

Lezione 5

3.10

- Predizione degli angoli di legame

3.11

- Natura polare delle molecole

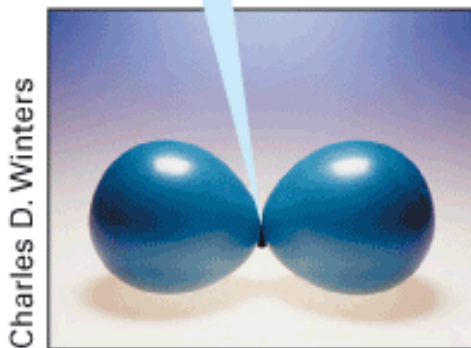
Come prevedere gli angoli di legame, la geometria di ogni atomo e la forma delle molecole

- 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

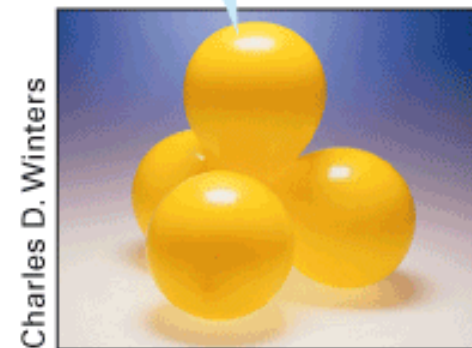


(a) Lineare

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

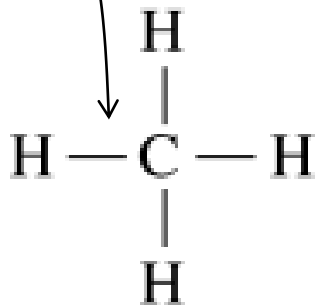
Geometria tetraedrica (angoli di 109.5°):

metano (CH_4), ammoniaca (NH_3) e acqua (H_2O).

Molecola simmetrica: METANO

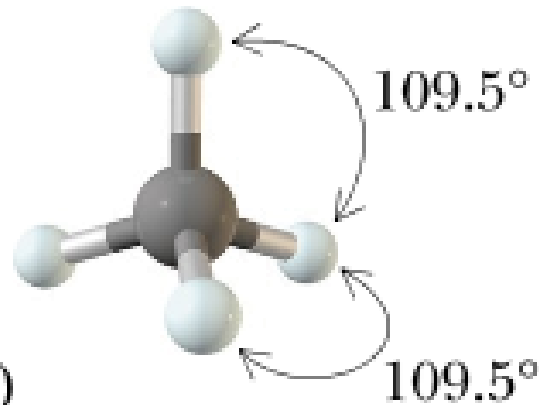
Disposizione
geometrica ottimale

4 legami
equivalenti



(a)

Struttura di Lewis



(b)

