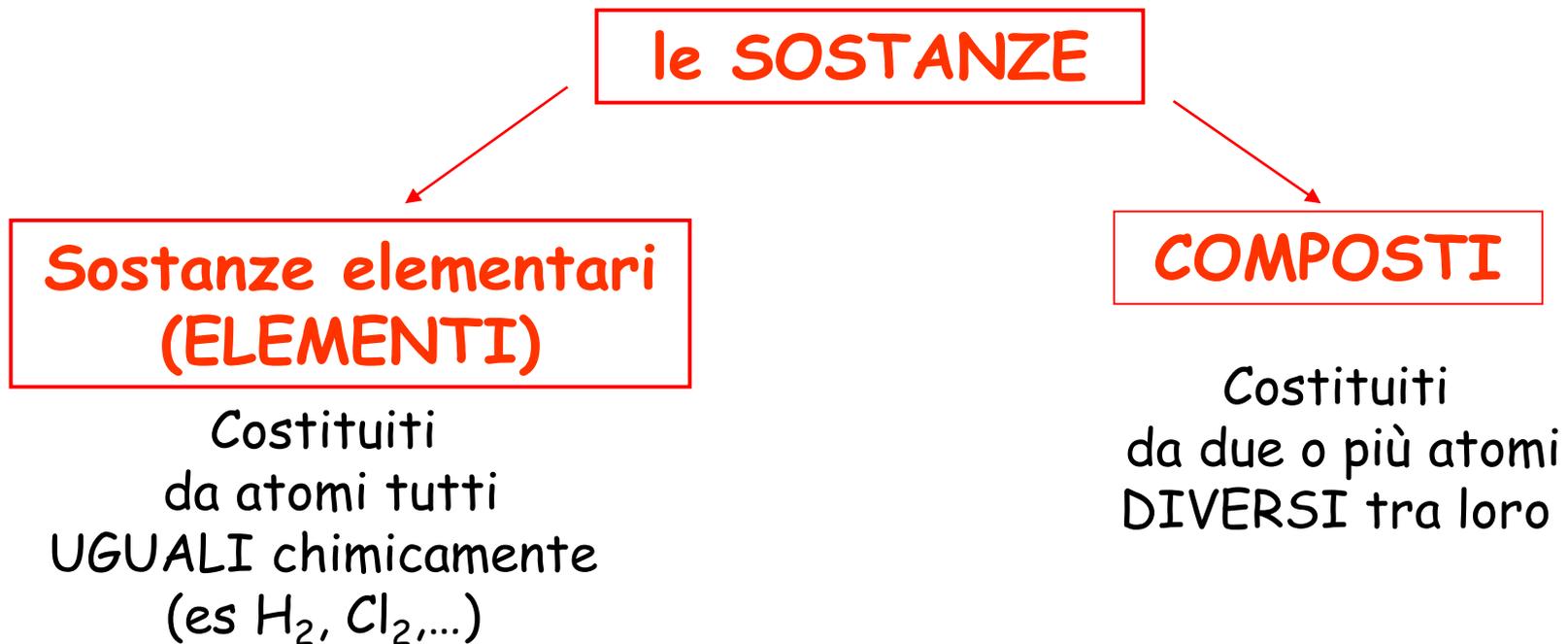


Il legame chimico



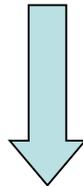
In natura gli atomi sono solitamente legati ad altri in unità più complesse chiamate MOLECOLE che, se aggregate fra loro, costituiscono quello che macroscopicamente percepiamo come "materia",



Il legame chimico

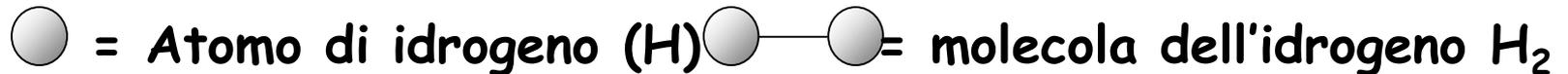
Legame chimico: rappresenta l'insieme delle forze che tengono uniti un atomo ad un altro e si forma sempre fra almeno due atomi

Energia di Legame: rappresenta l'energia necessaria a rompere il Legame chimico

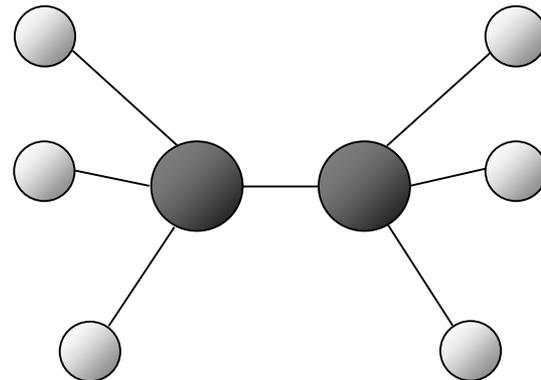
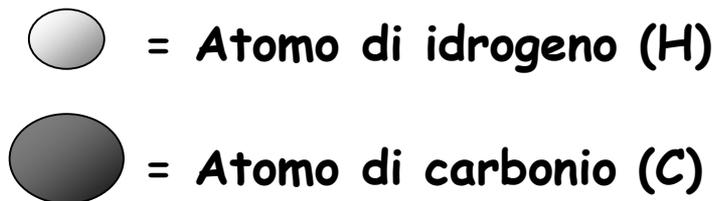


Gli atomi formano legami chimici per raggiungere una **configurazione elettronica più stabile**, generalmente la configurazione elettronica del gas nobile più vicino, quindi l'**ottetto** (gas nobili: inerzia chimica).

Nelle molecole costituite da due atomi (molecole biatomiche) come, per esempio, la molecola dell'idrogeno H_2 , un solo legame è sufficiente a tenere insieme i due atomi.



Nelle molecole costituite da più atomi (**molecole poliatomiche**) il numero di legami è maggiore. Ad esempio, nella molecola di **etano** (C_2H_6) costituita da otto atomi, ci sono sette legami: uno fra i due atomi di Carbonio e sei fra gli atomi di Carbonio e Idrogeno.



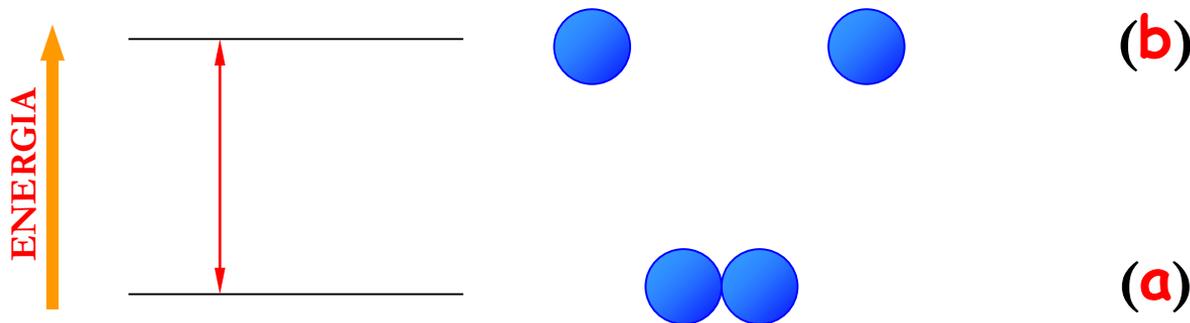
Molecola dell'etano
(C_2H_6)

Il legame chimico ed ENERGIA

Quando formiamo legami chimici, gli atomi raggiungono una situazione di **MAGGIORE STABILITA'**

L'energia totale del sistema costituito dai due atomi legati insieme **(a)** è minore dell'energia totale del sistema costituito dai due atomi separati **(b)**.

