

IL LEGAME CHIMICO

TFA II Ciclo
a.a.2014/2016

Dott. Angela Casu

UN VIDEO INTRODUTTIVO



TEDEd

Lessons Worth
Sharing

Per vedere il
video



[CLICCA
QUI](#)

Sommario

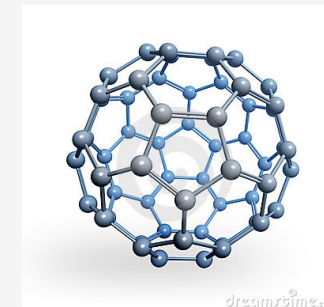
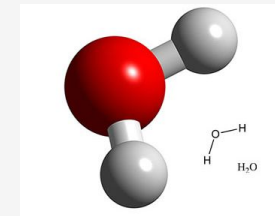
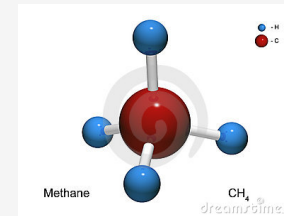
1. Il legame chimico
2. L'elettronegatività
3. Il legame ionico
4. Composti ionici
5. Il legame covalente
6. Composti covalenti
7. Il legame metallico
8. I metalli
9. La geometria delle molecole e la Teoria VSEPR
10. Gli orbitali molecolari: le nuove teorie del legame

IL LEGAME CHIMICO

In natura ad eccezione dei gas nobili, elementi e sostanze esistono come molecole poliatomiche



Devono esistere interazioni tra atomi che portano alla formazione di **aggregati stabili** che risultano energeticamente più stabili degli atomi isolati

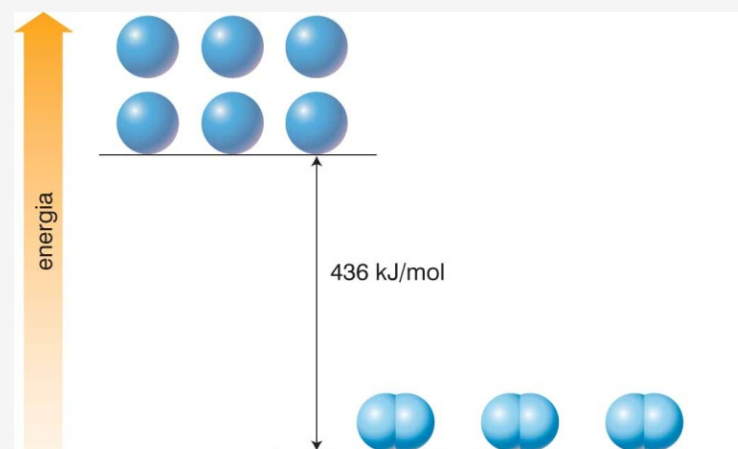


Si ha un **legame chimico** quando una forza di natura elettrostatica tiene uniti più atomi in una specie chimica

Da un punto di vista energetico si parla di **legame chimico** quando il guadagno di energia nella formazione di un aggregato di atomi è pari o superiore a 40 kJ/mol

IL LEGAME CHIMICO ENERGIA DI LEGAME

L'**energia di legame** (kJ/mol) è la quantità di energia che è necessario fornire a una mole di sostanza per rompere il legame fra i suoi atomi, cioè è l'energia che occorre impiegare per separare gli atomi contenuti nella molecola



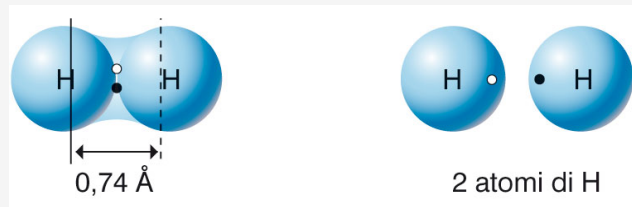
Tanto maggiore è l'energia di legame, tanto più stabile è il composto, tanto più è forte il legame che si è instaurato tra gli atomi

IL LEGAME CHIMICO

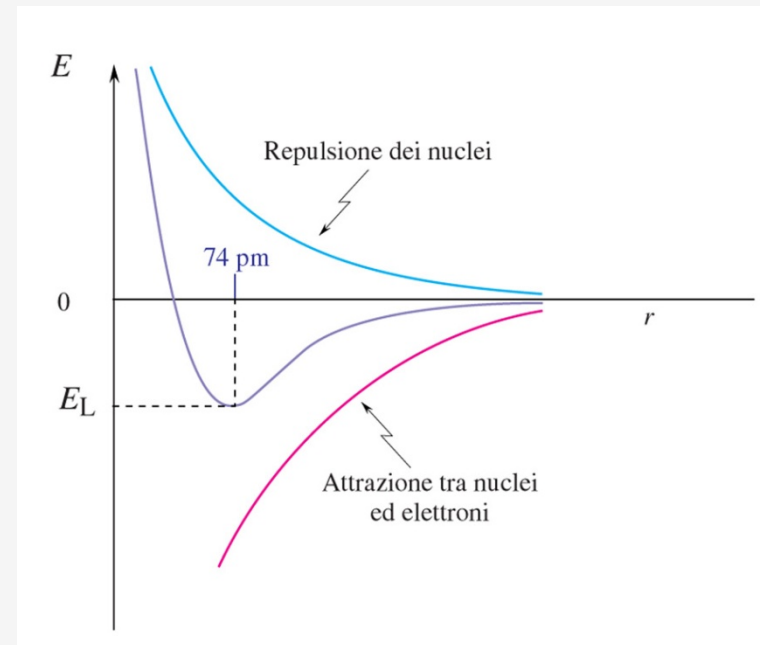
LUNGHEZZA DI LEGAME

La lunghezza di legame

è definita come la distanza media (perché gli atomi sono in perenne vibrazione, ciascuno attorno ad una sua posizione centrale di equilibrio) fra che intercorre tra i nuclei di due atomi uniti da un legame



La lunghezza di legame aumenta all'aumentare delle dimensioni atomiche e al diminuire della forza di legame.



REGOLA DELL'OTTETTO

LEWIS 1927

Un atomo raggiunge il massimo della stabilità acquistando, cedendo o condividendo elettroni con un altro atomo in modo da raggiungere l'**ottetto** nella sua configurazione elettronica esterna, simile a quella del gas nobile nella posizione più vicina nella tavola periodica.

H fa eccezione (due elettroni)

Struttura di Lewis	Configurazione elettronica	Numero di elettroni di valenza
He:	$1s^2$	2
:Ne:	$1s^2 2s^2 2p^6$	8
:Ar:	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	8
:Kr:	$[Ar] 4s^2 3d^{10} 4p^6$	8
:Xe:	$[Kr] 5s^2 4d^{10} 5p^6$	8
:Rn:	$[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$	8

Gli elettroni coinvolti nella formazione del legame sono quelli più esterni

ELETTRONEGATIVITA'

E' una grandezza che esprime la capacità di un atomo che interagisce con un altro ad attrarre verso di sé gli elettroni di legame.



