

CHIMICA

Corso di Laurea in Informatica

Prof.ssa Valentina Borghesani

Dipartimento di Scienze Chimiche, della Vita e della Sostenibilità Ambientale

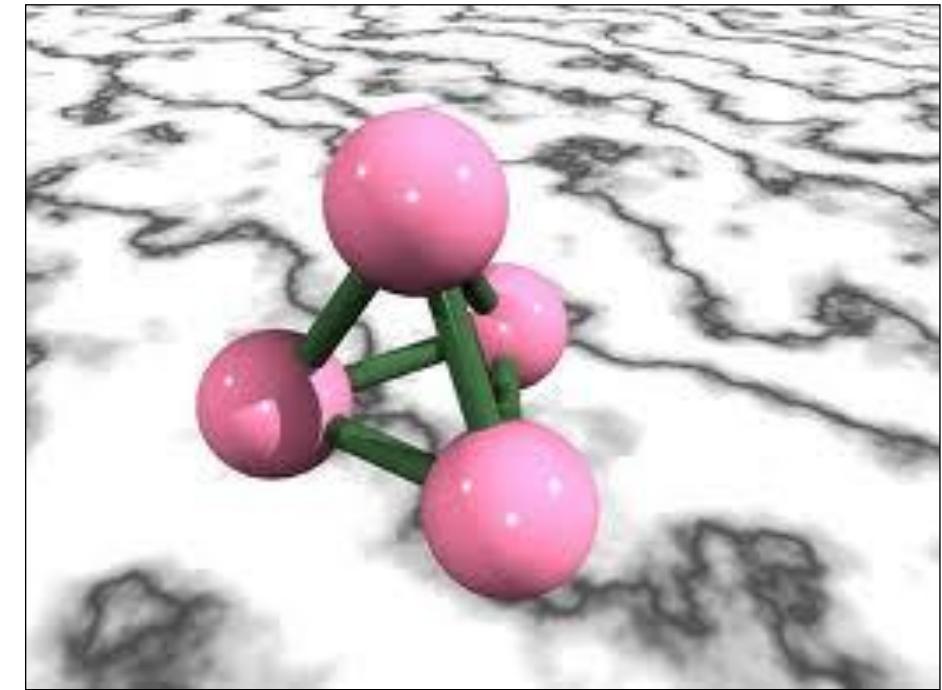
Plesso di Chimica

0521 902056

email: **valentina.borghesani@unipr.it**

Il legame chimico

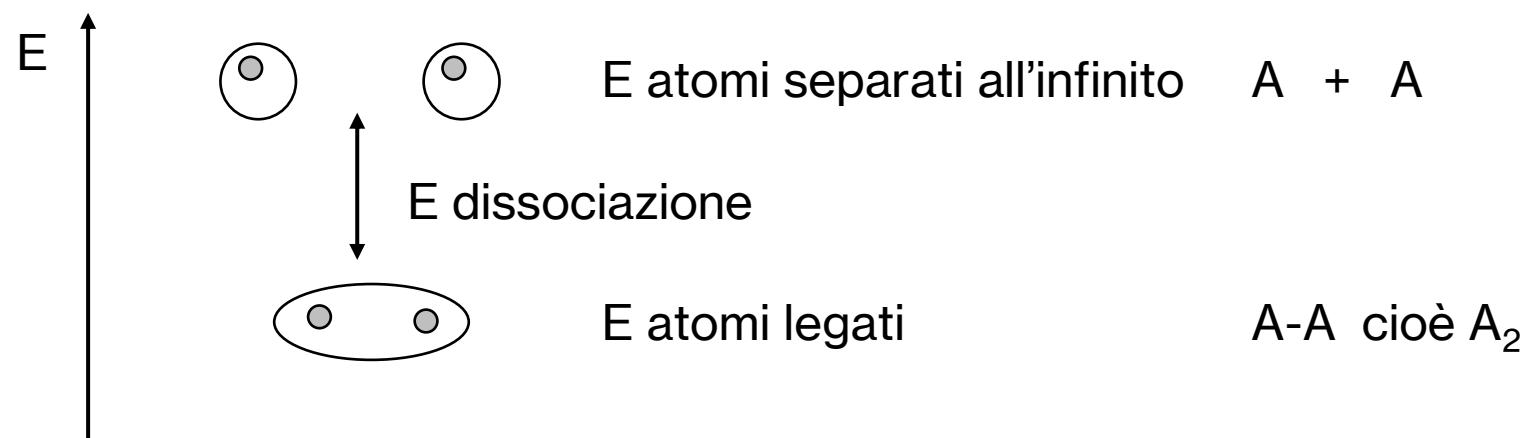
- Legame Covalente
 - Curva di Morse
 - Strutture di Lewis
 - Elettronegatività
 - Densità elettronica sperimentale
- Legame Ionico
 - Energia reticolare
 - Entalpia di formazione
 - Ciclo di Born-Haber
 - Proprietà dei composti ionici
- Geometrie VSEPR
- Teorie del legame
 - Modello VB
 - Modello MO
- Legame Metallico
- Interazioni deboli (Legame a Idrogeno)



Il legame chimico

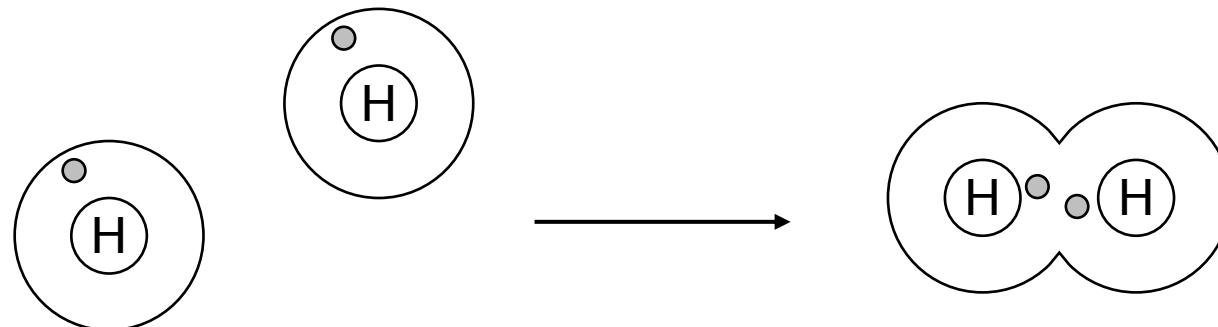
Definizione: il legame chimico è una connessione tra atomi che si forma quando gli elettroni si ridistribuiscono attorno ai nuclei in modo che la loro configurazione nel sistema legato possiede energia inferiore rispetto alla configurazione dei due atomi separati.

La ridistribuzione degli elettroni libera energia e per ripristinare la situazione iniziale degli atomi separati occorre fornire l'energia di dissociazione (rompere il legame).



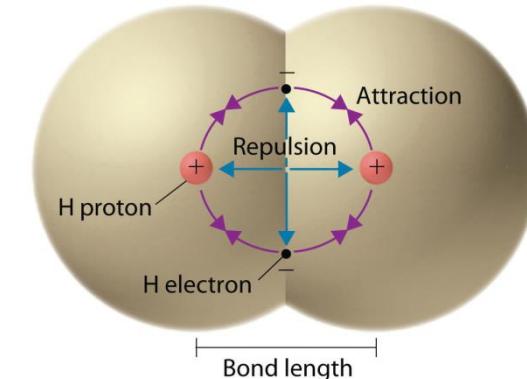
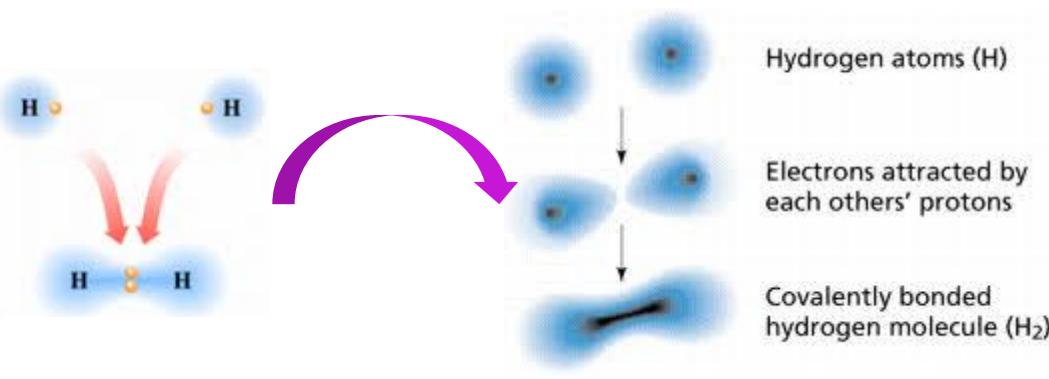
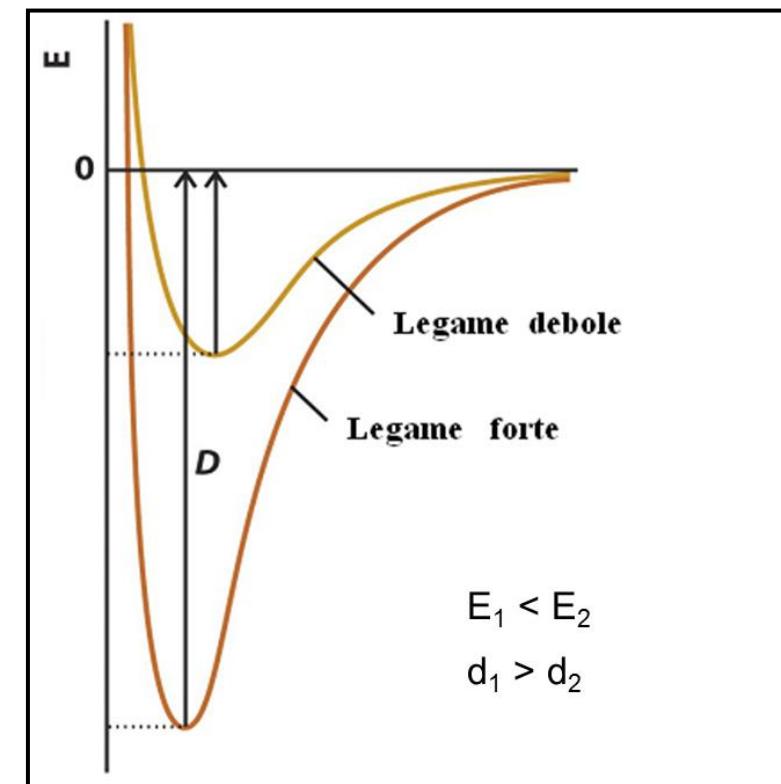
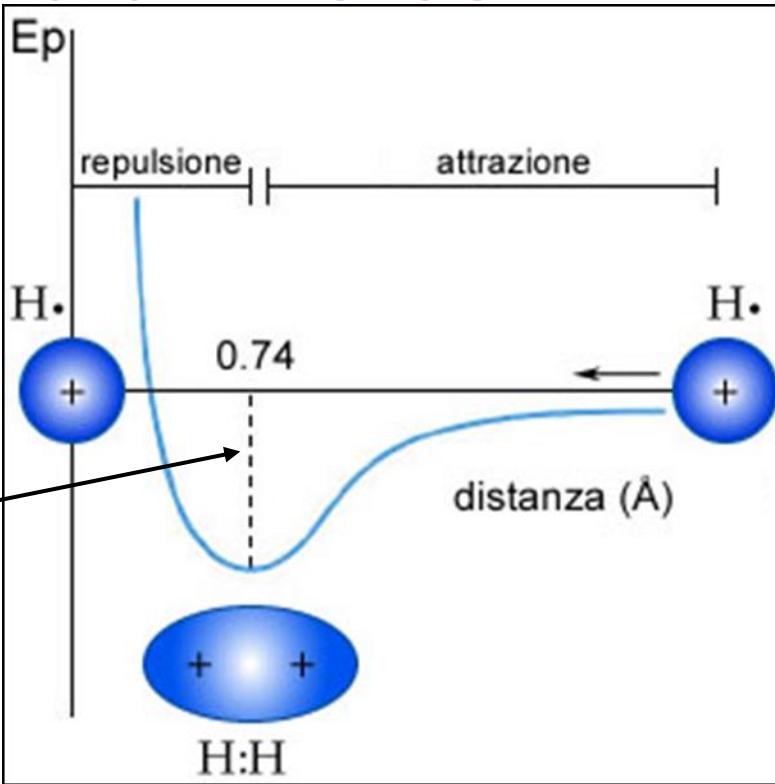
Il Legame Covalente

Nella maggior parte dei composti la combinazione tra energia di ionizzazione ed affinità elettronica non è sufficiente a consentire il trasferimento completo di elettroni tra due atomi il legame chimico si forma grazie al fatto che coppie di elettroni vengano condivise dagli atomi nello spazio compreso tra i nuclei. L'attrazione elettrostatica di due nuclei rispetto a uno solo rende più stabile il sistema, abbassando l'energia degli elettroni condivisi rispetto allo stato degli atomi isolati. Gli elettroni costituiscono una coppia di legame, che si localizza nello spazio tra i nuclei e li Lega assieme.



La curva di Morse

Energia di dissociazione



Il Legame Covalente

Il modello del **legame covalente** è basato sulla mutua attrazione/repulsione tra **nuclei e elettroni**

- un atomo raggiunge una configurazione elettronica stabile **condividendo elettroni** con altri atomi
- ogni atomo "vede" gli elettroni condivisi come suoi propri
- danno legami covalenti i non-metalli, i semimetalli e l'idrogeno

Esistono due teorie che permettono di spiegare la formazione del legame covalente:

Teoria del Legame di Valenza (VB)

Teoria dell'Orbitale Molecolare (MO)

Il Legame Covalente: il modello di Lewis

Un atomo può formare legami covalenti mediante la condivisione di coppie di elettroni se ha modo di localizzare i nuovi elettroni compartecipati nello strato di valenza. Se lo strato di valenza è già completamente occupato, gli elettroni che dovrebbero essere accolti in compartecipazione non possono essere collocati favorevolmente nello spazio tra i nuclei senza violare il principio di Pauli.

CRITERI EMPIRICI per la formazione del legame covalente basati sulla configurazione elettronica degli atomi che devono legare:

1. Regola dell'ottetto
2. Coppie di elettroni non condivisi
3. Legami semplici, doppi e tripli
4. Legame dativo (una coppia di elettroni proviene da un solo atomo)

Teoria del Legame di Valenza (V.B.) (Modello di Lewis)

Lewis, Heitler, London
1913 ...

Il **legame chimico** tra due atomi si forma per **sovraposizione** di **due orbitali atomici** (messa in comune di una coppia di elettroni)

- Il numero di legami che un atomo può formare è dato dal numero di elettroni di valenza non accoppiati che esso possiede



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



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

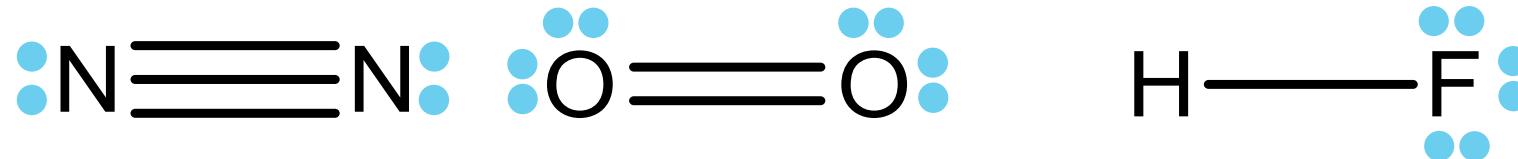


$1s^2 2s^2 2p^5$



$1s^1$

- Gli elettroni di valenza già accoppiati restano come coppie di non legame (coppie solitarie) nella molecola



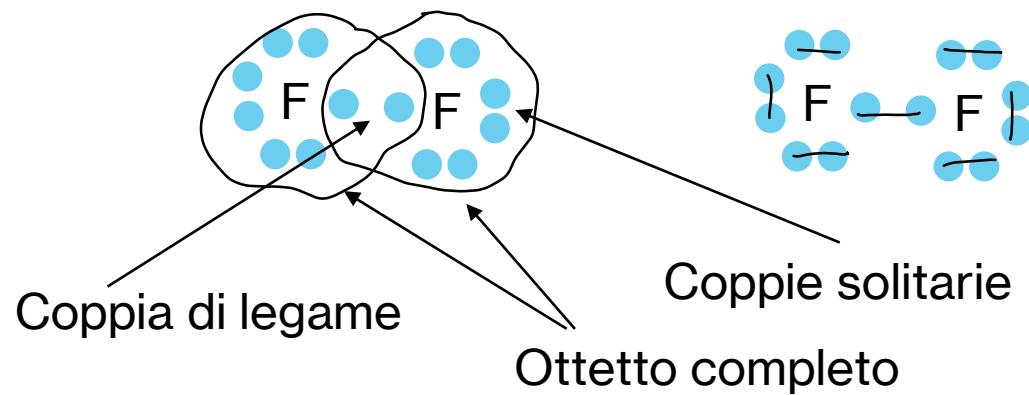
- Criterio della massima sovrapposizione orbitalica (forza del legame)

Il Legame Covalente: il modello di Lewis

CRITERI EMPIRICI per la formazione del legame covalente basati sulla configurazione elettronica degli atomi che devono legare:

1. Regola dell'ottetto

Nella formazione di un legame covalente gli atomi tendono a condividere coppie di elettroni fino a trovarsi circondati da 8 elettroni nello strato di valenza, completando la configurazione tipo gas nobile (per H è un doppietto)

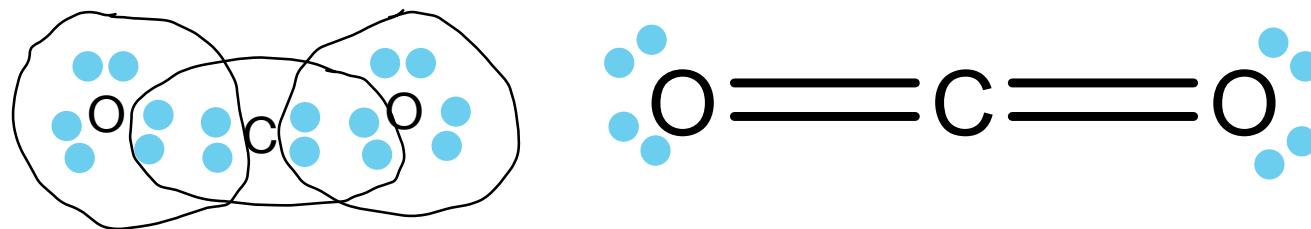


2. Sull'atomo possono rimanere coppie di elettroni non condivise (coppie solitarie, coppie di non legame) che non hanno influenza sulla stabilizzazione del legame.

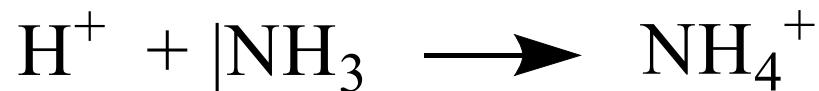
Il Legame Covalente: il modello di Lewis

CRITERI EMPIRICI per la formazione del legame covalente basati sulla configurazione elettronica degli atomi che devono legare:

3. Due atomi possono condividere una (legame singolo), due (legame doppio) o tre (legame triplo) coppie di elettroni



4. La coppia di legame condivisa può provenire anche da un solo dei due atomi, che funge da donatore, rispetto all'altro che funge da accettore (legame dativo)



Quindi...

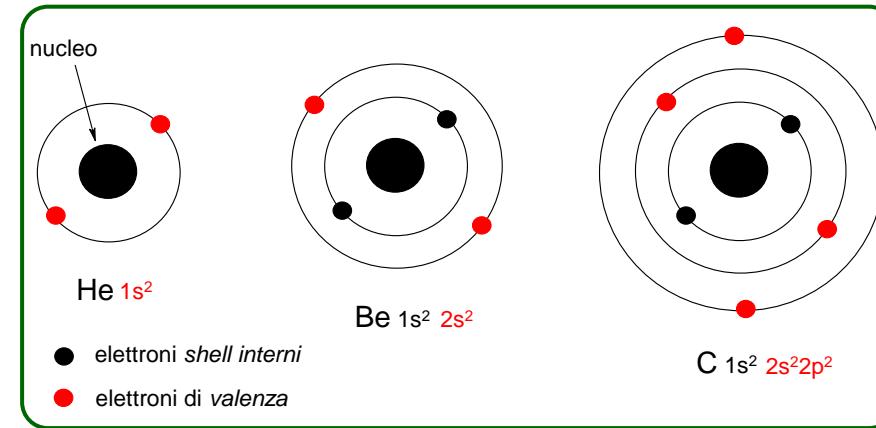
- un **atomo** raggiunge una **configurazione elettronica stabile** condividendo con altri atomi elettroni disaccoppiati (spaiati) (**Regola dell'ottetto**)
- due **elettroni condivisi** definiscono un **legame**
- gli **elettroni di legame** appartengono ad **entrambi gli atomi** da cui provengono
- le coppie di **elettroni** di valenza **non implicate nel legame** sono chiamate **coppie solitarie**

6	12,011
4,2,0,-2,-4	
$44925 \cdot 10^5$ atm	
3825 Sublima	
2,266 Grafite	C
[He]2s ² 2p ²	
Carbonio	

IIIB	III A	IVB	IV A	VB	VA	VIB	VI A	VIIA	VII B	VII A
5 10,811 2075	6 12,011 4,2,0,-2,-4 44925 · 10 ⁵ atm 3825 Sublima C [He]2s ² 2p ¹ Boro	7 14,00674 5,4,3,2,-3 44925 · 10 ⁵ atm 3825 Sublima C [He]2s ² 2p ² Carbonio	8 15,9994 -2,-1 -210,00 -195,79 °C N [He]2s ² 2p ³ Azoto	9 18,9984032 -1 -218,79 -182,95 °C O [He]2s ² 2p ⁴ Ossigeno	10 20,1797 -1 -219,62 -188,12 °C F [He]2s ² 2p ⁵ Fluoro					
13 26,981539 660,32 2,699	14 28,0855 4,-4 1414 3265 2,336	15 30,973762 5,3,-3 44,15 Bianco 3265 1,82 Bianco 2,070	16 32,066 6,4,-2 115,21 277 440,60 2,070	17 35,4527 7,5,3,1,-1 -101,5 -34,04 1,56 33,5 °C 1,40 -16 °C	18 39,948 -1 -189,3 -185,9 Cl Ar					
IB 11 IB [Ne]3s ² 3p ¹ Alluminio	IIB 12 IIB [Ne]3s ² 3p ² Silicio	IB 11 IB [Ne]3s ² 3p ³ Fosforo	IB 11 IB [Ne]3s ² 3p ⁴ Zolfo	IB 11 IB [Ne]3s ² 3p ⁵ Cloro	IB 11 IB [Ne]3s ² 3p ⁶ Argo					
29 63,546 1084,62 2,1	30 65,39 419,53 2,1	31 69,723 29,76 3,1	32 72,61 938,25 4,2	33 74,92159 817,8atm 2204	34 78,96 221 685 4,82	35 79,904 -7,2 58,78 3,12	36 83,89 -157,36 2,155 153 °C Kr			
Cu [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ Rame	Zn [Ar]3d ¹⁰ 4s ² Zinco	Ga [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ¹ Gallio	Ge [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ² Germanio	As [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ³ Arsenico	Se [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ⁴ Selenio	Bromio [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ⁵	Cripto [Ar]3d ¹⁰ 4s ² p ⁶			

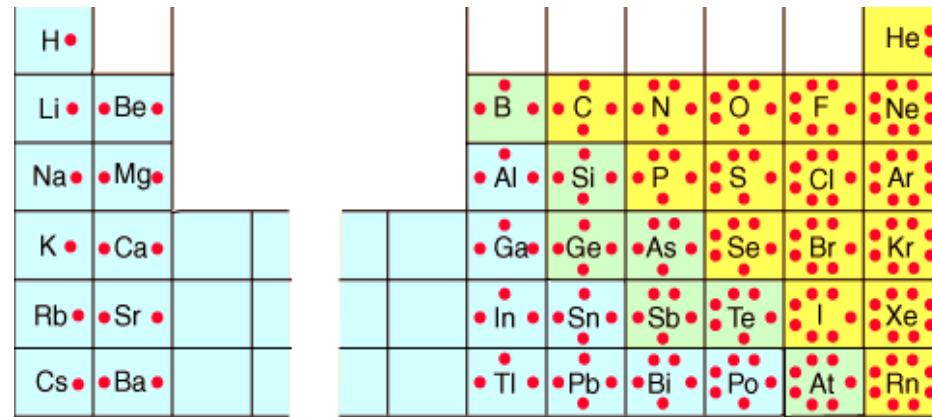
H •	
Li •	•Be•
Na •	•Mg•
K •	•Ca•
Rb •	•Sr•
Cs •	•Ba•

						He
•B	•C	•N	•O	•F	•Ne	
•Al	•Si	•P	•S	•Cl	•Ar	
•Ga	•Ge	•As	•Se	•Br	•Kr	
•In	•Sn	•Sb	•Te	•I	•Xe	
•Tl	•Pb	•Bi	•Po	•At	•Rn	



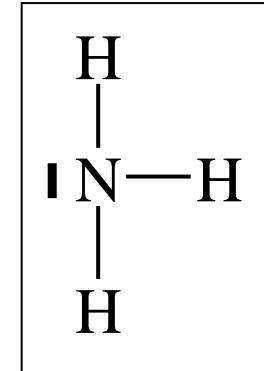
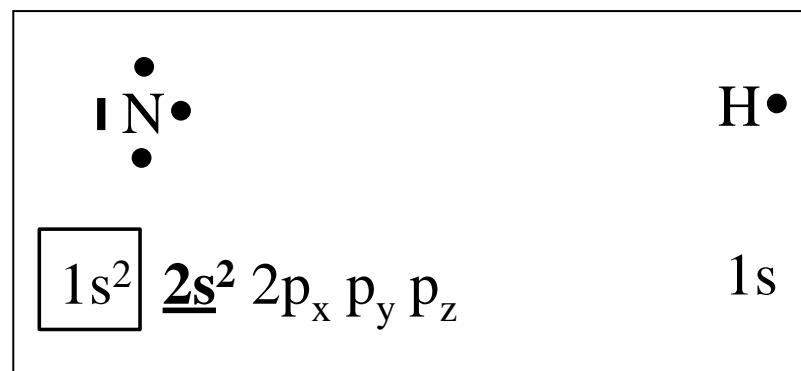
Formule di struttura di Lewis

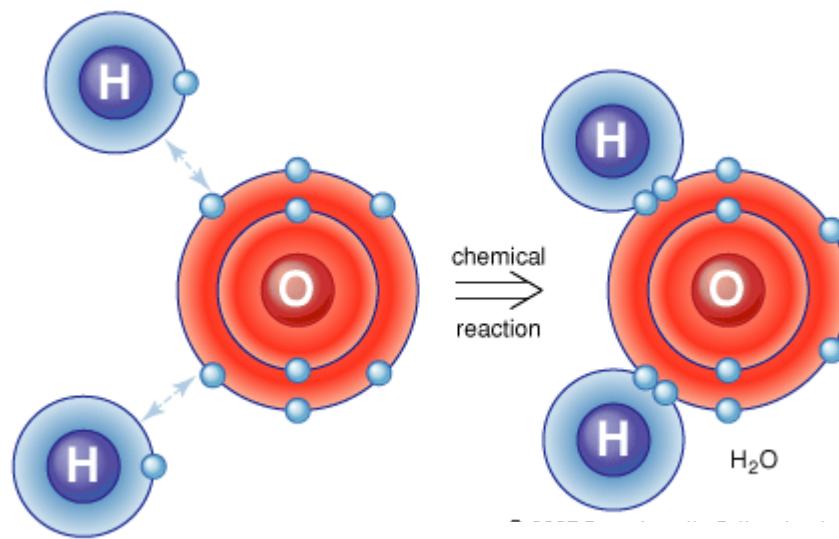
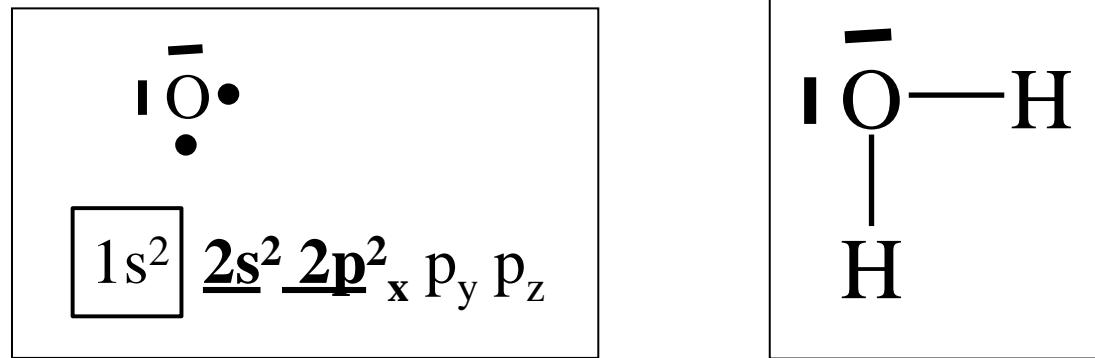
Lewis dot diagram



1

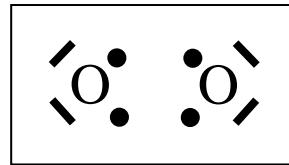
elettrone di valenza



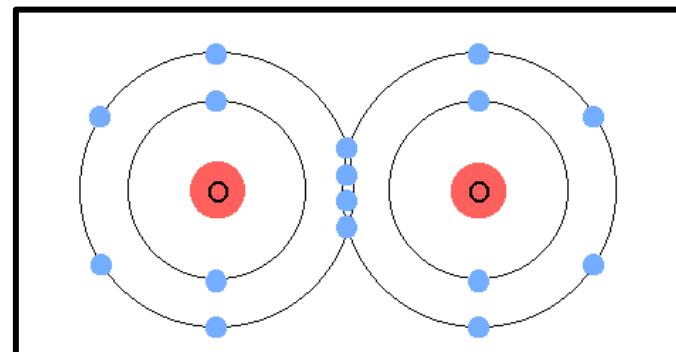
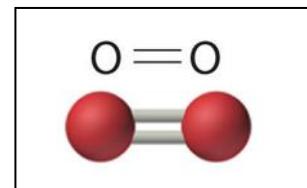
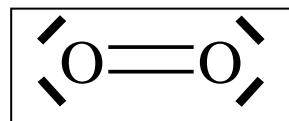


Legame doppio (O_2)

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

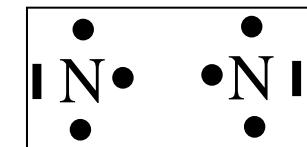


$1s^2 2s^2 2p^4$

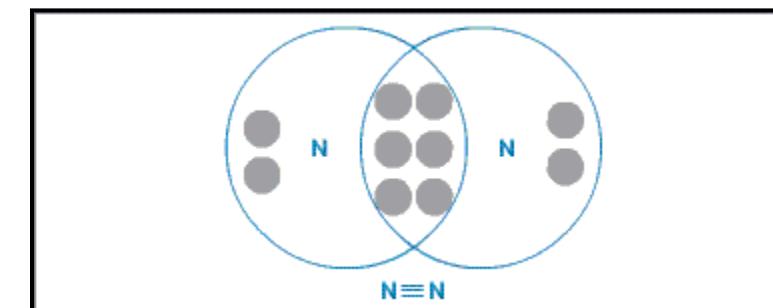
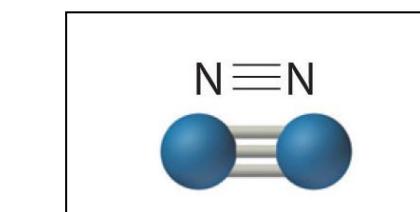


Legame triplo (N_2)

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



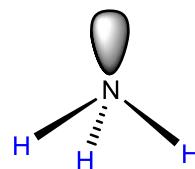
$1s^2 2s^2 2p^3$



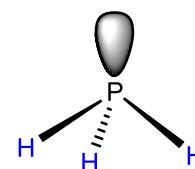
Formule di Lewis di un composto...

