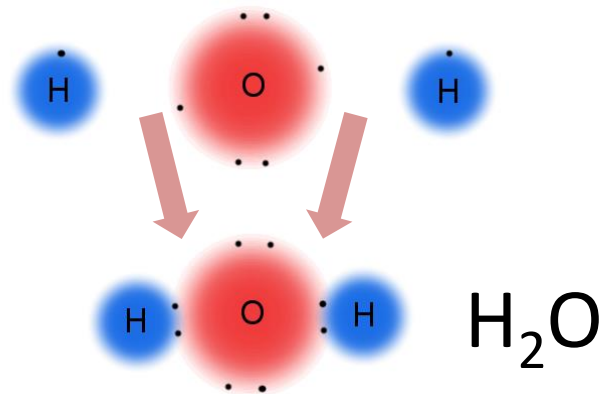
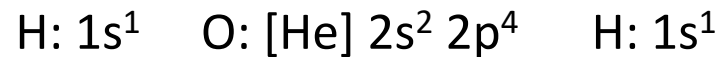
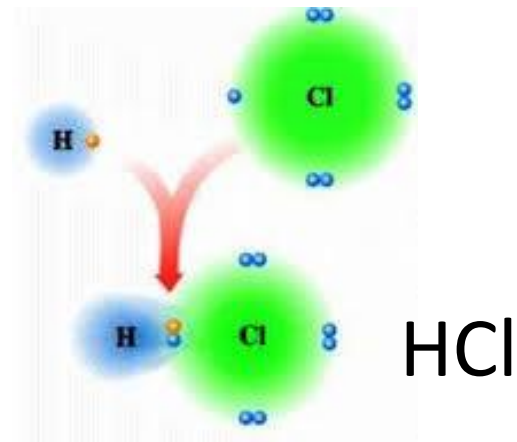


Legame covalente

Quando la differenza di elettronegatività non è molto elevata (tipicamente < 1.8), invece di completare l'ottetto acquisendo o perdendo uno o più elettroni, gli atomi mettono in comune gli elettroni, formando un legame covalente.



(Nel caso dell'idrogeno la configurazione stabile non è l'ottetto, ma quella dell'elio, a due elettroni)

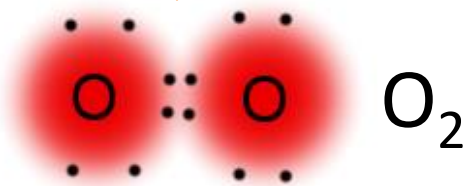


Legami multipli

In alcuni casi, un legame covalente non basta a raggiungere la configurazione dell'ottetto: gli atomi coinvolti devono mettere in comune più di una coppia di elettroni. In questo caso si formano legami multipli.

Due esempi di legame covalente multiplo:

O: [He] $2s^2 2p^4$

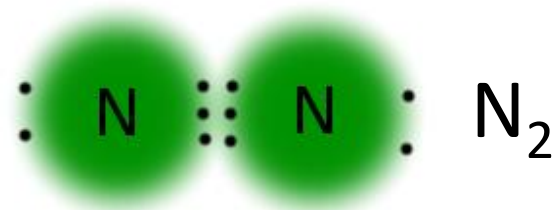
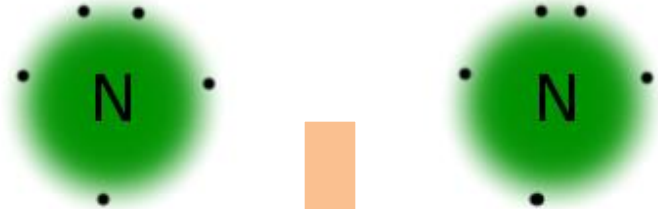


O_2

$O=O$

Doppio legame

N: [He] $2s^2 2p^3$

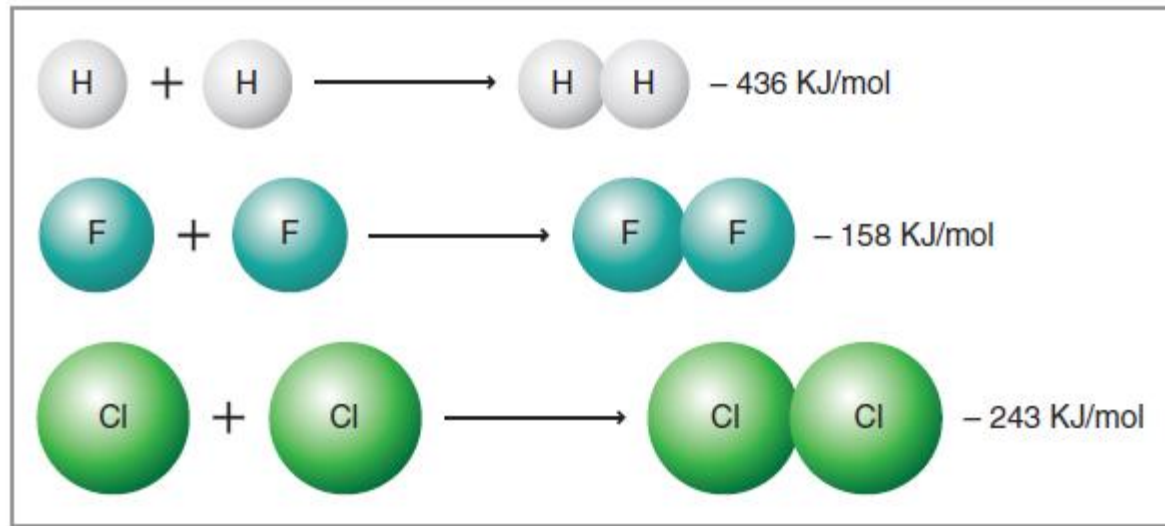


N_2

$N\equiv N$

Triplo legame

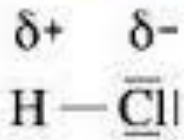
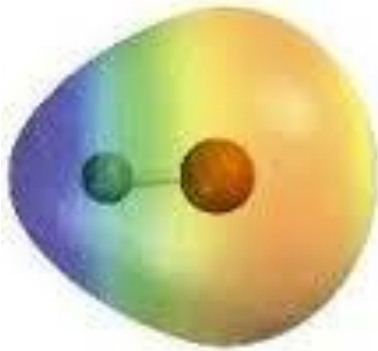
Energia di legame