Da non confondere con l'affinità elettronica che è riferita ad un atomo isolato allo stato gassoso ed è una forma di energia

non è una forma di energia e non è una grandezza misurabile sperimentalmente, dipende sia dall'energia di ionizzazione che dall'affinità elettronica.

Esistono diversi modi per esprimerla, la scala più utilizzata è la

Scala di elettronegatività proposta da Linus Pauling (1932)

Andamento dell'elettronegatività nella

Tavola Periodica

- I non-metalli hanno elettronegatività maggiore dei metalli
- Il Fluoro è l'elemento più elettronegativo (4.0) mentre il Francio (0.7) è l'elemento meno elettronegativo

aumenta lungo un periodo da sinistra a destra

	I												III					VIII
1	H 2,1																	He
2	Li 1,0	Be 1,6											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0	Ne
3	Na 0,9	Mg 1,2											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0	Ar
4	K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,9	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8	Kr
5	Rb 0,8	Sr 1,0	Y 1,2	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5	Xe
6	Cs 0,7	Ba 0,9	La 1,0	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,6	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,9	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,1	Rn
7	Fr 0,7	Ra 0,9																

■ elettronegatività alta
■ elettronegatività media
■ elettronegatività bassa

aumenta lungo un gruppo
dal basso verso l'alto

IL LEGAME IONICO

- Il legame ionico è un legame di natura elettrostatica che si forma quando si combinano fra loro gli atomi di elementi aventi, rispettivamente, un basso potenziale di ionizzazione e una affinità elettronica molto negativa.



- Ragionando in termini di Elettronegatività:
il legame ionico si forma quando la differenza di elettronegatività tra due atomi è molto alta e indicativamente maggiore di 1,9.
- L'atomo più elettronegativo diventa uno ione negativo, l'altro uno ione positivo.
- Sono sempre formati da **elementi spiccatamente metallici** (quelli che cedono facilmente un elettrone, elettronegatività piccola) **uniti a elementi spiccatamente non-metallici** (quelli che accettano facilmente un elettrone, elettronegatività elevata).

IL LEGAME IONICO BILANCIO ENERGETICO



Il sale NaCl è una sostanza stabile.

Il bilancio energetico tra potenziale di ionizzazione del sodio e l'affinità elettronica del cloro è positivo e non spiegherebbe la stabilità di NaCl !

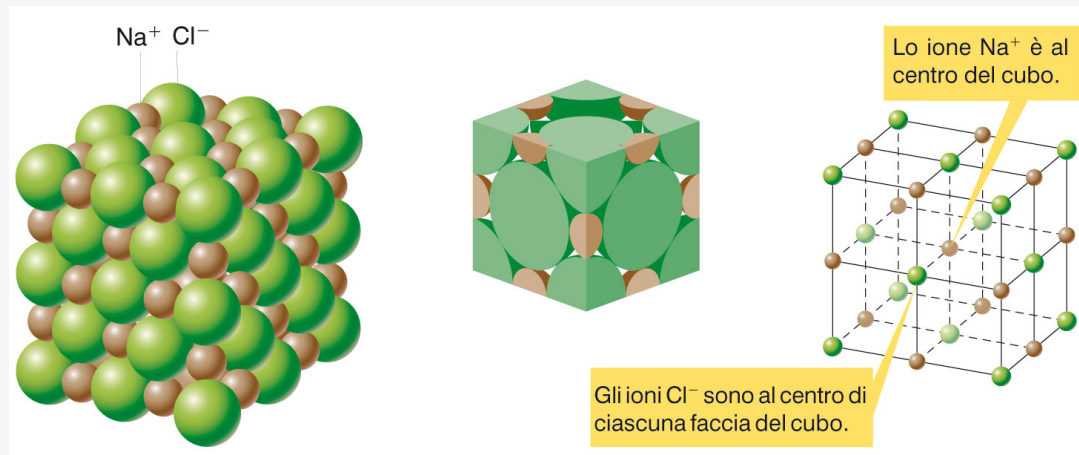
L'energia che si libera durante la formazione del sale, NaCl, è dovuta alla **grande forza di attrazione che agisce tra gli ioni di segno opposto Na⁺ e Cl⁻**

Per formarli a partire da atomi neutri è necessario invece fornire energia

L'aggregazione degli ioni di segno opposto in una struttura ordinata comporta la liberazione di energia

IL LEGAME IONICO STRUTTURA CRISTALLINA

La stabilizzazione elettrostatica tra gli ioni è massima con una distribuzione ordinata tridimensionale



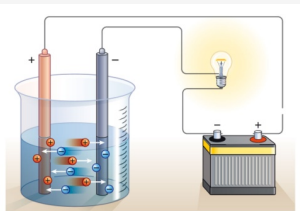
Gli ioni in un composto ionico sono disposti secondo uno schema ben preciso e possono dar luogo a un **reticolo cristallino**.

La **formula dei composti ionici** indica il rapporto di combinazione tra ioni positivi e negativi ma non rappresenta la molecola di un composto perché nei cristalli non si distinguono unità molecolari.

I COMPOSTI IONICI

Presentano alcune **proprietà macroscopiche caratteristiche** relazionabili al tipo di legame ionico e alla presenza di ioni disposti in posizioni ordinate nello spazio

- Sono solidi a temperatura ambiente e nelle normali condizioni di pressione
- Hanno alte temperature di fusione
- Si presentano in forme cristalline regolari e geometricamente ben definite

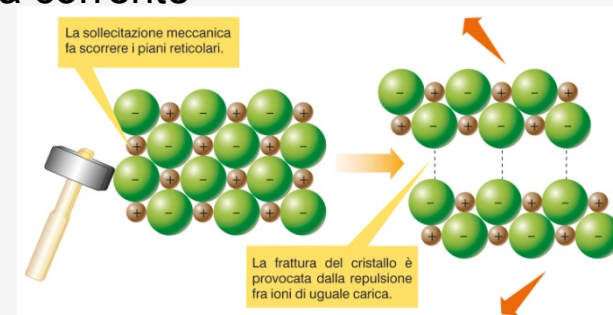


- Conducono la corrente solo allo stato fuso o in soluzione
- In forma solida non conducono la corrente

- Rispondono alle tensioni in modo fragile a volte rompendosi con piani di sfaldamento