Si definisce **energia di legame** la quantità di energia necessaria per rompere una mole di legami del tipo considerato. Tale energia è misurata in **KJ·mol⁻¹**.



Legame chimico PERCHE'?

Gli atomi formano legami chimici perché la molecola risultante è più stabile (ha energia minore) degli atomi isolati

FORMAZIONE legami → viene RILASCIATA energia

ROTTURA legami → viene ASSORBITA energia

COME?

DONANDO,
ACCETTANDO o
CONDIVIDENDO
elettroni

TIPI di LEGAME

Legame COVALENTE

è basato sulla **CONDIVISIONE** degli elettroni di valenza da parte di due atomi

Legami elettrostatici IONICO

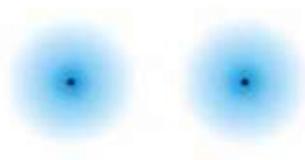
nasce dalle forze elettrostatiche **ATTRATTIVE** che si esercitano tra IONI di **CARICA OPPOSTA**

Legame METALLICO

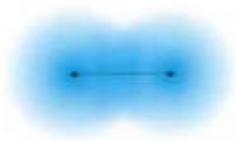
è basato sulla forza di coesione esercitata dagli **elettroni di valenza** liberi di muoversi in un reticolo di cationi

MODELLI di LEGAME CHIMICO

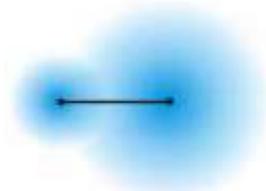
DISTRIBUZIONE STATISTICA della CARICA ELETTRICA



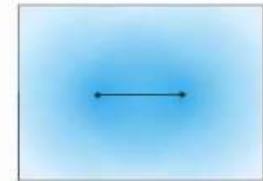
ATOMI ISOLATI



Legame
COVALENTE

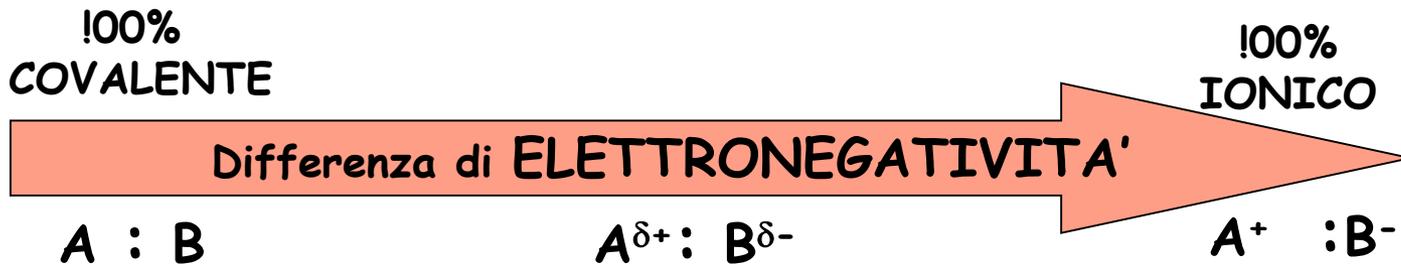


Legame
IONICO



Legame
METALLICO

LEGAME CHIMICO: CHE TIPO?



Due atomi con
ELETTRONEGATIVITA'
UGUALE
($\Delta\chi < 0,4$)



Legame COVALENTE PURO
(condivideranno gli elettroni del legame in modo equivalente)

Due atomi con
ELETTRONEGATIVITA'
un po' diversa
($0,4 < \Delta\chi < 1,7$)



Legame COVALENTE-POLARE
(condivideranno gli elettroni del legame in modo NON equivalente → cariche parziali)

Due atomi con
ELETTRONEGATIVITA'
molto DIVERSA
($\Delta\chi > 1,7-1,9$)



Legame IONICO
(provocano il trasferimento di un elettrone con creazione di **CARICHE NETTE**)

LEGAME IONICO

LEGAME IONICO

Un **legame ionico** si forma fra atomi che hanno una **forte differenza di elettronegatività**, cioè la cui differenza dei valori di elettronegatività è uguale o superiore a **1,7-1,9**

Fra due ioni con cariche elettriche opposte si stabilisce un'attrazione di tipo elettrostatico che li tiene uniti

I composti contenenti legami ionici sono chiamati **composti ionici** (NaCl, MgCl₂, ecc).

Un esempio di composto ionico è il **cloruro di sodio** (NaCl).

Il **sodio** (Na) appartiene al I gruppo e, quindi, ha un solo elettrone (e^-) esterno; la sua elettronegatività è **0,9**, un valore basso.

Il **cloro** (Cl) appartiene al VII gruppo e ha, perciò, sette elettroni esterni; la sua elettronegatività è **3**, un valore alto.

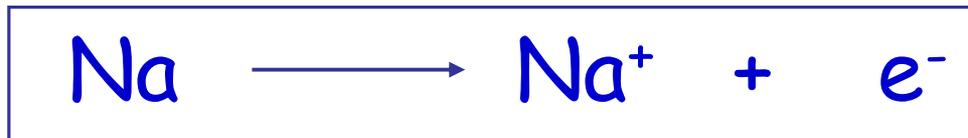
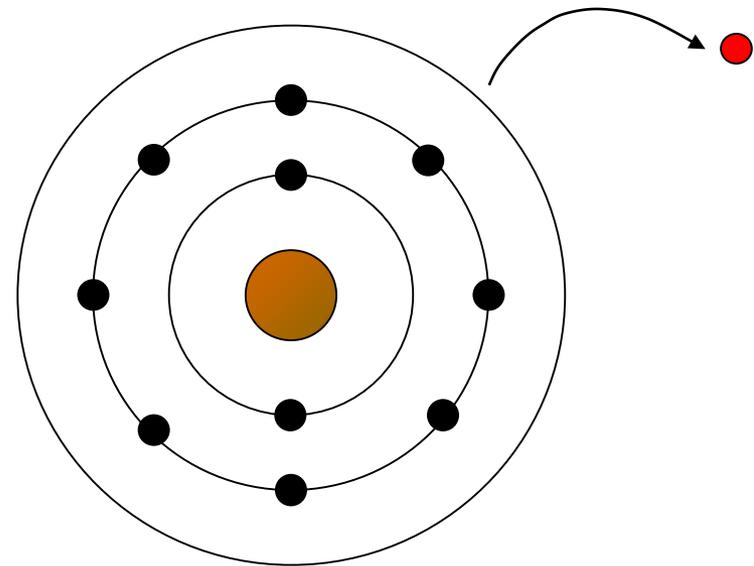
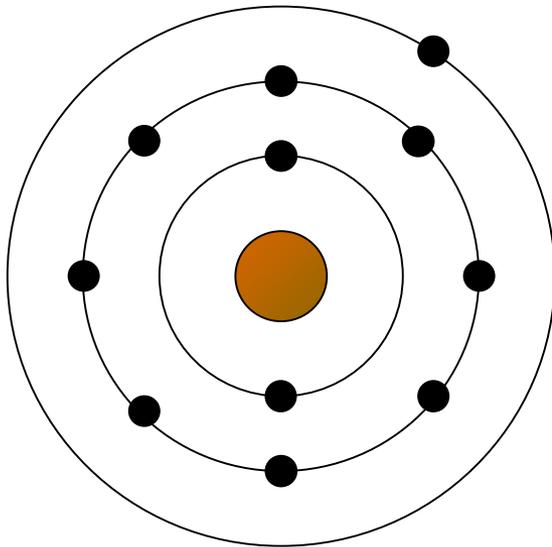
La differenza di elettronegatività ($3 - 0,9 = 2,1$) fra i due elementi supera il valore standard di 1,7, quindi fra i loro atomi si forma un legame ionico e l'elettrone dell'atomo di sodio passa a quello di cloro.