I legami multipli sono più forti (e più corti) di quelli singoli

Legame covalente polare e apolare

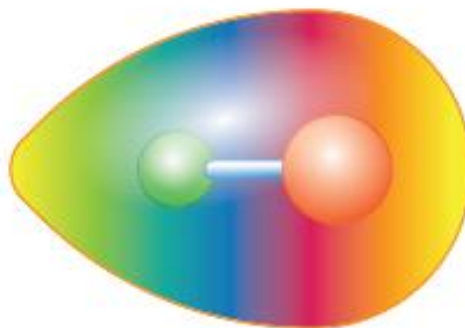
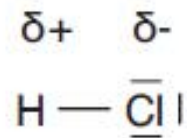
Legami covalenti tra due atomi uguali sono definiti puri o **apolari**: gli elettroni di legame sono equamente condivisi tra i due atomi.



Legami covalenti tra due atomi con elettronegatività molto diversa sono **polari**: gli elettroni non sono equamente condivisi, ma tendono a stare più dalla parte dell'atomo più elettronegativo.

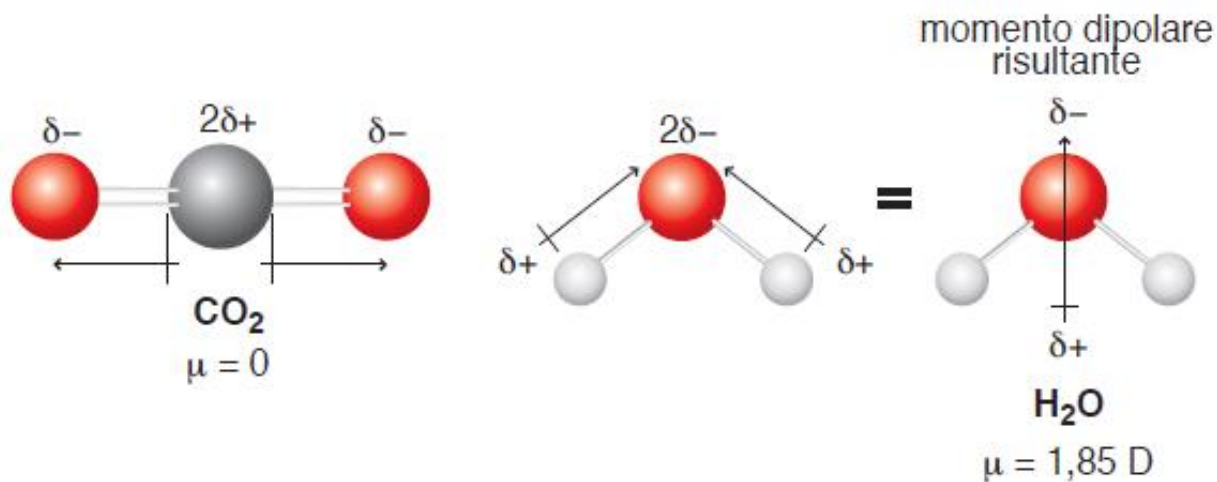
In un legame polare, la polarizzazione degli elettroni su un atomo genera un **dipolo (elettrico) di legame**. Un molecola in cui sono presenti dipoli di legame è **polare**, cioè possiede un dipolo elettrico risultante, a meno che i dipoli di legame non si annullino per ragioni di simmetria.

