

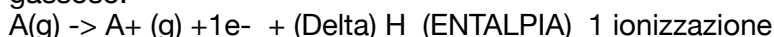
Legame chimico

Si ha un legame chimico quando una forza di natura elettrostatica tiene uniti più atomi in una specie chimica (legami forti, o primari o intramolecolari) o più molecole in una sostanza allo stato condensato (legami deboli, o secondari o intermolecolari).

I legami chimici "più forti" hanno un contenuto energetico maggiore e sono più difficili da rompere, mentre i legami minori hanno un contenuto energetico minore e sono più facili da rompere. Da ciò deriva che le molecole che hanno al loro interno legami chimici più deboli sono più instabili. Inoltre tanto più un legame è forte, tanto minore è la lunghezza del legame, essendo la forza che tiene uniti gli atomi maggiore.

ENERGIA DI IONIZZAZIONE

L'energia di ionizzazione è l'energia necessaria per strappare un elettrone di valenza allo stato gassoso.



L'elettrone deve appartenere al guscio più esterno poiché richiede meno energia per essere allontanato rispetto ad un elettrone esterno.

Processo endoergonico (richiede energia per avvenire) per gli elementi a destra della tavola periodica.

Processo esoergonico (non richiede energia) per gli elementi a sinistra della tavola periodica. Si libera energia.



I valori del ΔH si possono calcolare sperimentalmente, più la ionizzazione alta più sarà alta l'energia di ionizzazione (ΔH). ΔH varia da elemento ad elemento \rightarrow si esprime in kJ/mol

H \rightarrow 1312 kJ/mol

He \rightarrow 2372 KJ/mol (Alta energia di ionizzazione poiché c'è attrazione tra gli elettroni e i protoni)

Li \rightarrow 520 kJ/mol (la ΔH bassa perché devono allontanare un elettrone di valenza in un orbitale esterno tutti i metalli alcalini hanno ΔH bassa)

	2	I	II	III	IV	
Na	11	496	4561	6910	9544	Na+
Mg	12	738	1451	7733	10542	Mg 2+
Al	13	577	1817	2745	11577	Al 3+

ENERGIA DI AFFINITÀ ELETTRONICA

Processo nel quale viene aggiunto un elettrone ad un elemento assumendo così carica negativa.

Processo endoergonico (necessita di energia per avvenire) per gli elementi a sinistra della tavola e per i gas nobili.

Processo esoergonico (sviluppa energia) per gli elementi a destra della tavola periodica (es. alogeni).



△ Ionizzazione facilitata a sinistra Affinità elettronica facilitata a destra

ELETTRONEGATIVITÀ DEGLI ELEMENTI

A-B A e B sono due elementi chimici

Coppia di elettroni di legame: Un elettrone è messo in condivisione da A mentre un elettrone è messo in condivisione da B..

L'elettronegatività misura la tendenza di A o B di attrarre verso di sé gli elettroni di legame.
O A o B attrae maggiormente la coppia di elettroni di legame.

Linus Pauling (1954) -> premio Nobel per la chimica sul legame chimico e sull'elettronegatività.
Premio Nobel per la pace per l'antinuclearismo.

scala di Pauling. rappresenta la media geometrica delle energie di legame dei legami covalenti puri A-A e B-B. Tale valore viene assunto come stima dell'energia dell'ipotetico legame covalente puro A-B.

H₂ EI=432kJ/mol

F₂ EI=139kJ/mol

HF EI=565kJ/mol

media matematica: $E(H_2) + E(F_2) / 2 = 285$

media geometrica: $\sqrt{E(H_2) E(F_2)} = 245$

Non sono corrette per determinare l'energia di legame

$$\Delta = EI(HF) - \sqrt{[EI(H_2) + E(F_2)]} = 320 \text{ kJ/mol}$$

EI(HF): energia sperimentale

DIFFERENZA DI ELETTRONEGATIVITÀ

$$X_F - X_H = 0.102 \times \sqrt{\Delta}$$

La nuvola elettronica (i due elettroni condivisi) è maggiormente spostata verso il fluoro (più elettronegativo)

I valori di elettronegatività calano verso il basso di un gruppo

I valori di elettronegatività aumentano all'aumentare del numero del periodo (di 0,5 ogni elemento)

$\Delta X = 0$ L EGAME PURO : Quando sono due elementi uguali l'elettronegatività è uguale a zero.