- Determinare l'atomo centrale (se esiste)
- L'**idrogeno** forma **un solo legame** (terminale), l'**ossigeno** ne forma **due**, il **carbonio** sempre **quattro**
- Scrivere lo scheletro della struttura e connettere con una linea (un legame) gli atomi con quello centrale
- Assegnare **coppie solitarie** intorno agli **atomi terminali** in modo che raggiungano l'**ottetto** (eccezioni!)
- Se l'atomo centrale non raggiunge l'ottetto formare **legami multipli**
- In uno ione aggiungere o sottrarre elettroni secondo la carica

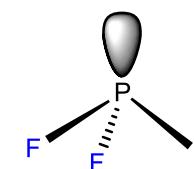
NH_3



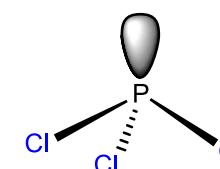
PH_3



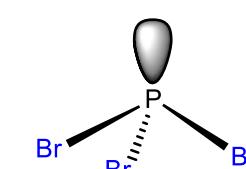
PF_3



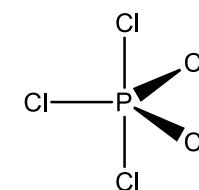
PCl_3



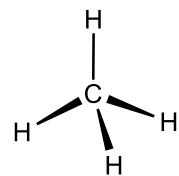
PBr_3



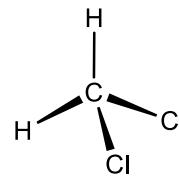
PCl_5



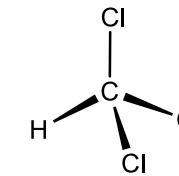
CH_4



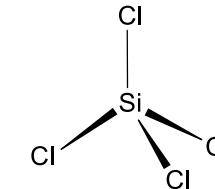
CH_2Cl_2



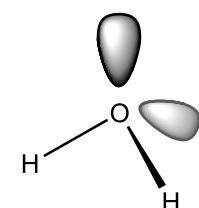
CHCl_3



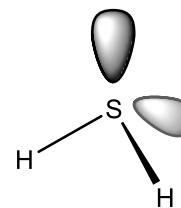
SiCl_4



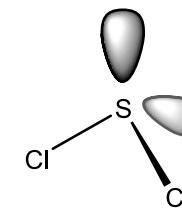
H_2O



H_2S



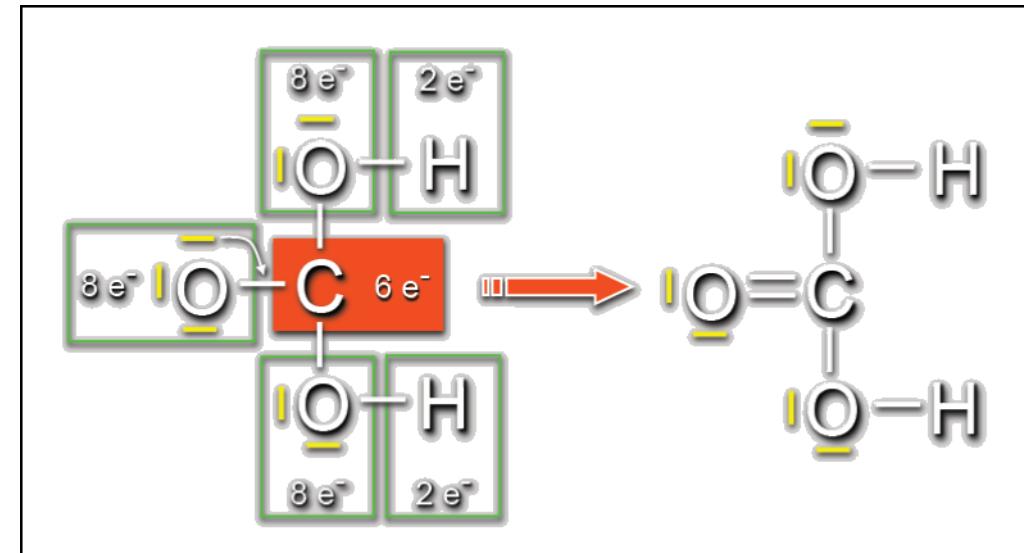
SCl_2

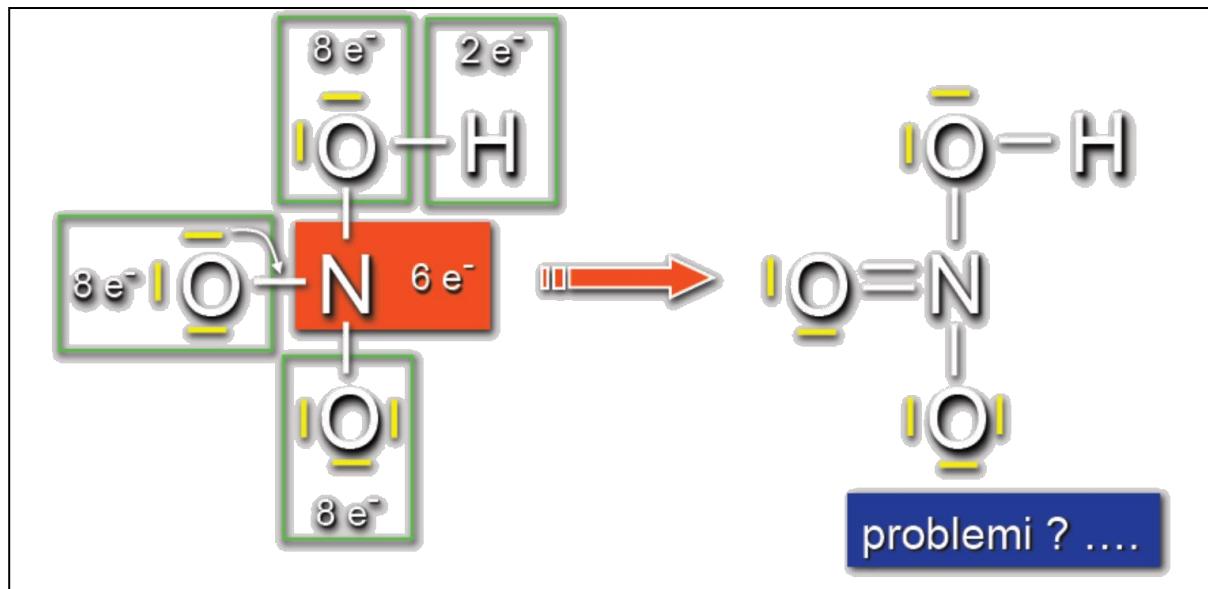


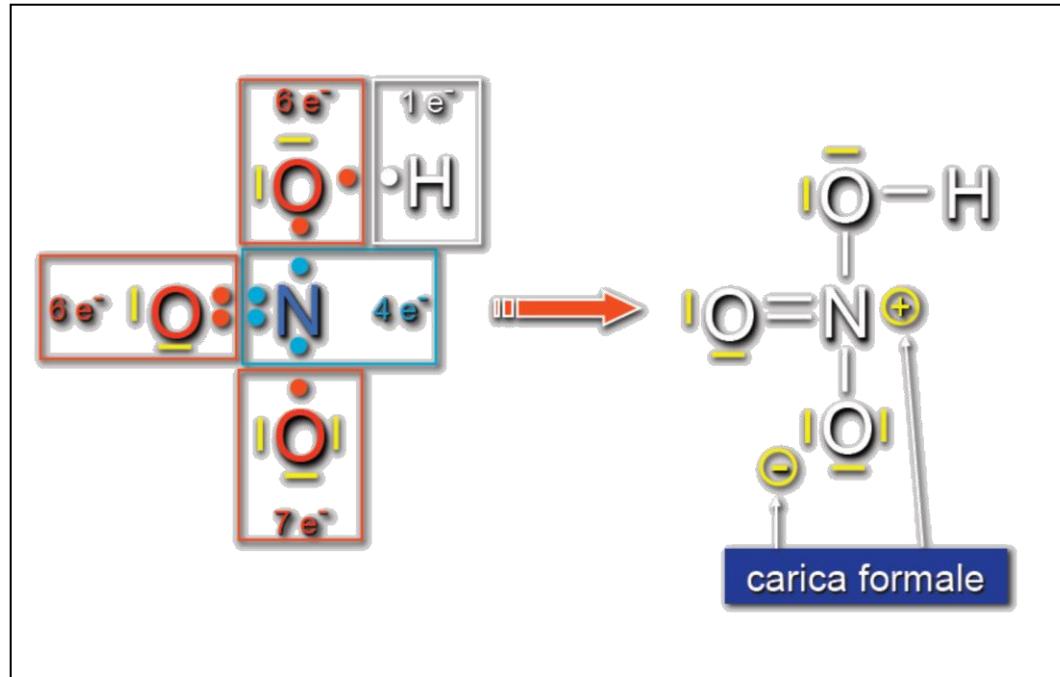
Regola dell'ottetto

Quando due **atomi si combinano**, i legami che si formano sono tali che **ciascun atomo** (idrogeno escluso) è circondato da un **ottetto di elettroni**.

Configurazione stabile di gas-nobile







Carica Formale

carica assegnata ad un atomo in una molecola,
assumendo che gli elettroni di legame siano equamente
condivisi tra gli atomi indipendentemente dalla loro
elettronegatività

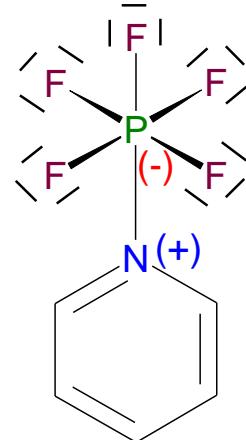
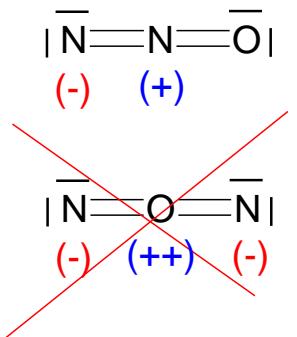
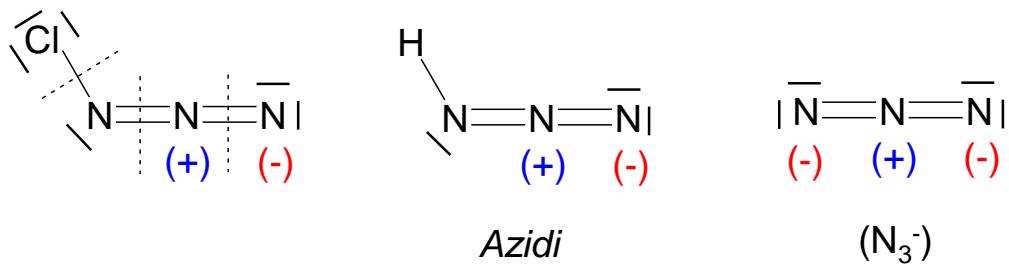
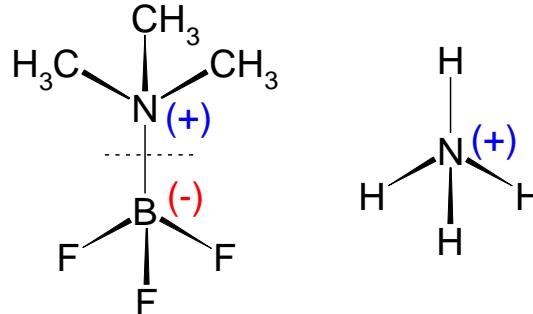
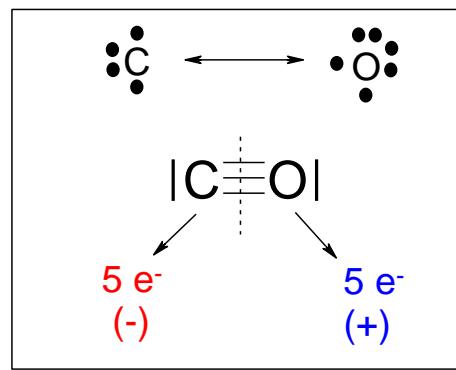
Come si calcola la carica formale?

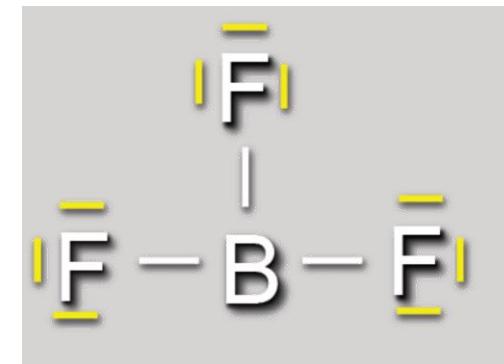
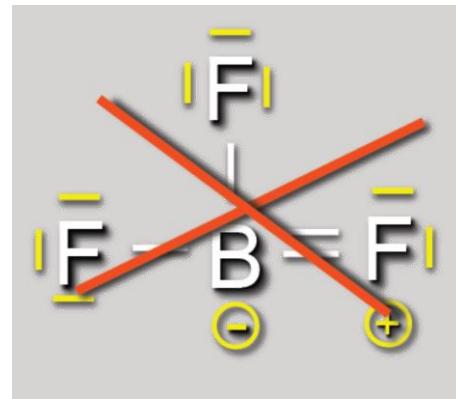
- gli elettroni **non condivisi** (coppie solitarie) appartengono **all'atomo sul quale si trovano**
- gli elettroni di una **coppia di legame** sono attribuiti **uno per ciascun atomo** implicato nel legame
- la somma delle cariche formali degli atomi deve essere uguale alla carica della molecola o ione

$$\text{C.F.} = (\text{N}^{\circ} \text{ e}^{-} \text{ di valenza}) - (\text{N}^{\circ} \text{ di legami}) - (\text{N}^{\circ} \text{ di e}^{-} \text{ di coppie solitarie})$$

Ci si deve ricordare che...

- la **formula** di Lewis più **plausibile** è di norma quella che presenta **carica formale = 0** su tutti gli **atomi**
- se deve esistere una **carica formale** (es. in uno ione), questa deve essere la **più piccola possibile**
- **atomi adiacenti non** devono possedere carica formale dello **stesso segno**
- una **carica formale negativa** è tanto più plausibile quanto più **non metallico** è il carattere di un **atomo**
- una **carica formale positiva** è tanto più plausibile quanto più **metallico** è il carattere di un **atomo**



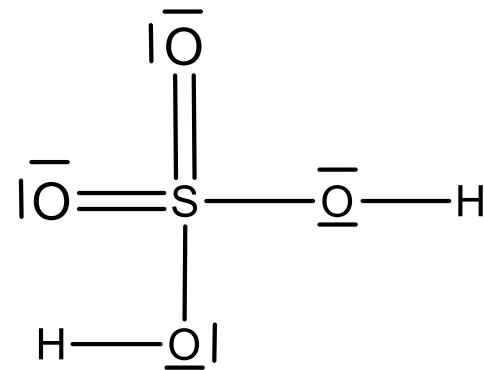
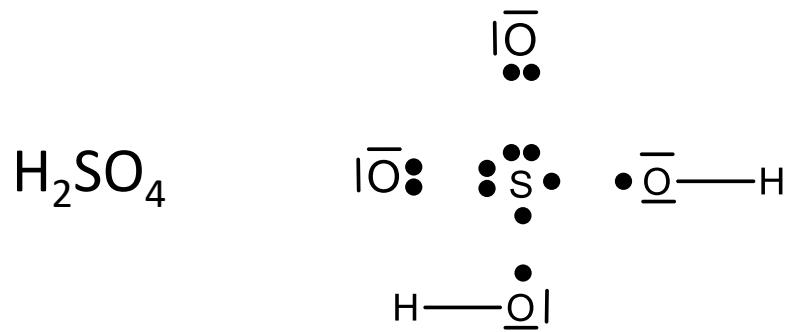


Eccezioni

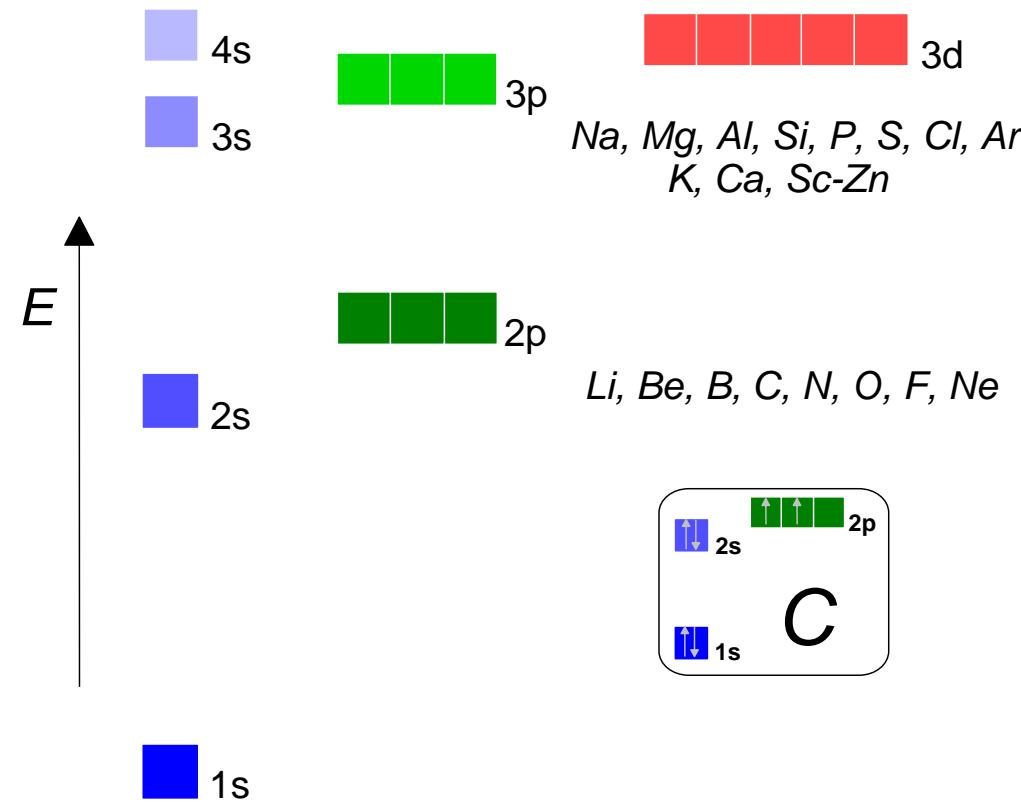
A partire dal terzo periodo, gli elementi non metallici con orbitali d accessibili possono espandere il guscio di valenza.

B e Be spesso non raggiungono l'ottetto (molecole deficienti di e^-)

Espansione dell'ottetto



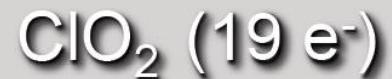
Gli **elementi**, nella formazione dei **loro composti**, tendono a raggiungere la **configurazione elettronica di gas nobile**.



Gli elementi del **2° periodo** non espandono l'ottetto (max. 8 elettroni)
Dal **3° periodo** si può avere l'espansione dell'ottetto (orbitali 3d e 4s disponibili)

Molecole con numero dispari di elettroni

In alcune molecole non tutti gli elettroni di valenza possono accoppiarsi (**radicali liberi**)



Eccezioni al modello di Lewis

1. Ottetti incompleti:

Alcune molecole possono stabilizzarsi anche senza raggiungere la configurazione ad ottetto completo, tipicamente il B forma solo 3 legami (6 elettroni), il Be forma 2 legami. Queste molecole elettronedeficienti possono poi accettare legami dativi per completare l'ottetto.

2. Espansione della sfera di valenza:

La regola dell'ottetto è rigorosamente valida per gli elementi del secondo periodo; gli elementi dal terzo periodo in poi possono collocare più elettroni nella sfera di valenza, avendo a disposizioni orbitali d vuoti ad energia accessibile, ed avendo dimensioni adatte per potersi circondare di più di quattro coppie di elettroni. Tali elementi possono quindi ad arrivare ad accoppiare anche tutti gli elettroni che hanno nella sfera di valenza.

Eccezioni al modello di Lewis

3. Composti radicalici:

certi composti possono restare con un numero dispari di elettroni di valenza, presentando quindi elettroni di valenza spaiati. Sono molto reattivi.

4. Effetto coppia inerte:

Gli elementi pesanti del 13 e 14 gruppo tendono a conservare una coppia di elettroni di non legame.

Legame covalente

omopolare

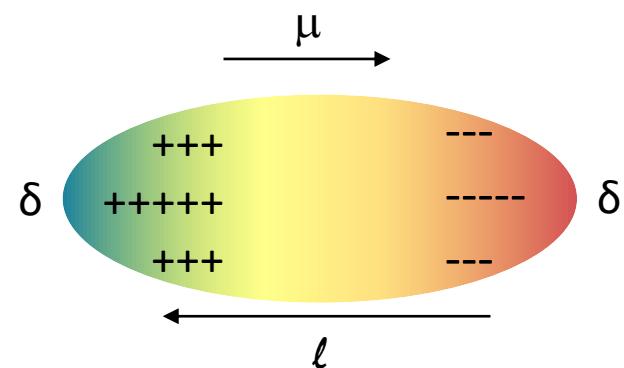
eteropolare

Polarità delle molecole

- Dipolo elettrico: sistema costituito da due cariche di uguale valore assoluto ma segno opposto (δ^+/δ^-)

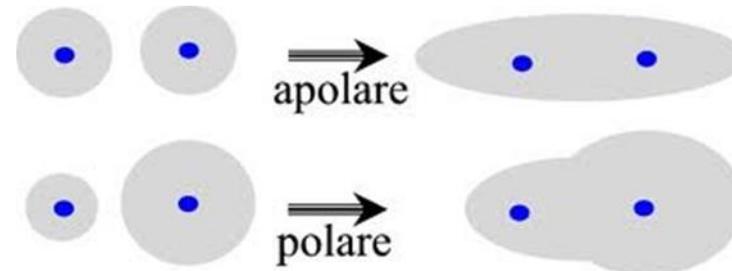
- Momento dipolare:

$$\mu = \delta l$$



Polarizzazione ed elettronegatività

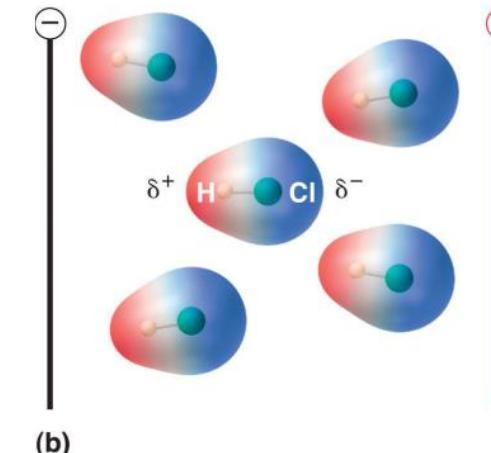
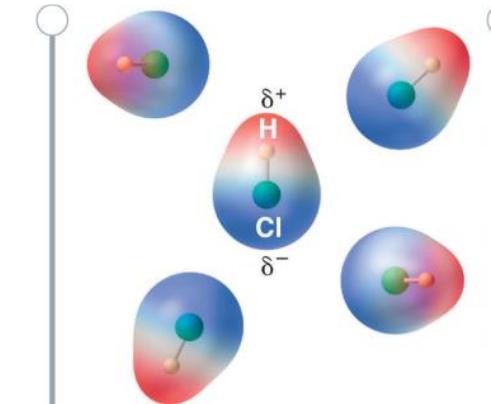
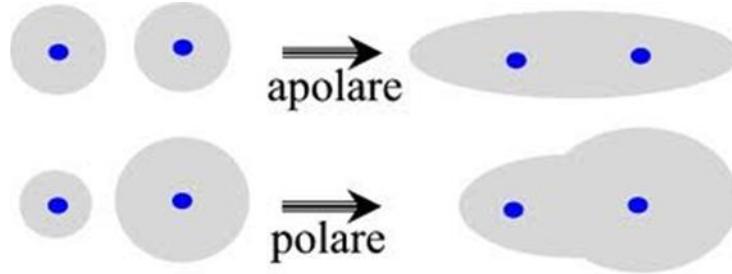
Nella formazione del legame covalente tra atomi differenti gli elettroni di legame possono essere attratti maggiormente da uno dei due partners (legame eteropolare). Sia il fenomeno della polarizzazione delle game, con quale si forma un eccesso di carica negativa (δ^-), mentre sull'altro atomo rimane un eccesso di carica positiva (δ^+). In legame acquista un momento di dipolo elettrico.



L'attitudine a polarizzare la nuvola elettronica in un legame si definisce tramite il parametro empirico dell'elettrone

Molecola polare: la densità elettronica si accumula verso una estremità della molecola (verso l'atomo più elettronegativo), determinando una parziale separazione di carica

Legame covalente eteropolare



Molecule apolari

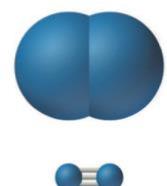
$$\mu = 0$$



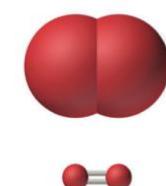
...



Hydrogen
(H₂)



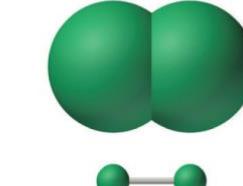
Nitrogen
(N₂)



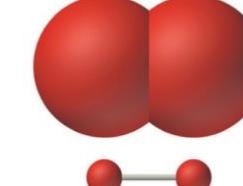
Oxygen
(O₂)



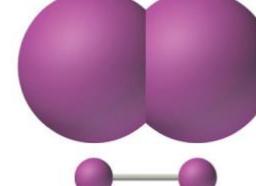
Fluorine
(F₂)



Chlorine
(Cl₂)

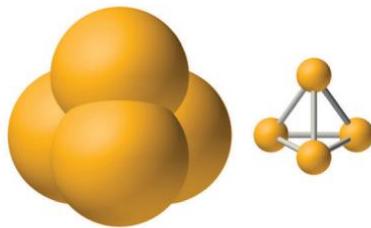


Bromine
(Br₂)

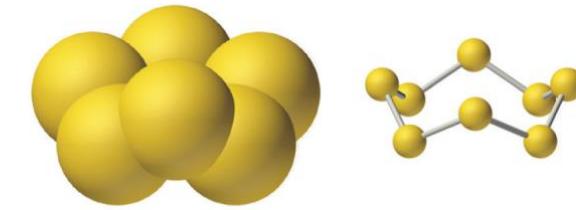


Iodine
(I₂)

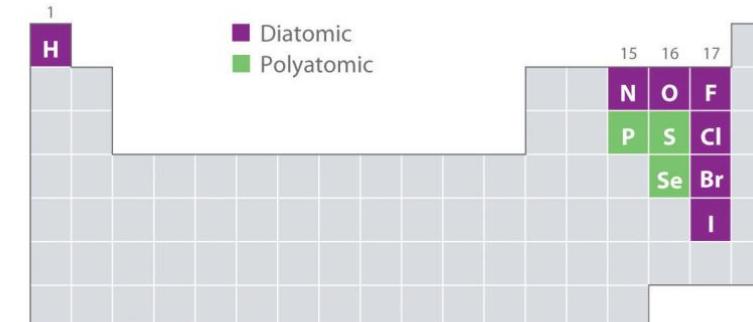
(a) Elements that exist as diatomic molecules



Phosphorus
(P₄)

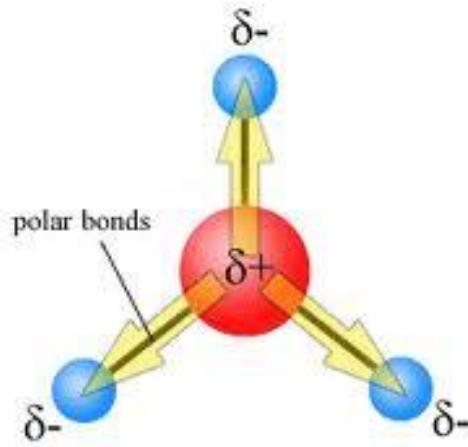
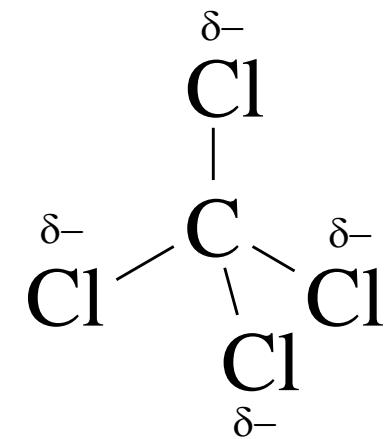
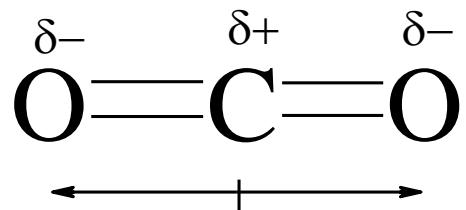


Sulfur
(S₈)



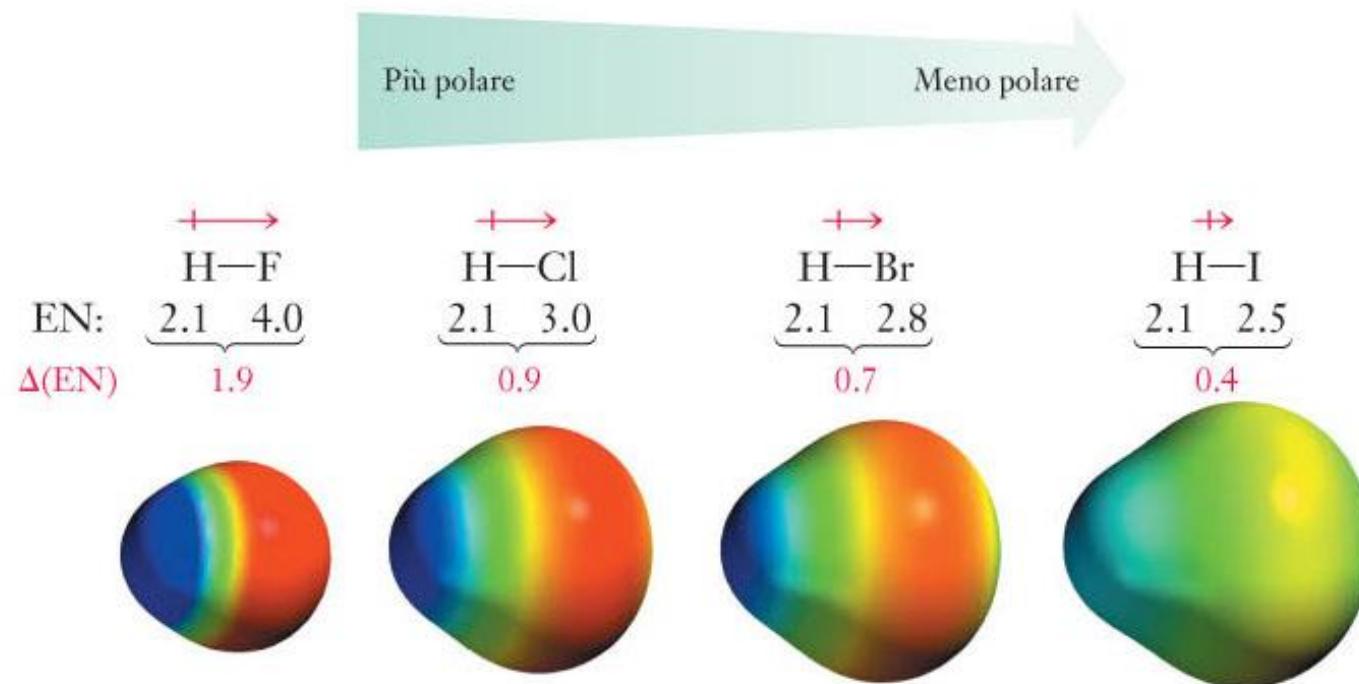
(b) Elements that exist as polyatomic molecules

Molecole apolari con legami polari

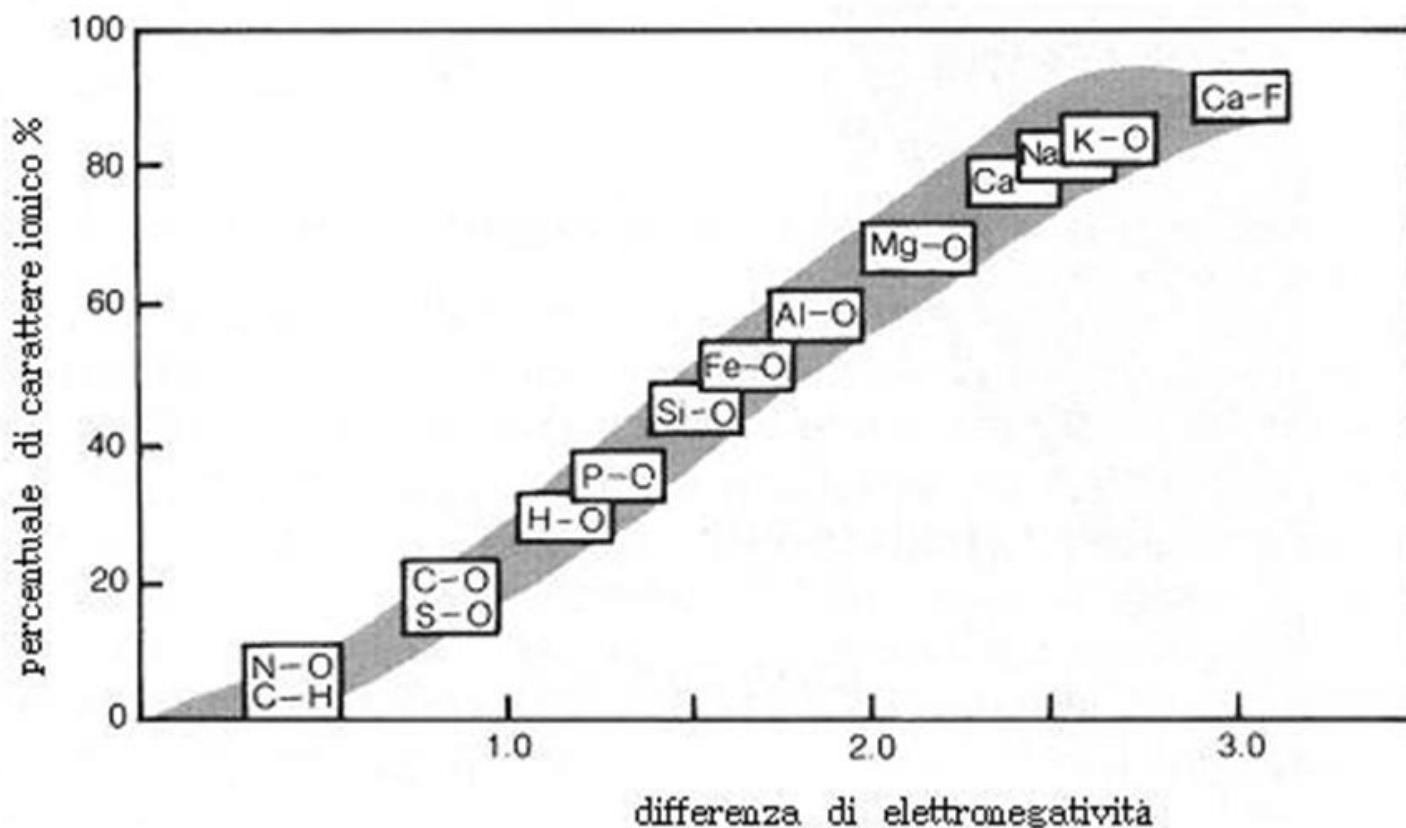


Boron Trifluoride

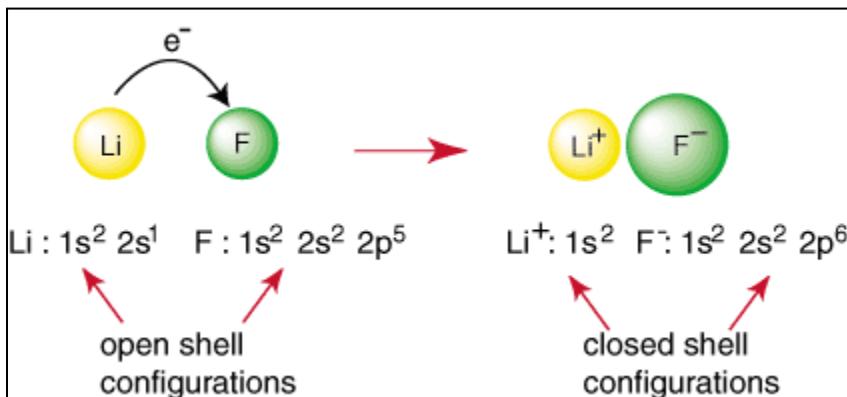
La polarità del legame aumenta all'aumentare della differenza di elettronegatività