- Quasi tutti sono solubili in acqua e in altri solventi polari



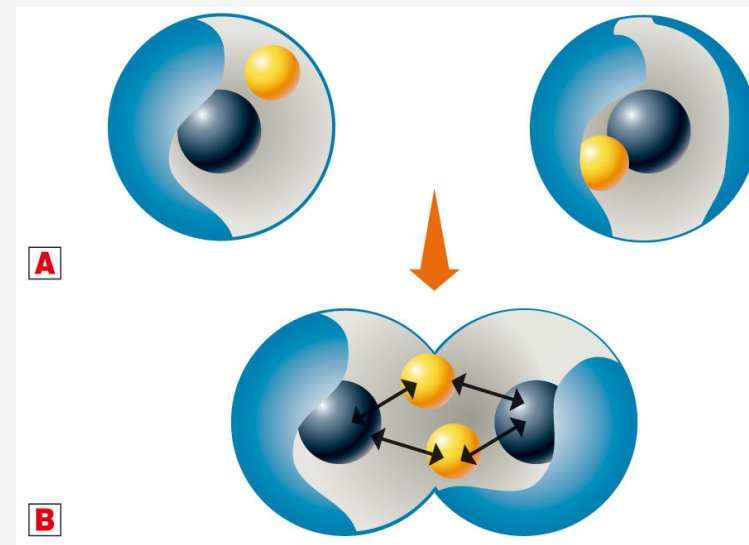
IL LEGAME COVALENTE

I composti in cui sono presenti i legami ionici sono in numero limitato. Nella maggior parte dei composti gli atomi sono legati fra loro in modo da raggiungere una configurazione più stabile (a minor energia) non per cessione e acquisto di un elettrone, ma **per messa a comune (condivisione) di una coppia di elettroni**.

Il **legame covalente** si forma quando due atomi mettono in comune una coppia o più coppie di elettroni.

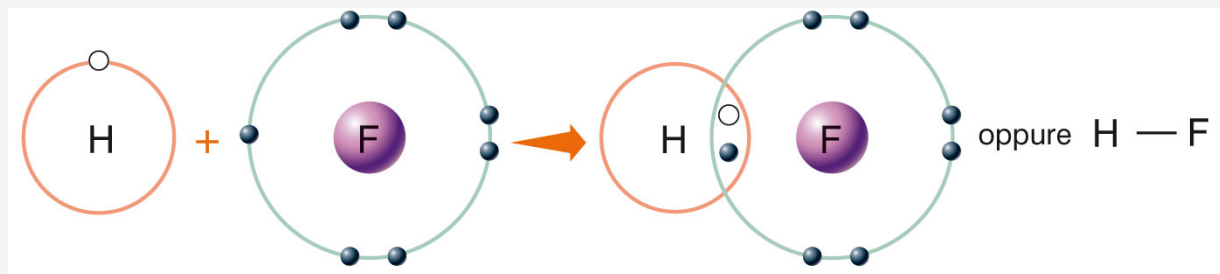
Se i due atomi sono identici il legame è **covalente puro**.

Esempi: H_2 , O_2 , Cl_2

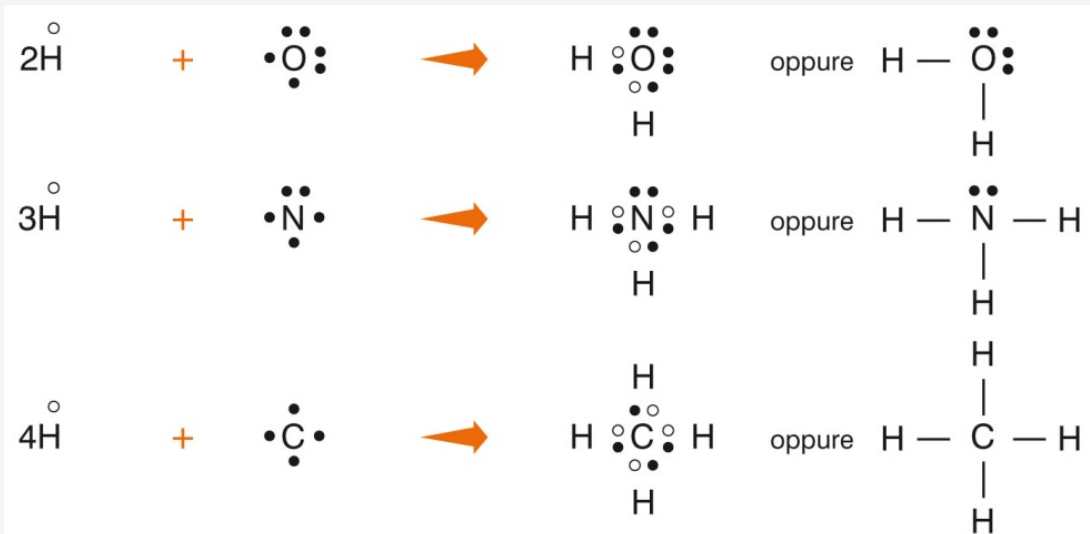


IL LEGAME COVALENTE

- Gli elettroni sono messi in compartecipazione per raggiungere l'ottetto e appartengono in contemporanea a entrambi gli atomi che li condividono.



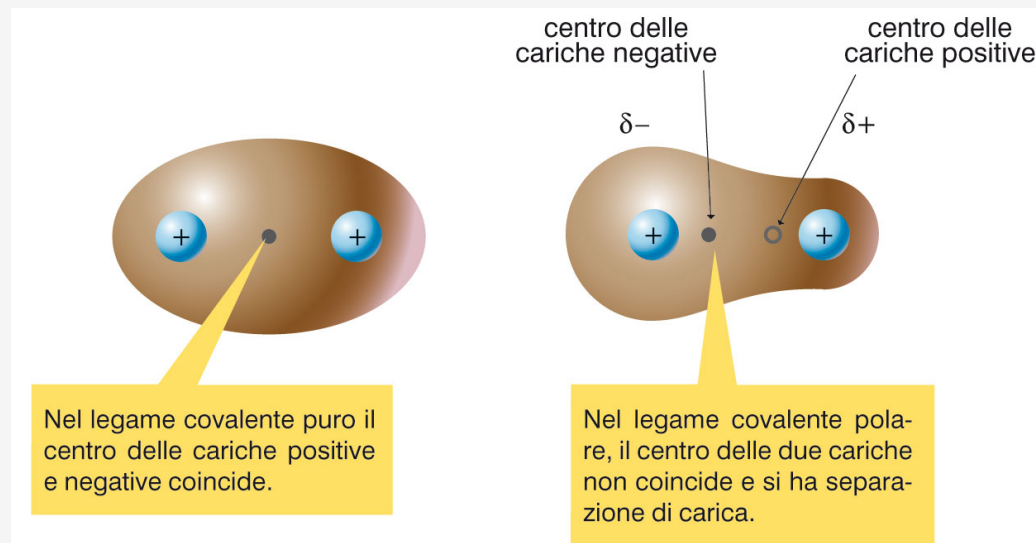
- I legami tra gli atomi possono essere rappresentati con la simbologia di Lewis oppure con dei trattini:



IL LEGAME COVALENTE
POLARE

- Se gli atomi sono diversi, gli elettroni si disporranno in maniera asimmetrica, con densità maggiore in corrispondenza dell'atomo che ha maggiore "affinità" per gli elettroni e in questo caso si ha un **legame covalente polare**

Esempi: **HCl** , **HF** , **CO**



- Gli elettroni non si trovano più al centro fra i due atomi, ma sono spostati più verso l'atomo a maggiore elettronegatività con formazione di una parziale carica negativa (δ^-). L'altro atomo acquisisce una parziale carica positiva (δ^+). Si forma così un **dipolo**.

