

Lezione 4

3.10

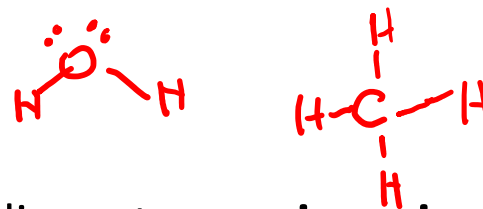
- Predizione degli angoli di legame

3.11

- Natura polare delle molecole

Come prevedere gli angoli di legame, la geometria di ogni atomo e la forma delle molecole

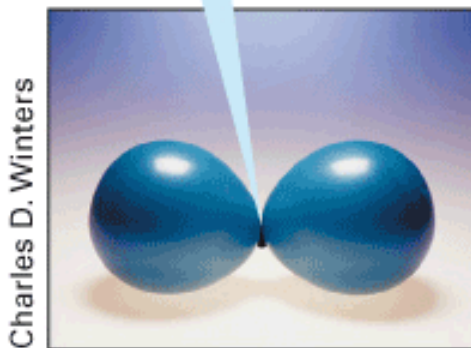
- usare le strutture di Lewis e
- Applicare il modello **VSEPR, *Valence Shell Electron Pair Repulsion*** (repulsione tra le coppie di elettroni del guscio di valenza).



Concetto base della teoria VSEPR:

- **Legami chimici e coppie di elettroni** non condivise di un atomo: **si respingono**
- Si dispongono in modo da essere alla **massima distanza possibile**

il punto in cui i palloncini sono legati insieme rappresenta l'atomo di cui si vogliono prevedere gli angoli di legame

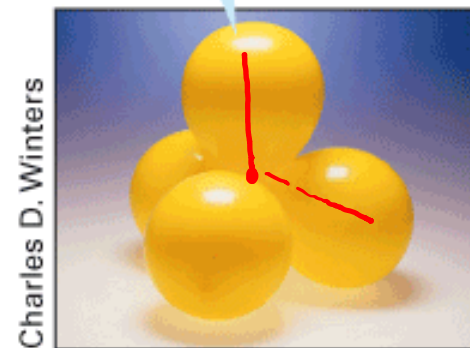


(a) Lineare

ogni palloncino rappresenta una regione di densità elettronica, che può consistere in un legame semplice, doppio o triplo o in una coppia solitaria di elettroni



(b) Trigonale planare



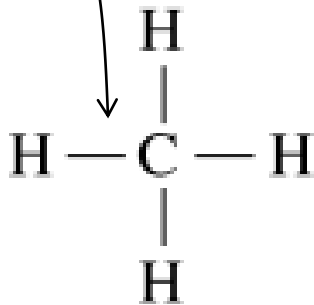
(c) Tetraedro

Geometria tetraedrica (angoli di 109.5°):

metano (CH₄), ammoniaca (NH₃) e acqua (H₂O).

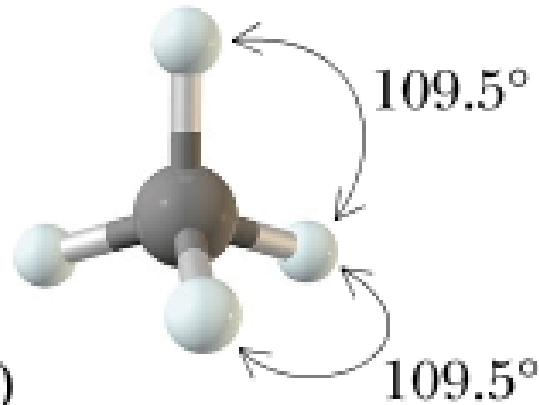
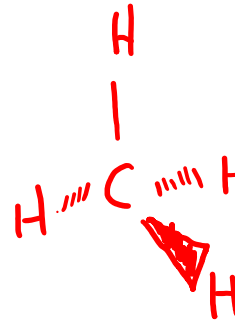
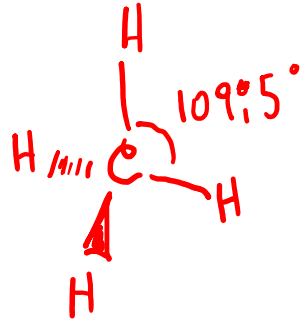
Molecola simmetrica: METANO

4 legami
equivalenti



(a)

Struttura di Lewis



(b)

Tetraedro

Disposizione
geometrica ottimale

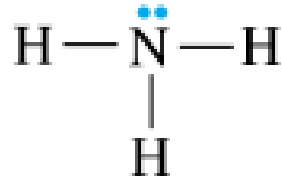
Tetraedrica

Una disposizione dei legami in cui un atomo è legato a 4 atomi posizionati agli angoli di un tetraedro.

Ammoniaca

orbitali NON
equivalenti

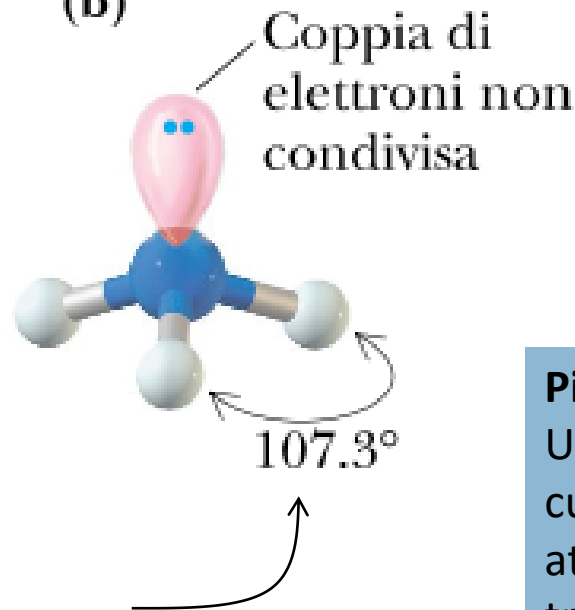
(a)



Struttura di Lewis

identificabile come
un tetraedro distorto
a causa del doppietto
solitario sull'azoto

(b)



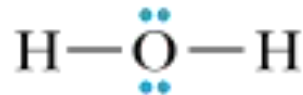
Piramidale

Una disposizione dei legami in cui un atomo è legato a 3 atomi in una piramide a base triangolare.

N.B.: $\neq 109.5$

H₂O

(a)



Struttura di Lewis

(b)



Coppia di
elettroni non
condivisa

104.5°

identificabile come
un tetraedro MOLTO
DISTORTO a causa dei
DUE doppietti solitari
sull'ossigeno

Per alcuni testi è:
Lineare Piegata

N.B.: $\neq 109.5$

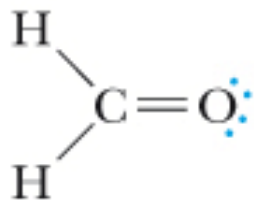
E se la molecola ha un doppio legame?

Un triplo legame?

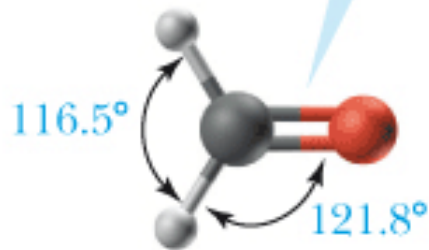
nel modello VSEPR un doppio legame (o un triplo) è trattato
come un **legame singolo**

**Atomo legato ad altri tre atomi:
formaldeide (CH_2O) e etilene (C_2H_4).**

Formaldeide



un doppio legame è trattato come una singola regione di densità elettronica

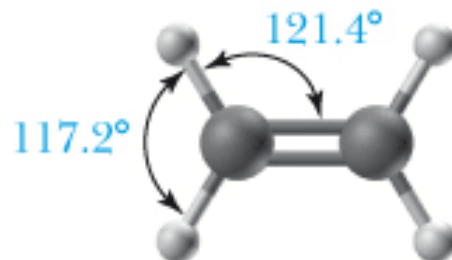
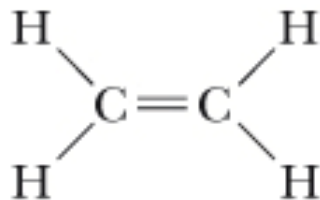


Vista dall'alto



Vista di lato

Etilene



Vista dall'alto



Vista di lato

Atomo legato ad altri due atomi: anidride carbonica (CO₂) e acetilene (C₂H₂).

(a)

Anidride carbonica

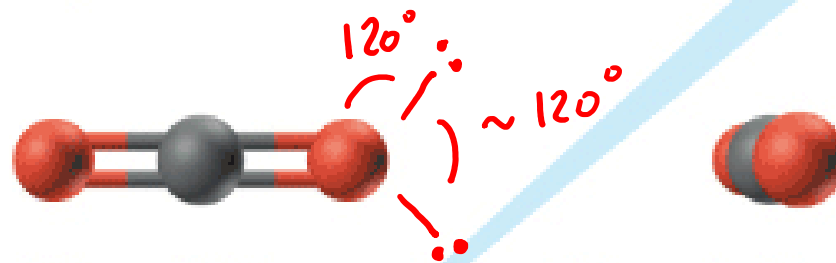


(b)

Acetilene

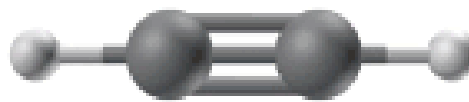


un triplo legame è trattato come una
singola regione di densità elettronica



Vista di lato

Vista dall'estremità



Vista di lato

Vista dall'estremità

Regioni di densità elettronica intorno all'atomo centrale

Distribuzione della densità elettronica prevista intorno all'atomo centrale

Angoli di legami previsti

Esempi (Forma della molecola)

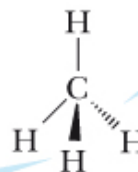
4

Tetraedrica

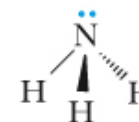
109.5°

un legame a forma di cuneo pieno rappresenta un legame che si proietta al di fuori del piano della pagina

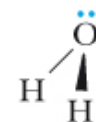
un legame a forma di cuneo tratteggiato rappresenta un legame che si proietta dentro il piano della pagina



Metano (tetraedrica)



Ammoniaca (piramidale)

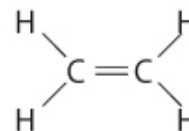


Acqua (piegata)

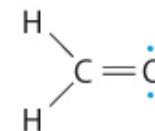
3

Trigonale planare

120°



Etilene (planare)

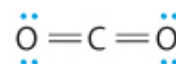


Formaldeide (planare)