- 1 - L'atomo di sodio perde il suo elettrone esterno e diventa uno ione positivo
- 2 - L'atomo di cloro acquista l'elettrone perduto dal cloro e diventa ione negativo
- 3 - I due ioni, avendo cariche elettriche di segno opposto, si attirano e restano uniti

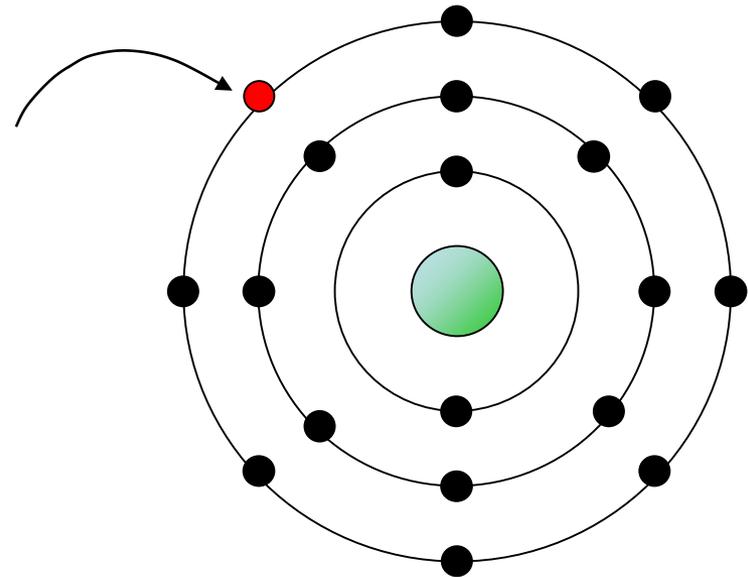
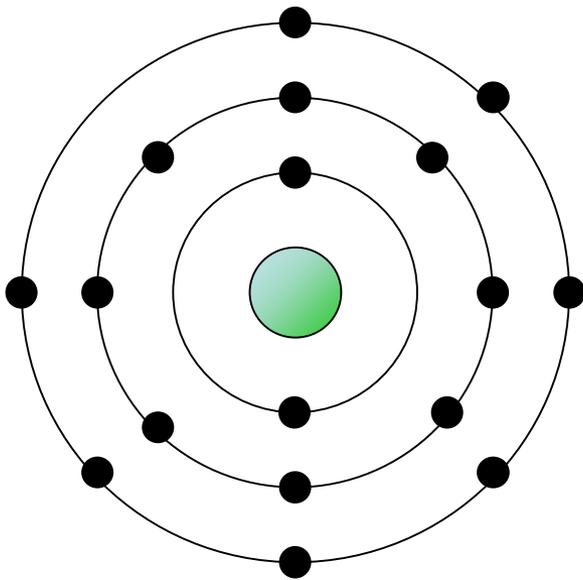
Formazione del legame ionico nel cloruro di sodio (NaCl)

1 - L' atomo di sodio perde il suo elettrone esterno e diventa uno **IONE POSITIVO**

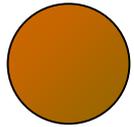
 = Atomo di sodio (Na)



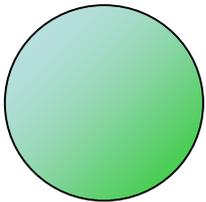
2 - L'atomo di cloro acquista l'elettrone perduto dal sodio e diventa
IONE NEGATIVO



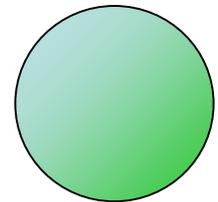
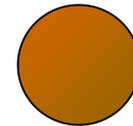
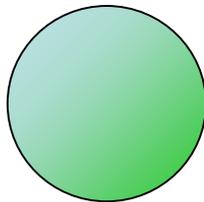
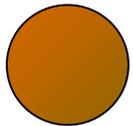
3 - I due ioni, avendo cariche elettriche di segno opposto
si attirano e restano uniti



= Atomo di sodio (Na)

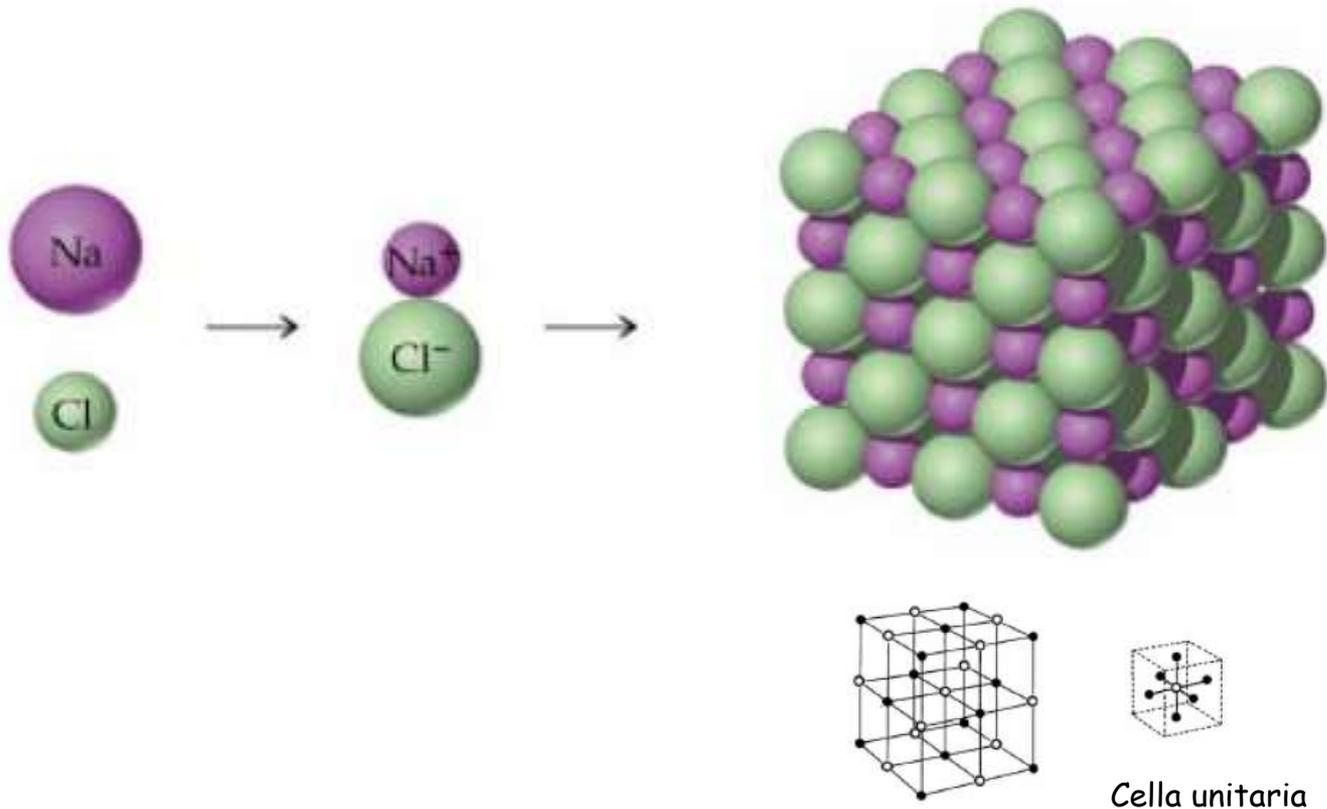


= Atomo di cloro (Cl)



