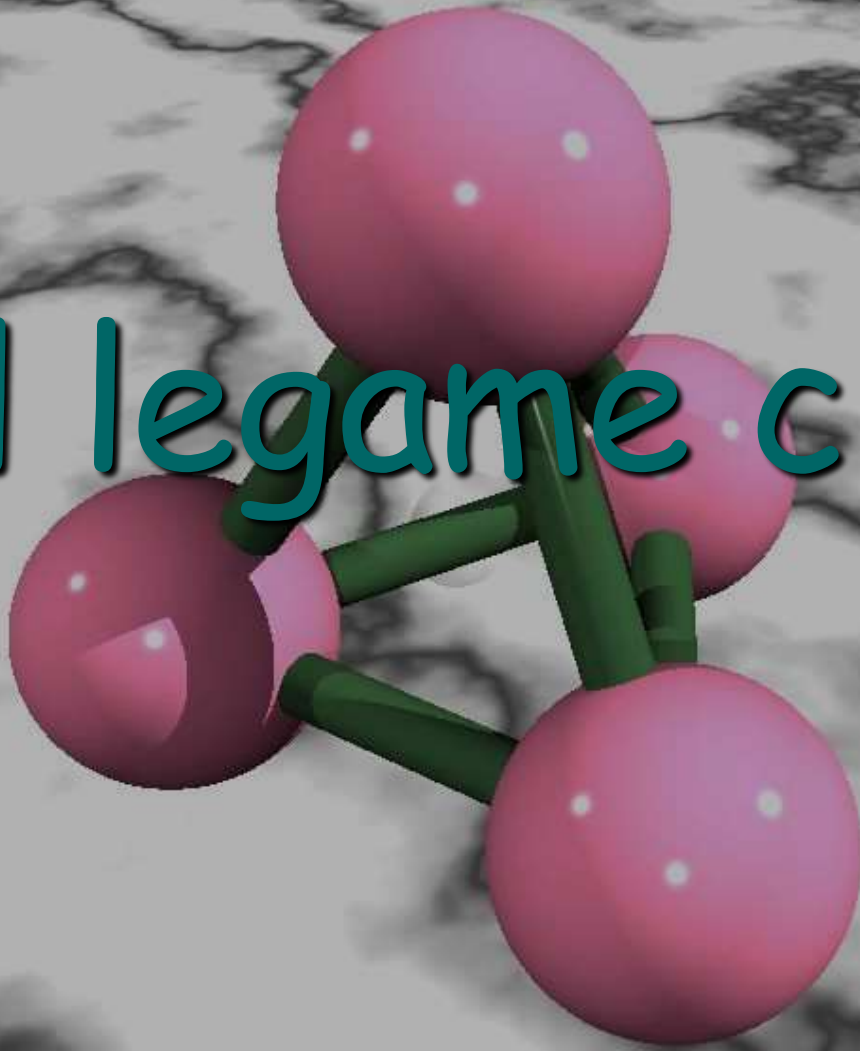
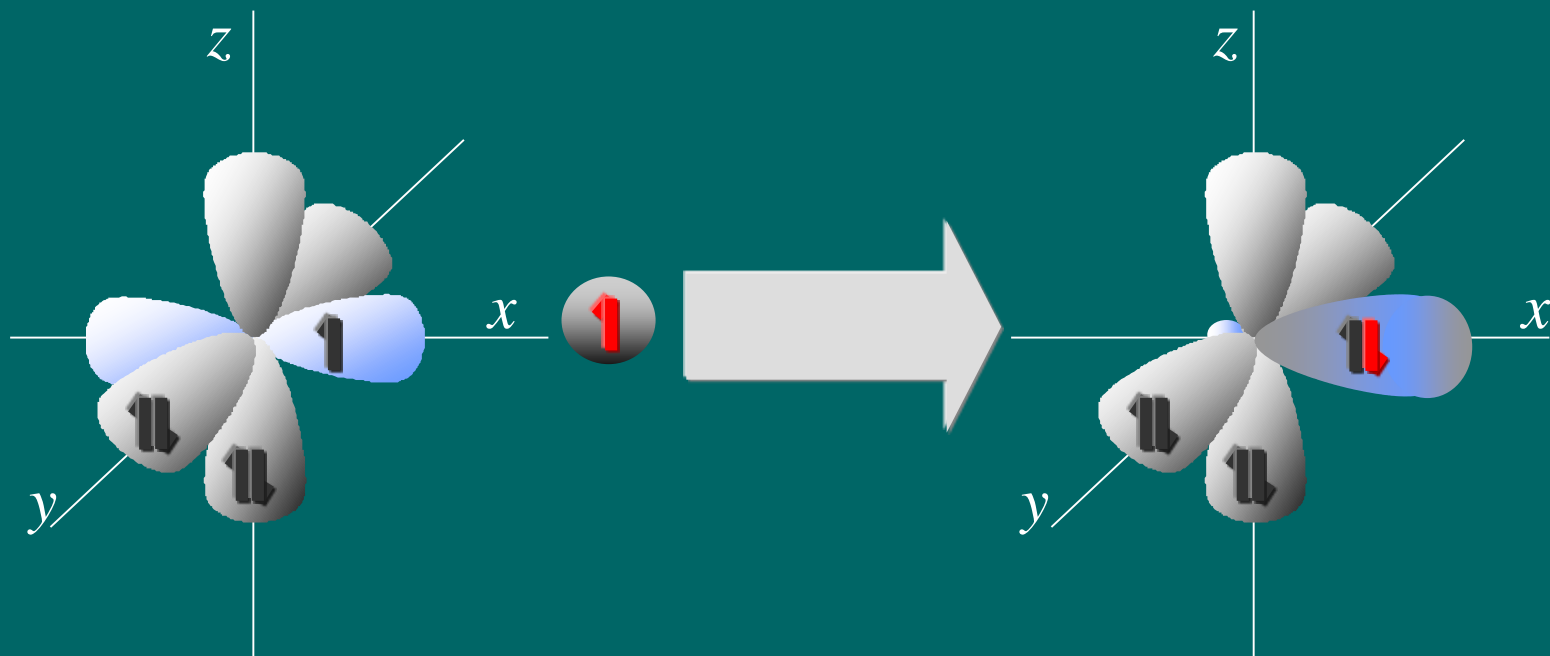
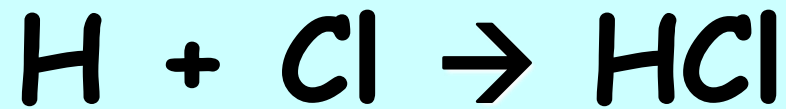


Il legame chimico



1°	2°											3°	4°	5°	6°	7°	8°	
1 H 1s																		2 He 1s ²
3 Li 2s	4 Be 2s ²											5 B 2s ² p	6 C 2s ² p ²	7 N 2s ² p ³	8 O 2s ² p ⁴	9 F 2s ² p ⁵	10 Ne 2s ² p ⁶	
11 Na 3s	12 Mg 3s ²											13 Al 3s ² p	14 Si 3s ² p ²	15 P 3s ² p ³	16 S 3s ² p ⁴	17 Cl 3s ² p ⁵	18 Ar 3s ² p ⁶	
19 K 4s	20 Ca 4s ²	21 Sc 3d,4s ²	22 Ti 3d ² ,4s ²	23 V 3d ³ ,4s ²	24 Cr 3d ⁵ ,4s	25 Mn 3d ⁵ ,4s ²	26 Fe 3d ⁶ ,4s ²	27 Co 3d ⁷ ,4s ²	28 Ni 3d ⁸ ,4s ²	29 Cu 3d ¹⁰ ,4s	30 Zn 3d ¹⁰ ,4s ²	31 Ga 4s ² p	32 Ge 4s ² p ²	33 As 4s ² p ³	34 Se 4s ² p ⁴	35 Br 4s ² p ⁵	36 Kr 4s ² p ⁶	
37 Rb 5s	38 Sr 5s ²	39 Y 4d,5s ²	40 Zr 4d ² ,5s ²	41 Nb 4d ³ ,5s ²	42 Mo 4d ⁵ ,5s	43 Tc 4d ⁵ ,5s ²	44 Ru 4d ⁶ ,5s ²	45 Rh 4d ⁷ ,5s ²	46 Pd 4d ⁸ ,5s ²	47 Ag 4d ¹⁰ ,5s	48 Cd 4d ¹⁰ ,5s ²	49 In 5s ² p	50 Sn 5s ² p ²	51 Sb 5s ² p ³	52 Te 5s ² p ⁴	53 I 5s ² p ⁵	54 Xe 5s ² p ⁶	

Legame della molecola acido cloridrico (HCl)

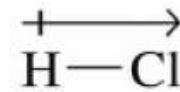
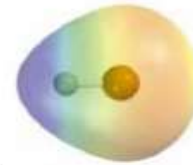
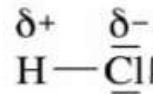
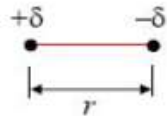


Sappiamo che l'atomo di idrogeno ha un elettrone spaiato nell'orbitale **1s** e l'atomo di cloro ha un elettrone spaiato in uno degli orbitali **3p**.

Polarizzazione legami covalenti

Nel caso di un legame covalente POLARE una molecola biatomica A-B , pur essendo neutra nel suo insieme, ha un'estremità negativa e una positiva: il baricentro delle cariche negative NON coincide con quello delle cariche positive

Nasce un DIPOLO ELETTRICO e la molecola diventa POLARE



Momento dipolare elettrico μ : è un vettore

modulo: $|\mu| = \delta \cdot r$

direzione: asse che passa per i centri di carica

verso: dalla carica positiva alla carica negativa

Unità di misura: **Debye (D)** $1 \text{ D} = 3.3 \times 10^{-30} \text{ Coulomb m}$

Il momento dipolare dà la misura della tendenza di una molecola ad orientarsi sotto l'azione di un campo elettrico (i dipoli si orientano in modo da disporre il loro vettore m parallelamente a quello del campo elettrico, ma con verso opposto)

Polarizzazione legami covalenti e polarità molecole

Nel caso di molecole con più di due atomi, la situazione può essere diversa e dipende:

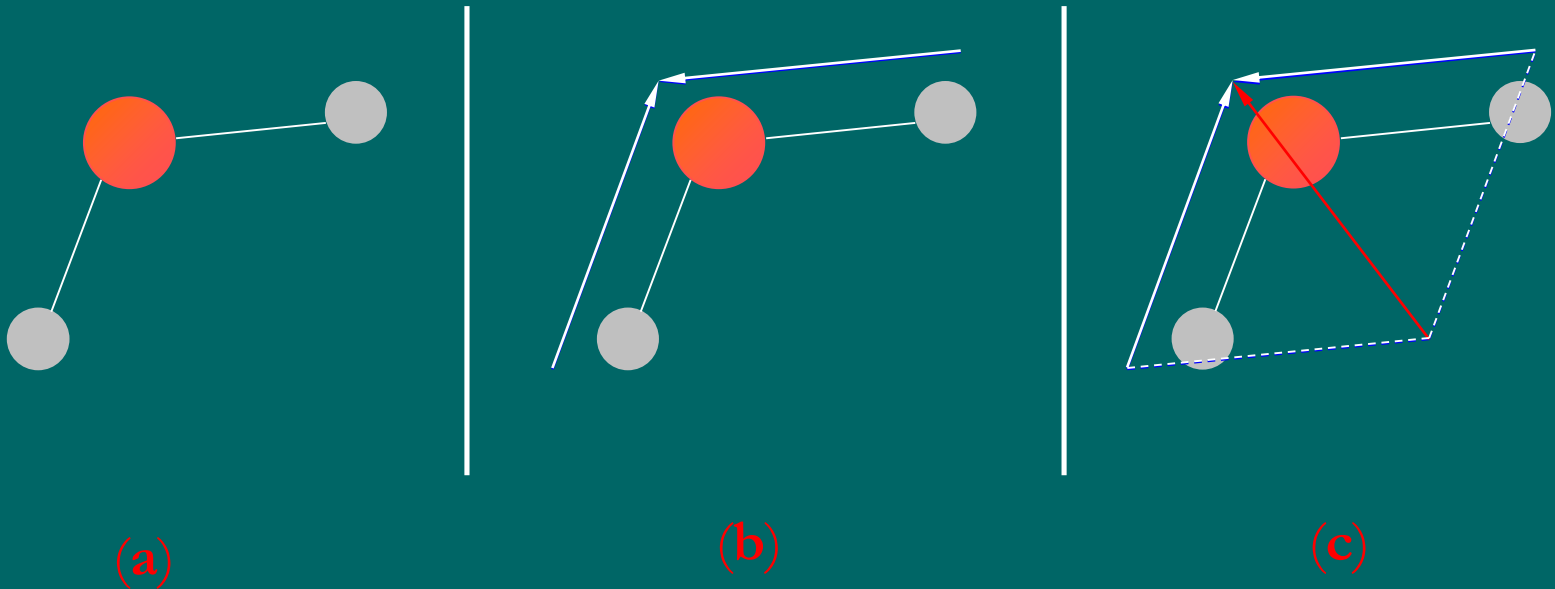
- dalla geometria della molecola,
- dalla somma vettoriale dei momenti dipolari associati ai vari legami polari

Possiamo considerare alcuni esempi:

- la molecola dell'acqua (H_2O)
- la molecola del biossido di carbonio (CO_2)

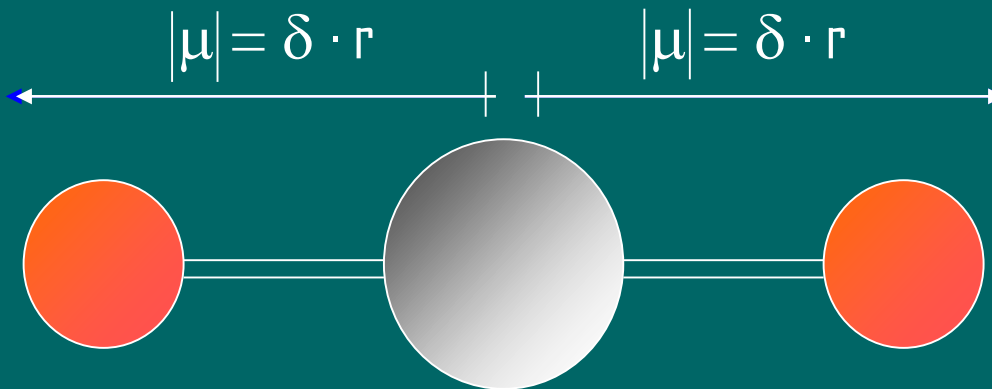
MOLECOLA DELL'ACQUA (H₂O)

Nella molecola dell'acqua i legami O-H formano un angolo di 104,5°



MOLECOLA DEL BIOSSIDO DI CARBONIO (CO₂)

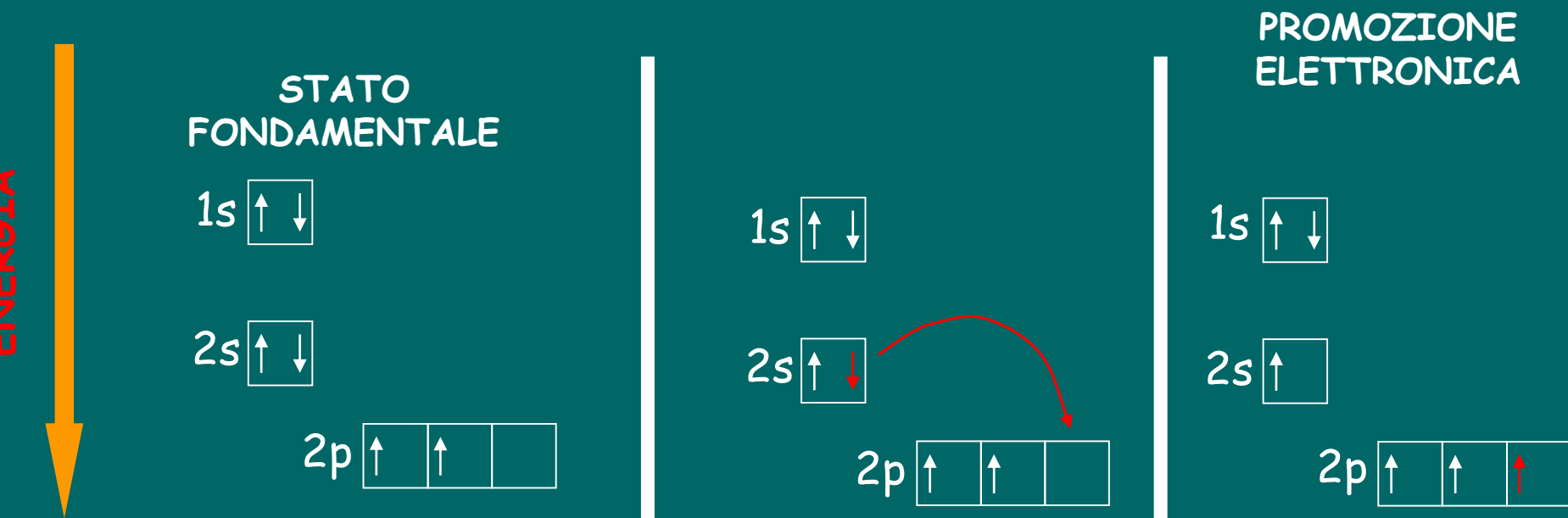
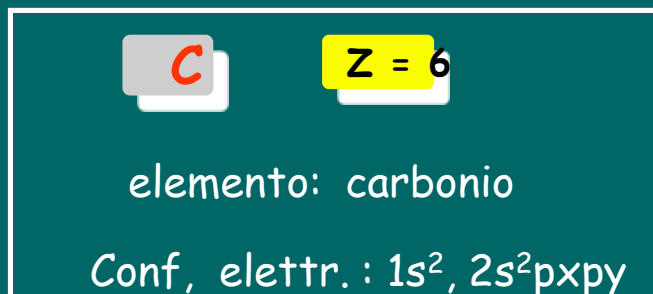
La molecola del biossido di carbonio (CO₂) è lineare, cioè i tre atomi sono allineati su una stessa retta, con l'atomo di carbonio al centro.



