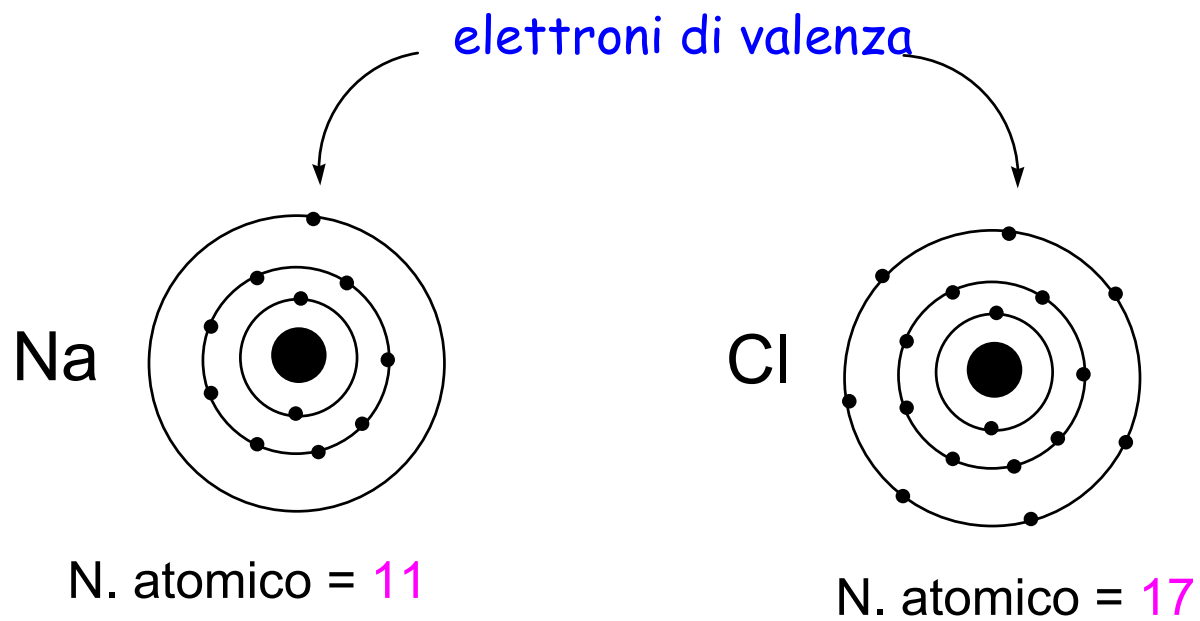


# ATOMI e MOLECOLE

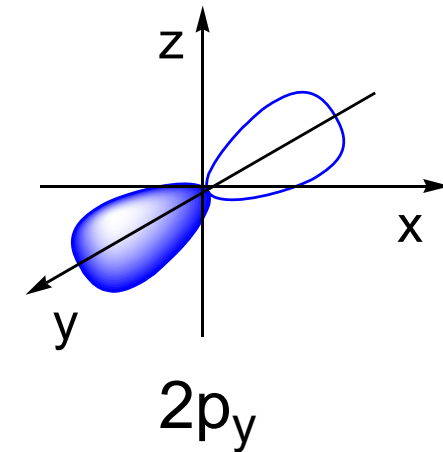
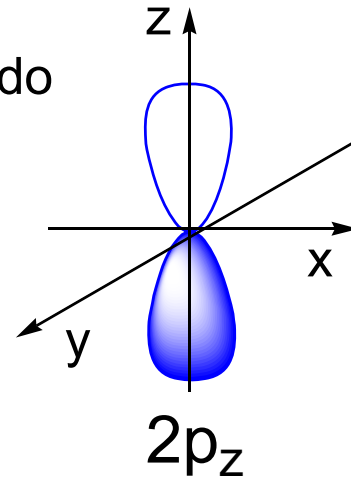
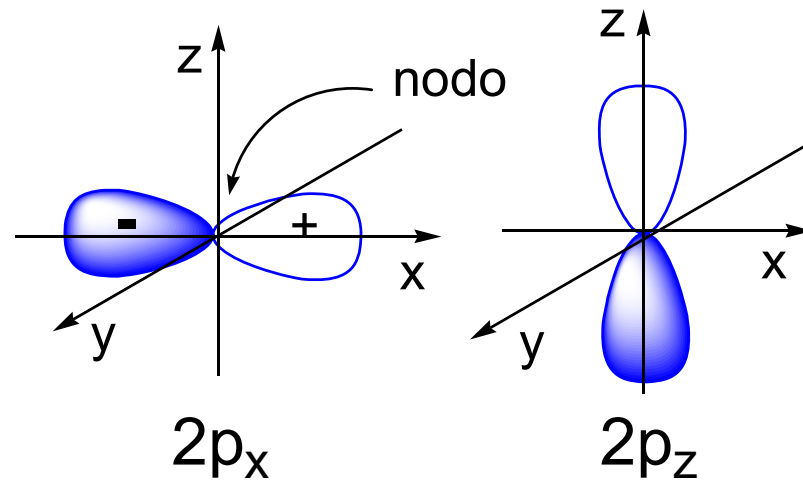
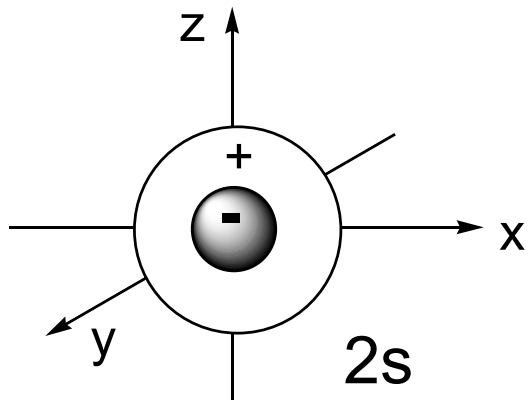
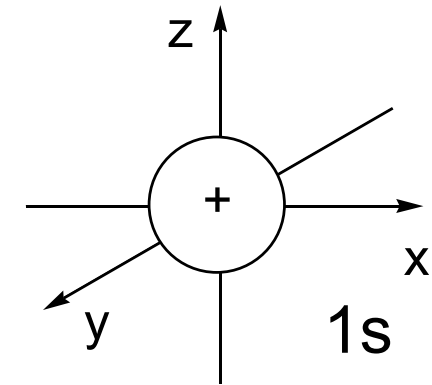
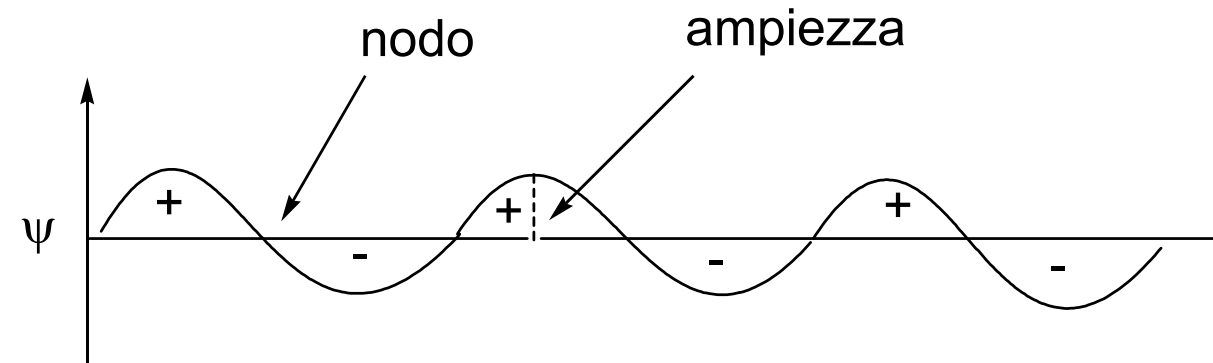
- a) modello atomico di Rutherford
- b) gli orbitali atomici
- c) descrizione della configurazione elettronica degli atomi
- d) perchè gli atomi reagiscono?
- e) in quale modo reagiscono gli atomi?
- f) valenza
- g) strutture di Lewis
- h) risonanza
- h) orbitali molecolari
- i) ibridazione