CARATTERISTICHE DEI COMPOSTI IONICI

- ➔ I composti ionici sono tutti solidi a temperatura ambiente
- ➔ Hanno in genere punti di fusione elevati e punti di ebollizione ancora più elevati, per cui è difficile farli passare allo stato di vapore
- ➔ Ciò indica che l'attrazione fra gli ioni è forte, per cui occorre molta energia per separarli
- ➔ Sono duri, ma fragili
- ➔ Sono **SOLUBILI in acqua e in solventi POLARI**, insolubili in solventi apolari
- ➔ Sono isolanti allo stato solido, conduttori allo stato fuso



Disposizione degli ioni Na^+ e Cl^- in modo da formare un **RETICOLO CRISTALLINO** tridimensionale in cui sono minime le forze di repulsione tra ioni della stessa carica e massime le forze attrattive tra ioni di carica opposta

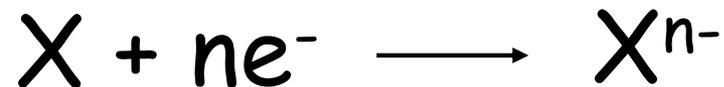
L'**energia liberata** all'atto della formazione del **RETICOLO CRISTALLINO** per effetto dell'interazione elettrostatica degli ioni positivi con tutti gli ioni negativi del cristallo ,e viceversa, prende il nome di

ENERGIA RETICOLARE

L'energia reticolare dipende dalla natura degli ioni che compongono il cristallo:

- aumenta all' aumentare della carica degli ioni
- aumenta al diminuire delle loro dimensioni

REQUISITI per la formazione del LEGAME IONICO



M= BASSA

energia di ionizzazione

X= ELEVATA

affinità elettronica

BASSA energia di ionizzazione:

possono facilmente dare

CATIONI

Na⁺, K⁺, ...
Mg²⁺, ...
Al³⁺

atomi singoli

NH₄⁺, ...

raggruppamenti
di atomi

ELEVATA affinità elettronica:

possono facilmente dare

ANIONI

F⁻, Cl⁻, ...

atomi singoli

SO₄²⁻, NO₃⁻
N₃⁻, SiO₄⁴⁻

raggruppamenti
di atomi

LEGAME COVALENTE

LEGAME COVALENTE

Il legame covalente si forma fra atomi la cui differenza dei valori di elettronegatività non è maggiore di 1,7

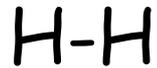
I due atomi **CONDIVIDONO** gli elettroni di legame

Gli elettroni che vengono messi in comune sono elettroni spaiati.

Quando i due atomi si avvicinano a sufficienza, avviene una parziale sovrapposizione dei due orbitali atomici in cui si trovano gli elettroni spaiati: i due orbitali atomici si compenetrano l'un l'altro in una certa regione di spazio, che apparterrà contemporaneamente ad entrambi gli atomi (**orbitale molecolare**) e di conseguenza gli elettroni apparterranno ai due atomi

LEGAME COVALENTE

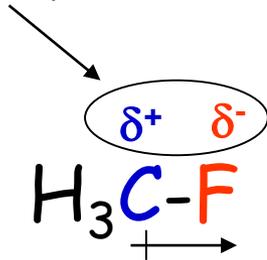
Il legame covalente è il legame chimico più forte e si distinguono due tipi di legame covalente:



Elettroni
simmetricamente
condivisi

Legame covalente
PURO (o apolare)

Cariche parziali



Elettroni
NON simmetricamente
condivisi

Legame covalente
POLARE

La polarizzazione generata
dal fuoro elemento più
elettronegativo crea un
momento di dipolo

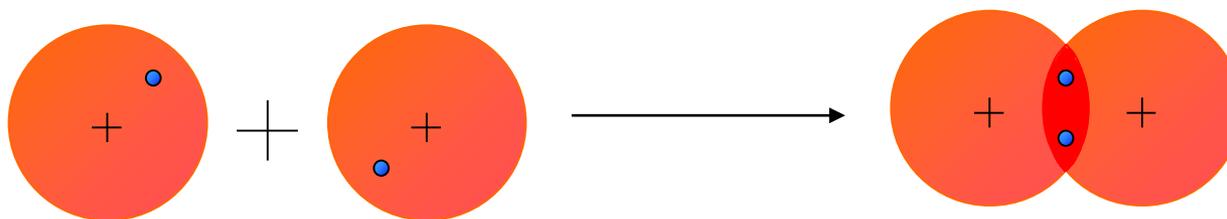
IL LEGAME COVALENTE PURO

Un legame covalente è detto "puro" quando si forma fra atomi con lo stesso valore di elettronegatività, oppure valori molto vicini

In questo caso, gli elettroni che vengono messi in comune fra i due atomi vengono attratti con la stessa forza da entrambi i nuclei e, perciò, vengono ad essere condivisi equamente fra i due atomi (c'è una distribuzione simmetrica della nube elettronica)

Es : la molecola dell'idrogeno (H_2) o del cloro (Cl_2)

MOLECOLA dell' idrogeno (H₂)