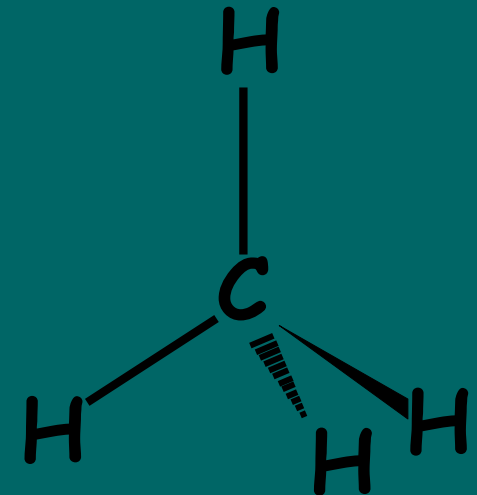
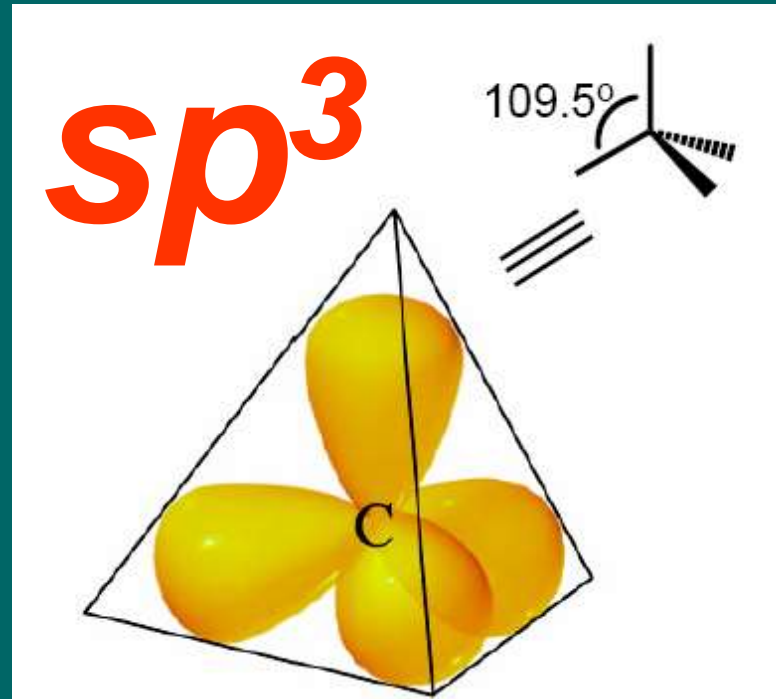
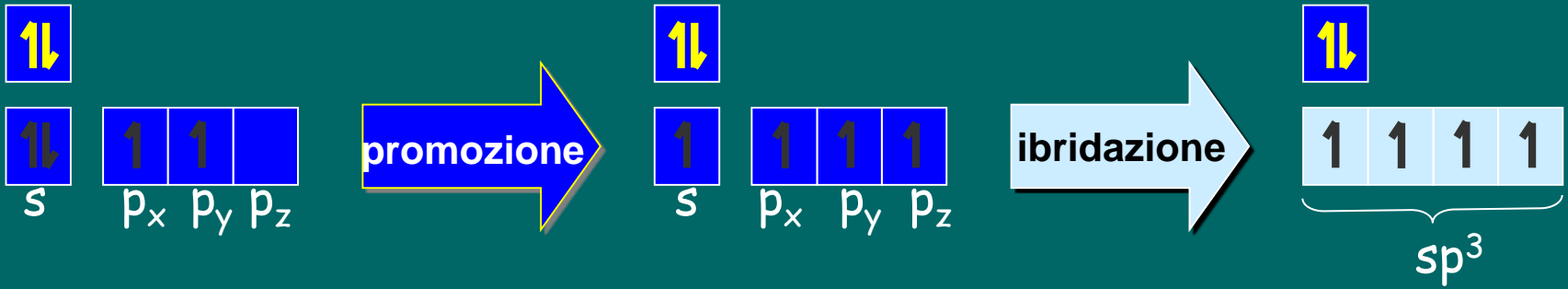
PROMOZIONE DEGLI ELETTRONI

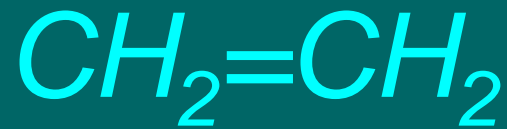
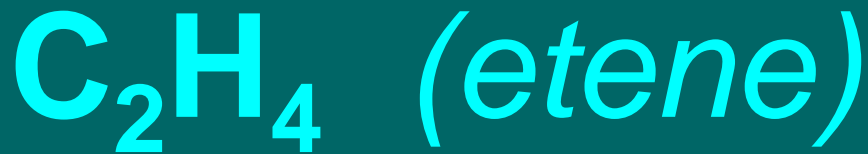
Il carbonio (C), che allo stato fondamentale può formare due legami.

Perché (tranne nel CO) forma sempre 4 legami?



CH₄ (*metano*)





s



p_x

p_y



p_z

promozione



s



p_x

p_y

p_z

ibridazione

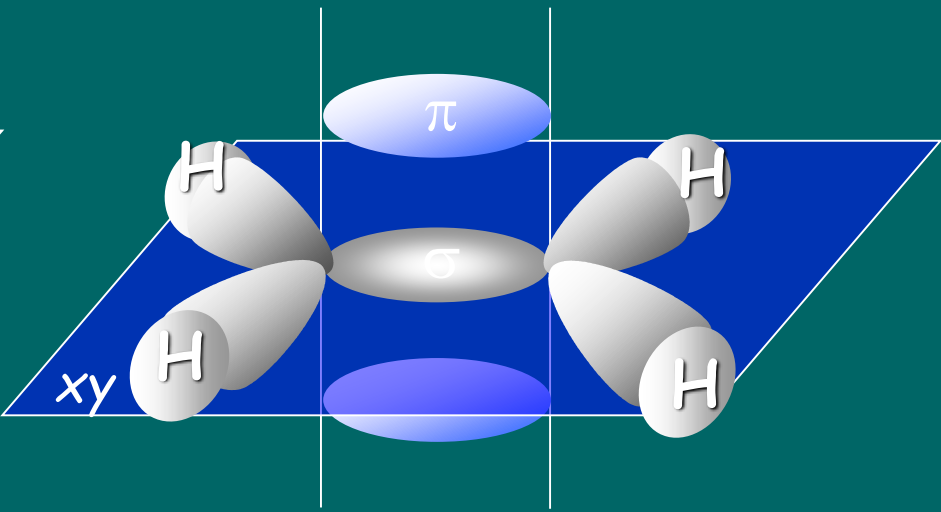
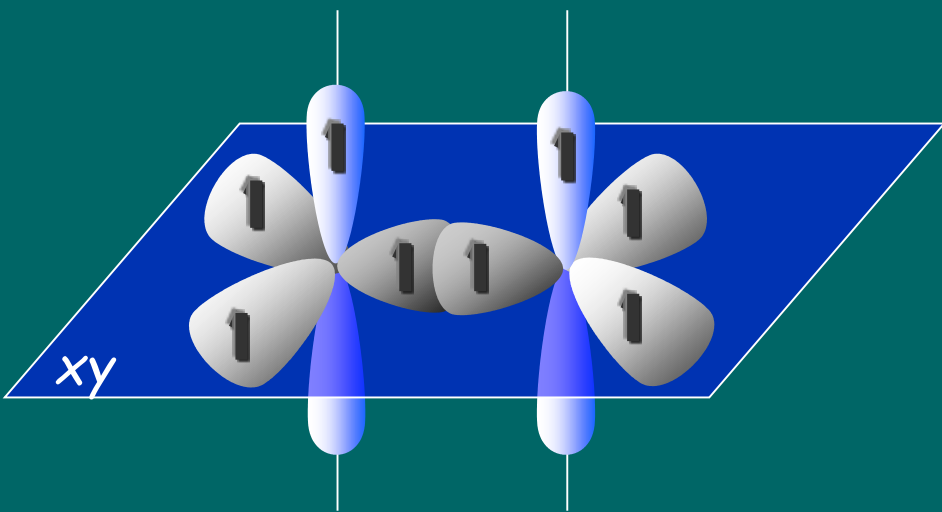
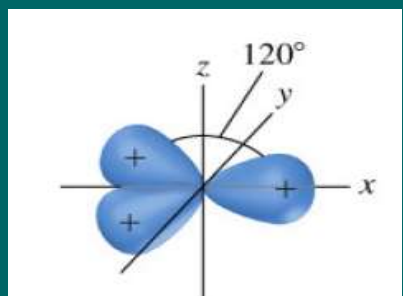


sp^2

p_z



sp^2



C_2H_2 (etino)



s

 p_x p_y p_z

promozione



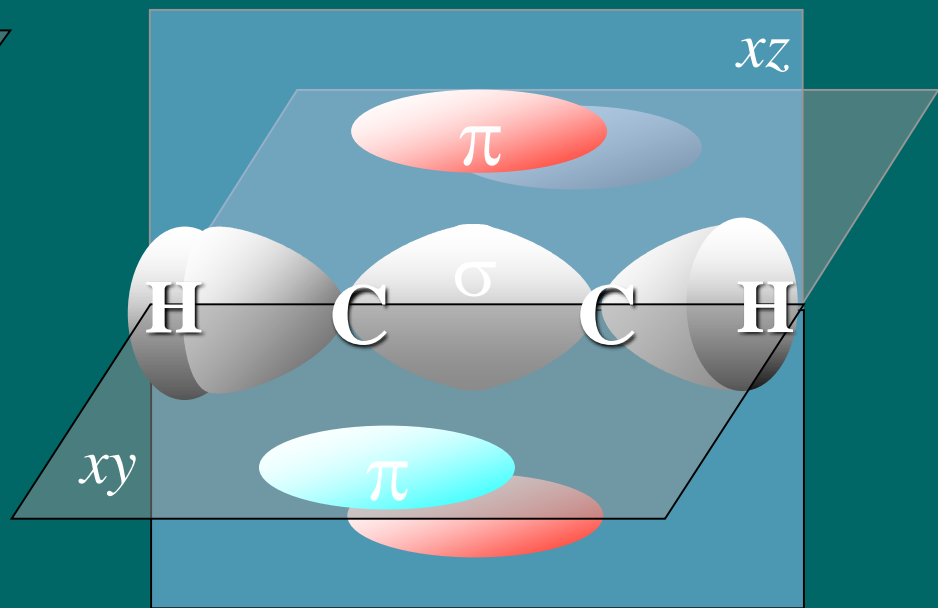
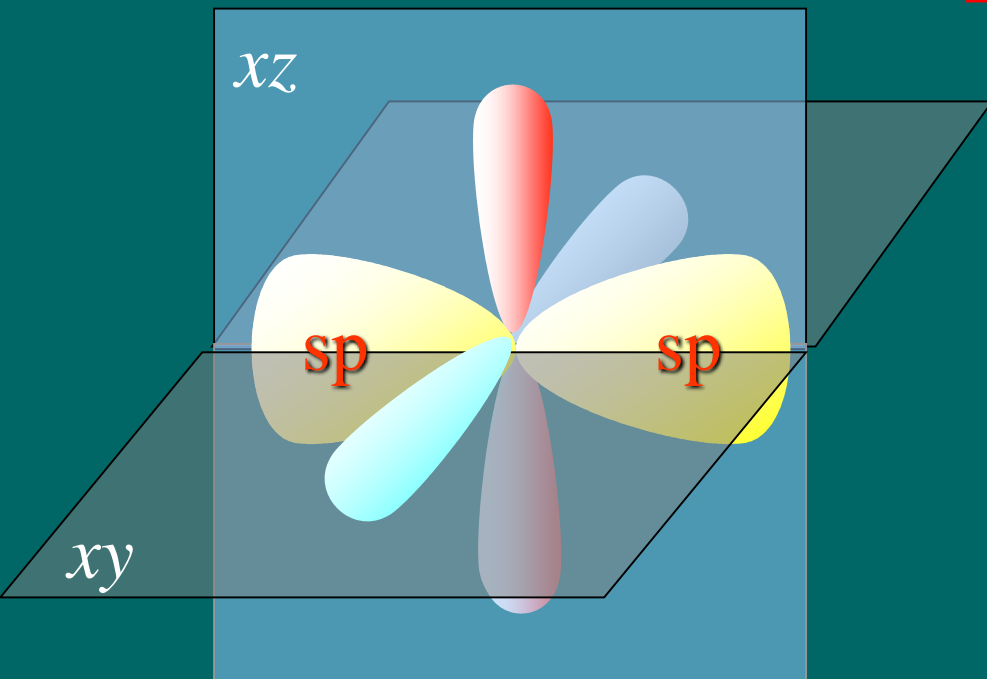
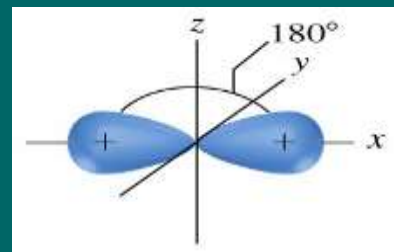
s

