

IL LEGAME CHIMICO

Il legame chimico si instaura quando l'insieme che ne risulta ha un'energia minore di quella che avevano nel complesso i due atomi isolati. L'insieme è **PIU' STABILE!**

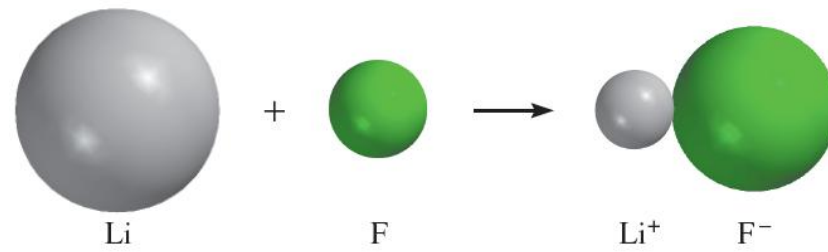
Due modelli limite

LEGAME IONICO

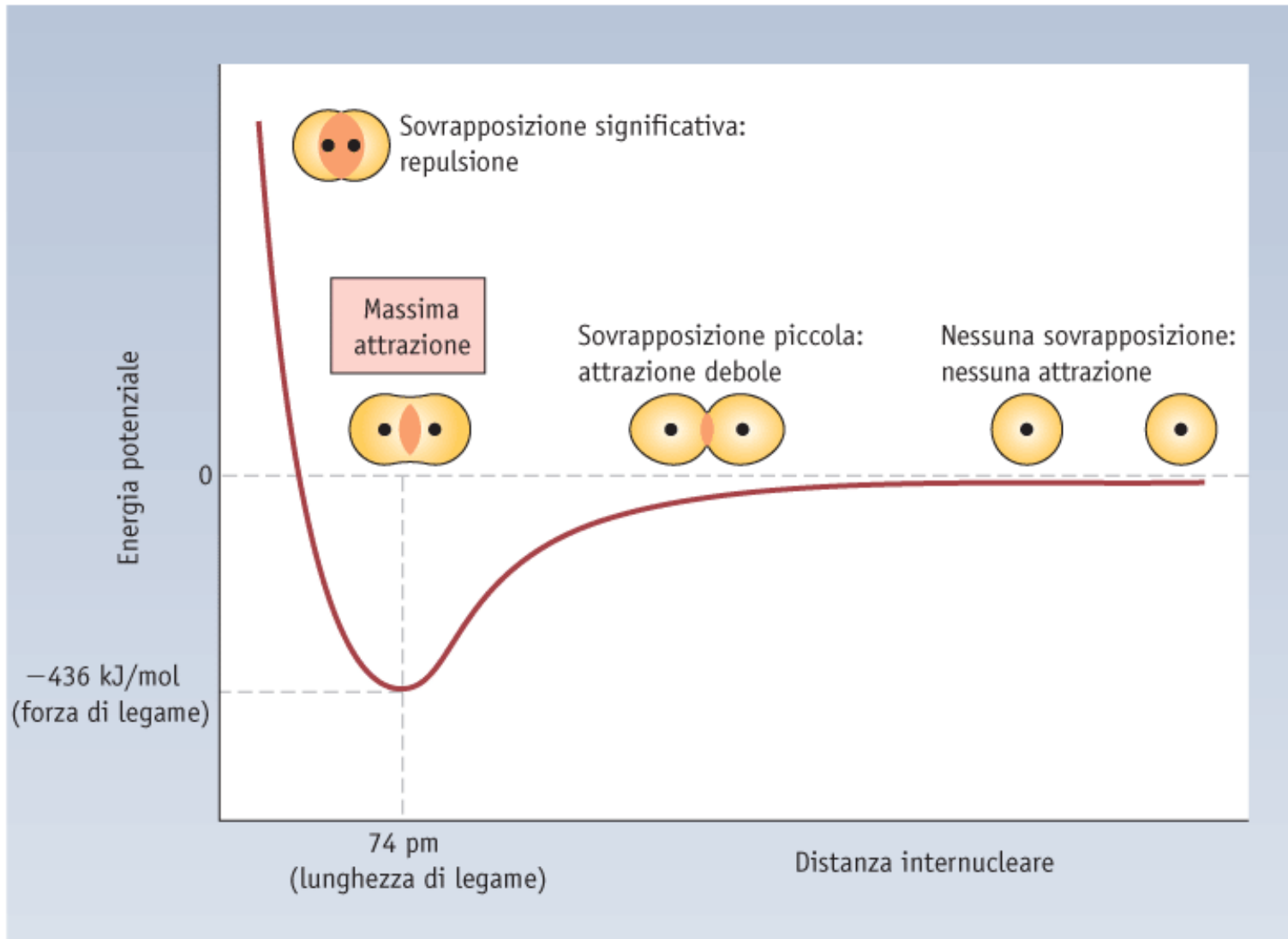
LEGAME COVALENTE

Trasferimento o Condivisione degli **ELETTRONI DI VALENZA**

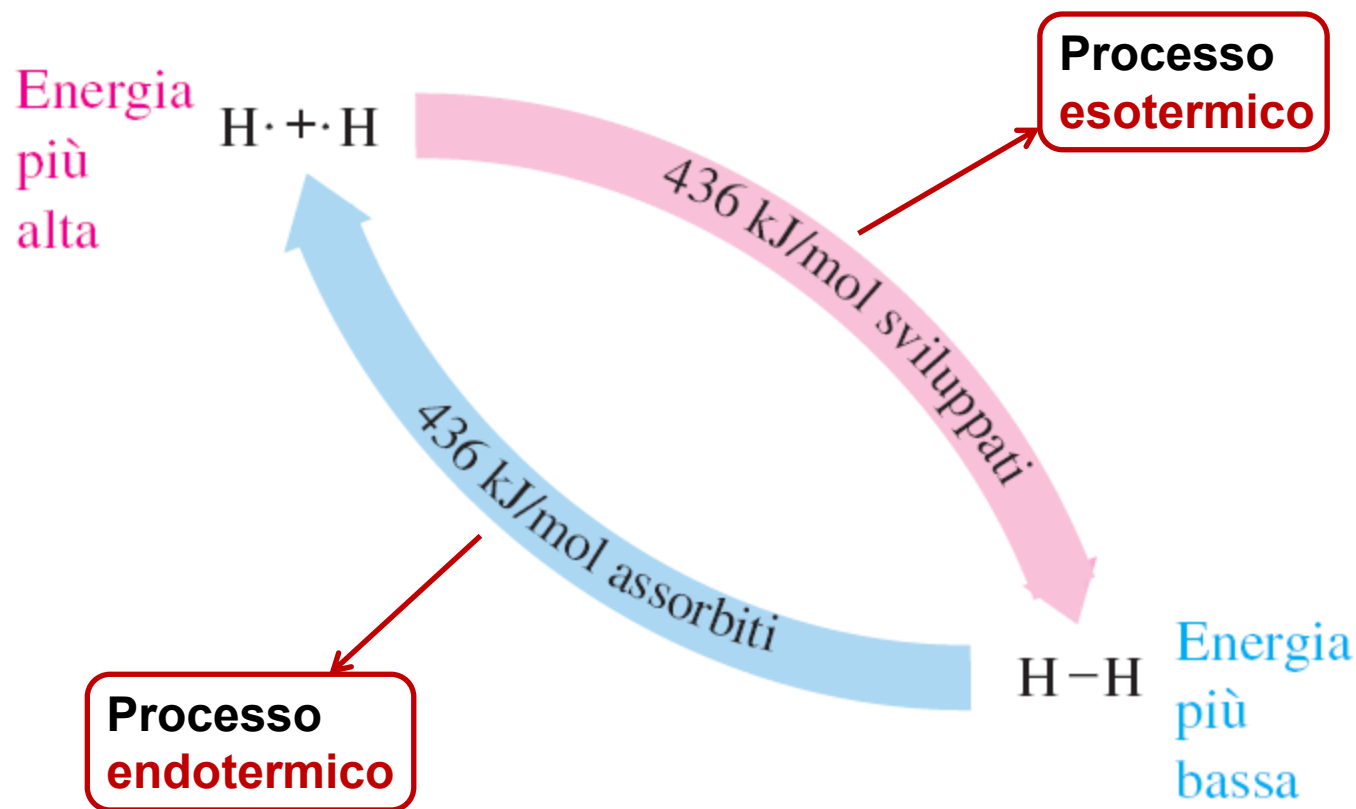
IL LEGAME IONICO



IL LEGAME COVALENTE



IL LEGAME CHIMICO

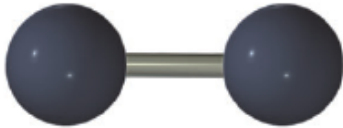
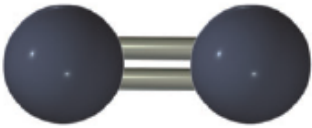
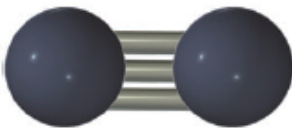