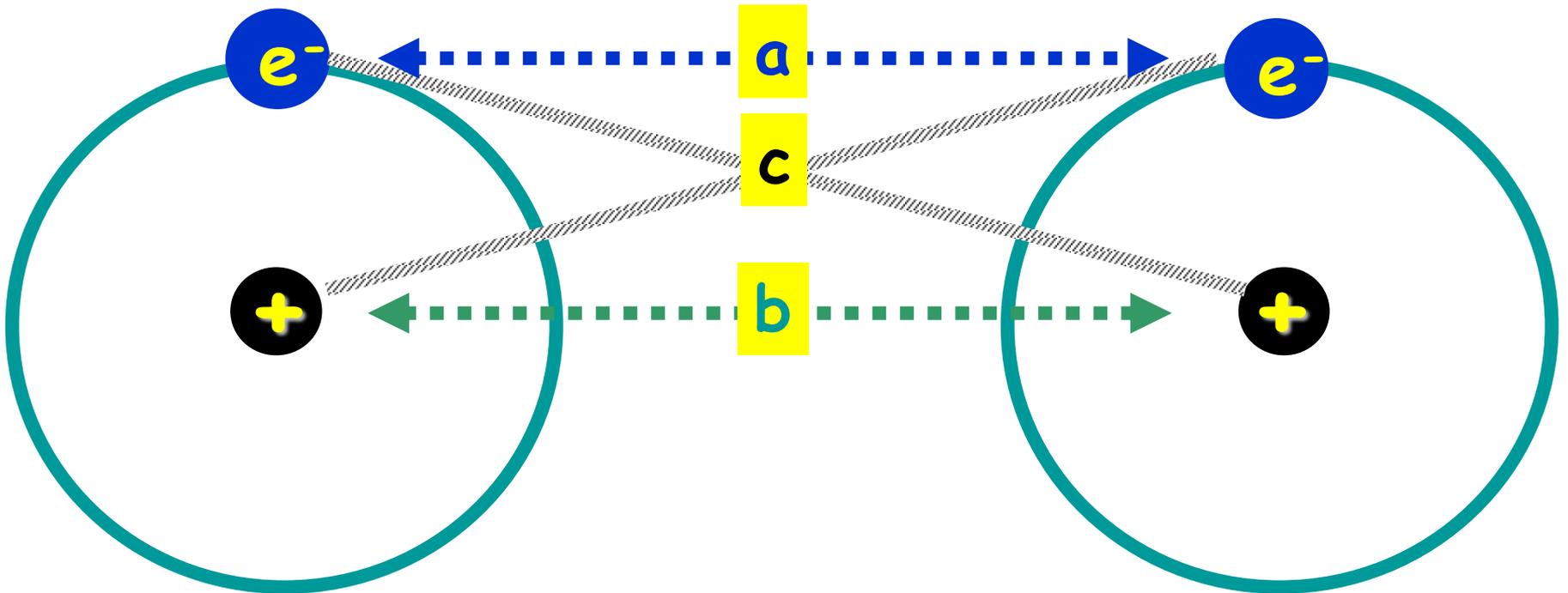


Fra due atomi di idrogeno agiscono forze repulsive ed attrattive.

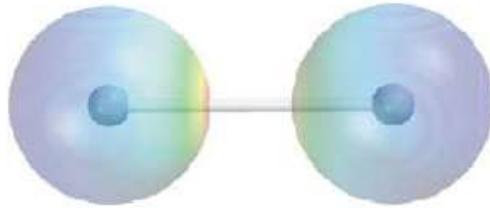
a) repulsione fra elettroni

b) repulsione fra nuclei

c) attrazione fra protone ed elettrone di atomi diversi

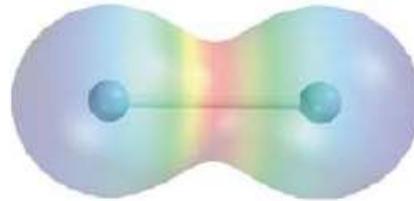


Formazione molecola H_2 : l'aspetto elettronico



Atomi separati: ognuno ha una configurazione

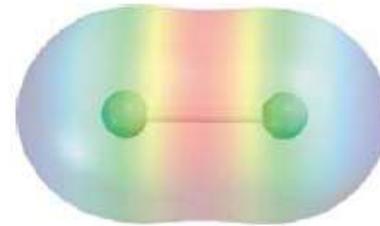
$1s^1$



Quando gli H cominciano ad avvicinarsi i loro orbitali $1s$ cominciano a sovrapporsi.

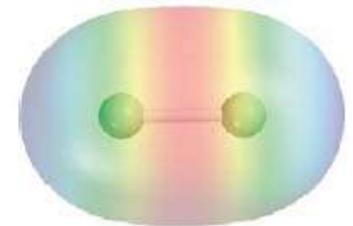
Ogni elettrone comincia a sentire la forza attrattiva dei due nuclei

Gli atomi sono sufficientemente vicini da prodursi una **sovrapposizione significativa degli orbitali $1s$** . La concentrazione di densità elettronica nella regione internucleare diventa visibile

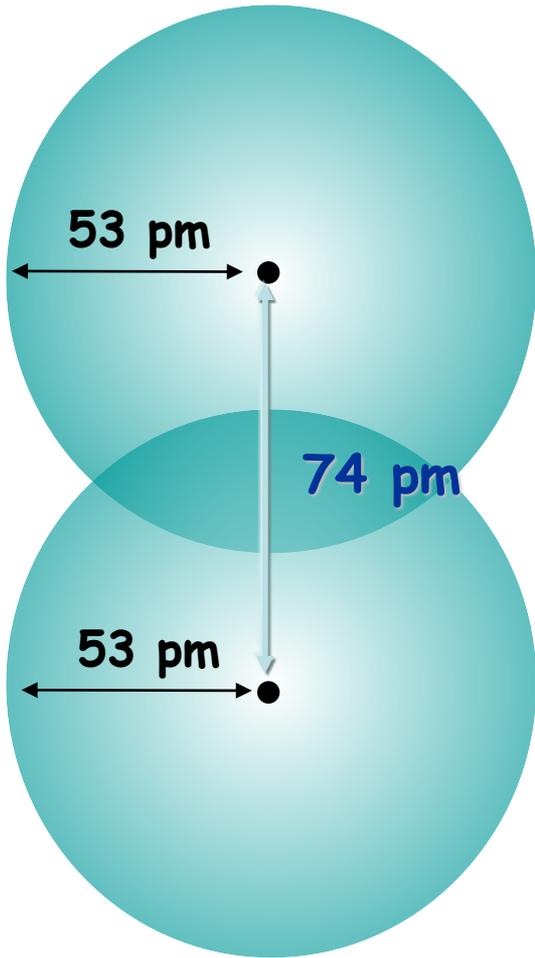


La molecola di H_2 si è formata. La distanza tra i nuclei è di 0.74 \AA . **La densità elettronica nella regione tra i due idrogeni è massima**

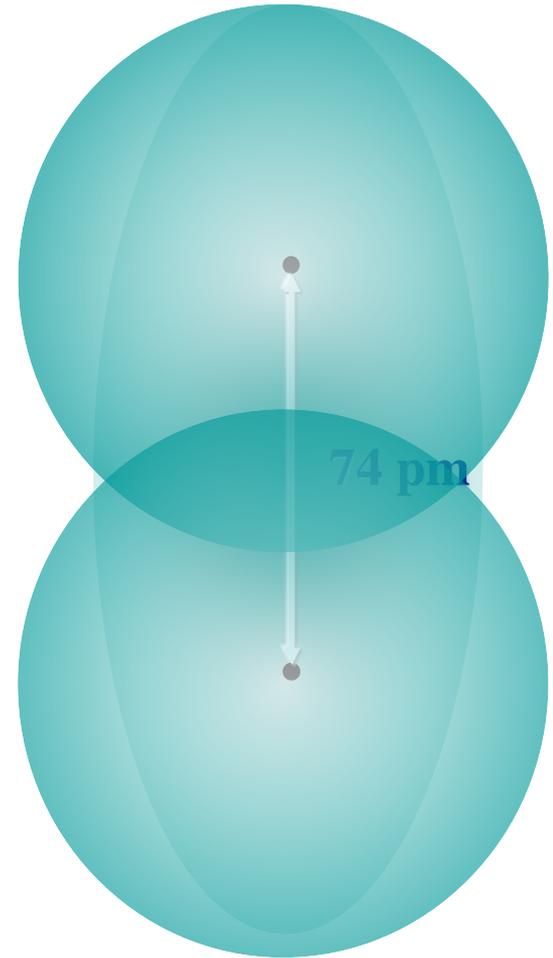
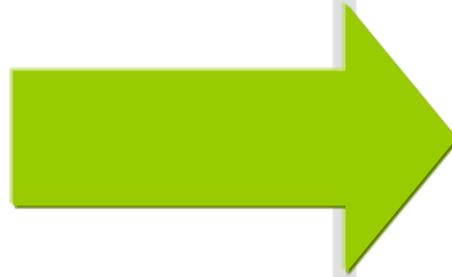
**ORBITALE MOLECOLARE
o ORBITALE DI VALENZA**