 p_x p_y p_z

ibridazione

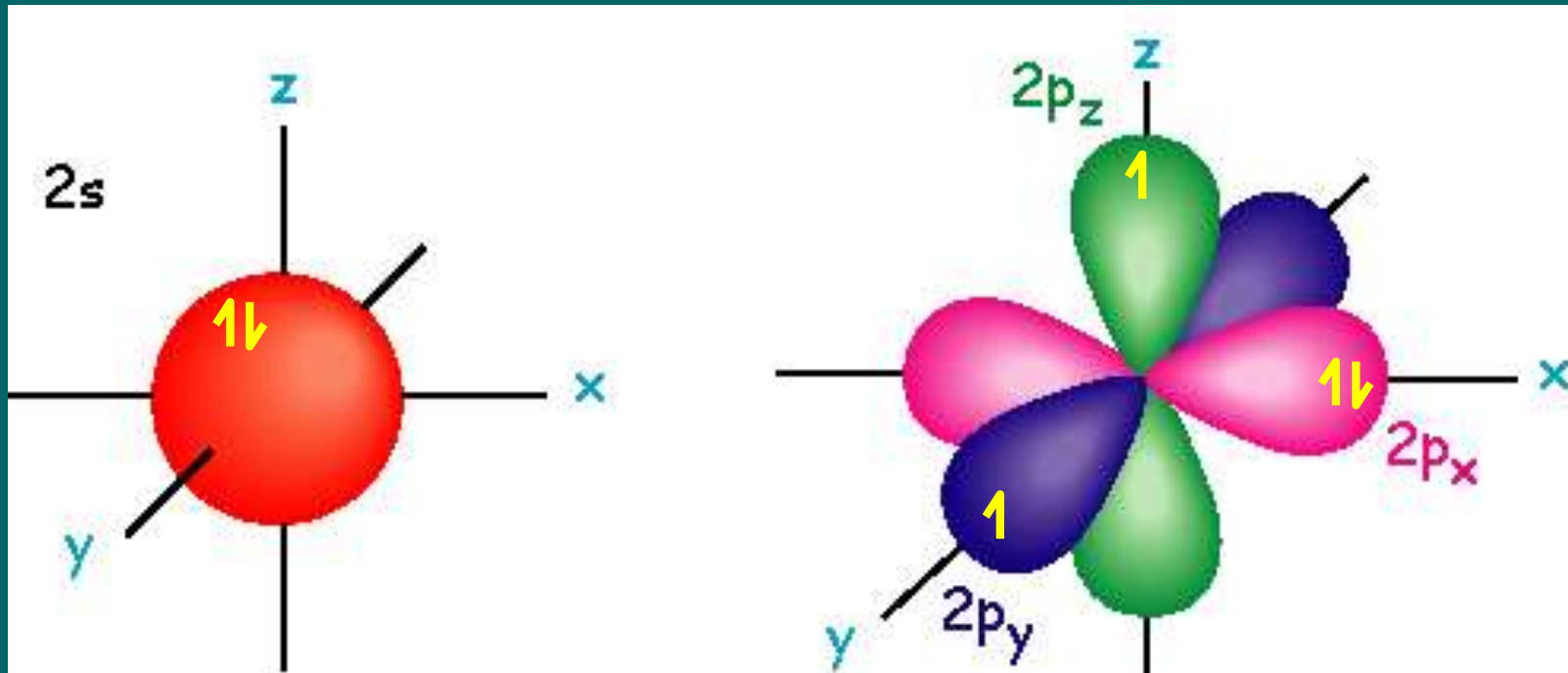


sp

 p_y p_z **sp**

H₂O

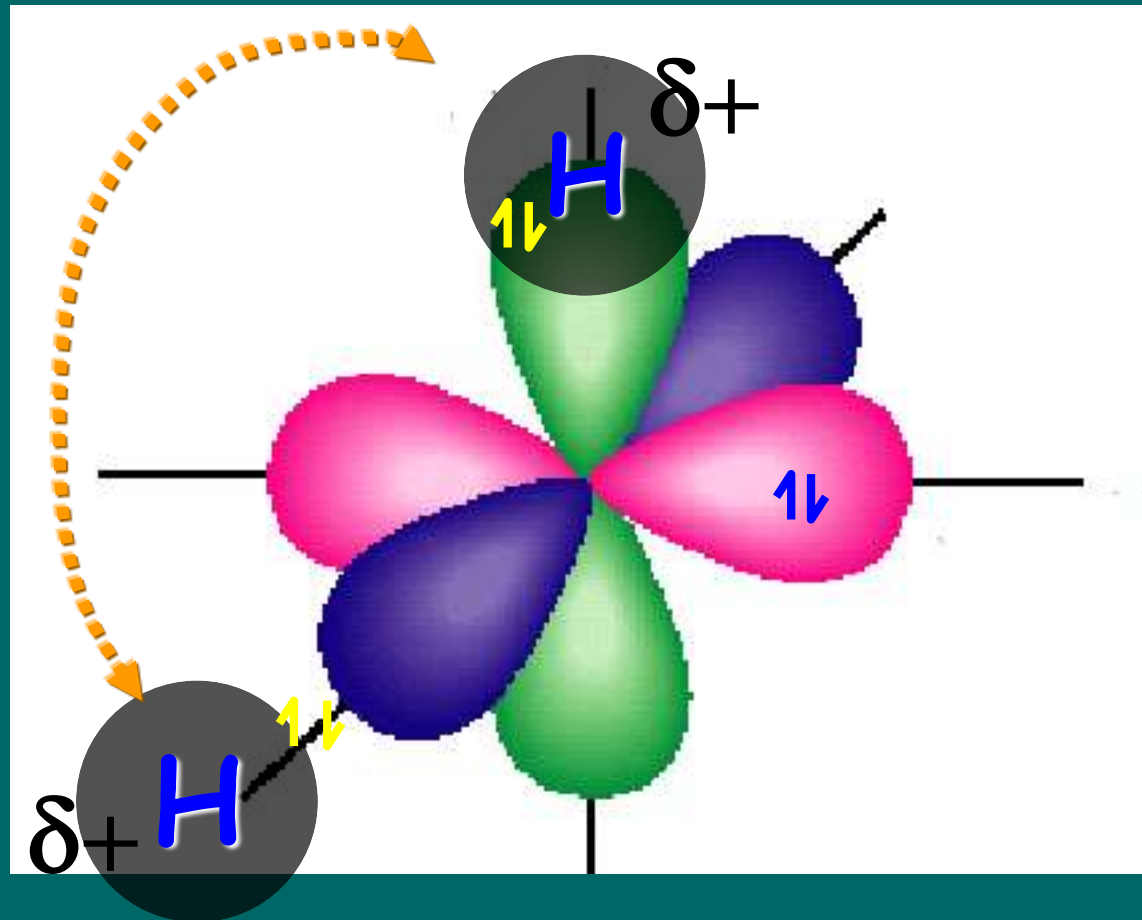
$1s^2, 2s^2p^4$



Ossigeno



repulsione

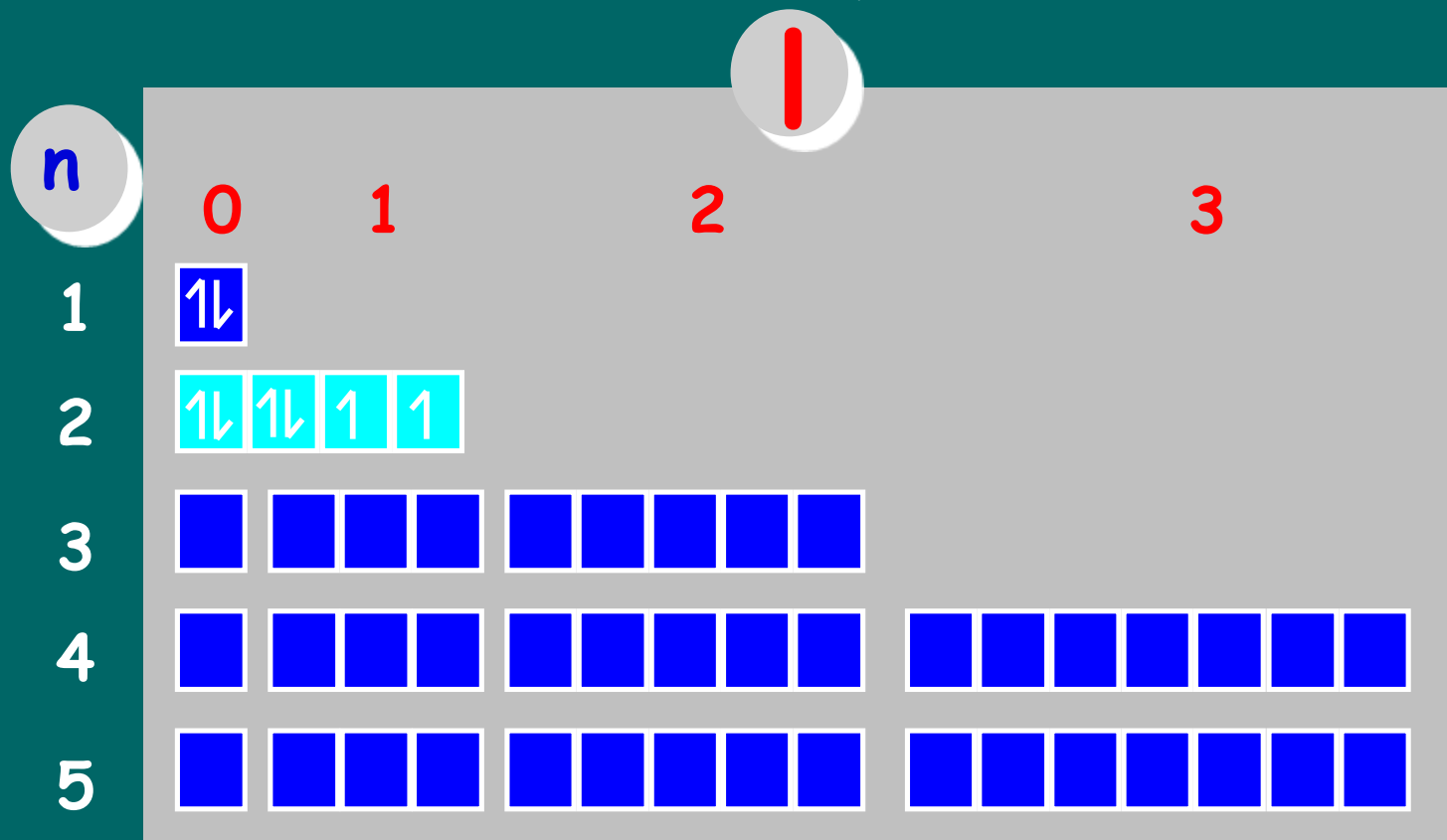


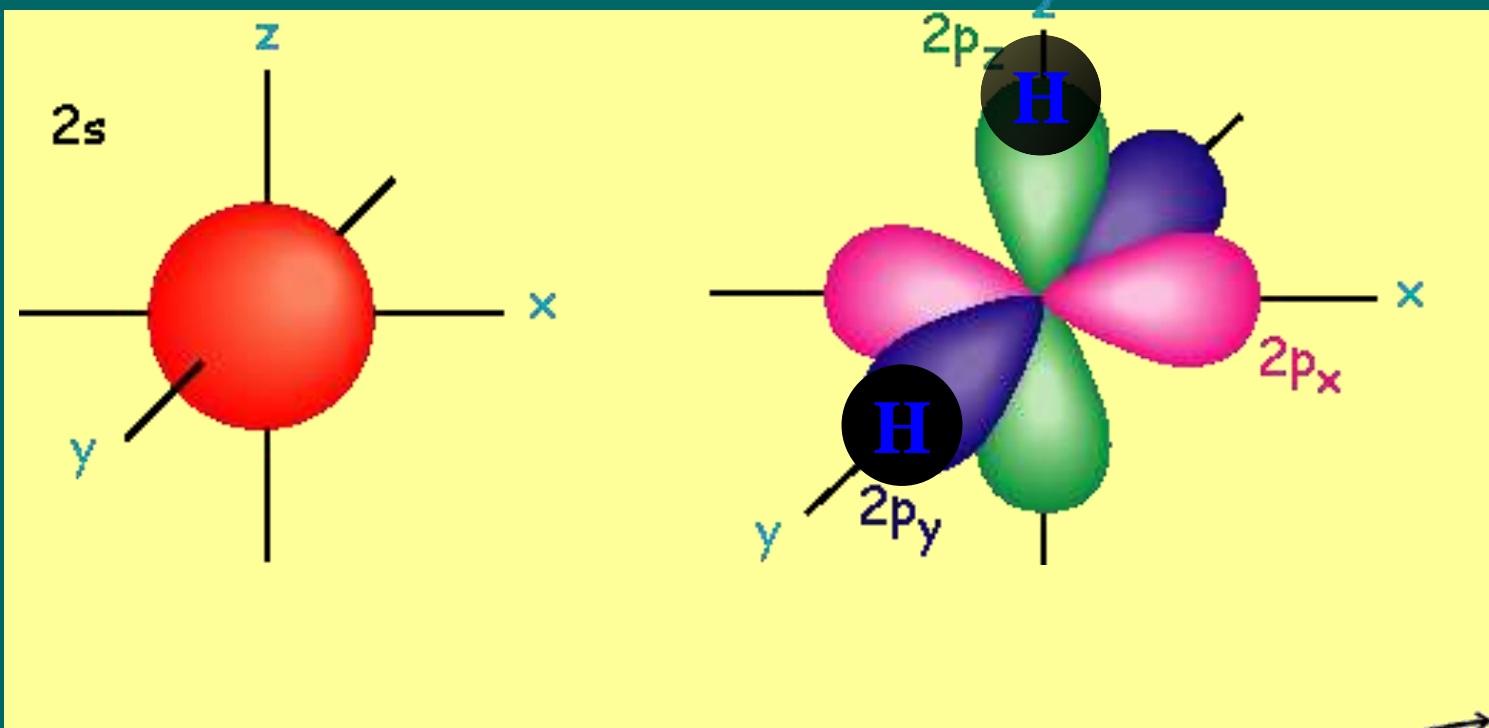
$Z = 8$

elemento: ossigeno

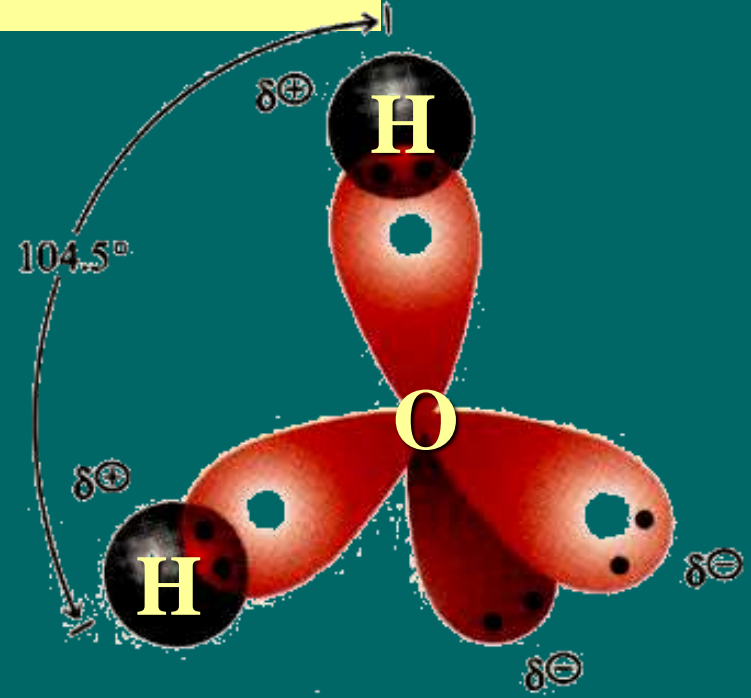
simbolo: **O**

L'orbitale **s** ed i tre orbitali **p** si ibridizzano formando quattro orbitali sp^3

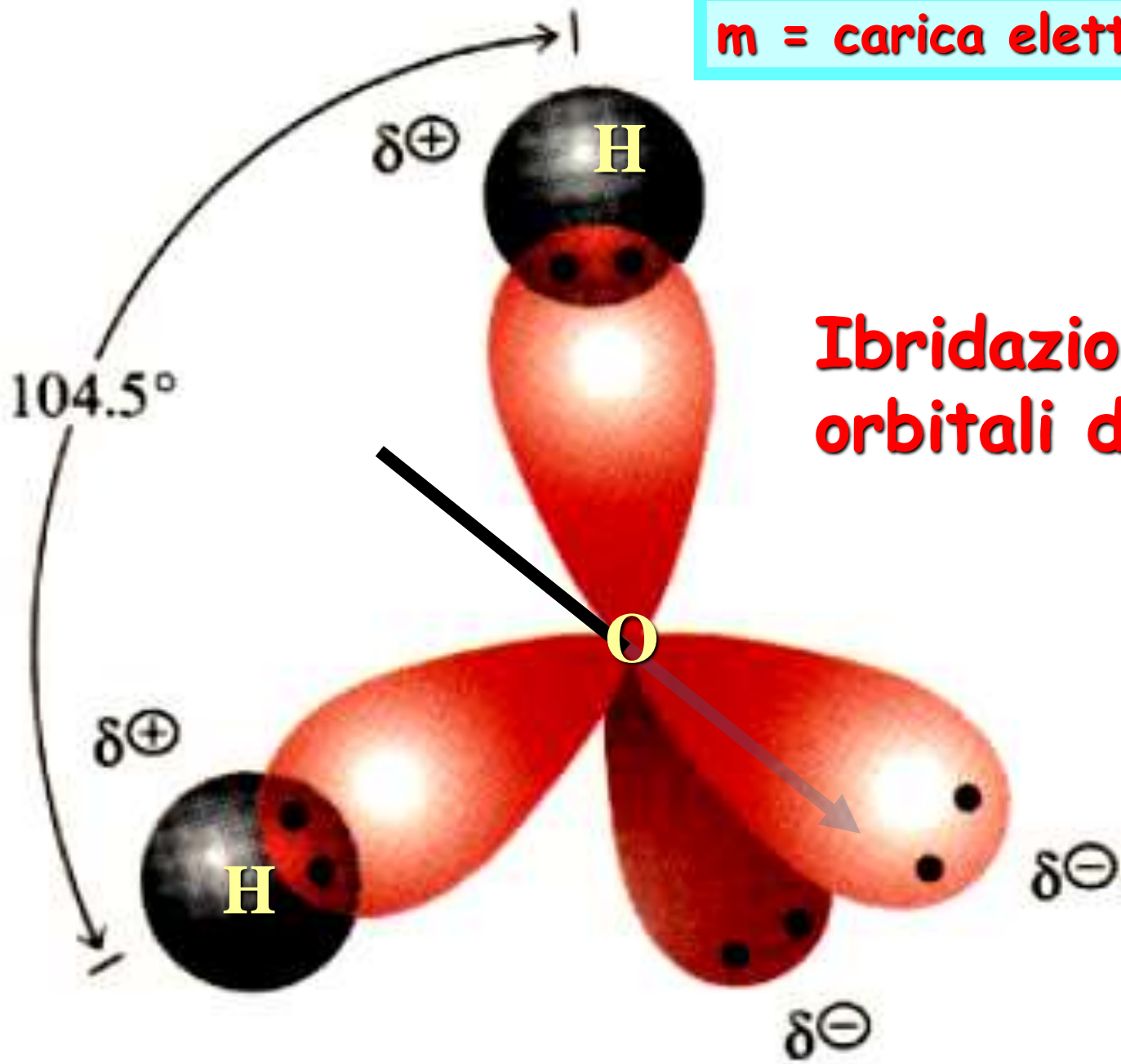




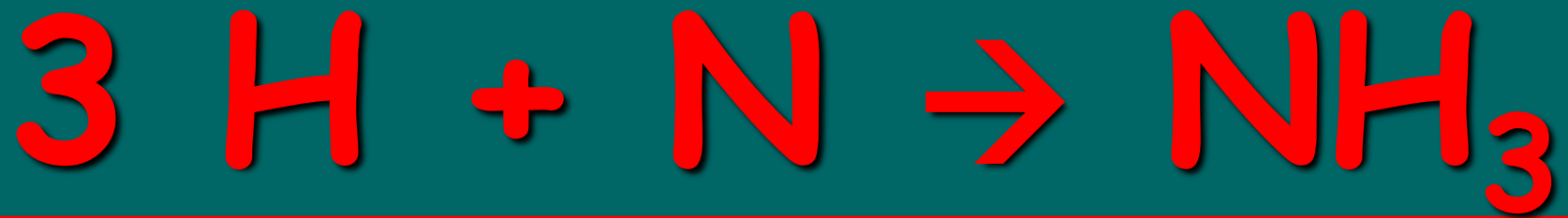
Ibridazione sp^3



$m = \text{carica elettrica} \times \text{distanza}$



Ibridazione sp^3 degli orbitali dell'ossigeno



$Z = 7$

elemento: azoto

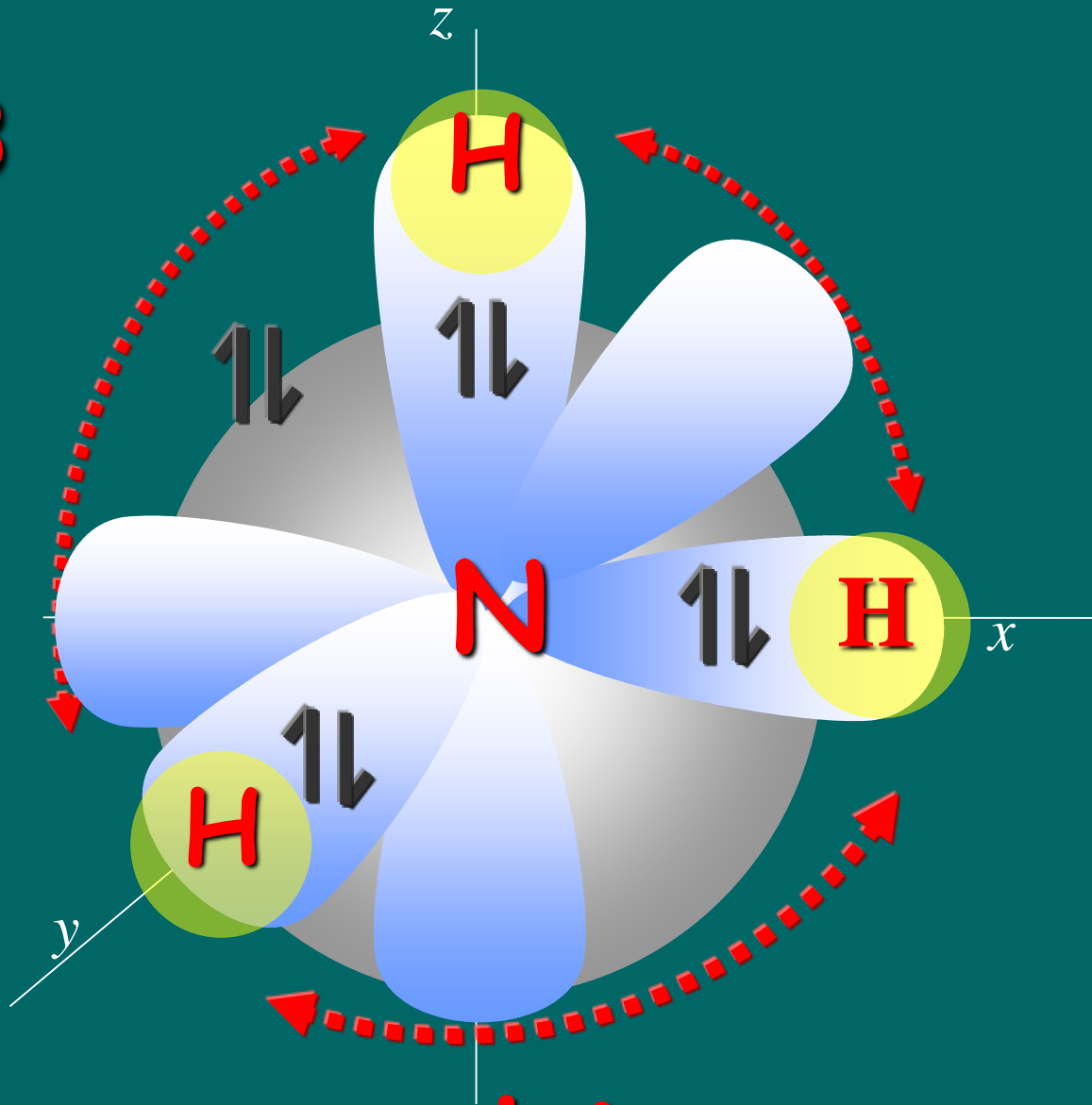
simbolo: **N**

Configurazione elettronica : $1s^2, 2s^2p_xp_y p_z$

n	0	1	2	3
1	↑↓			
2	↑↓	↑ ↑ ↑		
3				
4				
5				

The diagram shows the orbital filling for Nitrogen (Z=7). The principal quantum number n is listed on the left (1, 2, 3, 4, 5). The subshells are labeled 0, 1, 2, and 3. The 1s orbital (n=1, l=0) is filled with two electrons (↑↓). The 2s orbital (n=2, l=0) is filled with two electrons (↑↓). The 2p orbitals (n=2, l=1) are filled with three electrons (↑ ↑ ↑). The 3s, 3p, 4s, 4p, 5s, and 5p orbitals are shown as empty boxes.