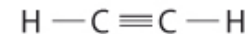
2

Lineare

180°



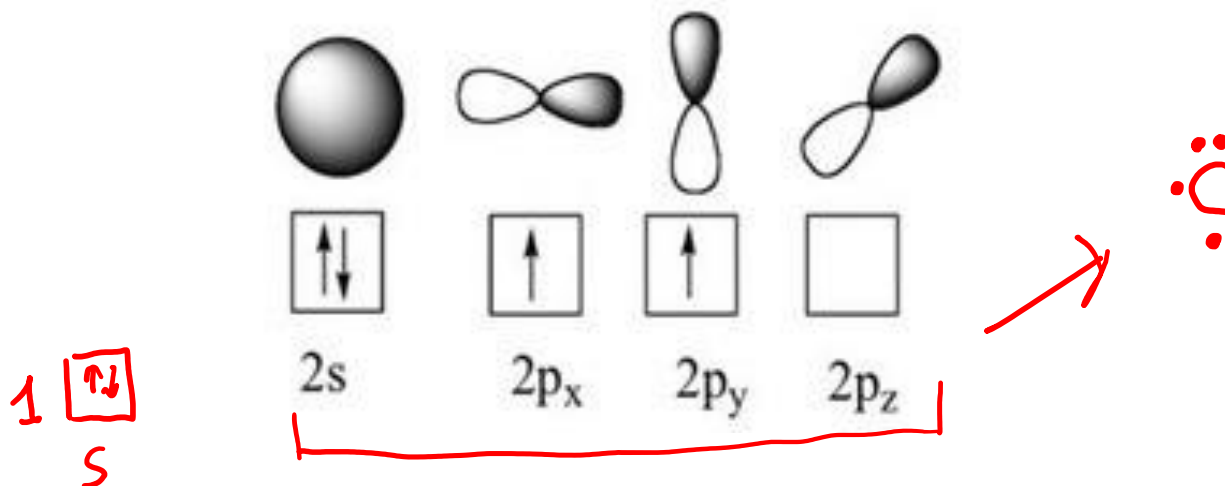
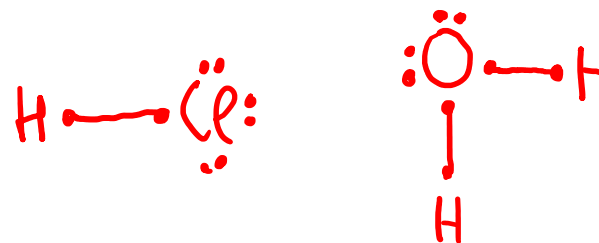
Anidride carbonica (lineare)



Acetilene (lineare)

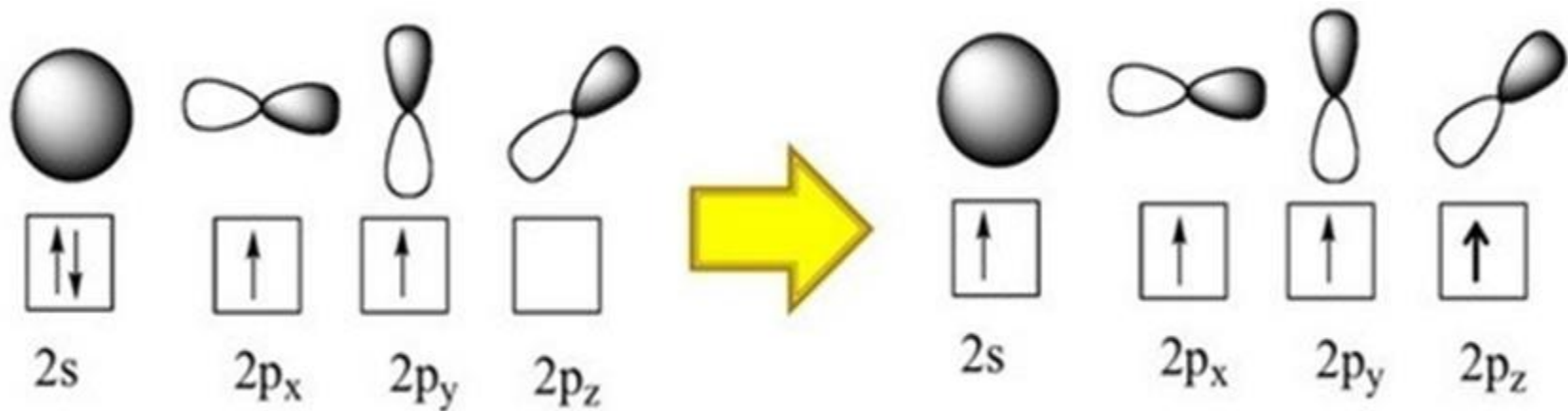
Problema:

- Il carbonio ha configurazione elettronica
 - $1s^2 2s^2 2p^2$
- Nel guscio di valenza abbiamo



Perché il carbonio fa 4 legami e non 2?

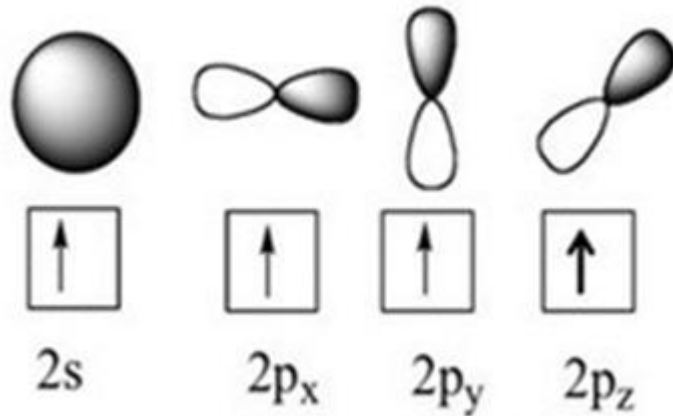
1. Perché il carbonio fa 4 legami e non 2?



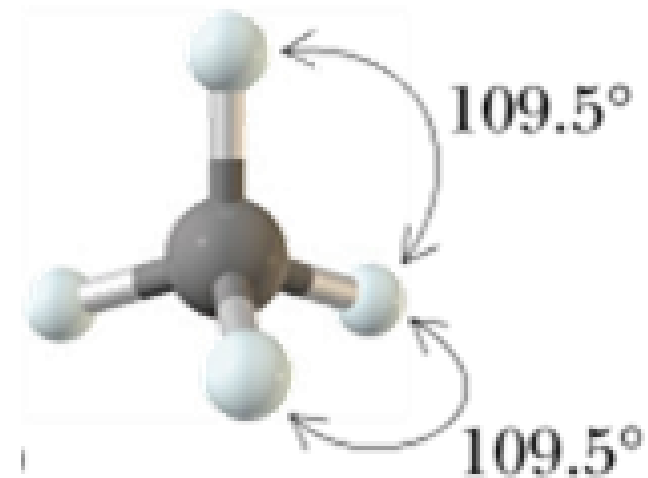
Il trasferimento dell'elettrone dal 2s al 2p è **VANTAGGIOSO**

Opportunità di formare 4 legami

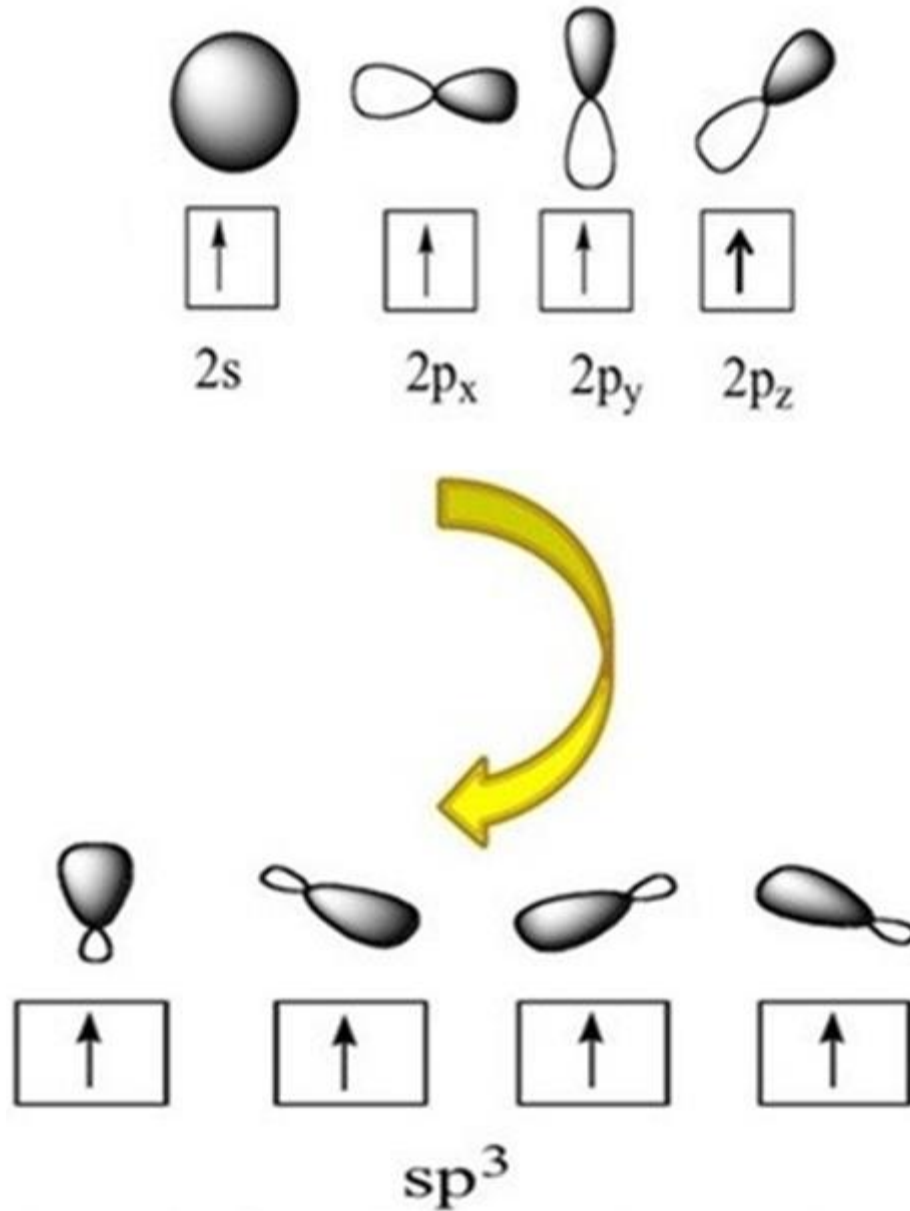
- Il carbonio ha configurazione elettronica
 - $1s^2 2s^2 2p^3$
- Nel guscio di valenza abbiamo



Gli orbitali 2s e 2p hanno forme diverse ma CH₄ è tetraedrico!