Nella molecola di idrogeno la distanza fra i due nuclei è minore della somma dei due raggi atomici



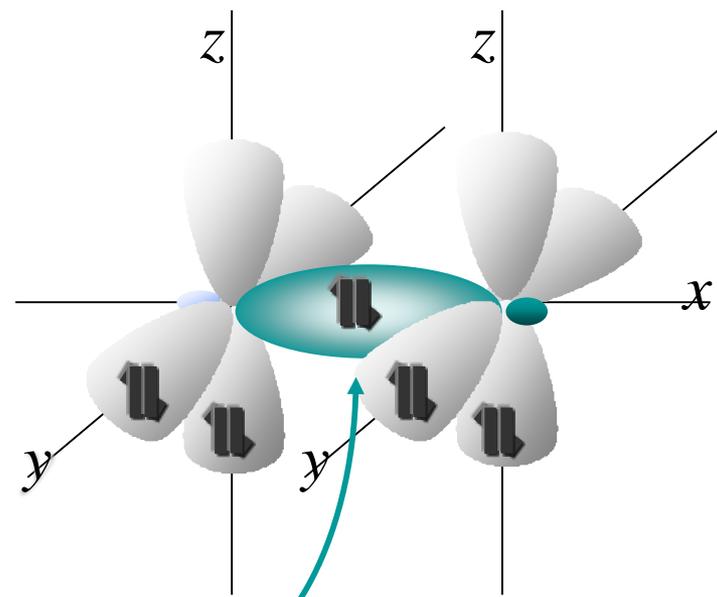
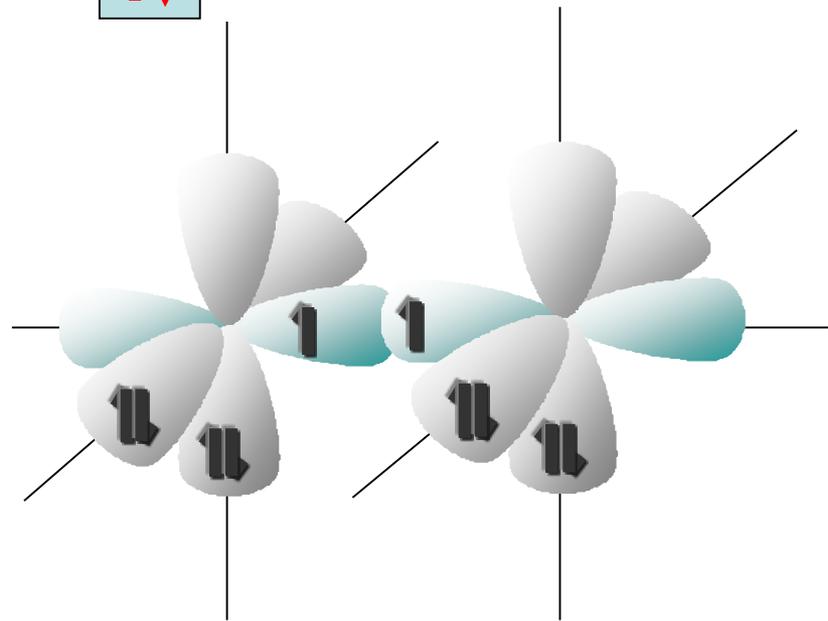
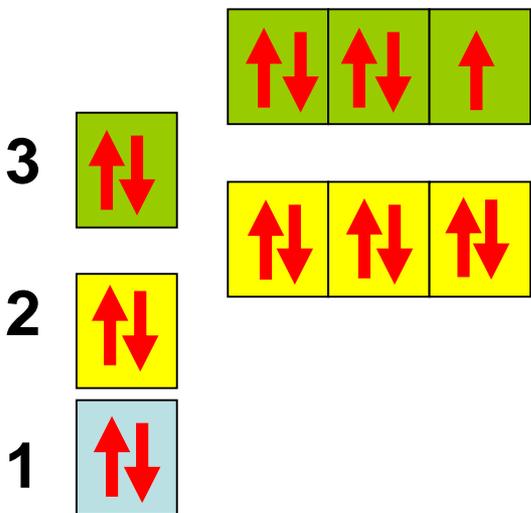
orbitali atomici $1s$



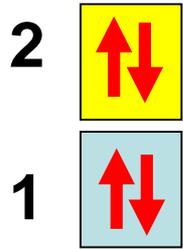
orbitale molecolare s



$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5$

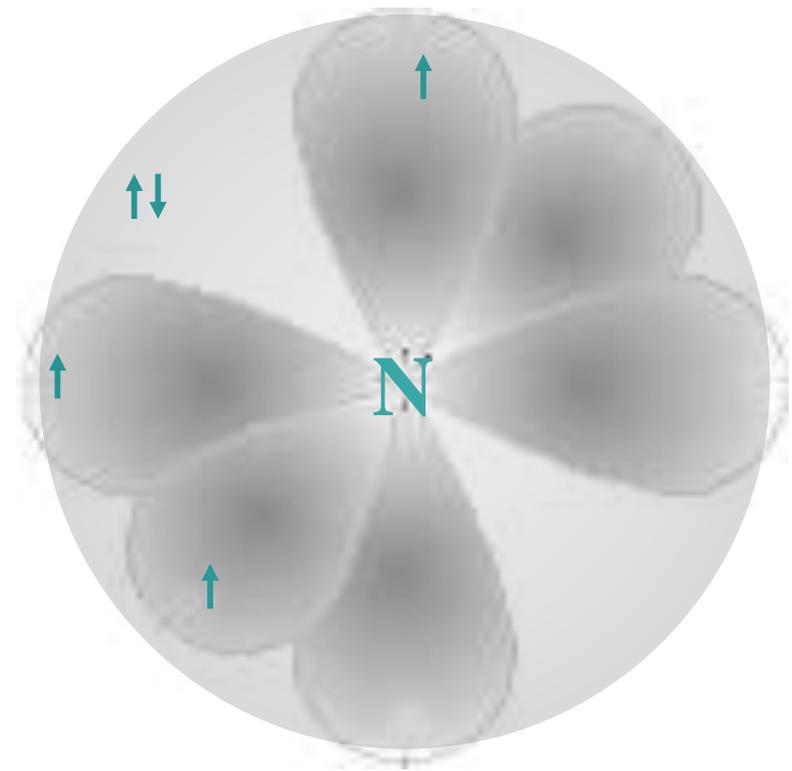
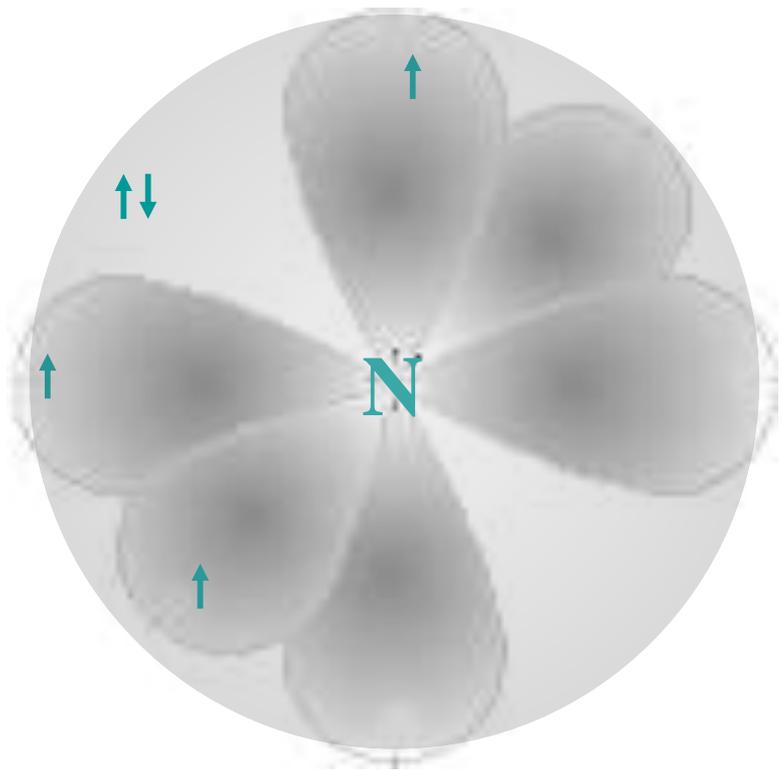