# modello atomico di Rutherford



# Orbitali ATOMICI

## Equazione d'onda di Schrödinger



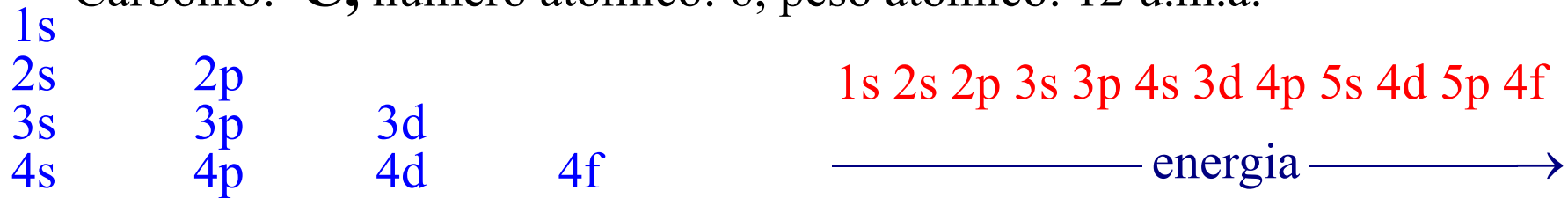
**In ciascuno degli orbitali possono trovarsi solo due elettroni con spin opposti**

# CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DI UN ATOMO: distribuzione degli elettroni e descrizione degli orbitali

**TAVOLA PERIODICA**

1																	2	
3	4																	10
11	12																	18
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110									
		58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
		90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			

Carbonio: **C**, numero atomico: 6, peso atomico: 12 u.m.a.