Si ha legame ionico con una differenza di elettronegatività > 2



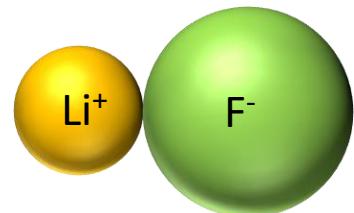
Legame ionico



Legame di natura
elettrostatica fra atomi
con elettronegatività
molto diversa

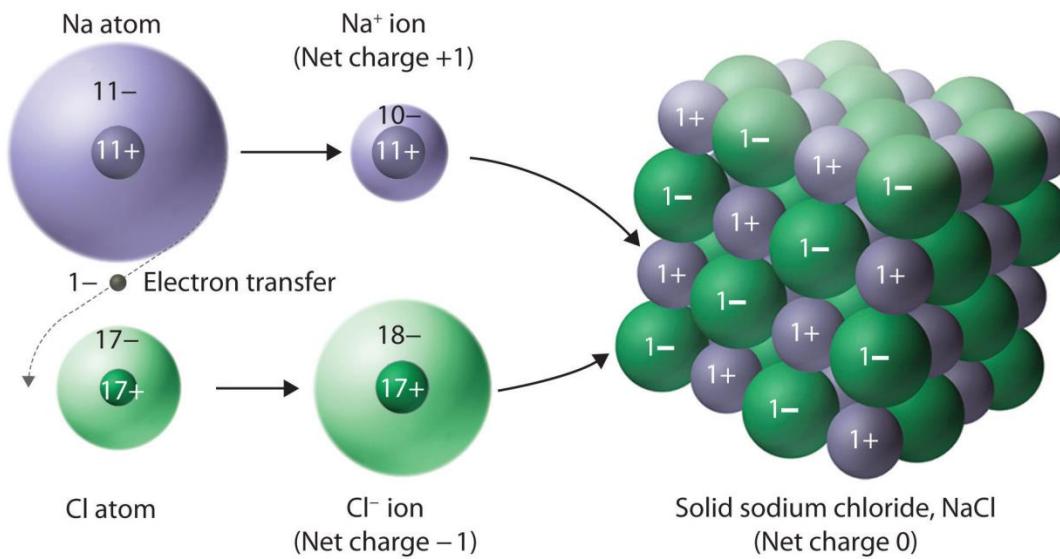


Si ha cessione di uno o più e^-



Legame non direzionale
Legame molto forte

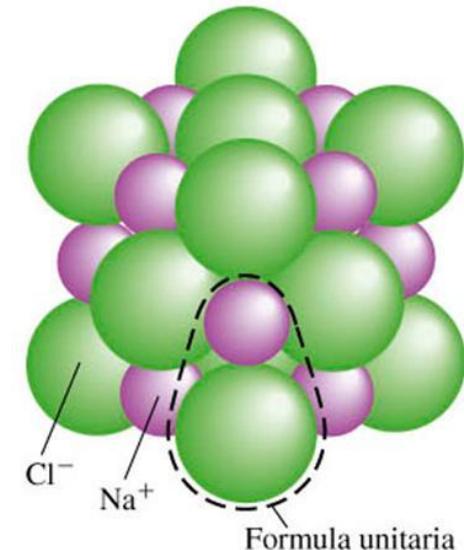
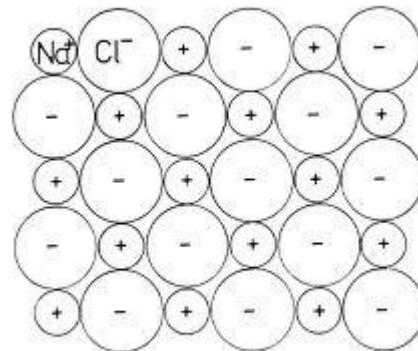
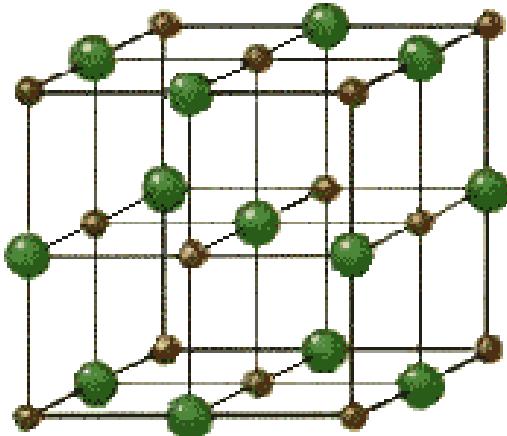
I composti ionici sono tutti solidi
ad alto punto di fusione



**Non esiste una
vera e propria
unità discreta,
una molecola**



**Reticolo di
anioni e cationi**

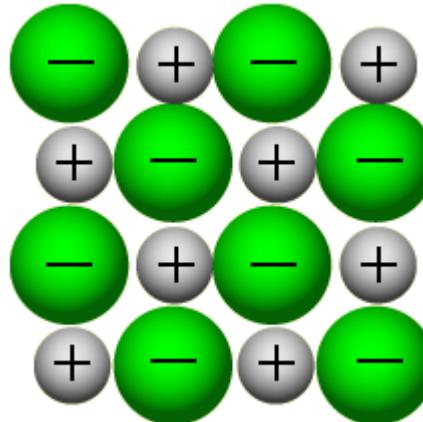


Esempi di composti basati sul legame ionico

T °C, punto di fusione

LiF	845	NaF	993	KF	858	χ	Li	0.98
LiCl	605	NaCl	801	KCl	770	χ	Na	0.93
LiBr	552	NaBr	747	KBr	734	χ	K	0.82
LiI	469	NaI	661	KI	681	χ	Ca	1.0
						χ	Ba	0.89
						χ	Al	1.61

CaF ₂	1418
CaCl ₂	1935
BaCl ₂	962
Al ₂ O ₃	2072



χ	F	3.98
χ	Cl	3.16
χ	Br	2.96
χ	I	2.66
χ	O	3.44

Legame ionico quando $\Delta\chi \geq 2$

Valence Shell Electron Pair Repulsion (VSEPR)

Metodo qualitativo per predire la geometria delle molecole

Interazione tra coppie elettroniche:

- coppia di legame - c. di legame
- c. di legame – c. solitaria
- c. solitaria – c. solitaria

Repulsione
crescente

In un atomo gli elettroni di valenza si dispongono in modo da minimizzare le reciproche repulsioni

La geometria del legame covalente – modello VSEPR

Il metodo Valence Shell Electron Pairs Repulsion (VSEPR) permette di prevedere la geometria di molecole costituite da un **atomo centrale A circondato da n atomi X ad esso legati AX_n** .

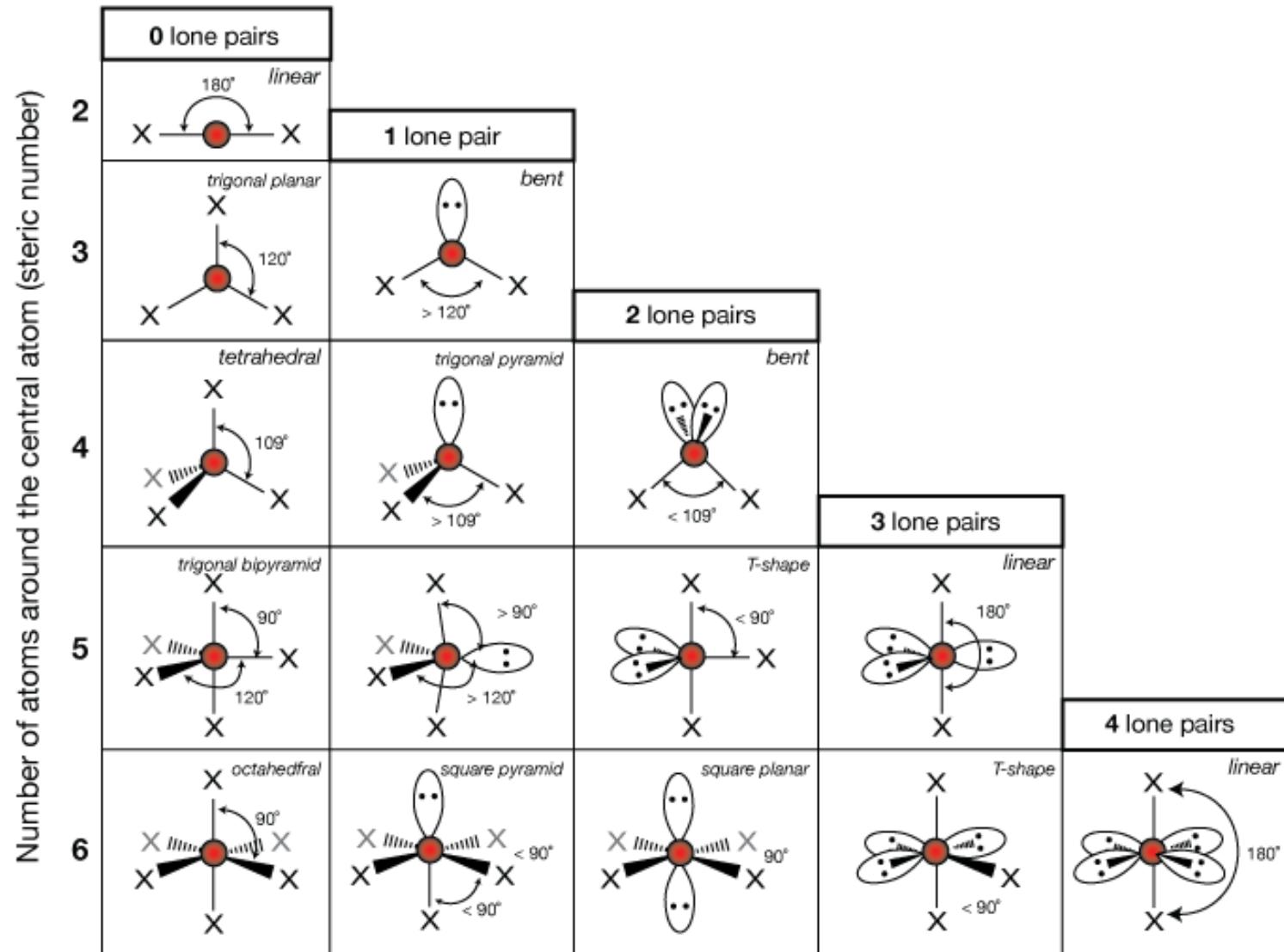
Il metodo tiene conto dell'ottimizzazione della disposizione delle coppie di elettroni, dei legame ed in un legame, che tendono ad occupare il massimo spazio possibile attorno ad A al fine di minimizzare la repulsione tra i domini elettronici degli atomi.

- i domini occupati dalle **coppie di non legame (E)** sono più estesi di quelli relativi alle coppie di legame singolo (sentono l'influenza di un solo core positivo)
- Le dimensioni di un dominio di legame singolo su un atomo centrale diminuiscono all'aumentare dell'elettrone negatività del legante
- I domini dei legami multipli sono costituite da più coppie di elettroni, non distinte
- i domini delle legami multipli sono più estesi dei domini di legame singolo

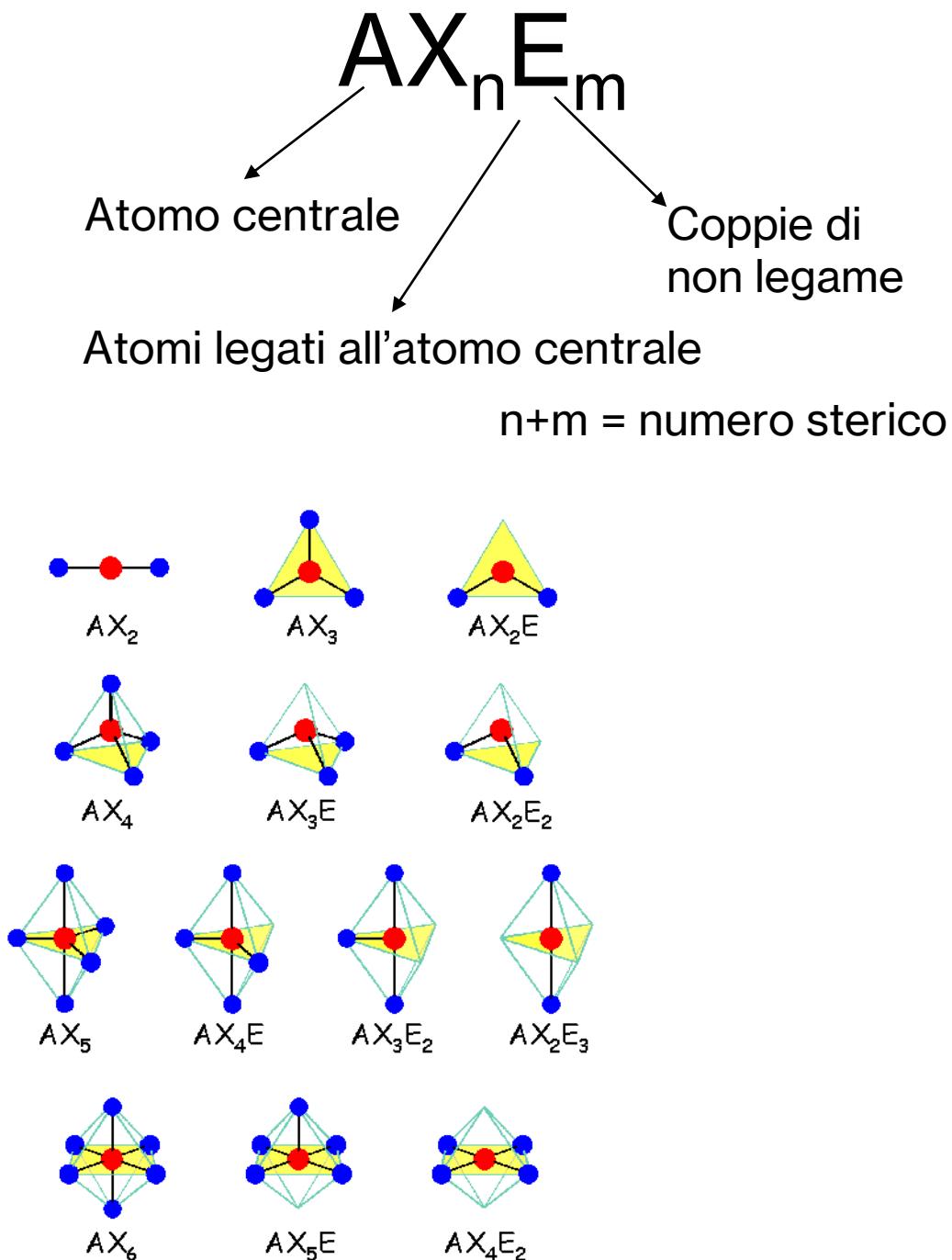
Geometria angolare dovuta alle dimensioni dei domini:

non legame: non legame > non legame: legame > legame: legame

Modello VSEPR



Number of electron pairs	Electron pair geometries: 0 lone pair	1 lone pair	2 lone pairs	3 lone pairs	4 lone pairs
2	X → E ← X 180° Linear				
3	X → E ← X 120° Trigonal planar	X → E ← X <120° Bent or angular			
4	X → E ← X 109° Tetrahedral	X → E ← X X < 109° Trigonal pyramid	X → E ← X <<109° Bent or angular		
5	X → E ← X 90° 120° Trigonal bipyramidal	X → E ← X <90° <120° Sawhorse or seesaw	X → E ← X <90° T-shape	X → E ← X 180° Linear	
6	X → E ← X 90° Octahedral	X → E ← X <90° Square pyramidal	X → E ← X 90° Square planar	X → E ← X X < 90° T-shape	X → E ← X 180° Linear

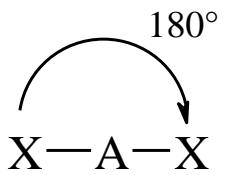


coppie
di elettroni

coppie
di non legame

2 lineare

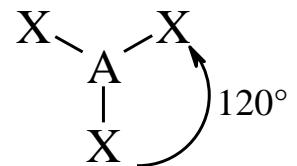
0



BeH₂, BeCl₂

3 trigonale
planare

0



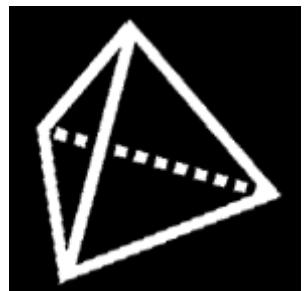
BF₃, AlCl₃

1

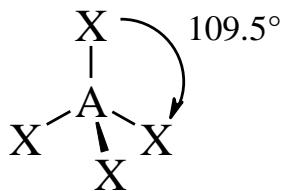


SnCl₂

4 tetraedro

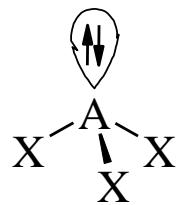


0



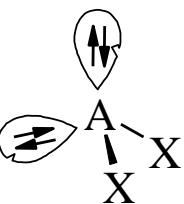
$\text{CH}_4, \text{CCl}_4$

1



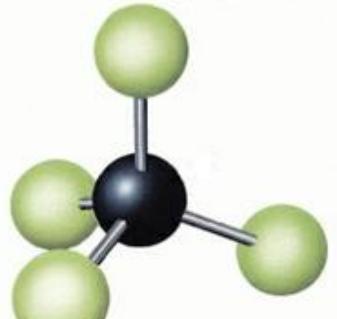
$\text{NH}_3, \text{H}_3\text{O}^+$

2



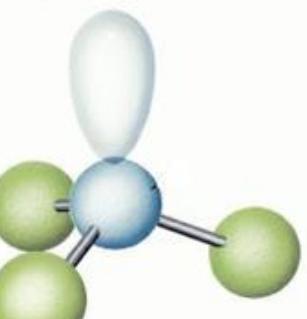
H_2O

Nessuna coppia solitaria



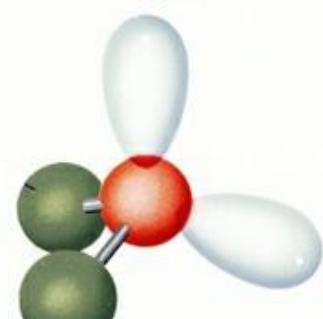
Tetraedrica

Una coppia solitaria

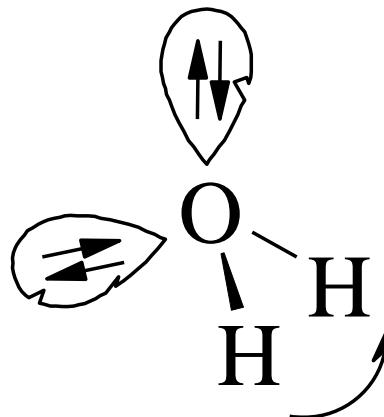
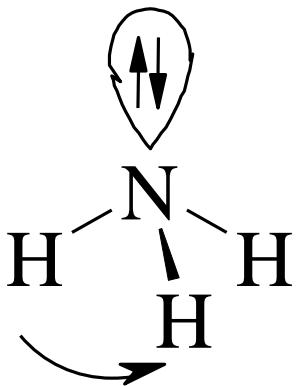
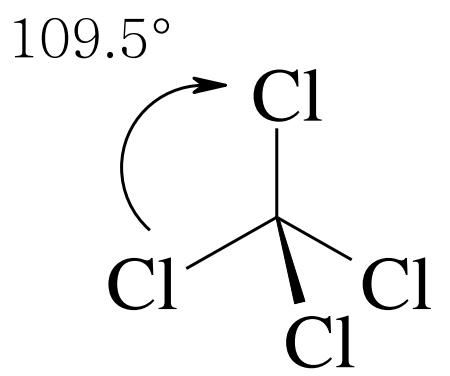


Piramidale triangolare

Due coppie solitarie

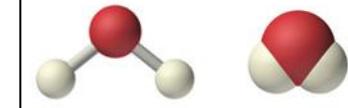
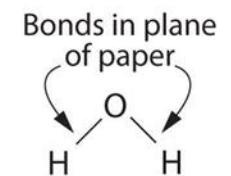
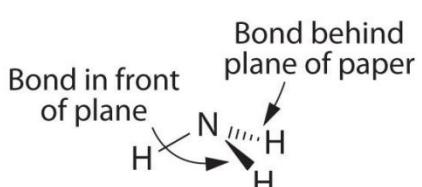
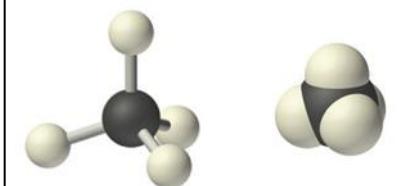
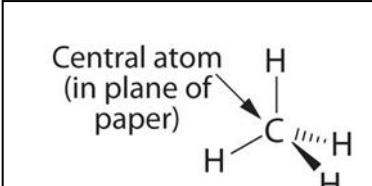


Angolare

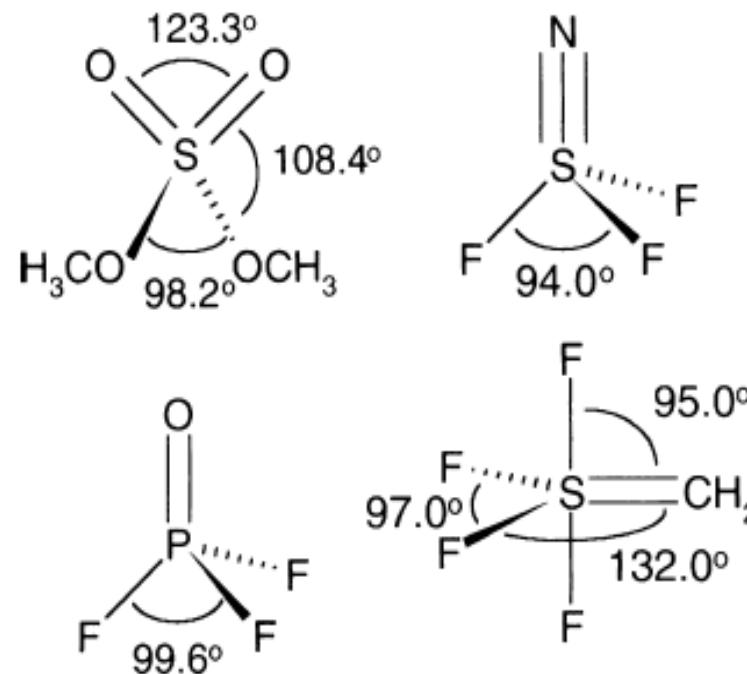


107°

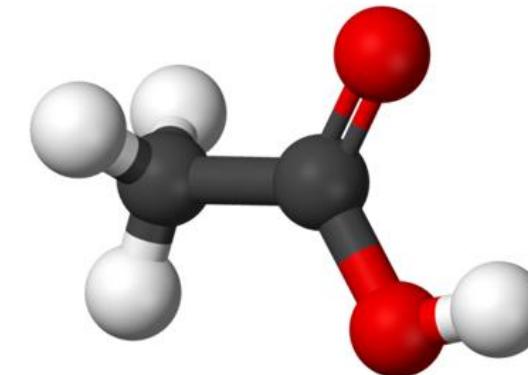
104.5°



legame multiplo-leg. multiplo > multiplo- semplice > semplice - semplice



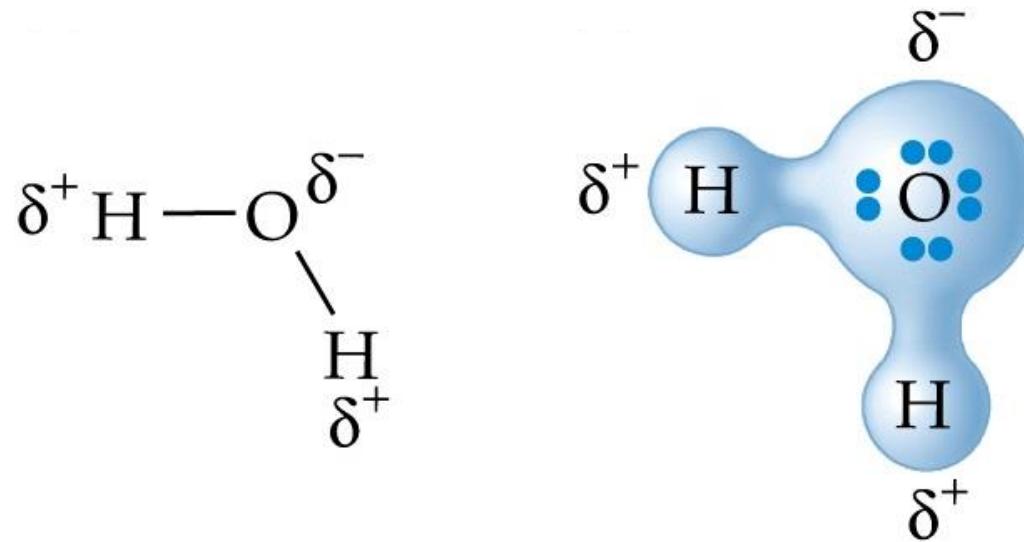
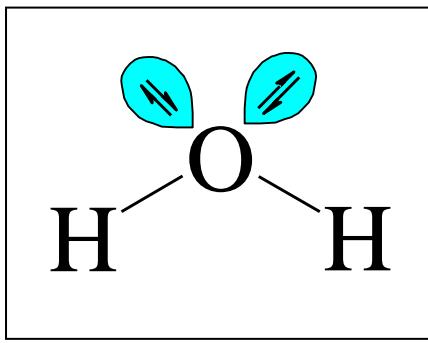
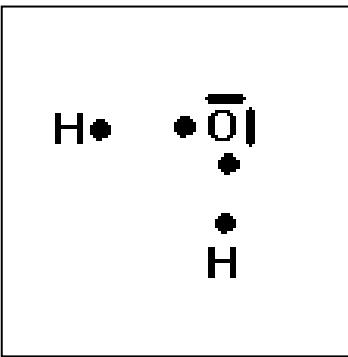
La forma di una molecola a più centri è la risultante della somma delle geometrie degli intorni dei singoli atomi



H 1s

O 1s² 2s² 2 p_x² p_y p_z

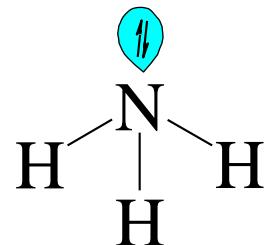
H₂O



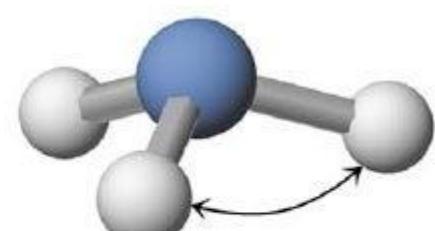
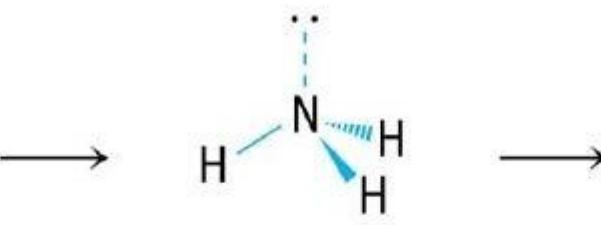
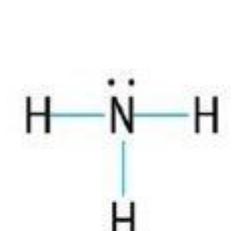
due legami covalenti,
eteropolari

H 1s

N 1s² 2s² 2 p_xp_yp_z



NH_3



Molecular geometry,
trigonal pyramidal

Teorie del legame chimico

Il modello di Lewis e la teoria VSEPR aiutano a costruire e rappresentare graficamente in modo semplice le molecole, ma non permettono di quantificare i dettagli energetici e geometrici dei legami.

In realtà gli elettroni non possono stare intrappolati in coppie che occupano posizioni fisse tra i nuclei, ma devono rispettare i principi della meccanica quantistica (sono descritti da una funzione d'onda Ψ ; $H\Psi=E\Psi$; Ψ^2 probabilità di trovare un elettrone in un certo spazio).

La descrizione quanto meccanica del comportamento degli elettroni in una molecola richiede che si individuino le porzioni di spazio in cui gli elettroni di valenza si dispongono attorno ai nuclei atomici che costituiscono lo scheletro della molecola. In un atomo isolato gli elettroni si dispongono in regioni dello spazio descritte dagli orbitali atomici; la presenza di altri nuclei turba il potenziale sentito dagli elettroni che si riarrangiano per trovare una configurazione più stabile. Gli orbitali si modificano.

Esistono due teorie utilizzate per calcolare le posizioni degli elettroni in una molecola:

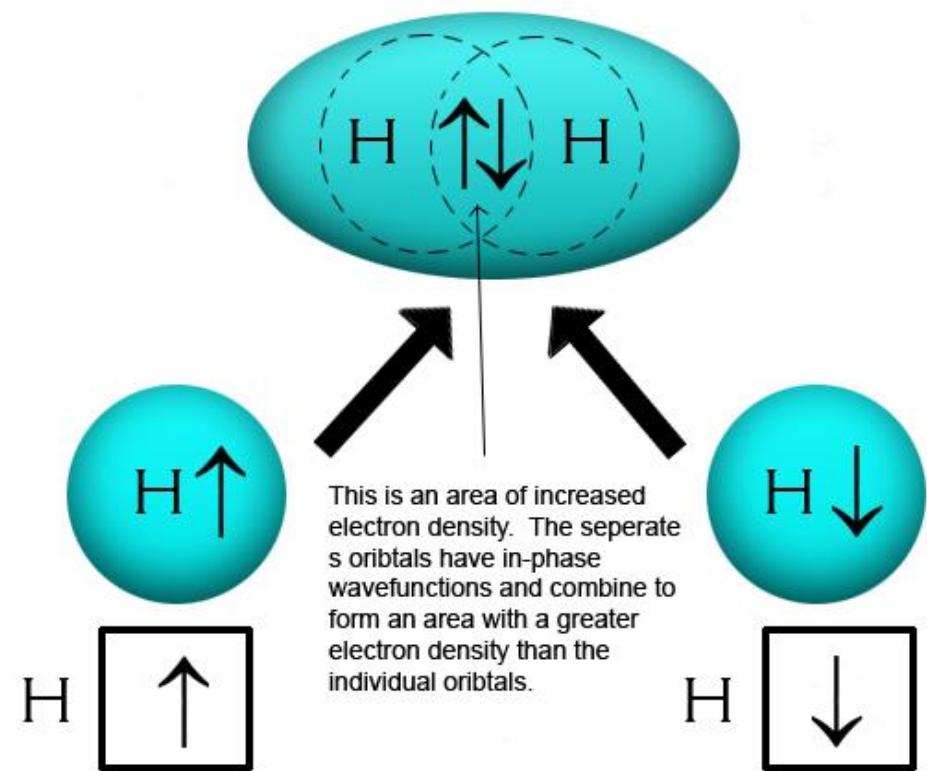
Valence Bond (VB)
Molecular Orbitals (MO)

Metodo VB (Valence Bond)

Il principio su cui si basa il metodo VB presuppone che le posizioni occupate dagli elettroni nella molecola possano essere descritte per ogni legame come la combinazione di una coppia di orbitali atomici degli atomi coinvolti nel singolo legame. Ciascun orbitale atomico che contribuisce al legame contiene un elettrone, quindi l'ospitale di legame risultante contiene una coppia di elettrone con spin appaiato.

Gli orbitali sono funzioni matematiche utili per rappresentare il comportamento degli elettroni suddividendo lo spazio in regione in cui gli elettroni possono transitare. Gli orbitali non sono entità fisiche osservabili.

La combinazione di orbitali è un'operazione matematica di combinazione di funzioni. In pratica individua la regione di spazio che risulta occupabile.