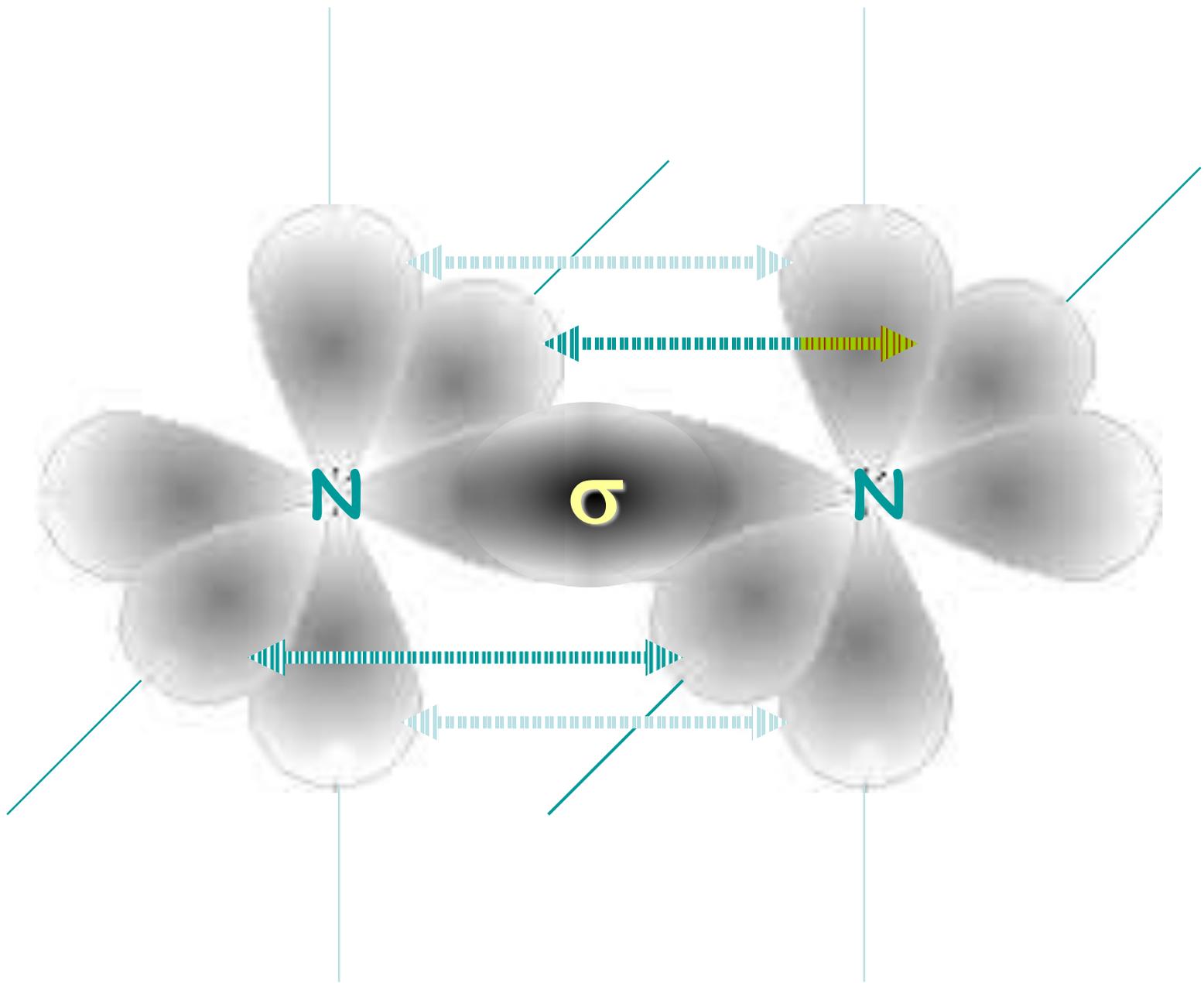
Orbitale σ

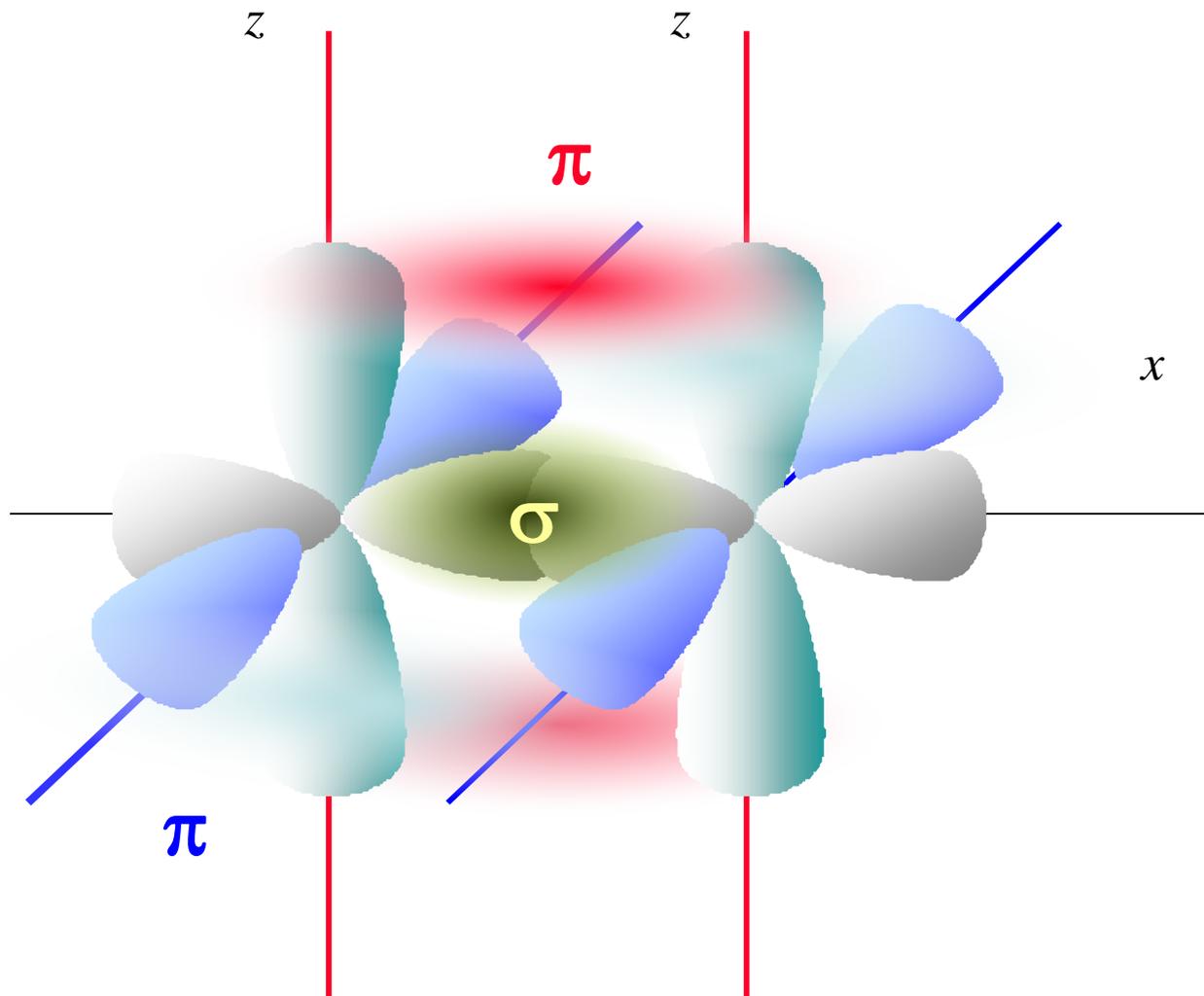


$1s^2, 2s^2 p_x, p_y, p_z$

$1s^2 2s^2 2p^3$

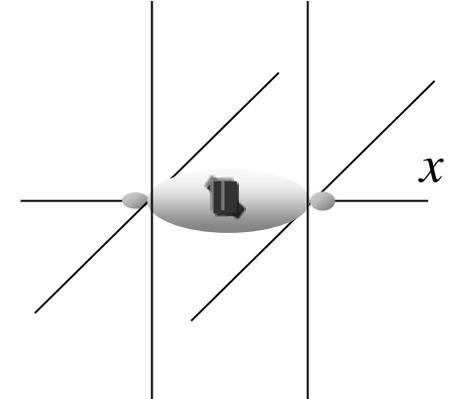
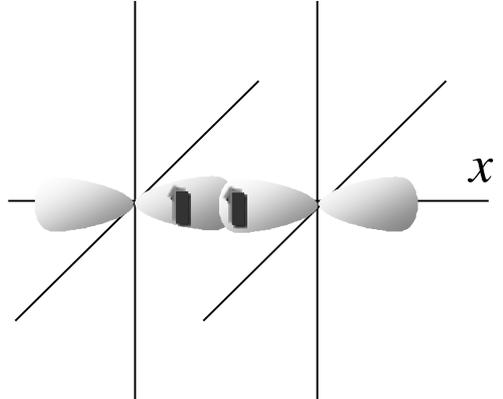




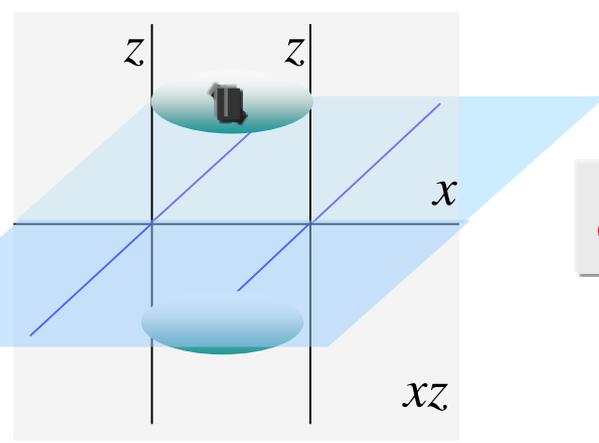
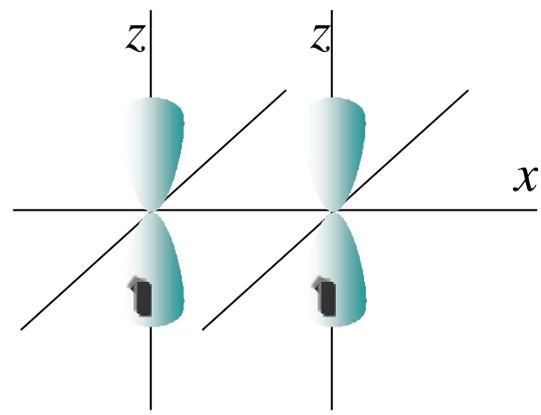


Per sovrapposizione dei tre orbitali p si formano tre orbitali molecolari: un orbitale σ e due orbitali π