IL LEGAME COVALENTE

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

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

IL LEGAME COVALENTE

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

IL LEGAME COVALENTE

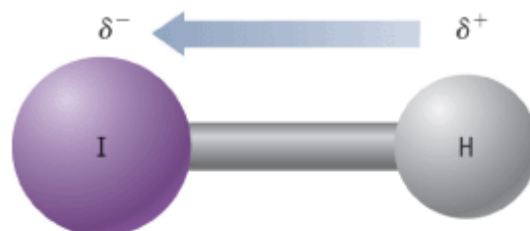


FIGURA 8.9 Il legame covalente polare in **HI**. Lo iodio attrae maggiormente gli elettroni di legame rispetto all'idrogeno. Il risultato è la presenza di una parziale carica negativa (δ^-) sullo iodio e una parziale carica positiva (δ^+) sull'idrogeno.

L'ELETTRONEGATIVITA'

L'elettronegatività, simbolo χ , è una proprietà chimica che descrive la tendenza di un atomo ad attrarre verso di sé elettroni condivisi.

NON RIGUARDA GLI ATOMI ISOLATI! un atomo con un'elevata elettronegatività attira gli elettroni (di legame) con maggiore forza rispetto a uno con un valore più basso; proprietà che definisce la polarità di un legame.

Aumento dell'elettronegatività

1A

2A

3A

4A

5A

6A

7A

8A

H 2.1																	
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Na 0.9	Mg 1.2											Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	Kr 3.0
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	Xe 2.6
Cs 0.7	Ba 0.9	La-Lu 1.0-1.2	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.9	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	
Fr 0.7	Ra 0.9																

Figura 9.5

Valori dell'elettronegatività degli elementi più comuni.

L'ELETTRONEGATIVITA'

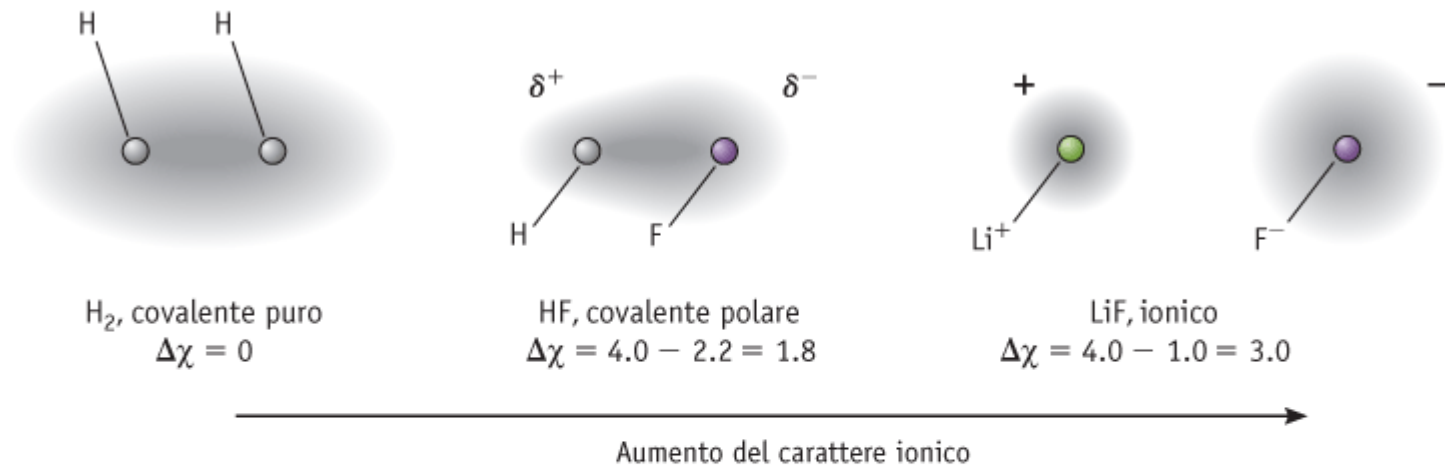
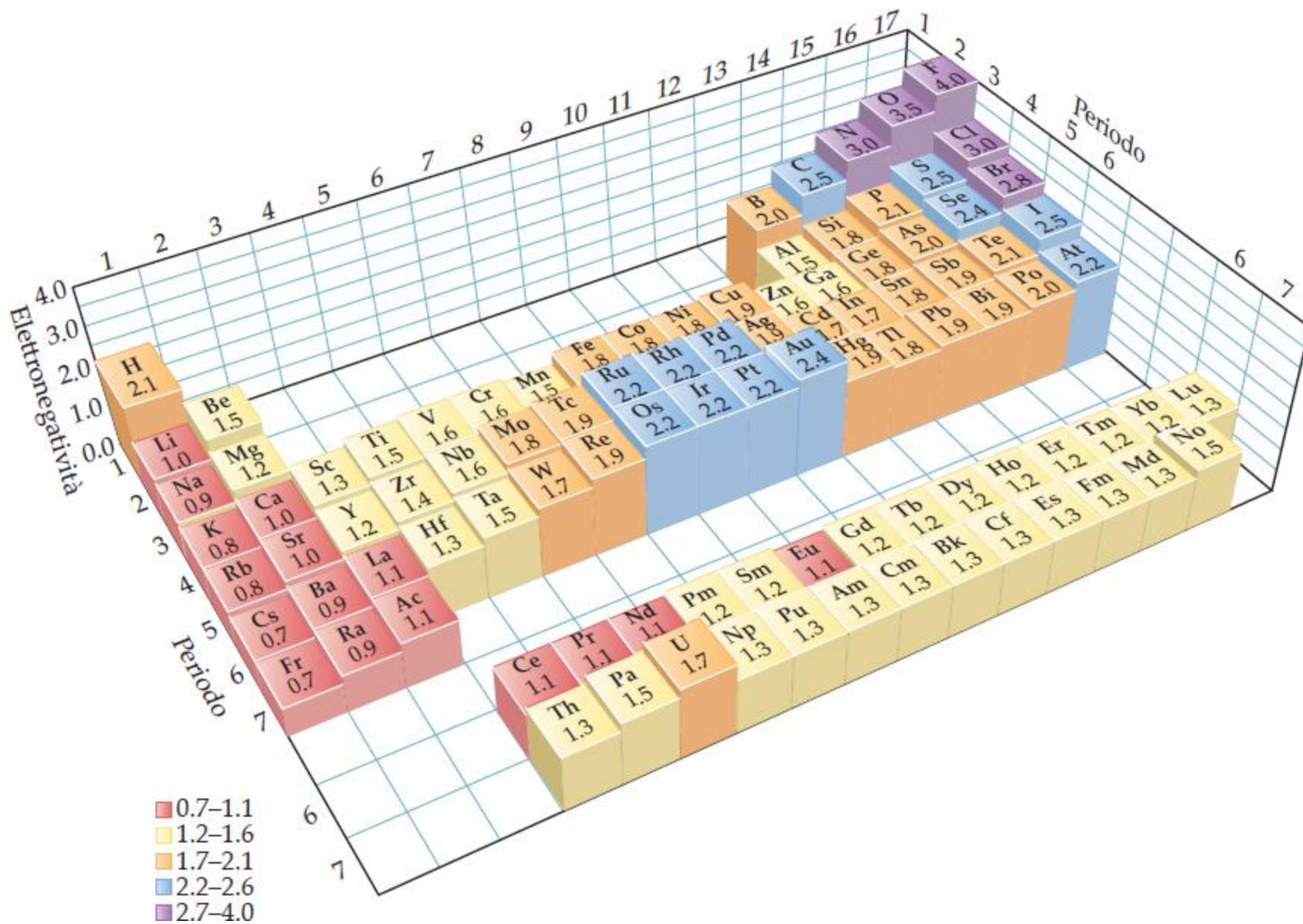
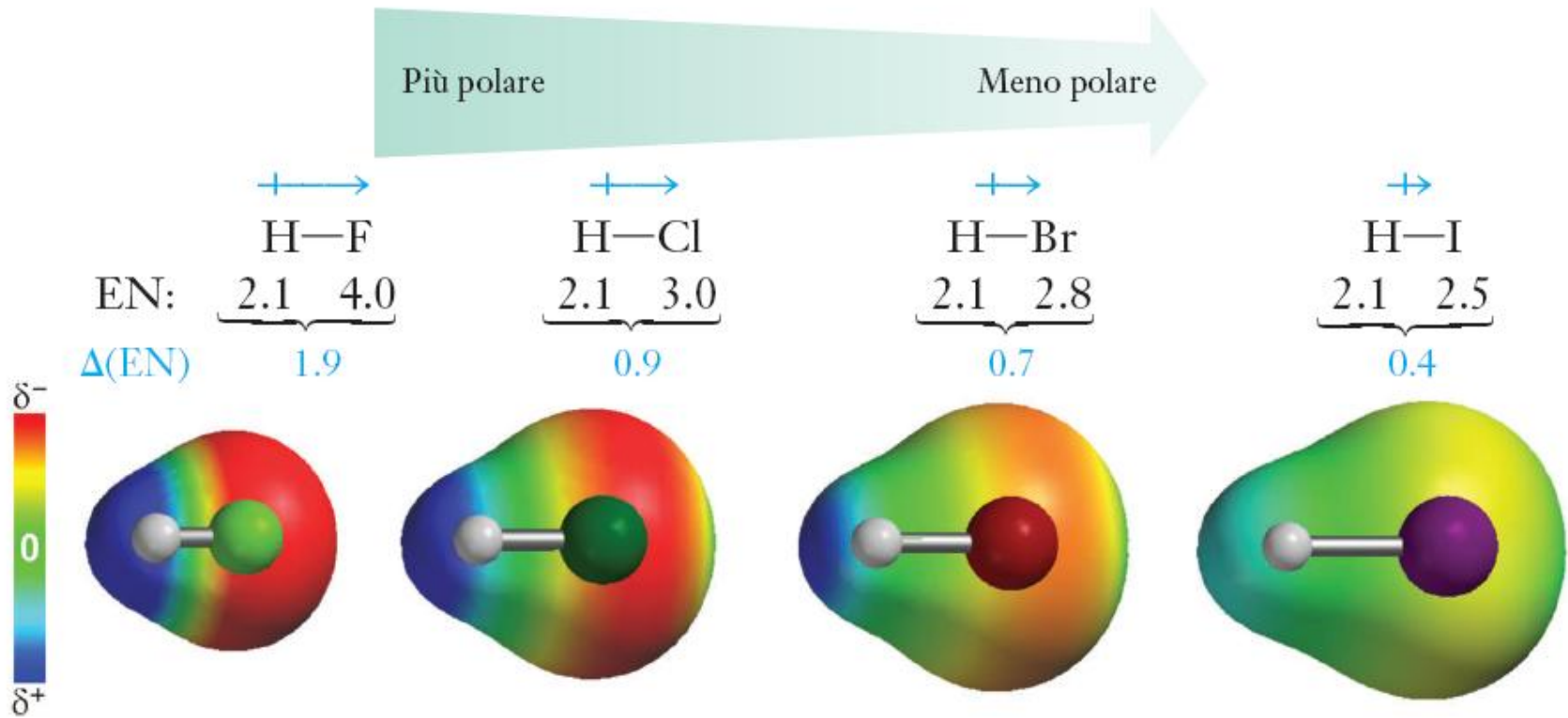