Metodo VB – requisiti e tipi di legame

Perché due orbitali possono combinarsi per formare un legame occorrono alcune condizioni basate sulla quantomeccanica:

1. Gli orbitali atomici che si sovrappongono devono avere energie poco diverse
2. ciascun atomo deve contribuire con un elettrone, tranne nel caso del legame dativo
3. La direzione di massima sovrapposizione degli orbitali corrisponde alla direzione del legame
4. gli orbitali devono avere la stessa simmetria rispetto alla direzione di legame

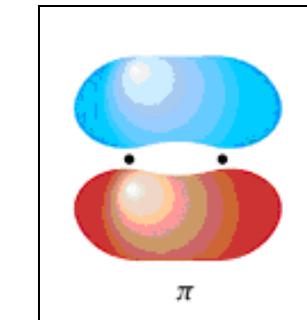
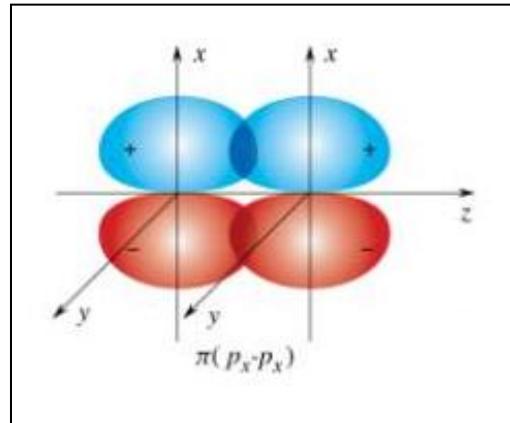
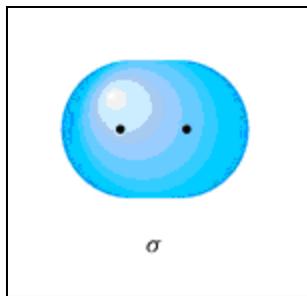
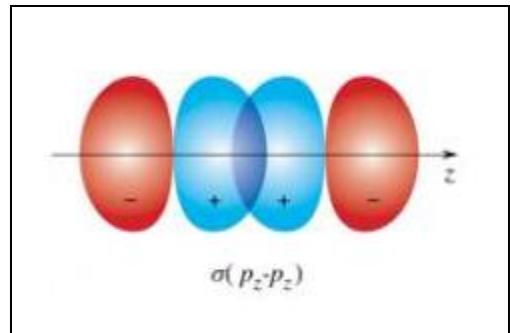
Simmetrie più frequenti:

σ : la massima densità elettronica si ha lungo l'asse internucleare

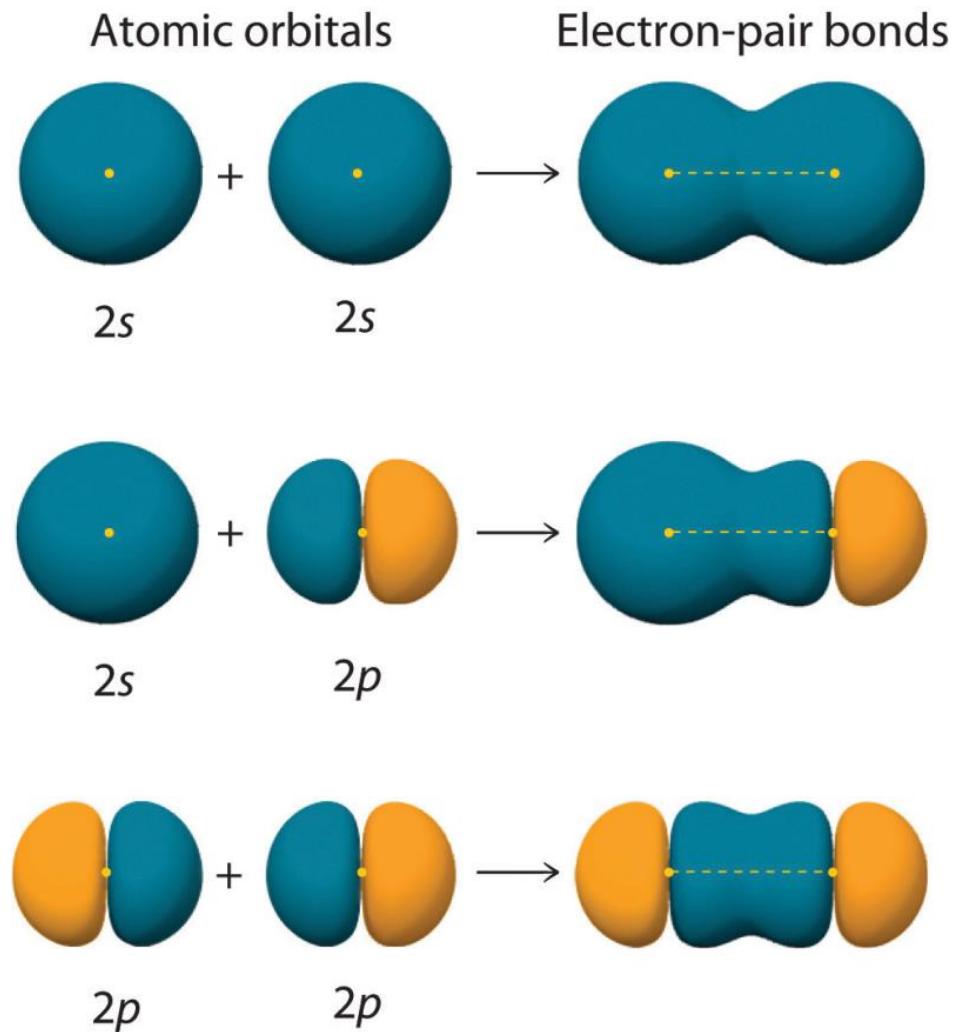
π : la massima densità elettronica occupa due lobi, sopra e sotto all'asse intenuclcare, si costituisce un piano nodale per il legame. Gli orbitali π contengono una sola coppia di elettroni anche se hanno due lobi.

Legame σ : La sovrapposizione tra gli orbitali avviene lungo l'asse internucleare. Completa identità della funzione d'onda rispetto all'asse di rotazione.

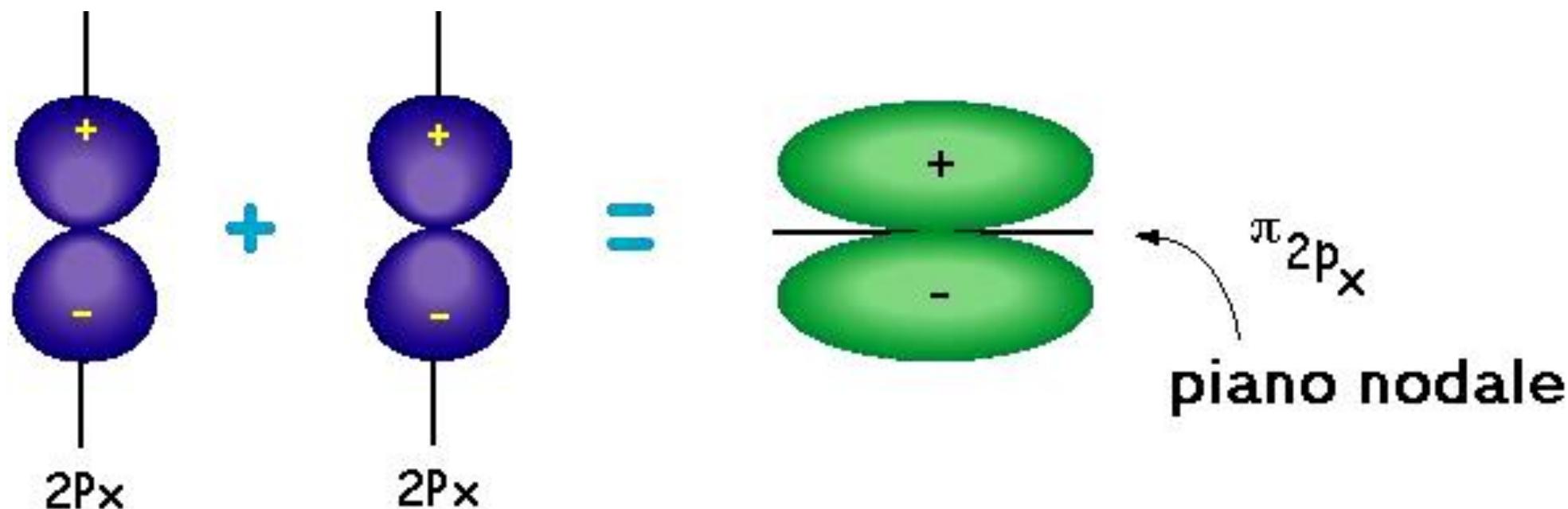
Legame π : La sovrapposizione tra gli orbitali avviene sopra e sotto l'asse internucleare, che costituisce un piano nodale (funzione d'onda nulla). Cambiamento di segno della funzione d'onda per rotazione intorno all'asse internucleare



Combinazioni di orbitali atomici che portano a un orbitale molecolare di tipo σ



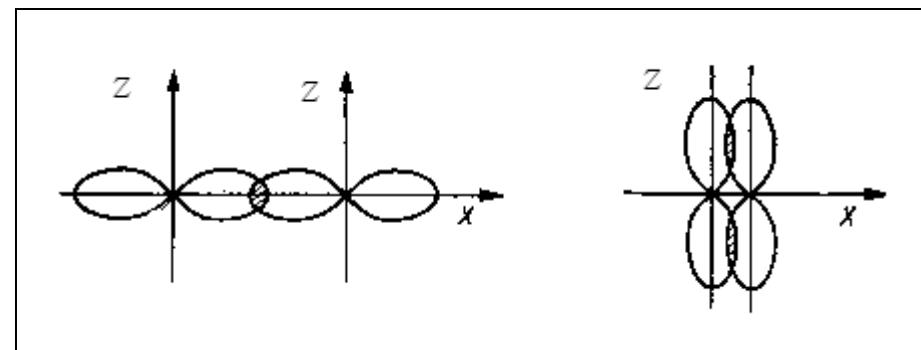
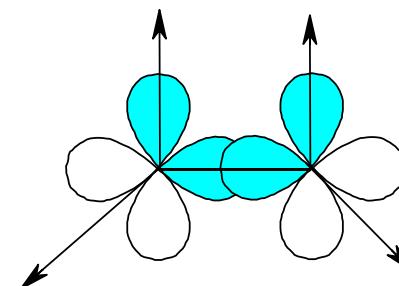
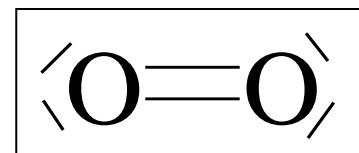
Orbitale molecolare di tipo π

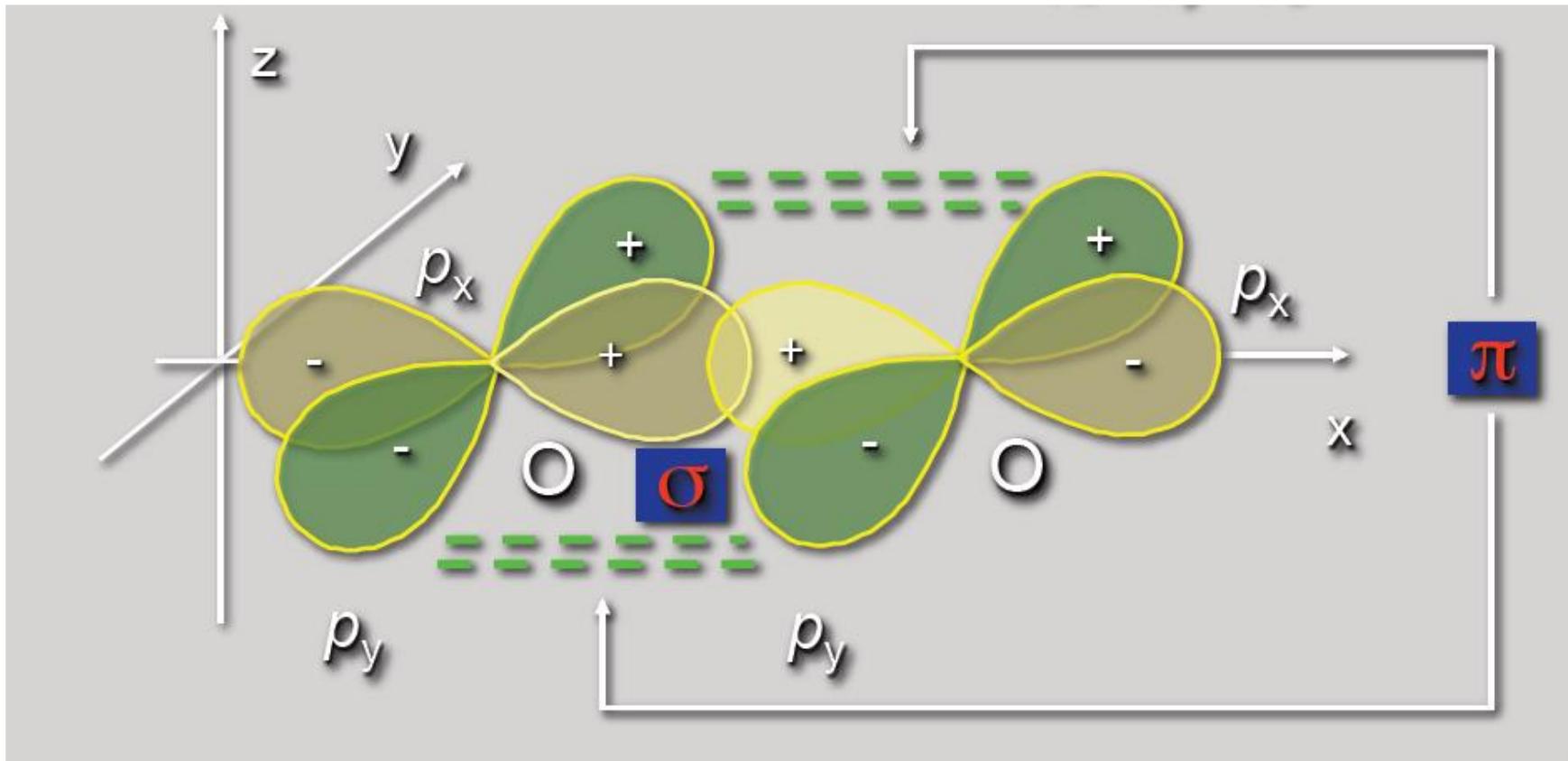


Legami multipli

Legame doppio

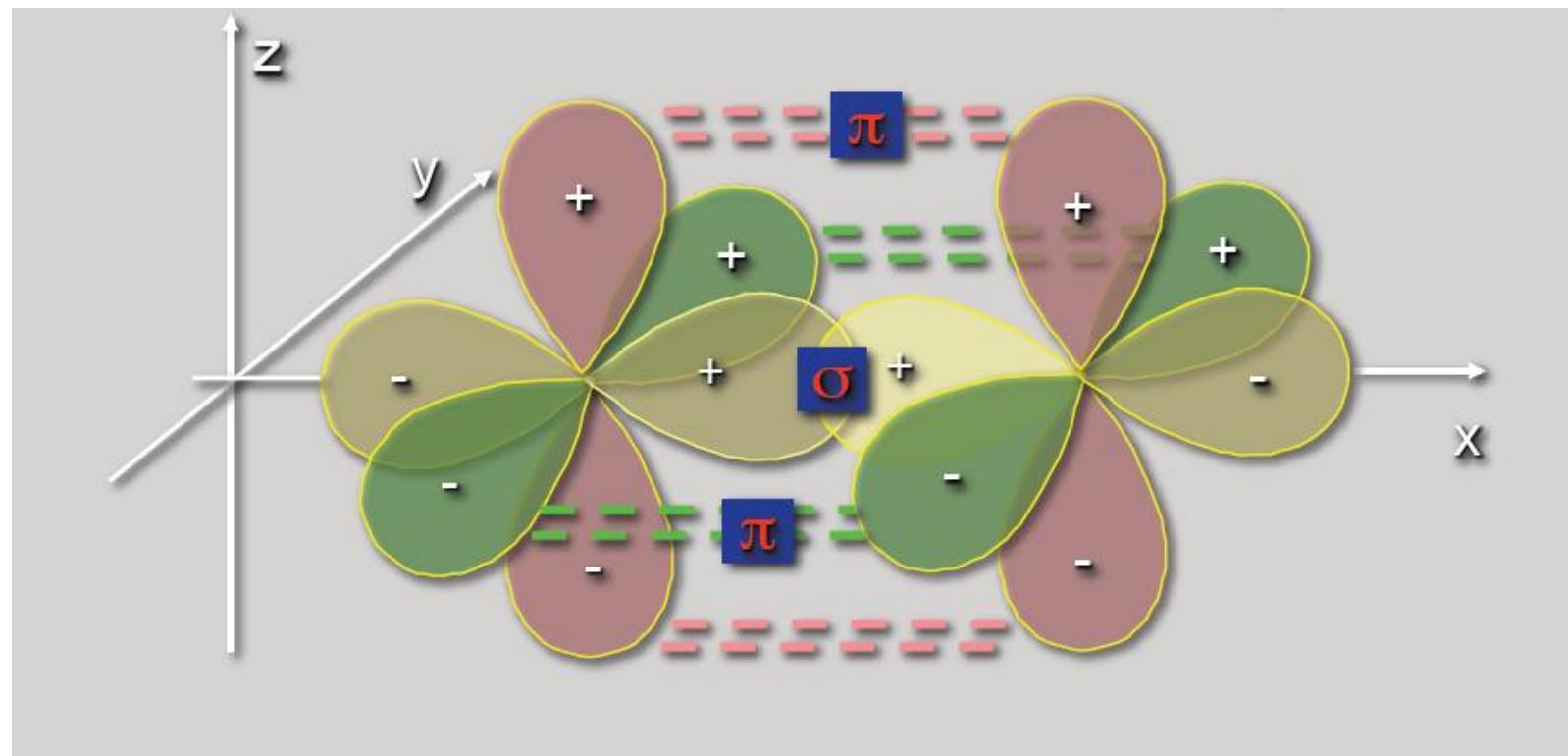
O $1s^2 2s^2 2p_x^2 p_y p_z$





Legame triplo

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

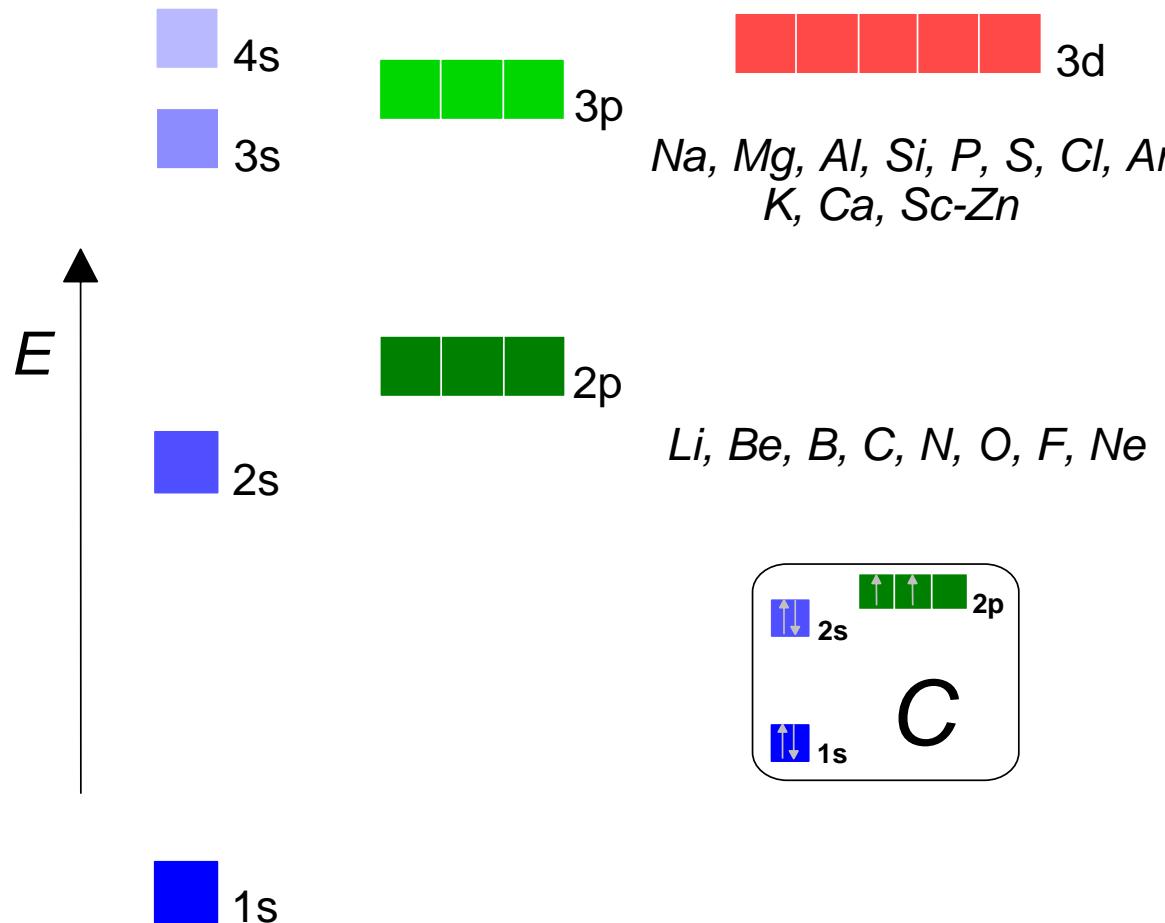


- tra due atomi **esiste sempre** un legame di tipo σ
- se il legame tra due atomi è multiplo **un legame è di tipo σ , gli altri sono di tipo π**
- la **geometria** di una molecola è definita dallo "scheletro" di legami σ
- al crescere del numero di legami
 - cresce l'energia del legame
 - diminuisce la distanza tra gli atomi

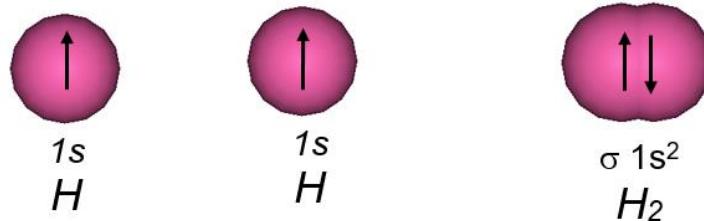
	distanze di legame (\AA)		
	singolo	doppio	triplo
C - C	1.54	1.34	1.21
C - N	1.47	1.27	1.15
C - O	1.43	1.22	1.13

	energia di legame (kJ mol^{-1})		
	singolo	doppio	triplo
C - C	347	611	837
C - N	293	615	891
C - O	351	803	1075

Sequenza orbitali atomici



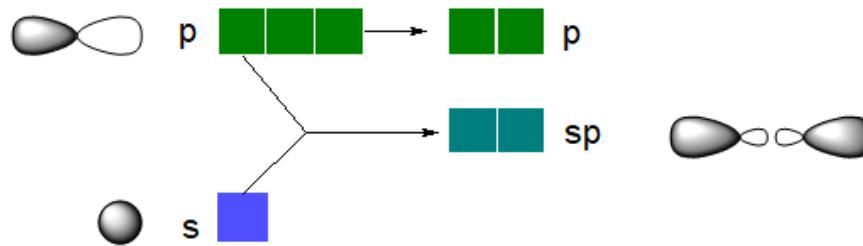
Legame: condivisione di elettroni. Gli elettroni sono contenuti in orbitali => *sovraposizione favorevole di orbitali atomici* (s, p, d) o *ibridi* (sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d , sp^3d^2)



Orbitali ibridi

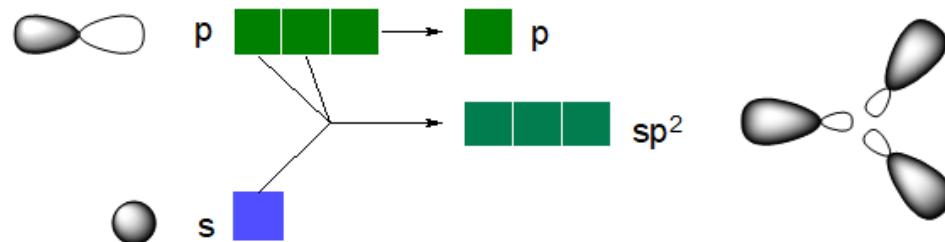
Permettono di descrivere la *direzionalità* delle *coppie di legame e solitarie*.

Ibridi sp



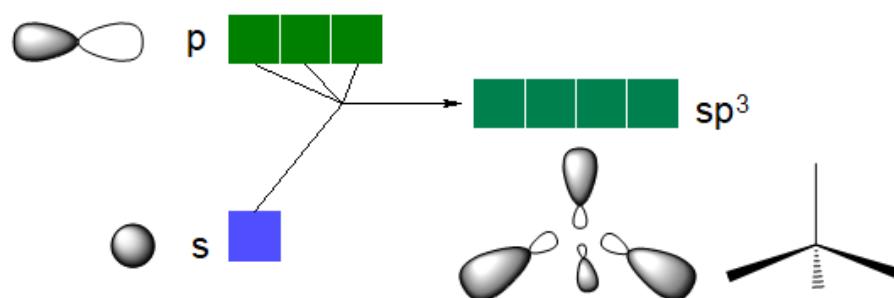
Succede che il semplice accoppiamento di orbitali atomici s, p puri non permette di formare orbitali di legame ottimali per le geometrie ideali previste dal modello VSEPR e riscontrate sperimentalmente.

Ibridi sp^2



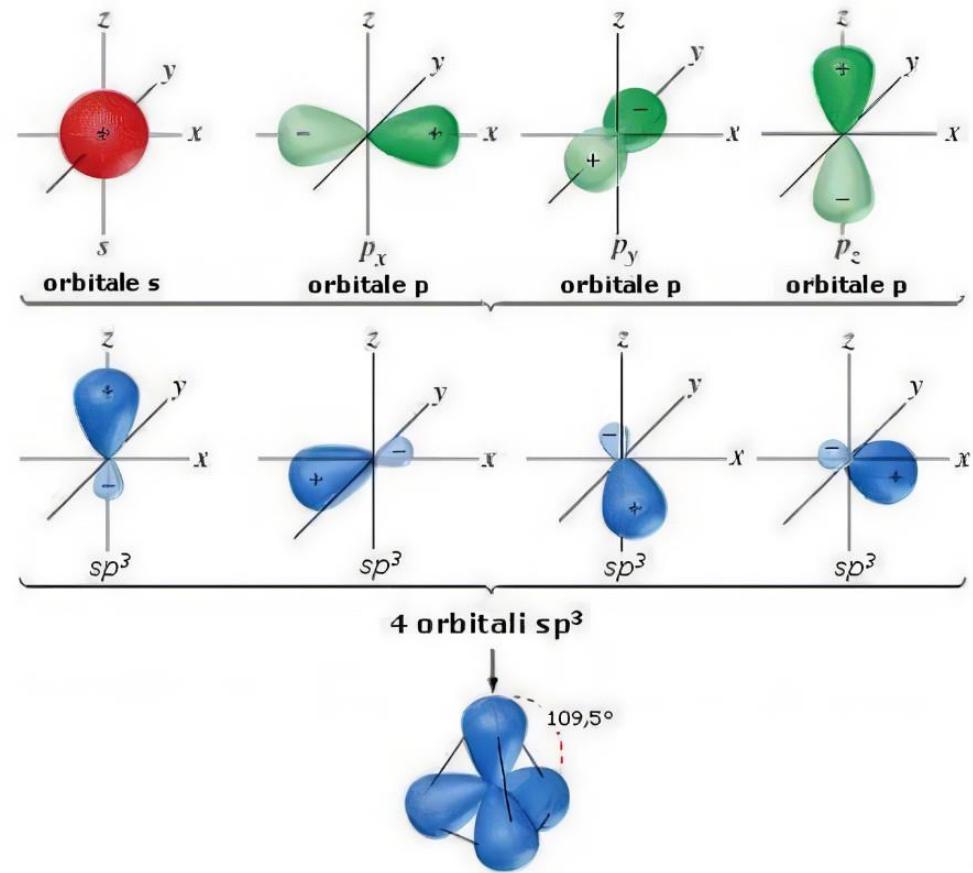
Ad esempio l'utilizzo degli orbitali s, p_x , p_y e p_z non permette di direzionare gli orbitali di legame in geometria tetraedrica.

Ibridi sp^3



Modello VB - ibridizzazione

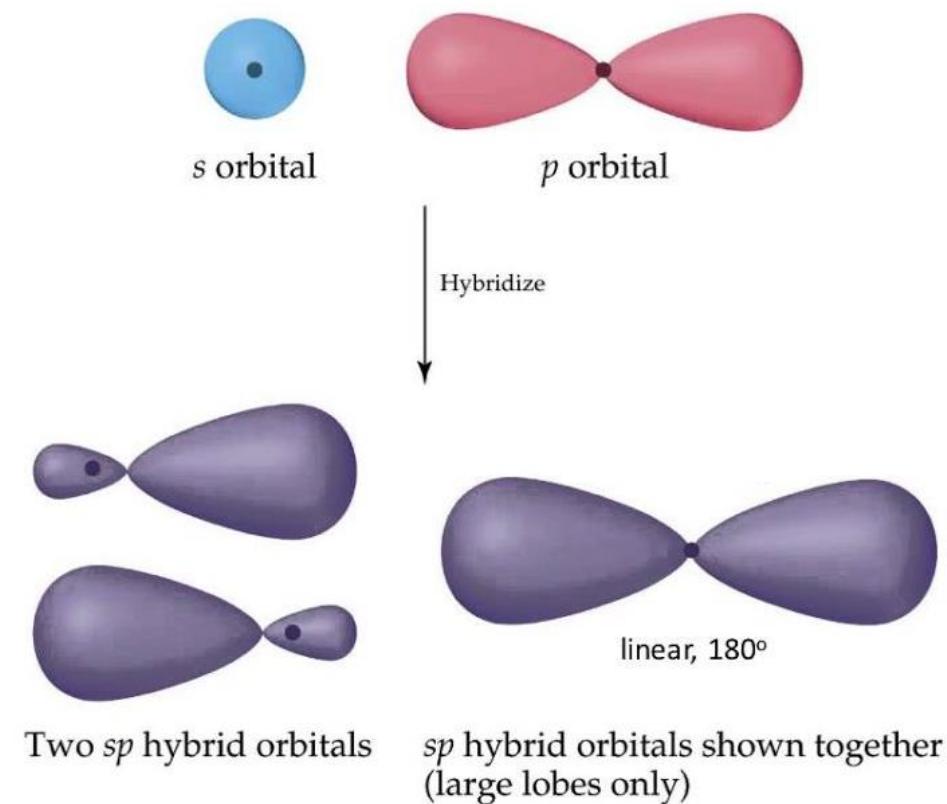
Per descrivere convenientemente la formazione di questi legami secondo i principi del metodo VB occorre utilizzare, al posto degli orbitali caratteristici dell'atomo isolato, orbitali ibridi, ottenuti per combinazione matematica degli orbitali atomici di base. Gli orbitali combinati per dargli ibridi possono avere la stessa energia, o energie poco diverse.



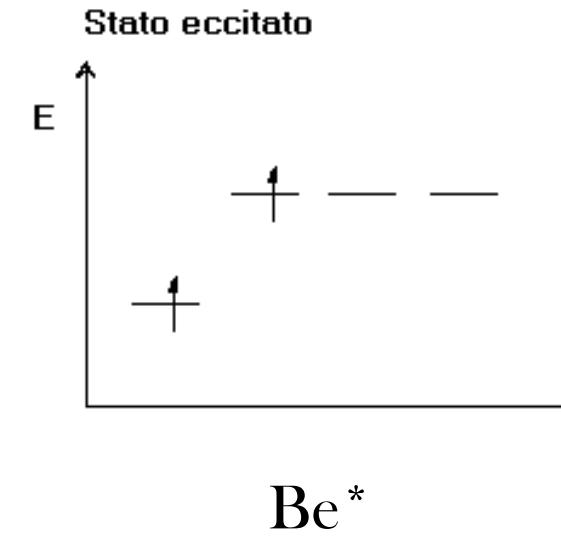
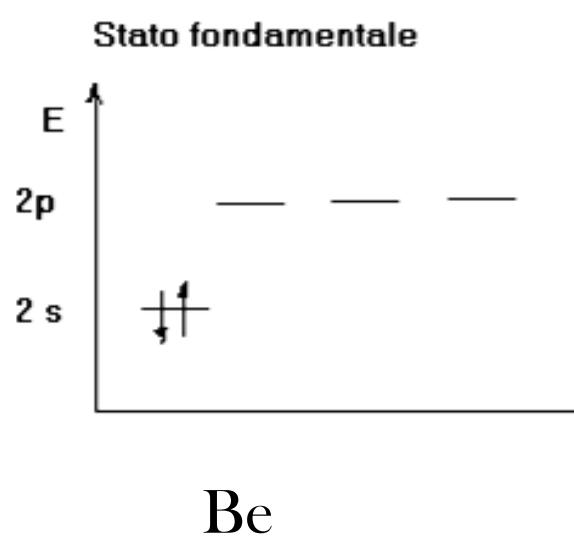
L'ibridizzazione è un procedimento matematico che permette di ottenere orbitali atomici orientati nelle direzioni più adatte per formare legami nella geometria reale della molecola osservata sperimentalmente. L'ibridizzazione non è un fenomeno fisico presente a priori, ma è un'operazione che si compie per adattare gli orbitali alla geometria osservata. La stabilizzazione della configurazione geometrica osservata rende ragione dell'eventuale energia richiesta per ridistribuire virtualmente gli elettroni sugli orbitali ibridi ottenuti mescolando orbitali atomici ad energia differente.

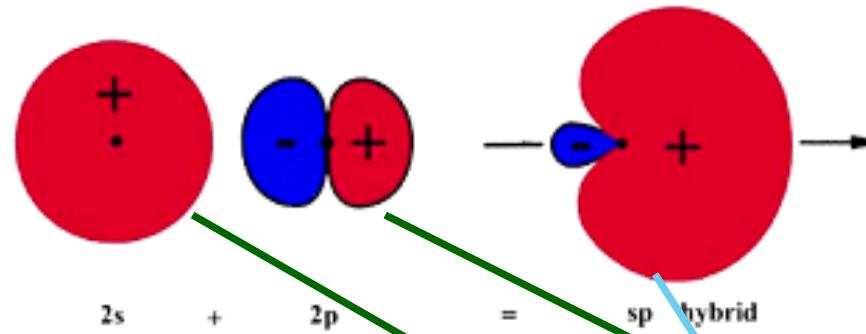
Modello VB - ibridizzazione

Gli orbitali ibridi hanno un carattere direzionale specifico che dipende dal tipo di orbitali atomici combinati. Nel processo di ibridizzazione si formano orbitali isoenergetici, equivalenti, di numero pari al numero di orbitali atomici impiegati. Quindi il numero totale di orbitali di valenza non cambia, cambia solo la direzionalità che viene predisposta per il legame.