$0 < \Delta X < 0,4$ LEGAME COVALENTE instaura quando avviene una sovrapposizione degli orbitali atomici di due atomi con una differenza di elettronegatività

$0.4 < \Delta X < 2$ LEGAME COVALENTE POLARE (HF, CH, OH)

$\Delta X > 2$ LEGAME IONICO: i doppietti elettronici sono fortemente vincolati all'elemento più elettronegativo (NaCl)

Geometria di lewis

A partire dalla configurazione elettronico degli atomi che che la compongono è possibile costruire una molecola con il metodo di Gilbert Lewis .

Per costruire una configurazione elettronica è necessario conoscere il numero di atomico z e la sequenza degli orbitali atomici.

Nella formazione dei legami tra atomi, non tutti gli elettroni di ciascun atomo sono coinvolti, bensì solo quelli di valenza ovvero del guscio più esterno.

La rappresentazione di Lewis di un determinato elemento chimico tiene conto solo degli elettroni di valenza, ciascun elettrone presente singolarmente in un orbitale atomico viene rappresentato da un punto o da un trattino.

Elemento	Orbitale s	Orbitali p	Configurazione superficiale	Configurazione di Lewis
Litio	\uparrow	---	$2s^1$	Li·
Berillio	$\uparrow\downarrow$	---	$2s^2$:Be o Be
Boro	$\uparrow\downarrow$	\uparrow ---	$2s^2 2p^1$:B· o B·
Carbonio	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow$ —	$2s^2 2p^2$:C· o C·
Azoto	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$	$2s^2 2p^3$:N· o N·
Ossigeno	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$	$2s^2 2p^4$:O· o O·
Fluoro	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$	$2s^2 2p^5$:F· o F·
Neon	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$	$2s^2 2p^6$:Ne: o Ne

La configurazione del berillio, del boro e del carbonio non giustifica la formazione dei loro composti. Infatti il berillio non potrebbe formare composti non avendo elettroni spaiati, il boro solo un legame e il carbonio solo due.

La configurazione del carbonio a due elettroni spaiati viene utilizzata solo per costruire la molecola del monossido di carbonio e dei carbeni. In tutte le altre molecole il carbonio forma sempre quattro legami, quindi spaiando la coppia di elettroni non spaiati. Ciò corrisponde alla formazione di uno stato eccitato.

Promozione elettronica: gli elettroni vengono promossi ad un orbitale maggiore così ho due elettroni spaiati utilizzabili per creare un legame.

Il formalismo di Lewis prevede la compartecipazione degli elettroni spaiati dei vari atomi che formano la molecola. Gli elettroni singoli di due atomi diversi si accoppiano formando una coppia di legame. Gli elettroni possono essere condivisi in modo tale che tra due atomi si possa formare un legame semplice, oppure uno doppio e triplo.

Gli elementi dello stesso gruppo hanno la stessa proiezione.

Nel caso dell'ossigeno, i due atomi mettono in compartecipazione quattro elettroni spaiati totali con la formazione di un doppio legame. Ciò è in contraddizione con la caratteristica peculiare della molecola dell' O_2 . Se si ipotizzasse la formazione di un legame singolo tra i due atomi di O la molecola presenterebbe due elettroni spaiati, ma ciò sarebbe in contraddizione con la regola che tutti gli elettroni spaiati devono essere accoppiati.

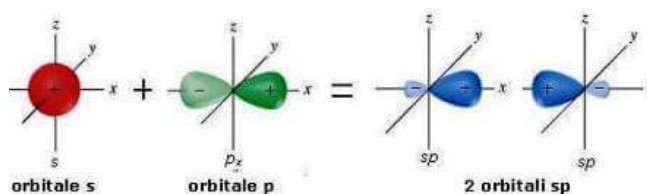
Paramagnetismo: presenza nella molecola di due elettroni spaiati

Orbitali ibridi

Ricombinazione degli orbitali atomici puri, si possono ibridare tra loro gli orbitali s e p.