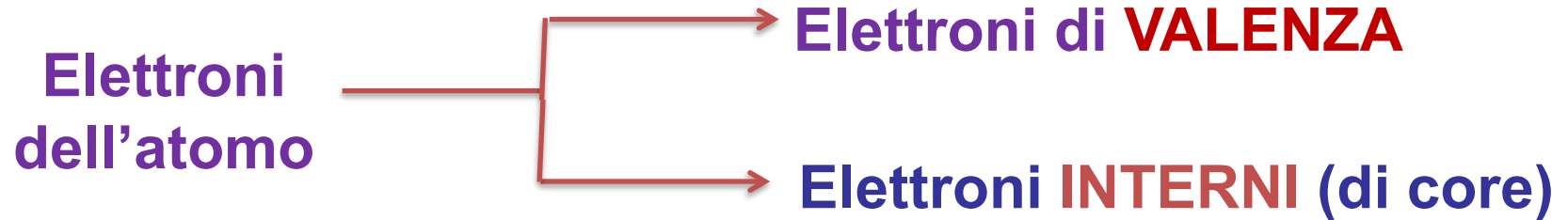
FIGURA 8.10 Legame da covalente a ionico. Aumentando la differenza di elettronegatività tra gli atomi di un legame, il legame diventa sempre più polare.



L'ELETTRONEGATIVITA'



LE FORMULE DI LEWIS



LA REGOLA DELL'OTTETTO

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

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

COME SI DISEGNANO LE STRUTTURE DI LEWIS

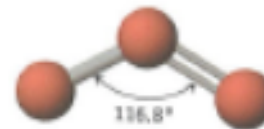
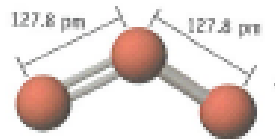
Regole per costruire le strutture di Lewis:

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

LA RISONANZA

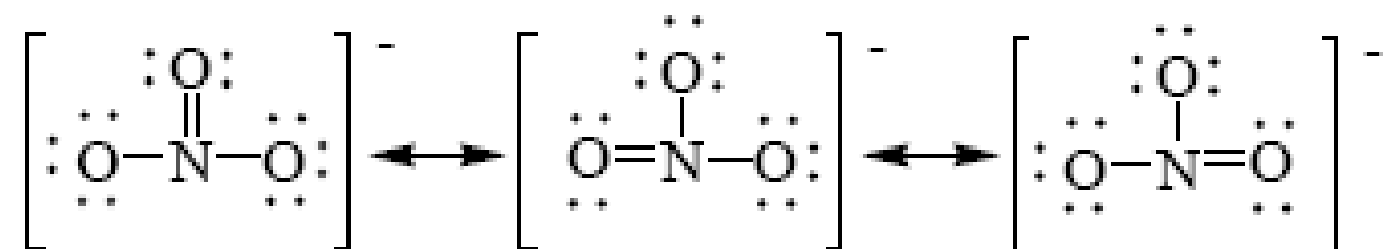
Risonanza = combinazione di strutture nelle quali gli atomi sono ugualmente collocati, mentre la disposizione degli elettroni è differente.