AVVIENE IL PROCESSO DI **IBRIDAZIONE** degli orbitali



Linus Pauling propose che:

«gli orbitali atomici si combinano tra loro per formare nuovi orbitali, denominati **orbitali ibridi.**»

Mescolanza di orbitali s e p
esistono tre tipi: **sp^3** , **sp^2** e **sp** ,
ciascuno contiene al massimo **due elettroni.**

La designazione **sp^3** indica:
si sono combinati un orbitale atomico **s** e tre orbitali atomici **p.**

La combinazione di un orbitale atomico 2s e tre orbitali atomici 2p
porta alla formazione di **quattro orbitali ibridi sp^3** equivalenti

La disposizione segue le regole VSEPR

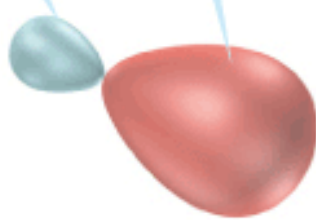
Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

Legame sigma (σ): caso degli orbitali sp^3

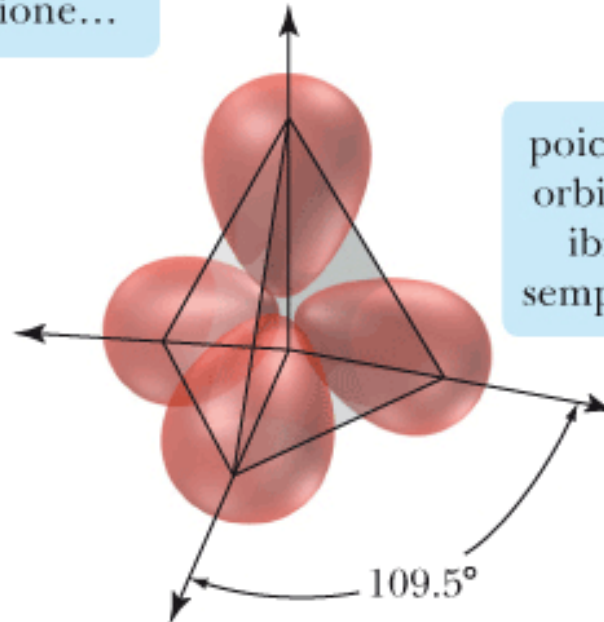
Caso del metano, CH_4 : Tetraedro perfetto

ciascun orbitale ibrido consiste di un lobo più grande che punta in una direzione...

... e un lobo più piccolo che punta in direzione opposta



(a) Un orbitale sp^3

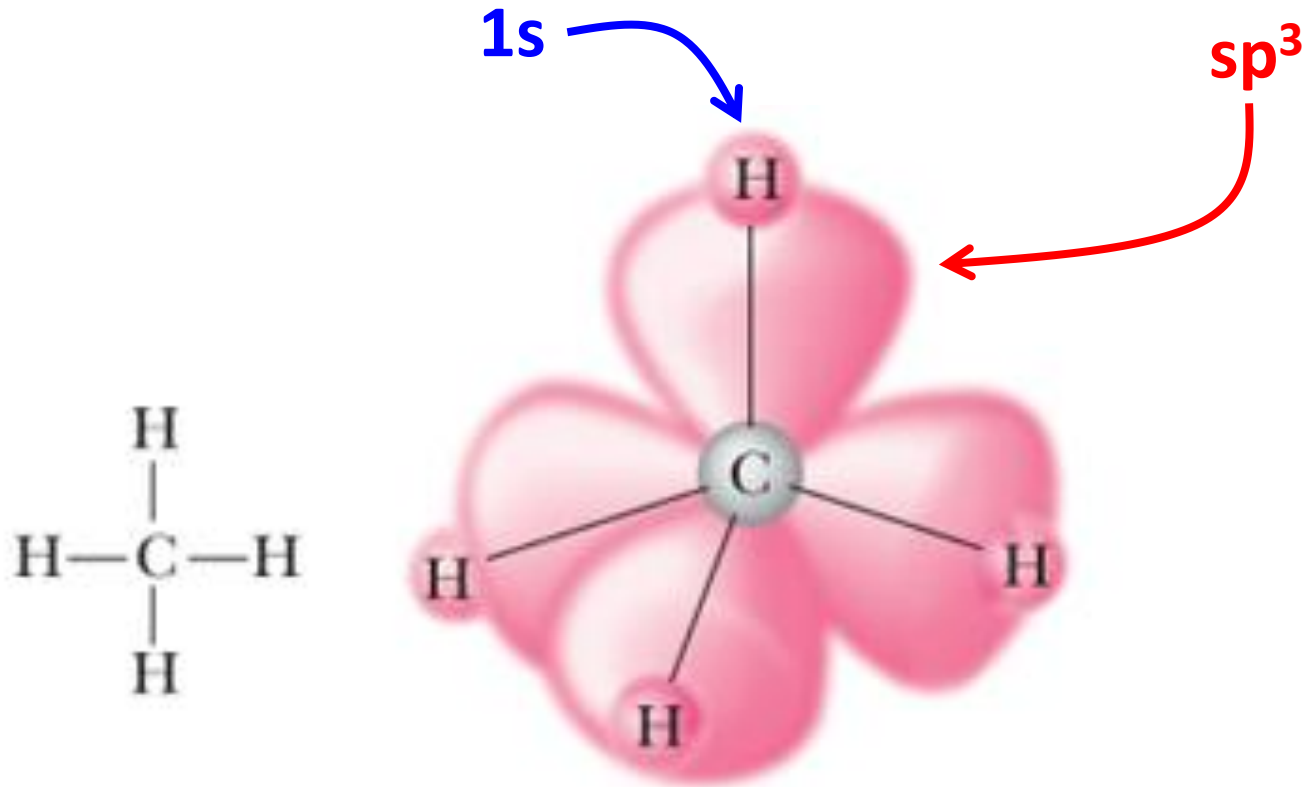


poiché derivano da quattro orbitali atomici, gli orbitali ibridi sp^3 si presentano sempre in gruppi di quattro

(b) Quattro orbitali tetraedrici sp^3

Legame sigma, σ

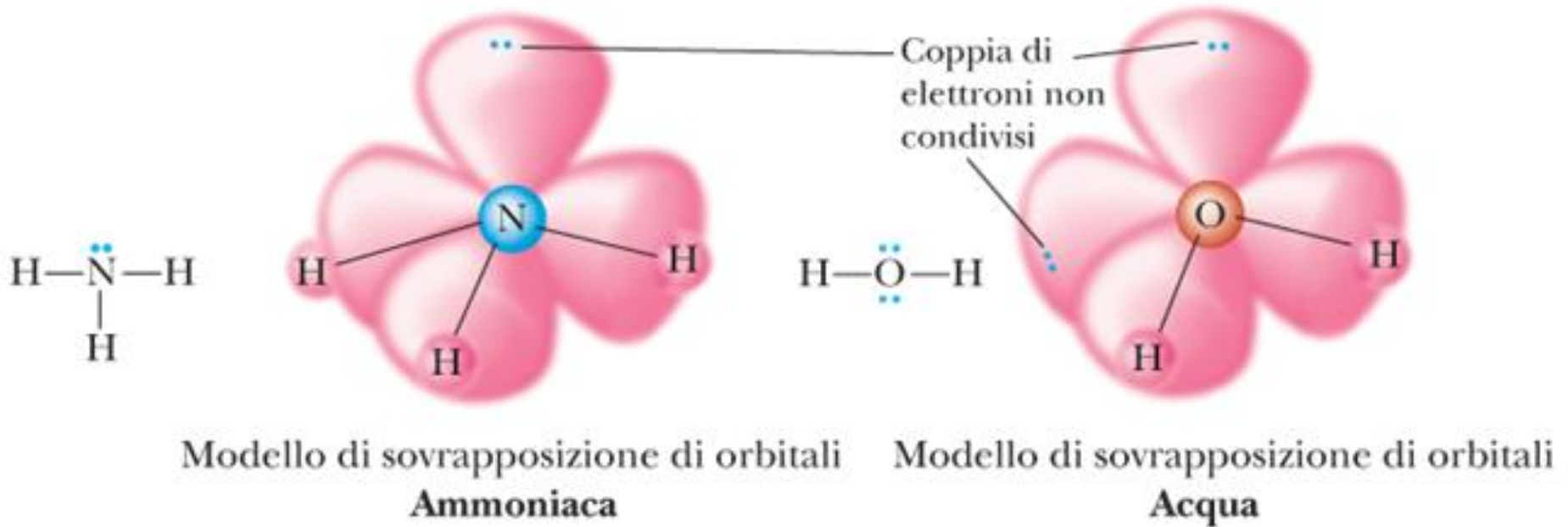
Sovrapposizione $1s - sp^3$



Modello di sovrapposizione di orbitali
Metano

Legame sigma, σ

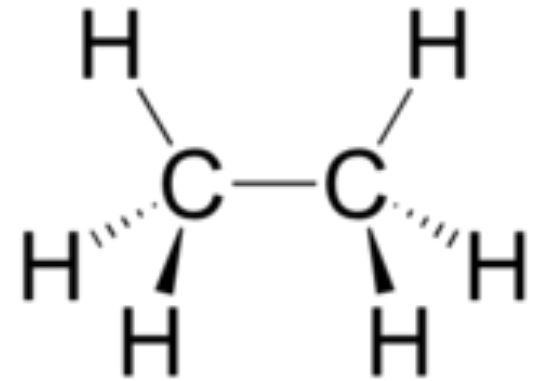
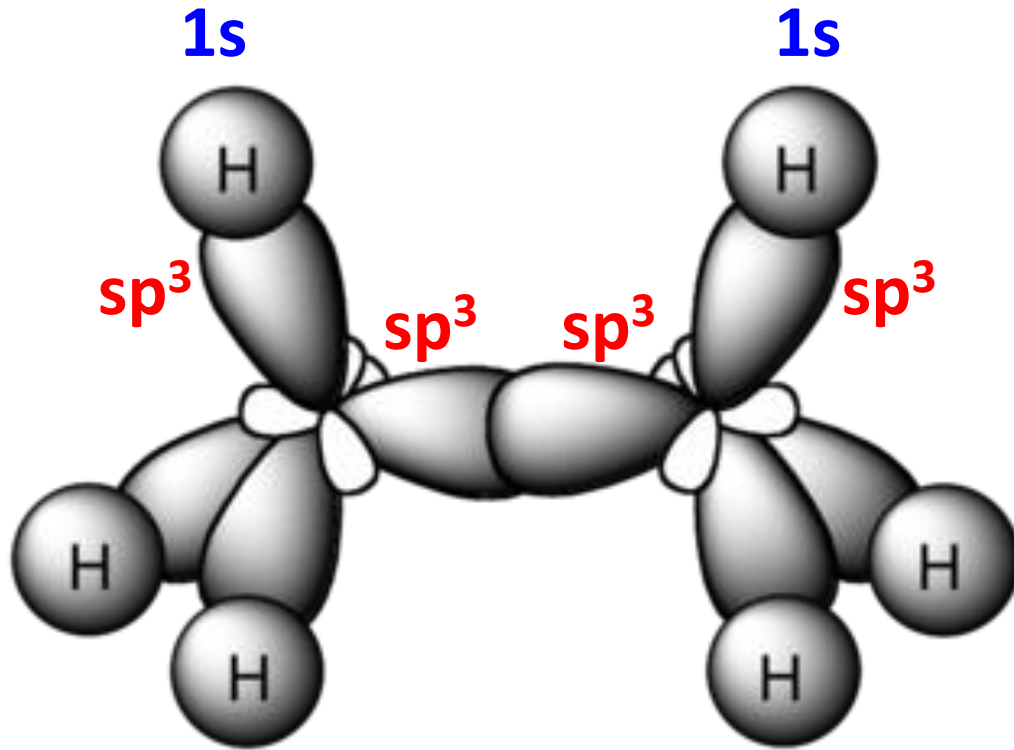
Sovrapposizione $1s - sp^3$