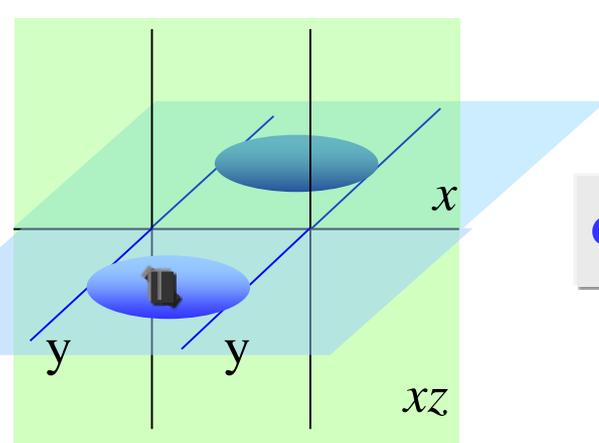
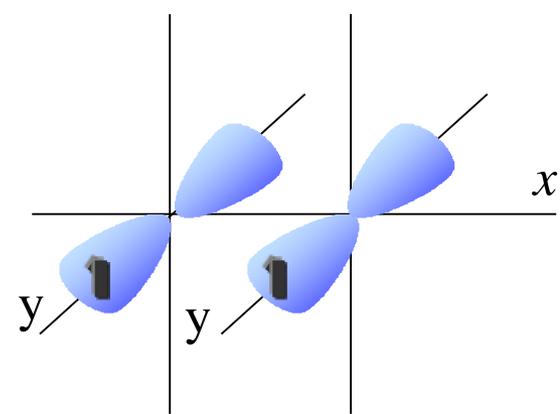
N₂



orbitale σ



orbitale π



orbitale π

Legame σ : orbitale molecolare in cui la probabilità di trovare i due elettroni di legame è massima lungo l'asse congiungente i due nuclei

Legame π : orbitale molecolare in cui la probabilità di trovare i due elettroni di legame è massima nello spazio ortogonale al piano