

$$O.l. = \frac{1}{2}(10-6) = 2$$

• N  $z=7$

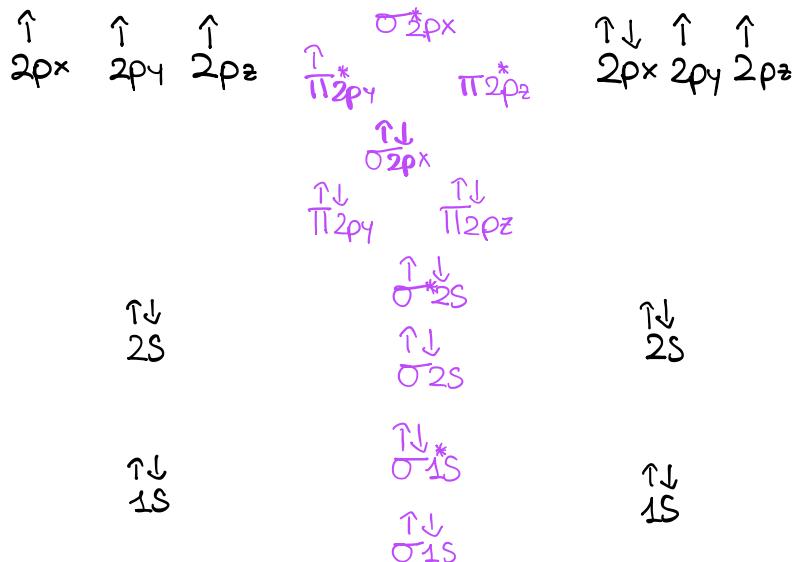
NO! OK!

15 elettroni  
da sistemare

O  $z=8$

BIAZONICA  
MOLECOLA ETTERONUCLEARE

Valori di z molto vicini, contenuto di energia degli orbitali equivalenti (ci permette la combinazione lineare degli orbitali).



$$O.l. = \frac{1}{2}(10-5) = 2,5$$

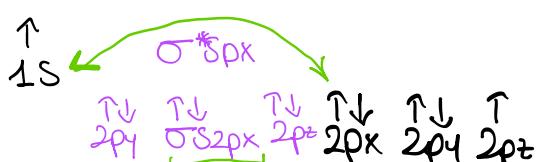
• H  $z=1$

HF

F  $z=9$

Qui abbiamo valori di z molto diversi.  
Molecola che esiste ma questa teoria non funziona.

10 elettroni  
da sistemare



unica  
combinazione  
possibile

orbitali  
di  
non  
legame

non è possibile una  
combinazione lineare

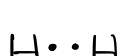
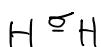


→ livello energetico più  
basso di quello dell'idrogeno

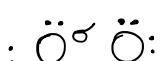
$$O.l = \frac{1}{2}(2 - O) = 1$$

### LEGAME COVALENTE OMEOPOLARE (legame covalente puro):

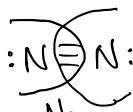
Quando si instaura tra due atomi dello stesso tipo



singolo



doppio



triplo

L'azione attrattiva che i nuclei dei 2 atomi esercitano nei confronti della coppia di legame è la stessa.

La carica elettrica (rappresentata dalla coppia di legame) è perfettamente condivisa fra i due atomi, fa sì che la molecola risultante sia una molecola APOLARE (fatta da due atomi uguali i cui nuclei esercitano la stessa forza attrattiva, non c'è alcuna forza maggiore da parte di un atomo)

L'unico legame covalente puro è quello basato sulla condivisione di elettroni.

Quando il legame è singolo si dice legame di tipo sigma perché si forma dalla sovrapposizione degli orbitali atomici che avviene lungo l'asse congiungente i due nuclei questo porta alla massima sovrapposizione e quindi alla massima forza di legame.

Legami doppi e tripli sono detti pigreco perchè si formano per una sovrapposizione che avviene all'esterno, il legame è più debole quindi la forza del legame è minore.

### LEGAME COVALENTE ETEROPOLARE (legame covalente misto):

Si instaura tra due atomi di tipo diverso

#### ACIDO CLORIDICO



↪ così hanno una configurazione + stabile

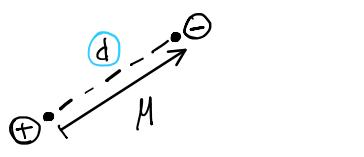
↓  
"DIPOLO ELETTRICO" → momento di dipolo

$$M = q d$$

carica elettrica  
distanza

$$M_{HCl} = 1.e1d$$

carica elettrone (non uniformemente  
frizzionabile)



Essendo i due atomi diversi l'azione attrattiva dei nuclei che esercitano verso gli elettroni è diversa.

Uno dei due attira la coppia di legame maggiormente, ovvero il cloro.

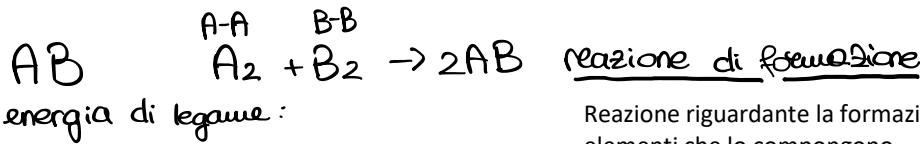
Il cloro ha il nucleo che attira maggiormente la coppia di legame, c'è un parziale spostamento di carica negativa verso il cloro(delta-), sull'idrogeno abbiamo una parziale carica positiva (delta+).

Otteniamo una molecola in cui possiamo individuare un polo positivo e un polo negativo cioè una molecola DIPOLARE, viene paragonata ad un DIPOLO ELETTRICO

Il dipolo elettrico è un sistema costituito da due cariche uguali e di segno opposto situate ad una certa distanza d, ogni dipolo elettrico è caratterizzato da un momento di dipolo.

Prendo una generica molecola:

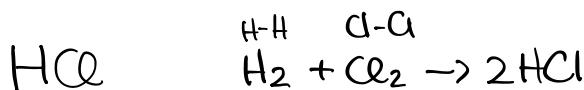
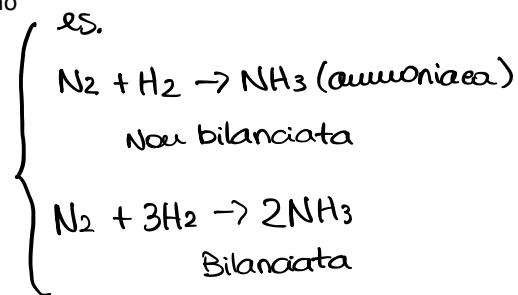




$$E_{AB} = \frac{1}{2} \sqrt{E_{AA} \cdot E_{BB}}$$

Reazione riguardante la formazione di un composto a partire dagli elementi che lo compongono

L'ammoniaca posso ottenerla anche con altre sostanze, ma quelle non sarebbero reazione di formazione.



energia di legame:

$$E_{HCl(\tau)} = \frac{1}{2} \sqrt{E_{HH} \cdot E_{ClCl}} = 325,3 \text{ kJ/mole}$$

$\downarrow$   
Teorico

$$E_{HCl(s)} = 431,8 \text{ kJ/mole}$$

$\downarrow$   
Sperimentale

$$E_{HCl(s)} - E_{HCl(\tau)} = 107 \text{ kJ/mole} \rightarrow \text{SURPLUS} = \Delta$$

Il SURPLUS si deve al fatto che il legame è eteropolare (misto), c'è forza attrattiva diversa sugli elettroni di legame da parte dei due atomi, si crea un polo positivo e uno negativo e quindi tra i due poli si stabilisce un'azione elettrostatica.

Cioè abbiamo una componente atomica basata sulla condivisione di elettroni e una componente elettrostatica basata sull'attrazione tra il polo positivo e il polo negativo.

Componente elettrostatica dipende dall'ELETTRONEGATIVITÀ dei due atomi.

**ELETTRONEGATIVITÀ** (da non confondere con l'affinità elettronica, cioè energia in gioco nel processo di acquisto di un elettrone da parte di un atomo isolato, gassoso, neutro nel suo stato fondamentale): è una misura della tendenza che ha un atomo ad attirare verso di se gli elettroni di legame.

Posso parlare di elettronegatività solo quando ho un atomo legato ad un altro atomo.

Un atomo è più elettronegativo se attira di più verso di se gli elettroni di legame.

Ha un suo andamento nei gruppi e nei periodi: scendendo nel gruppo diminuisce (atomo più grande, il nucleo è più lontano dagli elettroni esterni), muovendosi dai metalli ai non metalli l'elettronegatività aumenta (stesso andamento dell'affinità elettronica)

## $\chi$ ELETTRONEGATIVITÀ

Il fluoro è l'elemento più elettronegativo, poi l'ossigeno e l'azoto : F, O, N

Come sono stati calcolati questi valori di elettronegatività?

→ Metodo Pauling

$$\text{Atomo A} \Rightarrow |\chi_A - 2,2| = 0,102 \sqrt{\Delta}$$

→ Metodo Pauling

$$\text{Atomo A} \Rightarrow |x_A - 2,2| = 0,102 \sqrt{\Delta}$$

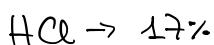
↓  
 elettronegatività  
 idrogeno

Δ  
 ↓  
 surplus

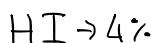
Percentuale di carattere elettrostatico del legame:

$$\frac{\mu_s}{\mu_t} = 100 = \frac{\mu_s}{1q1d} \cdot 100$$

↑ sperimentalmente  
 ↓ teorico ucente



$H F \rightarrow 60\% \rightarrow$  forte componente elettrostatica  
Perché il fluoro è quello più elettronegativo



**LEGAME COVALENTE DATIVO**

Differenza legame covalente eteropolare e legame dativo: sono entrambi misti, ma la differenza è legata al modo in cui il legame dativo si forma perché una volta che si è formato non ho più la possibilità di distinguere un dativo da un covalente eteropolare (sono identici)

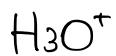
Nel dativo gli atomi hanno un comportamento diverso: l'atomo A avrà un doppietto elettronico mentre l'atomo B mette a disposizione un orbitale vuoto.