NH₃



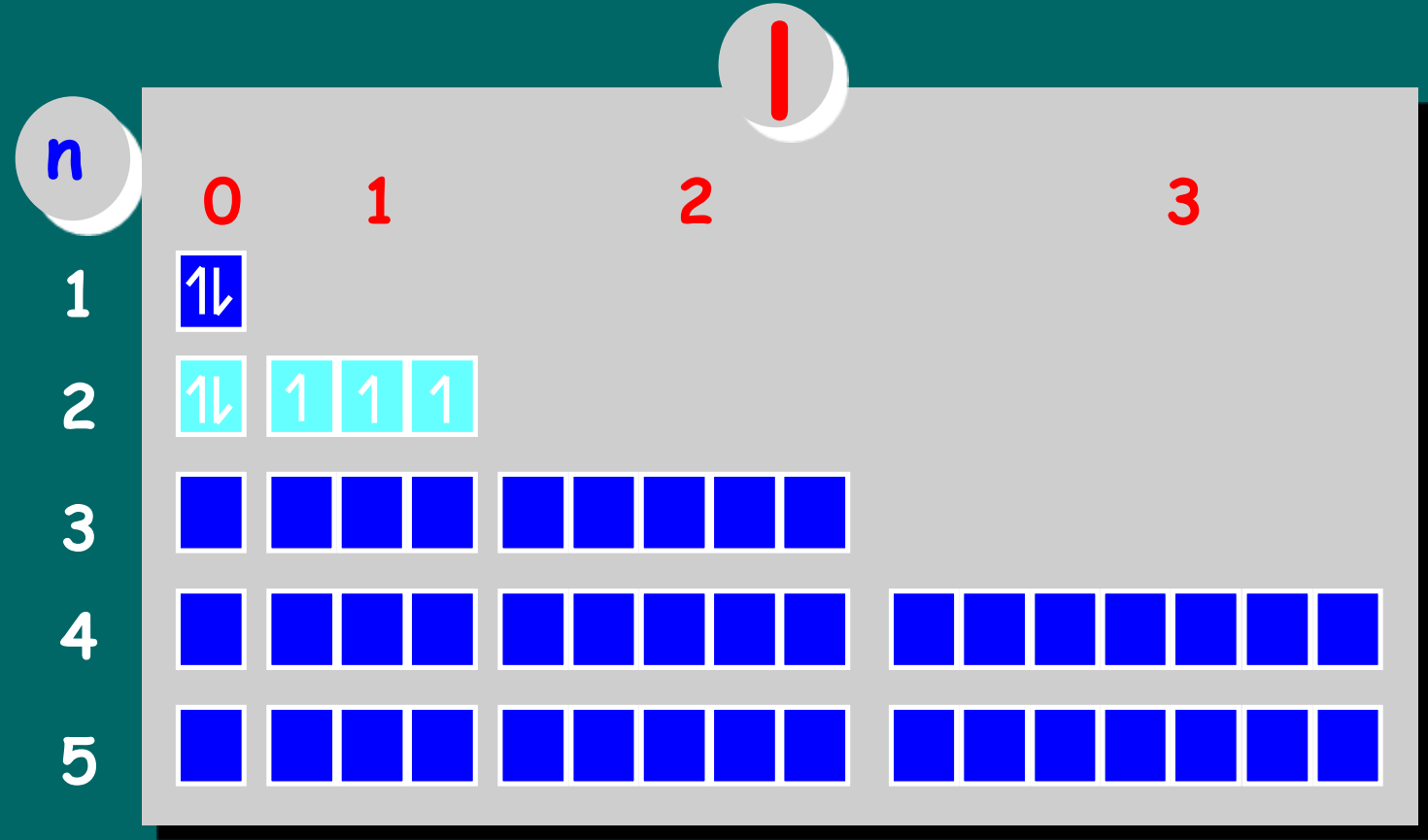
repulsione

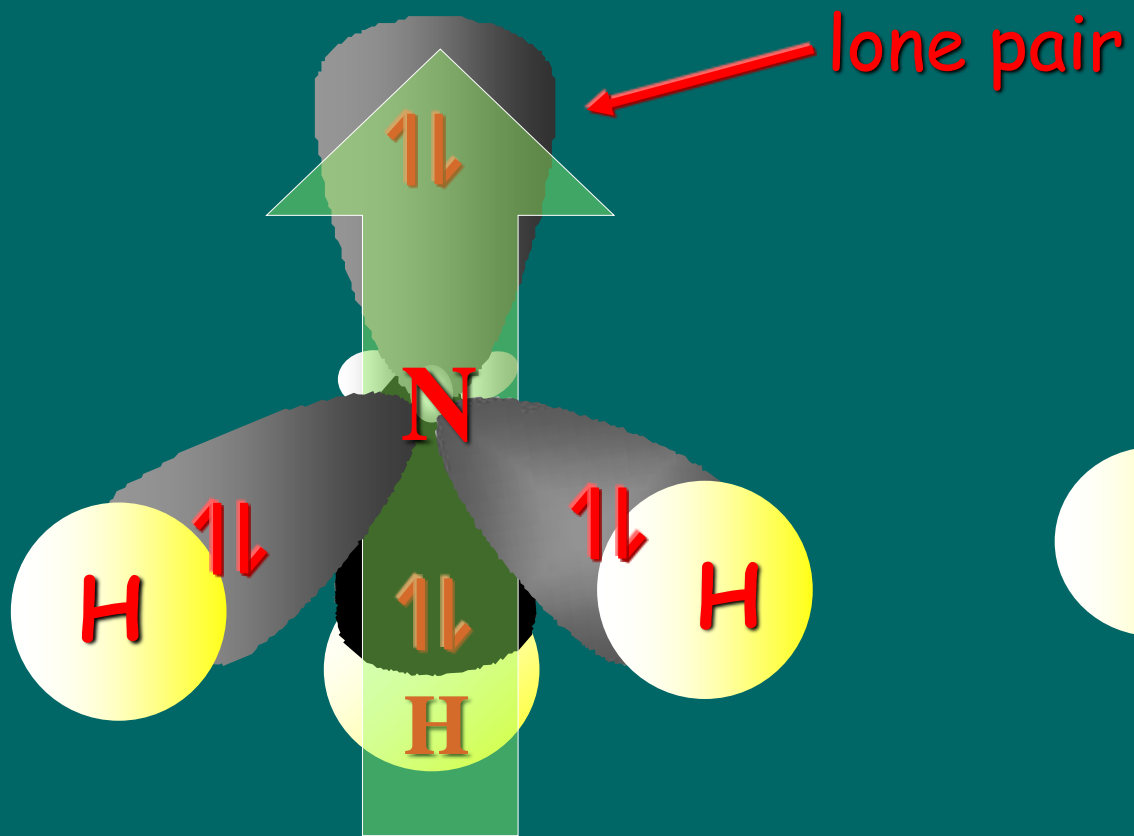
Z = 7

elemento: azoto

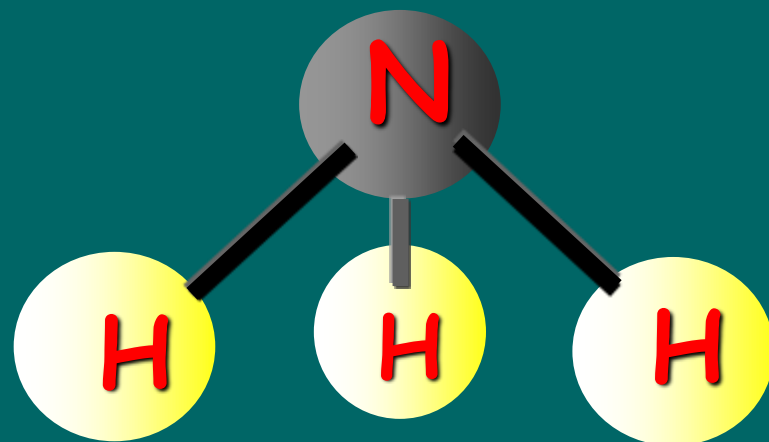
simbolo: **N**

Nell'ammoniaca, l'orbitale s ed i tre orbitali p dell'azoto si ibridizzano originando quattro orbitali sp^3





a



b

LEGAME DATIVO

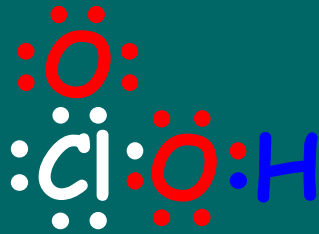
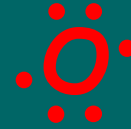
LEGAME DATIVO

Il legame dativo (o di coordinazione) è un legame covalente in cui due elettroni di legame provengono da uno stesso atomo

- Uno dei due atomi deve avere una **coppia di elettroni** in uno stesso orbitale, l'altro atomo deve avere un **orbitale vuoto**. La coppia di elettroni viene messa in comune fra i due atomi.
- L'atomo che fornisce la coppia di elettroni si chiama **agente nucleofilo o donatore**, mentre l'altro atomo si chiama **agente elettrofilo o accettore**.

Ossiacidi del cloro

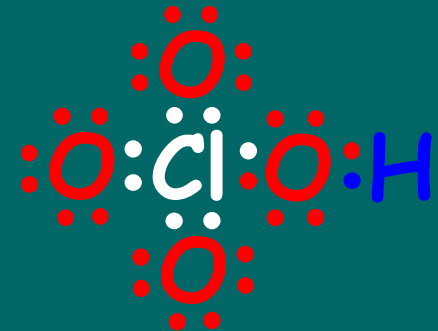
(idrogeno + ossigeno + cloro):



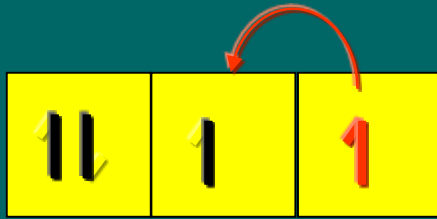
Acido cloroso



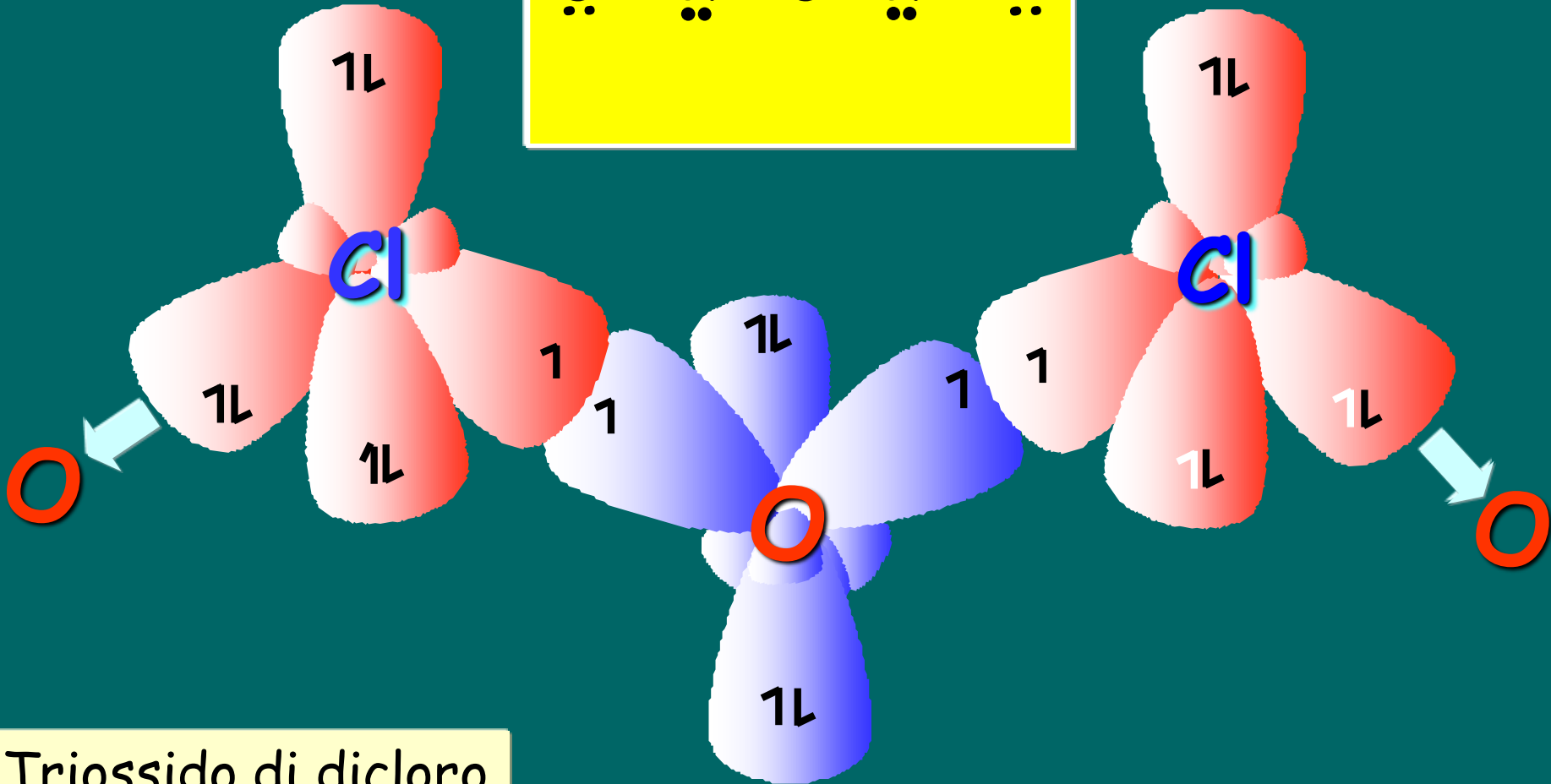
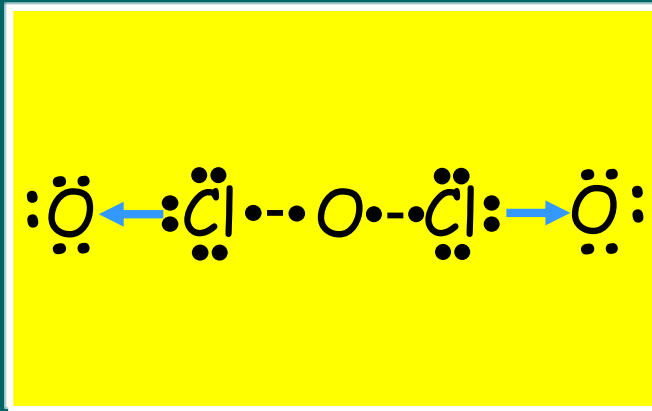
Acido clorico



Acido perclorico

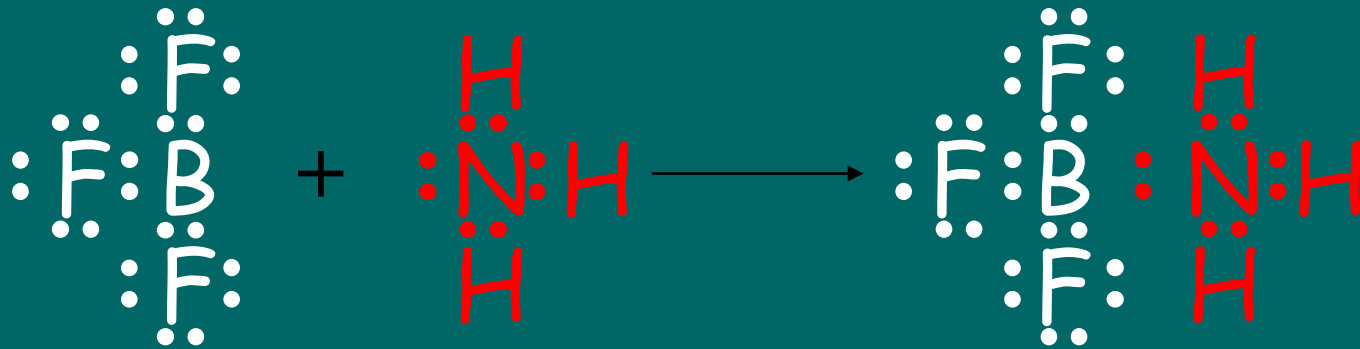


Assumendo questa configurazione elettronica, l'ossigeno può ricevere un lone pair dal cloro

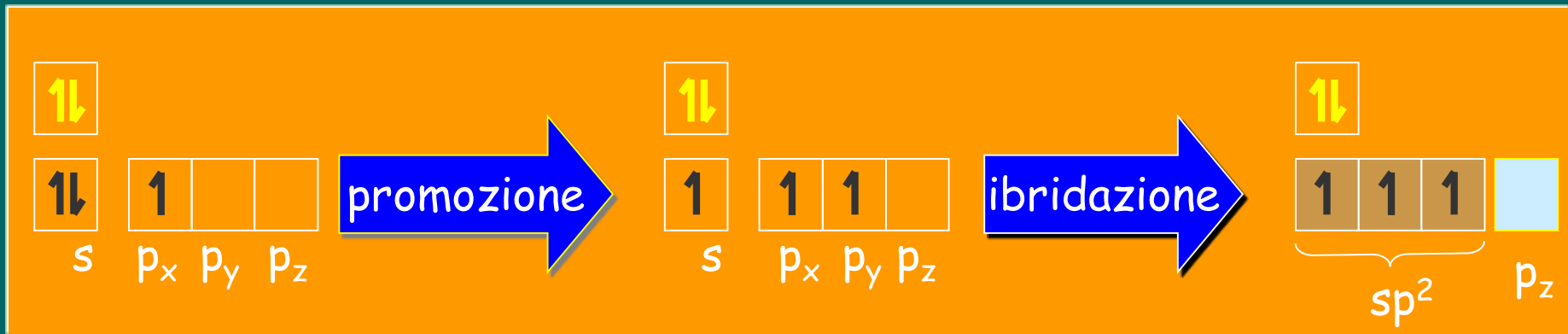


Triossido di dicloro

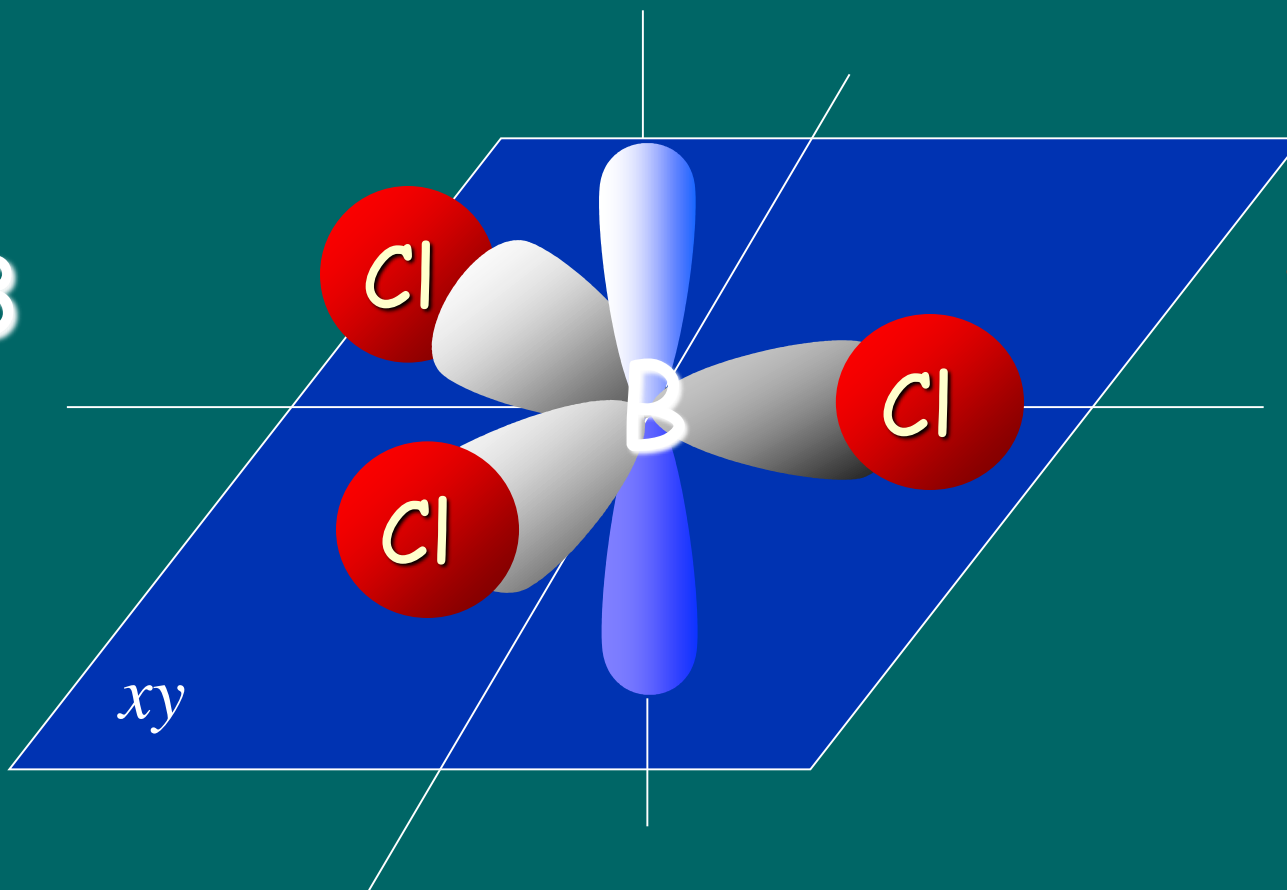
Il legame dativo si può anche stabilire fra due molecole. Le due molecole restano unite a formare un **complesso** (o anche composto di coordinazione). Consideriamo come esempio il caso del **trifluoruro di boro (BF₃)** e **l'ammoniaca (NH₃)**.