La molecola di O_3



LA RISONANZA

Lo ione nitrato



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

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

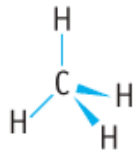
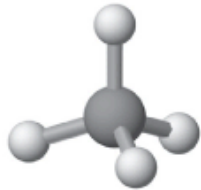
PROPRIETA' DEL LEGAME

Ordine di legame – numero di coppie di **elettroni di legame** DIVISO numero di legami sigma

Distanza di legame

Energia di legame

ORDINE DI LEGAME



Ordine di legame
1



Ordine di legame
2



Ordine di legame
3



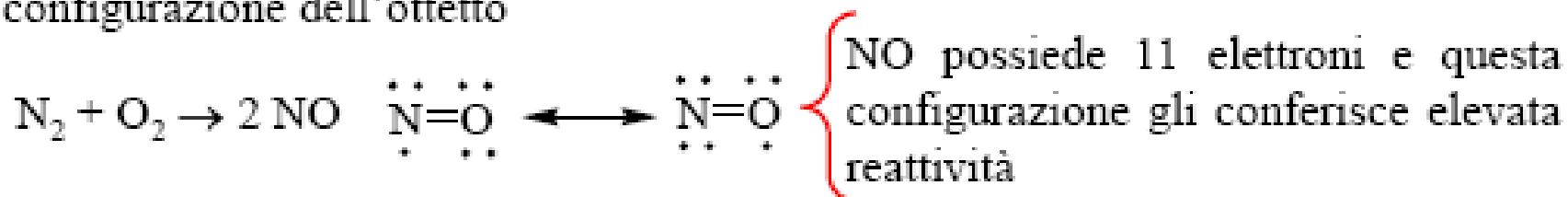
Ordine di legame
1.5

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

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

Molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni

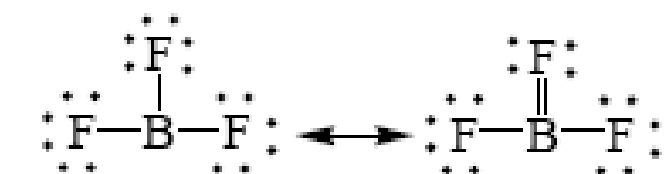
Le molecole e ioni poliatomici contenenti un numero dispari di elettroni sono denominati radicali. Per le specie radicaliche non è mai possibile raggiungere la configurazione dell'ottetto



ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

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

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



struttura di
risonanza più
probabile

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

ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO

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

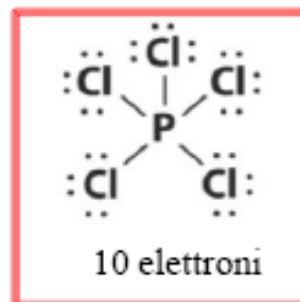
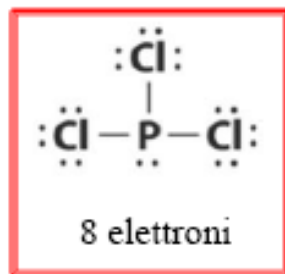


TABELLA 8.6 Strutture di Lewis di molecole in cui vi sono più di otto elettroni attorno all'atomo centrale

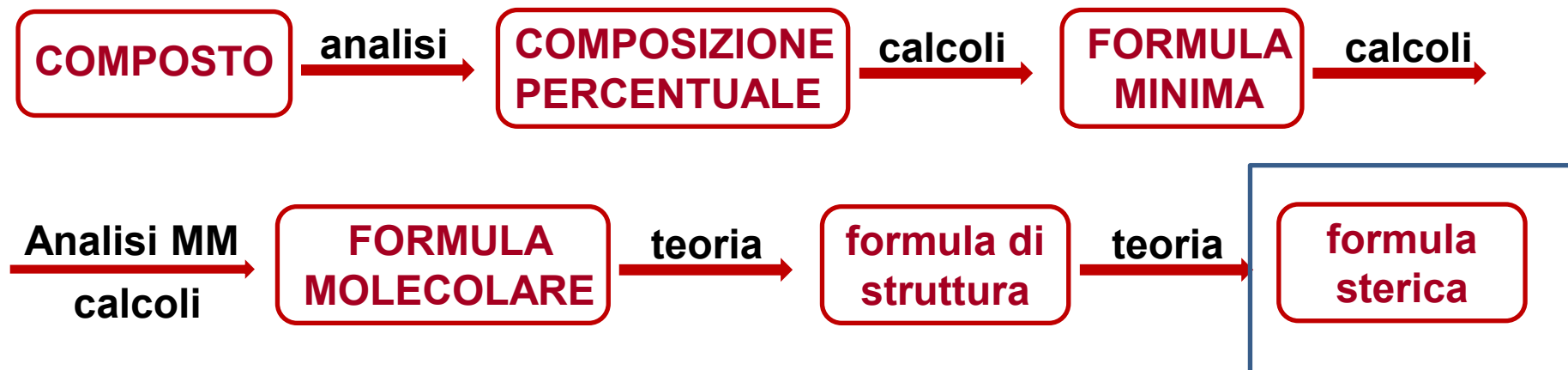
Gruppo 4A	Gruppo 5A	Gruppo 6A	Gruppo 7A	Gruppo 8
SiF_5^-	PF_5	SF_4	ClF_3	XeF_2
SiF_6^{2-}	PF_6^-	SF_6	BrF_5	XeF_4

LA MOLE E LA MASSA

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

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

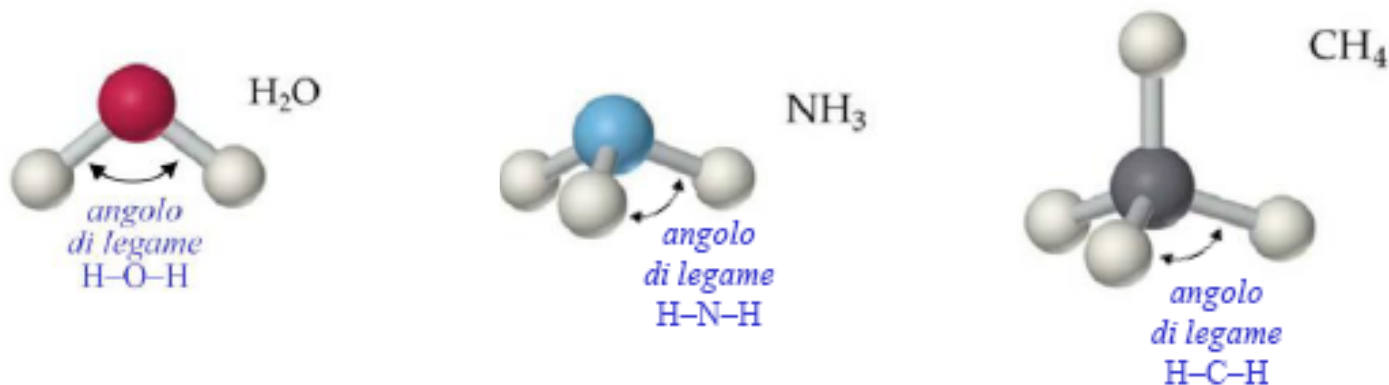
LE FORMULE DEI COMPOSTI



LA GEOMETRIA DELLE MOLECOLE

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

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



IL MODELLO VSEPR

(Valence Shell Electron Pair Repulsion)

(Repulsione delle Coppie di Elettroni del Guscio di Valenza)

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

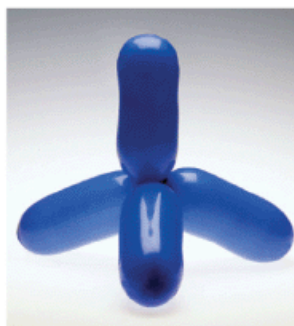
Esiste una sola possibile geometria che soddisfa questo requisito.