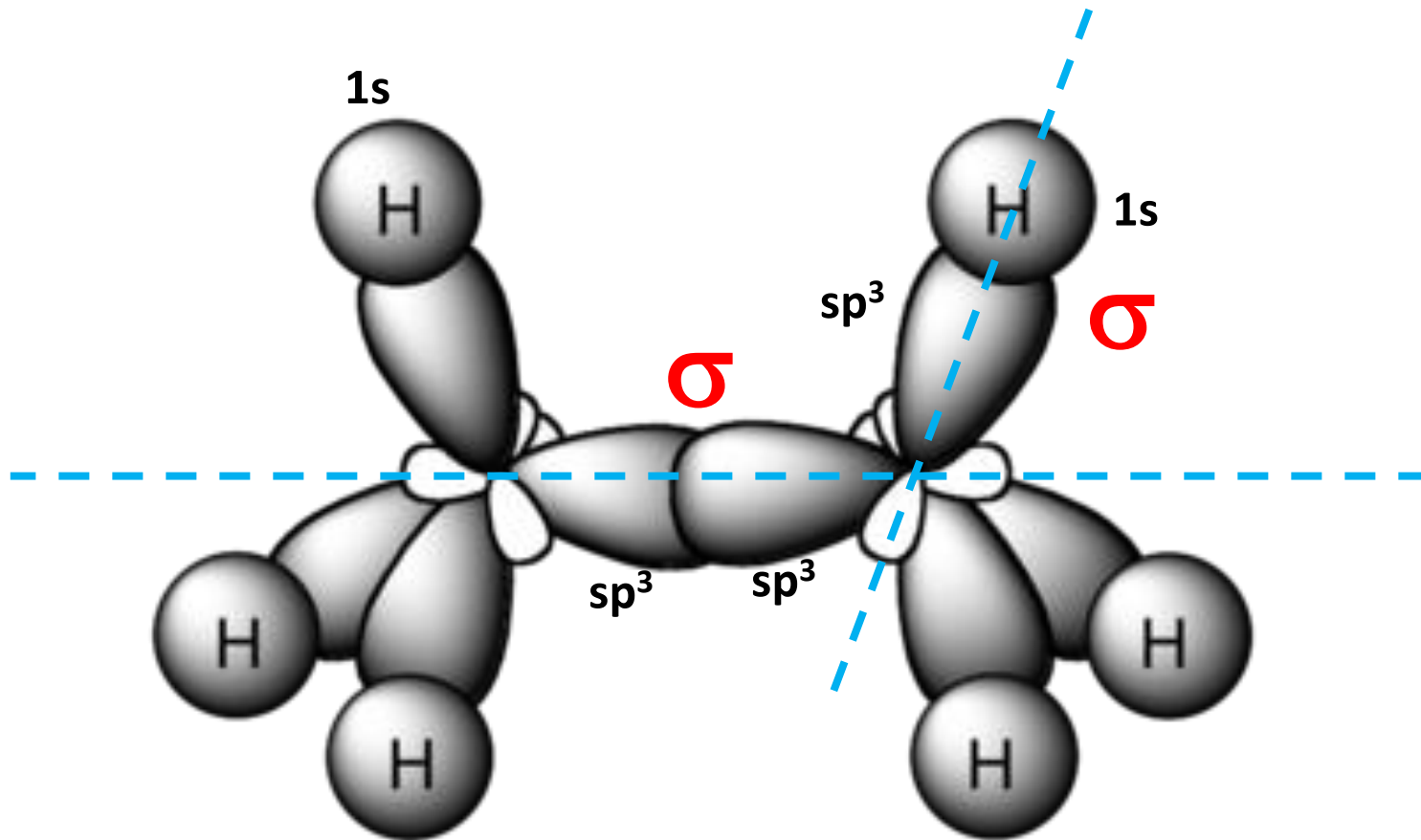
Legame sigma, σ

Sovrapposizione $1s - sp^3$

Sovrapposizione $sp^3 - sp^3$



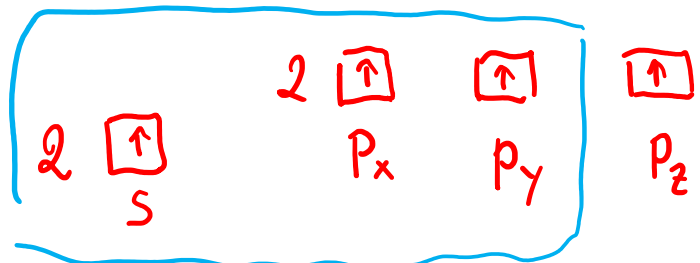
Il legame è di **tipo σ** se gli orbitali che si sovrappongono si trovano sull'asse che unisce i due nuclei: sovrapposizione FRONTALE



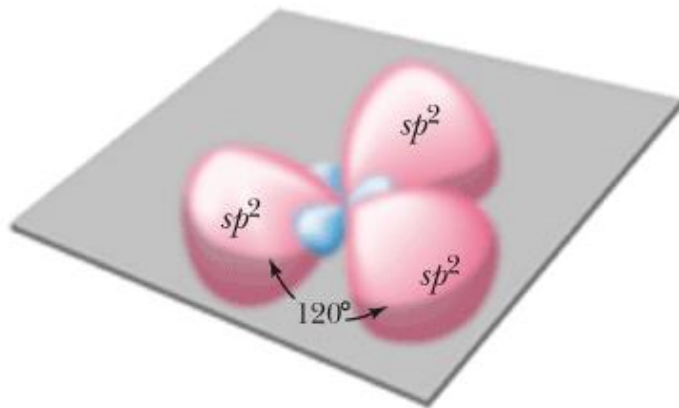
Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

gli orbitali sp^2

Combinazione di un orbitale atomico $2s$ e due orbitali atomici $2p$ si ottengono tre orbitali ibridi sp^2 equivalenti



(a) Un orbitale sp^2



(b) Tre orbitali sp^2

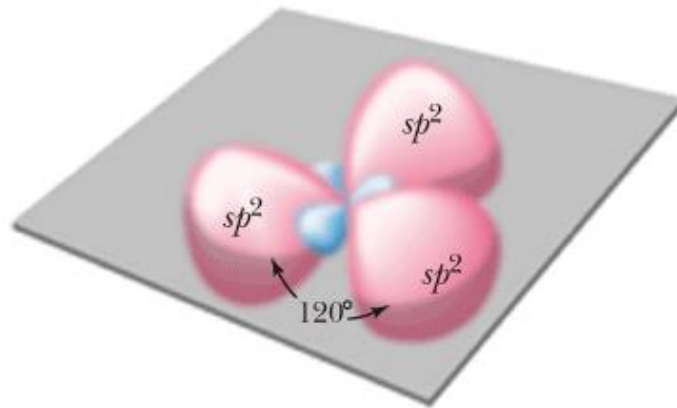
Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

gli orbitali sp^2

Combinazione di un orbitale atomico $2s$ e due orbitali atomici $2p$ si ottengono tre orbitali ibridi sp^2 equivalenti



(a) Un orbitale sp^2



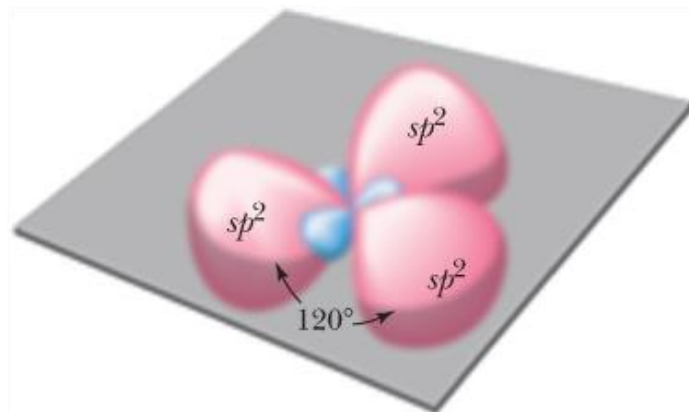
(b) Tre orbitali sp^2

E il terzo orbitale p?

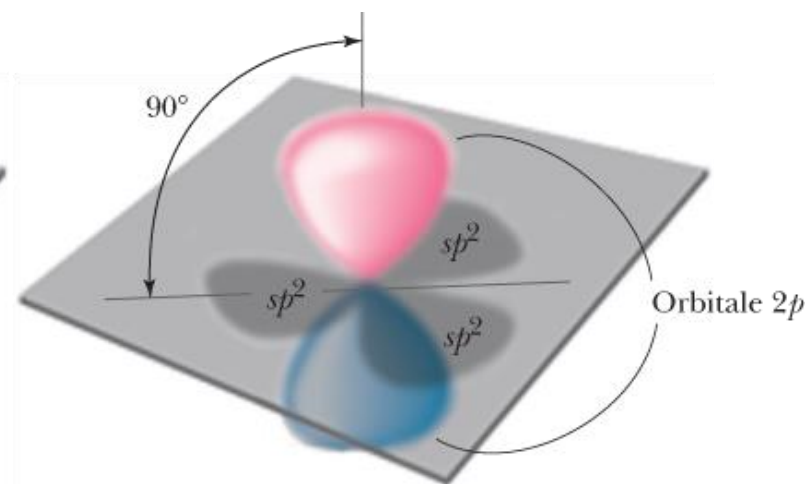
Il terzo orbitale atomico $2p$ non è coinvolto nell'ibridazione
consiste di due lobi perpendicolari al piano individuato dai tre sp^2 .



(a) Un orbitale sp^2



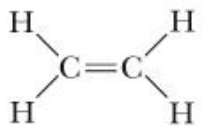
(b) Tre orbitali sp^2



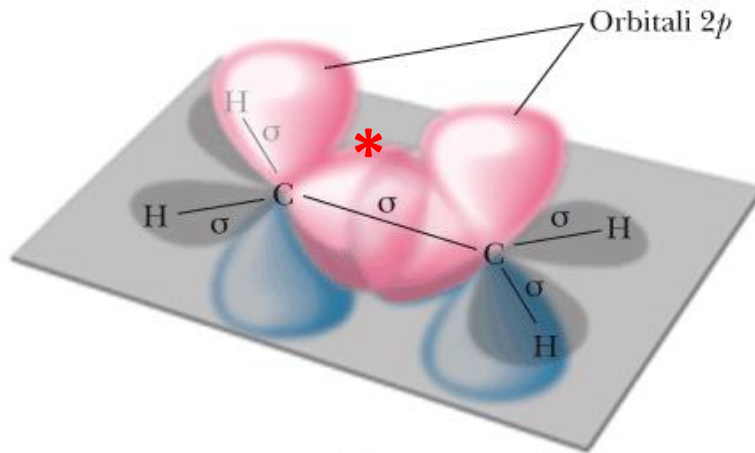
(c) Tre orbitali sp^2 e un orbitale $2p$ non ibridato

Esempio: etilene (C_2H_4).