Momento di dipolo elettrico

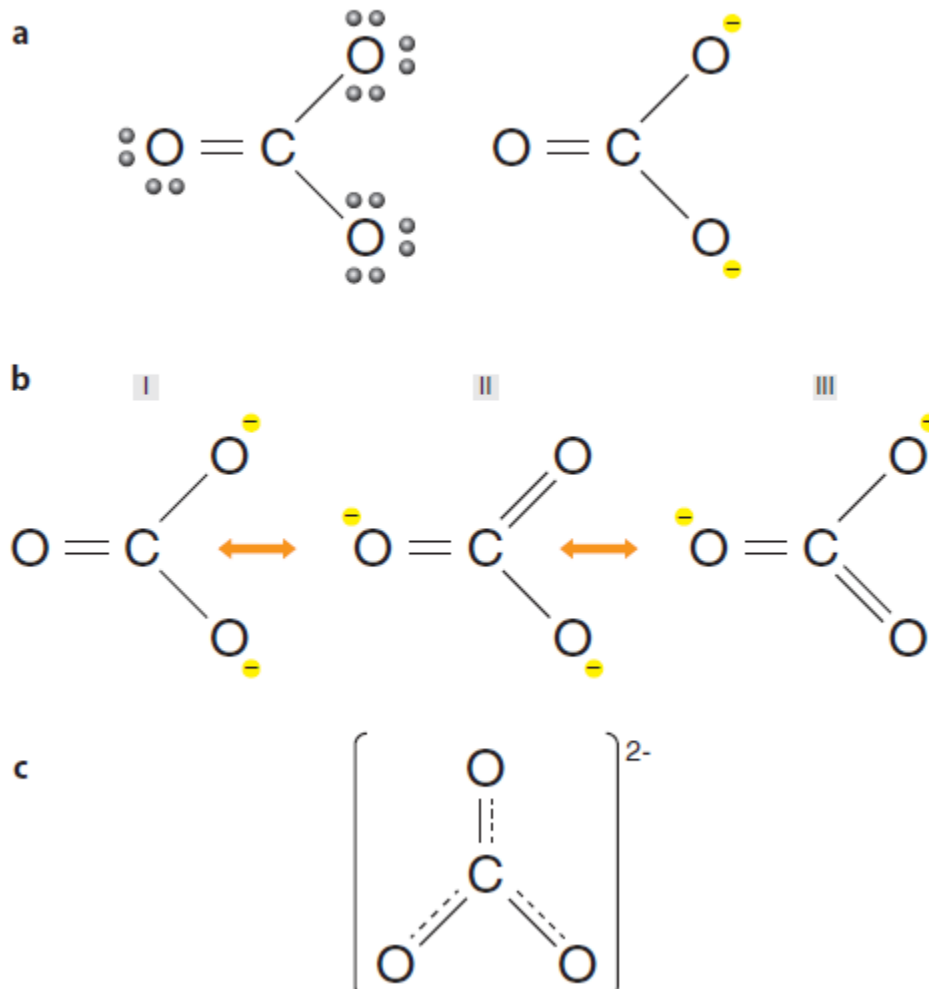


$$\mu = q \times r \text{ (D)}$$

$$1 \text{ Debye (D)} = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$



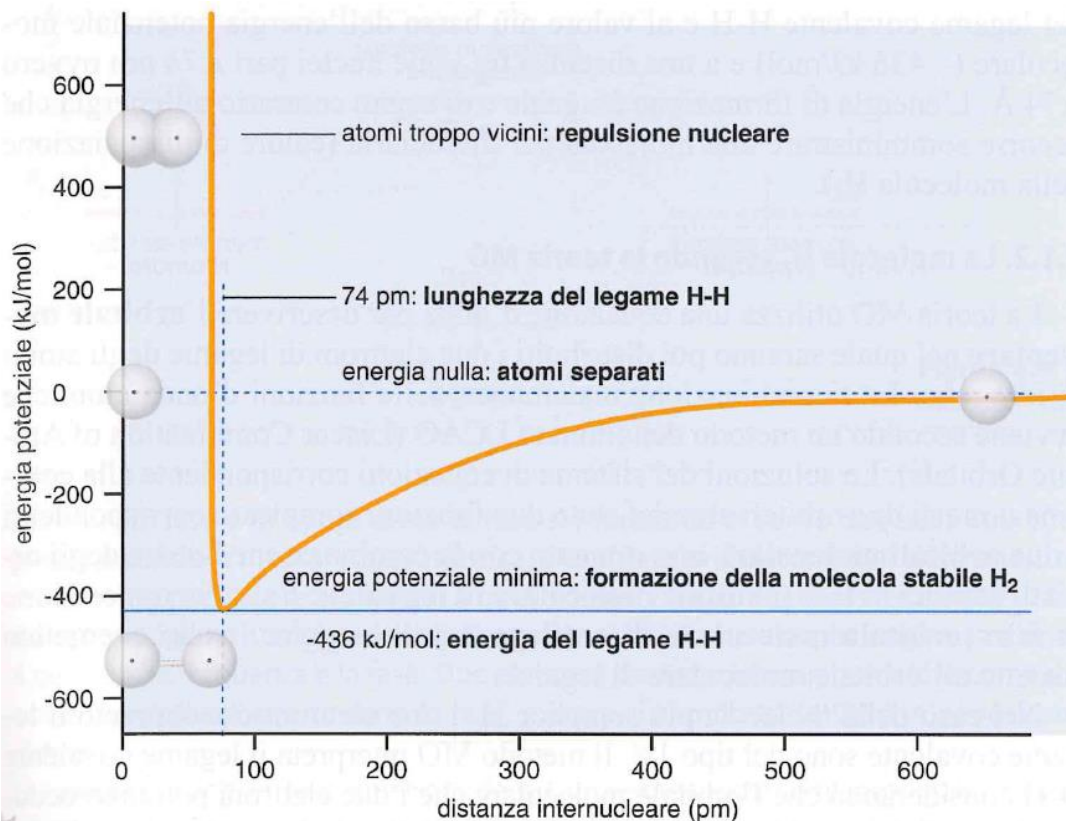
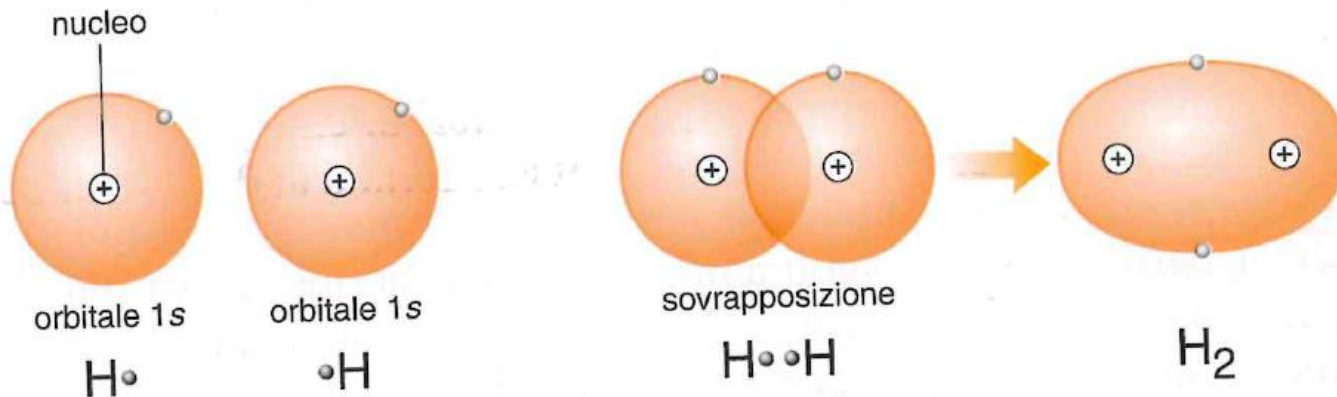
Risonanza