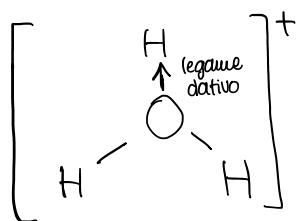
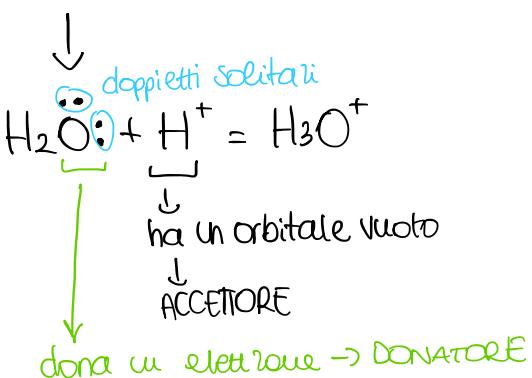
**Legame covalente dativo di tipo INTRAMOLECOLARE**

Cioè presente all'interno di una determinata molecola, è più frequente

ESEMPI LEGAME DATIVO INTRAMOLECOLARE :

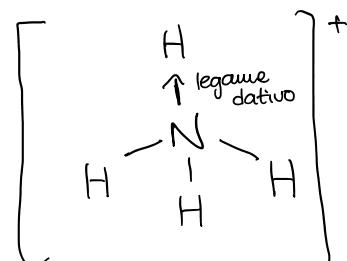
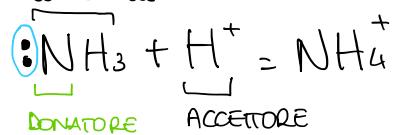


IONE IDRONIO

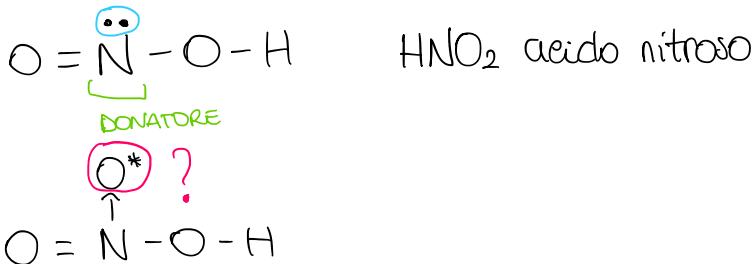


IONE AMMONIO

ammoniaca



- $\text{HNO}_3$  acido nitrico



per avvicinare è necessaria energia

allora si effettua uno spostamento dell'elettrone dal  $2p_z$  al  $2p_y$

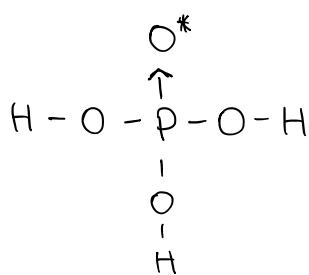
$1s \uparrow \downarrow$     $2s \uparrow \downarrow$     $2p_x \uparrow \downarrow$     $2p_y \uparrow$     $2p_z \uparrow$

→ Nel livello esterno non ha orbitali vuoti, quindi non può fare da accettore

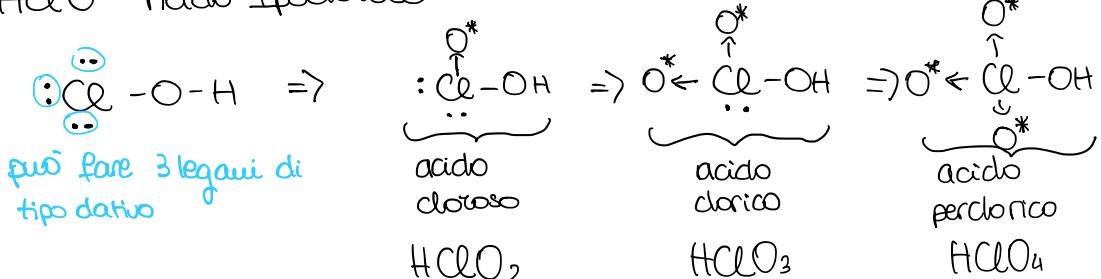
Per compiere lo spostamento di un elettrone da  $2p_z$  a  $2p_y$  è però necessaria energia (bisogna fornire energia), ma questo viene compensato dal fatto che l'atomo di ossigeno può fare il legame dativo, legame molto forte, la cui formazione comporta liberazione di energia.



- $\text{H}_3\text{PO}_4$  Acido fosforico  $\cdot \ddot{\text{P}} \cdot$

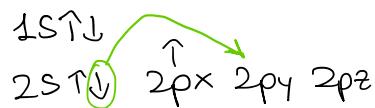
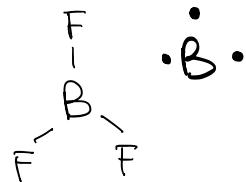


- $\text{HClO}$  Acido Ipercloroso

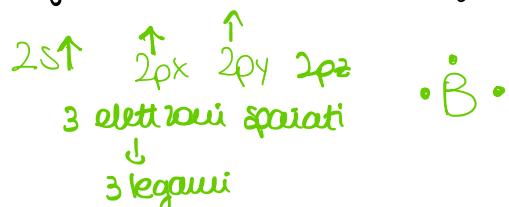


**Legame dativo INTERMOLECOLARE:** cioè che si instaura tra gli atomi di due molecole diverse.

Primo spieghiamo come si forma  $\text{BF}_3$ :



ha un solo elettrone spaiato,  
quindi dovrebbe fare un solo  
legame, ma in  $\text{BF}_3$  fa 3 legami



Si passa da uno stato fondamentale allo stato eccitato in cui ho 3 elettroni spaiati.

È necessaria una spesa energetica per far saltare l'elettrone. Ora si possono formare 3 legami e si libera più energia (si compensa l'energia spesa). Ora ho 2pz che può fare da accettore per il legame dativo.



### LEGAME COVALENTE = LEGAME DIREZIONALE

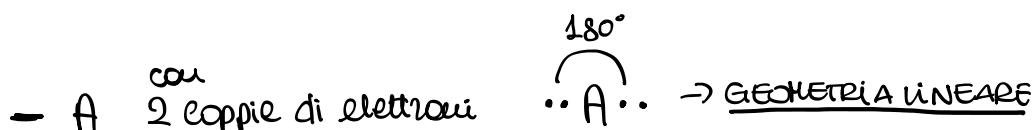
Cioè mentre i legami di tipo elettrostatico si possono formare in tutte le direzioni, il legame covalente si può formare in un'unica direzione.

Quando si forma una molecola, proprio perché i legami tra gli atomi hanno delle direzioni precise, gli atomi che formano la molecola assumeranno nello spazio una posizione precisa, quindi si dice che la molecola ha una sua:

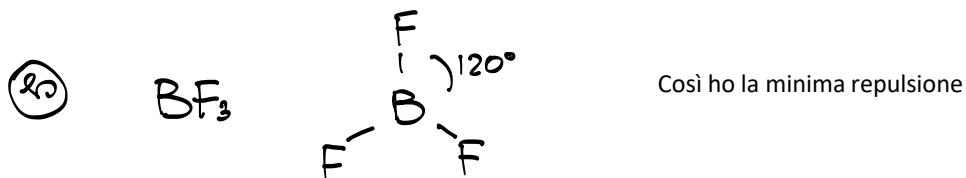
### GEOMETRIA MOLECOLARE :

Specificata disposizione degli atomi nello spazio, dovuta al fatto che i legami sono altamente direzionali.

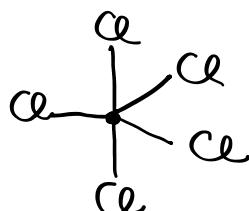
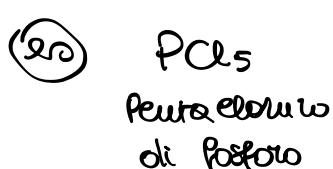
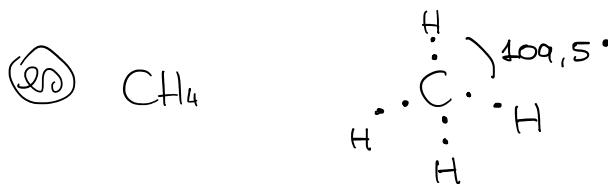
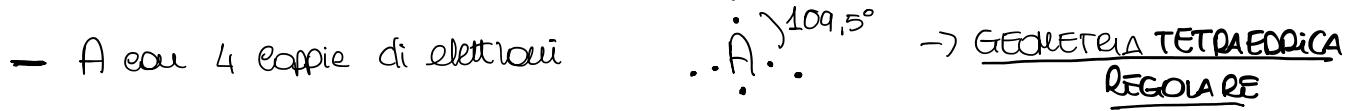
- Teoria VSEPR (valence shell electron pair repulsion) teoria semplice che si basa sul concetto che la disposizione degli atomi (che formano la molecola) dipende dalla repulsione che c'è tra le coppie elettroniche che circondano l'atomo centrale (cioè le coppie elettroniche che circondano l'atomo tendono a disporsi in maniera tale che fra di esse ci sia la minima repulsione possibile, massima stabilità per la molecola).



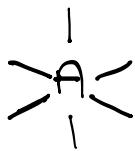
Quando abbiamo due coppie di legame ho la minima repulsione quando sono poste a 180°



Così ho la minima repulsione



- A con 6 coppie di elettroni

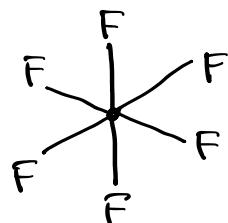


→ GEOMETRIA OTTAEDRICA



SF<sub>6</sub>

Esempio  
di zolfo



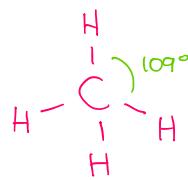
- Teoria dell'Ibridazione

## Lezione 6. 13-10-21

martedì 12 ottobre 2021

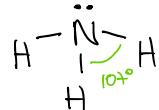
19:03

4 coppie di legame       $\text{CH}_4$



GEOMETRIA TETRAEDRICA  
REGOLARE.