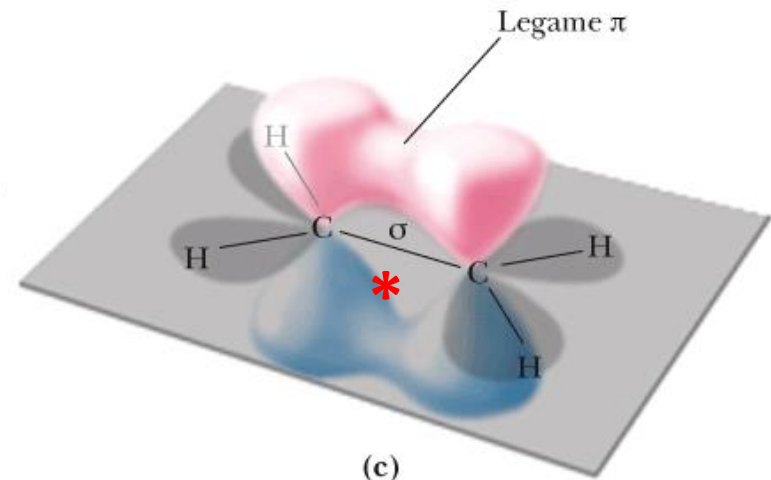
* **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione **FRONTALE** di due orbitali sp^2 .



(a)



(b)

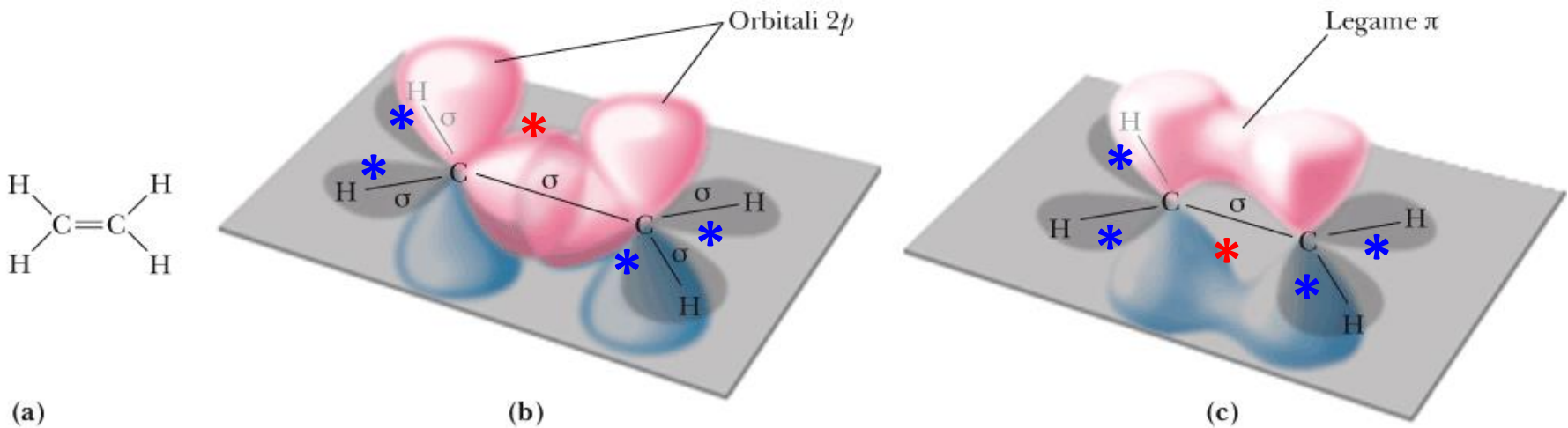


(c)

Esempio: etilene (C_2H_4).

* **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione **FRONTALE** di due orbitali sp^2 .

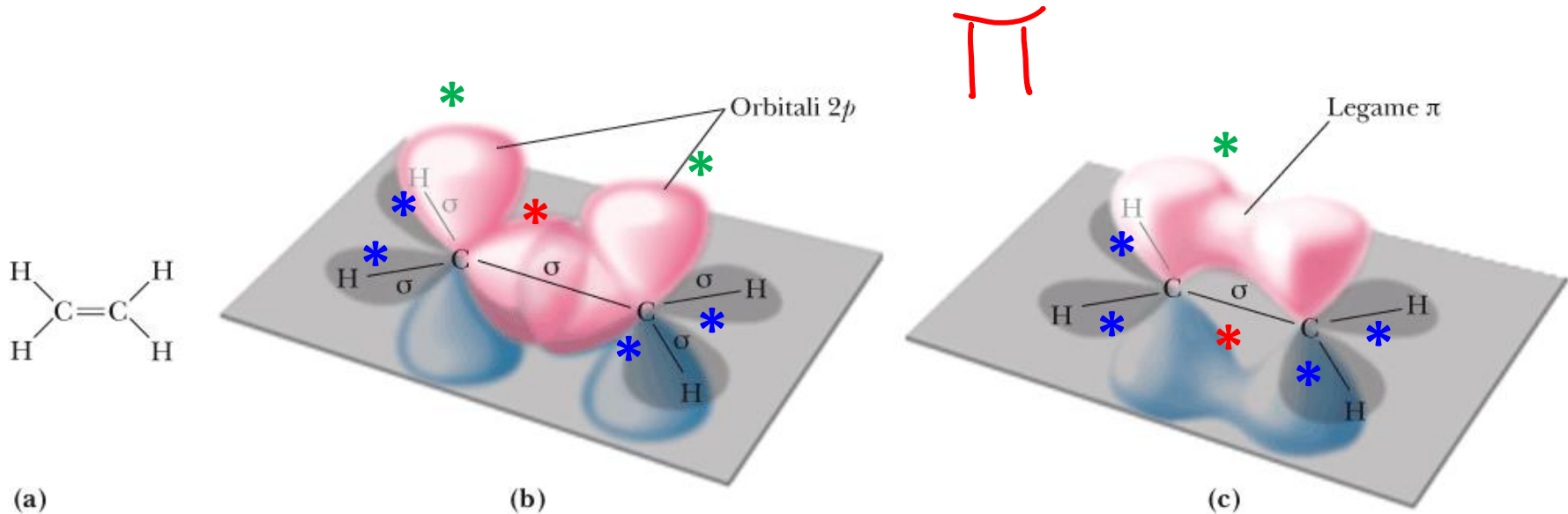
* **4 legami σ** carbonio-idrogeno: sovrapposizione **FRONTALE** di sp^2 -s.



Esempio: etilene (C_2H_4).

* **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione **FRONTALE** di due orbitali sp^2 .

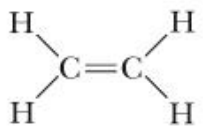
* **4 legami σ** carbonio-idrogeno: sovrapposizione **FRONTALE** di sp^2 -s.



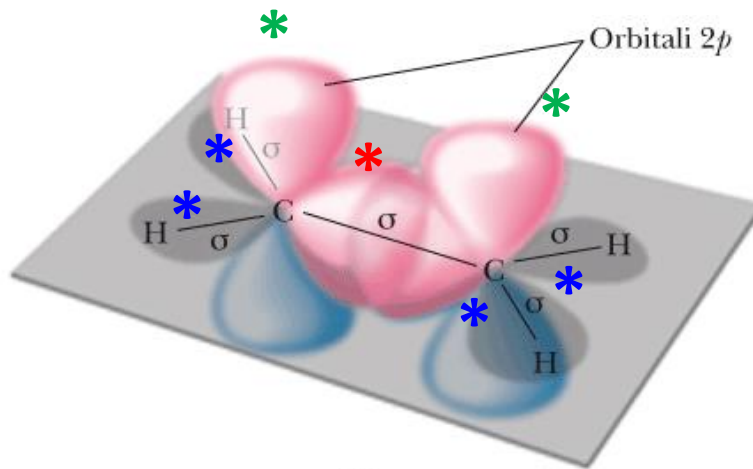
* **1 legame π** : sovrapposizione **LATERALE** dei due orbitali $2p$

Importante:

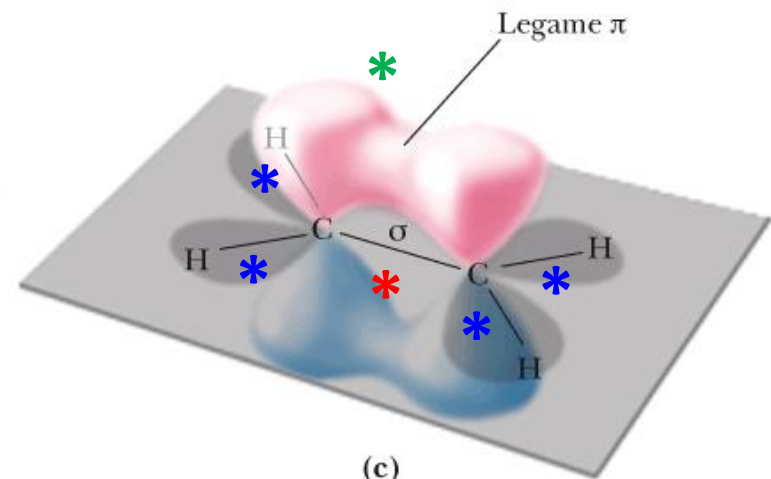
I legami σ (*, *) sono più forti dei legami π (*)



(a)



(b)



(c)

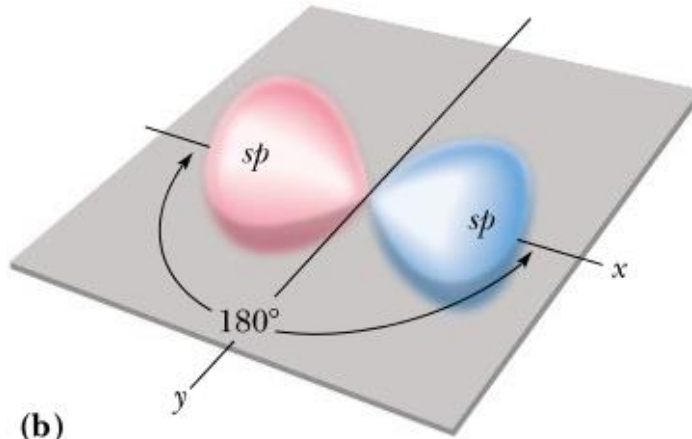
Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

gli orbitali *sp*

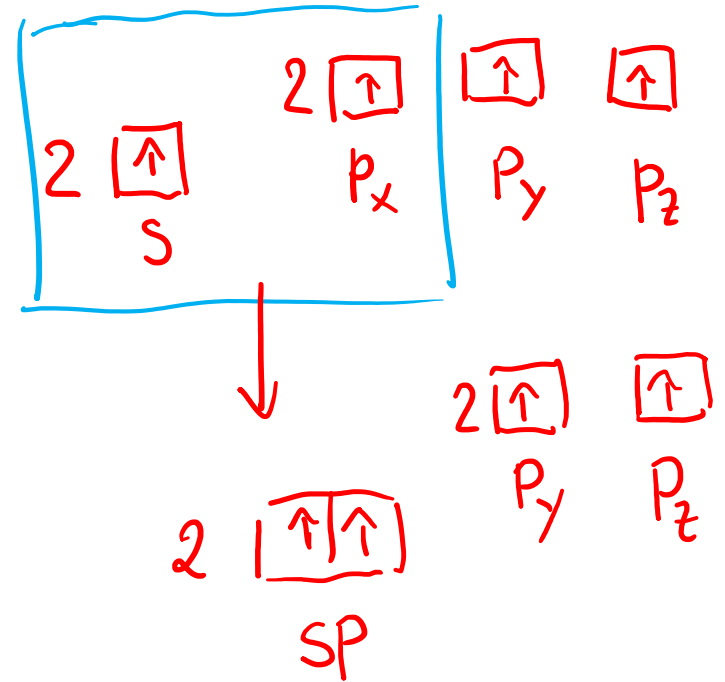
Combinazione di un orbitale atomico 2s e di un orbitale atomico 2p
Si ottengono **due orbitali ibridi *sp*** equivalententi.