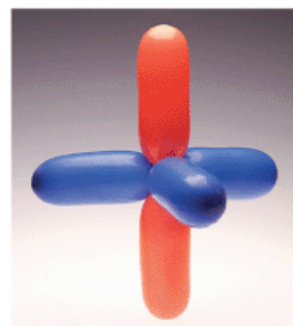
Lineare



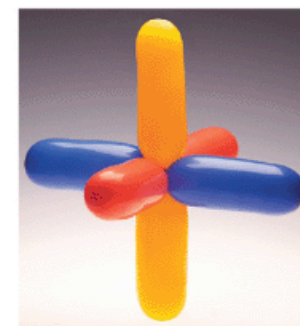
Trigonale planare



Tetraedrica



Trigonale bipiramidale



Ottaedrica

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

GEOMETRIE PREVISTE DAL MODELLO VSEPR

NS

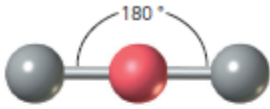
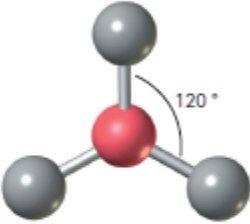
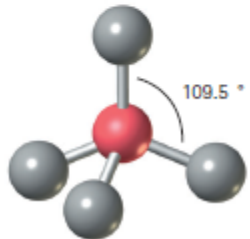
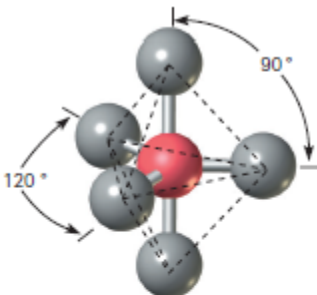
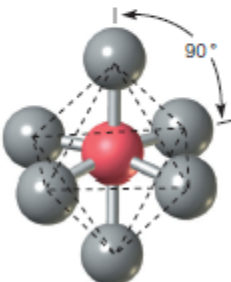
2

3

4

5

6

Tipo di specie	Orientazione delle coppie elettroniche	Angoli di legame previsti	Esempio	Modello ball and stick
AX_2	Lineare	180°	BeF_2	
AX_3	Trigolare planare	120°	BF_3	
AX_4	Tetraedro	109.5°	CH_4	
AX_5	Bipiramide trigonale	90° 120° 180°	PF_5	
AX_6	Ottaedro	90° 180°	SF_6	

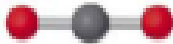
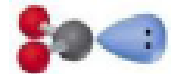
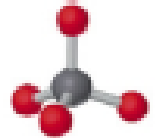
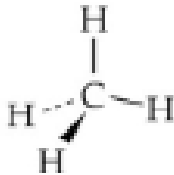
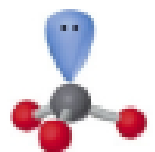
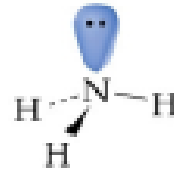
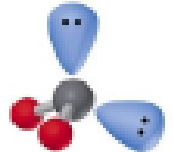
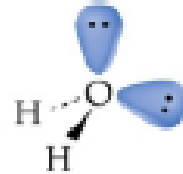
GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

NS

2

3

4

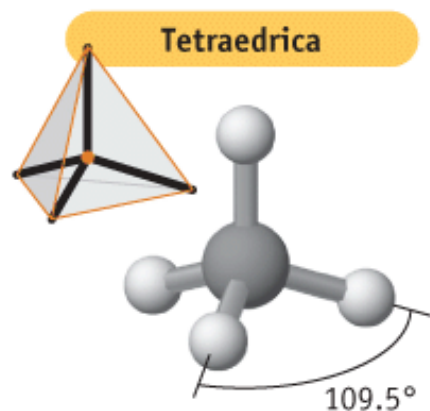
n legami	n coppie solitarie	n di sfere elettroniche	geometria molecolare		esempio
2	0	2 (AX ₂)	lineare (180 °)		O=C=O
3	0	3 (AX ₃)	planare triangolare (120 °)		
2	1	3 (AX ₂ E)	piegata (< 120 °)		
4	0	4 (AX ₄)	tetraedrica (109.5 °)		
3	1	4 (AX ₃ E)	piramidale trigonale (<109.5 °)		
2	2	4 (AX ₂ E ₂)	piegata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

DISTORSIONE CAUSATA DALLE COPPIE SOLITARIE

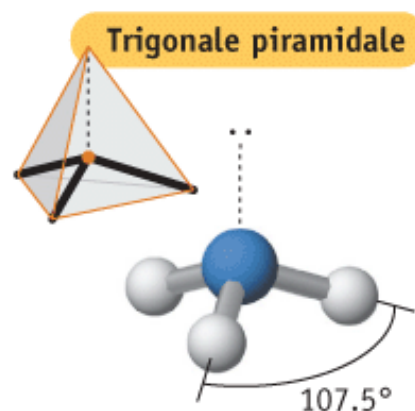
n legami	n coppie solitarie	n sfere elettroniche	geometria molecolare
4	0	4 (AX ₄)	tetraedrica (109.5°)
3	1	4 (AX ₃ E)	piramidale trigonale (<109.5°)
2	2	4 (AX ₂ E ₂)	piegata (<109.5°)

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

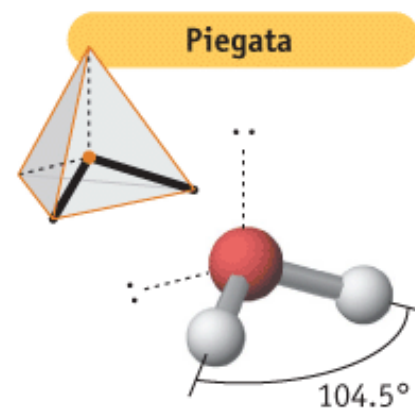
QUATTRO COPPIE ELETTRONICHE
Geometria delle coppie = tetraedrica



Metano, CH₄
4 coppie di legame
nessuna coppia solitaria



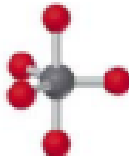
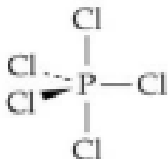
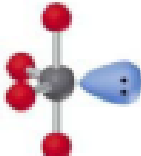
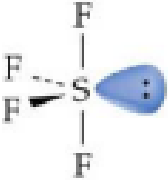
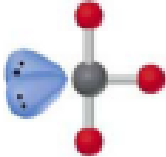
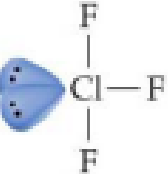
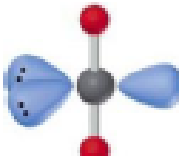
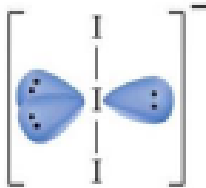
Ammoniaca, NH₃
3 coppie di legame
1 coppia solitaria



Acqua, H₂O
2 coppie di legame
2 coppie solitarie

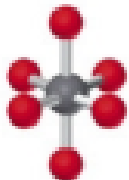
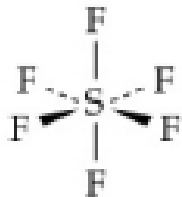
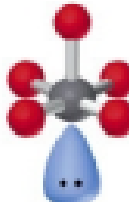
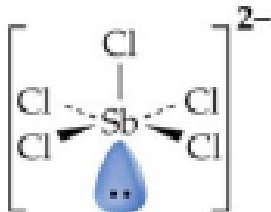
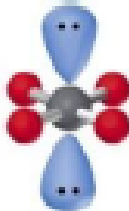
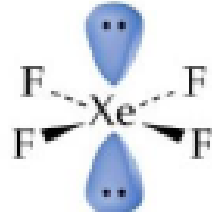
La forza repulsiva varia nell'ordine: CS-CS > CS-CL > CL-CL
CS = coppia solitaria;
CL = coppia di legame

GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

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

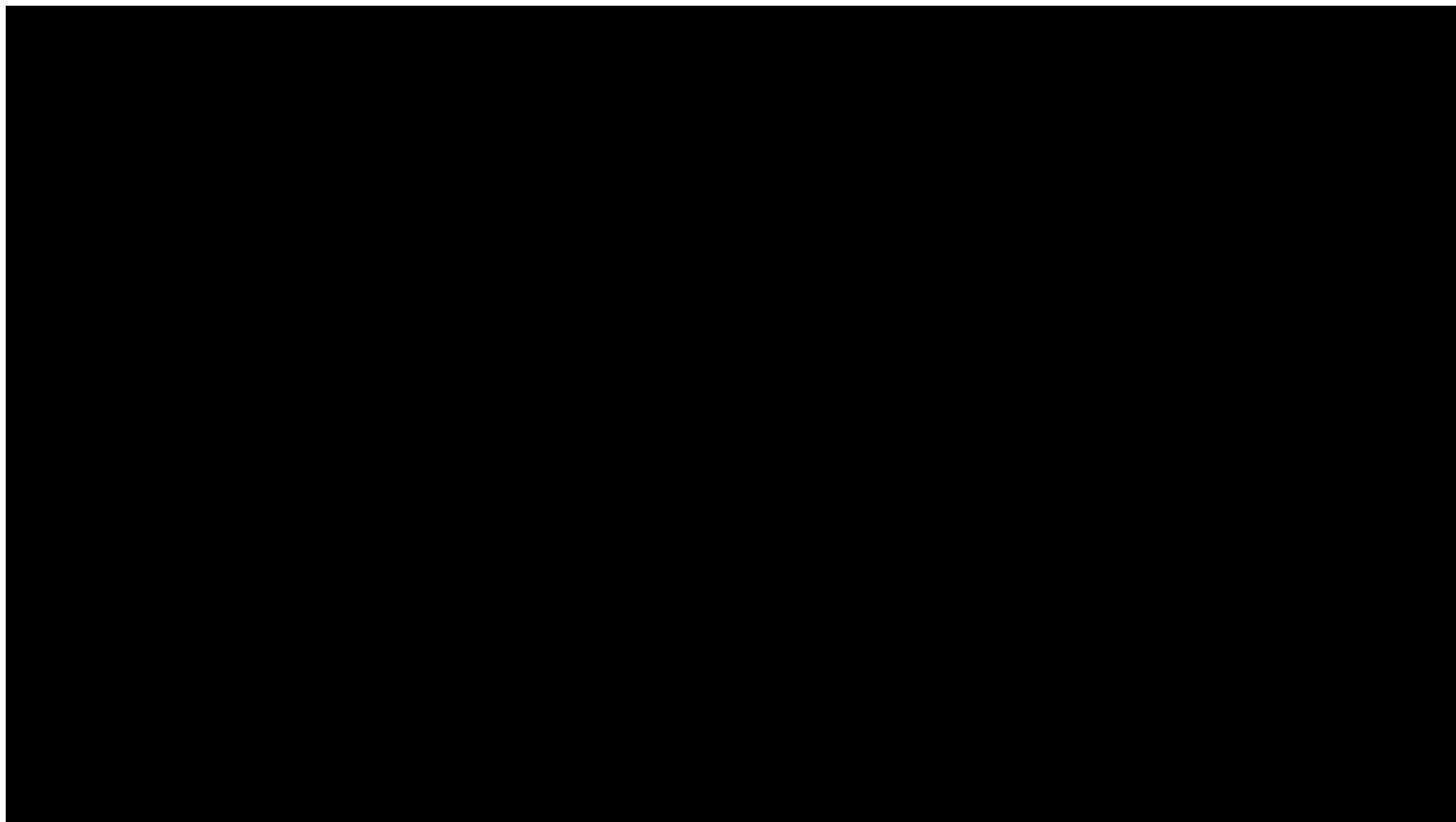
Nella geometria bipiramidale trigonale una (o più) coppia solitaria in posizione equatoriale stabilizza maggiormente le struttura

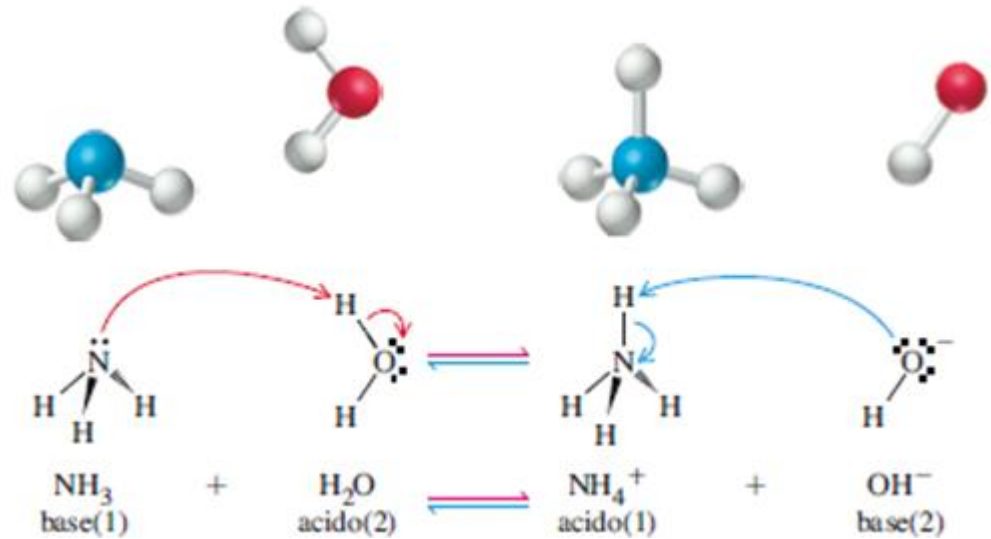
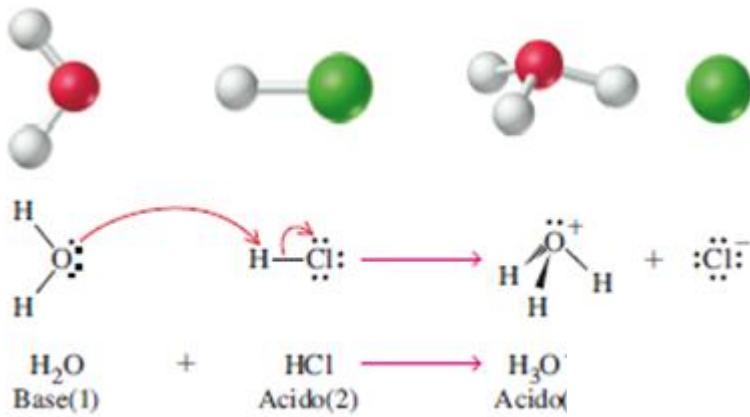
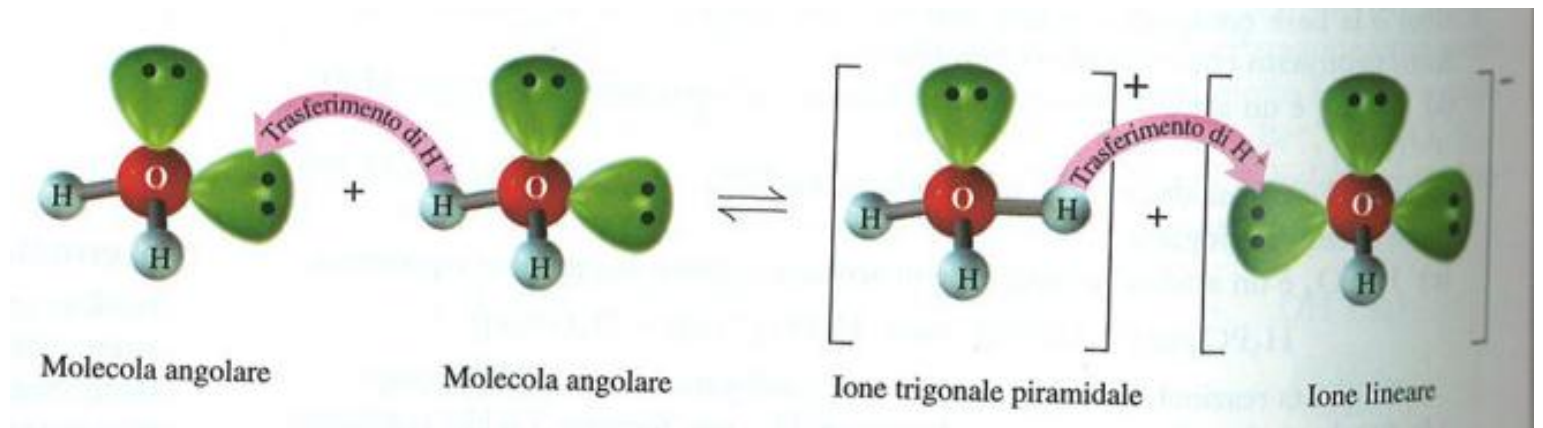
GEOMETRIA DELLE COPPIE DI ELETTRONI E GEOMETRIA MOLECOLARE