4 coppe } 3 coppe di legame  
  } 1 coppia solitaria



GEOMETRIA PIRAMIDALE  
A BASE TRIANGOLARE

La repulsione tra coppia solitaria e coppia di legame è maggiore rispetto alla repulsione tra due legami, quindi c'è una sorta di compressione per cui l'angolo diventa leggermente più piccolo (107°)

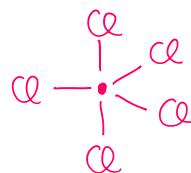
4 coppe } 2 coppe di legame  
  } 2 coppe solitarie



GEOMETRIA ANGOLARE

Qui la repulsione che c'è tra due coppie solitarie è maggiore di quella tra la coppia solitaria e la coppia di legame (che a sua volta è maggiore della repulsione tra due coppie di legame) quindi ho uno schiacciamento ancora maggiore (104°)

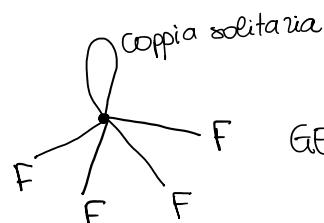
5 coppe di legame



GEOMETRIA BIPIRAMIDALE  
A BASE TRIANGOLARE

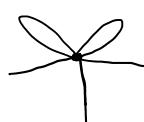
I legami del cloro sul piano orizzontale sono leggermente più deboli di quelli verticali

5 coppe } 4 coppe di legame  
  } 1 coppia solitaria



GEOMETRIA A SELLA

5 coppe } 3 coppe di legame  
  } 2 coppe solitarie



GEOMETRIA A T

5 coppie { 2 coppie di legame  
3 coppie solitarie



GEOMETRIA LINEARE

4 coppie in 2 legami doppi

O = C = O

GEOMETRIA  
LINEARE

### TEORIA DELL'IBRIDAZIONE

La teoria VSEPR mi spiega la geometria di una molecola senza tenere conto dell'energia di legame, la teoria dell'ibridazione la spiega

cloruro di Berillio

BeCl<sub>2</sub>

Be       $\tau = 4$

Il berillio non ha elettroni spaiati nel suo stato fondamentale, quindi non può formare legami, ma se subisce un processo di eccitazione uno dei due elettroni salta nel 2px e così ottiene due elettroni spaiati, ora può formare due legami con il cloro (l'eccitazione costa una spesa energetica che però poi viene compensata dai due legami che sono covalenti (forti) e viene liberata più energia di quella spesa).

1S ↑↓      Non ha elettroni → non può formare legami  
2S ↑↓      Spaiati  
2S ↑      2Px (processo di eccitazione) → spesa energetica  
2Px ↑      • B • → può fare due legami  
2Sp

Cl - Be - Cl → geometria lineare

I due legami, uno fatto con il 2s e uno con il 2px, dovrebbero avere diversa energia, invece sperimentalmente si vede che l'energia è identica. La teoria dell'ibridazione riesce a giustificare non solo la geometria ma anche l'energia di legame

### IBRIDAZIONE vuol dire:

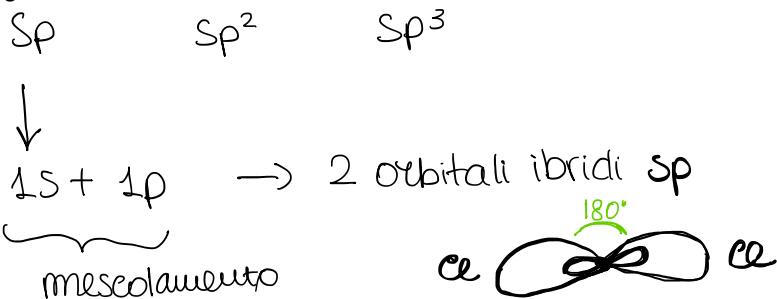
Combinazione lineare di due o più orbitali atomici con lo stesso o simile contenuto di energia, il risultato di questa combinazione sono orbitali ibridi che hanno lo stesso contenuto di energia, cioè sono degeneri.

L'atomo va incontro ad ibridazione perché gli orbitali ibridi consentono all'atomo di formare legami più forti, ovvero hanno una zona con maggiore addensamento di carica che consente una sovrapposizione con l'orbitale dell'altro atomo (con cui si forma il legame) maggiore.

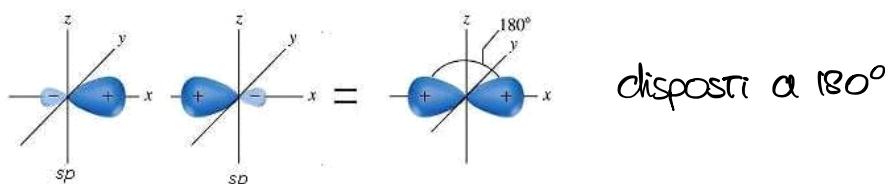
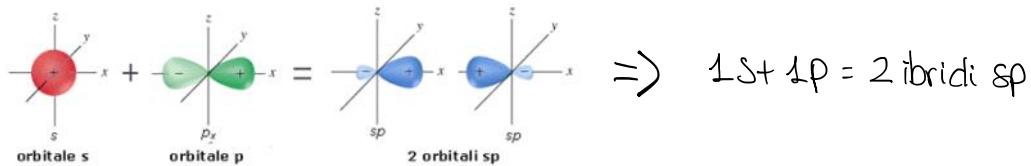
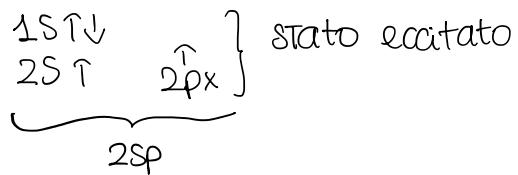
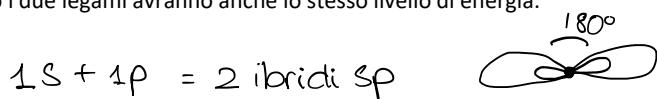


ORBITALE IBRIDO

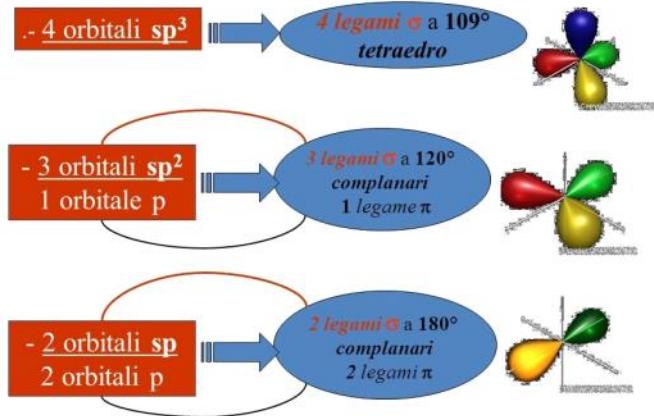
Dalla combinazione lineare di un orbitale s con uno di tipo p si ottengono due orbitali ibridi sp con un angolo di  $180^\circ$



Il cloruro di berillio ha geometria lineare; il berillio forma i legami con il cloro dopo aver subito un'ibridazione di tipo sp, quindi dispone due orbitali ibridi di tipo sp ( $180^\circ$ ) che usa per fare i legami con i due atomi di cloro, quindi si troveranno allineati con il berillio (lineare), usando due orbitali ibridi di tipo sp i due legami avranno anche lo stesso livello di energia.



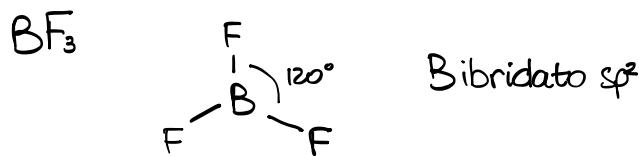
## GEOMETRIA DEGLI ORBITALI IBRIDI



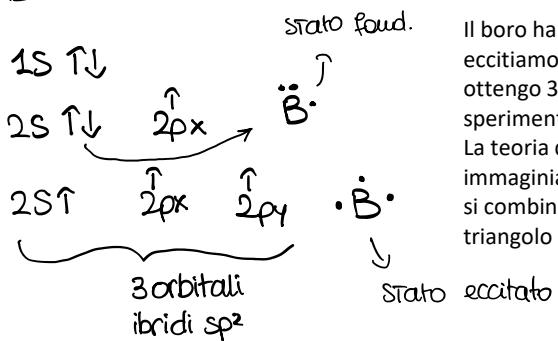
Ibridazione  $sp^2$ :

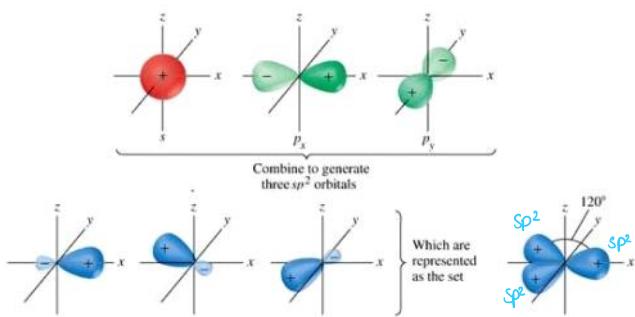
$sp^2$

$$1S + 2P = 3 \text{ orbitali ibridi } sp^2$$



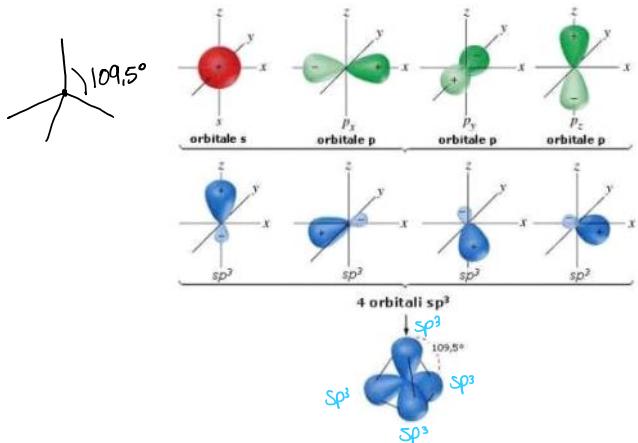
$B \quad Z=5$





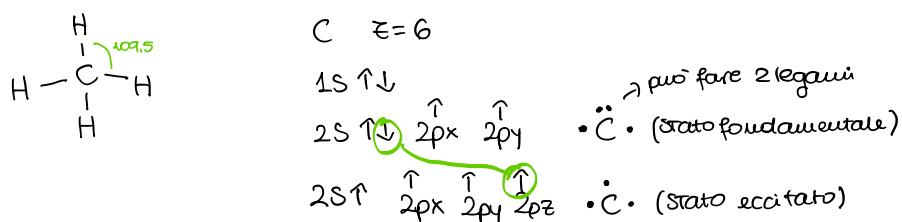
### Ibridazione $sp^3$ :

$sp^3$ ,  $1s + 3p = 4$  orbitali ibridi  $sp^3$



Il carbonio nel metano ha ibridazione  $sp^3$ .