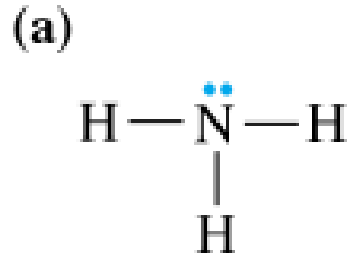
Tetraedro

Tetraedrica

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

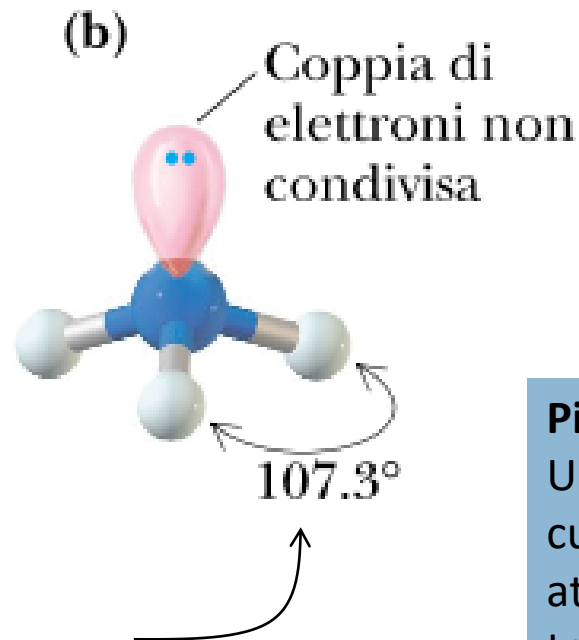
Ammoniaca

orbitali NON
equivalenti



Struttura di Lewis

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



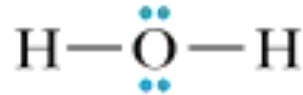
Piramidale

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

N.B.: $\neq 109.5$

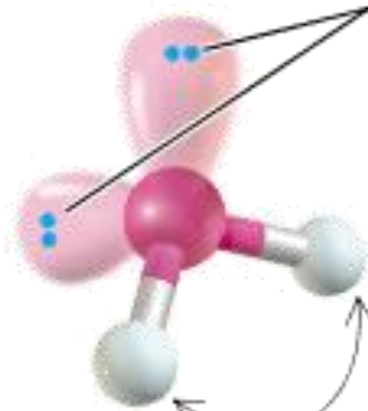
H₂O

(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.: $\neq 109.5$

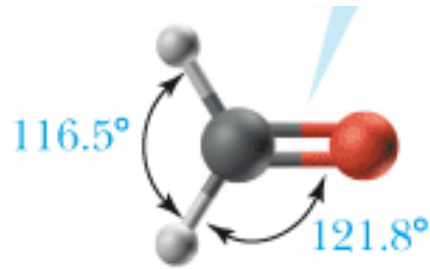
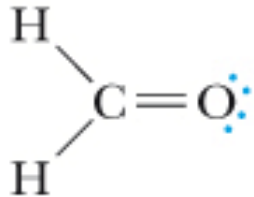
E se la molecola ha un doppio legame?

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

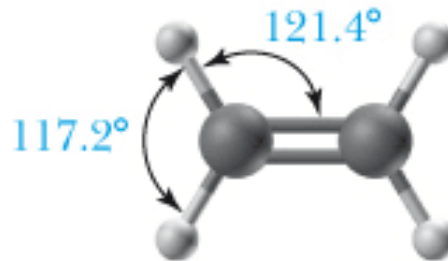
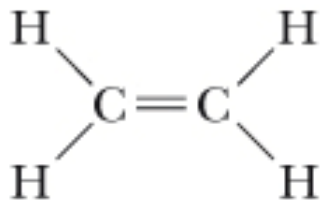


Vista dall'alto



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



Vista di lato



Vista dall'estremità

(b)

Acetilene



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)

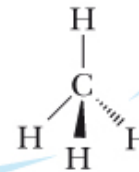
un legame a forma di cuneo tratteggiato rappresenta un legame che si proietta dentro il piano della pagina

4

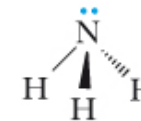
Tetraedrica

109.5°

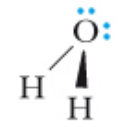
un legame a forma di cuneo pieno rappresenta un legame che si proietta al di fuori del piano della pagina



Metano (tetraedrica)



Ammoniaca (piramidale)

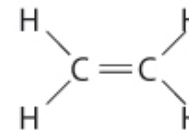


Acqua (piegata)

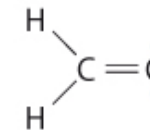
3

Trigonale planare

120°



Etilene (planare)

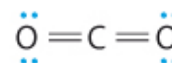


Formaldeide (planare)