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

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

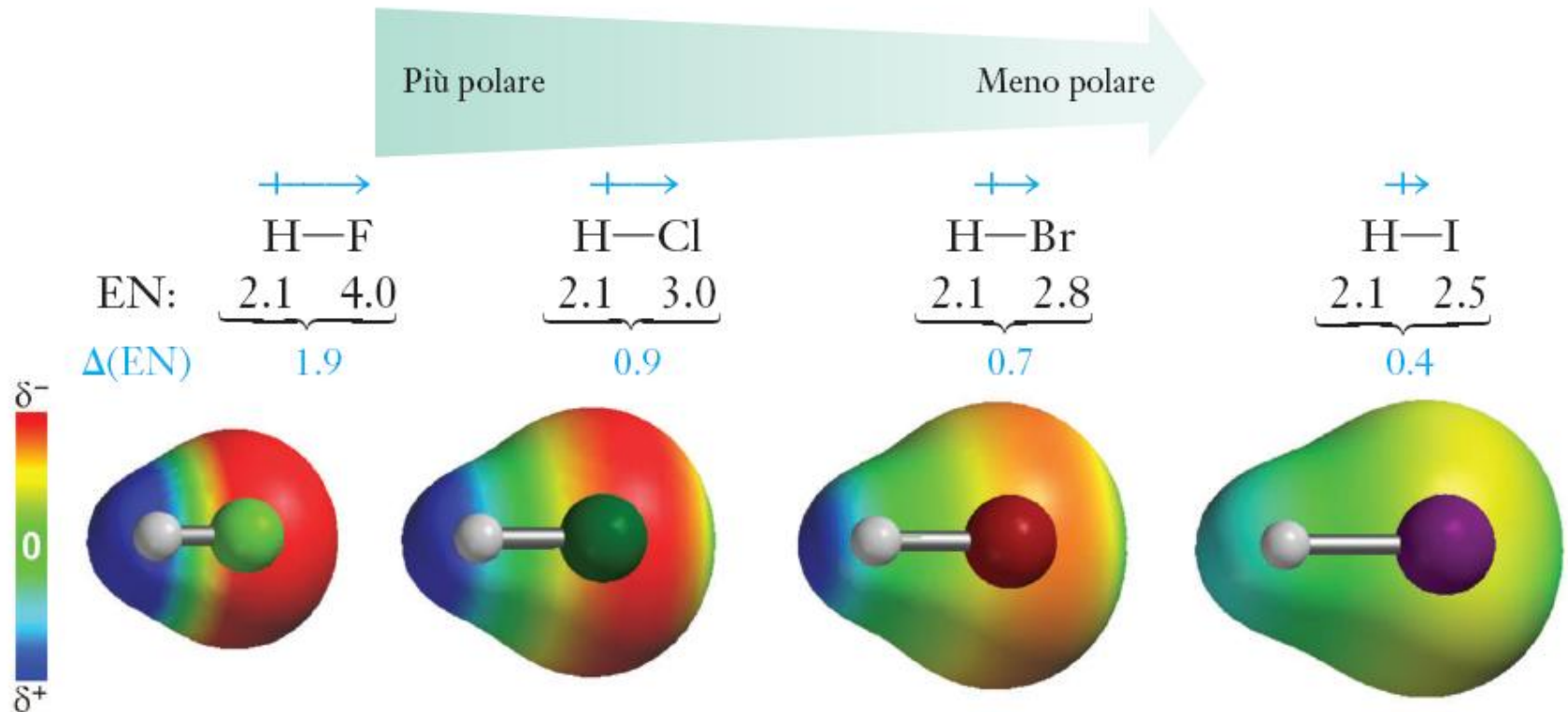
LA GEOMETRIA DELLE MOLECOLE





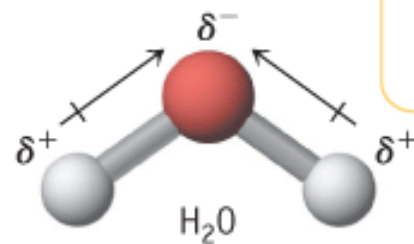
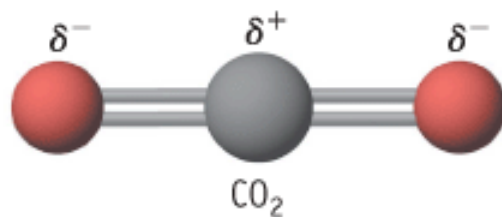
Dipolo elettrico = sistema costituito da due cariche puntiformi uguali e di segno opposto, $+\delta$ e $-\delta$, poste alla distanza r l'una dall'altra

Momento dipolare elettrico (momento di dipolo) μ = entità del dipolo elettrico misurabile sperimentalmente

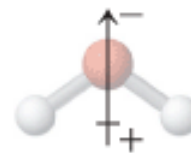


LA POLARITA' DELLE MOLECOLE POLIATOMICHE

Nessun momento
di dipolo risultante

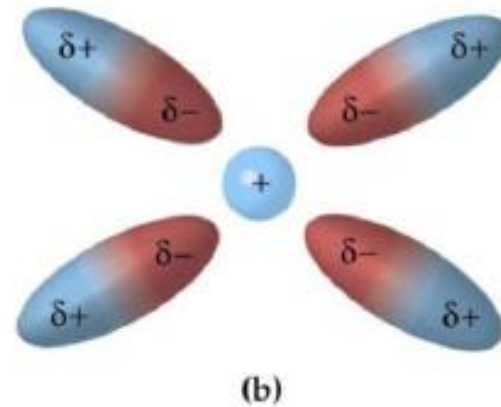
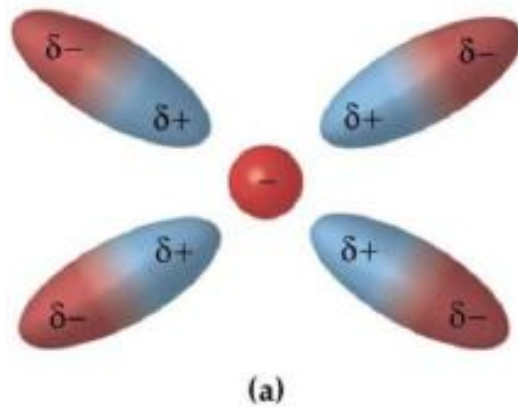


Dipolo risultante
 $\mu = 1.85\text{D}$

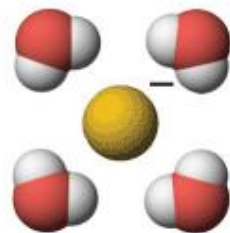


INTERAZIONI IONE-DIPOLO

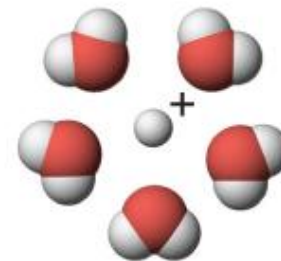
L'attrazione elettrostatica si stabilisce fra la carica propria dello ione e il dipolo delle molecole circostanti. Quest'ultimo può essere permanente, nel caso di molecole polari, oppure indotto dalla carica stessa dello ione



Interazioni tra molecole polari e (a) uno ione negativo o (b) uno ione positivo



Un anione circondato dall'acqua



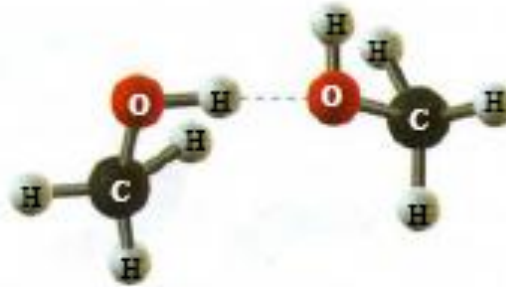
Un catione circondato dall'acqua

LEGAMI A IDROGENO

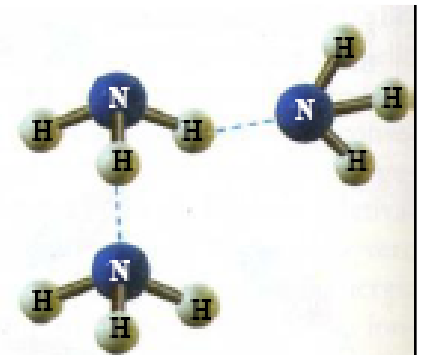
Legame idrogeno = interazione dipolo-dipolo che si instaura tra molecole che contengono un atomo di idrogeno legato ad un atomo piccolo e molto elettronegativo come F, O e N