LEGAME COVALENTE e
ELETTRONEGATIVITA'

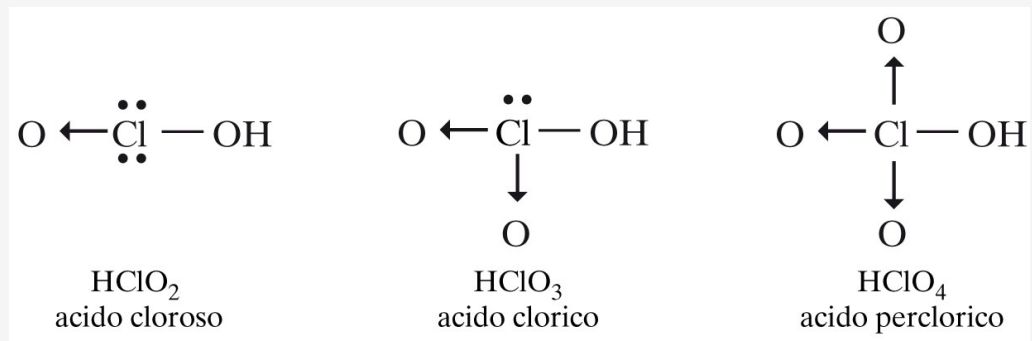
Tanto maggiore è la differenza di elettronegatività fra due atomi, tanto più è polarizzato il legame che li unisce.

Legame ionico rappresenta il caso limite si forma tra atomi con grande differenza di elettronegatività

Differenza di elettronegatività Δ_e	Percentuale di polarità
0,1	0,5
0,3	2
0,5	6
0,7	12
0,9	19
1,1	26
1,3	34
1,5	48
1,7	51
1,9	59
2,1	67
2,3	74
2,5	79
2,7	84
2,9	88
3,1	91
3,3	93

IL LEGAME COVALENTE
DATIVO

- Il **legame covalente dativo** si forma quando la coppia di elettroni di legame è fornita da uno solo dei due atomi che partecipano al legame.
- L'atomo che dona gli elettroni si dice **donatore**, quello che li riceve prende il nome di **accettore**.



LEGAMI SINGOLI DOPPI e TRIPLI

Il legame covalente può essere

- **singolo**: se è condivisa una sola coppia di elettroni
 - H-Cl
- **doppio**: se sono condivise due coppie di elettroni
 - O=O
- **triplo**: se sono condivise tre coppie di elettroni
 - N≡N

Legame	Energia (kJ/mol)	Lunghezza (Å)
singolo	347	1,54
doppio	598	1,34
triplo	812	1,20

Caratteristiche dei legami multipli tra atomi di carbonio

SOLIDI COVALENTI

I solidi Covalenti o reticolari si formano grazie a una rete tridimensionale di legami covalenti fra gli atomi.

Il legame covalente, anziché caratterizzare una singola molecola vista come entità microscopica a se stante, può caratterizzare un intero reticolo cristallino

Proprietà caratteristiche:

- sono duri
- hanno temperatura di fusione elevata,
- non conducono elettricità
- non sono solubili in acqua

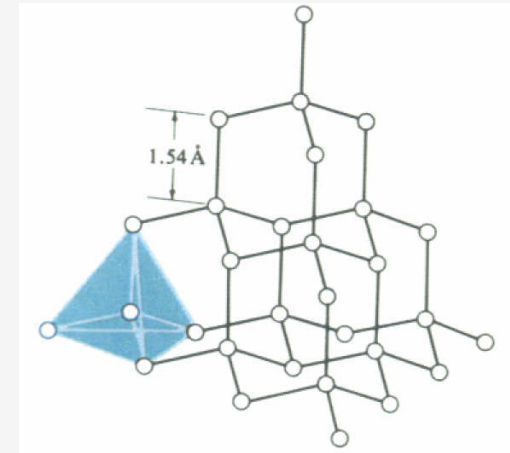


SOLIDI COVALENTI ESEMPI

- Solidi covalenti in cui è presente un solo tipo di atomo

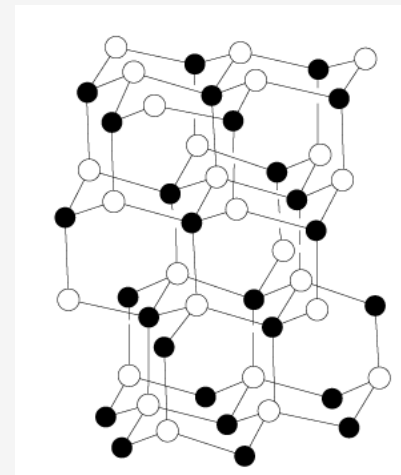
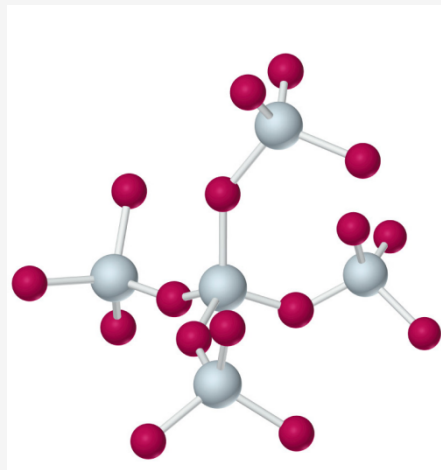
diamante che è costituito da carbonio puro

ogni atomo di carbonio è legato ad altri 4 atomi di carbonio tramite legami covalenti equivalenti lungo tutte le direzioni



- solidi covalenti in cui sono presenti atomi diversi

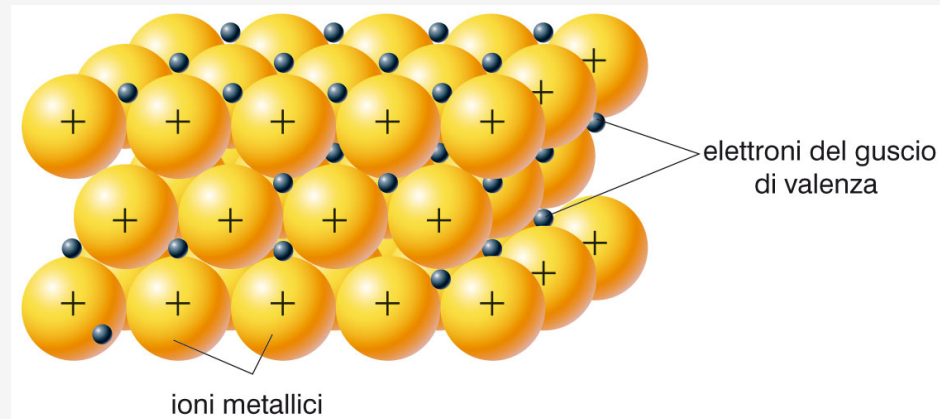
silice SiO_2
nella forma
cristallina prende il
nome di quarzo



nitruro di boro BN

IL LEGAME METALLICO

- Gli atomi metallici possono mettere in comune gli elettroni di valenza, che vengono condivisi tra più nuclei.