L'atomo di boro della molecola del BF₃ ha un orbitale vuoto, mentre l'atomo di azoto della molecola dell'ammoniaca ha una coppia di elettroni disponibile. L'atomo di azoto agisce da agente nucleofilo e l'atomo di boro da agente elettrofilo e la coppia di elettroni dell'atomo di azoto viene messa in comune tra i due atomi. Si forma il legame dativo e le due molecole restano unite nel **complesso trifluoruro di boro-ammoniaca**.



BF_3



sp^2

Teoria VSEPR

Teoria che prevede la geometria delle molecole e si basa sulla repulsione tra i doppietti elettronici del guscio di valenza
Valence Shell Electron Pair Repulsion

Secondo tale teoria le coppie di elettroni più esterne, avendo tutte la stessa carica negativa, tendono a respingersi le une con le altre e a disporsi il più possibile lontano



A = atomo centrale X = atomi legati all'atomo centrale
E = doppietti elettronici solitari

$m + n = 2$ molecola lineare
 $m + n = 3$ molecola trigonale planare
 $m + n = 4$ molecola tetraedrica
 $m + n = 5$ bipiramide a base trigonale
 $m + n = 6$ ottaedrica

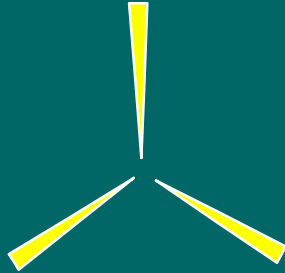
tipi di ibridazione



sp

lineare

angolo di 180°



sp^2

triangolare

angolo di 120°

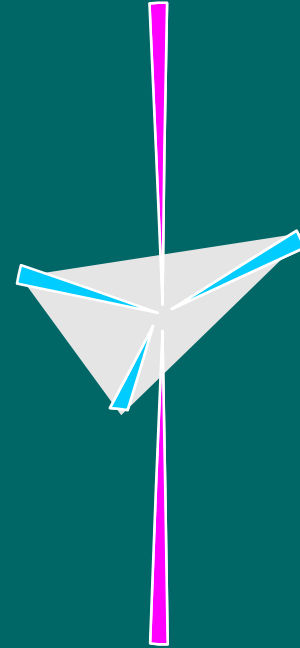


sp^3

tetraedrica

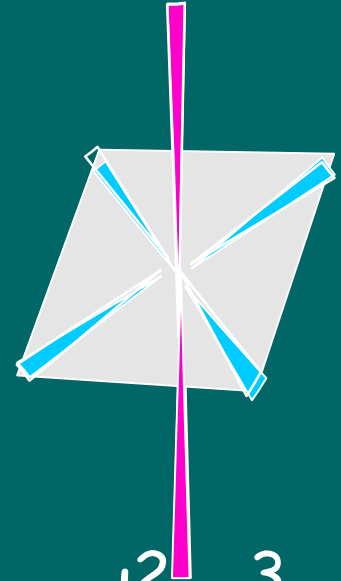
angolo di $109,5^\circ$

CH_4



Sp^3d

bipiramide
triangolare



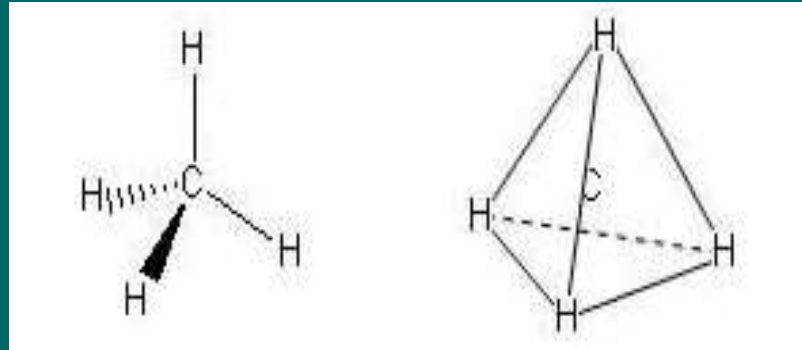
d^2sp^3

ottaedrica

emoglobina

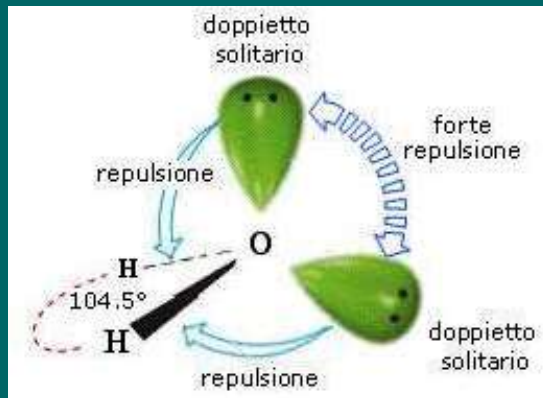
La molecola assume la forma che consente la massima distanza

AX_4



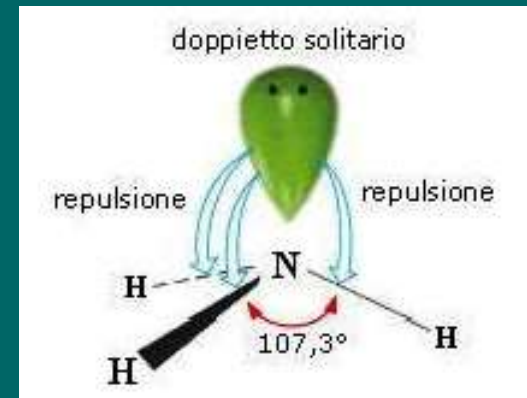
AX_2E_2

Con geometria angolata
derivata da quella
tetredrica

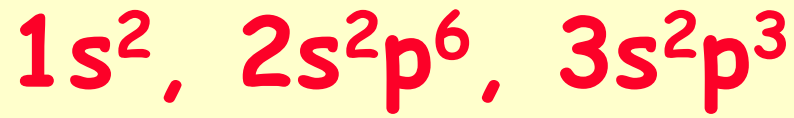


AX_3E

Con geometria piramidale
derivata da quella
tetredrica

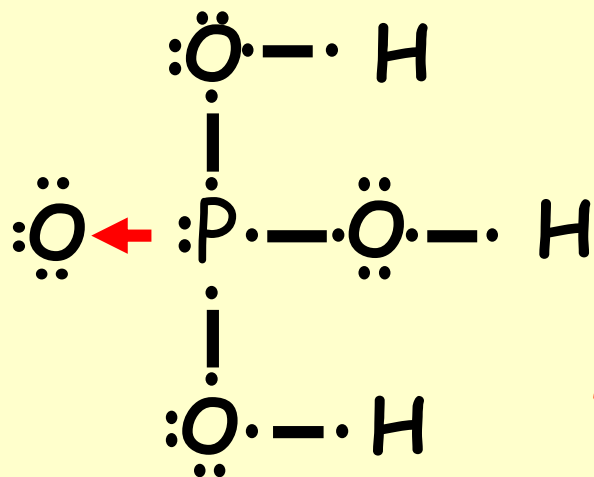


P

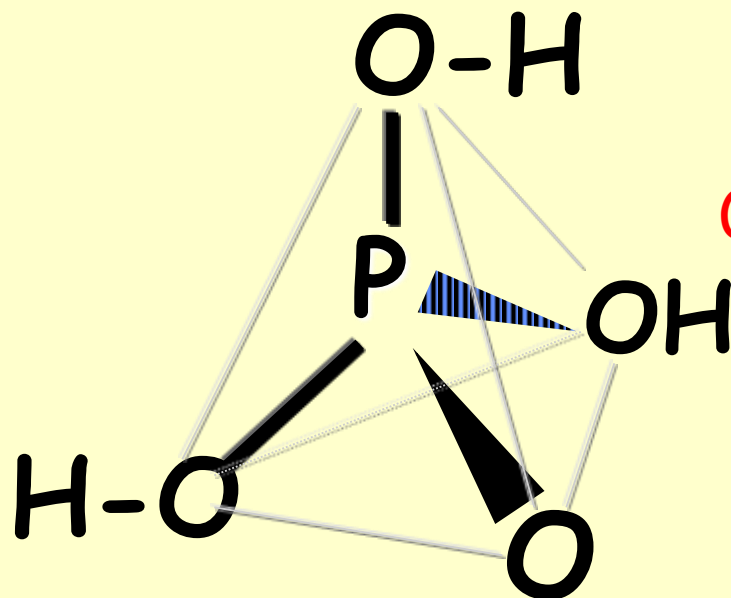


I

n	0	1	2	3
1	1↓			
2	1↓	1↓ 1↓ 1↓		
3	1↓	1 1 1		
4				
5				



H_3PO_4 Acido fosforico
(formula di Lewis)

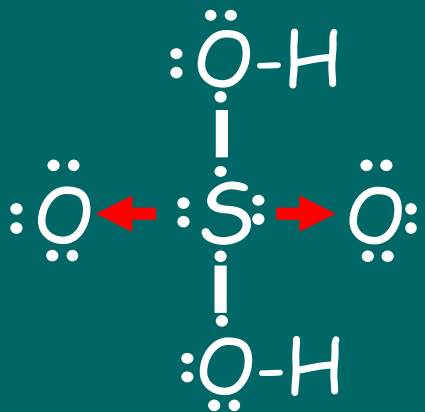


AX_4
(VSPR)

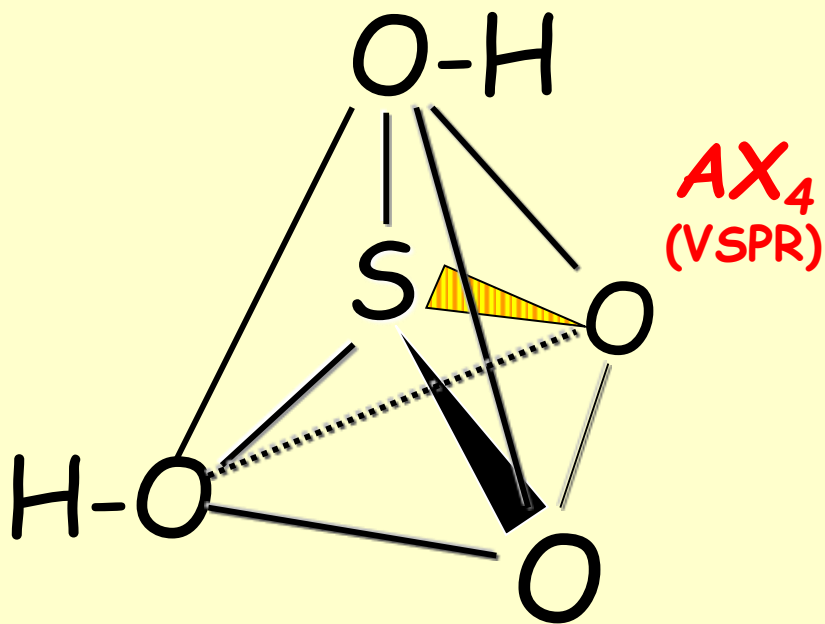
S

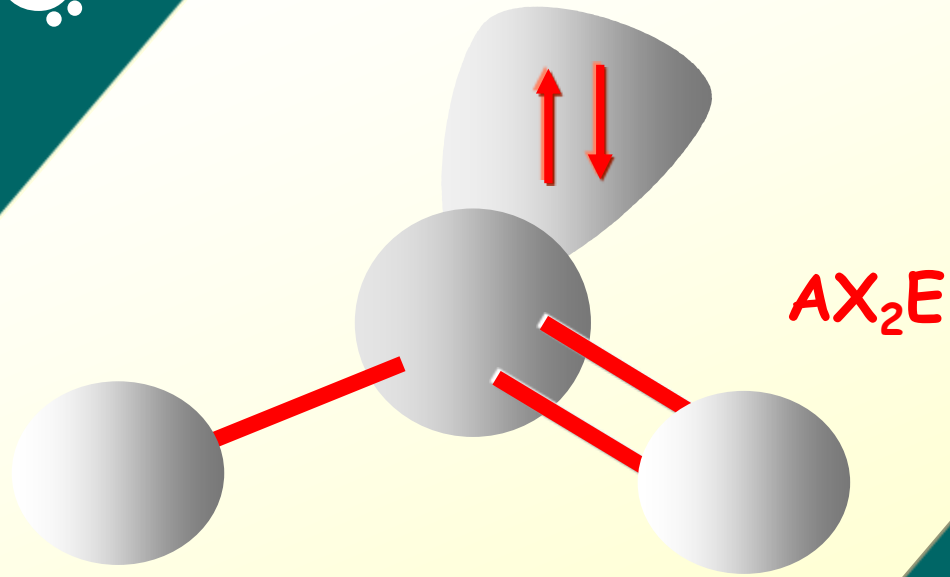
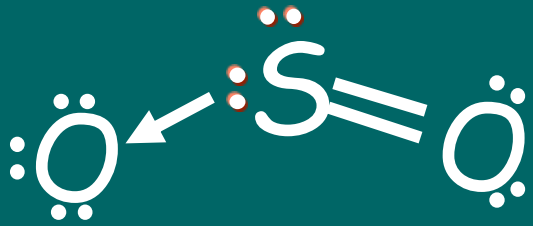
$1s^2, 2s^2p_x^6, 3s^2p_x^4$

n	0	1	2	3
1	↑↓			
2	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓		
3	↑↓	↑↓ ↑ ↑		
4				
5				

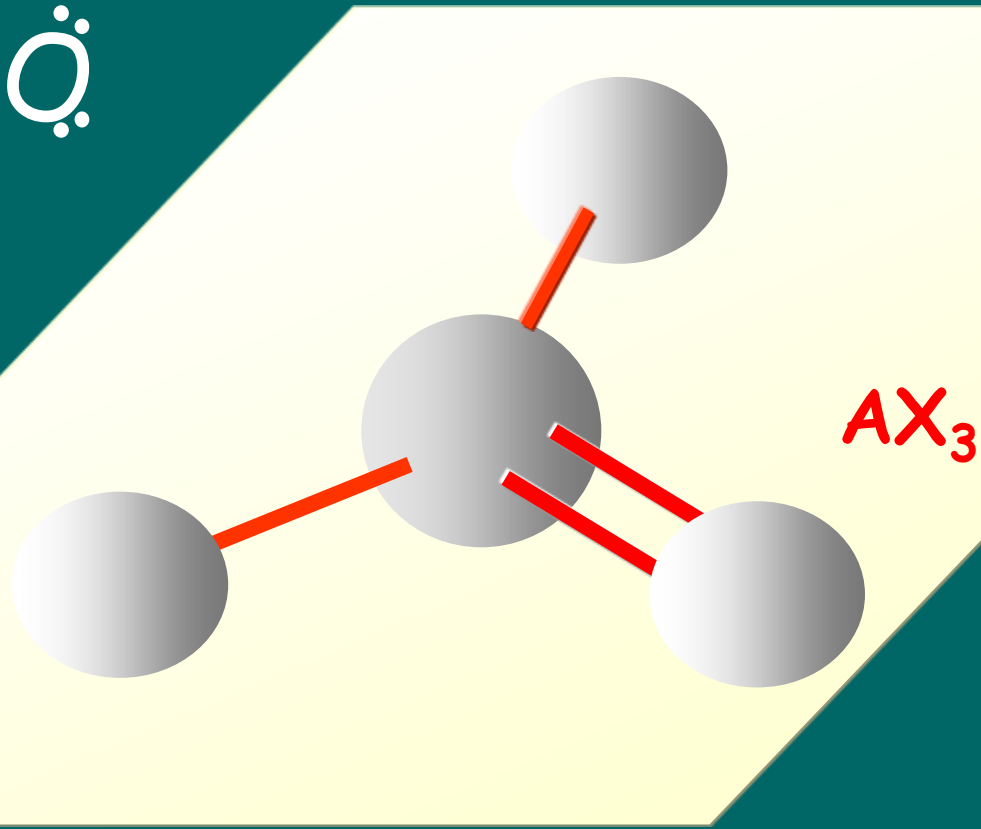
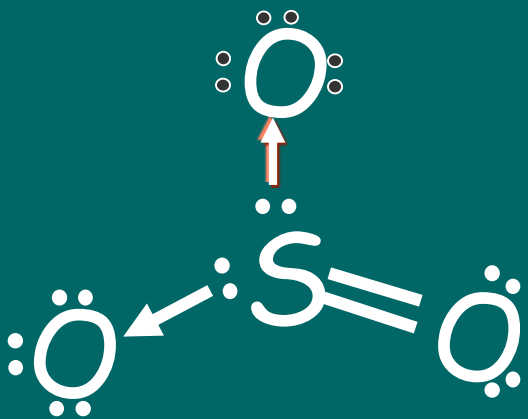


*H₂SO₄ Acido solforico
(formula di Lewis)*



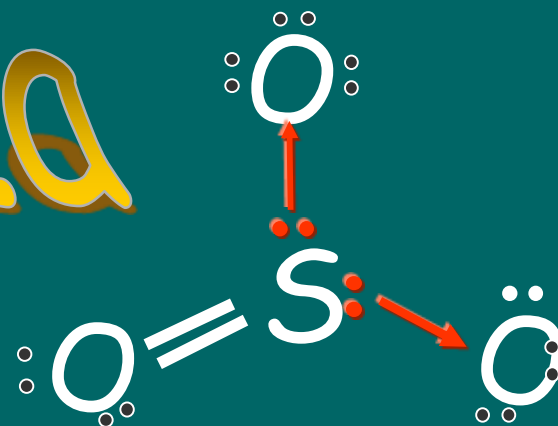
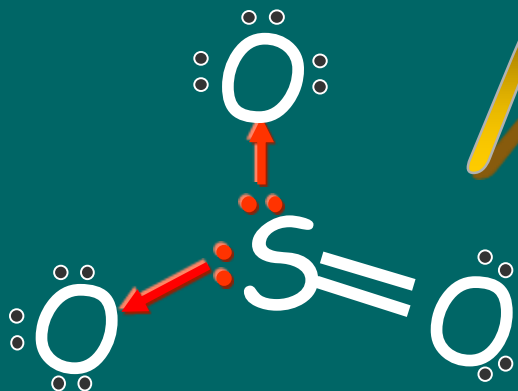


biossido di zolfo o anidride solforosa



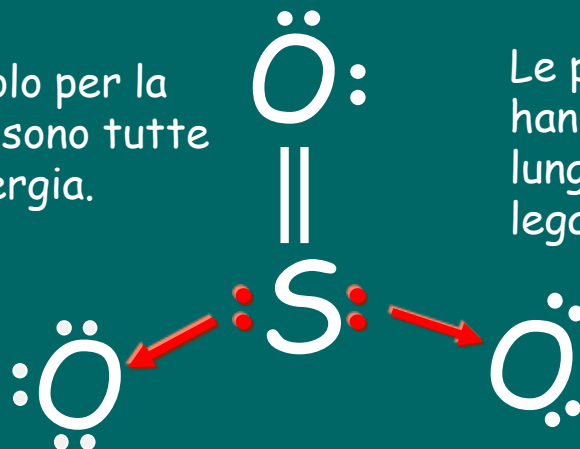
triossido di zolfo o anidride solforica

RISONANZA

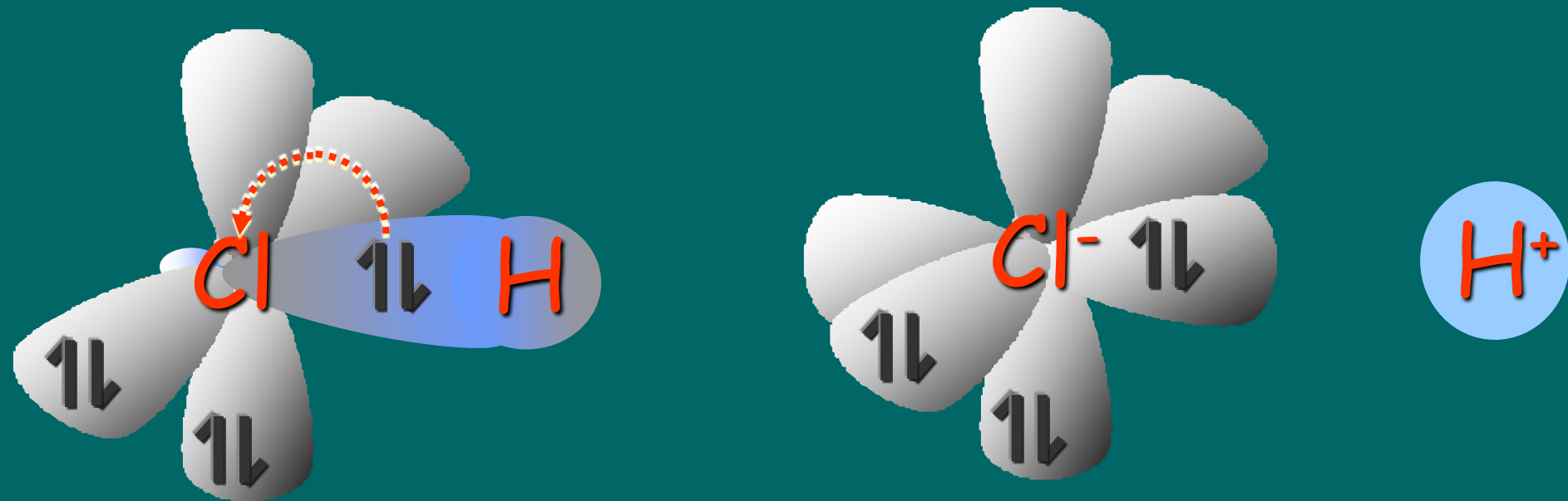


Le tre forme differiscono solo per la posizione del doppio legame, sono tutte valide ed hanno la stessa energia.