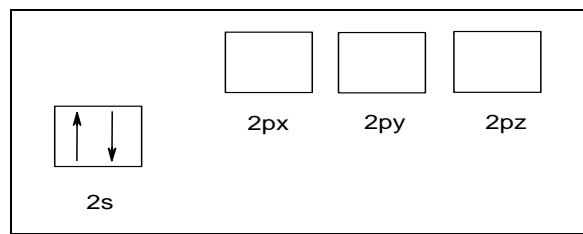


Ibridizzazione

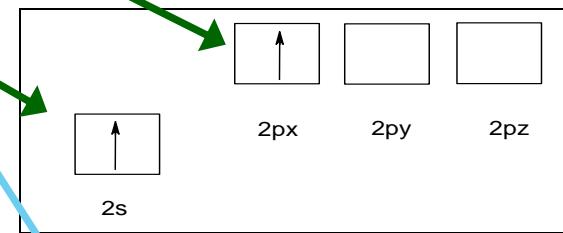




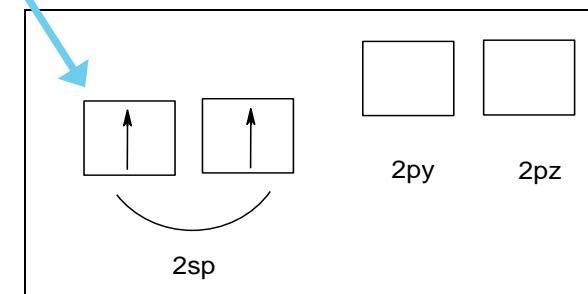
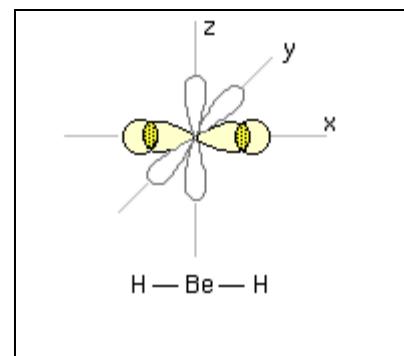
Gli orbitali ibridi si ottengono per combinazione lineare (somma algebrica) degli orbitali atomici dello stato di valenza aventi energie poco diverse



Promozione elettronica

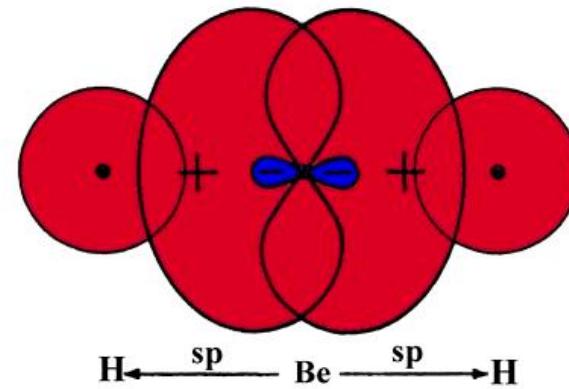
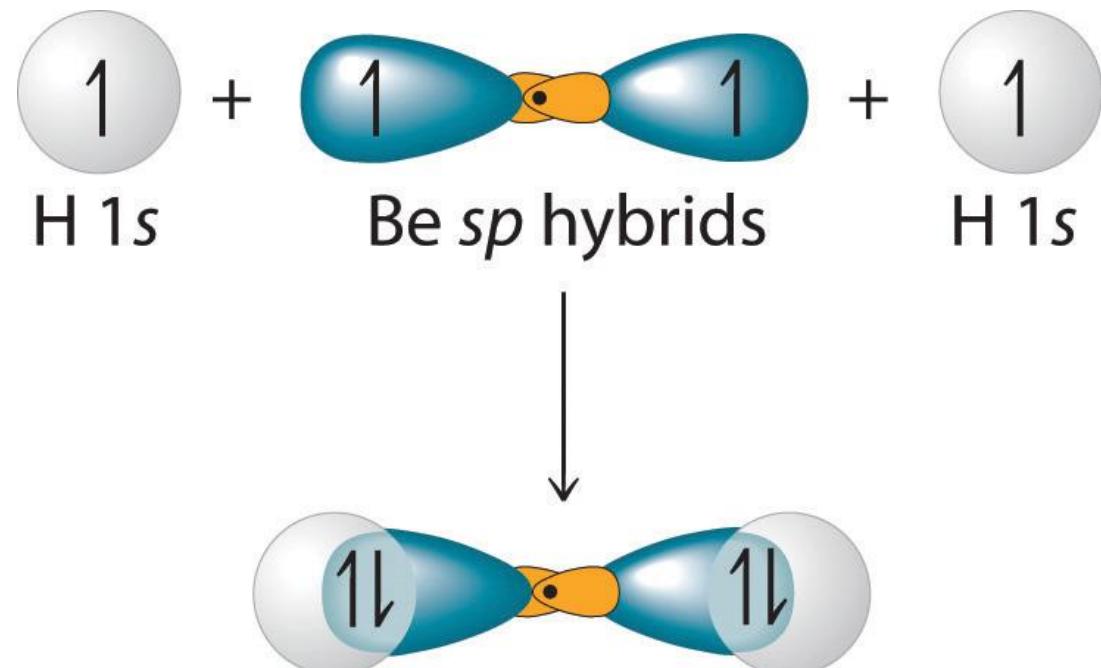


Ibridizzazione



IBRIDIZZAZIONE sp

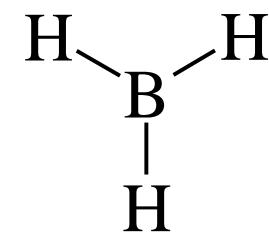
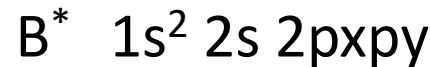
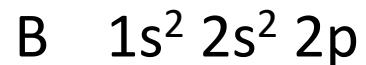
DUE orbitali IBRIDI DEGENERI (stessa energia)



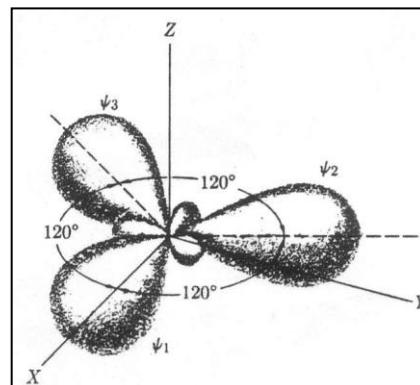
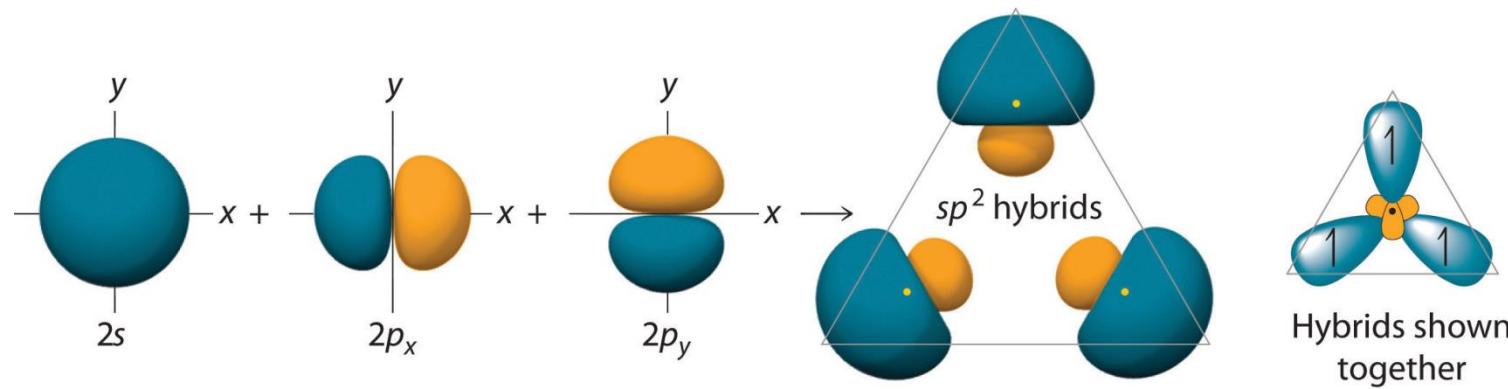
Molecola lineare



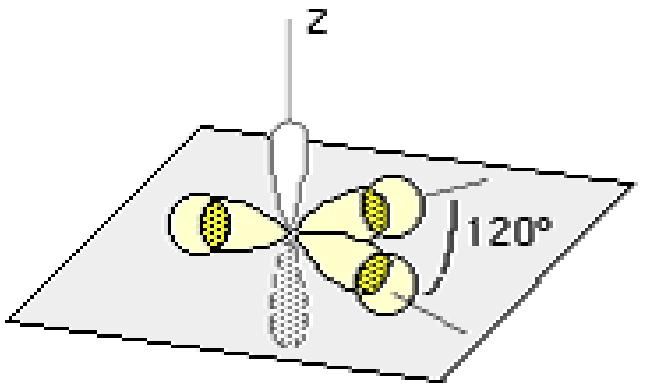
IBRIDIZZAZIONE sp^2



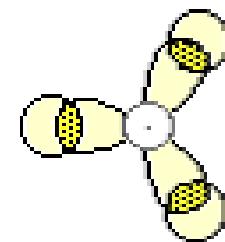
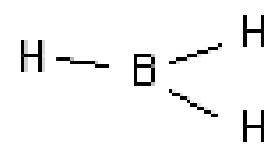
un orbitali s + due orbitali p \rightarrow 3 orbitali ibridi, degeneri, sp^2



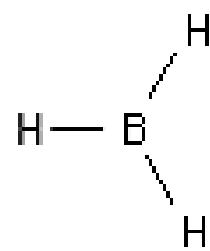
Molecola
trigonale planare



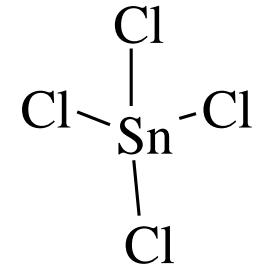
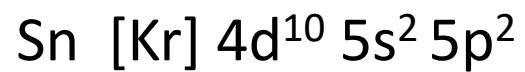
Vista prospettica della molecola



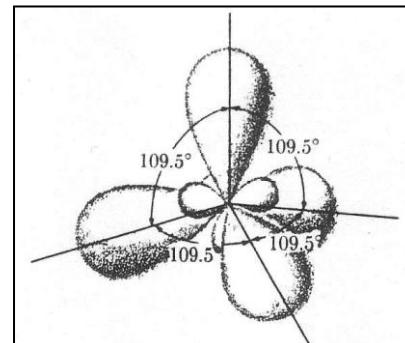
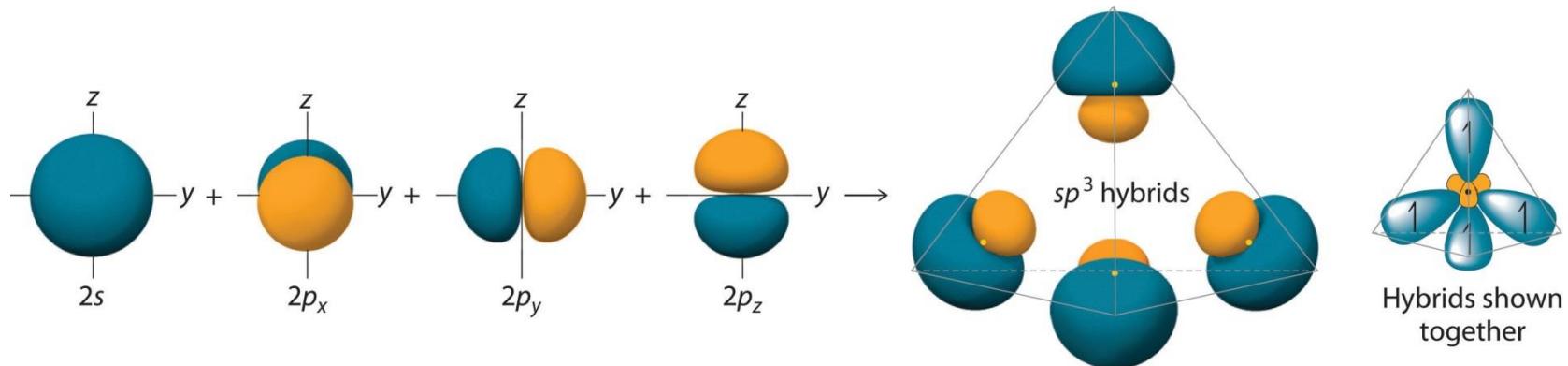
Vista dall'asse z



IBRIDIZZAZIONE sp^3

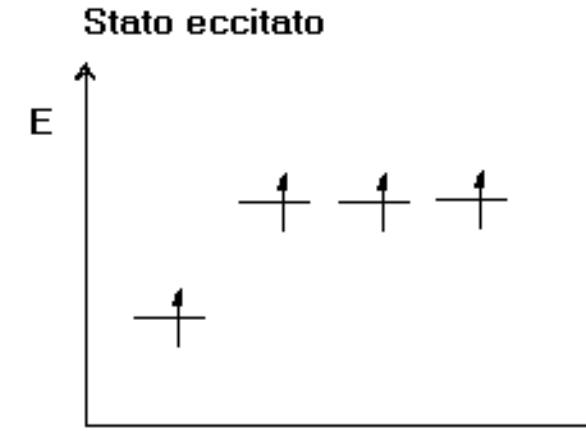
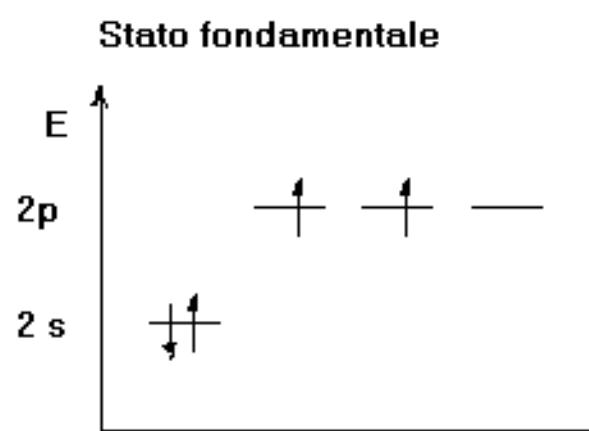
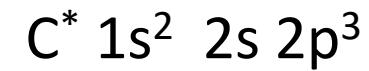
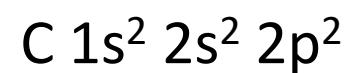


un orbitali s + tre orbitali p \rightarrow 4 orbitali ibridi, degeneri, sp^3



Molecola
tetraedrica

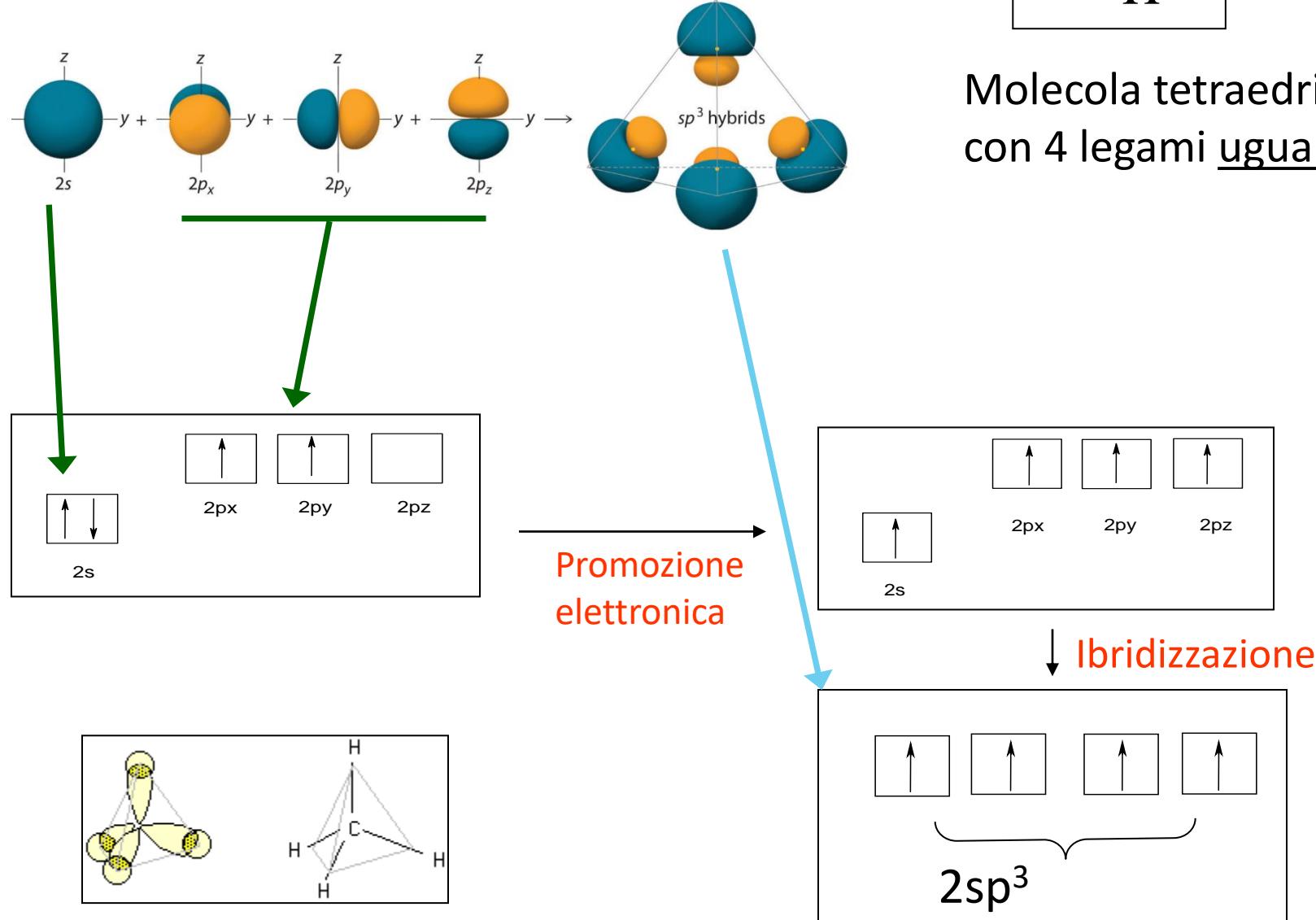
L'ATOMO DI CARBONIO

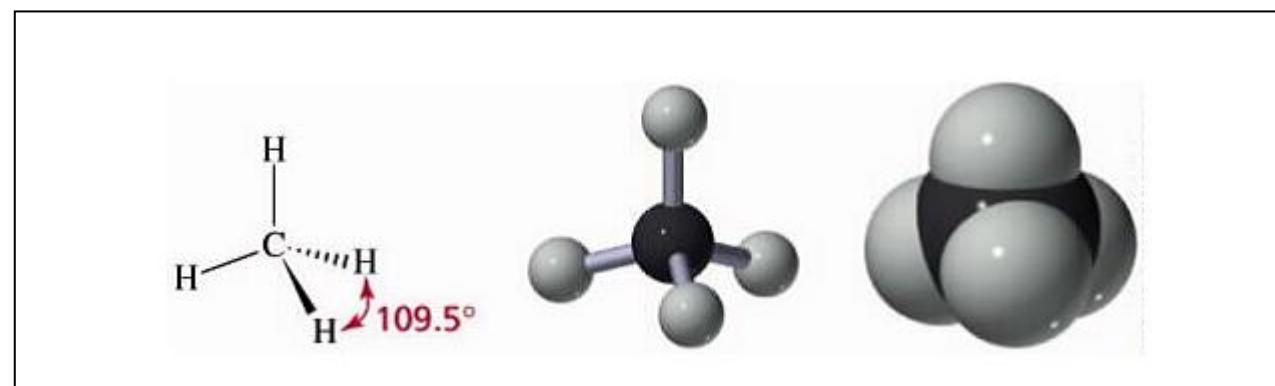
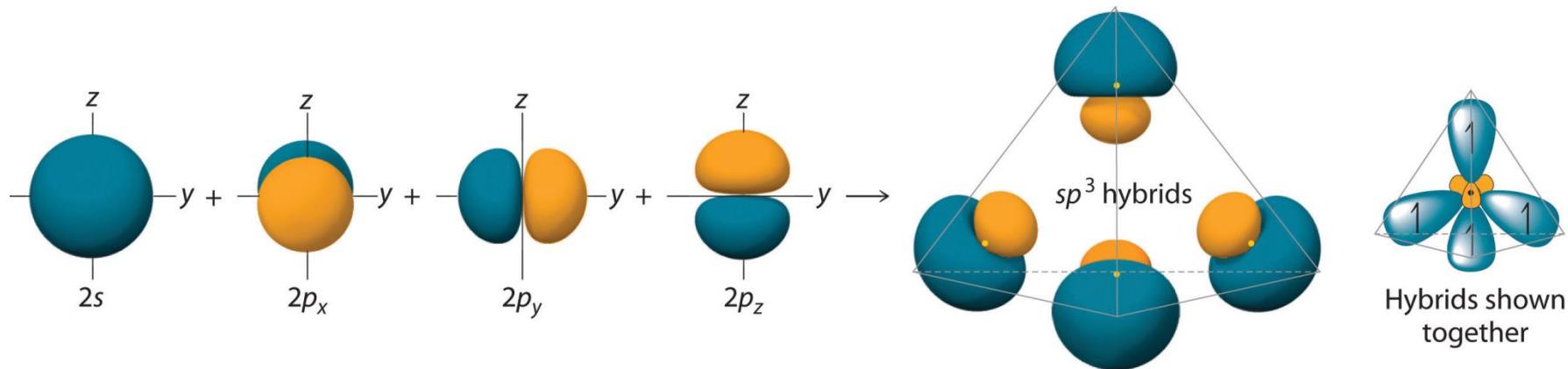


Possibilità di formare 4 legami

Ibridizzazione sp^3

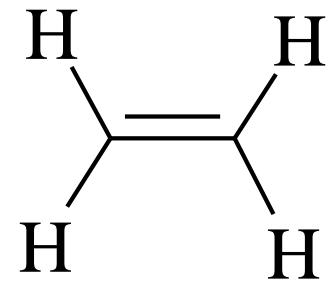
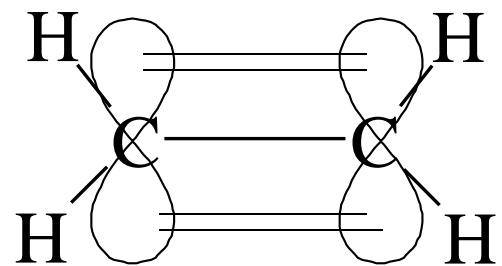
4 orbitali atomici ibridi → 4 legami semplici s





Ibridizzazione sp^2

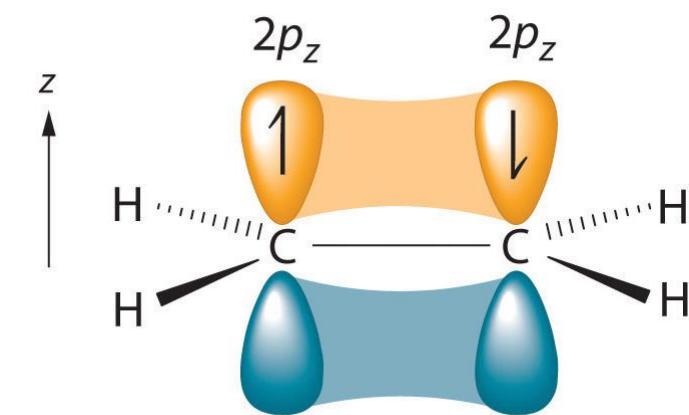
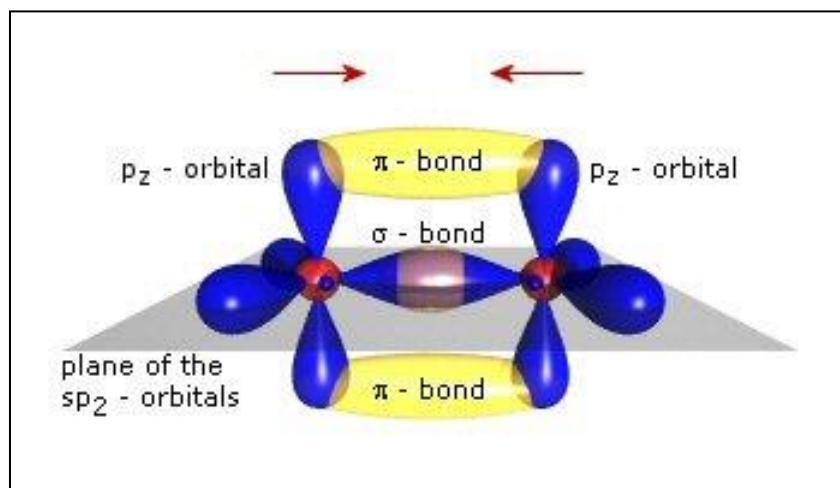
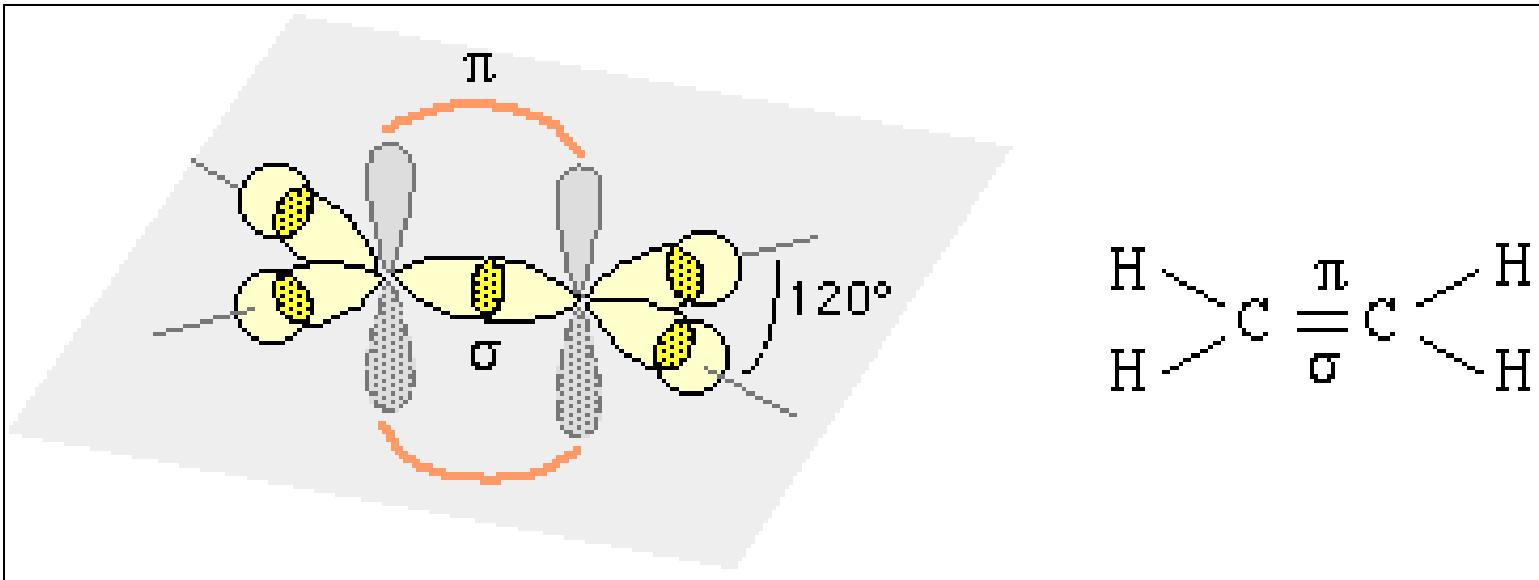
C_2H_4 etilene

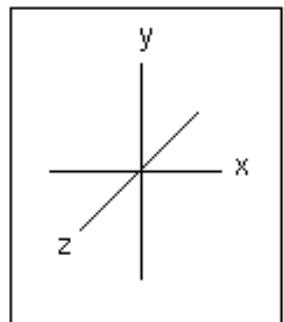


3 orbitali atomici ibridi \rightarrow 3 legami s (2 C-H, 1 C-C)

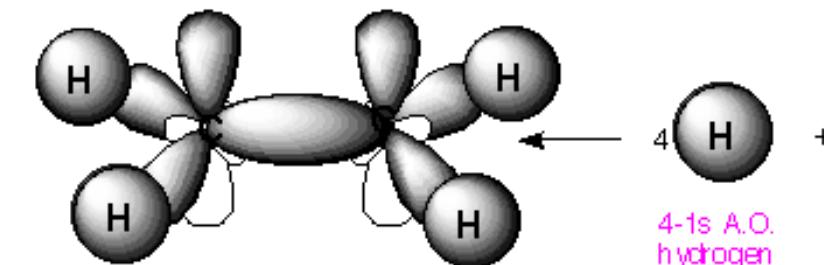
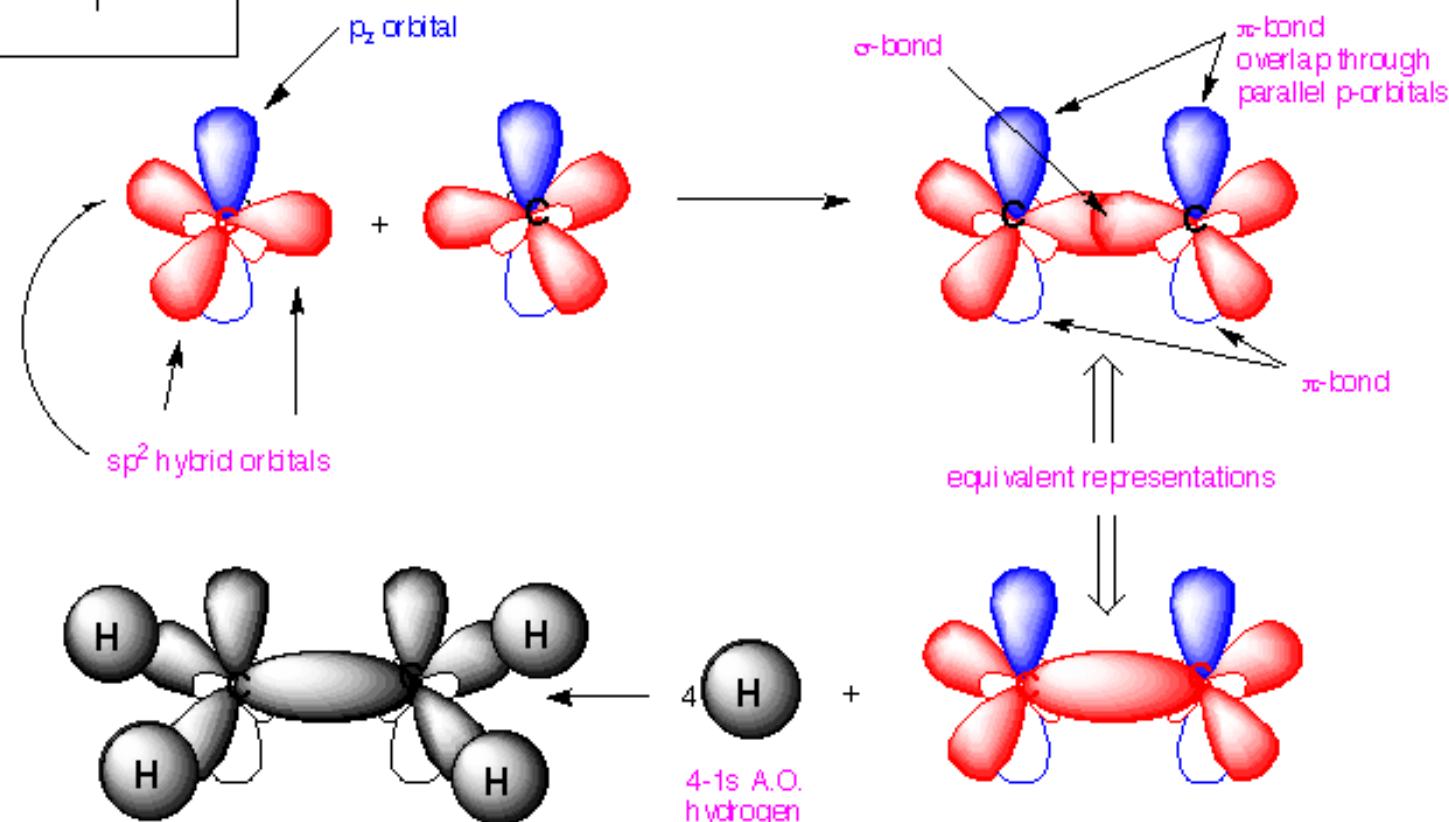
due orbitali atomici pz \rightarrow 1 legame p (C-C)

Legame doppio carbonio-carbonio (s+p)

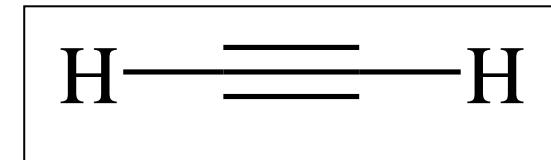
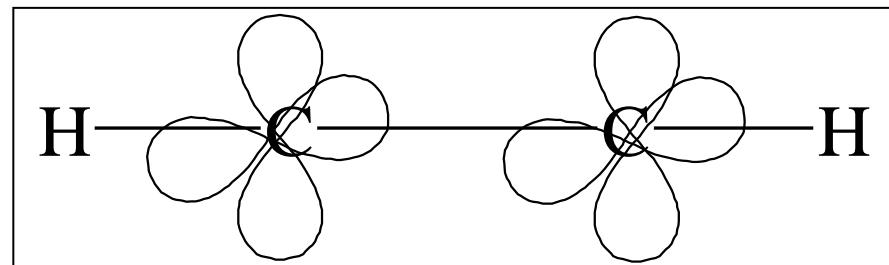