1) **PRINCIPIO DELL'AUFBAU**: l'ordine degli orbitali dipende dalla loro energia

2) **PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI**: max. 2 elettroni per orbitale

3) **REGOLA DI HUND** (o di massima molteplicità): se sono disponibili più orbitali di uguale energia, in ciascuno di questi si va a collocare un solo elettrone finchè tutti gli orbitali sono riempiti per metà

**TABLE 1.2 The Ground-State Electronic Configurations of the Smallest Atoms**

<b>Atom</b>	<b>Name of element</b>	<b>Atomic number</b>	<b>1s</b>	<b>2s</b>	<b>2p<sub>x</sub></b>	<b>2p<sub>y</sub></b>	<b>2p<sub>z</sub></b>	<b>3s</b>
H	Hydrogen	1	↑					
He	Helium	2	↑↓					
Li	Lithium	3	↑↓	↑				
Be	Beryllium	4	↑↓	↑↓				
B	Boron	5	↑↓	↑↓	↑			
C	Carbon	6	↑↓	↑↓	↑	↑		
N	Nitrogen	7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	
O	Oxygen	8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	
F	Fluorine	9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	
Ne	Neon	10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	
Na	Sodium	11	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑

# PERCHE' GLI ATOMI REAGISCONO?

Un atomo reagisce per raggiungere una configurazione elettronica a cui compete una maggiore stabilità e che corrisponde a quella del gas nobile a lui più vicino

	Ia	IIa	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	gas nobili
I	H 2.1							He
II	Li 1.0	Be 1.5	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	Ne
III	Na 0.9	Mg 1.2	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	Ar
IV	K 0.8						Br 2.8	Kr

Il numero del gruppo corrisponde agli elettroni di valenza nel guscio più esterno, quello del periodo al numero quantico principale

**Potenziale di ionizzazione** = Energia spesa per allontanare un elettrone del guscio esterno dall'atomo in fase gassosa. Genera ioni positivi.

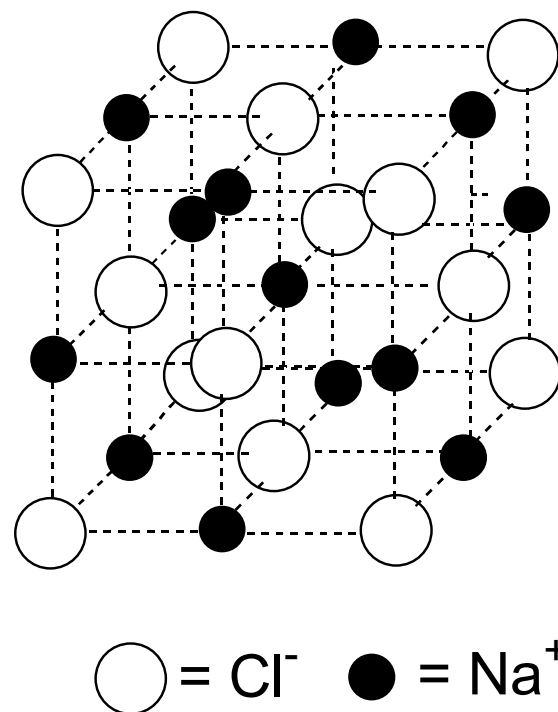
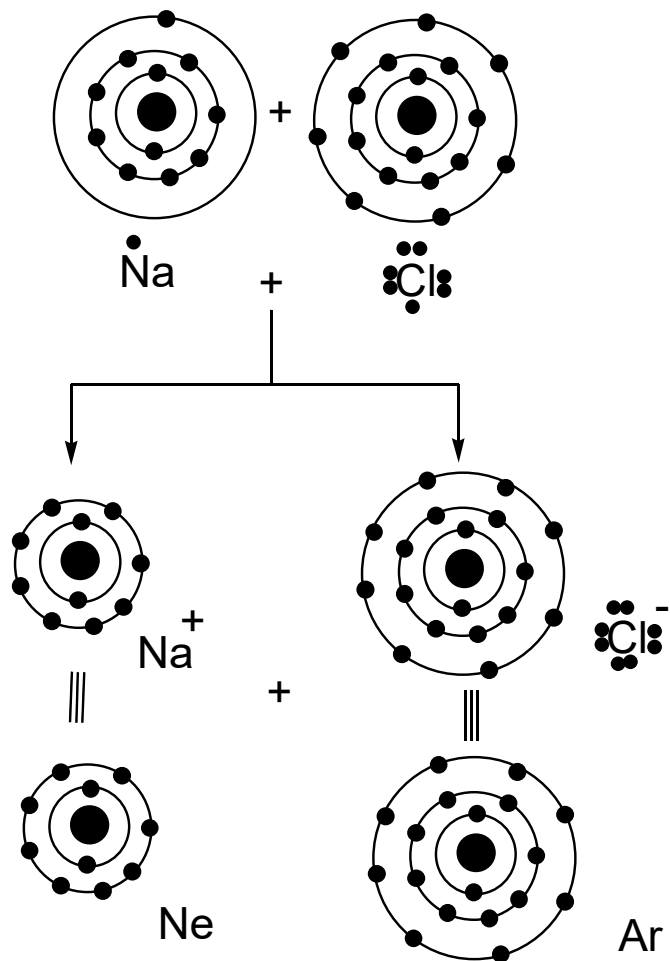
**Affinità elettronica** = Energia (di solito) guadagnata quando un elettrone si addiziona ad un atomo in fase gassosa. Genera ioni negativi.