$S + P_x$ (p_y e p_z rimangono puri) = SP (geometria lineare)

BeF₂ F-Be-F
CO₂ O=C=O
C₂H₂
HCN



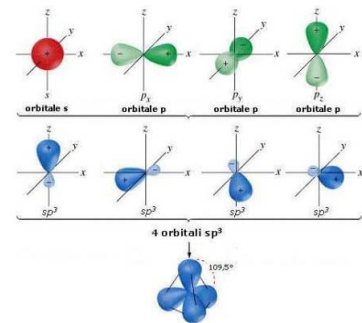
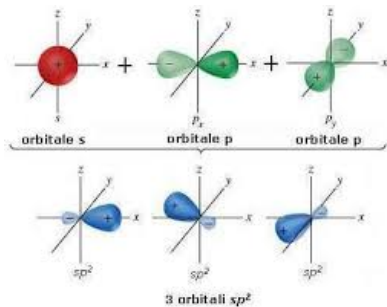
$S + p_x + p_y = sp^2$ (geometria trigonale)

$S + p_x + p_y + p_z = sp^3$ (geometria tetraedrica)

BF₃
C₂H₂

CH₄

ClO₄⁻



VSEPR (Valence shell electron pair repulsion)

La teoria VSEPR (acronimo dall'inglese Valence Shell Electron Pair Repulsion) è usata come metodo per valutare la disposizione geometrica degli atomi di una molecola nello spazio, e si basa sul fatto che i elettroni tendono a disporsi il più lontano possibile fra loro.

Tale teoria si basa sull'ipotesi che la distribuzione dei legami attorno ad un atomo dipende dal numero totale di coppie di elettroni che lo circondano, sia quelle che sono coinvolte in legami chimici sia quelle che non sono coinvolte in nessun legame chimico. Tali coppie di elettroni si dispongono nello spazio in modo da minimizzare le forze di repulsione reciproca.

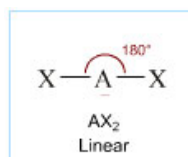
AX_m E_n

A: atomo centrale

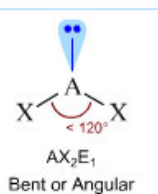
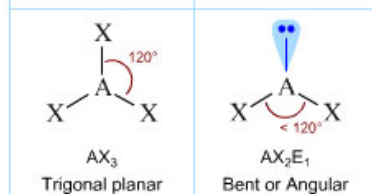
X: atomi legati a A

En: doppietto di elettroni di non legame

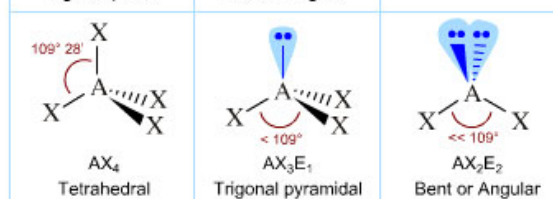
AX₂ BeF₂
(geometria lineare)



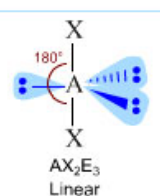
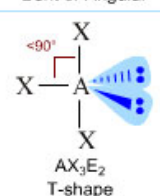
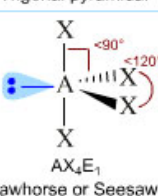
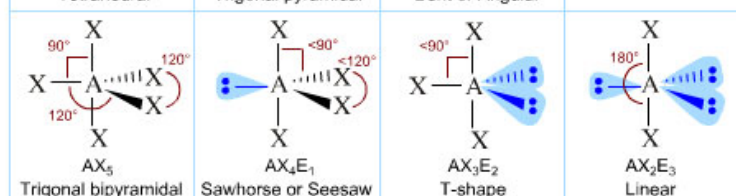
AX₃ BF₃
AX₂E SO₂
(Geometria trigonale)



AX₄
AX₃E NH₃
PH₃
AX₂E₂ H₂O
(Geometria tetraedrica)



AX₅
AX₄E SF₄
AX₃E₂ Xe F₂
AX₂E₃
(trigonal bipyramidale)



AX₆
AX₅E XeF₃
AX₄E₂
AX₃E₃
AX₂E₄
(Geometria ottaedrica)