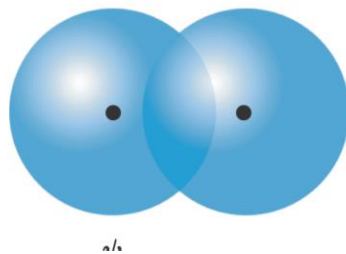
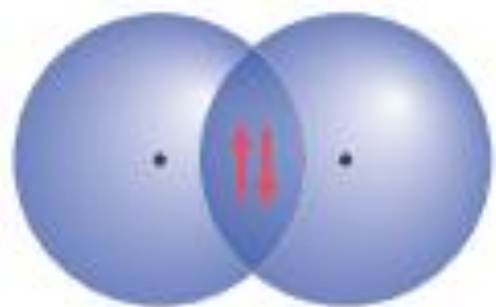
Lo ione carbonato è un ibrido di risonanza di tre forme limite (canoniche) equivalenti

L'energia calcolata di un ibrido di risonanza è sempre inferiore a quella della forma canonica più stabile

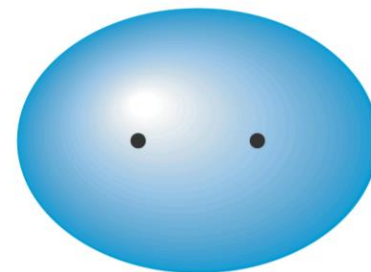
Molecola H_2 secondo la teoria VB



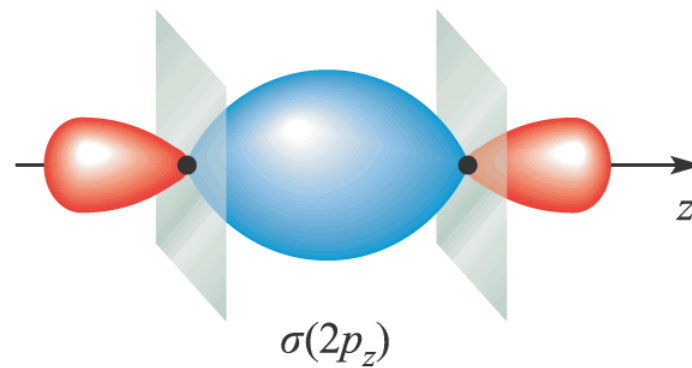
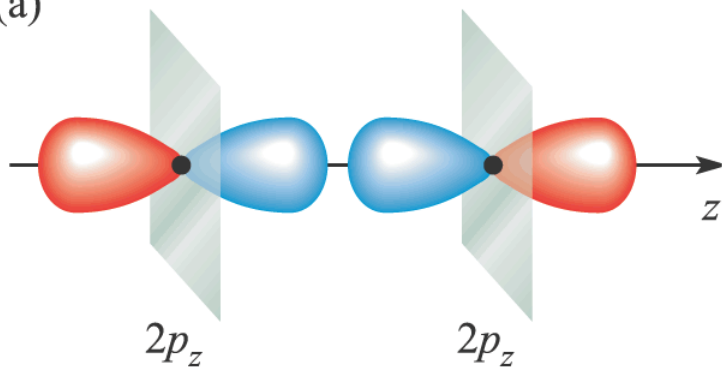
Legami σ