**Elettronegatività** = Proprietà di attrarre gli elettroni di legame da parte degli atomi. Responsabile della polarizzazione del legame.

**Tutte queste grandezze aumentano da sinistra verso destra lungo il periodo e diminuiscono dall'alto verso il basso lungo il gruppo.**

# IN QUALE MODO REAGISCONO GLI ATOMI?

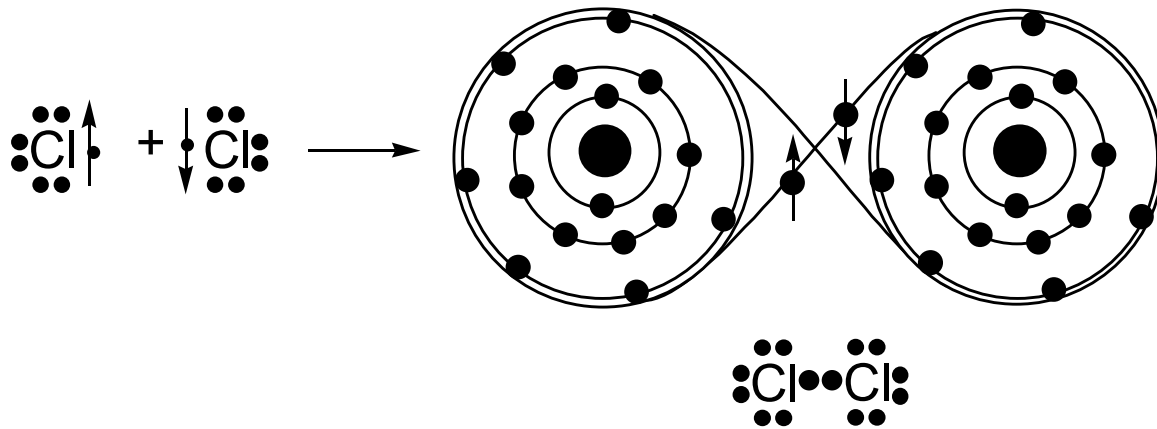
**LEGAME IONICO**= cessione di elettroni dall'atomo con basso P.I a quello con alta A.E. con conseguente formazione di ioni, rispettivamente positivo e negativo, e quindi attrazione.



Il legame ionico **non è direzionale** e non dà origine a molecole, ma a solidi ionici

# IN QUALE MODO REAGISCONO GLI ATOMI?

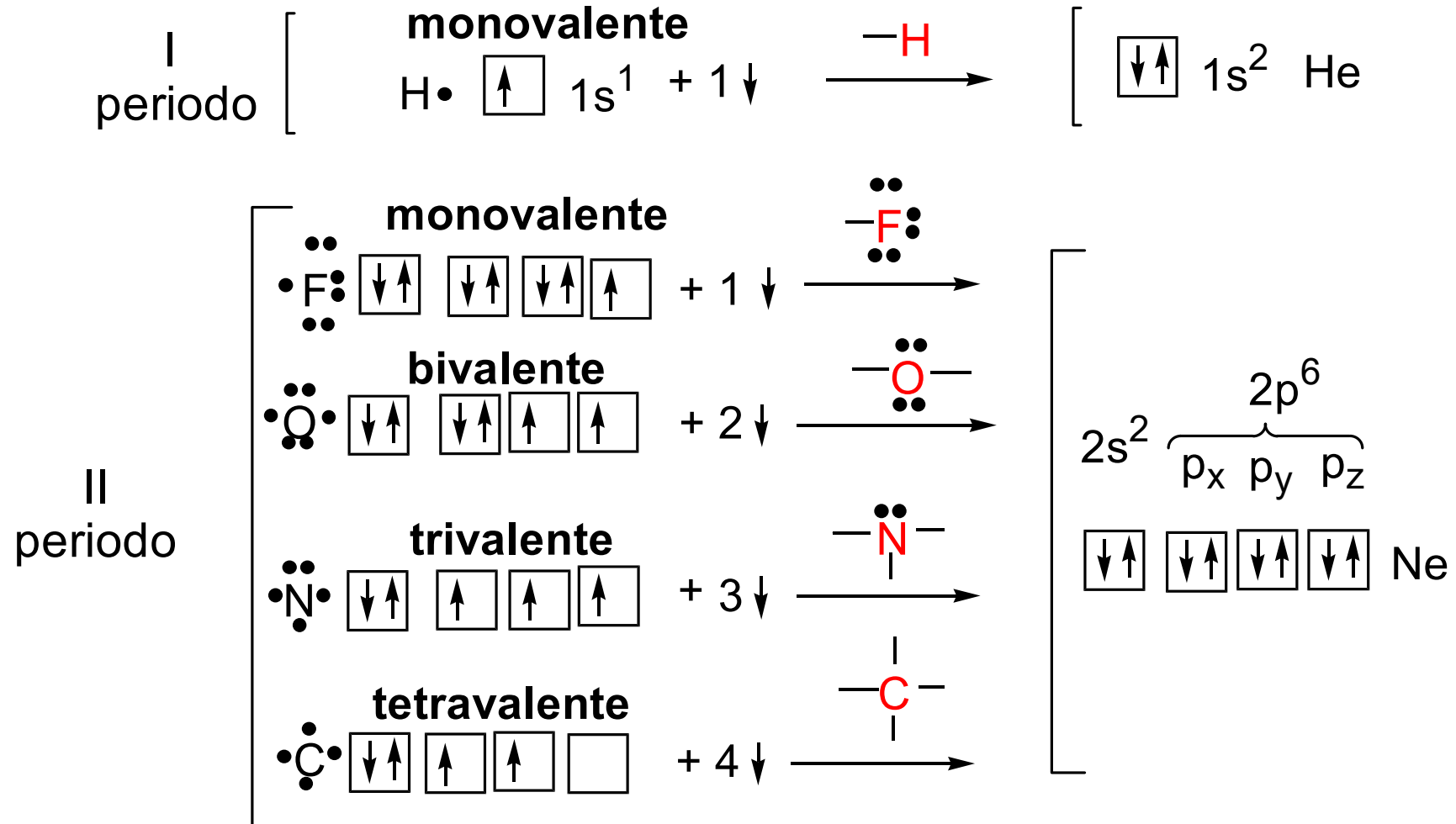
**LEGAME COVALENTE** = Messa in compartecipazione di un elettrone da parte di ciascuno atomo impegnato nel legame. Gli elettroni devono avere spin opposti in modo da formare un doppietto elettronico di legame