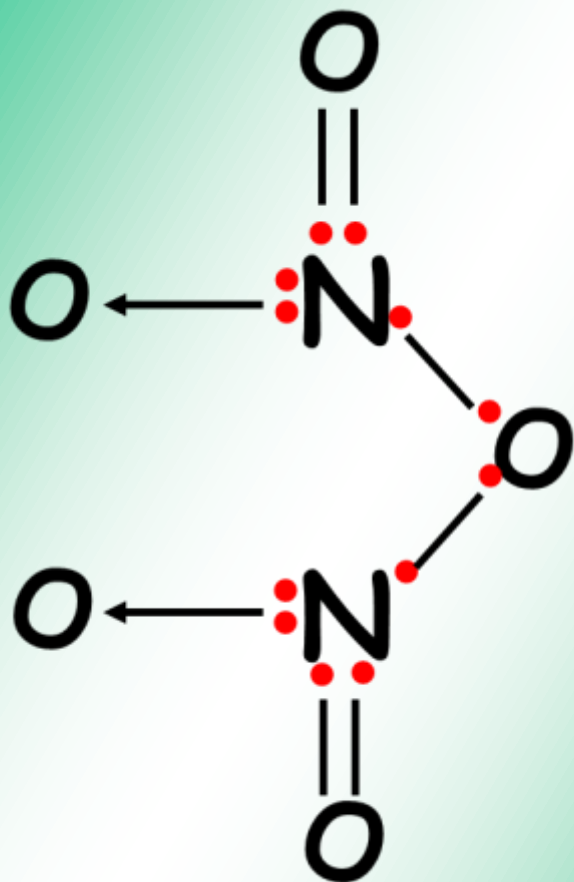
Le prove sperimentali dicono che i legami hanno tutti la stessa lunghezza: risultano lunghi di un doppio legame e più corti di un legame singolo.



IBRIDO DI RISONANZA: miscela di strutture

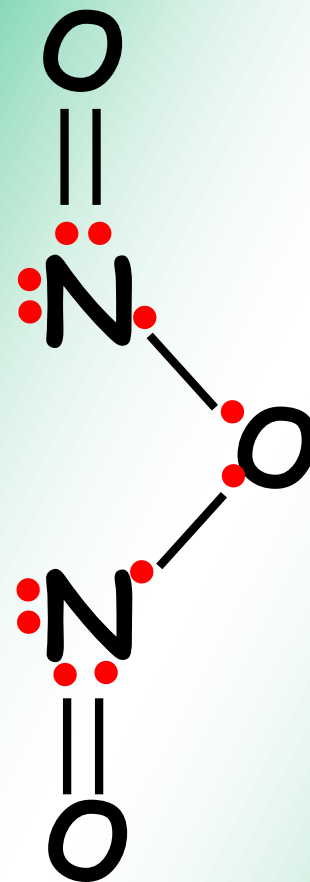


HCl risuona fra una forma limite covalente eteropolare e una forma limite ionica



Pentossido di diazoto

⁰
anidride nitrica



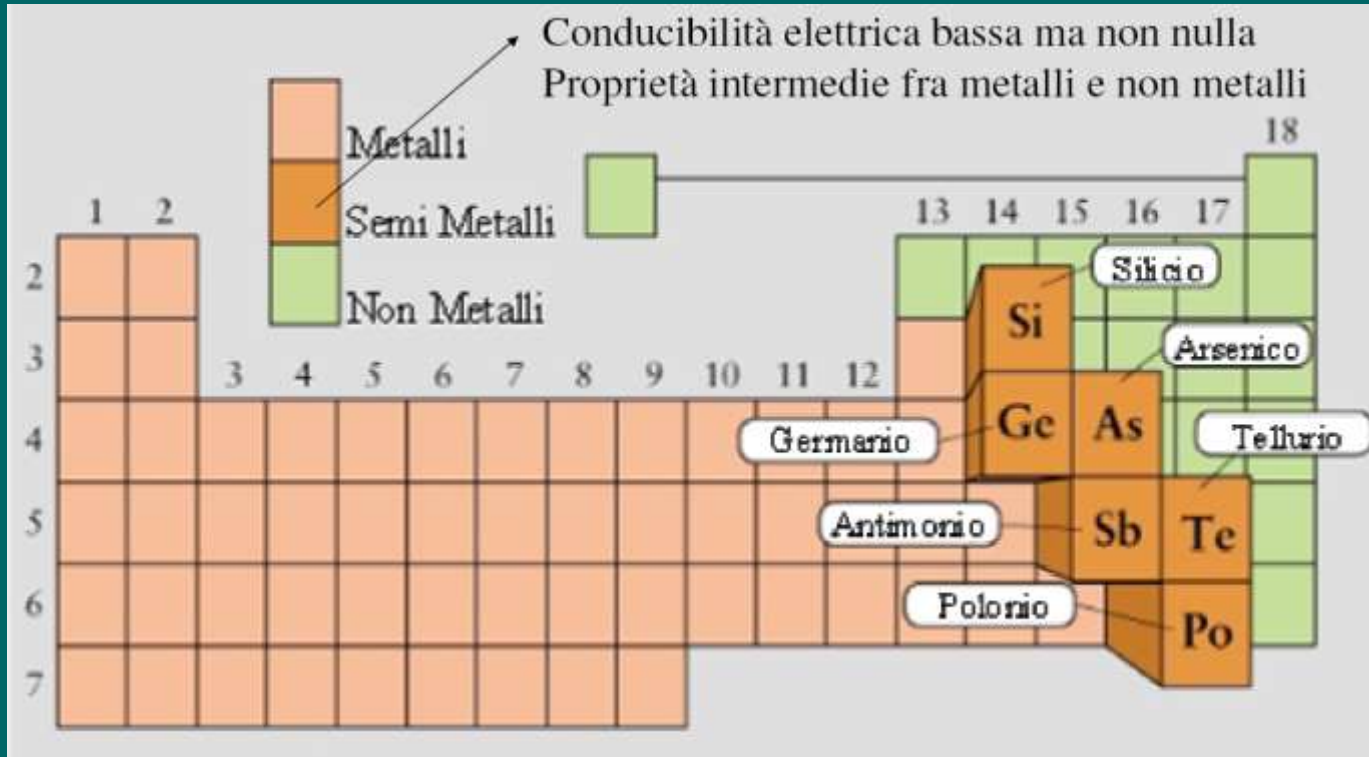
Triossido di diazoto

⁰
anidride nitrosa

LEGAME METALLICO

Circa i quattro quinti di tutti gli elementi sono metalli, (sono tutti solidi tranne il **mercurio: Hg**).

I metalli hanno bassa **energia di ionizzazione** e bassa elettronegatività.

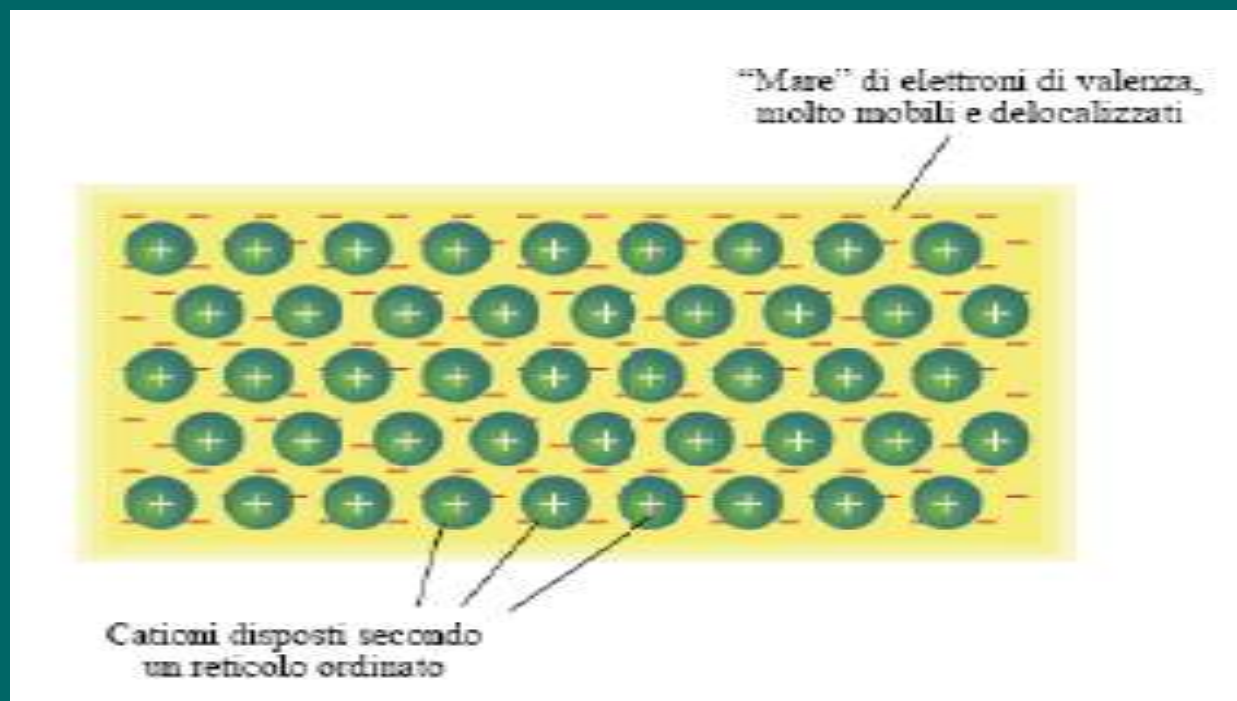


Gli elettroni esterni sono attratti debolmente dai rispettivi nuclei e se ne separano facilmente

Ciò avviene anche quando il metallo si trova allo stato solido

- ➔ Nei metalli, **le posizioni** (o **nodi**, occupati dalle particelle) del **reticolo cristallino sono occupate dagli ioni positivi del metallo**
- ➔ Gli elettroni esterni non rimangono vincolati ognuno al proprio atomo ma sono liberi di muoversi per tutto il solido, tenendo insieme in questo modo il solido stesso
- ➔ Gli elettroni esterni sono **delocalizzati**, cioè non appartengono ad un atomo specifico, e nemmeno sono condivisi fra una coppia specifica di atomi, ma possono trovarsi in qualsiasi zona all'interno del metallo

Struttura del metallo come reticolo cristallino con i nodi occupati dagli ioni positivi, immersi in una nube elettronica formata da tutti gli elettroni esterni.



Modello semplificato di un reticolo cristallino concepito come un insieme di ioni positivi immersi in un “mare di elettroni”

(Legami deboli)
FORZE INTERMOLECOLARI

LEGAMI CHIMICI



Legami FORTI

($E = 5-150 \text{ Kcal//mol}$)

COVALENTE

IONICO

Metallico

Legami DEBOLI

($E < 10 \text{ Kcal//mol}$)

a idrogeno

legami dipolari

LEGAMI FORTI

Forza

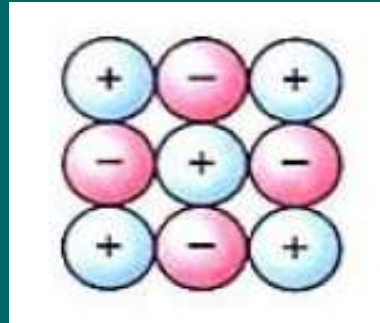
Modello

Base attrazione

Esempio

Forze di legame

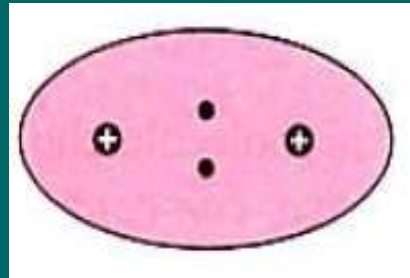
Forze di
legame ionico



catione-anione

NaCl

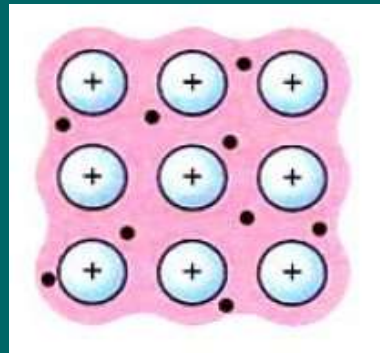
Forze di
legame covalente



nuclei-coppia di
 e^- condivisa

H-H

Forze di
legame metallico



cationi-elettroni
delocalizzati

Fe

LEGAMI DEBOLI

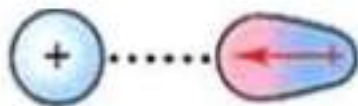
Forza

Modello

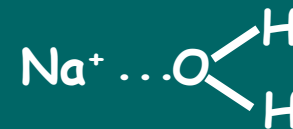
Base attrazione

Esempio

Ione - dipolo



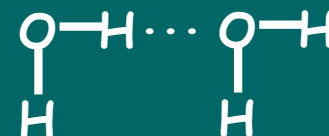
carica ione-carica
dipolo



Legame idrogeno



Legame polare con
carica H-dipolo
(N, O, F)



Dipolo - dipolo



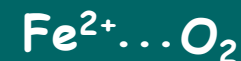
cariche dipoli



Ione - dipolo
indotto



carica ione-nuvola
elettronica
polarizzabile



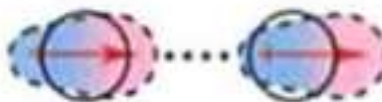
Dipolo - dipolo
indotto



carica dipolo-nuvola
elettronica
polarizzabile



Forze di
dispersione
(forze di London)



nuvole elettroniche
polarizzabili



Interazioni INTRA/INTERMOLECOLARI

forze intramolecolari: Interazioni che tengono insieme gli atomi per formare le molecole.

forze intermolecolari: Interazioni responsabili delle forze fra le molecole:

➤ Legame a idrogeno

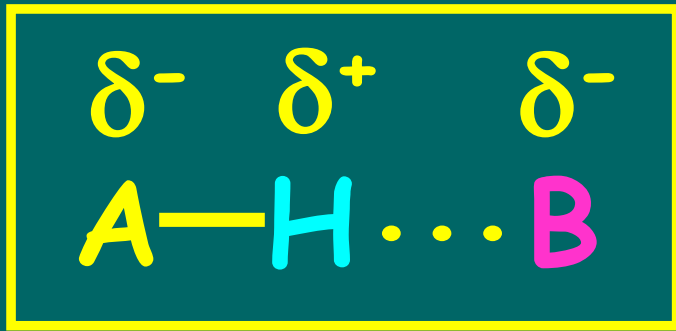
➤ Legami dipolari:

- Interazione ione-dipolo

- Interazione di Van der Waals

Dipolo permanente-dipolo permanente
Dipolo permanente-dipolo indotto
Dipolo istantaneo-dipolo indotto
(forze di dispersione o di London)

LEGAME ad IDROGENO



Il legame a idrogeno si indica con una linea tratteggiata per indicare che si tratta di una forza interatomica più debole di un legame covalente: 5 - 40 kJ/mol rispetto ad esempio dei 436 kJ/mol del legame O-H

E' un'interazione elettrostatica che si verifica nelle molecole che possiedono un atomo di H legato ad un atomo A molto elettronegativo e piccolo (F, N, O, Cl) con un secondo atomo B anche esso fortemente elettronegativo

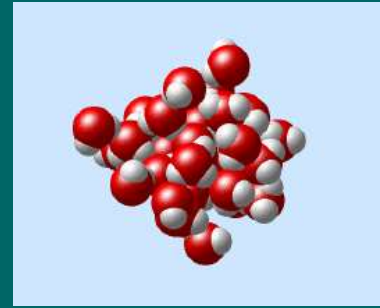
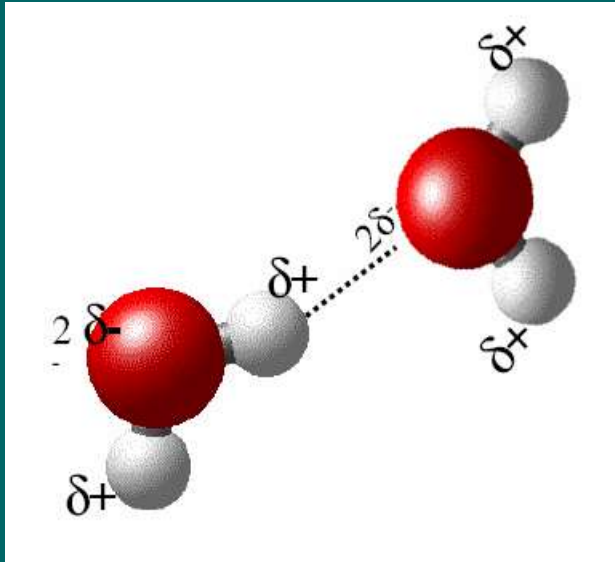
A, B: atomi piccoli e molto elettronegativo