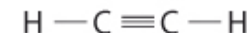
2

Lineare

180°



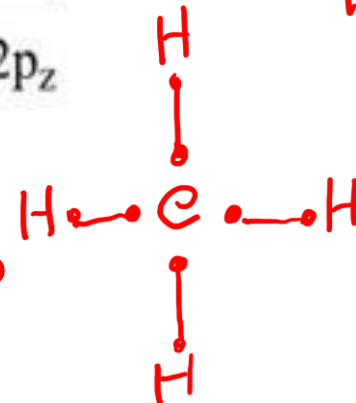
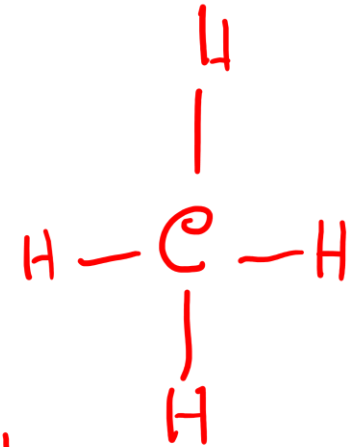
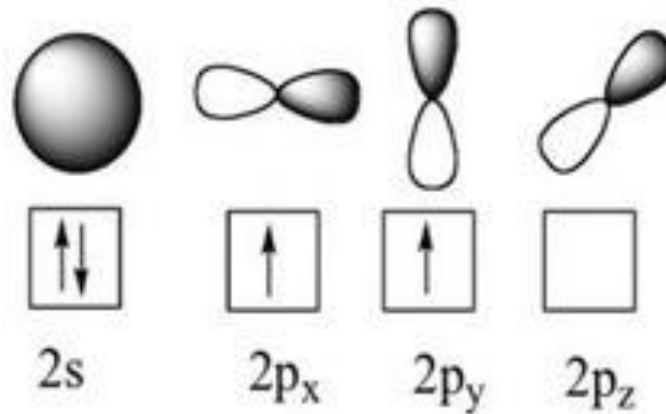
Anidride carbonica (lineare)



Acetilene (lineare)

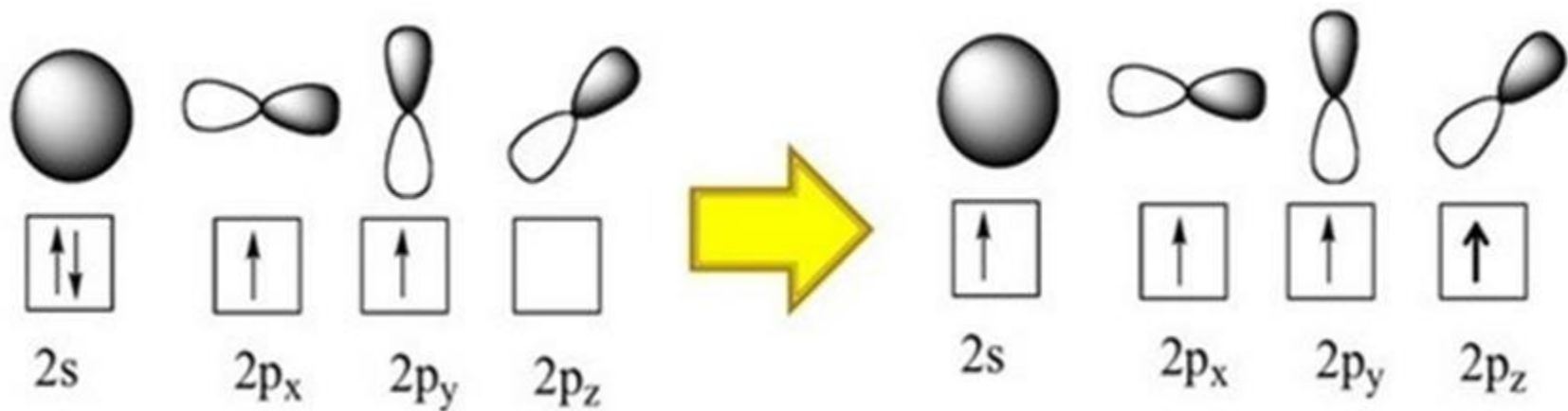
Problema:

- 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?