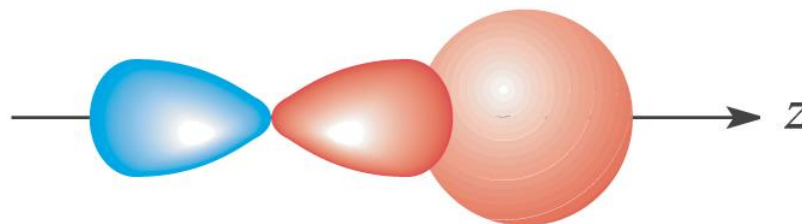
is equivalent to



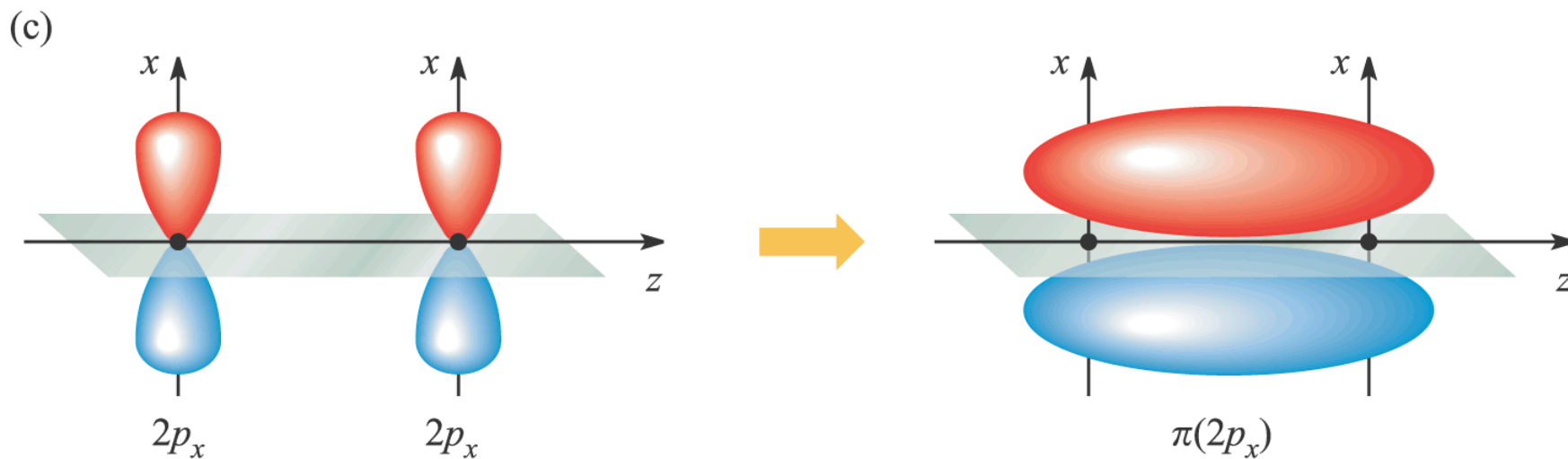
(a)



C.E. Housecroft, A.G. Sharpe
Inorganic Chemistry (3rd ed)
Pearson



Legami π

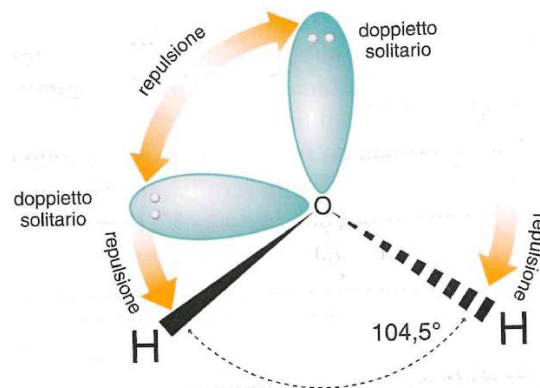
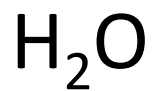
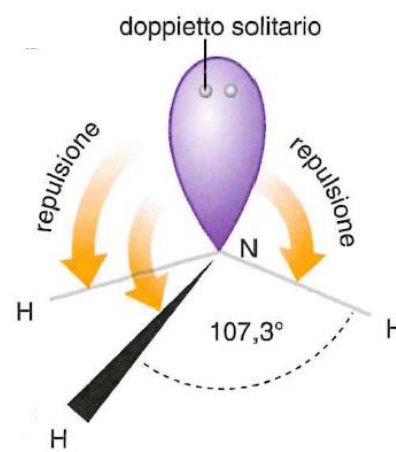
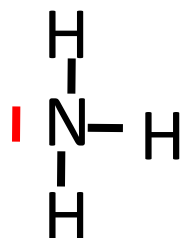
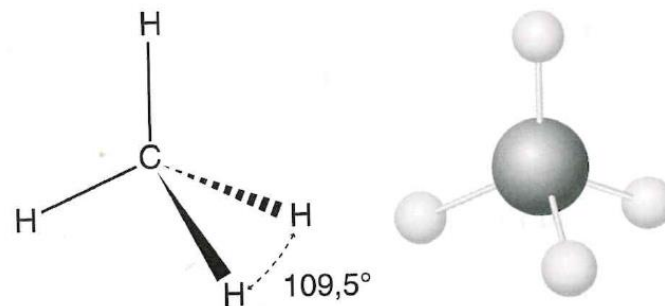
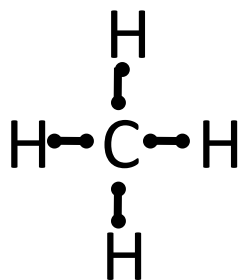


C.E. Housecroft, A.G. Sharpe, Inorganic Chemistry (3rd ed), Pearson

Geometria delle molecole

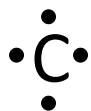
La geometria delle molecole può essere dedotta dall'analisi delle coppie di elettroni che si trovano attorno all'atomo centrale (teoria VSEPR = ***Valence Shell Electron Pair Repulsion*** = Repulsione delle Coppie Elettroniche nel Guscio di Valenza).

Numero di regioni di densità elettronica	Arrangiamento
2	Lineare
3	Trigonale planare
4	Tetraedrico
5	Bipiramidale trigonale
6	Ottaedrico

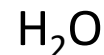
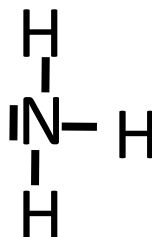
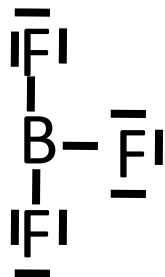
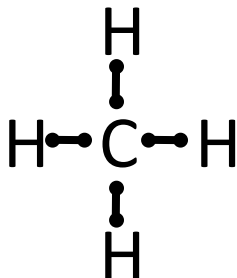


Regole per determinare la geometria molecolare:

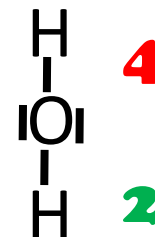
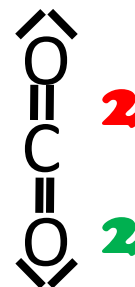
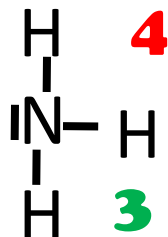
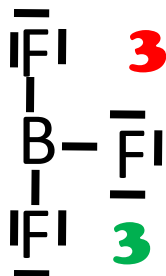
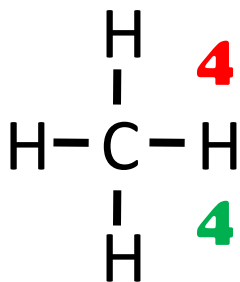
1. Scrivere la **struttura di Lewis** degli atomi coinvolti (elettroni del guscio di valenza):



2. Indicare i legami che si formano e gli elettroni non condivisi (doppietti solitari):



3. Contare le **coppie strutturali** attorno all'atomo centrale: i legami singoli valgono 1, i legami multipli (doppi, tripli) valgono 1, le coppie solitarie valgono 1



4. Contare gli **atomi legati** attorno all'atomo centrale
5. Individuare la geometria delle coppie strutturali e quella della molecola

Le coppie di elettroni si respingono tra loro e tendono a disporsi in modo da trovarsi più lontano possibile le une dalle altre.

Coppie strutturali	Geometria delle coppie strutturali	Atomi legati	Geometria della molecola
4	Tetraedrica	4	Tetraedro (109.5°)
		3	Piramide trigonale (<109.5°)
		2	Angolata (piegata, <109.5°)
3	Trigonale planare	3	Trigonale planare (120°)
		2	Angolata (< 120°)
2	Lineare	2	Lineare

Esempio:

Determinare la geometria molecolare di BeF_2 secondo la teoria VSEPR.

1. Strutture di Lewis: $\cdot\text{Be}\cdot \quad \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\text{F}\cdot \\ \cdot\cdot \end{array} \quad \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\text{F}\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$
2. Formazione di legami: $\text{|\overline{F}}-\text{Be}-\text{\overline{F}}|$
3. Coppie strutturali attorno all'atomo centrale: 2
4. Atomi legati all'atomo centrale: 2
5. Geometria della molecola: **LINEARE**

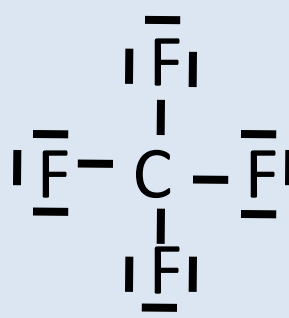
Esempio:

Determinare la geometria molecolare di H_2S secondo la teoria VSEPR.

1. Strutture di Lewis: $\cdot\text{H} \quad \cdot\text{H} \quad \begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \cdot\text{S}\cdot \\ \cdot\cdot \end{array}$
2. Formazione di legami: $\text{H}-\text{\overline{S}}-\text{H}$
3. Coppie strutturali attorno all'atomo centrale: 4
4. Atomi legati all'atomo centrale: 2
5. Geometria della molecola: **ANGOLATA (angolo < 109°)**

Esempio:

Determinare la geometria molecolare di CF_4 secondo la teoria VSEPR.

1. Strutture di Lewis: $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot$ $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{F}}}\cdot$ $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{F}}}\cdot$ $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{F}}}\cdot$ $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{F}}}\cdot$
 2. Formazione di legami:
 3. Coppie strutturali dell'atomo centrale: 4
 4. Atomi legati all'atomo centrale: 4
 5. Geometria della molecola: **TETRAEDRICA**
- 

Esempio:

Determinare la geometria molecolare di BH_3 secondo la teoria VSEPR.

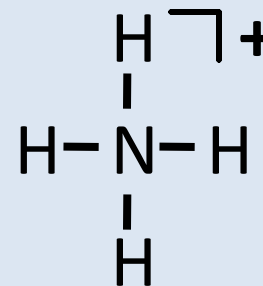
1. Strutture di Lewis: $\cdot\text{H}$ $\cdot\text{H}$ $\cdot\text{H}$ $\cdot\overset{\cdot}{\text{B}}\cdot$
2. Formazione di legami:
 $\begin{array}{c} \text{H} \\ | \\ \text{H} - \text{B} - \text{H} \end{array}$
3. Coppie strutturali attorno all'atomo centrale: 3
4. Atomi legati all'atomo centrale: 3
5. Geometria della molecola: **TRIGONALE PLANARE**

Esempio:

Determinare la geometria molecolare dello ione NH_4^+ secondo la teoria VSEPR.

1. Strutture di Lewis: $\cdot\ddot{\text{N}}^+\cdot \quad \cdot\text{H} \quad \cdot\text{H} \quad \cdot\text{H} \quad \cdot\text{H}$
The lone pair on the nitrogen atom is marked with a red 'X'.

2. Formazione di legami:



3. Coppie strutturali attorno all'atomo centrale: 4

4. Atomi legati all'atomo centrale: 4

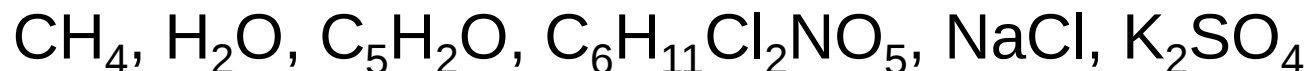
5. Geometria dello ione: **TETRAEDRICA**

FORMULE CHIMICHE

I composti sono rappresentati con una FORMULA CHIMICA che ne definisce la composizione atomica.