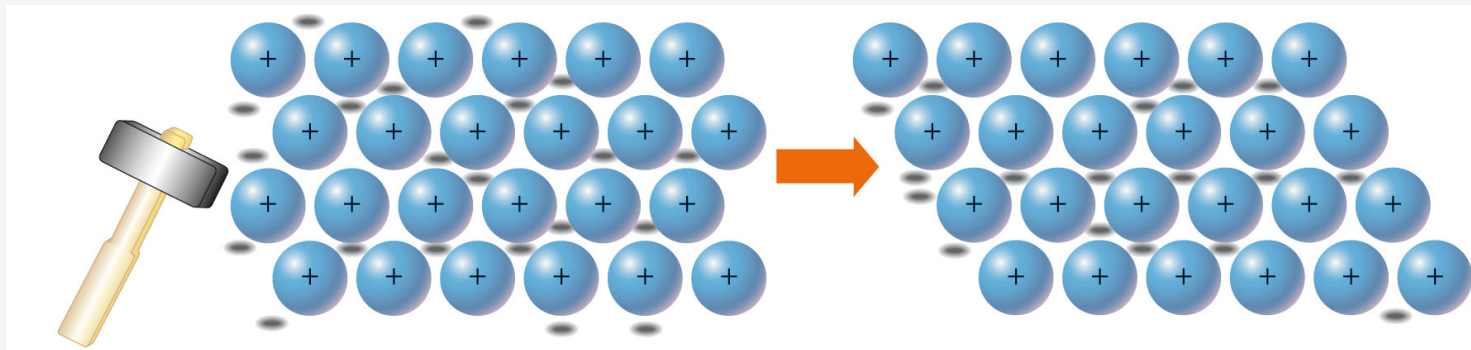
- Il **legame metallico** è dovuto all'attrazione fra gli ioni metallici positivi e gli elettroni mobili che li circondano.
- Tanto più forte è il legame metallico, tanto più sono numerosi gli elettroni mobili.

I METALLI

- I **cristalli metallici** sono costituiti da atomi legati con legame metallico.

Proprietà caratteristiche:

- ▣ duttili
- ▣ malleabili
- ▣ conducono elettricità e calore

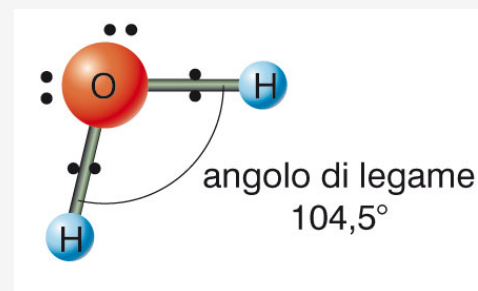
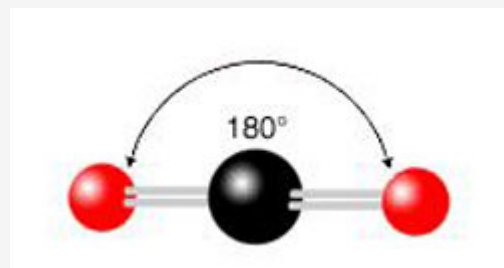


LA FORMA DELLE MOLECOLE

I legami covalenti sono direzionali e quindi hanno una orientazione caratteristica nello spazio.

Se un atomo centrale forma più di un legame covalente con altre specie atomiche osserviamo che i legami si dispongono con una orientazione tipica

L'angolo di legame definisce la geometria di una molecola



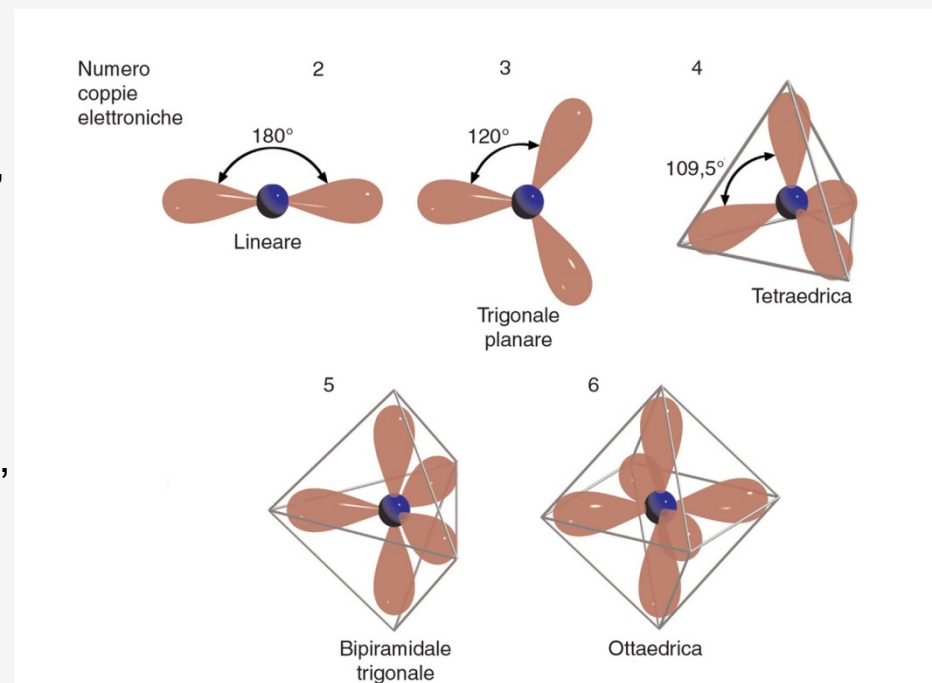
l'angolo di legame è definito come l'angolo formato dagli assi congiungenti i nuclei degli atomi che si legano.