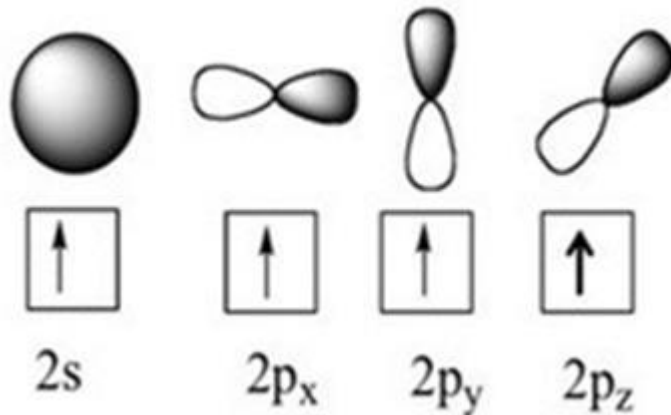


Il trasferimento dell'elettrone dal 2s al 2p è **VANTAGGIOSO**

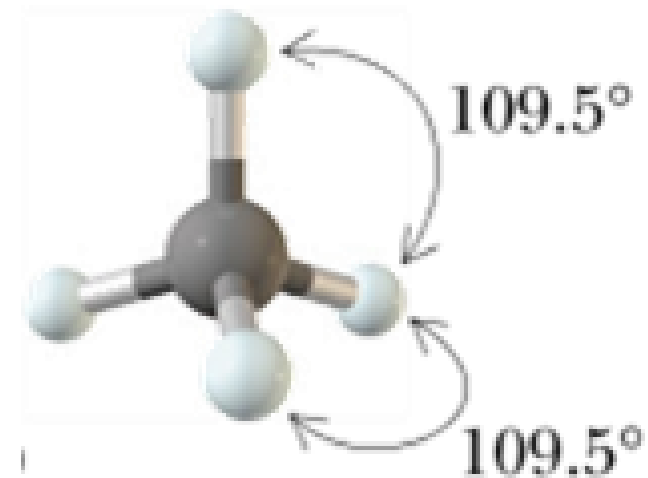
Opportunità di formare 4 legami

Problema 2:

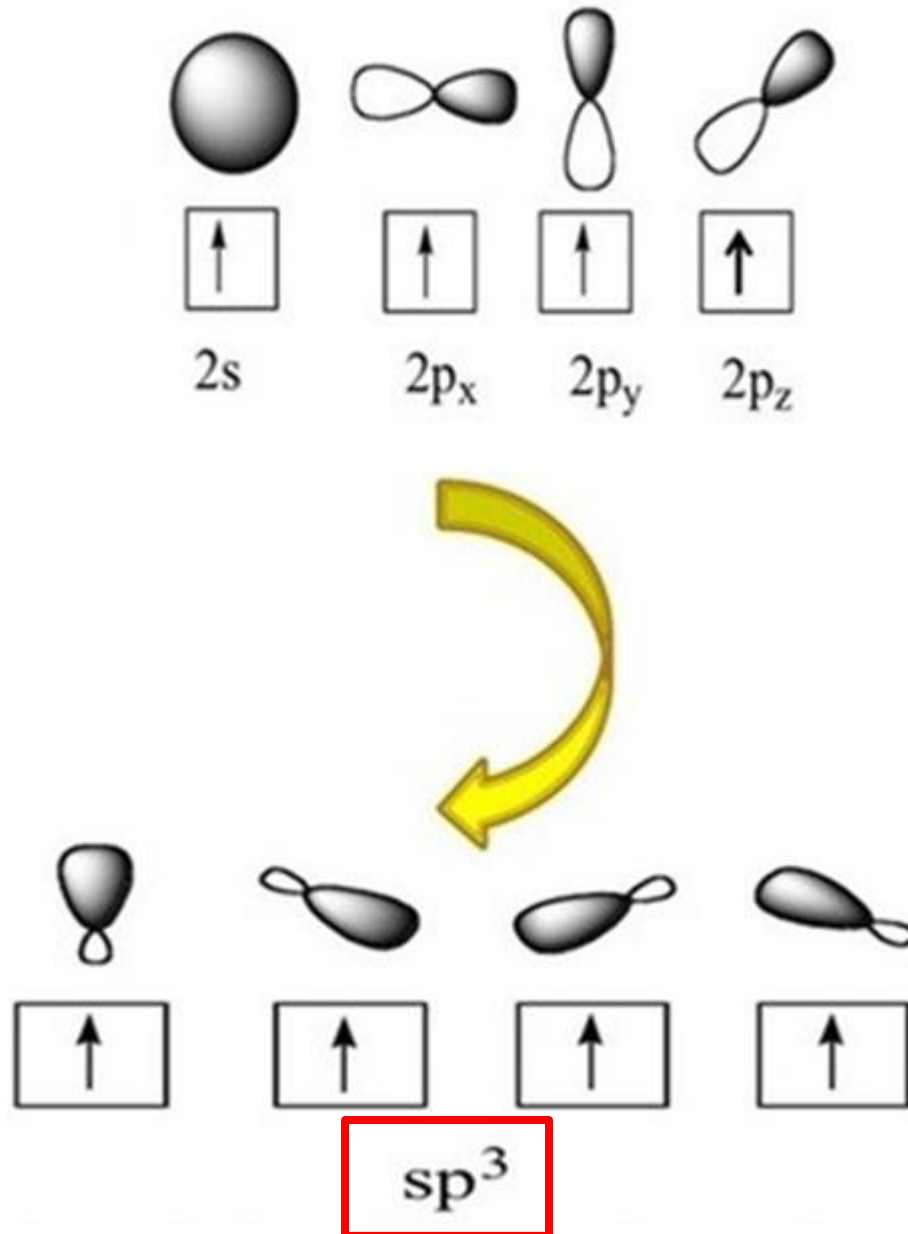
- Il carbonio ha configurazione elettronica
 - $1s^2 2s^2 2p^3$
- Nel guscio di valenza abbiamo



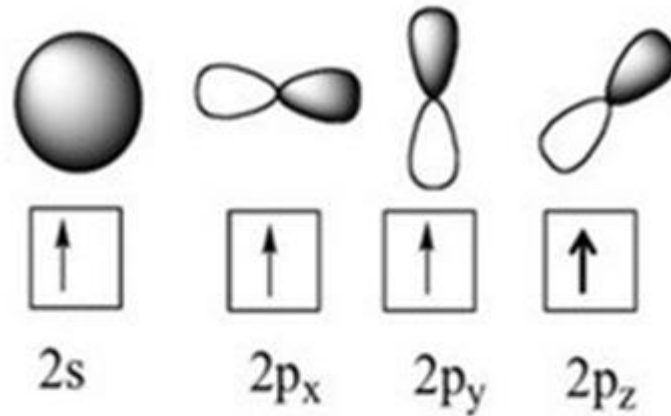
Gli orbitali $2s$ e $2p$ hanno forme diverse ma CH_4 è tetraedrico!