FORMULA EMPIRICA (formula minima o formula bruta)

mostra, nel modo più semplice possibile,
il rapporto presente tra gli elementi nel composto, mediante
l'uso dei simboli degli elementi stessi (generalmente in
ordine alfabetico)
seguiti da un pedice che rappresenta il numero relativo di
atomi di quella specie nel composto (1 escluso)



Composti diversi e quindi con diverse proprietà, possono avere la stessa formula empirica

Es. **acido acetico** e **glucosio** (due composti totalmente diversi) hanno entrambi formula empirica CH_2O

FORMULA MOLECOLARE

Fornisce maggiori informazioni:

mostra il numero esatto di ciascun tipo di atomi presenti nella molecola.

acido acetico $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$

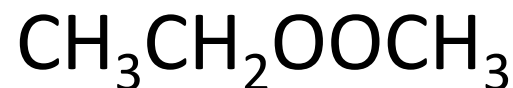
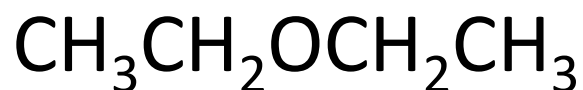
glucosio $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$

formula empirica CH_2O

FORMULA ESTESA

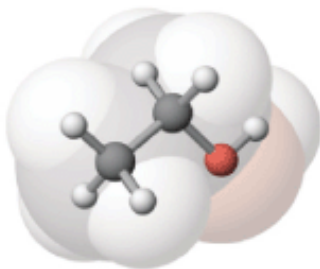
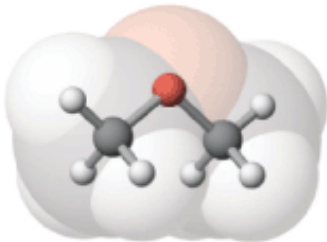
Più dettagliata della precedente:

mette in risalto e descrive la sequenza dei gruppi di atomi



FORMULA DI STRUTTURA

ancora più dettagliata: descrive il modo con cui sono raggruppati gli atomi nella molecola, in particolare gli atomi legati covalentemente tra loro sono congiunti con una linea che rappresenta il legame chimico.

NOME	FORMULA MOLECOLARE	FORMULA ESTESA	FORMULA DI STRUTTURA	MODELLO MOLECOLARE
Etanolo	C_2H_6O	CH_3CH_2OH	$\begin{array}{c} H & H \\ & \\ H-C & -C-O-H \\ & \\ H & H \end{array}$	
Etere dimetilico	C_2H_6O	CH_3OCH_3	$\begin{array}{c} H & & H \\ & & \\ H-C & -O- & C-H \\ & & \\ H & & H \end{array}$	

Peso-formula e peso-molecolare

Elemento: il peso atomico si trova sulla tavola periodica

Composto: il peso molecolare (molecole) o peso-formula (solidi ionici) si calcola come somma delle masse atomiche degli atomi degli elementi che lo compongono

$$m_{\text{Na}} = 22.99 \text{ uma}$$

$$m_{\text{Cl}} = 35.45 \text{ uma}$$

$$m_{\text{C}} = 12.01 \text{ uma}$$

$$m_{\text{N}} = 14.01 \text{ uma}$$

$$m_{\text{O}} = 16.00 \text{ uma}$$

$$m_{\text{H}} = 1.01 \text{ uma}$$



$$m_{\text{NaCl}} = m_{\text{Na}} + m_{\text{Cl}} = 58.44 \text{ uma}$$



$$\begin{aligned} m_{\text{C}_9\text{H}_8\text{O}} &= 9 \times m_{\text{C}} + 8 \times m_{\text{H}} + m_{\text{O}} = \\ &= 9 \times 12.01 + 8 \times 1.01 + 16.00 = \\ &= 132.17 \text{ uma} \end{aligned}$$



$$m_{\text{NH}_4\text{Cl}} = 53.50 \text{ uma}$$



$$m_{\text{C}_2\text{H}_6\text{O}} = 46.08 \text{ uma}$$



$$m_{\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7} = 192.14 \text{ uma}$$

La mole

La mole è la quantità di sostanza che contiene un numero di specie chimiche (atomi, molecole, ioni...) pari al numero di atomi presenti in 12.0 g di ^{12}C . Questo numero è il numero di Avogadro (N_A), 6.022×10^{23}

Una mole corrisponde quindi a un numero di grammi pari al peso molecolare in unità di massa atomica.

Una molecola di acqua pesa 18.02 uma. Una mole di molecole di acqua pesa 18.02 g.

Un atomo di carbonio pesa 12.01 uma. Una mole di atomi di carbonio pesa 12.01 g.

64 g di ossigeno contengono 2 moli di ossigeno O_2 , perché una molecola di ossigeno pesa 32 uma.

Quanto pesa una mole di atomi di idrogeno? 1.01 g

Quante moli di zolfo ci sono in 32.06 g di S? 1 mol

Quanto pesa l'idrogeno presente in una mole di acqua? 2.02 g

E l'ossigeno nella stessa quantità di acqua? 16.00 g

Quante moli di rame sono contenute in 10.00 g di rame?

Il peso atomico del rame è 63.55 uma.

La massa di una mole di atomi di rame è pari a 63.55 g. La **massa molare** del rame è 63.55 g/mol.

In 10.00 g di rame ci sono: $\frac{10.00 \text{ g}}{63.55 \text{ g/mol}} = 0.1573 \text{ mol}$

29	63,546
+2	2,1
8,96 1083 2568	Cu
Rame	

Quante moli di CuSO_4 corrispondono a 15.00 g di solfato di rame?

Il peso atomico del rame è 63.55 uma, quello dello zolfo 32.06 uma, quello dell'ossigeno 16.00 uma e quello dell'idrogeno 1.01 uma.