A e B \longrightarrow stessa molecola \Rightarrow Legame H INTRAMOLECOLARE

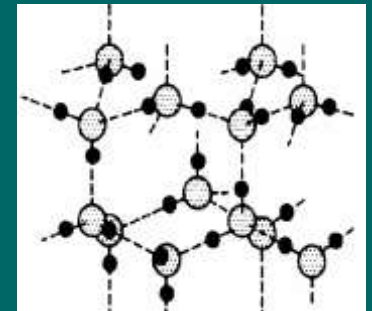
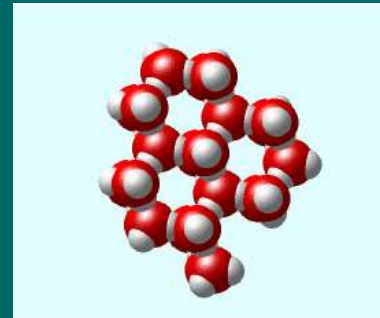
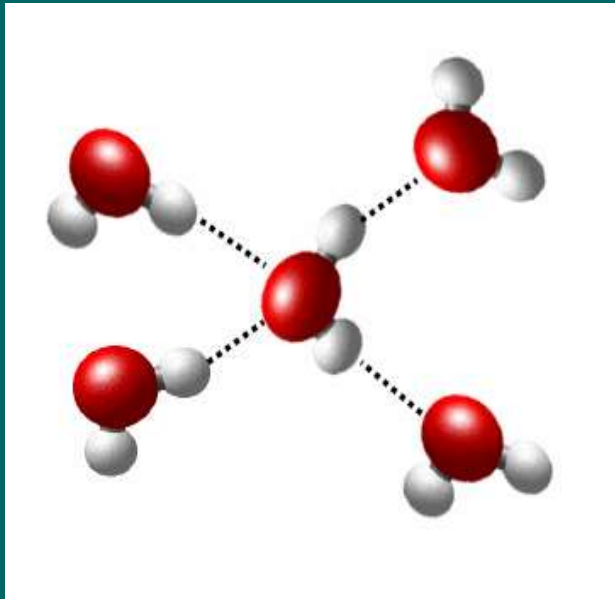
A e B \longrightarrow molecole diverse \Rightarrow Legame H INTERMOLECOLARE

LEGAME ad IDROGENO

nell'
 H_2O

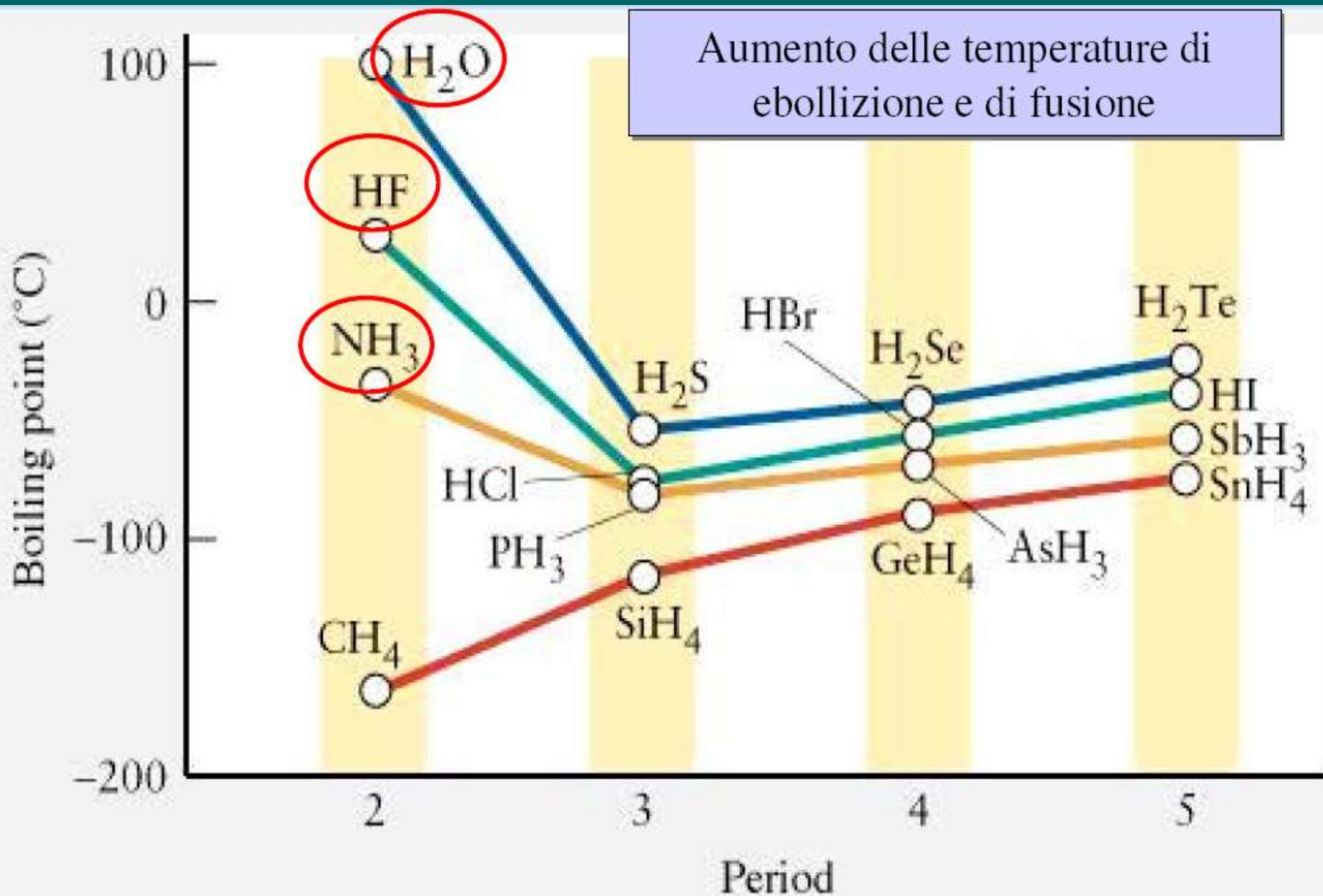


nel
ghiaccio



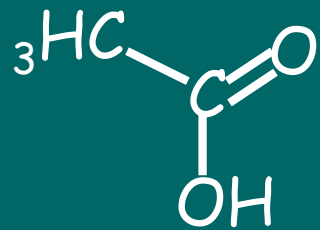
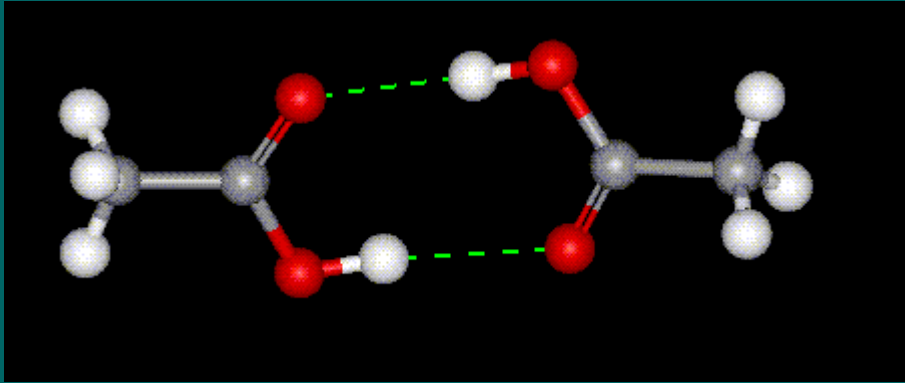
anello esagonale dei cristalli di ghiaccio che spiega l'anomala diminuzione di densità (aumento di V) dell' H_2O nel passaggio stato liquido-solido

LEGAME ad IDROGENO



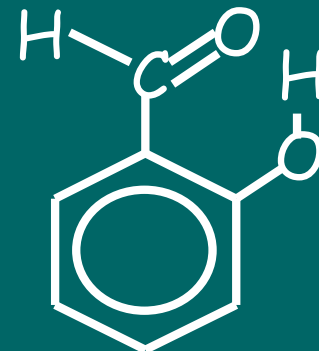
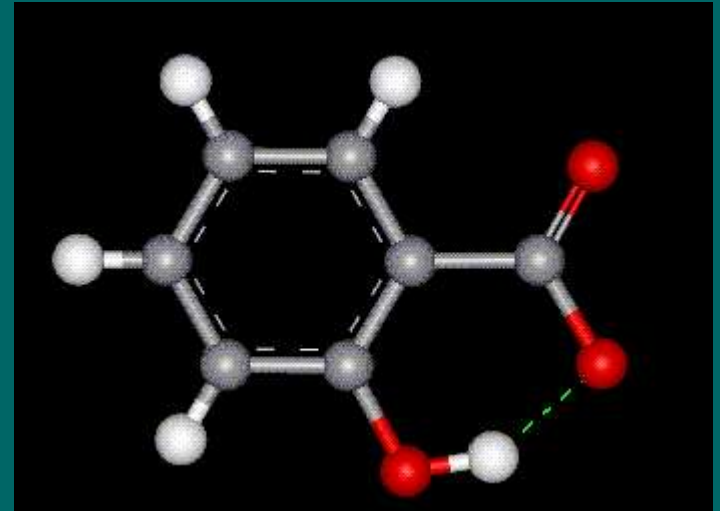
LEGAME a IDROGENO

Legame H
INTERMOLECOLARE



Acido acetico

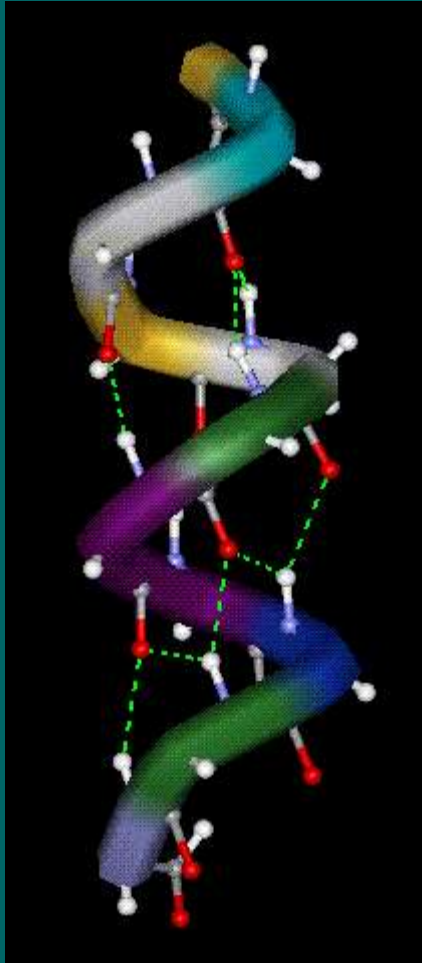
Legame H
INTRAMOLECOLARE



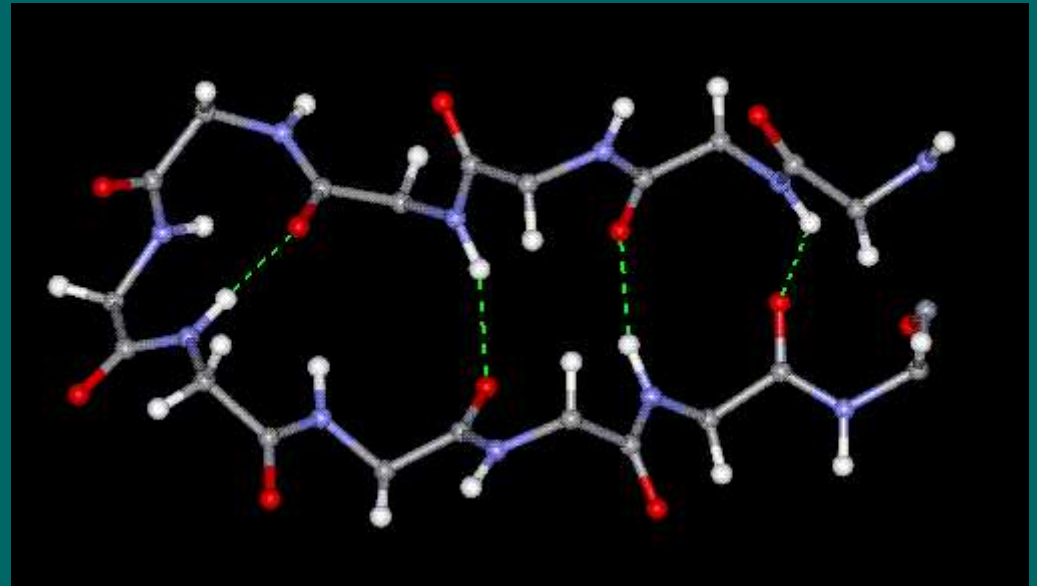
o-idrossibenzaldeide

LEGAME a IDROGENO

nelle PROTEINE



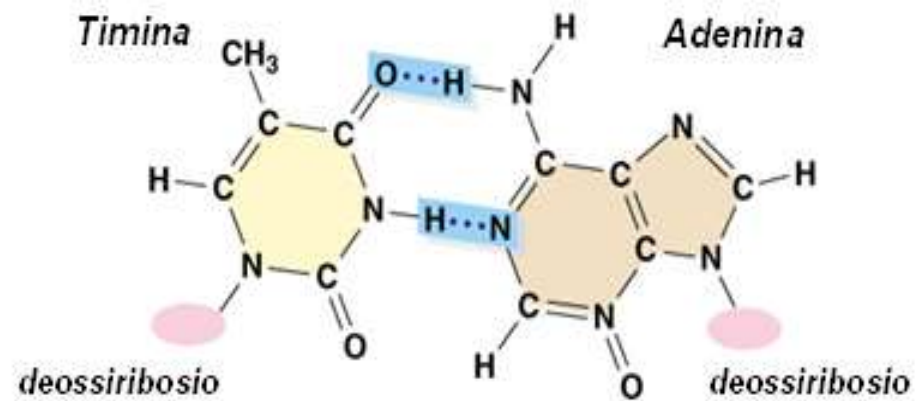
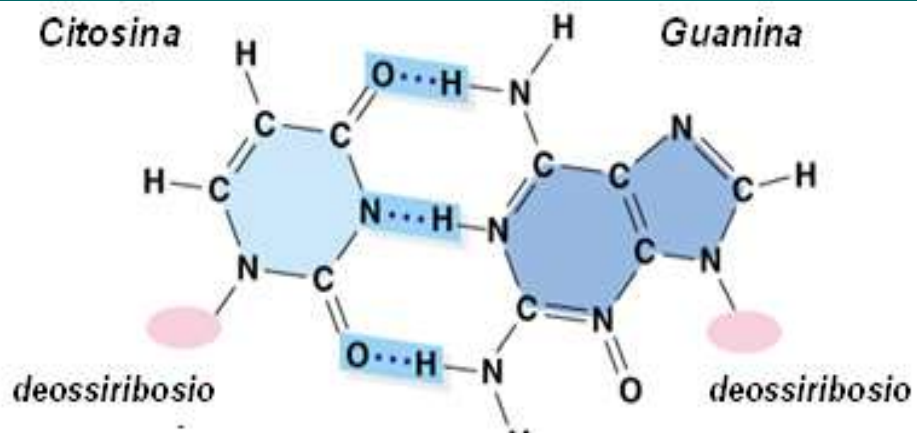
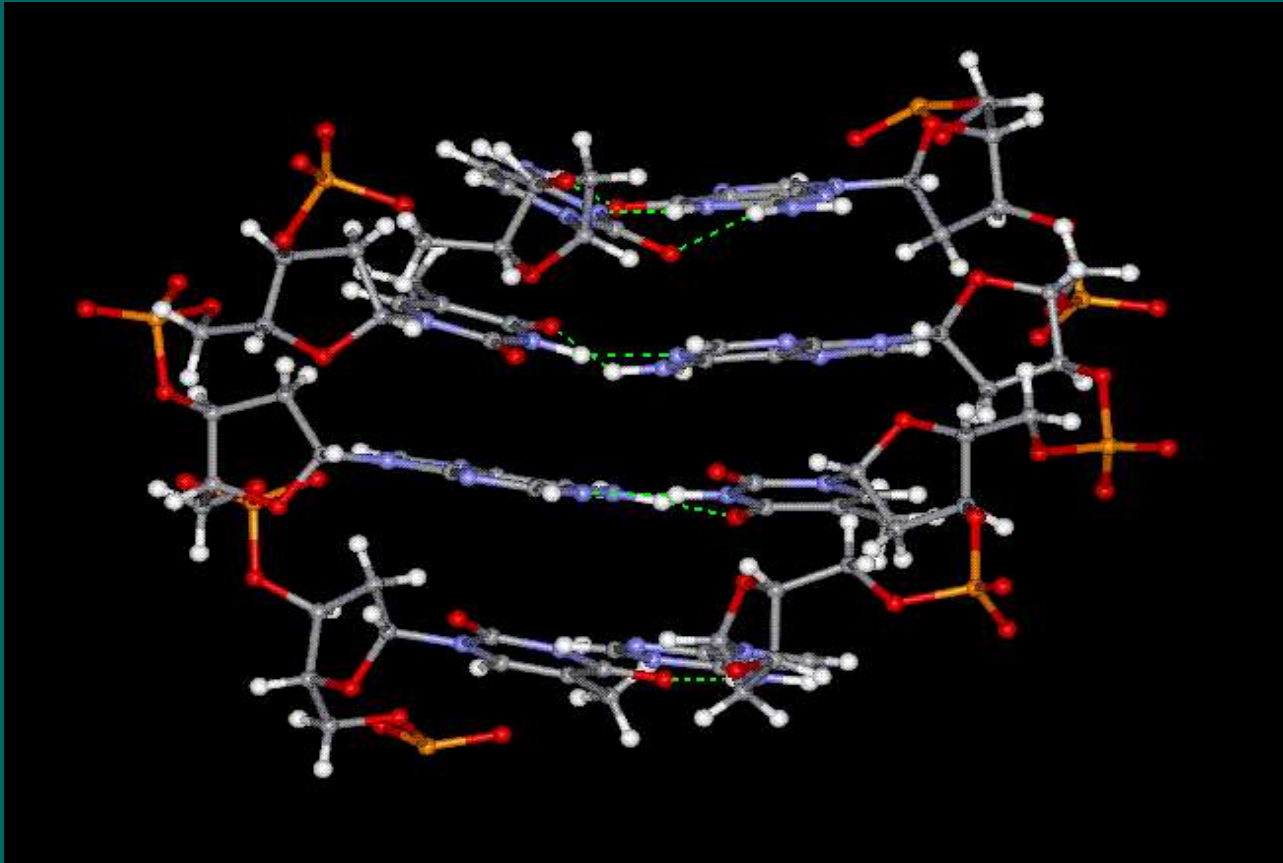
Legami H
in una α -elica



Legami H
in un foglietto β

LEGAME α IDROGENO

DNA



Interazioni DIPOLARI

Legami dipolari

```
graph TD; A[Legami dipolari] --> B[Interazioni IONE-DIPOLO]; A --> C[Interazioni di Van der Waals];
```