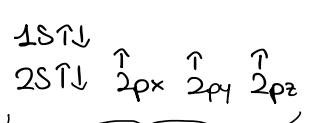
Elemento del 4° gruppo quindi 4 elettroni nel livello più esterno.



Eccitiamo il carbonio così da avere 4 elettroni spaiati (quindi può fare 4 legami), tre legami dovrebbero essere uguali (orbitali p) e uno dovrebbe essere diverso, ma sperimentalmente si vede che i legami sono uguali allora la teoria dell'ibridazione ci dice che dopo l'eccitazione dobbiamo immaginare un processo di ibridazione di tipo  $sp^3$ , quindi abbiamo 4 orbitali ibridi  $sp^3$  che vengono usati per fare i legami con l'idrogeno quindi i legami sono uguali.

NH<sub>3</sub> N ibridato  $sp^3$

N  $\epsilon = 7$



Ci sono già 4 elettroni spaiati (non è necessaria eccitazione).

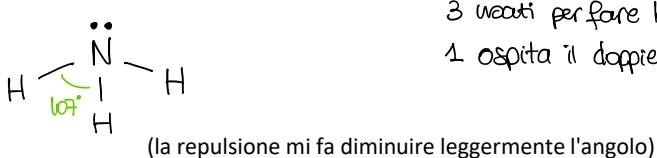
La teoria dell'ibridazione dice che l'atomo di azoto va incontro a un processo di ibridazione di tipo  $sp^3$ .

$sp^3$  (4 orbitali ibridi)

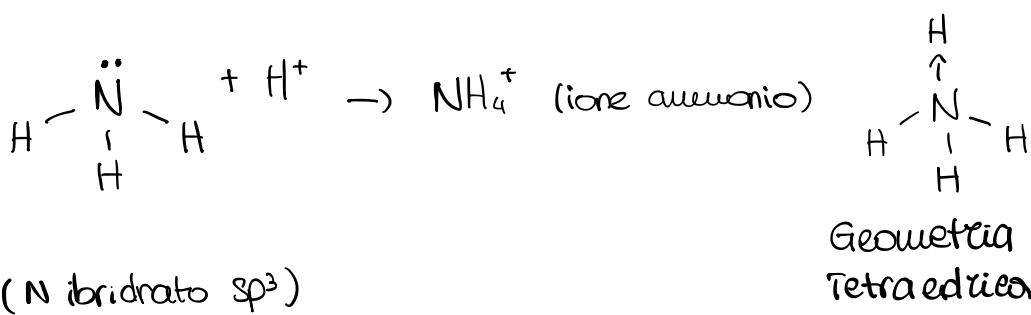
↓

3 usati per fare legami con H

1 ospita il doppietto solitario

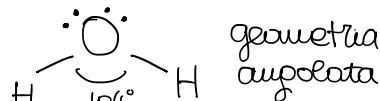
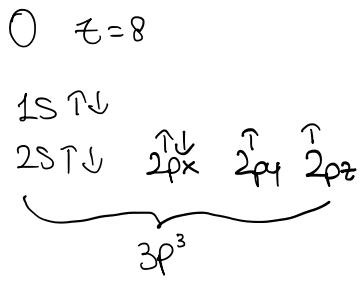
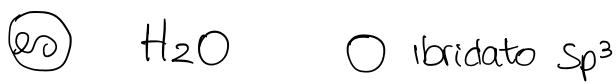


Inoltre l'azoto che ha un doppietto solitario è in grado di formare un legame dativo (fare da donatore):



$\text{NH}_3 \rightarrow$  piramidale a base triangolare

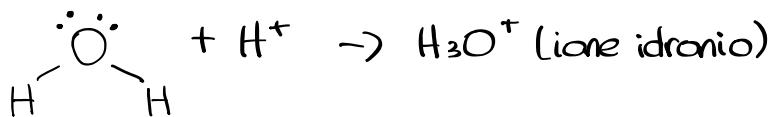
$\text{NH}_4 \rightarrow$  tetraedrico



4 orbitali ibridi  
2 usati per fare legami con H  
2 ospitano doppietti solitari

L'ossigeno ha 2 elettroni spaiati per fare i due legami con l'idrogeno, ma se usasse i due elettroni in questi orbitali p farebbe legami più deboli, quindi avviene un processo di ibridazione si combinano il 2s con il 2px, 2py e 2pz a formare 4 orbitali ibridi  $\text{sp}^3$ , di cui due vengono usati con i legami dell'idrogeno e due per formare i doppietti solitari (la repulsione fa diminuire l'angolo ancora di più).

Inoltre l'ossigeno ha due doppietti solitari, quindi ha la possibilità di fare due legami dativi (può fare da donatore):



$\text{H}_2\text{O} \rightarrow$  angolata

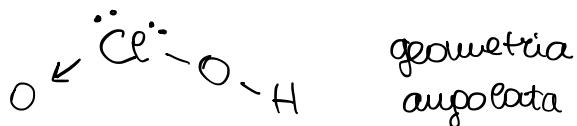
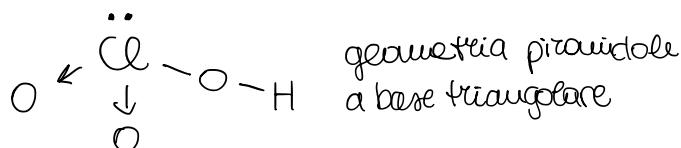
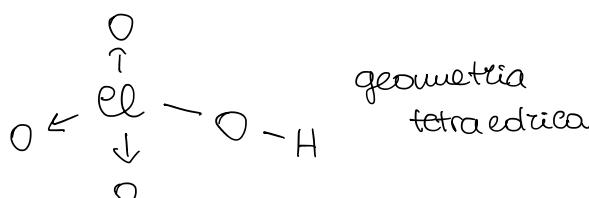
$\text{H}_3\text{O}^+ \rightarrow$  piramidale a base triangolare

(20)



geometria lineare

Qui il cloro ha 3 coppie solitarie, può fare 3 legami dativi e formare i legami sotto.  
La particolarità è che il cloro ha un'ibridazione sp3.

geometria  
a polaregeometria piramidale  
a base triangolaregeometria  
tetraedrica

Ibridazione sp3d:

$$\text{sp}^3\text{d} \quad 1s + 3p + 1d = 5 \text{ orbitali ibridi } \text{sp}^3\text{d}$$

(20)

geometria bipiramidale  
a base triangolare

$$\text{P} \quad Z=15$$

$$1s \uparrow \downarrow$$

$$2s \uparrow \downarrow \quad 2p_x \uparrow \downarrow \quad 2p_y \uparrow \downarrow \quad 2p_z \uparrow \downarrow$$

$$3s \uparrow \downarrow \quad 3p_x \uparrow \quad 3p_y \uparrow \quad 3p_z \uparrow$$

$$3s \uparrow \quad 3p_x \uparrow \quad 3p_y \uparrow \quad 3p_z \uparrow \quad 3d \uparrow$$

 $\text{PCl}_3$  (tricloruro di fosforo)

può fare 3 legami (3 atomi spaiati)

 $\cdot \ddot{\text{P}} \cdot$  (stato fondamentale)

eccitazione

$\uparrow$   
 (stato eccitato)  
 Può saltare al 3d perché in questo atomo il suo contenuto di energia è più basso del 4s, quindi se eccito l'atomo lui salta nel 3d

(20)

 $\text{SF}_4$  S ha ibridazione  $\text{sp}^3\text{d} \rightarrow 5$  orbitali ibridi  $\text{sp}^3\text{d}$ 

per formare i legami con F

$\text{SF}_4$

forma ibridazione  $\text{sp}^3d^2$

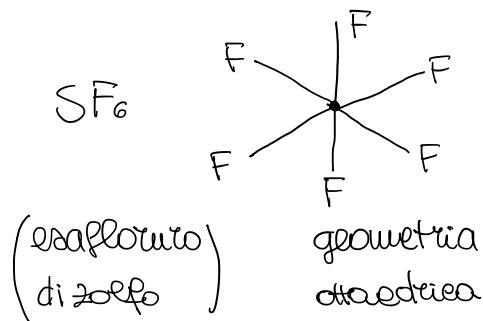


geometria a sella

{  
per formare i legami con F  
ospita il doppietto solitario}

Ibridazione  $\text{sp}^3d^2$ :

$\text{Sp}^3\text{d}^2 \quad 1\text{S} + 3\text{S} + 2\text{d} = 6$  orbitali ibridi  $\text{Sp}^3\text{d}^2$



S  $Z=16$

1S ↑↓

↑↓ 2S    ↑↓ 2p<sub>x</sub>    ↑↓ 2p<sub>y</sub>    ↑↓ 2p<sub>z</sub>

↑↓ 3S    ↑↓ 3p<sub>x</sub>    ↑ 3p<sub>y</sub>    ↑ 3p<sub>z</sub>

↑ 3S ↑↓ 3p<sub>x</sub>    ↑ 3p<sub>y</sub>    ↑ 3p<sub>z</sub>    ↑ 3d

→ ulteriore eccitazione

3S ↑    3p<sub>x</sub>    3p<sub>y</sub>    3p<sub>z</sub>    ↑ 3d

3 orbitali ibridi  $\text{Sp}^3\text{d}^2$

$\text{SF}_4$

$\text{SF}_6$

$\text{SF}_2$  (difluoro di zolfo)

• S • (stato fondamentale)

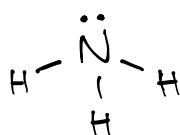
• S • (stato eccitato)

### DOPPIA ECCITAZIONE

(e2)

$\text{NH}_3$

N  $Z=7$



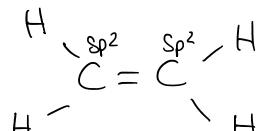
1S ↑↓  
2S ↑↓    ↑ 2p<sub>x</sub>    ↑ 2p<sub>y</sub>    ↑ 2p<sub>z</sub>    • N •