La geometria della molecola può influenzare il fatto che ci sia un dipolo oppure no in presenza di legami covalenti polari

LA FORMA DELLE MOLECOLE
LA TEORIA VSEPR

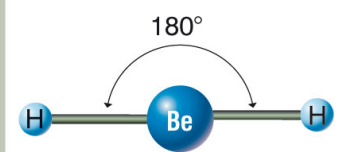
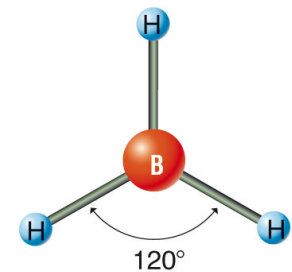
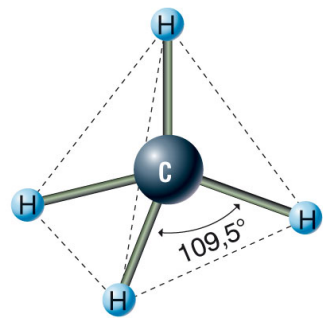
La forma geometrica di una molecola può essere prevista in base alla **teoria VSEPR** (*Valence Shell Electron Pair Repulsion*) secondo la quale:

- in una molecola gli atomi si dispongono intorno all'atomo centrale in modo tale da ridurre la repulsione fra le coppie di elettroni, siano esse di legame oppure no.
- la disposizione degli atomi dipende dal numero totale di coppie elettroniche che circondano l'atomo centrale;
- le coppie elettroniche, avendo uguale segno, si respingono e si collocano alla maggiore distanza possibile le une dalle altre.



LA FORMA DELLE MOLECOLE LA TEORIA VSEPR

□ Alcuni esempi

Molecola	Numero di gruppi elettronici	Struttura di Lewis	Forma	Struttura geometrica	Angolo di legame	Modello
BeH ₂	2	H ◦ Be ◦ H	lineare	H — Be — H	180°	
BH ₃	3	<pre> H ◦ B ◦ H H </pre>	triangolare planare	<pre> H B / \ H H </pre>	120°	
CH ₄	4	<pre> H H ◦ C ◦ H H </pre>	tetraedrica	<pre> H C / \ H H H </pre>	109,5°	

LA FORMA DELLE MOLECOLE LA TEORIA VSEPR

- Le coppie di elettroni liberi hanno un comportamento simile a quello delle coppie condivise, ma la repulsione tra coppie elettroniche libere è maggiore di quella tra coppie condivise.
- Nel caso di coppie elettroniche libere, la forma della molecola tiene conto anche del doppietto elettronico.
- I legami covalenti doppi e tripli valgono come un legame singolo ai fini della geometria molecolare.

Molecola	Numero di gruppi elettronici	Struttura di Lewis	Forma	Struttura geometrica	Angolo di legame	Modello
NH ₃	4		piramide triangolare		107,3°	
H ₂ O	4		piegata		105°	
CO ₂	2		lineare		180°	
HCN	2		lineare		180°	

ORBITALI MOLECOLARI

- La teoria quantomeccanica ondulatoria fornisce un modello per interpretare la formazione dei legami tra gli atomi.
- La trattazione teorica prevede di risolvere l'equazione di Schroedinger per un sistema con due (o più) nuclei e i relativi elettroni con uno sviluppo matematico molto complesso
- Dalla meccanica quantistica si ricorre a delle semplificazioni e sono state sviluppati due modelli:
 - Il modello del legame di valenza VB
 - Il modello della combinazione lineare degli orbitali atomici LCAO

MODELLO DEL LEGAME DI VALENZA (VB)

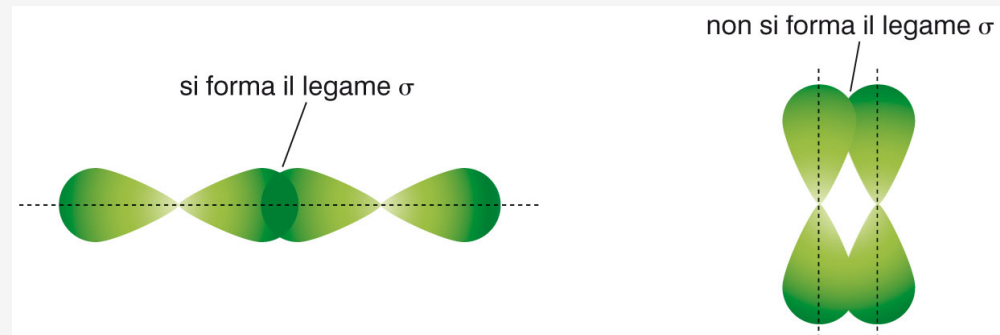
- Secondo la **teoria del legame di valenza**
il legame covalente si forma quando gli orbitali semipieni di due atomi si sovrappongono e sono occupati da una coppia di elettroni con spin opposto, dando origine a un nuovo orbitale, **l'orbitale molecolare** che permette loro di condividere gli elettroni di legame

- la forma degli orbitali molecolari sarà relazionata agli orbitali atomici di partenza

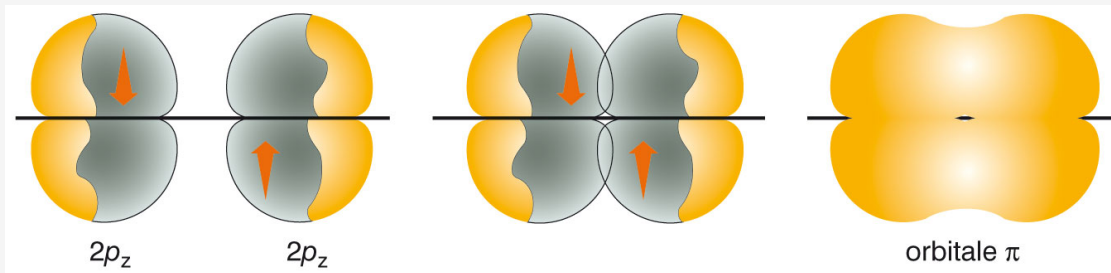
- In funzione della geometria e dal tipo di orbitali atomici da cui originano gli orbitali molecolari possono essere
 - di tipo σ (sigma)
 - di tipo molecolare π (pi greco)

GLI ORBITALI MOLECOLARI σ e π

- In un **legame σ** la distribuzione elettronica è concentrata lungo l'asse di legame ed è disposta in modo simmetrico intorno a esso con geometria cilindrica

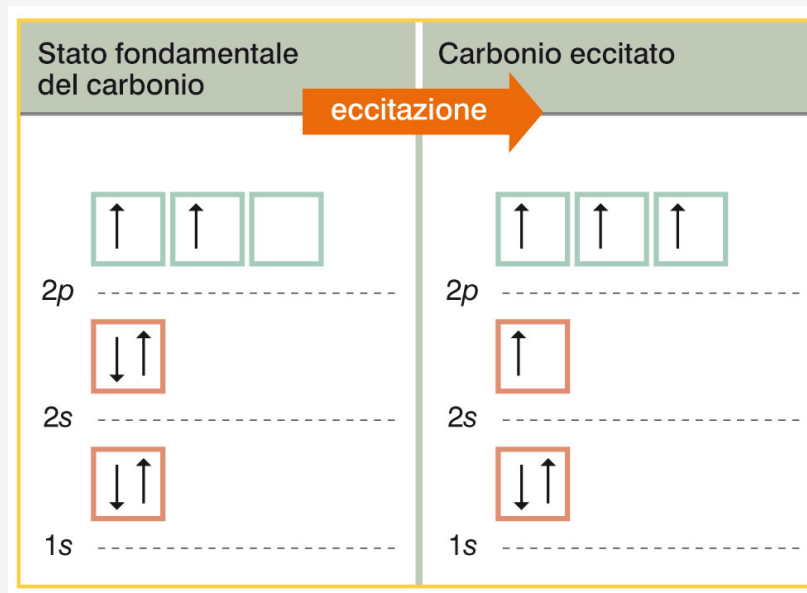


- In un **legame π** la distribuzione elettronica è concentrata in due zone situate da parti opposte rispetto all'asse di legame e non è disposta simmetricamente intorno a esso.