(a)



(b)



Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

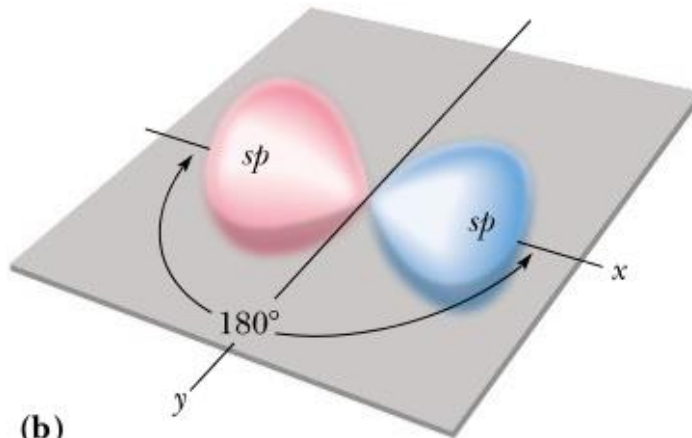
gli orbitali *sp*

Combinazione di un orbitale atomico 2s e di un orbitale atomico 2p
Si ottengono **due orbitali ibridi *sp*** equivalenti.

E i 2 orbitali 2p rimanenti?



(a)



(b)

Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

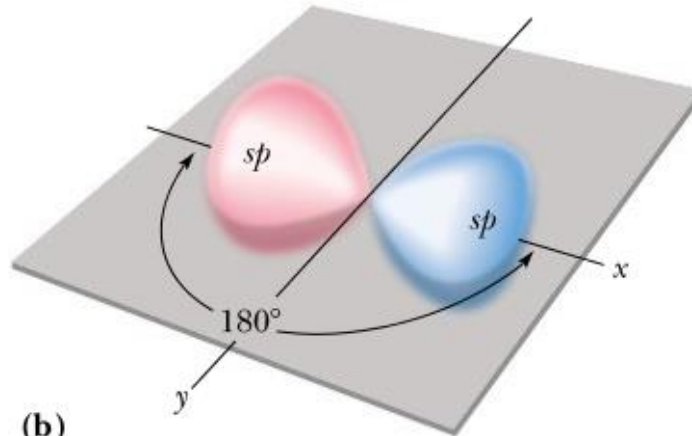
gli orbitali *sp*

Combinazione di un orbitale atomico $2s$ e di un orbitale atomico $2p$
Si ottengono **due orbitali ibridi *sp*** equivalententi.

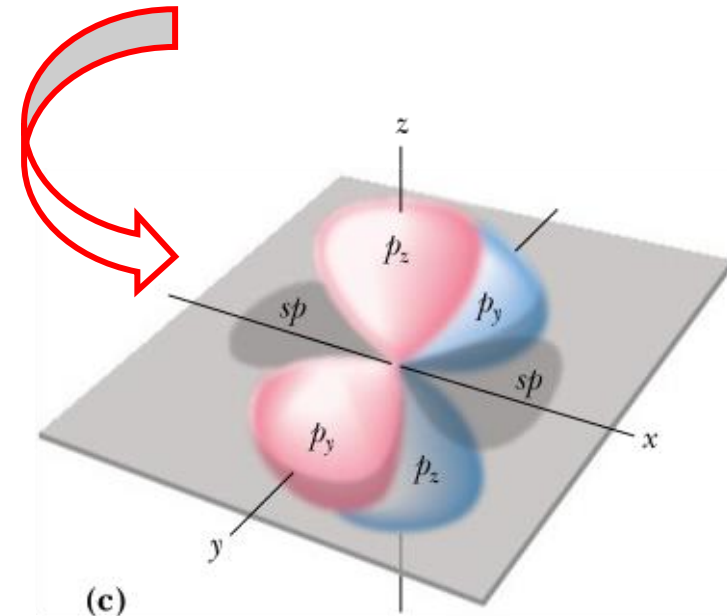
Rimangono non ibridati, perpendicolari tra loro e perpendicolari ai 2 orbitali *sp*.



(a)



(b)



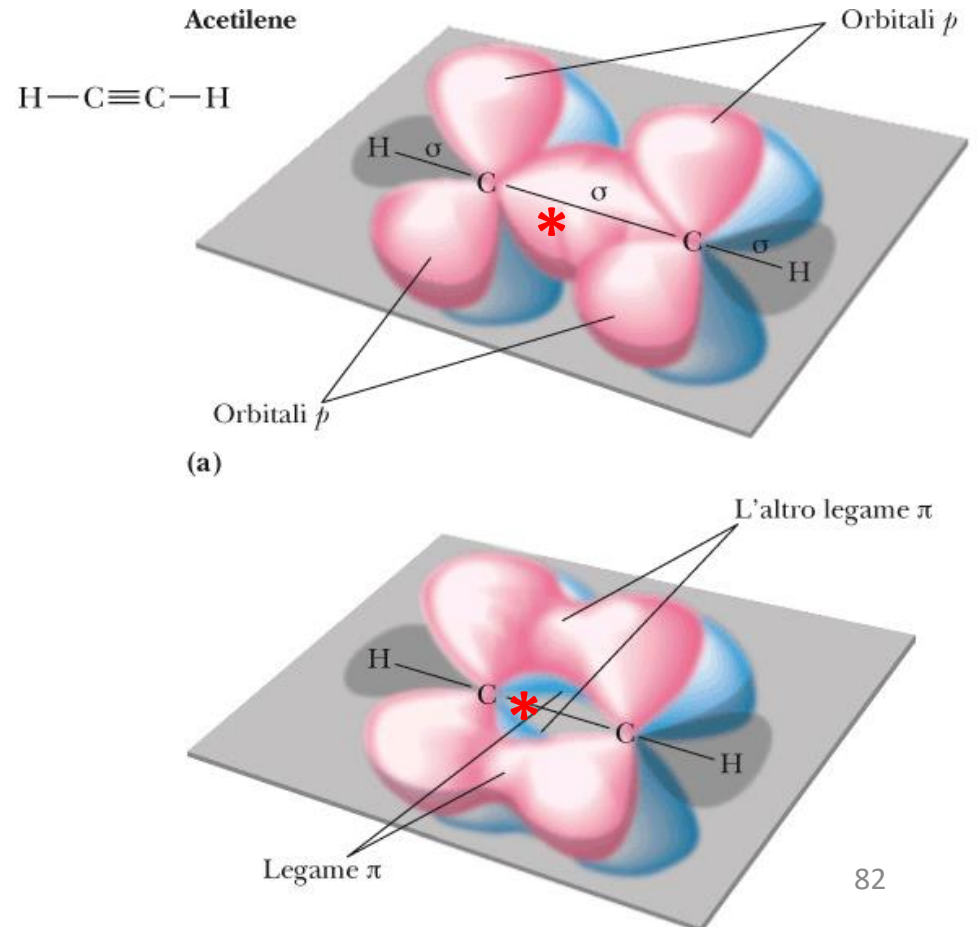
(c)

Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

gli orbitali *sp*

Esempio: l'acetilene (C_2H_2).

* **1 legame σ** carbonio-carbonio:
sovrapposizione di due orbitali
sp.



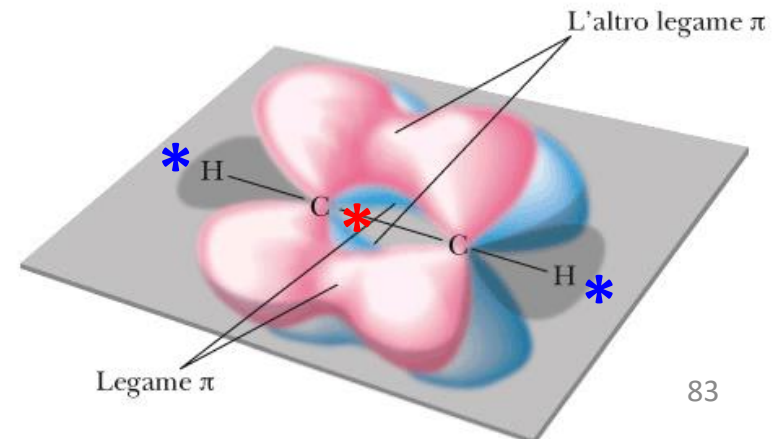
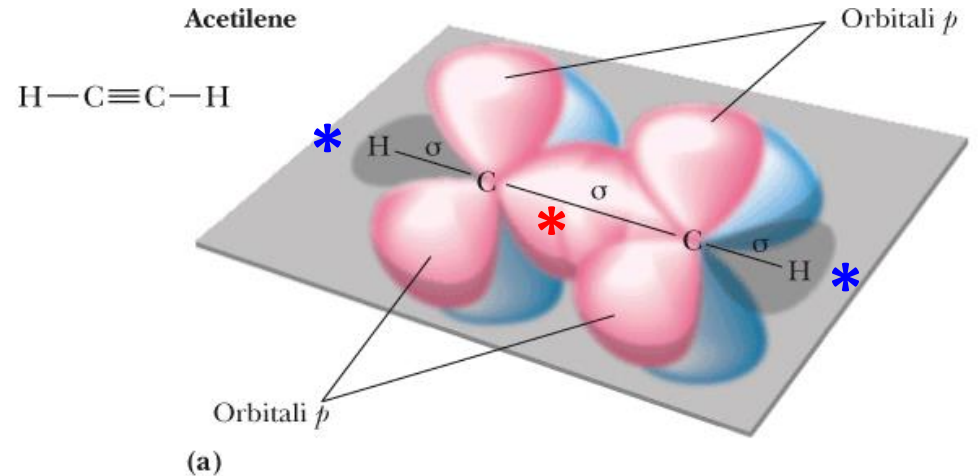
Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

gli orbitali *sp*

Esempio: l'acetilene (C_2H_2).

* **1 legame σ** carbonio-carbonio:
sovrapposizione di due orbitali *sp*.