Il legame covalente, a differenza di quello ionico, è **direzionale** induce quindi una certa geometria molecolare e caratterizza le molecole.

# Valenza

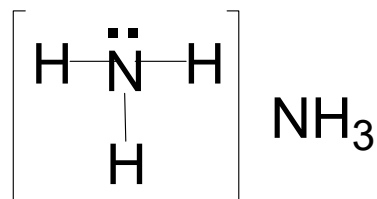
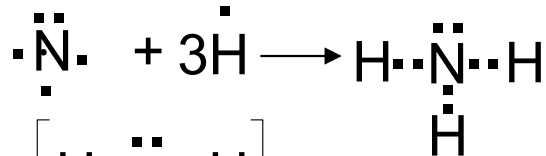
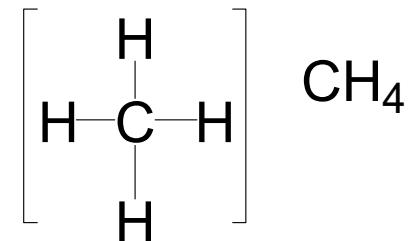
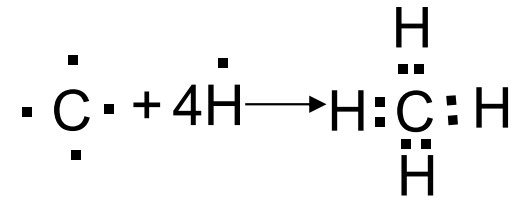
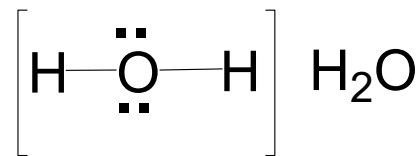
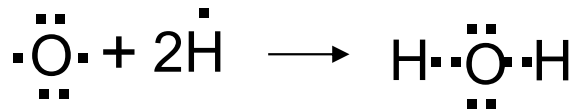
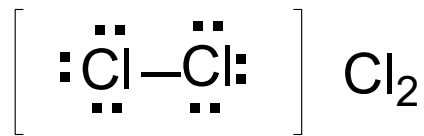
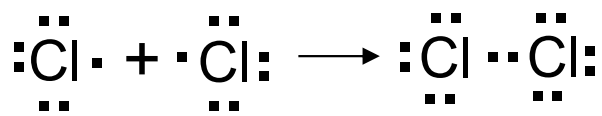
Il numero di legami covalenti che un certo atomo può formare dipende dal numero di elettroni che gli occorrono (per compartecipazione) per raggiungere la configurazione elettronica del gas nobile a lui più vicino nel sistema periodico



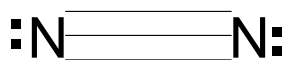
**Regola dell'ottetto.** La più comune configurazione elettronica stabile è quella che prevede otto elettroni nel guscio più esterno.

# STRUTTURE DI LEWIS

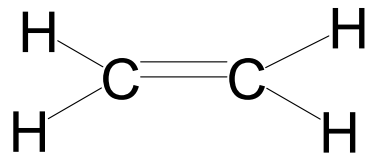
I legami covalenti sono indicati con le strutture di Lewis che mostrano tutti gli elettroni di valenza sia quelli non condivisi, indicati con punti, che quelli condivisi, cioè quelli di legame. Questi di solito sono indicati da un trattino che indica una coppia di elettroni con spin opposti.