Il carbonio presenta 3 tipi diversi di ibridazione perché forma legami di tipo diverso.  
I legami multipli sottraggono orbitali p all'ibridazione

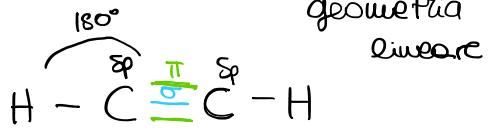
$\text{CH}_4$  metano

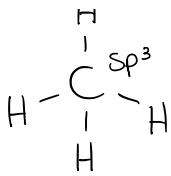


$\text{C}_2\text{H}_4$  etene (etilene)

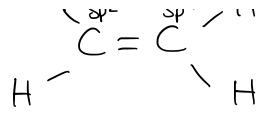


$\text{C}_2\text{H}_2$  etino (acetilene)



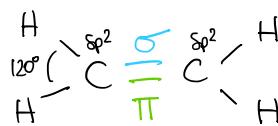


geometria  
tetraedrica



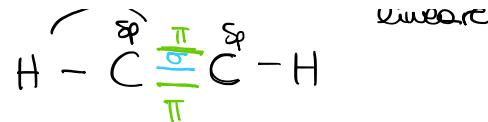
geometria  
planare

Il doppio legame toglie un orbitale p all'ibridazione, ogni carbonio dispone di 3 orbitali ibridi sp<sup>2</sup> die cui ne usa 2 per fare i legami con atomo di idrogeno e 1 per fare il legame sigma con l'altro atomo di carbonio (il legame sigma deriva dalla sovrapposizione degli orbitali ibridi sp<sup>2</sup> dei due atomi di carbonio), poi abbiamo un secondo legame pigreco (che deriva dalla sovrapposizione dagli orbitali p non ibridati dei due atomi di carbonio, ovvero il 2pz non ibridato).



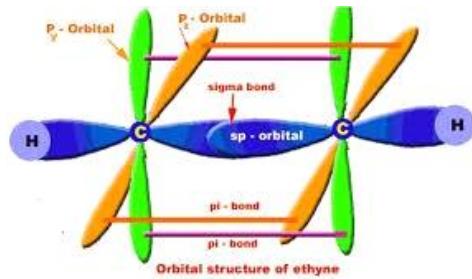
### Etilene

C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>



Qui abbiamo un triplo legame quindi il carbonio è ibridato sp.

Con i due orbitali ibridi ci fa un legame con l'idrogeno e il primo legame sigma con l'altro legame di carbonio. Poi ogni carbonio ha due orbitali p non ibridati e lei usa per fare due legami pigreco con il carbonio.



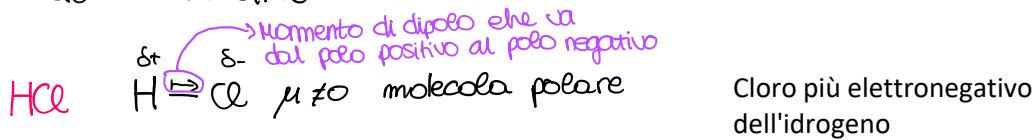
# Lezione 7. 19-10-21

giovedì 14 ottobre 2021 12:58

## GEOMETRIA MOLECOLARE E POLARITÀ'

Conoscere la geometria delle molecole è importante perché nota la geometria sappiamo se è polare oppure no, e quindi capire che tipo di interazioni ci possono essere tra molecole

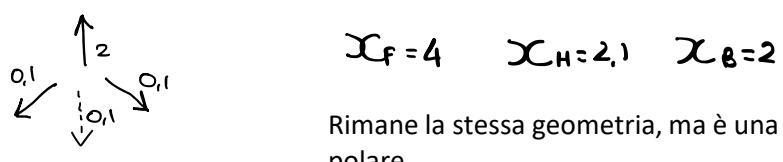
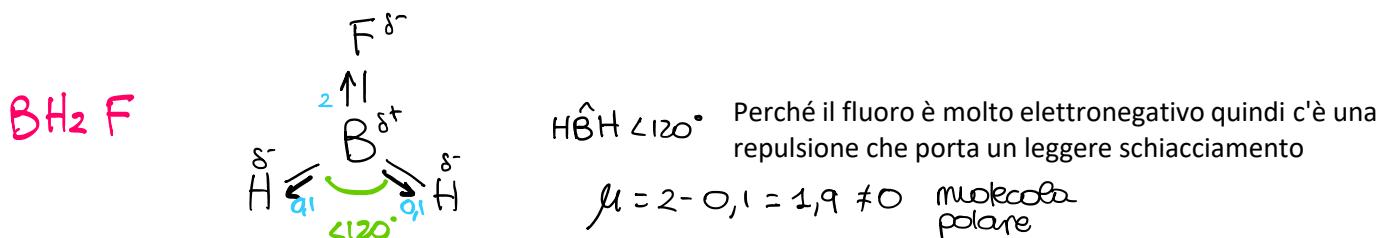
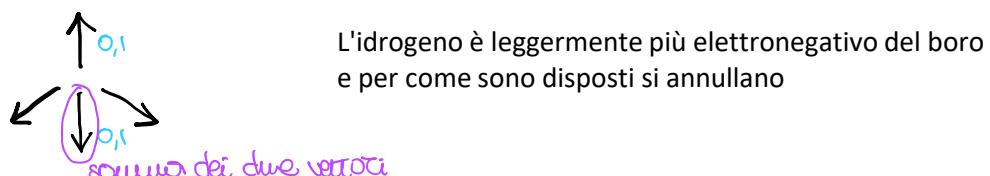
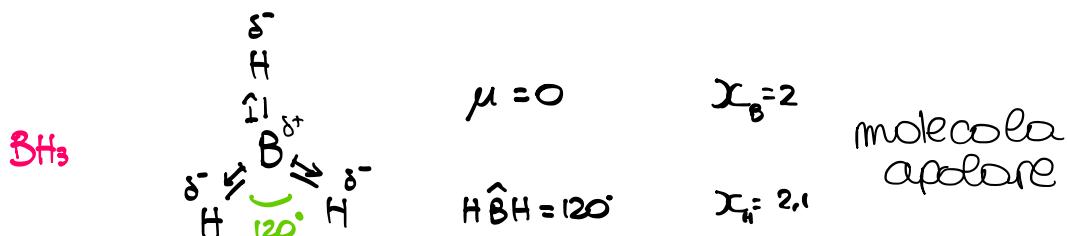
### GEOMETRIA LINEARE

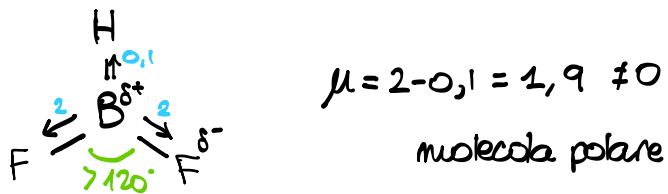


$$X_{\text{Cl}} = 3 \quad X_{\text{Be}} = 1,5$$

Il momento di dipolo è nullo perché ne ho due che sono uguali e opposti

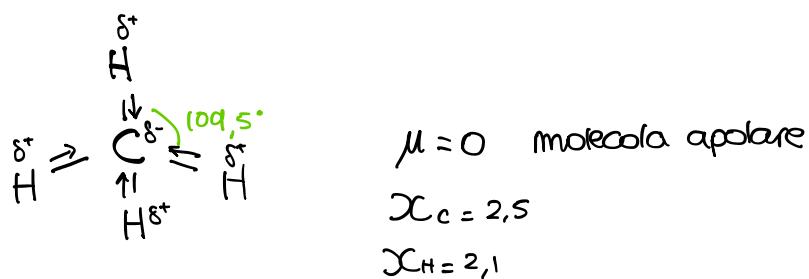
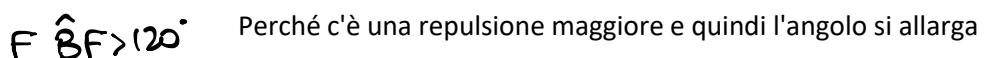
### GEOMETRIA TRIANGOLARE PIANA





$$\mu = 2 - 0,1 = 1,9 \neq 0$$

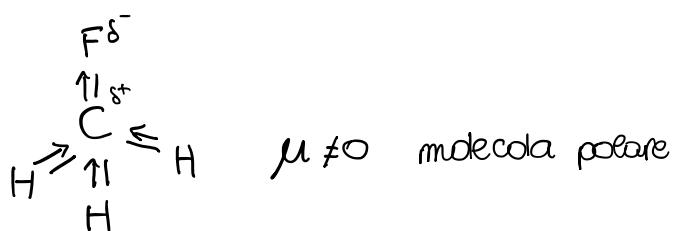
molecola polare



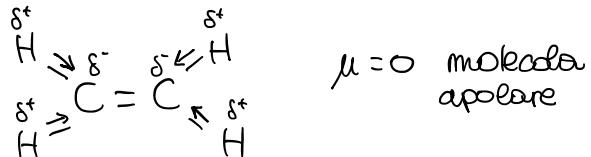
$$\mu = 0 \quad \text{molecola apolare}$$

$$X_C = 2,5$$

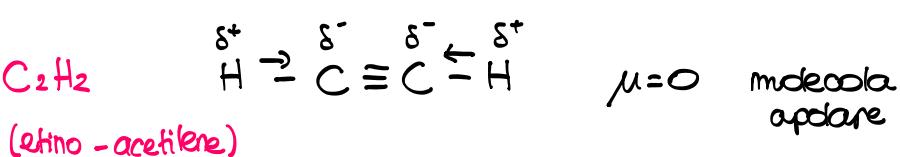
$$X_H = 2,1$$



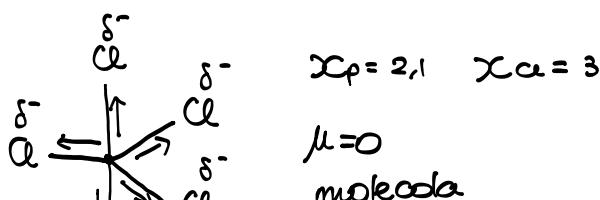
$$\mu \neq 0 \quad \text{molecola polare}$$



$$\mu = 0 \quad \text{molecola apolare}$$



(etino - acetilene)