Hybridization of Ethylene



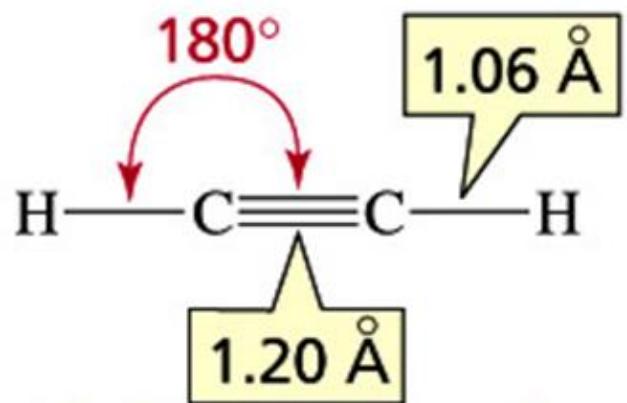
Ibridizzazione sp



Legame triplo carbonio-carbonio

1 legame s (due orbitali atomici ibridi)

2 legami p (orbitali atomici p_z e p_y)



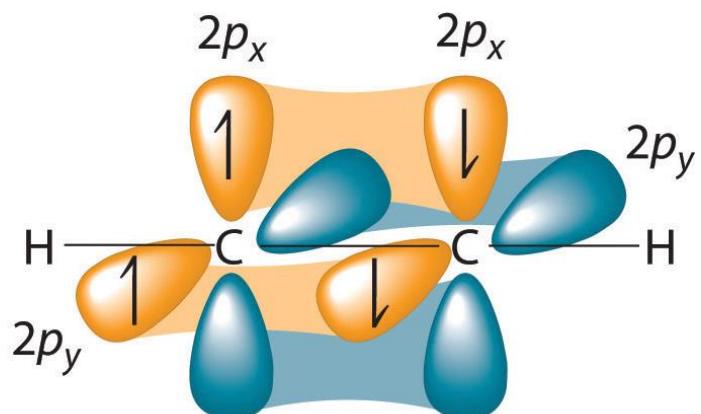
a triple bond consists of one
 σ bond and two π bonds



ball-and-stick model
of ethyne

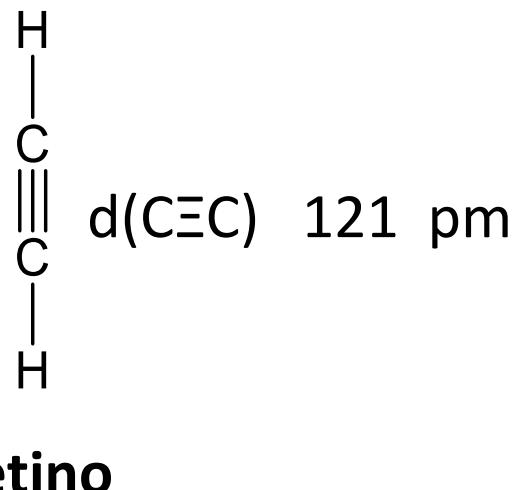
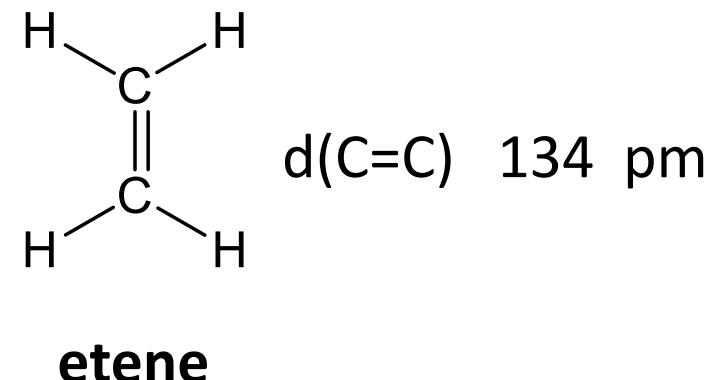
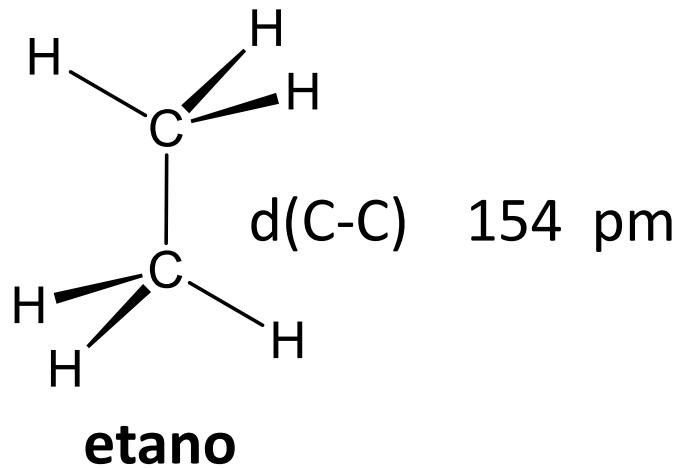


space-filling model
of ethyne



Distanza di legame

1 pm = 10^{-12} m



Distanza di legame - Forza di legame

<i>Legame</i>	<i>Lunghezza (pm)</i>	<i>Energia di dissociazione (kJ mol⁻¹)</i>
C-C	154	343
C=C	134	615
C≡C	121	812
N-N	147	159
N=N	125	418
N≡N	110	946
C-N	147	293
C=N	125	615
C≡N	115	879

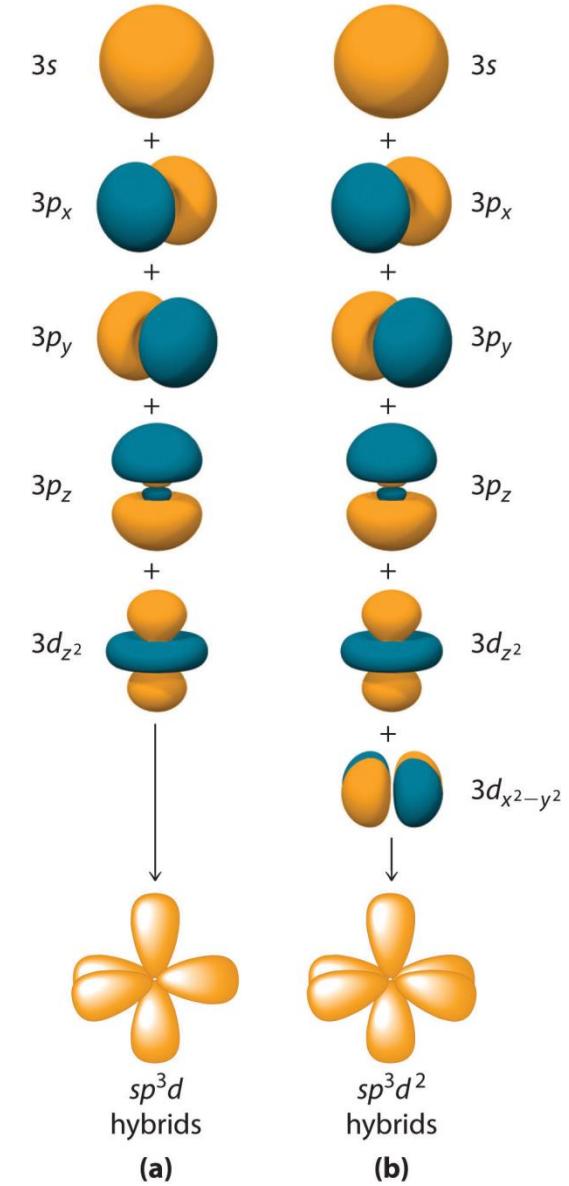
Ibridi sp^3d e sp^3d^2

Dalla combinazione di un orbitale s , tre orbitali p e un orbitale d si ottengono cinque orbitali ibridi di tipo sp^3d

- hanno geometria bipiramidale trigonale
- formano angoli di 120° (equatoriali) e di 90°
- si trovano in molecole di tipo AX_5 , AX_4E ...

Dalla combinazione di un orbitale s , tre orbitali p e due orbitali d si ottengono sei orbitali ibridi di tipo sp^3d^2

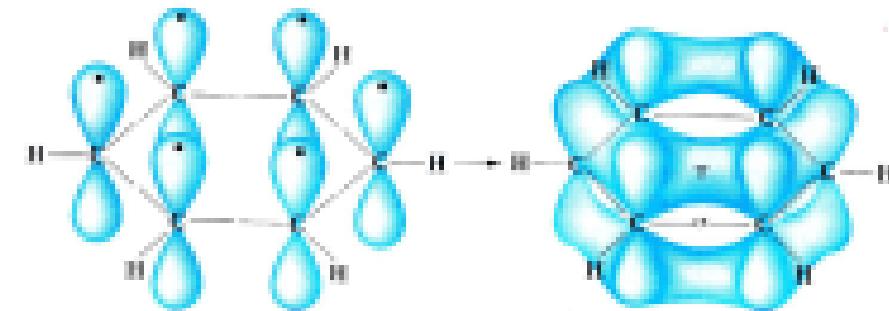
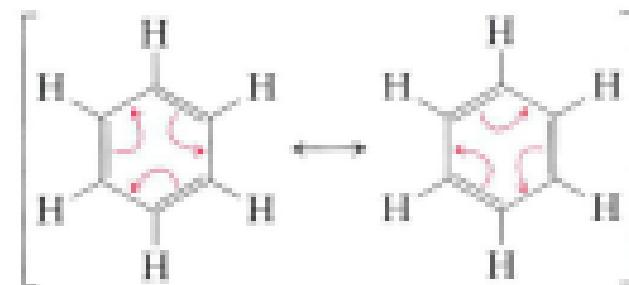
- hanno geometria ottaedrica
- formano angoli di 90°
- si trovano in molecole di tipo AX_6 , AX_5E ...



Risonanza (mesomeria)

Non sempre le strutture di Lewis risultano adeguate per riprodurre in modo soddisfacente la **distribuzione elettronica** di una molecola o di uno ione, cioè di interpretare correttamente la geometria (angoli, distanze di legame) di una molecola. La distribuzione elettronica reale è rappresentata da una **sovraposizione o mescolamento di diverse distribuzioni** (gli orbitali π sono delocalizzati).

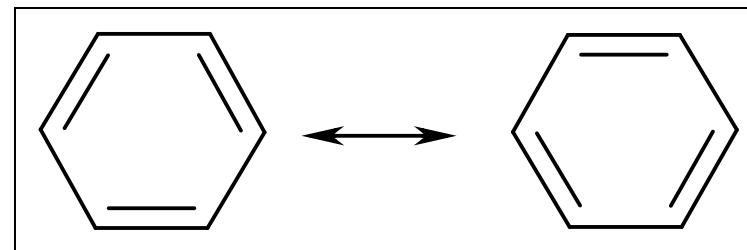
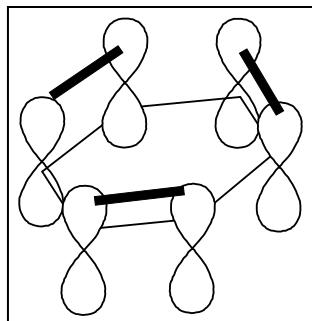
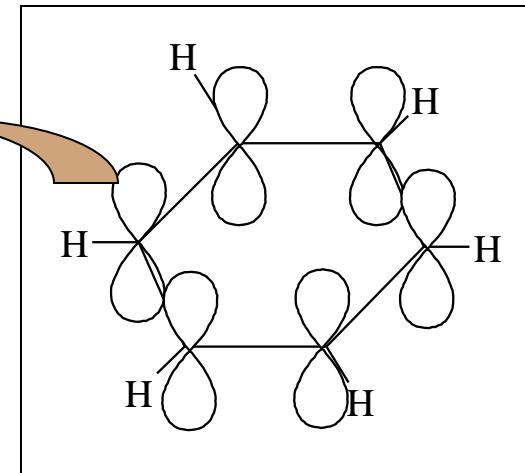
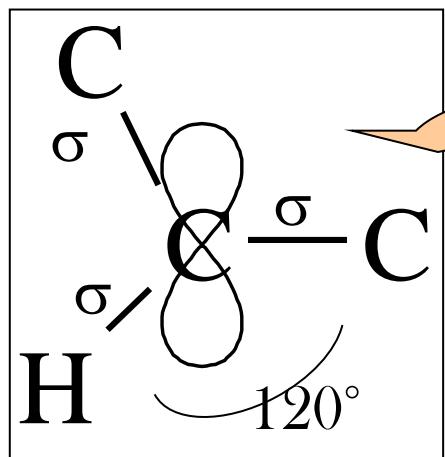
L'energia di risonanza è data dalla differenza tra l'energia delle strutture "mescolate" e l'energia della forma limite più stabile.



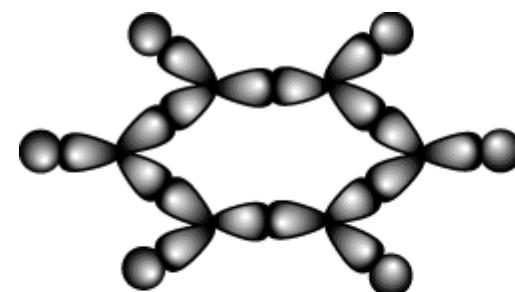
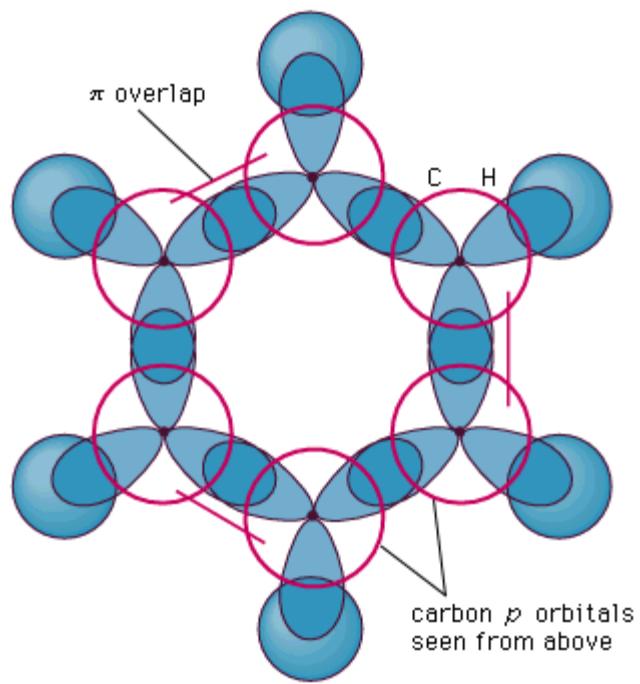
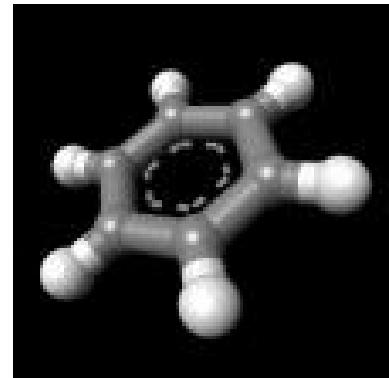
BENZENE

C_6H_6

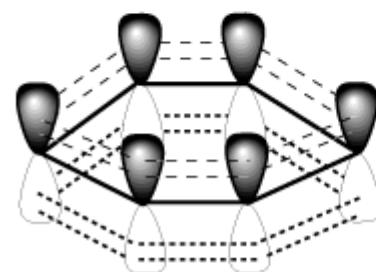
Ibridizzazione sp^2
dell'atomo di carbonio



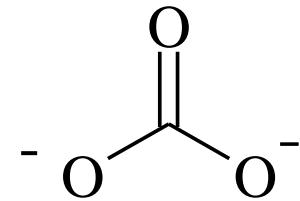
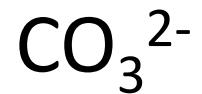
esagono regolare



σ - bond
localized bonds held
by sp^2 hybrid orbitals
in planar arrangement.



π - bond
delocalized bonds spread
evenly over six p-orbitals
perpendicular to the
 σ - plane



Sperimentalmente tutte le distanze C-O sono uguali ed hanno un valore intermedio fra C-O e C=O

Teoria dell'Orbitale Molecolare (M.O.)

Il metodo VB descrive una molecola come un insieme di atomi tra loro legati tramite sovrapposizione di orbitali atomici (**coppie di elettroni localizzate**)

Secondo il metodo dell'orbitale molecolare (MO) una molecola è un insieme di atomi i cui elettroni sono **delocalizzati in orbitali diffusi su tutta la struttura**

Così come gli atomi isolati possiedono orbitali atomici di forma e energia definita, le molecole possiedono **orbitali molecolari** di forma ed energia definita

Si ottengono per **combinazione lineare degli orbitali atomici** applicando l'approssimazione **LCAO** (Linear Combination of Atomic Orbitals)

Ogni orbitale molecolare:

- può contenere **due elettroni**
- possiede forma e energia definite
- il **quadrato di una funzione d'onda molecolare** definisce la **probabilità** di trovare l'elettrone nella molecola

La teoria VB è la trasposizione teorica dei concetti di Lewis di localizzazione di coppie di elettroni sui legami tra i nuclei, o come coppie di non legame sugli atomi.

Presenta però carenze nella capacità di descrivere:

- a) Gli Stati di legame di molecole che presentano elettroni spaiati (ad esempio l' O_2)
- b) l'interpretazione degli spettri dovuti a transizioni elettroniche all'interno di molecole (non ci mostra i salti elettronici della molecola)

il modello alternativo al metodo VB è quello dell'Orbitale Molecolare (MO), che attualmente è il più utilizzato in chimica teorica. Entrambi i modelli hanno lo scopo di costruire funzioni (orbitali) che descrivano la distribuzione degli elettroni nella molecola; VB le costruisce partendo dalla sovrapposizione di coppie di orbitali pre-direzionati lungo la direzione interna nucleare di legame. Il metodo MO invece costruisce orbitali ti abbracciano l'intera molecola, e che vengono formati dalla combinazione degli orbitali atomici di tutti gli atomi (LCAO = Linear Combination of Atomic Orbitals).

I singoli orbitali atomici entrano nella composizione degli orbitali molecolari con diversi coefficienti, che rappresentano il contributo di ciascun atomo al legame.

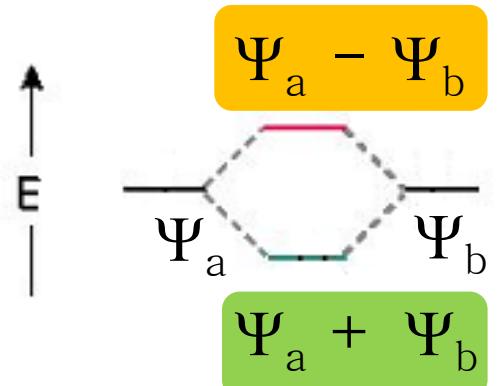
Dalla combinazione lineare di due orbitali atomici, Ψ_a e Ψ_b , si ottengono **due orbitali molecolari**:

$$\Psi_+ = N+(\Psi_a + \Psi_b)$$

Orbitale molecolare di Legame
(Stato Attrattivo)

$$\Psi_- = N-(\Psi_a - \Psi_b)$$

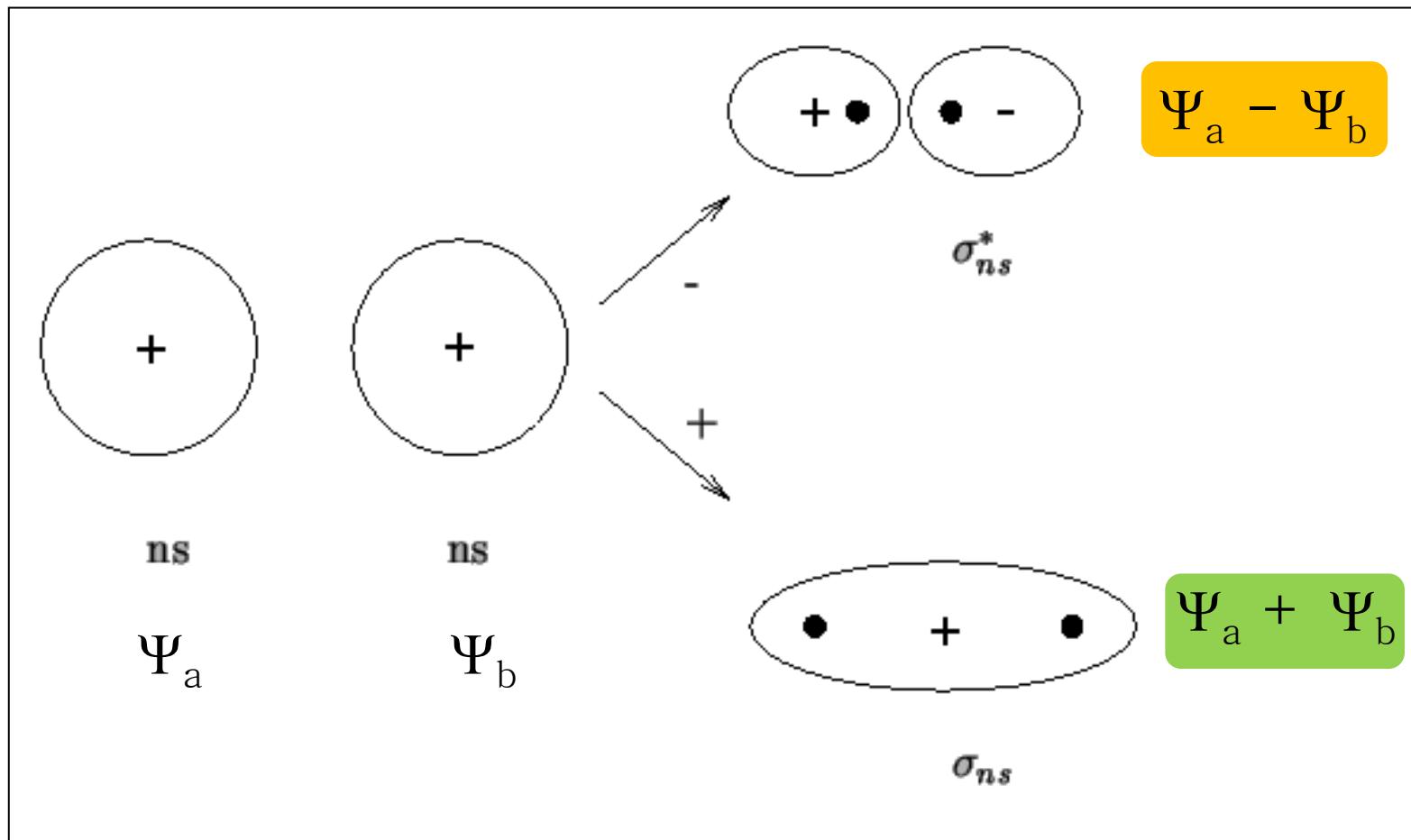
Orbitale molecolare di Antilegame
(Stato Repulsivo)

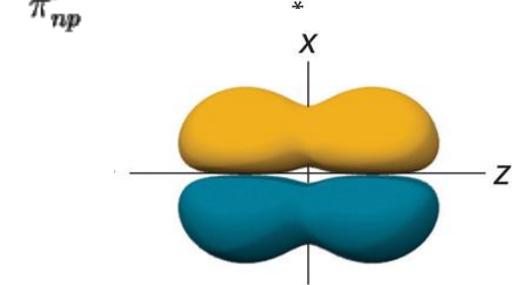
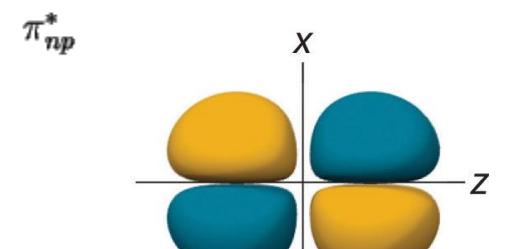
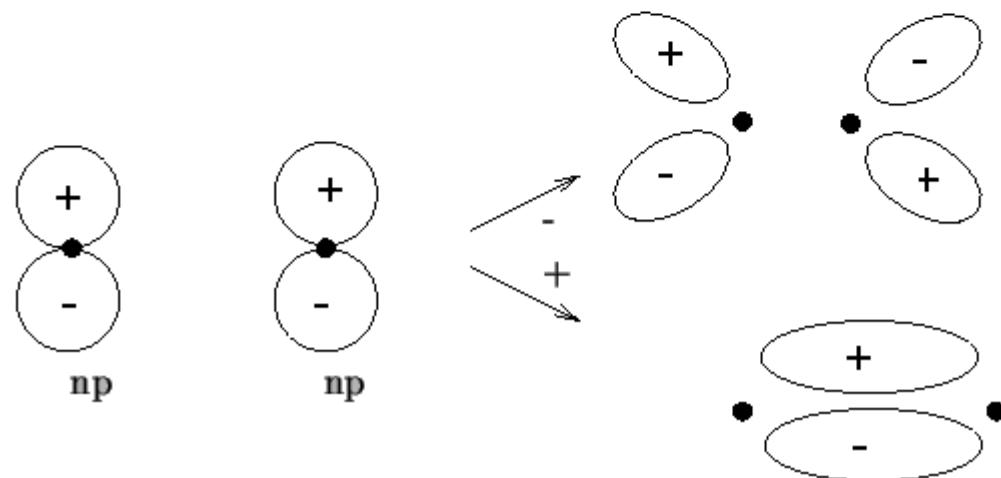
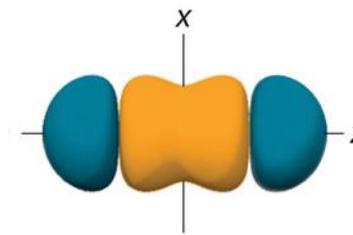
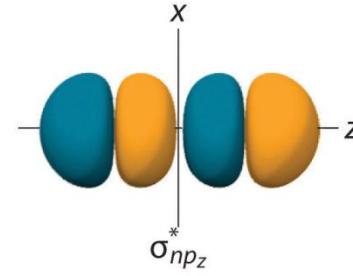
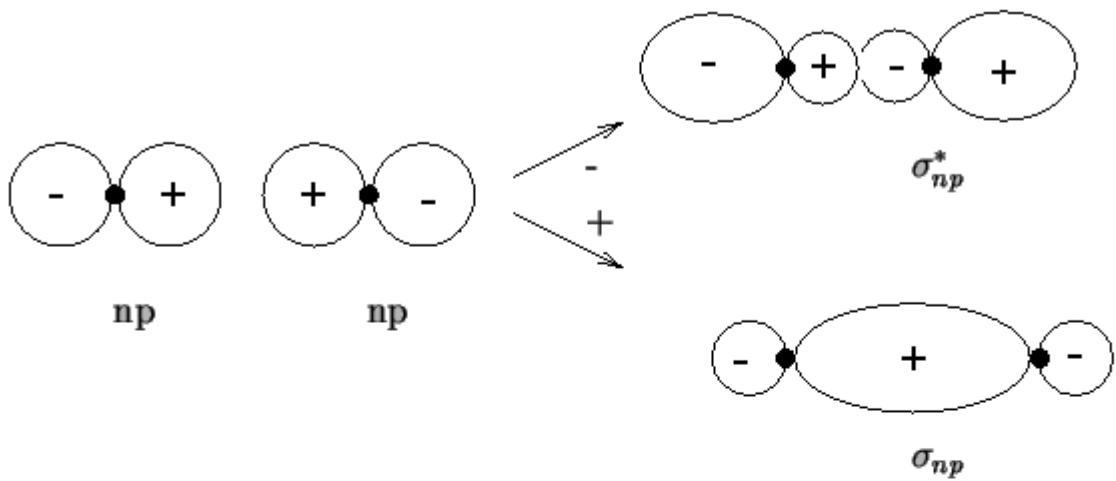


Gli elettroni nella molecola sono descritti da funzioni d'onda definite dagli stessi numeri quantici visti per gli orbitali atomici

Perché si formino **orbitali molecolari** devono essere soddisfatte le seguenti **condizioni** che riguardano gli **orbitali atomici** coinvolti:

- **Energie poco diverse**
- Nuvole elettroniche il più possibile **sovrapponibili**
- **Stessa simmetria** rispetto all'asse internucleare





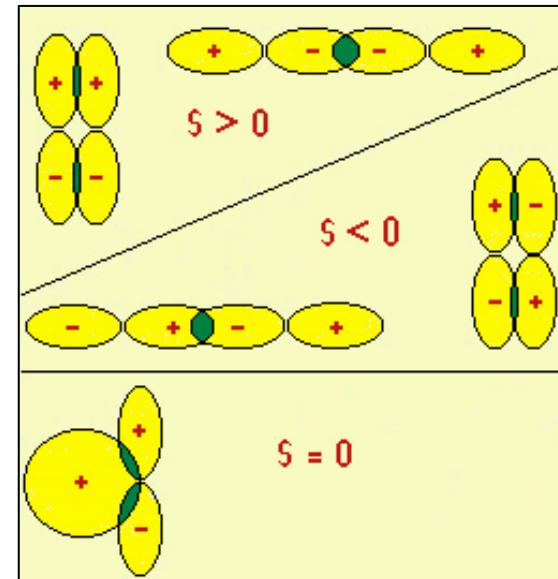
Combinazioni di orbitali atomici permesse e vietate

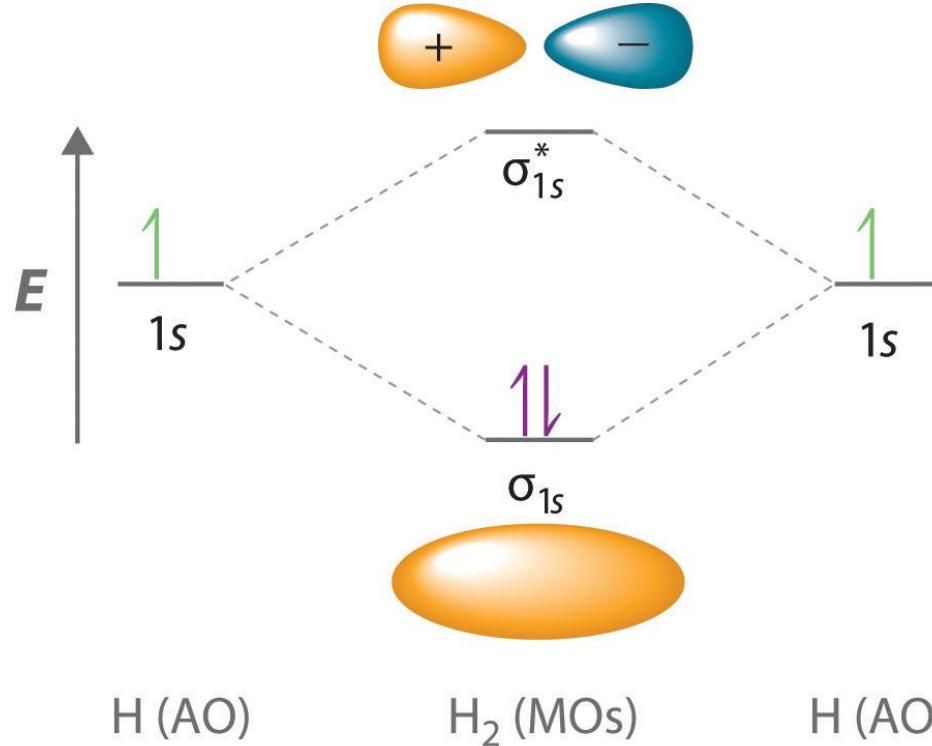
	permesse	vietate
s	s, p_x (s)	p_y, p_z
p_x	s, p_x (s)	p_y, p_z
p_y	p_y (p)	s, p_x, p_z
p_z	p_z (p)	s, p_x, p_y

Integrale di sovrapposizione superiore a zero, $S>0$: la densità elettronica fra i due nuclei aumenta e si forma un legame.

Integrale di sovrapposizione inferiore a zero, $S<0$: la densità elettronica fra i due nuclei diminuisce e si forma un antilegame.

Integrale di sovrapposizione uguale a zero, $S=0$: l'integrale positivo dovuto alla sovrapposizione delle due parti degli orbitali con segno eguale viene esattamente annullato dall'integrale negativo dovuto alla sovrapposizione delle due parti degli orbitali con segno opposto. Non esiste alcuna interazione; è una situazione di "non legame".