H₂O



CH₃OH

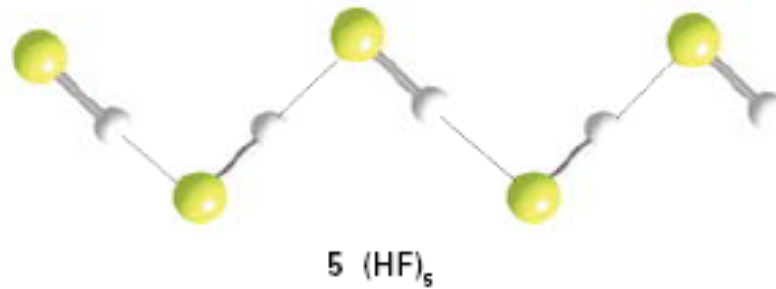


NH₃

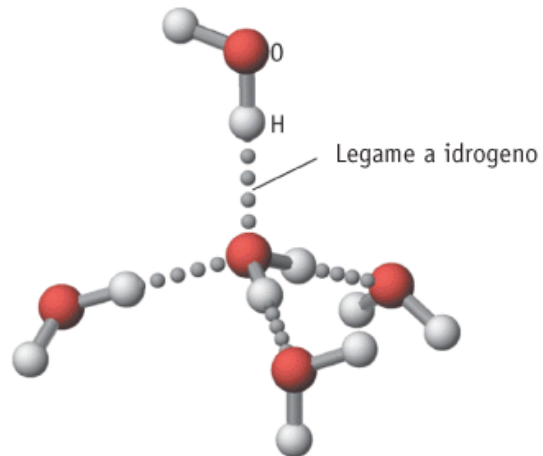
L'atomo di idrogeno legato ha una parziale carica positiva δ^+ e può quindi interagire con atomi molto elettronegativi con elevata densità di carica negativa δ^- come F, O o N.

LEGAMI A IDROGENO

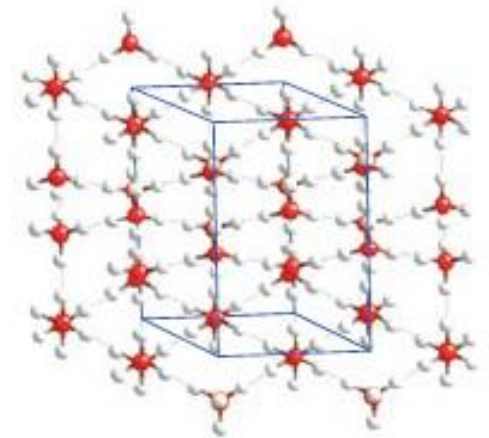
La struttura di **HF**



La struttura di **H₂O**



Il reticolo cristallino
del **ghiaccio**





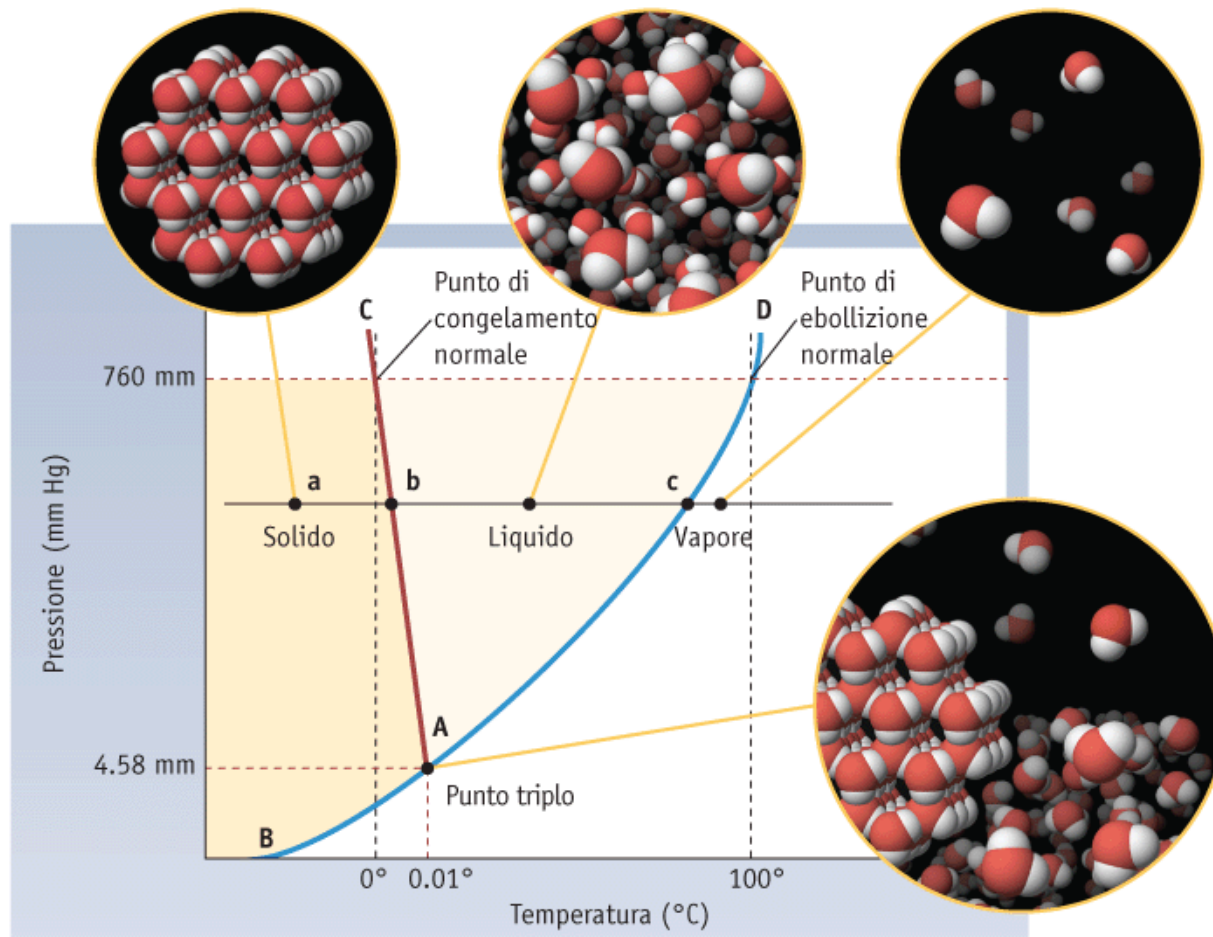
Ghiaccio in acqua liquida



I DIAGRAMMI DI FASE

I diagrammi di fase rappresentano come le fasi di un sistema siano correlate tra loro da variazioni di temperatura e pressione.

IL DIAGRAMMA DI FASE DELL'ACQUA



Si rammenta che nella prova scritta ci sarà almeno una domanda di teoria oltre agli esercizi di stechiometria, per i quali lo svolgimento va accompagnato da spiegazioni esaustive!

Materiale ammesso e richiesto:

Documento identificativo, calcolatrice, tavola periodica, penna

Materiale fornito:

tabelle con costanti di equilibrio, fogli di protocollo

Piattaforma ESSETRE:

iscrizione alla prova scritta e alla prova orale facoltativa; indicazione su intervalli temporali d'iscrizione/luogo/data/orario di inizio delle prove scritte; dettagli su modalità esame/iscrizione/esito/.. si trovano nel file Introduttivo Introduzione al Corso (MOODLE).

Accesso alla prova scritta:

Frequenza ad almeno 2 su 3 esperienze di laboratorio e PARTECIPAZIONE AL test FINALE DI LABORATORIO



In bocca al lupo!

CREPI!