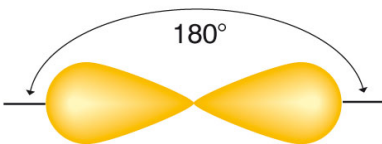
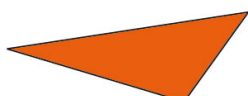
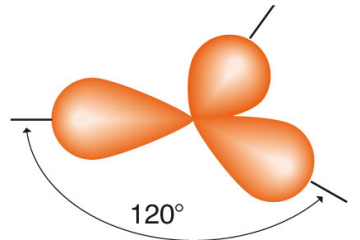
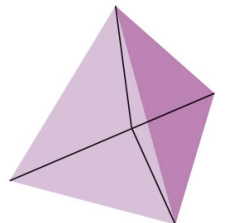
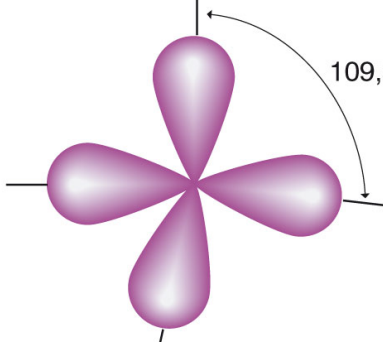
IBRIDAZIONE DEGLI ORBITALI ATOMICI

- Gli **orbitali atomici ibridi** sono funzioni matematiche che derivano dalla somma algebrica di un certo numero di orbitali atomici aventi energia simile.
- Gli elettroni possono passare da un orbitale a più bassa energia a un orbitale dello stesso livello n che presenti una maggiore energia e che non sia occupato.



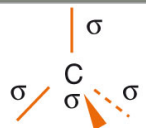
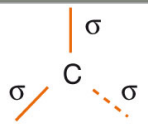

IBRIDAZIONE DEGLI ORBITALI ATOMICI

- La promozione degli elettroni produce la formazione di nuovi orbitali ibridi con precise geometrie che l'atomo può utilizzare per fare legami.

Ibrido	Numero di orbitali ibridi	Geometria della molecola	Angoli di legame
sp	2 	lineare	 180°
sp^2	3 	triangolare piana	 120°
sp^3	4 	tetraedrica	 109,5°

IBRIDAZIONE DEGLI ORBITALI ATOMICI

- In Chimica Organica gli orbitali ibridi sono fondamentali
- l'atomo di carbonio presenta diversi stati di ibridazione a seconda del tipo di molecola che va a formare

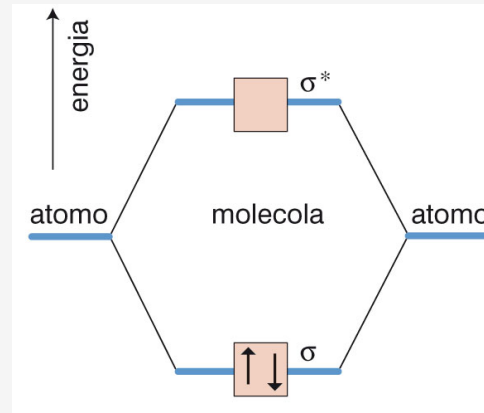
	Ibrido sp^3	Ibrido sp^2	Ibrido sp
geometria	 tetraedrica	 triangolare planare	 lineare
natura dei legami	4 legami σ 0 legami π	3 legami σ 1 legame π	2 legami σ 2 legami π
numero orbitali p non ibridati	0	1	2
esempio	metano	etilene	acetilene

- Secondo la teoria degli **orbitali molecolari - Metodo LCAO**, linear combination of atomic orbitals
gli orbitali molecolari si ottengono per combinazione lineare (somma pesata) degli orbitali atomici di partenza

- il numero di orbitali molecolari che si formano è sempre pari al numero di orbitali atomici che si combinano
- dalla combinazione di due orbitali atomici si ottengono due orbitali molecolari:
 - un **orbitale molecolare di legame** e
 - un **orbitale molecolare di antilegame**