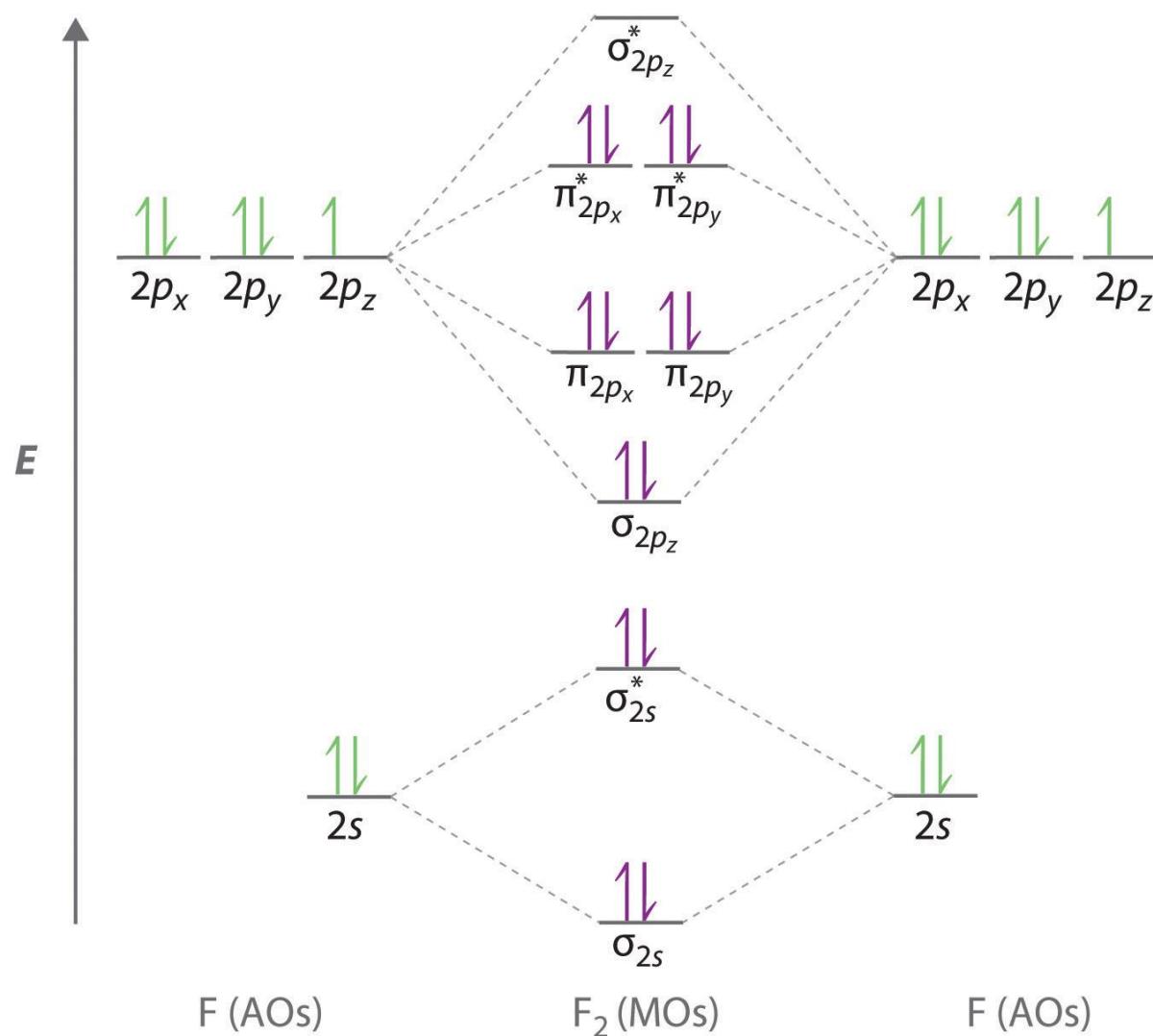
La distribuzione degli elettroni negli orbitali molecolari avviene secondo il principio di “aufbau”.

Ordine di Legame:

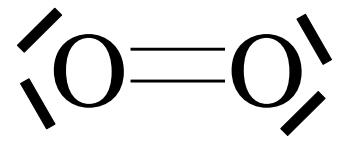
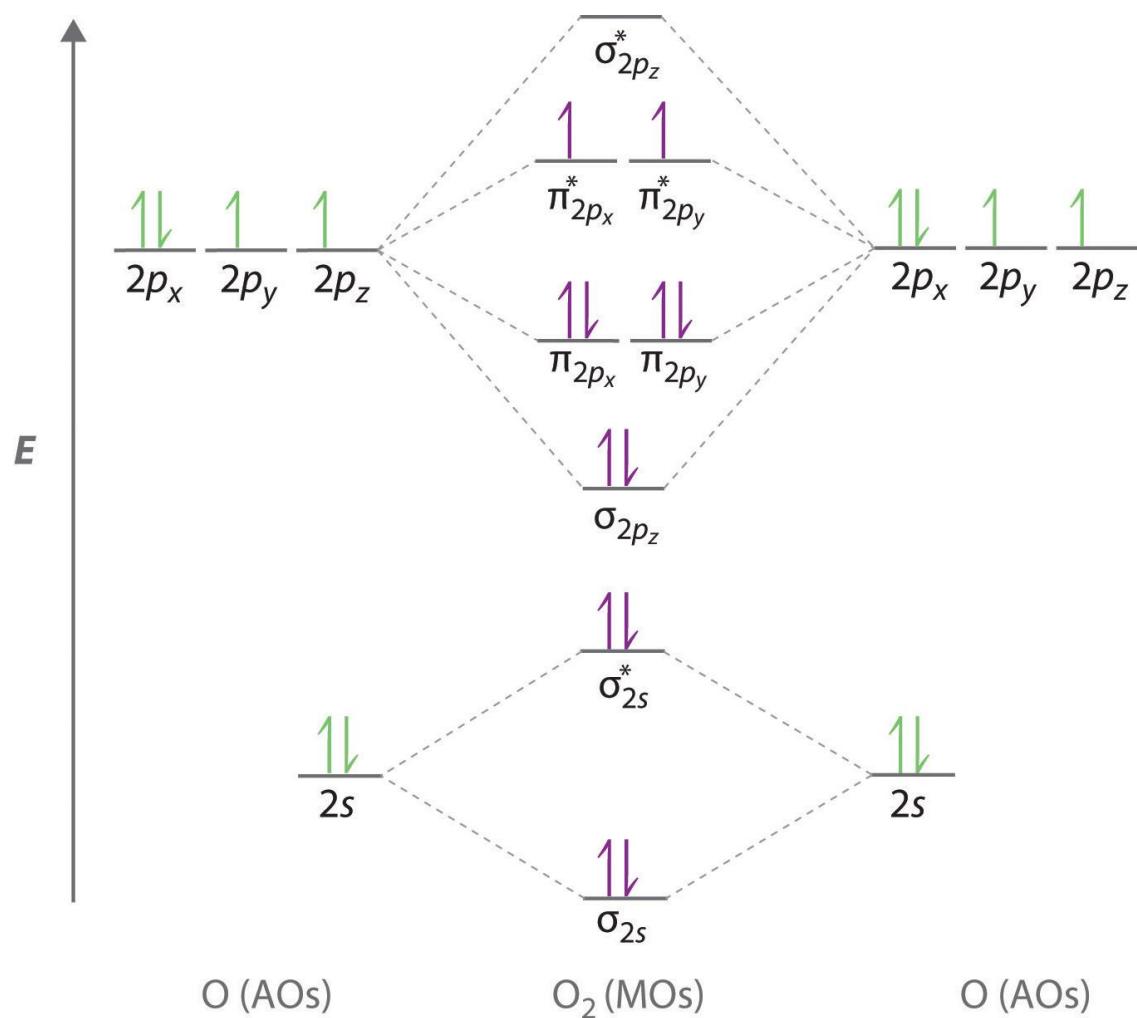
$\frac{1}{2} (n^{\circ} \text{ elettroni legame} - n^{\circ} \text{ elettroni antilegame})$

Molecole Biatomiche Omonucleari secondo MO

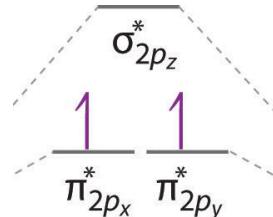
La molecola del fluoro F_2



La molecola di O₂ secondo la teoria MO



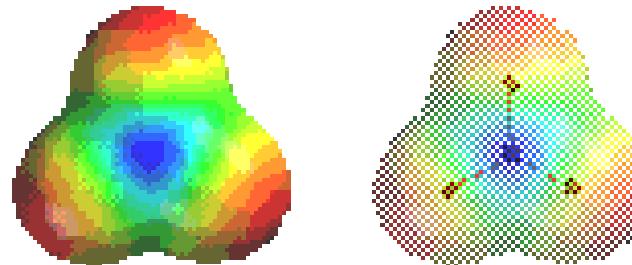
**O₂ è un
biradicale !!!**



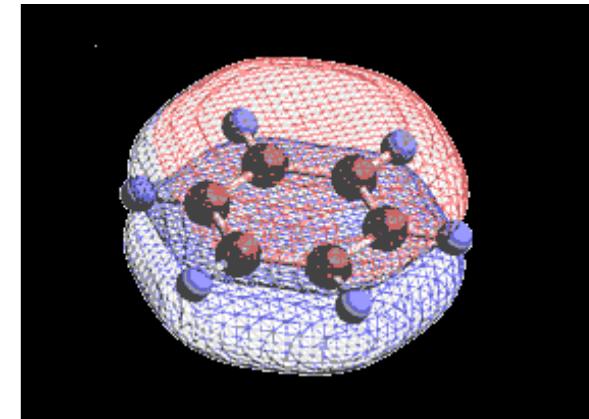
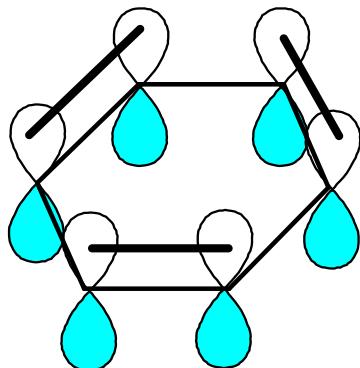
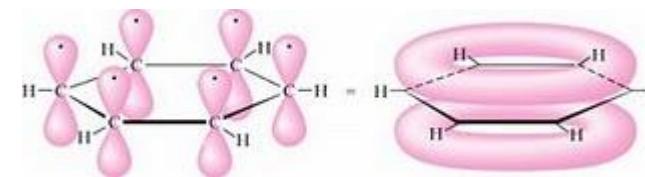
$$(\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 \quad (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2p})^2 (\pi_{2p})^4 (\pi_{2p}^*)^2$$

Orbitali Molecolari Delocalizzati

- Ione CO_3^{2-}



- Benzene



6 elettroni
delocalizzati
su tutto
l'anello

Legame Metallico

Caratteristiche dei metalli:

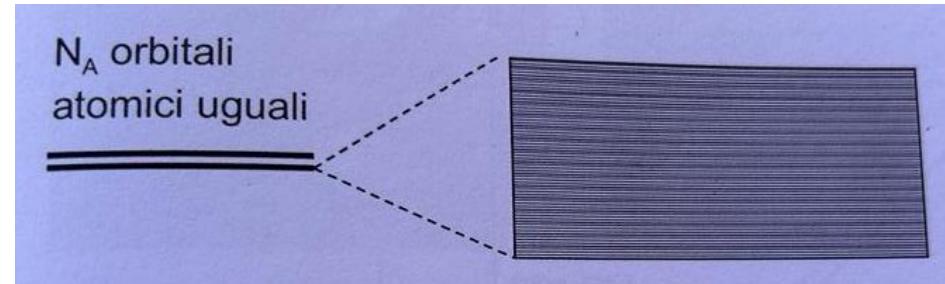
- Conducibilità termica ed elettrica
 - Duttilità e malleabilità
 - Struttura compatta (numeri di coordinazione 8-12)
 - Opacità e lucentezza
-
- Bassi valori di energia di prima ionizzazione
 - Bassa elettronegatività



Il legame tra gli atomi negli elementi metallici solidi viene descritto mediante la teoria delle bande, che deriva dal metodo MO.

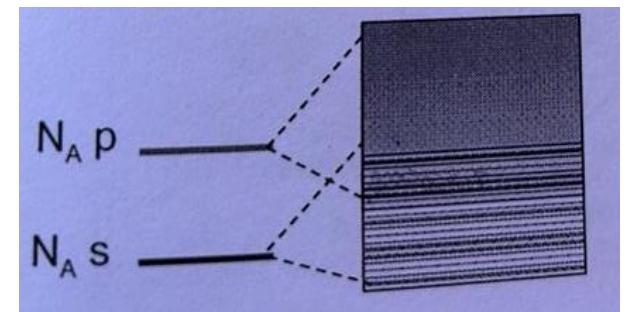
Legame Metallico - Teoria delle bande

La coesione nel metallo è assicurata dall'interazione di tutti gli orbitali di valenza che interagiscono collettivamente. Si formano orbitali molecolari «giganteschi» delocalizzati su tutto il solido. Dalla combinazione di un numero elevatissimo N di AO tutti uguali si ottengono N MO con energie tanto vicine da costituire un continuo. Si formano tante bande quanti sono gli AO gli di valenza dell'atomo isolato.

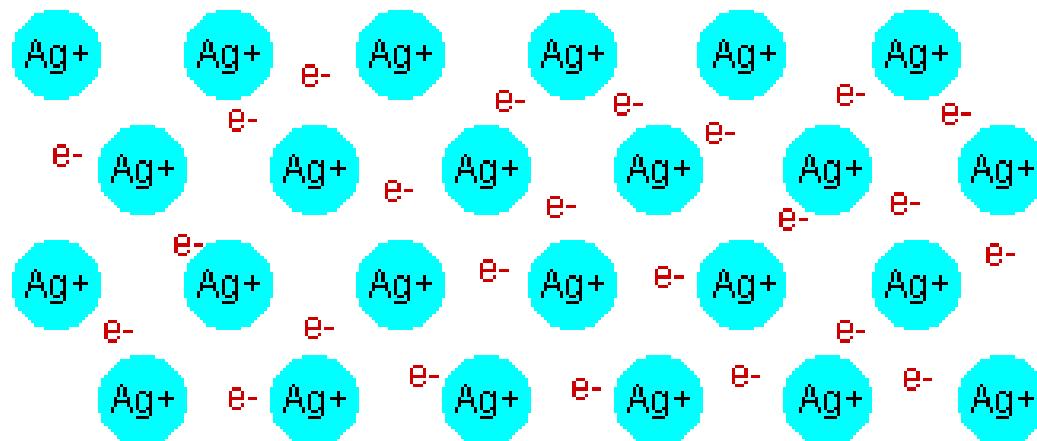


Ogni banda può ospitare $2N_A$ elettroni, collocati nell'energia inferiori seguendo il principio di Pauli.

Bande derivanti da AO diversi con energia simile si possono sovrapporre.



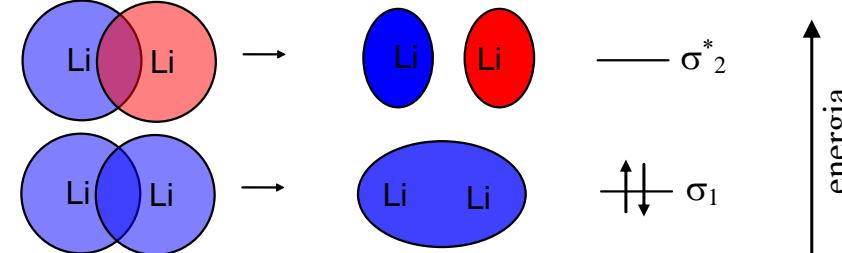
I cationi, fissi nel reticolo cristallino, sono immersi in un
nuvola di elettroni mobili (elettroni di valenza
delocalizzati).



N.B. - Gli Ag^+ presenti NON sono ioni veri e propri.

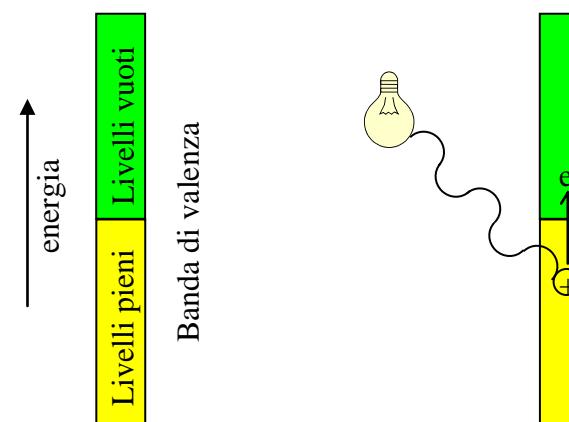
La configurazione elettronica dello stato fondamentale degli elettroni di valenza di Li: $2s^1$

Supponiamo di avere due atomi di litio posti a distanza di legame.



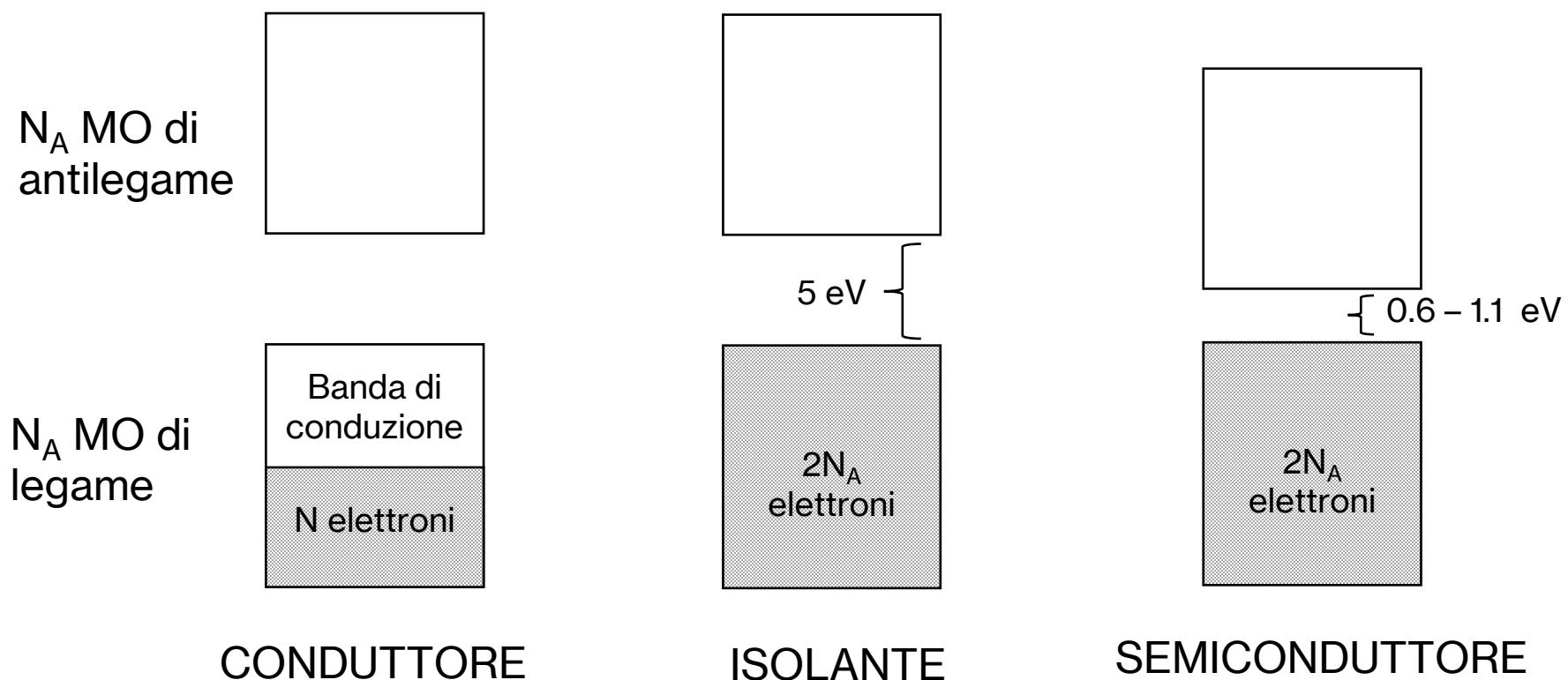
Se consideriamo **N atomi** di Li otteniamo **N orbitali molecolari** per metà occupati dagli N elettroni.

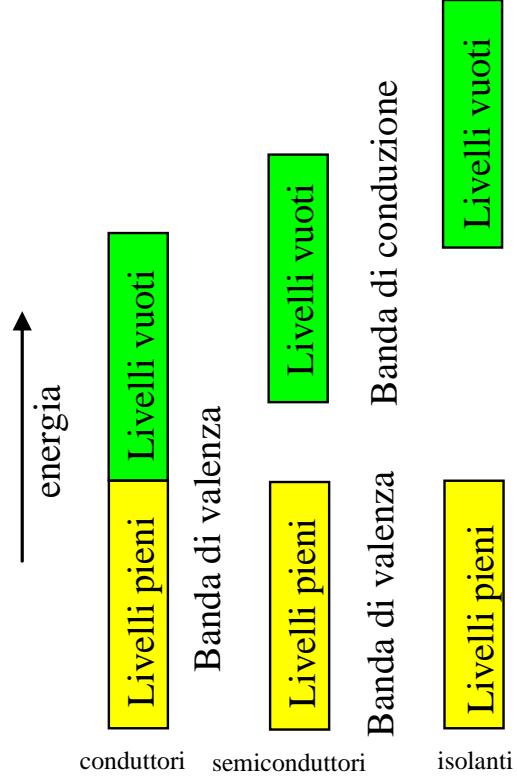
Se N è molto grande (si consideri il numero di Avogadro) gli orbitali hanno energie così vicine che si crea una **banda continua di orbitali** semi occupata dagli elettroni.



Conduzione- Teoria delle bande

Per avere conduzione elettrica occorre che una banda di valenza non sia completamente occupata, oppure che si sovrapponga ad una banda vuota (materiale conduttore). Si costituisce così una banda di conduzione, in cui gli elettroni si possono spostare. Se la banda di valenza è piena e non si ha accessibilità energetica a livelli vuoti , il materiale è un isolante. Nei semiconduttori gli elettroni possono essere promossi in una banda vuota con una piccola spesa energetica, per eccitazione termica o per irraggiamento.

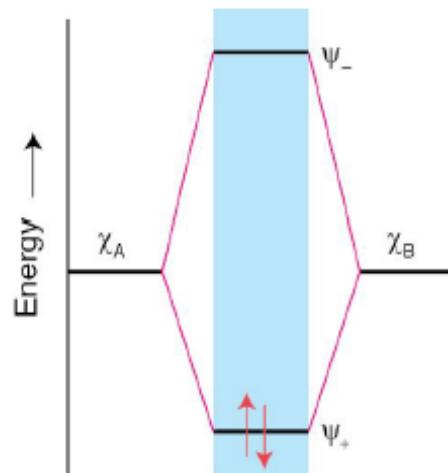




I **materiali semiconduttori** sono caratterizzati dall'avere la **banda di valenza** completamente **occupata** dagli **elettroni** con una **banda completamente vuota** ad **energia un po' più alta** chiamata **banda di conduzione**.

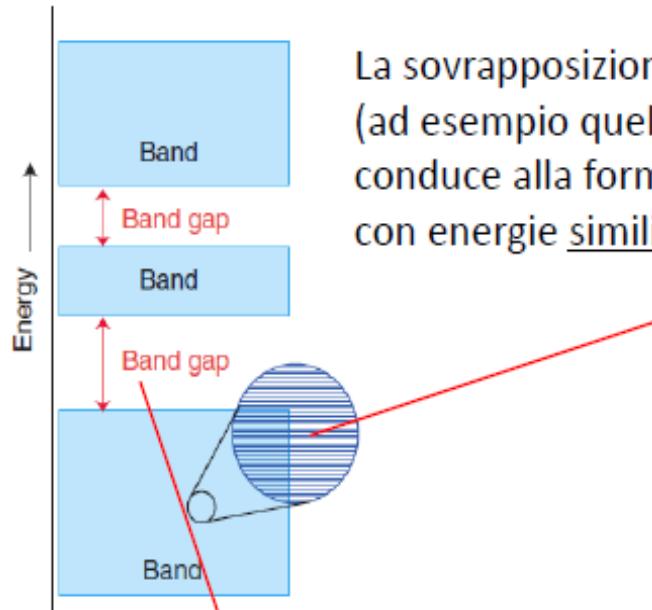
I **materiali isolanti** hanno una situazione simile a quella dei semiconduttori ma in questo caso il **salto energetico** tra la **banda di valenza** e quella **di conduzione** è molto **maggior**e.

Struttura elettronica dei solidi



quando si forma un legame,
due orbitali atomici generano
due orbitali molecolari

Figure 3.61 The electronic structure of a solid is characterized by a series of bands of orbitals separated by gaps at energies where orbitals do not occur.



La sovrapposizione di un grande numero di orbitali atomici in un solido (ad esempio quelli di atomi, tutti uguali e vicini, in un metallo esteso) conduce alla formazione di un grande numero di orbitali molecolari con energie simili, una «**banda**» di livelli energetici quasi continui.

Si possono formare diverse bande, separate da un «**band gap**» dove non esistono orbitali

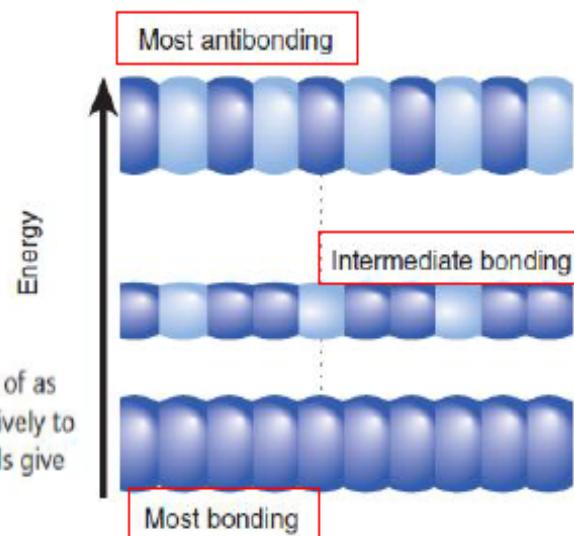


Figure 3.62 A band can be thought of as formed by bringing up atoms successively to form a line of atoms. N atomic orbitals give rise to N molecular orbitals.

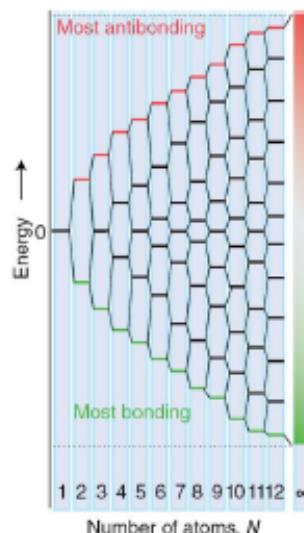
Punto di Fusione

Table 9.2 Normal melting points of the elements, θ_{mp} /°C

Li	Be							B	C	N	O	F
180	1280							2300	3730	-210	-218	-220
Na	Mg							Al	Si	P	S	Cl
97.8	650							660	1410	44*	113	-110
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
63.7	850	1540	1675	1900	1890	1240	1535	1492	1453	1083	420	29.8
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Au	Cd	In
38.9	768	1500	1850	2470	2610	2200	2500	1970	1550	961	321	2000
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl
28.7	714	920	2220	3000	3410	3180	3000	2440	1769	1063	13.6	304
												327
												271
												254

* White allotrope.
† Grey allotrope under 28 atm.

interazioni intermolecolari



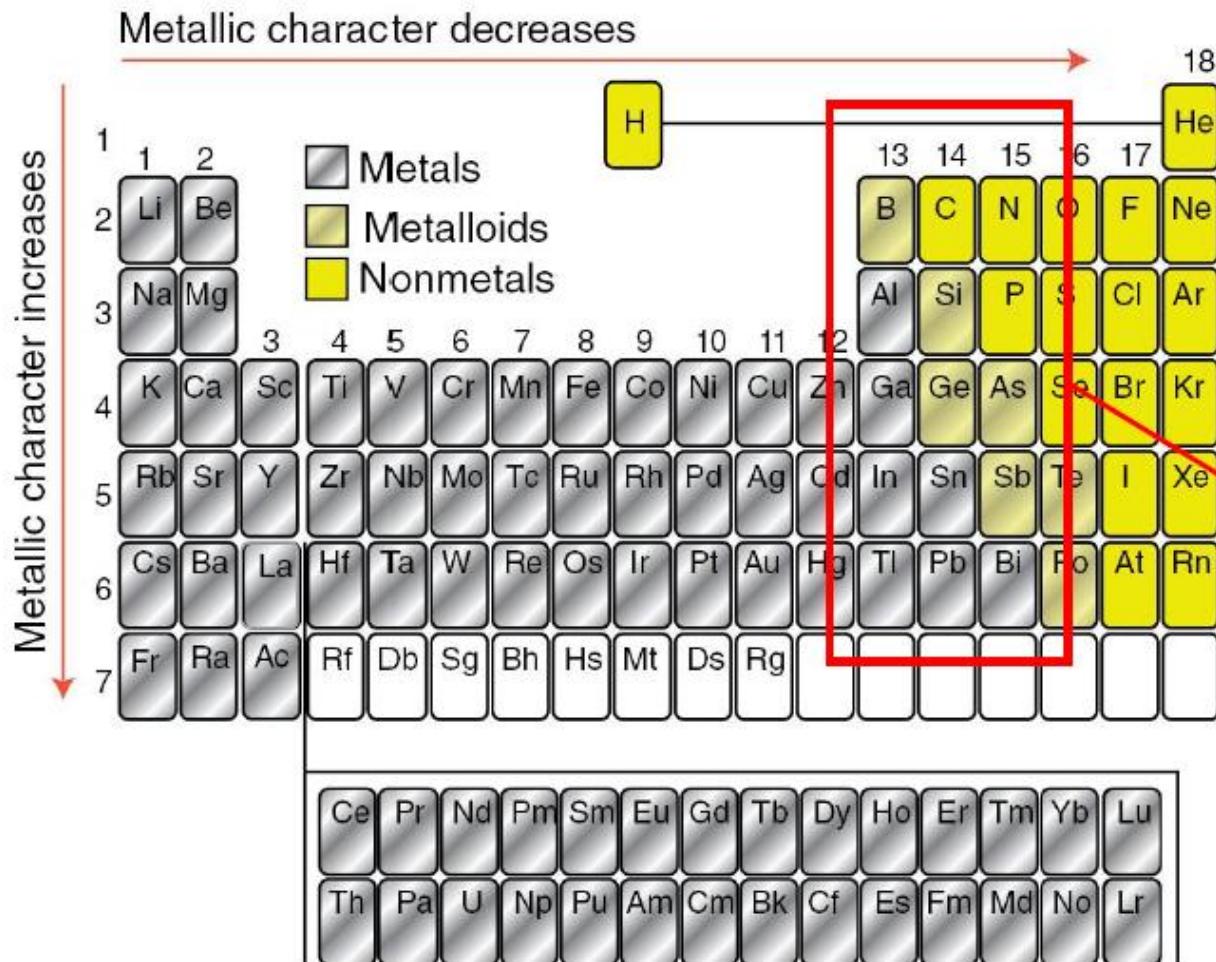
Lungo B

il numero degli elettroni aumenta
nella banda ad alta energia (antilegame)

Lungo A

il numero degli elettroni aumenta
nella banda a bassa energia (legame)

Carattere metallico



il legame metallico si forma quando un atomo di un elemento perde facilmente un elettrone e lo mette in comune con tutti gli altri

Basse energie di ionizzazione (grandi raggi atomici) favoriscono il legame metallico.

scendendo nel gruppo,
il raggio atomico aumenta,
l'energia di ionizzazione diminuisce
il carattere passa da non metallico a semimetallo a metallo

I legami deboli

Negli stati condensati le molecole neutre si associano mediante interazioni attrattive che presentano energie con ordini di grandezza da 10^{-1} KJ/mol fino a 10^2 KJ/mol.

Legame covalente → 10^2 KJ/mol

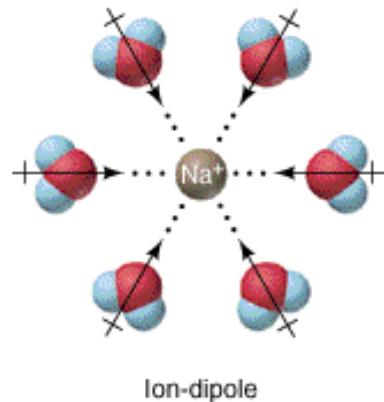
Interazione intermolecolare → $< 10^{-1}$ KJ/mol

Interazioni di Van de Waals

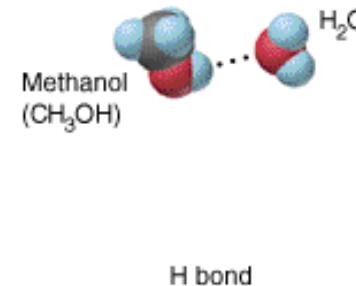
- Interazioni dipolo - dipolo
- Interazioni dipolo – dipolo indotto
- Interazioni dipolo istantaneo – dipolo istantaneo (interazioni dispersive di London)

Legame di Idrogeno

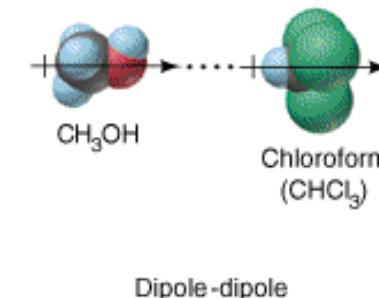
Interazioni di Van der Waals



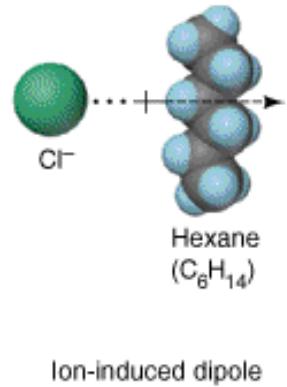
Ion-dipole



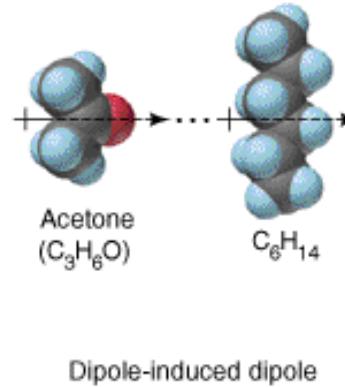
H bond



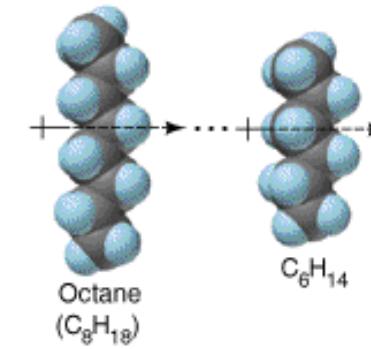
Dipole-dipole



Ion-induced dipole



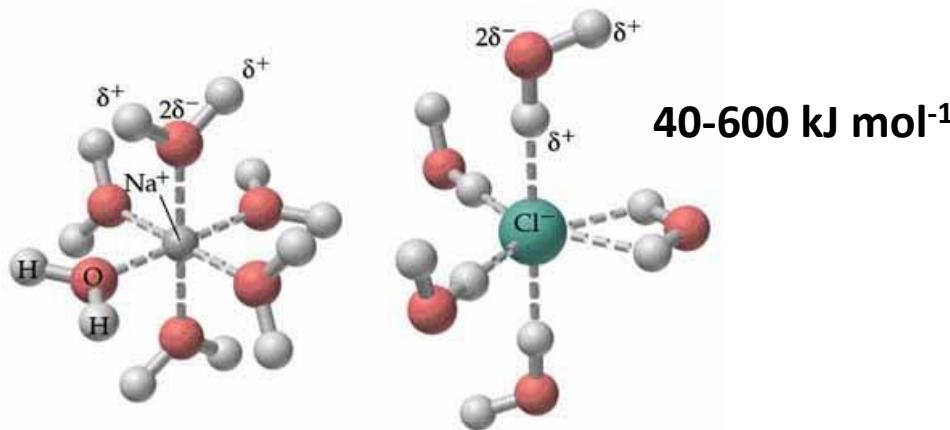
Dipole-induced dipole



Dispersion

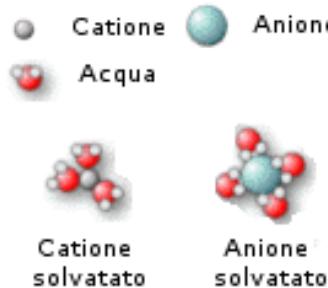
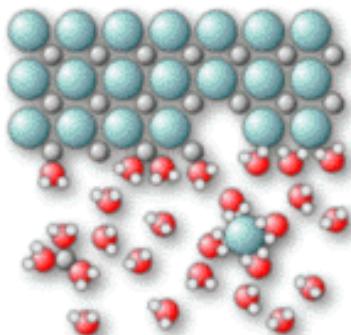
Le interazioni di Van der Waals sono di **origine elettrostatica** e sono molto **più deboli** dei **legami chimici**. Hanno origine dalla interazione tra cariche parziali (dipoli) in atomi non legati in molecole adiacenti (distanze di Van der Waals)

Interazione ione - dipolo



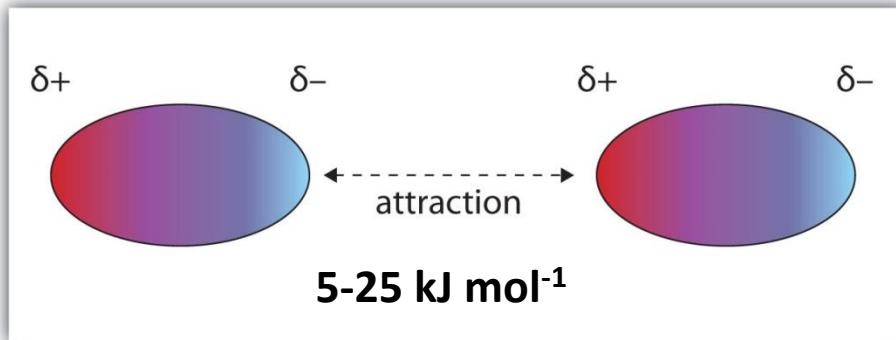
L'energia dell'interazione (**40-600 kJ mol⁻¹**) aumenta:

- al crescere della carica ionica
- al diminuire del raggio ionico



Spiega la **solubilità dei sali** in **solventi polari** quali l'**acqua** (solvatazione) e la presenza di **ioni idrati** nei minerali

Interazione dipolo - dipolo



Molecole in cui si ha una distribuzione asimmetrica delle cariche posseggono un momento di dipolo permanente.