* **2 legami σ** carbonio-idrogeno:
sovrapposizione *sp*-*s*.



Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

gli orbitali sp

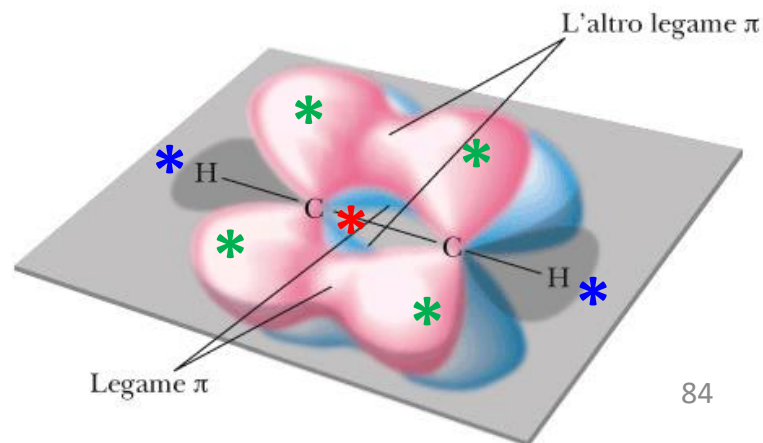
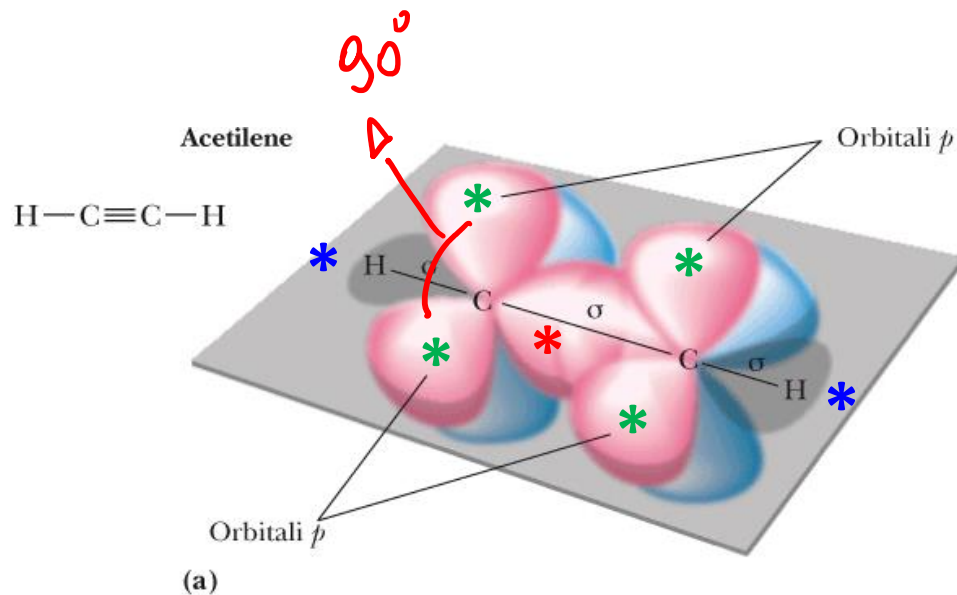
Esempio: l'acetilene (C_2H_2).

* **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione di due orbitali sp .

* **2 legami σ** carbonio-idrogeno: sovrapposizione $sp-s$.

* **2 legami π** : sovrapposizione dei due orbitali $2p$

NB: I due legami π sono perpendicolari tra loro e ai legami σ



4.1

- Cosa è una reazione chimica?

4.2

- Come si bilanciano le reazioni chimiche

4.3

- Come predire se gli ioni reagiscono tra loro in soluzione

4.4

- Cosa sono l'ossidazione e la riduzione

4.5

- Cosa sono il peso formula e il peso molecolare

4.6

- Cosa è la mole e come si usa

4.7

- Calcolare le relazioni di massa nelle reazioni

4.8

- Il calore di reazione

4.1

• Cosa è una reazione chimica?

In una trasformazione chimica, chiamata anche **reazione chimica**, uno o più **reagenti** (i materiali di partenza) si trasformano in uno o più **prodotti**.

Esempi di reazioni:

Accendere una candela,
cucinare,
mettiamo in moto un'auto,
ascoltiamo una radio portatile

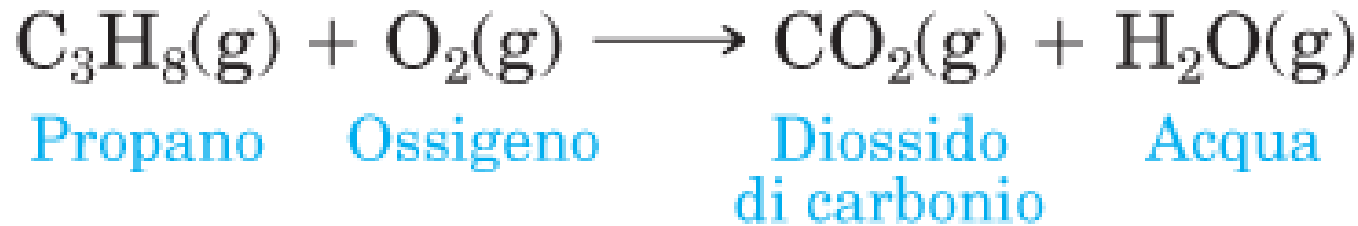
Prodotti chimici: la raffinazione del petrolio, generi alimentari, farmaci, plastiche, fibre sintetiche, fertilizzanti, esplosivi.....

4.2

- Come si bilanciano le reazioni chimiche

Il propano (GPL, gas da petrolio liquefatto), brucia nell'aria cioè reagisce con l'ossigeno dell'aria.

La reazione chimica si chiama **combustione**.



Reagenti

Equazione Chimica

Prodotti

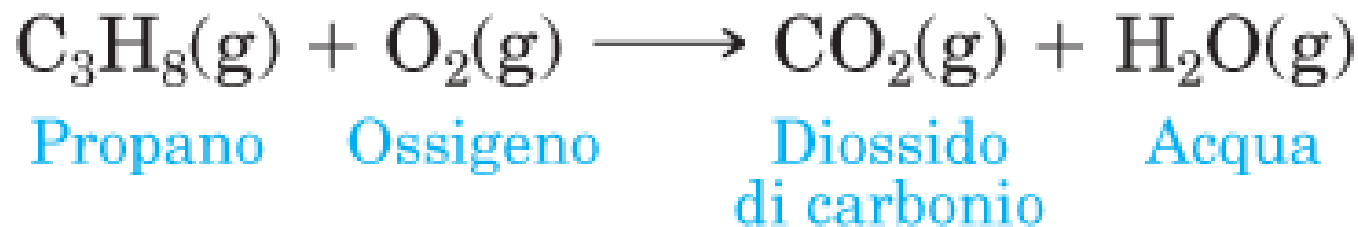


4.2

- Come si bilanciano le reazioni chimiche

Questa equazione chimica non è completa

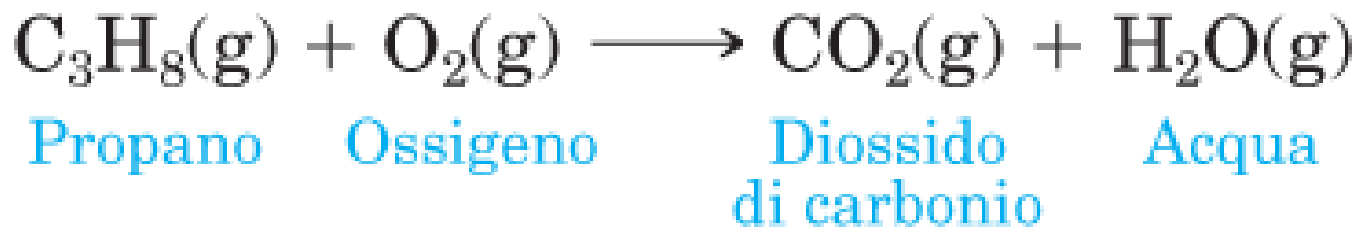
Non è bilanciata!

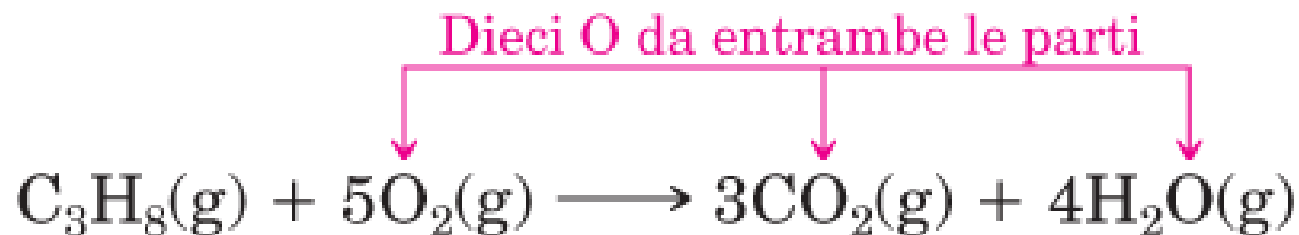


4.2

- Come si bilanciano le reazioni chimiche

Perché la reazione sia bilanciata dobbiamo avere lo stesso numero di atomi nella parte sinistra e destra della reazione



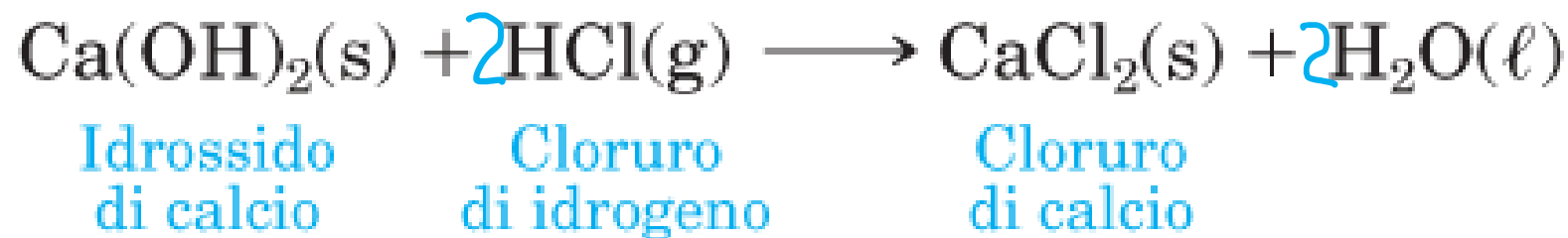


Propano



Questo bilanciamento è corretto?