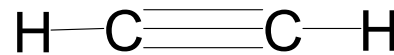
Le valenze di un atomo possono essere saturate, cioè soddisfatte, anche da legami multipli



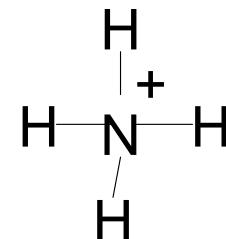
azoto



etene



etino

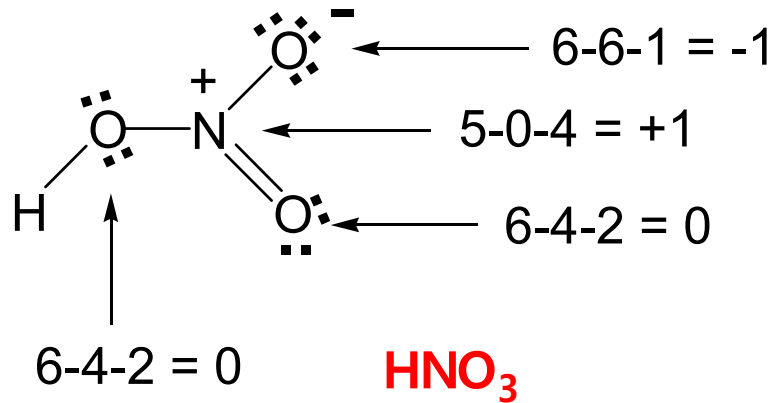


catione ammonio

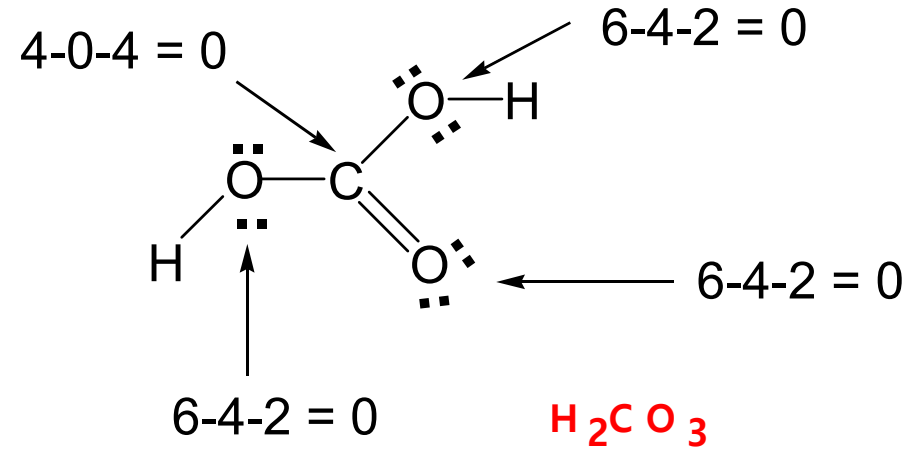
# CARICA FORMALE

Elettroni del guscio più esterno dell'atomo neutro – elettroni non condivisi – ½ elettroni condivisi