Interazioni
IONE-DIPOLO

Interazioni
di Van der Waals

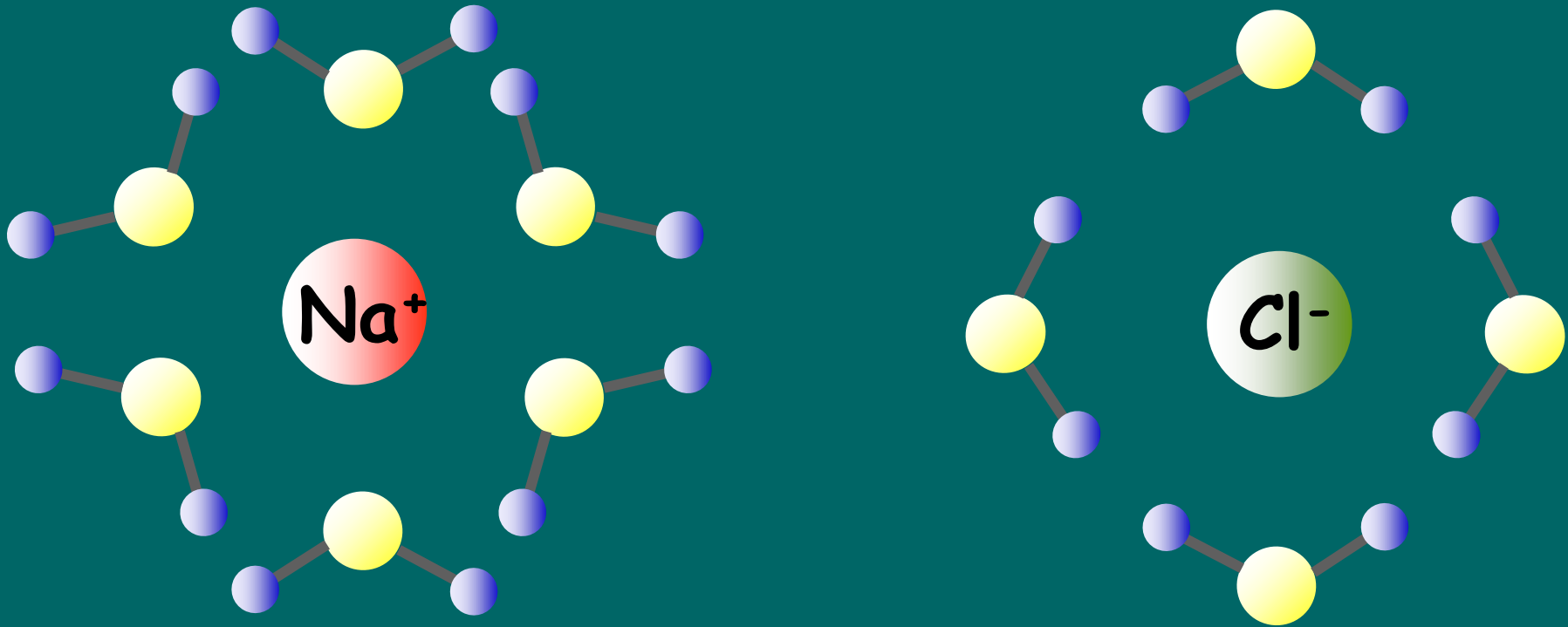
Dipolo permanente-dipolo permanente

Dipolo permanente-dipolo indotto

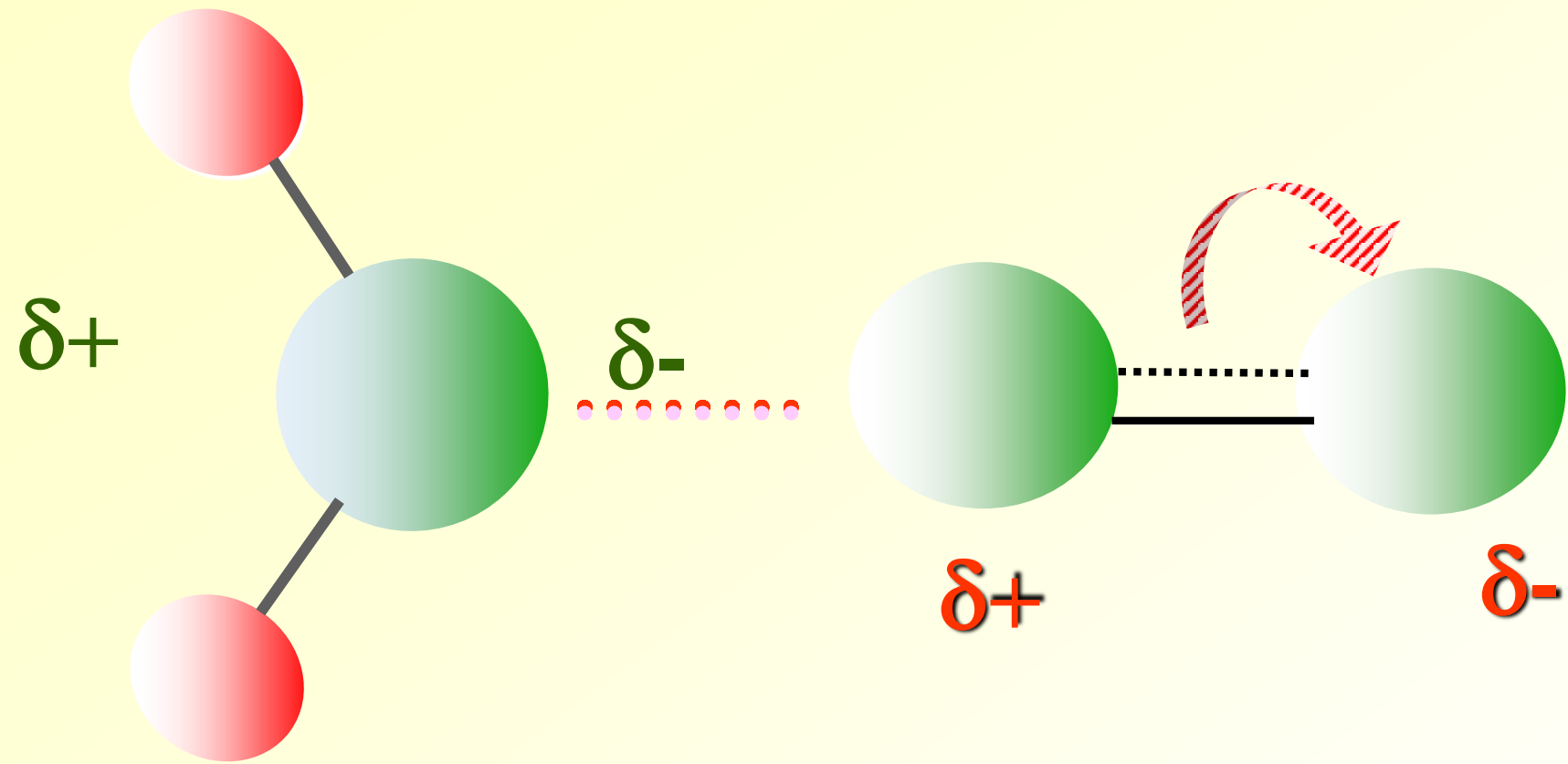
Dipolo istantaneo-dipolo indotto
(forze di dispersione o di
London)

Interazioni IONE-DIPOLO

L'attrazione elettrostatica si stabilisce fra la carica propria dello ione e il dipolo delle molecole circostanti



Soluzione acquosa di NaCl
esempio di legame ione-dipolo



Soluzione acquosa di ossigeno **esempio di legame dipolo permanente - dipolo** **indotto**

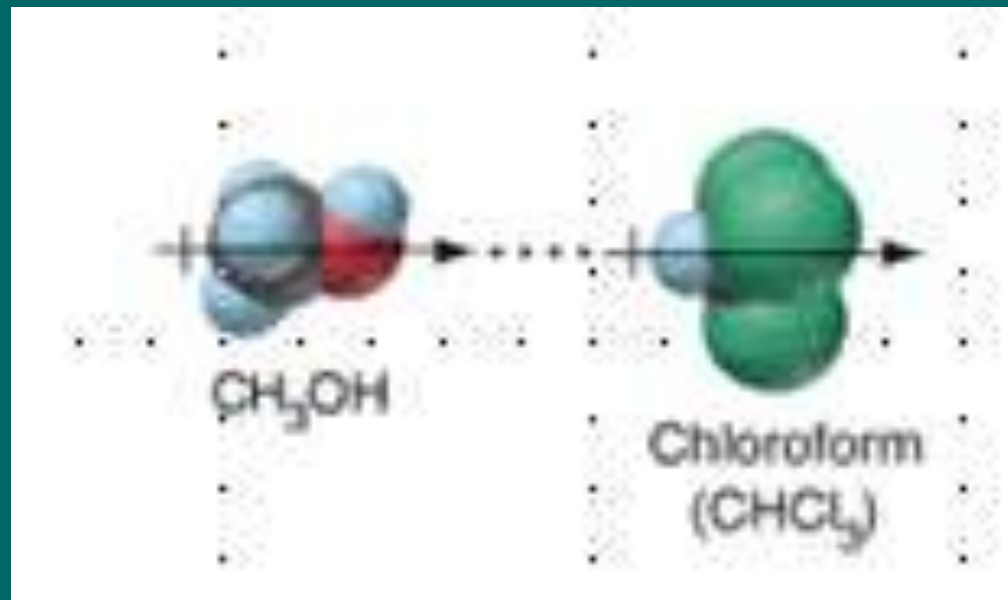
La presenza di un dipolo permanente induce in una molecola non polare una separazione di carica in modo da stabilire un'interazione elettrostatica

Interazioni di Van der Waals

Sono forze di attrazione a *corto raggio* di natura elettrostatica che si instaurano tra molecole in fase gas, liquida o solida

Interazioni DIPOLO-DIPOLO

Si verificano tra molecole POLARI, ovvero quelle che possiedono un momento dipolare totale non nullo

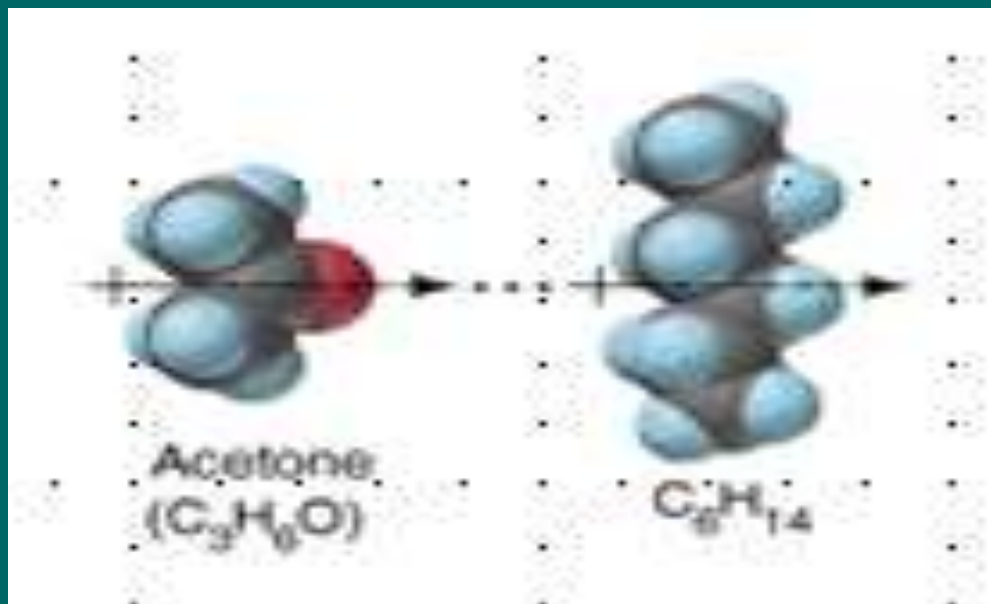


Interazioni di Van der Waals

Interazioni DIPOLO-DIPOLO indotto

Si verificano tra molecole POLARI e molecole APOLARI

DIPOLO indotto= se si avvicina una specie carica, come uno ione o un dipolo, a una molecola apolare questa si polarizza



Interazioni di Van der Waals

Interazioni dipolo istantaneo-dipolo indotto
Si verificano tra molecole APOLARI

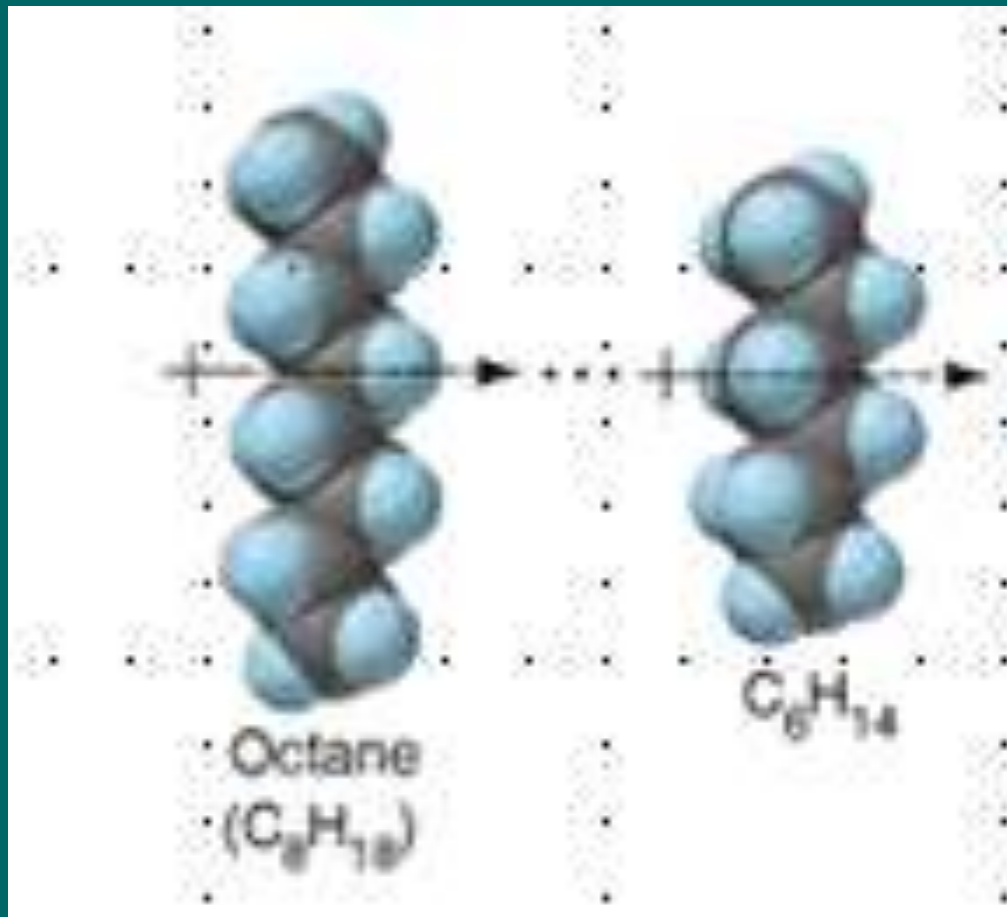
Se si considera la *media nel tempo*, la nuvola elettronica di un atomo è perfettamente simmetrica, ma *in un dato istante* può addensarsi maggiormente da un lato e *in un istante immediatamente successivo* può spostarsi all'altra estremità.

Ciò determina la comparsa di un momento di dipolo elettrico istantaneo variabile nel tempo e mediamente nullo.

Ciascun dipolo istantaneo genera un campo elettrico che polarizza le particelle circostanti, creando dei "dipoli indotti" variabili continuamente. Tra il dipolo "induttore" e il dipolo "indotto" nascono così forze di attrazione

Interazioni di Van der Waals

Interazioni dipolo istantaneo-dipolo indotto
(forze di dispersione o di London)



Interazioni di Van der Waals

Interazioni dipolo istantaneo-dipolo indotto (forze di dispersione o di London)

L'intensità delle forze di London dipendono dalla facilità con cui la nuvola elettronica di un atomo o di una molecola può venire distorta, (*polarizzata*) dal dipolo istantaneo di un atomo o molecola adiacente.

Più alta è la polarizzabilità dell'atomo o della molecola, più le forze di dispersione sono elevate.

In genere atomi e molecole GRANDI sono più facilmente polarizzabili di atomi e molecole di piccole dimensioni

1. Il legame di coordinazione o dativo è un legame:

A ionico

B a idrogeno

C covalente

D dipolo-dipolo

E doppio

2. Un composto ionico si dissocia se sciolto in un solvente:

- A molto volatile
- B polare
- C poco volatile
- D apolare
- E organico con bassa costante dielettrica

3. Indicare in quale delle seguenti sostanze il legame è dovuto principalmente a forze elettrostatiche:

A sodio

B cloruro di sodio

C acido cloridrico

D diamante

E metano

5. Quando due atomi si legano, per energia di legame si intende:

- A l'energia acquistata dagli atomi per la formazione del legame
- B** l'energia perduta dagli atomi per la formazione del legame
- C l'energia donata da un atomo all'altro nella formazione del legame
- D la somma del contenuto energetico di ciascun elettrone coinvolto nel legame
- E l'energia di attivazione

6. Il legame è ionico nel composto di formula:

A CH_3COOH

B KCl

C CO_2

D NH_3

E H_2O

7. Un legame covalente polare si può formare fra:

- A due elementi di diversa elettronegatività
- B due ioni di segno opposto
- C un atomo di potassio e uno di sodio
- D due atomi uguali
- E un atomo di cloro e uno di sodio

8. Quale è la definizione corretta di molecola?

- A L'atomo più piccolo e caratteristico di un elemento.
- B La più piccola quantità di un elemento di cui mantiene le caratteristiche fisiche.
- C** La più piccola quantità di un composto di cui mantiene le caratteristiche chimiche e fisiche
- D La più piccola quantità di un elemento di cui mantiene le caratteristiche chimiche
- E La più piccola quantità di un elemento allo stato solido

9. Il legame tra l'ossigeno e l'idrogeno in una molecola di acqua è:

A ionico

B a idrogeno

C dativo

D covalente

E di coordinazione

10. Quale fra le seguenti molecole non è polare:

A NH_3

B H_2O

C HCl

D CO_2

E CH_3OH

11. Il legame chimico presente tra due atomi di carbonio appartenenti ad una catena idrocarburica satura è:

A ionico

B covalente

C dativo

D metallico

E sempre polarizzato

12. Una delle seguenti caratteristiche è comune allo ione ammonio e al tetracloruro di carbonio:

- A la carica elettrica
- B** la struttura spaziale
- C le spiccate proprietà basiche
- D le spiccate proprietà acide
- E l'energia di legame tra gli atomi costituenti le rispettive molecole

13. Una delle seguenti caratteristiche è comune allo ione ammonio e al tetracloruro di carbonio:

- A la carica elettrica
- B** la struttura spaziale
- C le spiccate proprietà basiche
- D le spiccate proprietà acide
- E l'energia di legame tra gli atomi costituenti le rispettive molecole

14. Nella molecola di H_2O l'angolo H-O è pari a:

A 90°

B 180°

C $109,5^\circ$

D 45°

E $104,5^\circ$

15. Il legame a idrogeno:

- A è un legame forte
- B** è presente nell'acqua allo stato solido e a quello liquido
- C è un legame covalente debole
- D è presente nel cicloesano
- E si stabilisce fra molecole polari

16. Per doppio legame si intende:

- A un legame covalente fra tre molecole
- B un legame fra ioni monovalenti
- C un legame tra ioni bivalenti
- D un legame derivante dalla compartecipazione di due coppie di elettroni
- E un legame tra due atomi