Il peso-formula del composto è:

$63.55 + 32.06 + (4 \times 16.00) = 159.61 \text{ uma}$

In 15.00 g di solfato di rame ci sono:

16	32,06
-2	6,4,2,-2
1,92 119 445	S
Zolfo	

8	15,9994
-2	-2,-1
0,001429 -218,8 -183	O
Ossigeno	

$\frac{15.00 \text{ g}}{159.61 \text{ g/mol}} = 0.09398 \text{ mol}$

Il numero di Avogadro è un numero

enorme

Composizione percentuale

La composizione percentuale indica la proporzione in massa di un atomo o un componente in un composto o in una miscela:

$$\text{Massa percentuale} = \frac{\text{Massa totale del componente}}{\text{Massa totale dell'intera sostanza}} \times 100$$

Esempio:

Calcolare la composizione percentuale dell'acqua.

$$\text{Massa percentuale ossigeno} = \frac{\text{Massa totale ossigeno}}{\text{Massa totale acqua}} \times 100$$

1 mole di acqua pesa 18.02 g.

In una mole di acqua c'è una mole di ossigeno (O) e 2 moli di idrogeno (H).

1 mole di ossigeno pesa 16.00 g.

$$\text{Massa percentuale ossigeno} = \frac{16.00 \text{ g}}{18.02 \text{ g}} \times 100 = 88.79\%$$

2 moli di idrogeno pesano 2.02 g.

$$\text{Massa percentuale idrogeno} = \frac{2.02 \text{ g}}{18.02 \text{ g}} \times 100 = 11.21\%$$

100%

Esempio:

Le piante hanno bisogno di assumere azoto dal proprio ambiente. La quantità di azoto è critica per la sopravvivenza della piante. Dovendo concimare una pianta, si possono scegliere diversi sali contenenti azoto, ma è necessario conoscere con precisione la quantità di azoto che si sta somministrando alla pianta. Quale di questi composti contiene in percentuale più azoto? NH_4NO_3 oppure $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$?

$$\text{Massa percentuale azoto} = \frac{\text{Massa totale azoto}}{\text{Massa totale composto}} \times 100$$

1 mole di NH_4NO_3 pesa 80.06 g.

In una mole di NH_4NO_3 ci sono due moli di azoto (N).

2 moli di azoto pesano 28.02 g.

$$\text{Massa percentuale azoto in } \text{NH}_4\text{NO}_3 = \frac{28.02 \text{ g}}{80.06 \text{ g}} \times 100 = 35.00\%$$

1 mole di $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ pesa 132.16 g.

In una mole di $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ ci sono due moli di azoto (N).

2 moli di azoto pesano 28.02 g.

$$\text{Massa percentuale ossigeno} = \frac{28.02 \text{ g}}{132.16 \text{ g}} \times 100 = 21.20\%$$

Qualsiasi massa di NH_4NO_3 contiene una percentuale di azoto superiore a quella contenuta in una quantità pari di $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$.

Esempio:

Nel cioccolato ci sono diversi composti che conferiscono il tipico aroma. Un chimico isola uno di questi composti e ne determina la composizione percentuale: 66.62% carbonio, 7.47% idrogeno e 25.91% azoto. Qual è la formula minima di questo composto?

Per 100 g del composto ignoto:

La massa di carbonio è 66.62 g, che corrisponde a:

$$\text{Moli di carbonio} = \frac{66.62 \text{ g}}{12.01 \text{ g/mol}} = 5.55 \text{ mol}$$

La massa di idrogeno è 7.47 g.

$$\text{Moli di idrogeno} = \frac{7.47 \text{ g}}{1.01 \text{ g/mol}} = 7.40 \text{ mol}$$

La massa di azoto è 25.91 g.

$$\text{Moli di azoto} = \frac{25.91 \text{ g}}{14.01 \text{ g/mol}} = 1.84 \text{ mol}$$

$$5.55 / 1.84 = 3$$

$$7.40 / 1.84 = 4$$

$$1.84 / 1.84 = 1$$

La formula del composto incognito è $\text{C}_3\text{H}_4\text{N}$.



Esercizi

1. Dire quanti atomi di ciascun elemento sono presenti nei seguenti composti:

Acido solforico H_2SO_4

Idrossido di calcio $\text{Ca}(\text{OH})_2$

Fosfato acido di sodio Na_2HPO_4

Nitrato di alluminio $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$

1. Quante moli di zinco sono contenute in 5.5 g di Zn? E quanti atomi di zinco?
2. Calcolare la massa in grammi di 0.100 moli di piombo. Quante moli di piombo corrispondono a 1.50 g di Pb?
3. Quanti atomi di ossigeno sono contenuti in 1.00 g di O_2 ?
4. Calcolare quante moli degli elementi Na, S, O, H e quante moli di acqua sono contenute in 1 mole di $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$. A quanto corrisponde in grammi una mole di questo composto?
5. Calcolare quanti grammi di idrogeno (H) e ossigeno (O) sono contenuti in 1.00 g di acqua (H_2O).

Esercizi

6. Calcolare la massa molecolare dei seguenti composti:

benzene C_6H_6

carbonato di alluminio $Al_2(CO_3)_3$

nitrato di magnesio $Mg(NO_3)_2$

idrossido di rame II $Cu(OH)_2$

ossalato di calcio CaC_2O_4

ossido di cromo VI CrO_3

cloruro di titanio $TiCl_2$

clorato di litio $LiClO_3$

7. Avendo 5.00 g di litio, 5.00 g di piombo e 5.00 g di cobalto, quale campione contiene un numero maggiore di atomi?
8. La cisteina contiene 29.55% di C, 5.80% di H, 11.30% di N, 26.72% di O e 26.49% di S. Determinare la formula minima della cisteina.