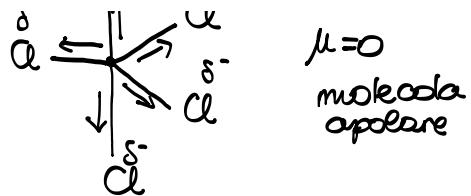


$$X_P = 2,1 \quad X_{\text{Cl}} = 3$$

$$\mu = 0$$

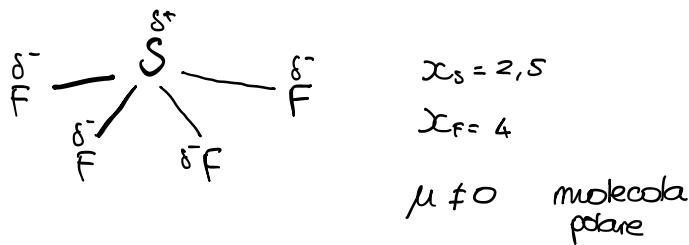
molecola

$\text{PCl}_5$



$\mu = 0$   
molecola  
apolare

$\text{SF}_4$

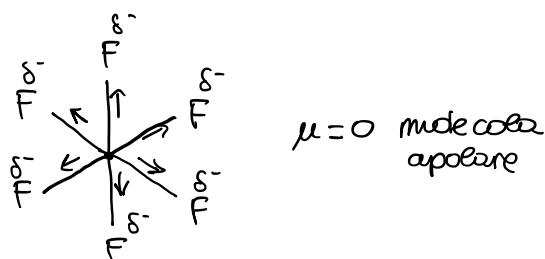


$x_s = 2,5$

$x_F = 4$

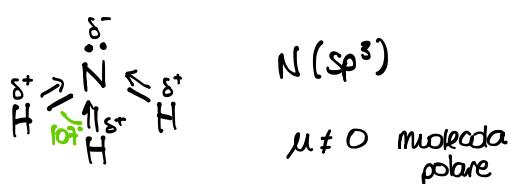
$\mu \neq 0$  molecola  
polare

$\text{SF}_6$



$\mu = 0$  molecola  
apolare

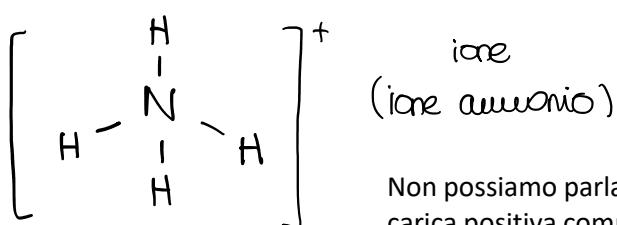
$\text{NH}_3$



$N(\text{sp}^3)$

$\mu \neq 0$  molecola  
polare

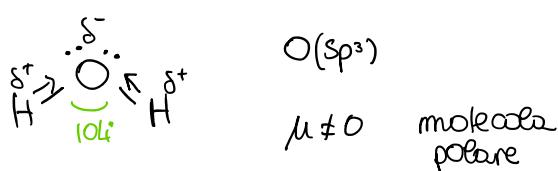
$\text{NH}_4^+$



ione  
(ione ammonio)

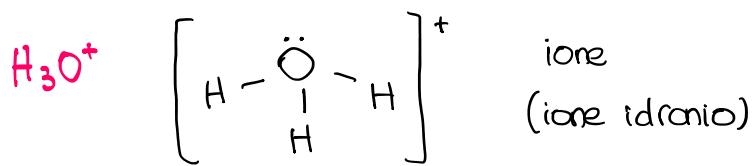
Non possiamo parlare di molecola apolare perché è uno ione cioè ha una carica positiva complessiva

$\text{H}_2\text{O}$



$O(\text{sp}^3)$

$\mu \neq 0$  molecola  
polare



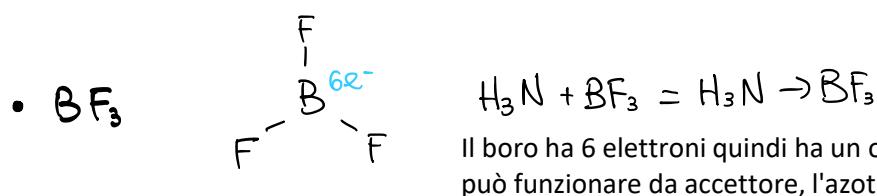
**ECCEZIONI ALLA REGOLA DELL'OTTETTO:** gli atomi cercano di raggiungere l'ottetto per maggiore stabilità ma ci sono tante molecole che sono stabili e che non raggiungono l'ottetto.

- $\text{BeCl}_2$        $\text{Cl}^- - \text{Be} - \text{Cl}$        $\text{BeCl}_2 + 2\text{Cl}^- \rightarrow \text{BeCl}_4^{2-}$

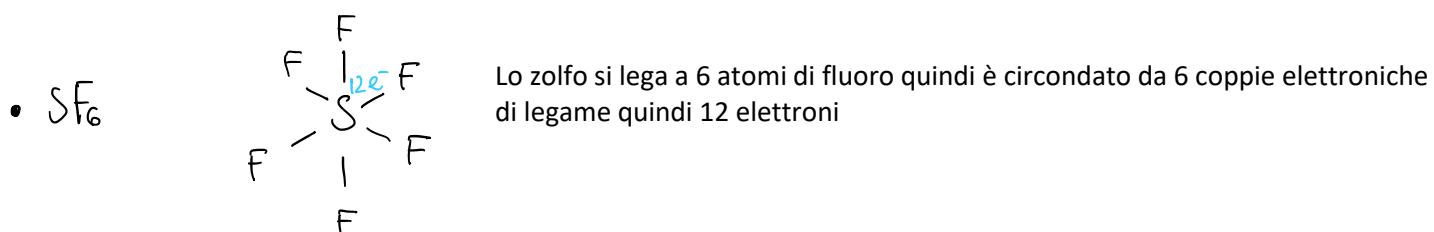
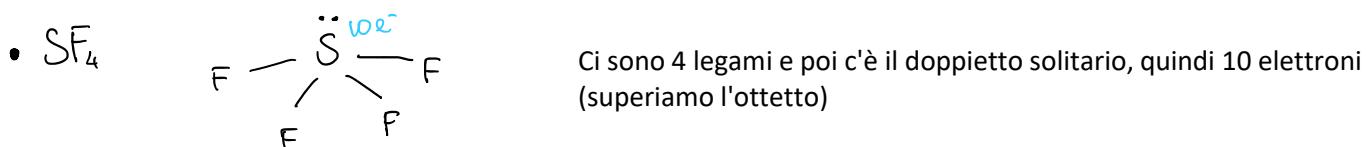
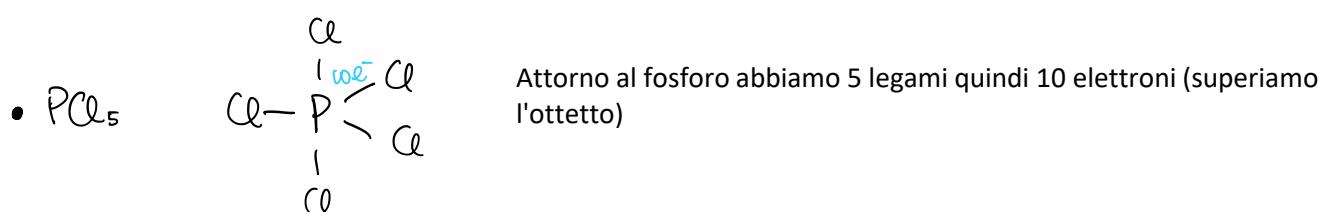
Il berillio è circondato da 4 elettroni ed è stabile. Nel livello più esterno ha due orbitali liberi quindi può fare da eccettore per due legami di tipo dativo.



Infatti se mettiamo due ioni cloruro (ione che ha acquistato un elettrone e che quindi ha l'ottetto) a reagire e formare  $\text{BeCl}_4^{2-}$

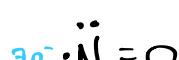


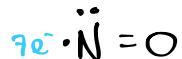
Il boro ha 6 elettroni quindi ha un orbitale vuoto nel livello più esterno quindi può funzionare da accettore, l'azoto può funzionare da donatore



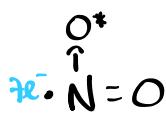
**Radicali liberi:** l'elemento principale è circondato da un numero dispari di elettroni, quindi sono instabili

$\text{NO}$

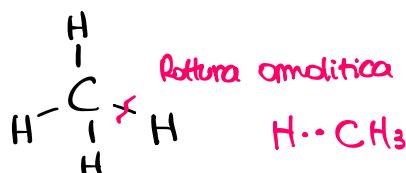
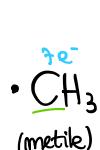




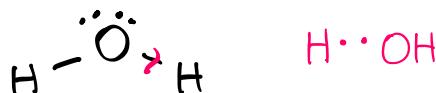
L'azoto usa 2 elettroni spaiati per fare il legame con l'ossigeno, quindi abbiamo 7 elettroni



Qui l'azoto ha fatto un legame di tipo dativo con l'ossigeno



Dei due elettroni della coppia di legame uno resta sul carbonio e uno sull'idrogeno



Si chiamano radicali liberi perché hanno l'elettrone spaiato e sono delle specie altamente instabili, altamente reattive e quindi molto pericolose a livello cellulare perché possono portare a processi cancerogenesi

### LEGAMI DI TIPO ELETROSTATICO

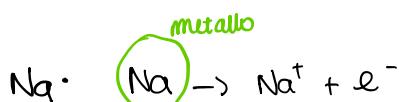
Legami che si basano sull'attrazione elettrostatica tra cariche di segno opposto.