## Acido nitrico



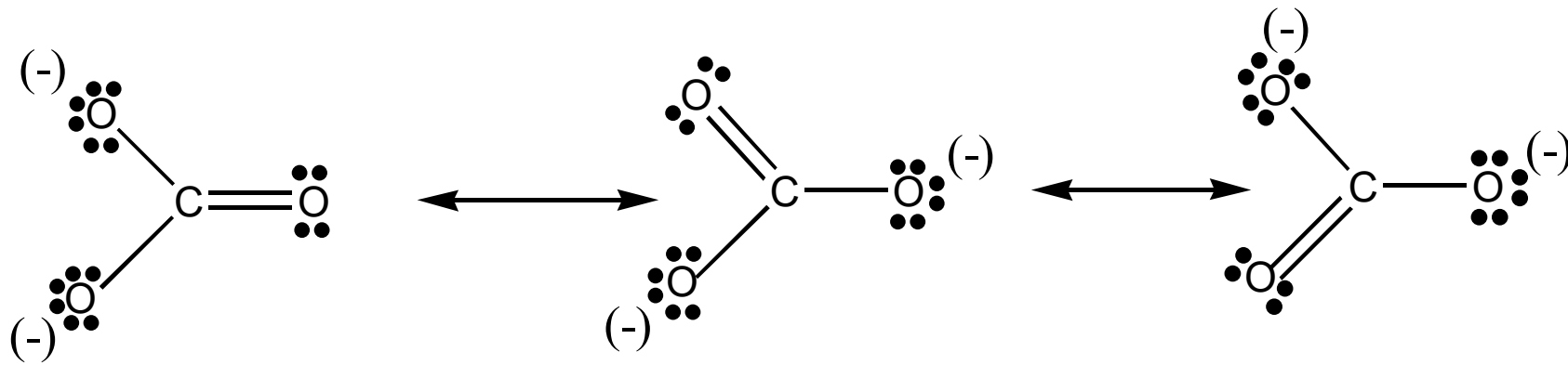
## Acido carbonico



### Sommario delle più comuni cariche formali

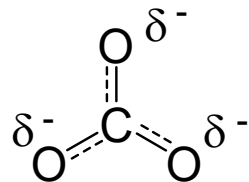
Atomo	C		N		O		S		P
Struttura	$\begin{array}{c} + \\ \text{---C---} \\   \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{---}} \\ \text{---C---} \\   \end{array}$	$\begin{array}{c}   \\ \text{---N}^+ \\   \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{---}} \\ \text{---N---} \\ \ddot{\text{---}} \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{---}} \\ \text{---O}^+ \\   \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{---}} \\ \text{---O}^- \\ \ddot{\text{---}} \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{---}} \\ \text{---S}^+ \\   \end{array}$	$\begin{array}{c} \ddot{\text{---}} \\ \text{---S}^- \\ \ddot{\text{---}} \end{array}$	$\begin{array}{c}   \\ \text{---P}^+ \\   \end{array}$
Elettroni del guscio più esterno	4	4	5	5	6	6	6	6	5
Numero di legami	3	3	4	2	3	1	3	1	4
Numero di coppie non condivise	0	1	0	2	1	3	1	3	0
Carica formale	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1

# RISONANZA: LO IONE CARBONATO $\text{CO}_3^{2-}$



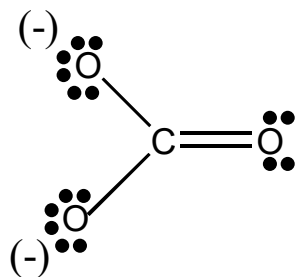
## FORME CANONICHE DI RISONANZA O STRUTTURE LIMITE DI RISONANZA

• **L'ibrido di risonanza** esprime le caratteristiche di tutte le forme di risonanza. Esso può essere rappresentato o dalle forme canoniche stesse o attraverso la struttura con i legami tratteggiati.

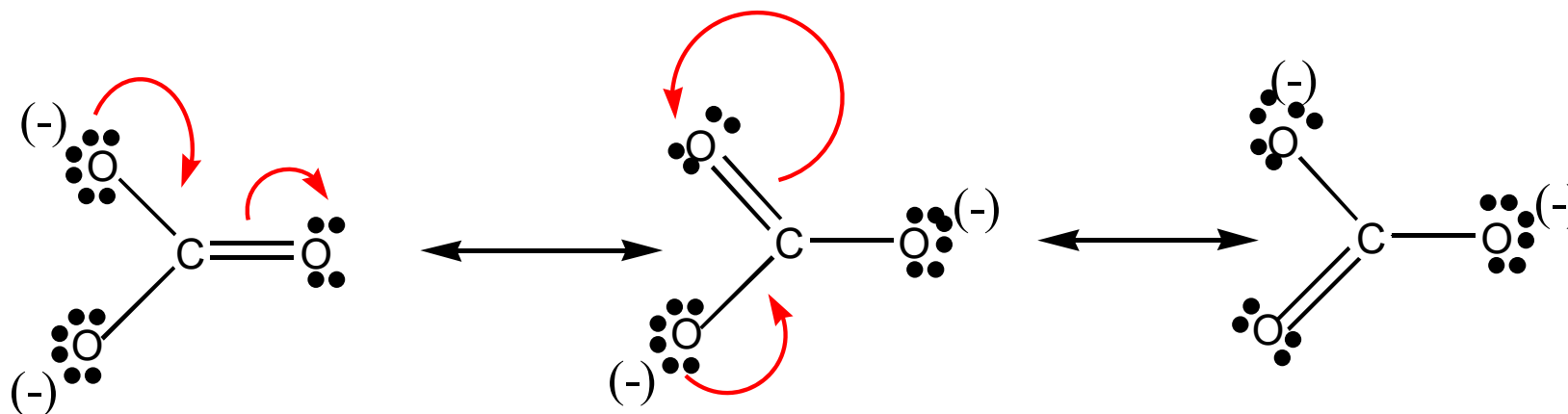


# FORMALISMO DELLE FRECCE RICURVE

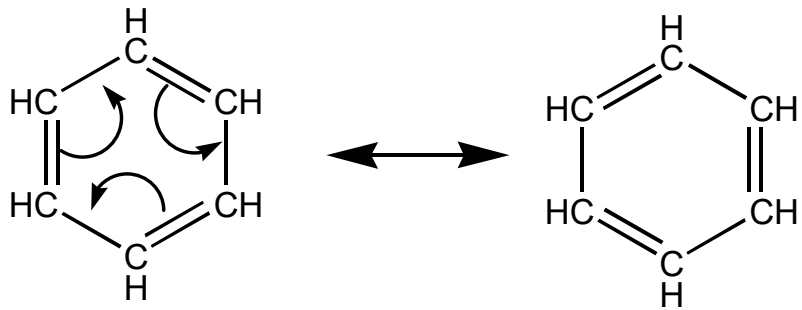
- Disegnare la struttura con gli elettroni del guscio di valenza