Bilanciare le seguenti reazioni

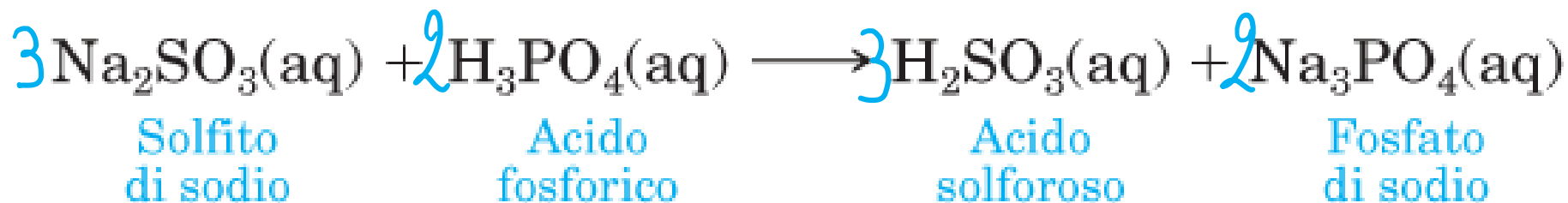


Bilanciare le seguenti reazioni



Butano

Bilanciare le seguenti reazioni



4.3

- Come predire se gli ioni reagiscono tra loro in soluzione

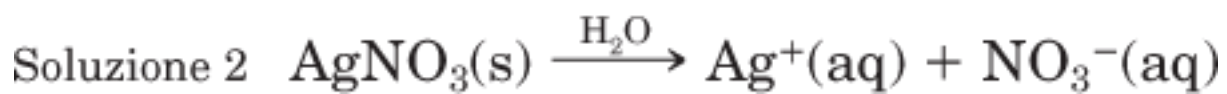
Molti composti ionici sono solubili in acqua.

Avviene il fenomeno di **dissociazione**: le molecole d'acqua separano gli ioni positivi da quelli negativi



Entrambi solubili in acqua
Separatamente





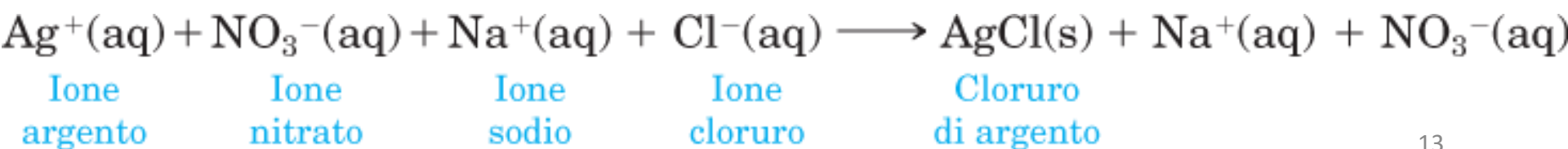
Se le due soluzioni
vengono mescolate
succede questo:



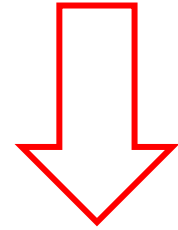
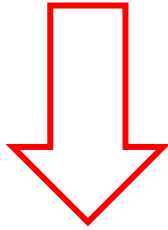
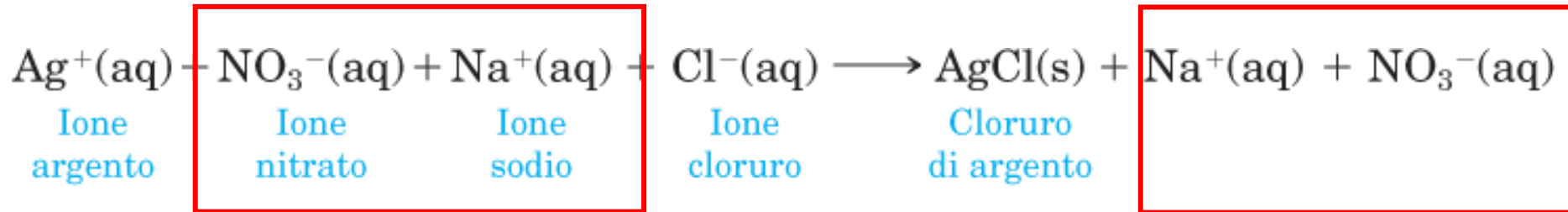
Charles Steele



In termini chimici

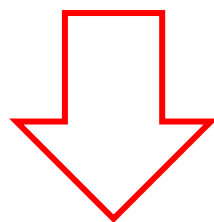
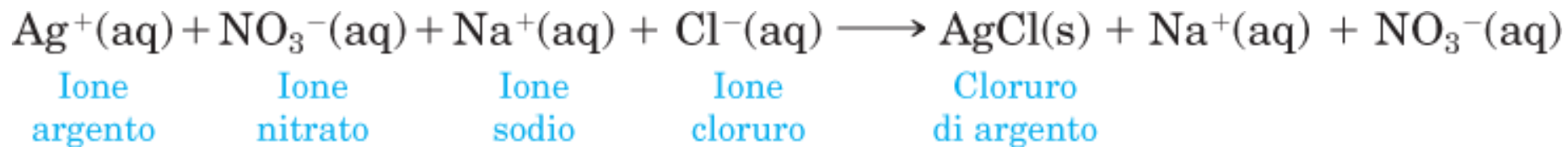


Importante:

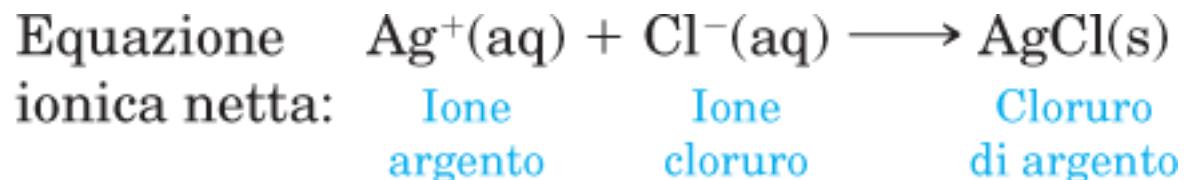
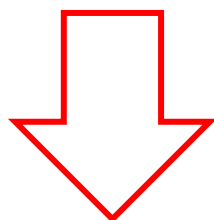


Compaiono invariati come reagenti e prodotti
Non subiscono modifiche
Chiamati: **IONI SPETTATORI**

Importante:



L'equazione viene semplificata **omettendo** gli ioni spettatori



Le **equazioni ioniche nette** devono essere **bilanciate**.

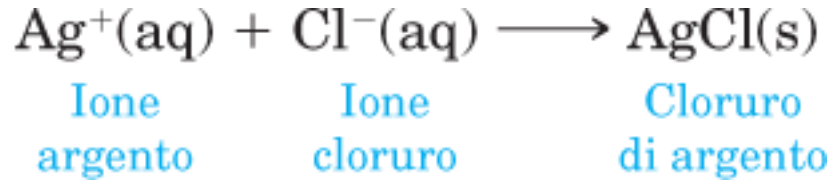
Valgono i criteri visti finora e BISOGNA considerare anche il **bilanciamento delle cariche**.

Es.



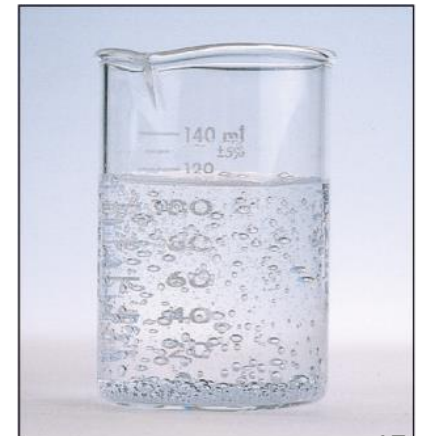
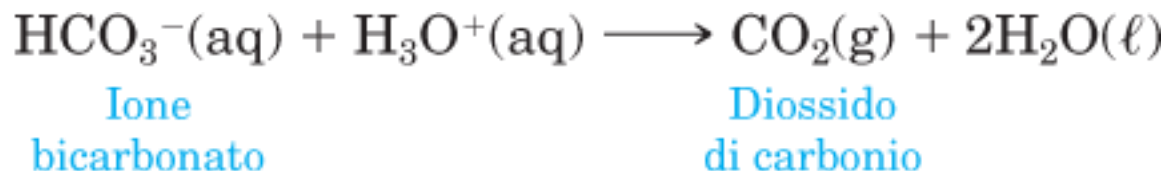
Quando gli ioni in soluzione reagiscono tra di loro si può verificare uno di questi eventi:

1. Due ioni formano un **solido** insolubile in acqua come AgCl

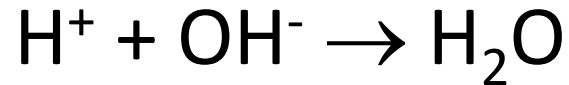


2. Due ioni formano un **gas** che fuoriesce dalla miscela di reazione sotto forma di bolle.

Es.



3. Un acido **neutralizza** una base.



4. Uno ione può ossidare l'altro: avviene una reazione di **ossido riduzione**.

In molti casi non avviene alcuna reazione

Per esempio, mescolando soluzioni di nitrato di rame (II), $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, e solfato di potassio, K_2SO_4 , si ottiene semplicemente una miscela di ioni Cu^{2+} , K^+ , NO_3^- e SO_4^{2-} disciolti in acqua.

Caso 1

Quando o con quali ioni può avvenire una **reazione ionica**?

Alcuni ioni tendono a dare composti solubili, altri no.

Tabella 4.1 Regole di solubilità per i composti ionici

Solitamente solubili

Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺,

Cs⁺, NH₄⁺

Nitrati, NO₃⁻

Cloruri, bromuri,

ioduri, Cl⁻, Br⁻, I⁻

Tutti i sali del Gruppo 1A (metalli alcalini) e i sali d'ammonio sono solubili.

Tutti i nitrati sono solubili.

Tutti i comuni cloruri, bromuri e ioduri sono solubili, eccetto AgCl, Hg₂Cl₂, PbCl₂, AgBr, Hg₂Br₂, PbBr₂, AgI, Hg₂I₂, PbI₂.

Solfati, SO₄²⁻

La maggior parte dei solfati sono solubili, eccetto CaSO₄, SrSO₄, BaSO₄, PbSO₄.

Acetati, CH₃COO⁻

Tutti gli acetati sono solubili.

Caso 1

Quando o con quali ioni può avvenire una **reazione ionica**?

Alcuni ioni tendono a dare composti solubili, altri no.

Solitamente insolubili

Fosfati, PO_4^{3-}

Tutti i fosfati sono insolubili, eccetto quelli di NH_4^+ e dei cationi del Gruppo 1A (metalli alcalini).

Carbonati, CO_3^{2-}

Tutti i carbonati sono insolubili, eccetto quelli di NH_4^+ e dei cationi del Gruppo 1A (metalli alcalini).

Idrossidi, OH^-

Tutti gli idrossidi sono insolubili, eccetto quelli di NH_4^+ e dei cationi del Gruppo 1A (metalli alcalini). $\text{Sr}(\text{OH})_2$, $\text{Ba}(\text{OH})_2$ e $\text{Ca}(\text{OH})_2$ sono scarsamente solubili.

Solfuri, S^{2-}

Tutti i solfuri sono insolubili, eccetto quelli di NH_4^+ e dei cationi del Gruppo 1A (metalli alcalini) e del Gruppo 2A. MgS , CaS e BaS sono scarsamente solubili.