#### Legame ionico:

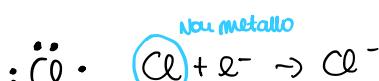
Quando la differenza di elettronegatività tra i due atomi è > 1.7 il legame non viene più considerato covalente ma IONICO, non c'è più condivisione di elettroni ma c'è una specie che perde il suo elettrone spaiato e l'altra specie che l'acquista, quindi l'elemento che lo perde si trasforma in un catione e l'elemento che acquista si trasforma in un anione, tra i due c'è una forte attrazione elettrostatica che li tiene insieme (legame ionico)

#### CLORETO DI SODIO (COMPOSTO IONI)

NaCl è un reticolato fatto da ioni positivi  $\text{Na}^+$  e ioni negativi  $\text{Cl}^-$  che stanno insieme grazie all'azione elettrostatica



Bassa energia di ionizzazione (quindi tende a perdere l'unico elettrone, così da raggiungere una configurazione elettronica più stabile), bassa affinità elettronica (perché il sodio non vuole acquistare un elettrone ma perderlo)



Elevata energia di ionizzazione (tende ad acquistare un



Elevata energia di ionizzazione (tende ad acquistare un elettrone per arrivare all'ottetto), elevata affinità elettronica (si libera tanta energia quando acquista un elettrone)



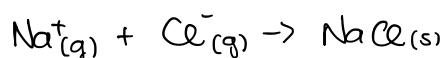
L'energia di ionizzazione (anche quella più bassa, es. sodio) è sempre maggiore anche dei più alti valori di affinità elettronica (es Cl, F), quindi non sarà questa differenza che mi permette di formare il composto ionico, quello che mi permette di formare il composto ionico e ne garantisce la stabilità è L'ENERGIA RETICOLARE:

Energia reticolare è l'energia che si libera quando una mole di ioni  $\text{Na}^+$  allo stato gassoso e una mole di ioni  $\text{Cl}^-$  allo stato gassoso, partendo da distanza infinita si uniscono a formare una mole di  $\text{NaCl}$  solido (una mole di cristallo).

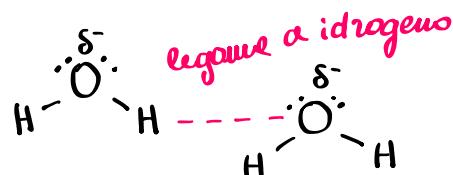
Grazie a quest'energia che si libera che il sistema esiste ed è stabile.

Il fatto che un elemento dia un metallo (con bassa  $E_i$  e bassa affinità elettronica) e un non metallo (con alta  $E_i$  e alta affinità elettronica) è una CONDIZIONE NECESSARIA MA NON SUFFICIENTE.

Non posso calcolare in laboratorio l'energia reticolare che si libera poiché non dispongo di sodio allo stato gassoso, posso fare un calcolo teorico: CICLO DI BORN-HABER



Legame a idrogeno: poiché è l'idrogeno l'unico elemento che può formare questo tipo di legame

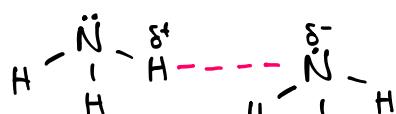


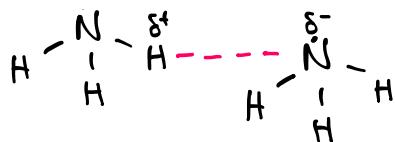
Legame fra un atomo di idrogeno (che deve essere già legato covalentemente ad un elemento fortemente elettronegativo) e un atomo fortemente elettronegativo (F, O, N)

Qui è l'ossigeno l'elemento fortemente elettronegativo, quindi l'idrogeno può legarsi ad un elemento fortemente elettronegativo ovvero l'ossigeno di un'altra molecola di acqua (entrambi gli idrogeni possono formare il legame a ponte di idrogeno).

L'idrogeno è l'unico che può fare questo legame perché è l'unico che ha un solo elettrone, quindi quando si lega ad un elemento fortemente elettronegativo la coppia elettronica si sposta più verso l'ossigeno (ovvero verso l'elemento più elettronegativo), quindi è come se l'unico elettrone che l'idrogeno possiede si allontana da lui e lui diventa una sorta di protone (protonizzazione dell'atomo di idrogeno) quindi ho una carica positiva e questo favorisce la formazione del ponte a idrogeno.

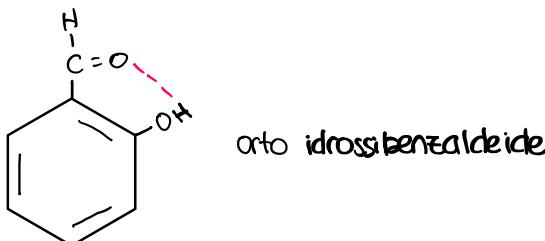
Legame a idrogeno intermolecolare: (cioè tra due molecole)





Il legame a idrogeno tra due molecole di acqua è più forte del legame a idrogeno delle molecole di ammoniaca perché l'ossigeno è leggermente più elettronegativo dell'azoto.

Legame a idrogeno intramolecolare: (cioè all'interno della stessa molecola)

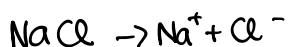


Interazione dipolari (sono forze deboli, quindi non parliamo di legami)

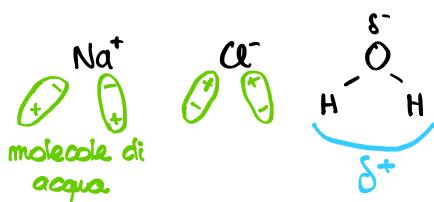
1. Ione-dipolo
  2. Ione -dipolo indotto
  3. Dipolo-dipolo
  4. Dipolo-dipolo indotto
  5. Dipolo istantaneo- dipolo indotto (forze di London)
- } forze di VanderWaals

### 1) IONE-DIPOLO

Immaginiamo di dissolvere cloruro di sodio (sale da cucina) in acqua



I Salì in acqua si dissociano in ioni positivi e negativi che vanno a interagire con molecole di acqua (molecole polari), quindi sono interazione ione-dipolo

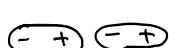


### 2) IONE - DIPOLO INDOTTO



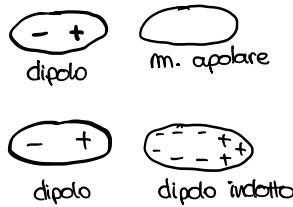
La molecola subisce una polarizzazione cioè ha un addensamento di carica negativa nella parte della molecola più vicina allo ione positivo e viceversa.

### 3) DIPOLO - DIPOLO



Avvengono tra molecole dipolari, quando sono vicine il polo positivo di una è vicino il negativo dell'altra

#### 4) DIPOLO - DIPOLO INDOTTO



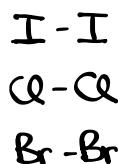
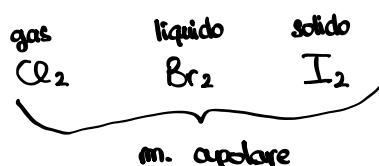
Ho un dipolo vicino ad una molecola apolare, la vicinanza mi provoca una momentanea polarizzazione (momentaneamente perché basta un allontanamento delle molecole per dissolvere il legame)

#### 5) DIPOLO Istantaneo - Dipolo Indotto

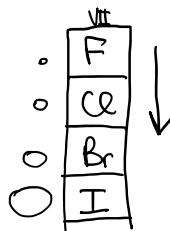


Interazioni che si instaurano tra molecole apolari.

Se una molecola apolare di polarizza momentaneamente (dipolo istantaneo) allora un'altra molecola apolare viene indotta a polarizzarsi.



Le uniche interazioni possibili sono quelle dipolo istantaneo-dipolo indotto (forze di London)



Le forze di London sono più forti nello stato solido e così via, questo perché l'entità di queste forze dipende dalla polarizzabilità delle molecole cioè più facilmente la molecola è polarizzabile più forti sono le forze di London che si instaurano. La polarizzabilità dipende dalla carica negativa cioè dagli elettroni, quindi dalle dimensioni (maggiori dimensioni più elettroni ci sono) se ci sono più elettroni è più facile che ci sia un addensamento di cariche da una parte. Scendendo nel gruppo le dimensioni atomiche aumentano quindi sono più polarizzabili.

#### ESERCIZI

- Quanti g di S ci sono in 31g di  $\text{Na}_2\text{SO}_4$

$$\frac{23 \cdot 2 + 32 + 4 \cdot 16}{142} = 142$$

$$\text{PM}(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 142 \quad \text{PA(S)} = 32$$

passo dai grammi alle moli:

$$\frac{31}{142} = 0,218 \text{ moli} \quad 0,218 \cdot 32 = 6,98 \text{ g S}$$

in una mole di  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  c'è una mole di S

- Calcolare la formula minima (la formula minima mi dice qual è il minimo rapporto tra gli atomi che compongono la molecola) del composto CrxCly costituito per il 43% in peso da cromo e per il 57% in peso da cloro

su 100 gr

$\left\{ \begin{array}{l} 43 \text{ gr Cr} \\ 57 \text{ gr Cl} \end{array} \right.$	$\text{PA(Cr)} = 52$
	$\text{PA(Cl)} = 35,45$

$$\frac{43}{52} = 0,827 \text{ moli Cr}$$

X

$$\frac{57}{83,45} = 1,61 \text{ moli Cl}$$

Y

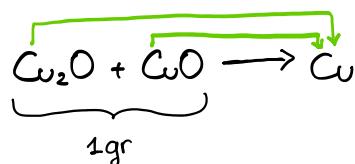
$$\frac{X}{x} = 1$$

$$\frac{1,61}{0,827} = \frac{Y}{x} = 1,94 \approx 2$$

Ho trovato i pedici della formula minima:

Formula minima:  $\text{CrCl}_2$

- Una miscela del peso di 1 gr è costituita da  $\text{Cu}_2\text{O}$  e  $\text{CuO}$  e viene ridotta a 0.839 g di Cu metallico. Determinare la composizione % della miscela



$$\text{PA(Cu)} = 63,55$$

$$\frac{0,839}{63,55} = 0,013 \text{ moli Cu}$$

$$x = \text{peso in gr Cu}_2\text{O}$$

$$y = \text{peso in gr CuO}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x+y=1 \\ \frac{2x}{\text{PM}(\text{Cu}_2\text{O})} + \frac{y}{\text{PM}(\text{CuO})} = 0,013 \end{array} \right.$$

perché ho due mole  
di Cu per ogni mole  
di  $\text{Cu}_2\text{O}$

143      79,5

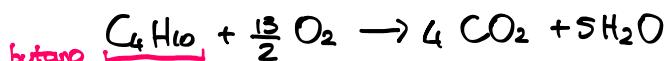
$$x = 0,4 \text{ g}$$

$$y = 0,6 \text{ g}$$

Miscela costituita da:

40%  $\text{Cu}_2\text{O}$  e 60%  $\text{CuO}$

- Data la seguente reazione (combustione butano)



Calcolare quanti gr di O<sub>2</sub> servono per bruciare 5g di butano

Reazione di combustione

↓ prodotti



$$\text{PM}(\text{C}_4\text{H}_{10}) = 58$$

$$\frac{5}{58} = 0,086 \text{ moli C}_4\text{H}_{10}$$

una mole di butano

$$\frac{13}{2} : 1 = X : 0,086 \Rightarrow X = 0,56 \text{ moli O}_2$$

modi di O<sub>2</sub>

$$0,56 \cdot \text{PM(O}_2) = 0,56(32) = 17,9 \text{ gr O}_2$$

- L'energia di legame dello iodio(I<sub>2</sub>) è 152.6 kcal/mole. Calcolare la quantità di energia che serve per rompere il legame fra due atomi di iodio in una molecola di I<sub>2</sub>

$$E = E \cdot \rho \cdot n \cdot 10^{23} - v \cdot 1 \Rightarrow v - n < 10^{-22} \text{ J m}^{-1}$$

che serve per rompere il legame fra due atomi di iodio in una molecola di I<sub>2</sub>

$$152,6 : 6,023 \cdot 10^{23} = x : 1 \Rightarrow x = 2,5 \cdot 10^{-22} \text{ kCal}$$

in una mole ci sono  $6,023 \cdot 10^{23}$  molecole  $\rightarrow$  NUMERO DI ANOGADRO

- Una miscela del peso di 94 gr di CaSO<sub>4</sub> e Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> contiene il 22,7% in peso di zolfo. Determinare la composizione % della miscela

Dati 100 gr di miscela ci sono 22,7 gr di S

$$22,7 : 100 = x : 94 \Rightarrow x = 21,34 \text{ gr (zolfo in 94 gr miscela)}$$

$$\begin{aligned} x &= \text{gr di CaSO}_4 \\ y &= \text{gr di Na}_2\text{SO}_4 \end{aligned} \quad \frac{21,34}{\text{PA(S)}} = \frac{21,34}{32} = 0,665 \text{ moli S}$$

(zolfo totale)

$$\left\{ \begin{array}{l} x + y = 94 \\ \frac{x}{\text{PA(CaSO}_4)} + \frac{y}{\text{PA(Na}_2\text{SO}_4)} = 0,66 \end{array} \right.$$

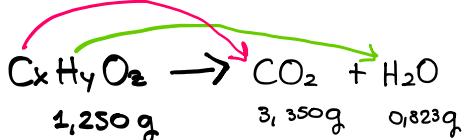
moli di CaSO<sub>4</sub>                          moli di Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

Composizione miscela:

$$10,8 : 94 = x : 100 \Rightarrow x = 11,5\% \text{ Ca}_2\text{SO}_4$$

$$83,2 : 94 = y : 100 \Rightarrow y = 88,5\% \text{ Na}_2\text{SO}_4$$

- Abbiamo 1,250 gr di un composto fatto da C, H, O questa sostanza viene fatta reagire e come prodotti si ottengono 3,350 gr di CO<sub>2</sub> e 0,823 gr di H<sub>2</sub>O. Determinare la composizione %, la formula minima, e la formula molecolare sapendo che PM=164



$$\text{PM(CO}_2) = 12 + 2 \cdot 16 = 44 \quad , \quad \text{PM(H}_2\text{O}) = 2 + 16 = 18$$

$$\frac{3,350}{44} = 0,076 \text{ moli CO}_2 \quad \underline{\underline{0,076 \text{ moli di C}}}$$

$$\frac{0,823}{18} = 0,046 \text{ moli H}_2\text{O} \quad \left| \begin{array}{l} \text{in ogni mole di H}_2\text{O ci sono 2 moli di H} \\ 0,046 \cdot 2 = \underline{\underline{0,092 \text{ moli H}}} \end{array} \right.$$

$$\underbrace{0,076}_{12}(\text{PA(C)}) = 0,076 \cdot 12 = \underline{\underline{0,912 \text{ g C}}}$$

$$0,092 \cdot 1 = \underline{\underline{0,092 \text{ g H}}}$$

$$1,250 - 0,912 - 0,092 = \underline{\underline{0,246 \text{ g Ossigeno}}}$$

$$\frac{0,246}{\text{PA(O)}} = \frac{0,246}{16} = \underline{\underline{0,015 \text{ modi O}}}$$

$$1,250 \text{ g} \left\{ \begin{array}{l} 0,912 \text{ g C} \quad 72,96\% \text{ C} \\ 0,092 \text{ g H} \quad 7,30\% \text{ H} \\ 0,246 \text{ g O} \quad 19,68\% \text{ O} \end{array} \right.$$

$0,912 : 1,250 = x : 100$   
 $x = 72,96\% \text{ e così via}$

Divido per il valore più piccolo cioè 0,015:

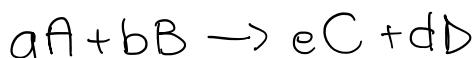
$$\frac{0,076}{0,015} \approx 5 \quad \frac{0,092}{0,015} \approx 6 \quad \frac{0,015}{0,015} = 1 \rightarrow \text{Ho trovato i pedici per la formula minima}$$



$$\text{PH} = (12 \cdot 5) + 6 + 16 = 82 \quad (\text{se F.m. fosse anche quella molecolare})$$

164, dai dati  
 $\frac{164}{82} = 2 \rightarrow$  raddoppio tutto  $\rightarrow \text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_2$  formula molecolare

### REAGENTE LIMITANTE:



$$n_A = \text{moli di A} \quad \frac{n_A}{a}$$

$$n_B = \text{moli di B} \quad \frac{n_B}{b}$$

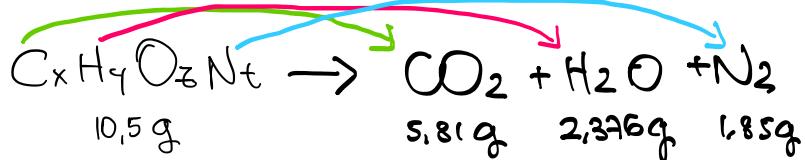
- se  $\frac{n_A}{a} = \frac{n_B}{b} \Rightarrow$  non c'è reagente limitante
- se  $\frac{n_A}{a} < \frac{n_B}{b} \Rightarrow A \text{ è R.l.}$
- se  $\frac{n_A}{a} > \frac{n_B}{b} \Rightarrow B \text{ è R.l.}$

# Lezione 8. 19-10-21

martedì 19 ottobre 2021 19:34

## ESERCIZIO

- Un composto fatto da C, H, N, O con  $P_m=228$ , subisce una reazione e si ottengono  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{N}_2$



Determinare la formula minima, la formula molecolare, i grammi di C contenuti in 25 g di composto, i g di N contenuti in 0,10 moli di composto, il numero di molecole contenute in 5g di composto.

$$P_M(\text{CO}_2) = 44$$

$$P_M(\text{H}_2\text{O}) = 18$$

$$P_M(\text{N}_2) = 28$$

$$\frac{5,81}{44} = 0,132 \text{ moli CO}_2 \quad \underline{0,132 \text{ moli C}}$$

$$\frac{2,376}{18} = 0,132 \text{ moli H}_2\text{O} \quad \underline{0,264 \text{ moli H}} \quad (\text{Ho 2 moli di idrogeno})$$

$$\frac{1,85}{28} = 0,066 \text{ moli N}_2 \quad \underline{0,132 \text{ moli N}} \quad (\text{Ho 2 moli di N})$$

$$0,132(12) = 1,584 \text{ g C}$$

$$0,264(1) = 0,264 \text{ g H}$$

$$0,132(14) = 1,848 \text{ g N}$$

Troviamo grammi O:

$$10,05 - 1,584 - 0,264 - 1,848 = 6,355 \text{ g O}$$

$$\frac{6,355}{16} = 0,397 \text{ moli O}$$

dividiamo per il numero di moli più piccolo (0,132):

$$\frac{0,132}{0,132} = 1, \quad \frac{0,264}{0,132} = 2, \quad \frac{0,132}{0,132} = 1, \quad \frac{0,397}{0,132} = 3$$

Abbiamo trovato: pedici

Formula minima  $\Rightarrow \text{CH}_2\text{NO}_3$

se  $F_{\min} = F_{\text{mol}}$ :

$$10,05 : 228 = 0,044 \text{ mol}$$

dai dati  
778 -> ~ 1000 trafilati

$\Rightarrow F_{\text{min}} = F_{\text{mol}}$ :

$$\text{PH} (12 + 2 + 14 + 48) = 76$$

dai dati

$$\frac{228}{76} = 3 \Rightarrow \text{devo triplicare la f. min}$$

Formula molecolare  $\Rightarrow C_3H_6N_3O_4$

$$1,584 : 10,05 = x : 25 \Rightarrow x = 3,94 \text{ (g di C in 25 g di composto)}$$

- Dalla formula molecolare (1 mole) vediamo che ci sono 3 mol di N

$$3:1 = x : 0,10 \Rightarrow x = 0,3 \text{ (moli di N in 0,10 mol di composto)}$$

$$0,3(14) = 4,2 \text{ gN (in 0,10 mol di composto)}$$

Altro modo:

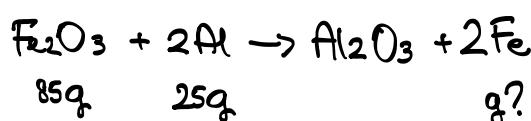
$$\frac{10,05}{228} = 0,044 \text{ mol di composto}$$

$$0,132 : 0,044 = x : 0,10$$

$$\text{PH} = 228 \quad 1 \text{ mole} = 228 \text{ g} \quad \left( \text{in una mole ci sono } 6,023 \cdot 10^{23} \text{ molecole} \right)$$

$$6,023 \cdot 10^{23} : 228 = x : 5 \Rightarrow x = 1,32 \cdot 10^{22} \text{ molecole}$$

- ESERCIZIO:



$$\frac{85}{159,7} = 0,532 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3$$

$$\frac{0,532}{1} = 0,532$$

$$0,463 < 0,532$$