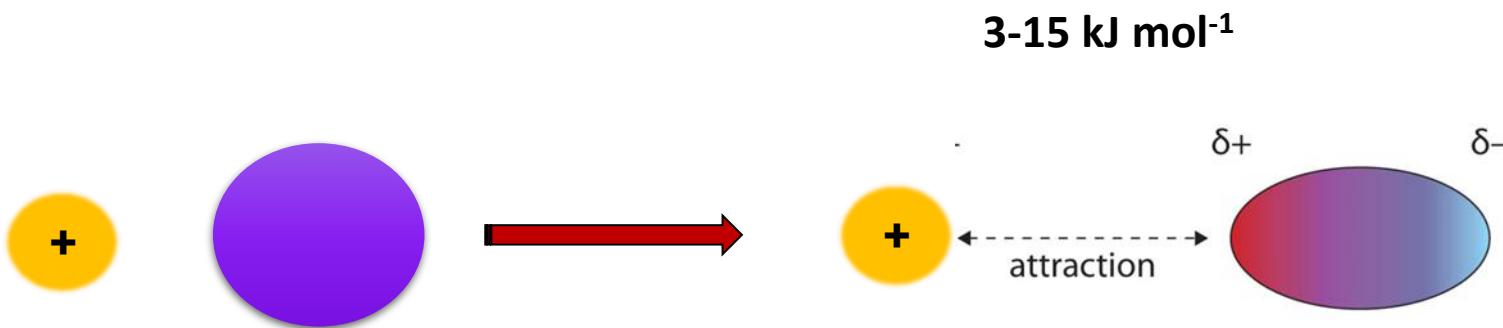
Molecole biatomiche costituite da atomi con notevole differenza di elettronegatività.

$$\text{Momento di dipolo molecolare: } \vec{\mu} = \Delta q \cdot \vec{r}$$

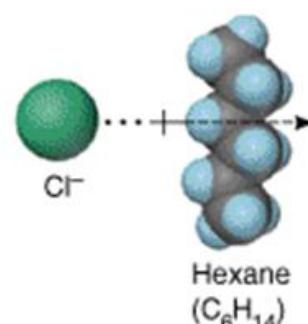
Si instaura tra molecole che possiedono un **momento di dipolo permanente**

- è detta forza di orientazione
- l'energia dell'interazione è piccola (**5-25 kJ mol⁻¹**)
- l'energia dell'interazione aumenta al crescere del momento di dipolo μ

Interazione ione – dipolo indotto

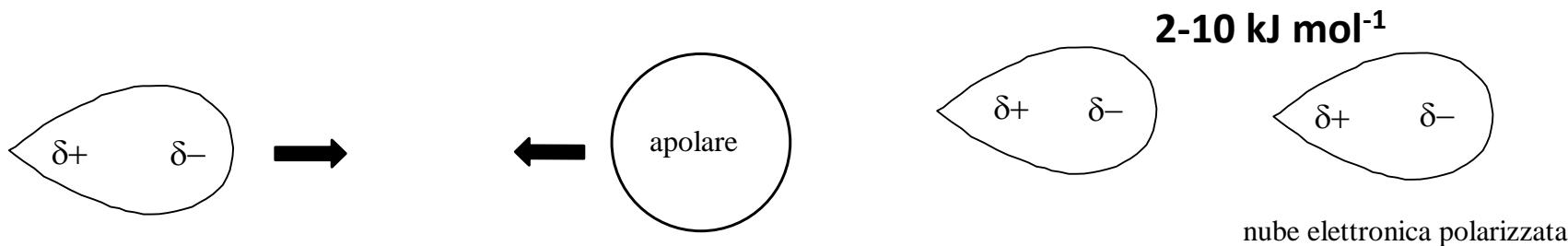


Uno ione induce la formazione di un dipolo non permanente (indotto) in una molecola apolare. L'energia dell'interazione è piccola (**3-15 kJ mol⁻¹**) e spiega ad es. la piccola solubilità dei sali in solventi apolari.



Ion-induced dipole

Interazione dipolo - dipolo indotto ("polarizzabilità")



Si instaura tra una molecola che possiede un momento di dipolo permanente ed una molecola apolare.

E' detta forza di induzione (o di Debye).

L'energia dell'interazione è piccola (**2-10 kJ mol⁻¹**) e spieghala piccola solubilità delle molecole apolari in solventi polari (es. i gas dell'aria in acqua)

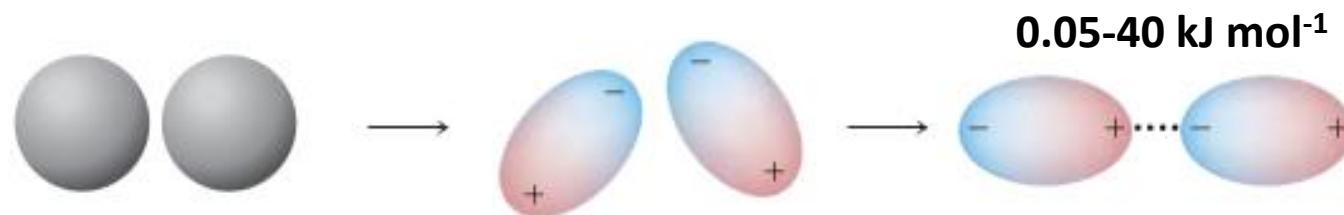
La capacità della nuvola elettronica di un atomo o molecola di essere distorta da un campo elettrico è detta polarizzabilità.

La polarizzabilità aumenta all'aumentare del numero atomico, ovvero all'aumentare della dimensione della nuvola elettronica



Interazione Dipolo istantaneo-dipolo istantaneo

E' detta **forza di dispersione (o di London)**.



Quando due **atomi o molecole apolari** collidono gli **elettroni esterni si respingono**, provocando una **distribuzione asimmetrica delle carica elettronica**: questo provoca la formazione di **dipoli istantanei** che inducono la polarizzazione in molecole adiacenti.

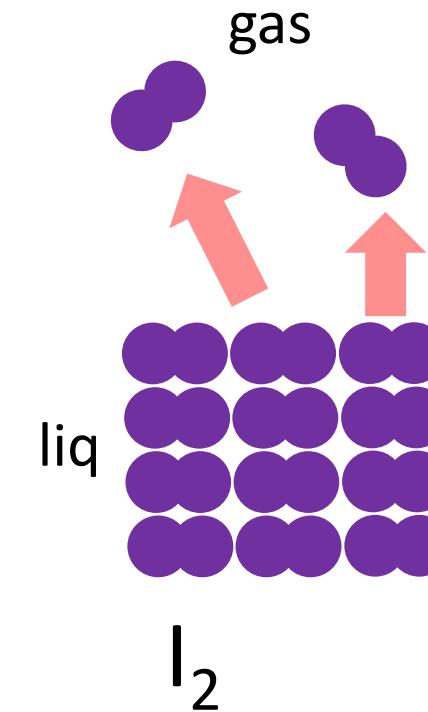
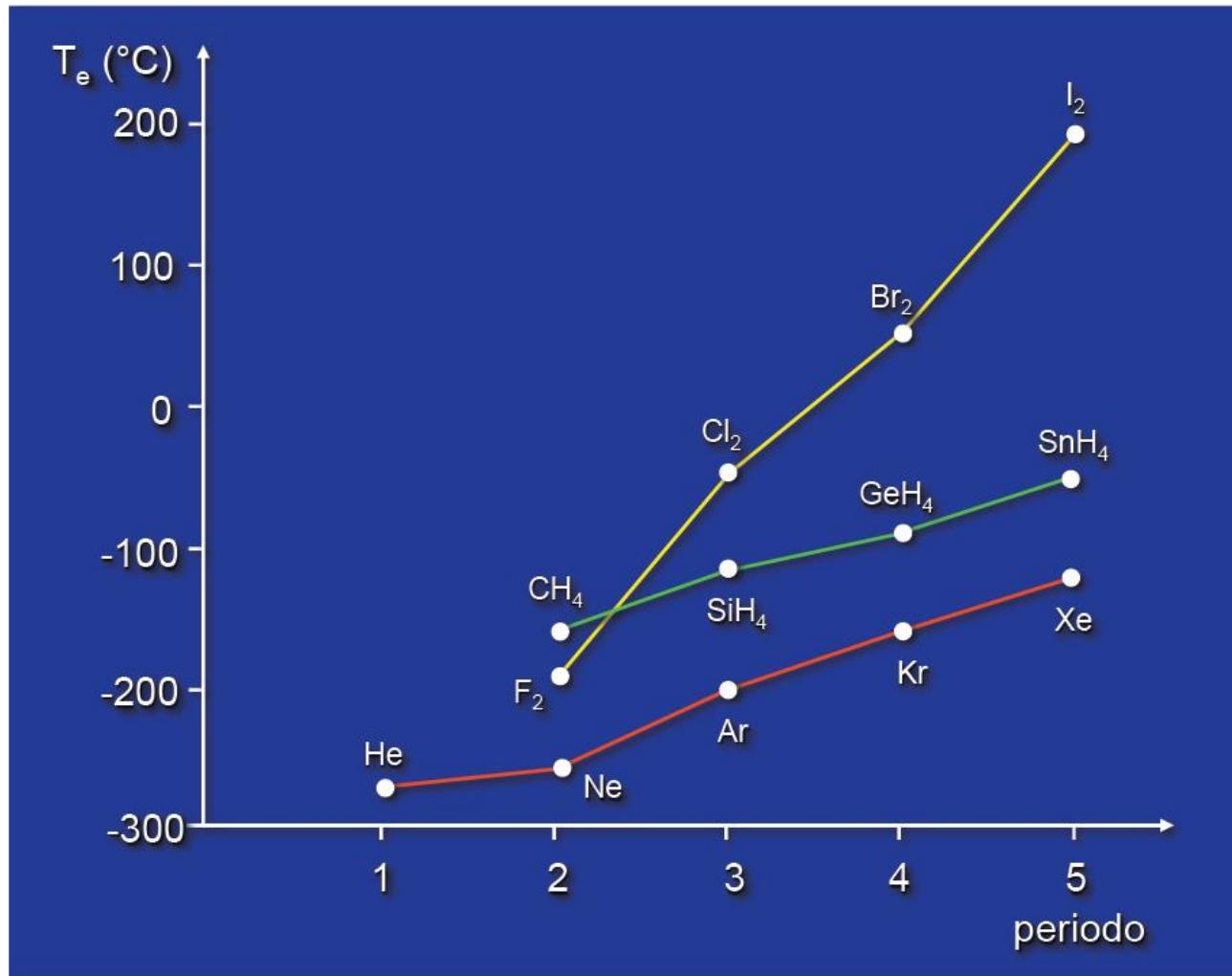
Si instaura tra molecole che non possiedono un momento di dipolo permanente (apolari).

L'energia dell'**interazione è molto piccola ($0.05\text{-}40 \text{ kJ mol}^{-1}$)** e spiega la possibilità per **atomi o molecole apolari di condensare**.

Le forze di dispersione crescono (in genere) all'aumentare della massa e al crescere del numero dei possibili punti di contatto

Dipolo istantaneo-dipolo istantaneo

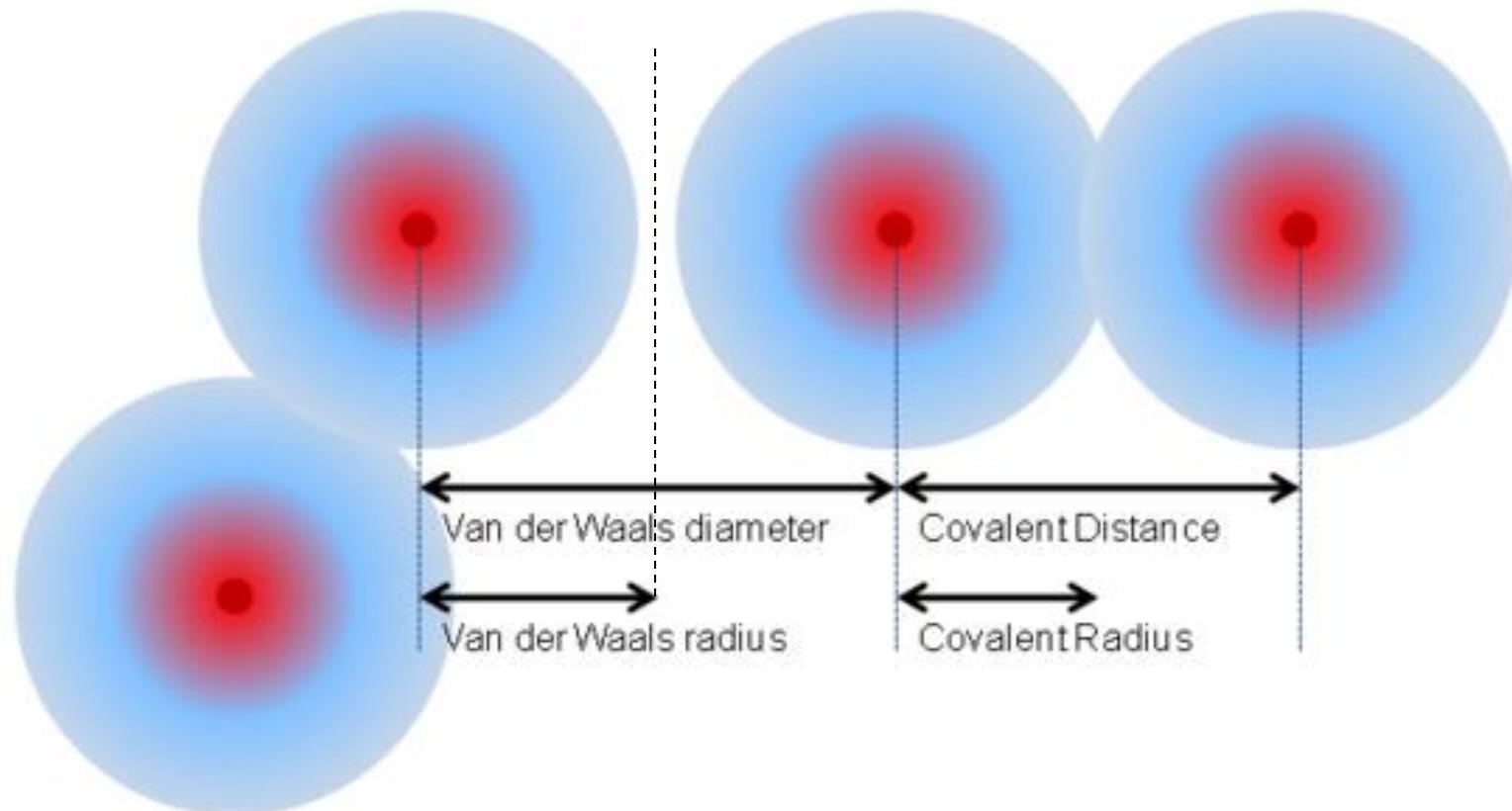
Forze di **dispersione**: influenza sui punti di ebollizione



Raggio di Van der Waals

Distanza minima di avvicinamento tra due atomi
«in assenza di un legame»)

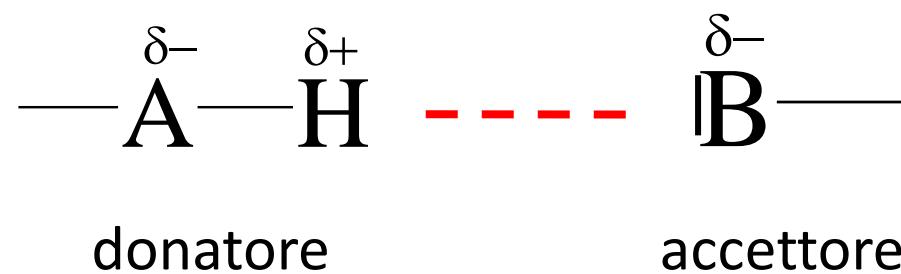
$$r_{\text{vdW}} > r_{\text{covalente}}$$



Legame Idrogeno

Legame di **natura elettrostatica** avente carattere direzionale.

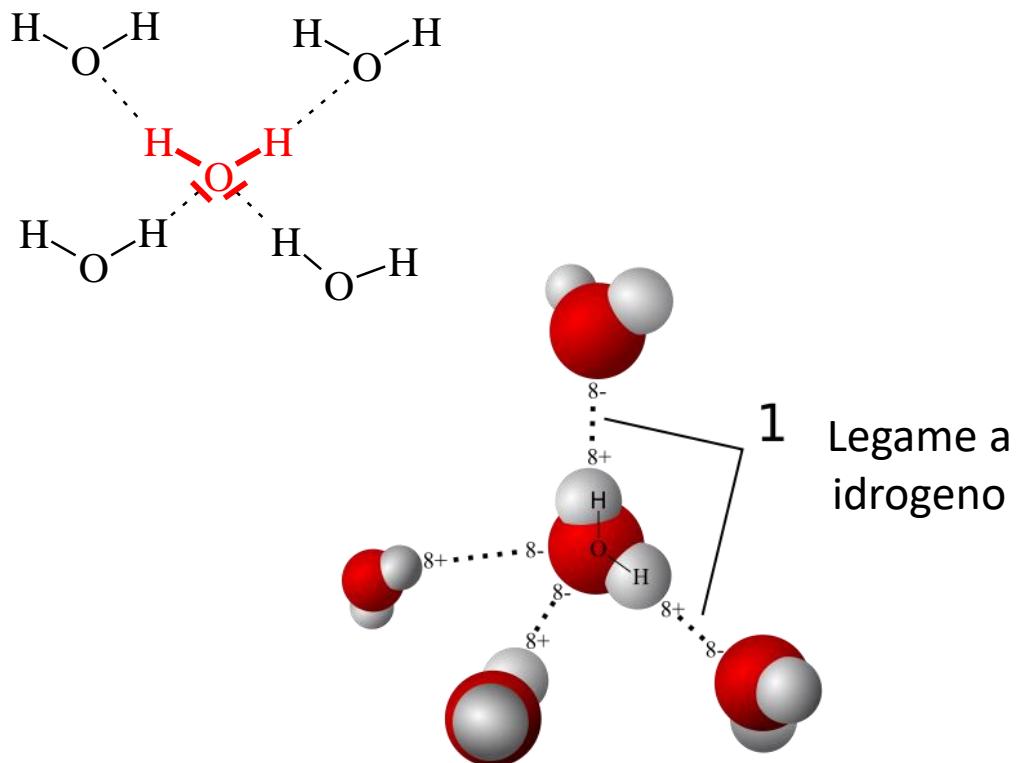
L'atomo di idrogeno, se legato ad un atomo fortemente elettronegativo, può formare un altro legame, più debole e di natura elettrostatica (legame a idrogeno) con un secondo atomo molto elettronegativo avente coppie solitarie.



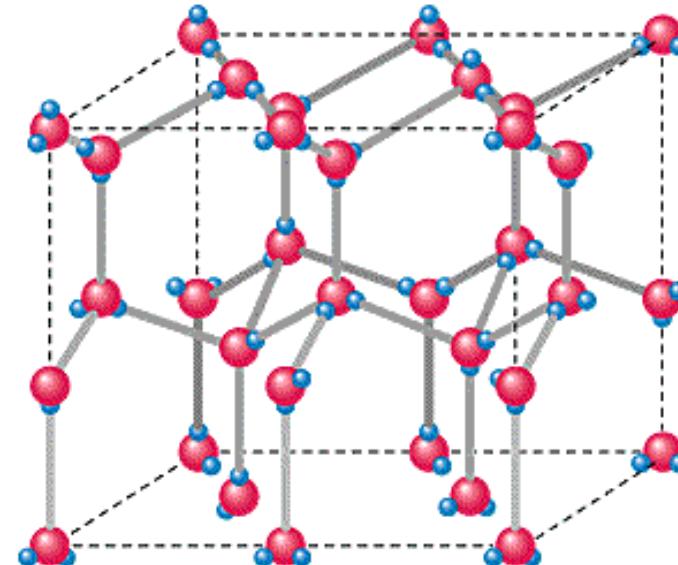
L'energia dell'interazione è piccola (**10-40 kJ mol⁻¹**) ma determinante per definire lo stato di aggregazione

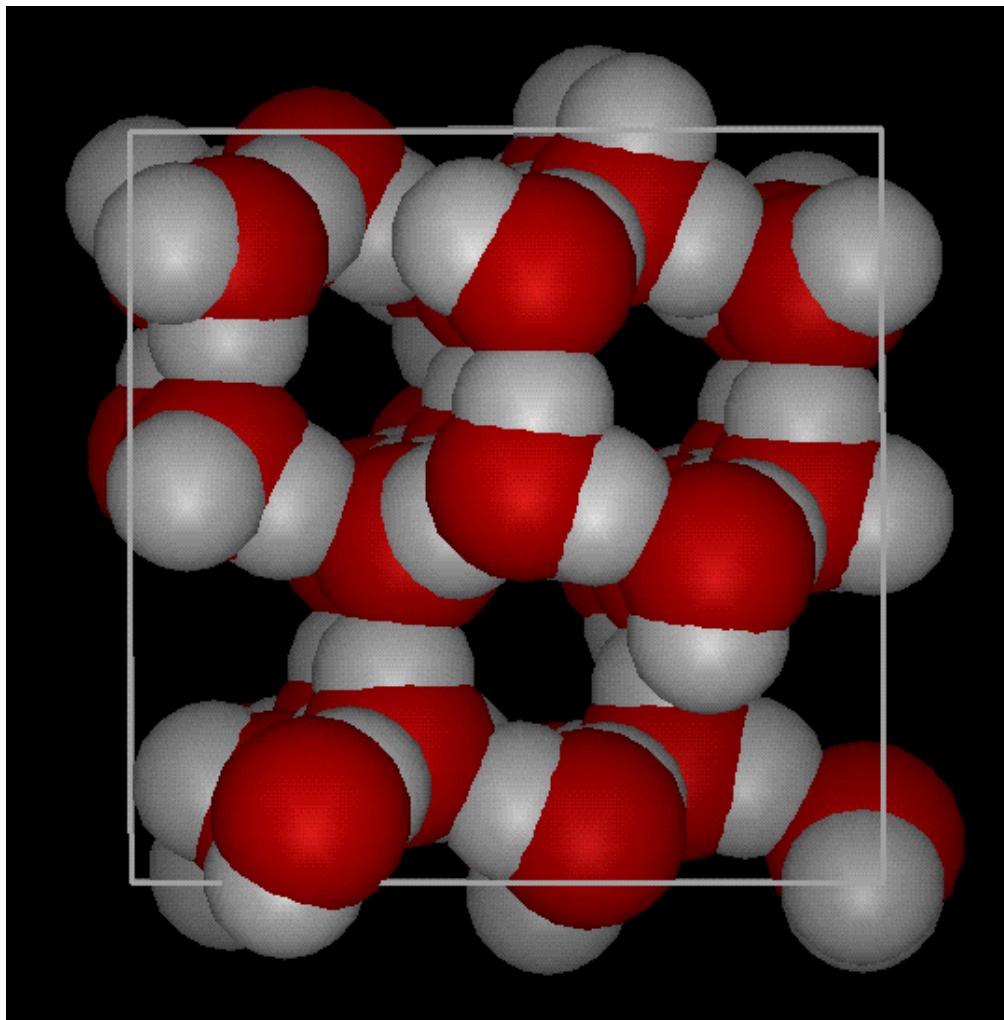
Spiega:

- l'**alta solubilità in acqua** di composti molecolari contenenti O, N, F...
- le **alte temperature di fusione di ebollizione** di H₂O, HF, NH₃
- la struttura delle proteine e degli acidi nucleici

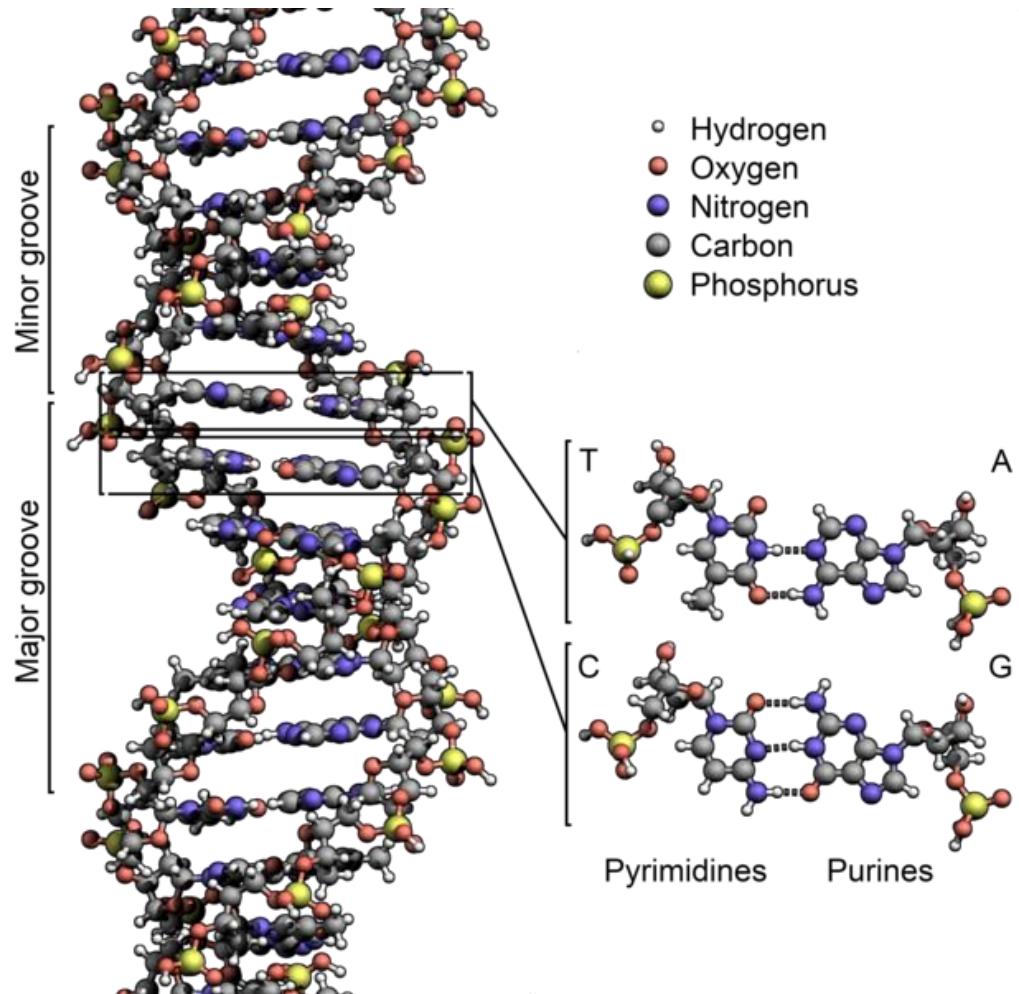
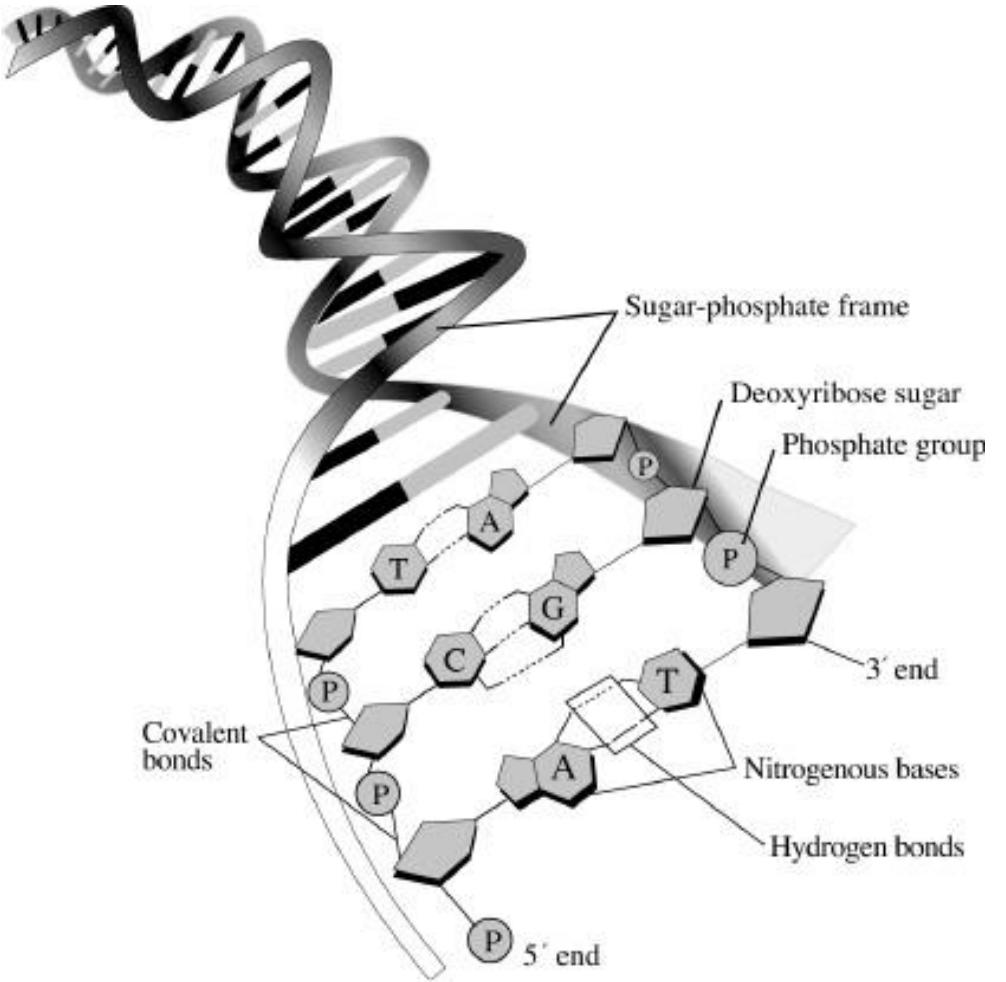


STRUTTURA DEL GHIACCIO





Il ghiaccio è meno denso dell'acqua liquida



L'energia potenziale di

- forze di orientazione (**dipolo - dipolo**)
- forze di induzione (**dipolo - dipolo indotto**)
- forze di dispersione (**dipolo indotto - dipolo indotto**)

varia secondo la relazione:

$$E = - C r^{-6}$$

C = costante dipendente dal tipo di interazione

r = distanza tra i dipoli

Il legame chimico

- Legame Covalente
 - Curva di Morse
 - Strutture di Lewis
 - Elettronegatività
- Legame Ionico
 - Proprietà dei composti ionici
- Geometrie VSEPR
- Teorie del legame
 - Modello VB
 - Modello MO
- Legame Metallico
- Interazioni deboli (Legame a Idrogeno)