MODELLO LCAO

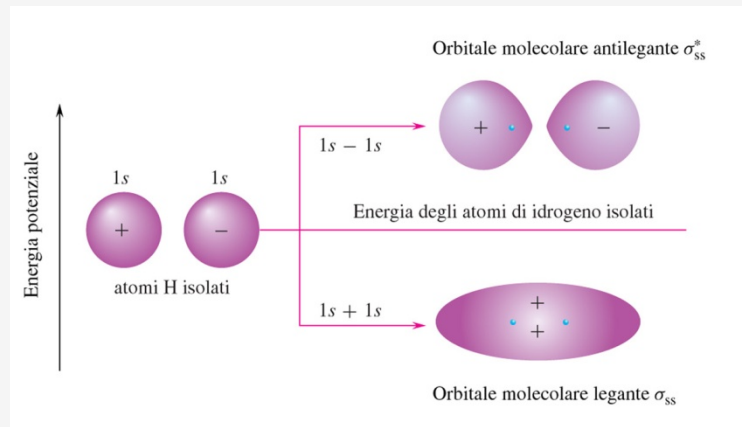
- Esempio: molecola H₂



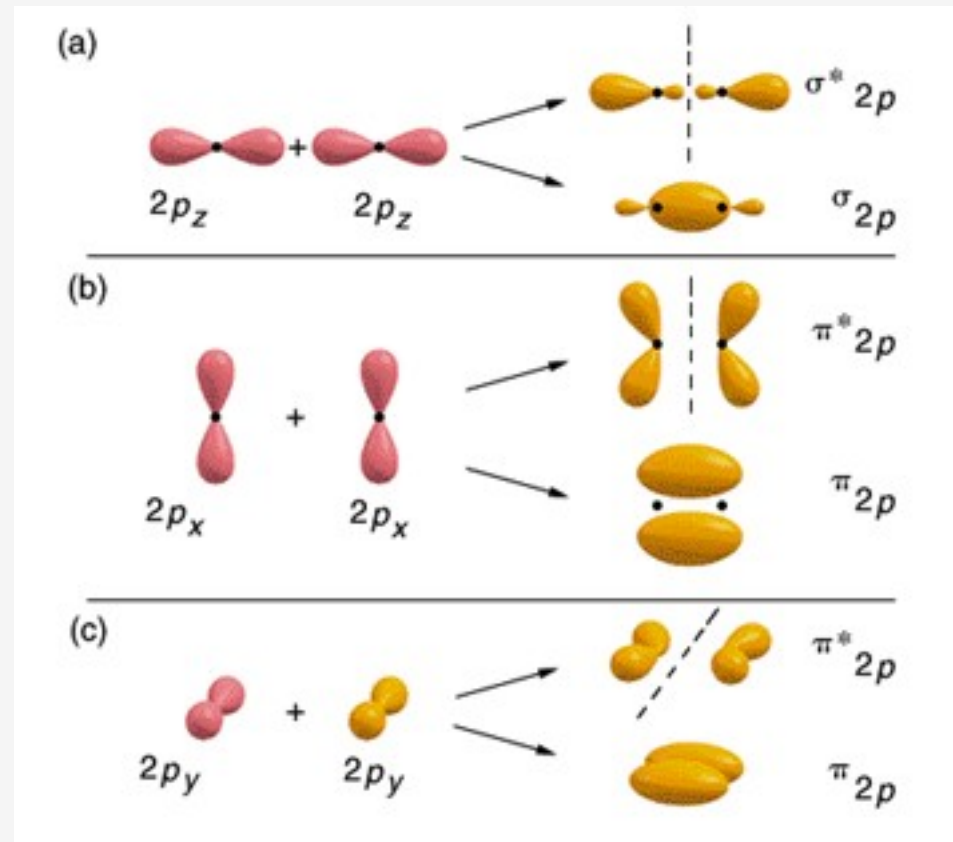
- Un **orbitale di antilegame** è un orbitale molecolare con energia superiore rispetto agli orbitali atomici di partenza.
- Se viene occupato da elettroni destabilizza la molecola.
- Una molecola si forma soltanto se il numero di elettroni negli orbitali di legame è superiore a quello negli orbitali di antilegame

MODELLO LCAO

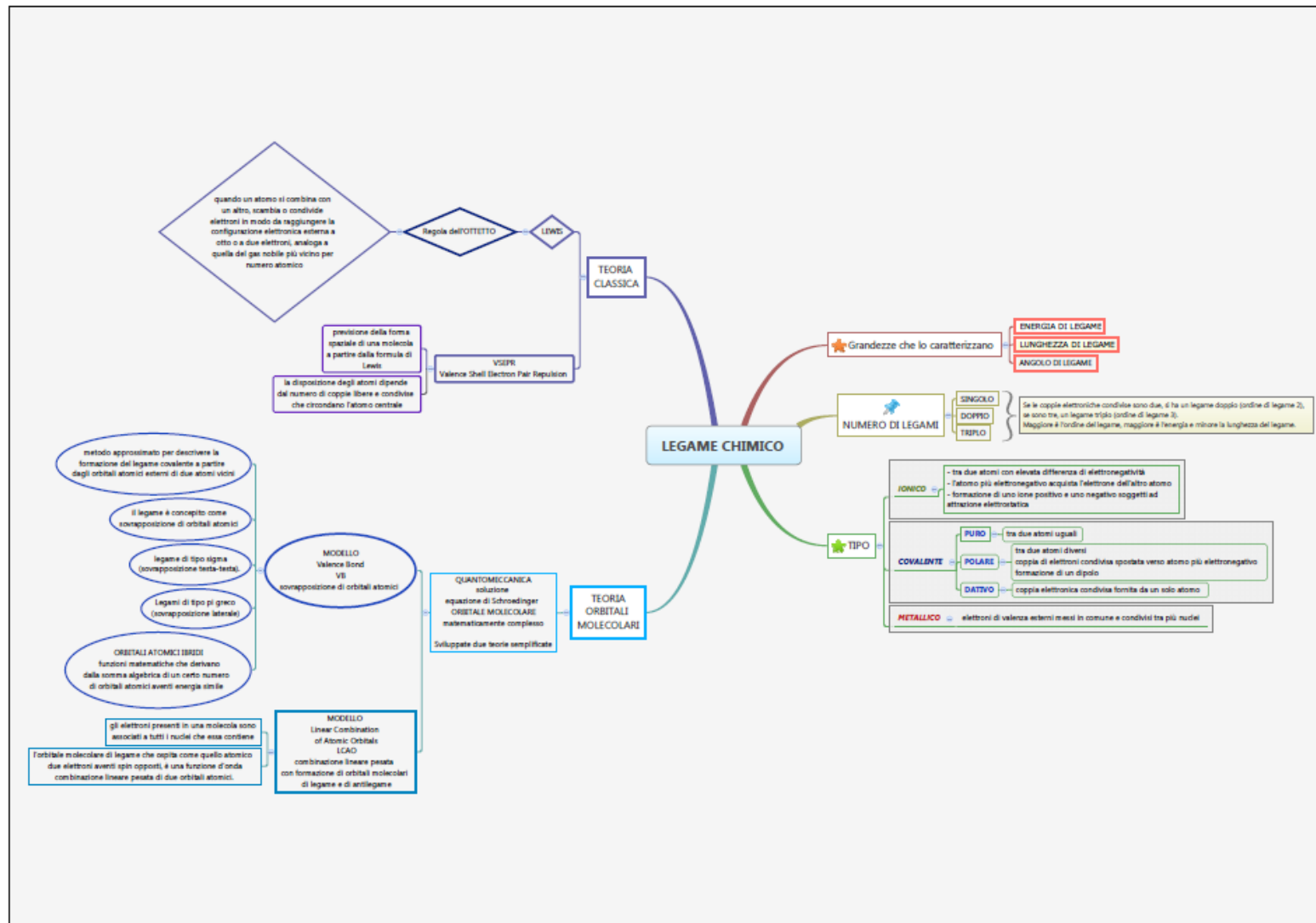
Formazione di orbitali sigma (leganti e antileganti) a partire da orbitali di tipo s



Formazione di orbitali sigma e pi greco (leganti e antileganti) a partire da orbitali di tipo p



MAPPA CONCETTUALE



APPROFONDIMENTI

*Se vuoi approfondire....
guarda i VIDEO on-line*

ELETTRONEGATIVITA'
E LEGAMI CHIMICI

I LEGAMI IONICI E
COVALENTI

Teoria VSEPR

APPROFONDIMENTI

*Se vuoi approfondire
ecco alcune interessanti
LETTURE on-line*

LEGAMI
CHIMICI

Lezione e
bibliografia
sui legami
chimici 1

Lezione e
bibliografia
sui legami
chimici 2

VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

*Se vuoi verificare il tuo apprendimento...
Ci sono molti QUIZ on-line...
Prova !*

QUIZ sul
Legame
Chimico

QUIZ Legami
chimici per
ammissione
medicina