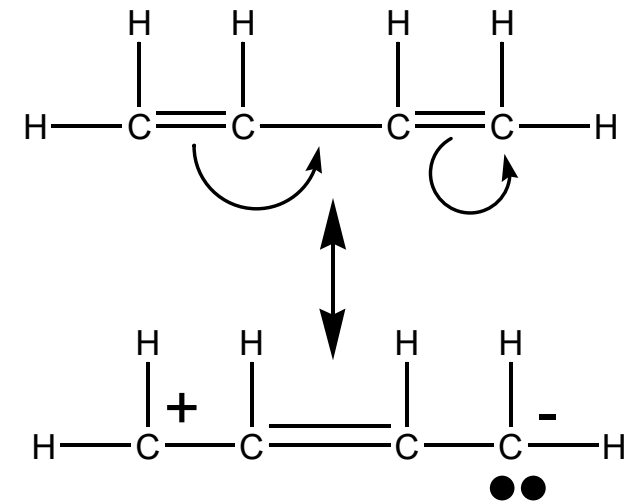
- Spostare a due a due gli elettroni (su atomi o legami vicinali)
- La punta indica la destinazione, la coda il punto da cui gli elettroni partono



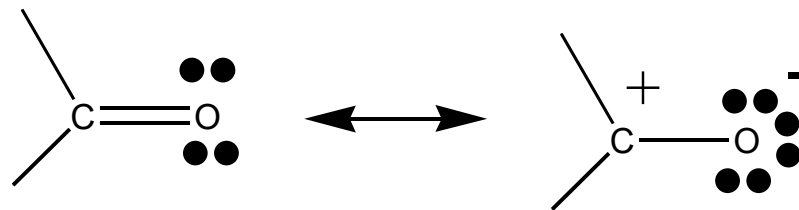
# LA RISONANZA: UN FENOMENO DIFFUSO IN CHIMICA ORGANICA



benzene



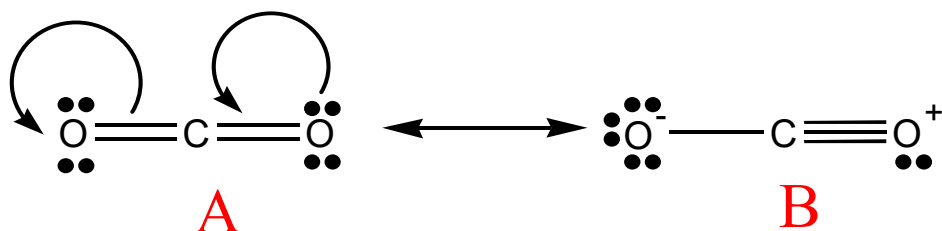
butadiene



il gruppo carbonilico

# REGOLE DELLA RISONANZA

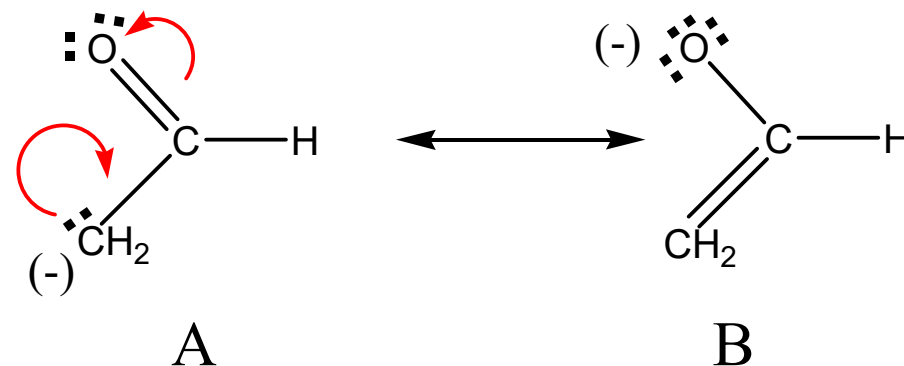
1. Due strutture di risonanza si differenziano solo per la **distribuzione degli elettroni**, ma hanno la stessa identica posizione dei nuclei
2. La molecola reale è un ibrido di due o più strutture di risonanza che **non hanno esistenza reale** ma servono per descrivere la situazione elettronica effettiva
3. Le diverse strutture di risonanza **non sono necessariamente equivalenti**. La struttura più stabile dà il maggior contributo.
4. Sono più stabili le strutture con più legami e quelle in cui non c'è separazione di carica
5. L'ibrido di risonanza è **più stabile** di ciascuna delle strutture che ad esso contribuiscono
6. La risonanza è importante quando le strutture che contribuiscono all'ibrido hanno un contenuto energetico simile



**B** molto meno stabile di **A**

6. Il contributo all'ibrido delle strutture limiti dipende dalla **natura dell'atomo** su cui si trovano le cariche

L'ossigeno porta molto meglio una carica negativa essendo più elettronegativo del carbonio, per cui A è molto meno stabile e contribuisce poco all'ibrido



7. Le forme di risonanza soggiacciono alle **normali regole della valenza** e quindi tutti gli atomi tendono ad avere la configurazione di un gas nobile (**regola dell'ottetto**)