AVVIENE IL PROCESSO DI **IBRIDAZIONE** degli orbitali

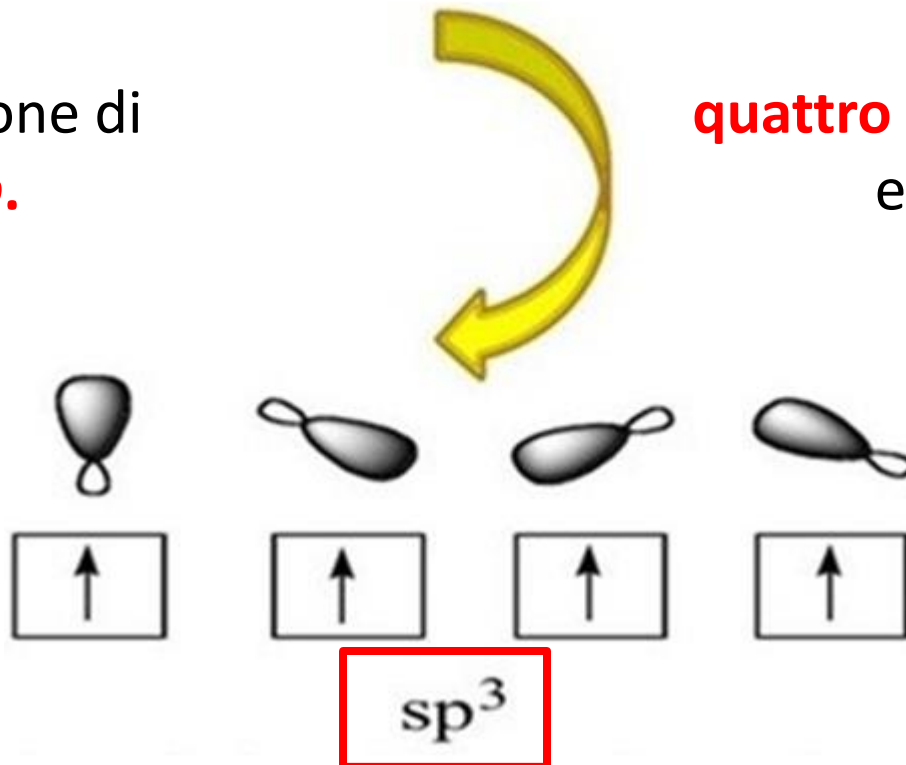


AVVIENE IL PROCESSO DI **IBRIDAZIONE** degli orbitali



sp^3 : combinazione di un **s** e tre **p**.

quattro orbitali ibridi sp^3 equivalenti



Linus Pauling propose che:

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

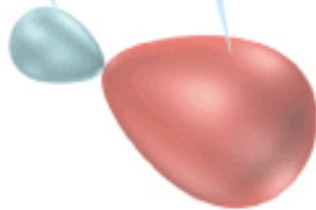
Mescolanza di orbitali s e p
esistono tre tipi: **sp^3 , sp^2 e sp** ,
ciascuno contiene al massimo **due elettroni**.

La disposizione segue le regole VSEPR

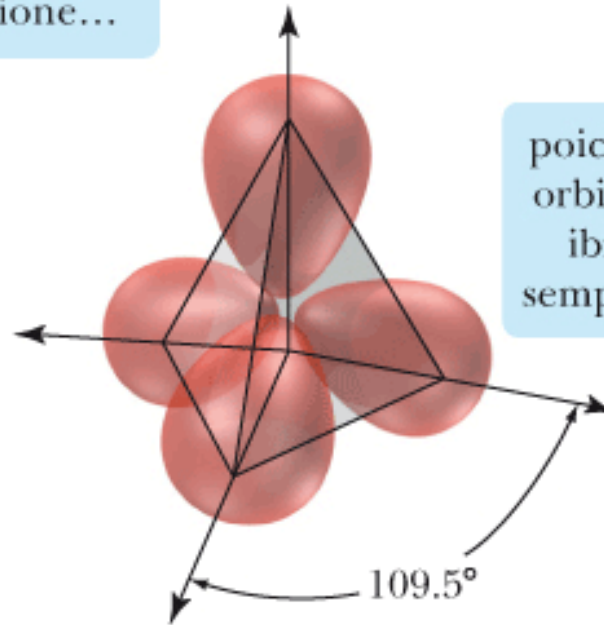
Caso del metano, CH₄: Tetraedro perfetto

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

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



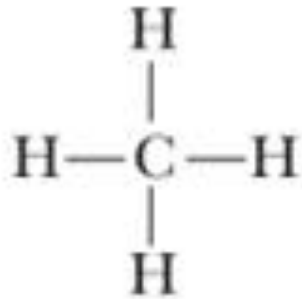
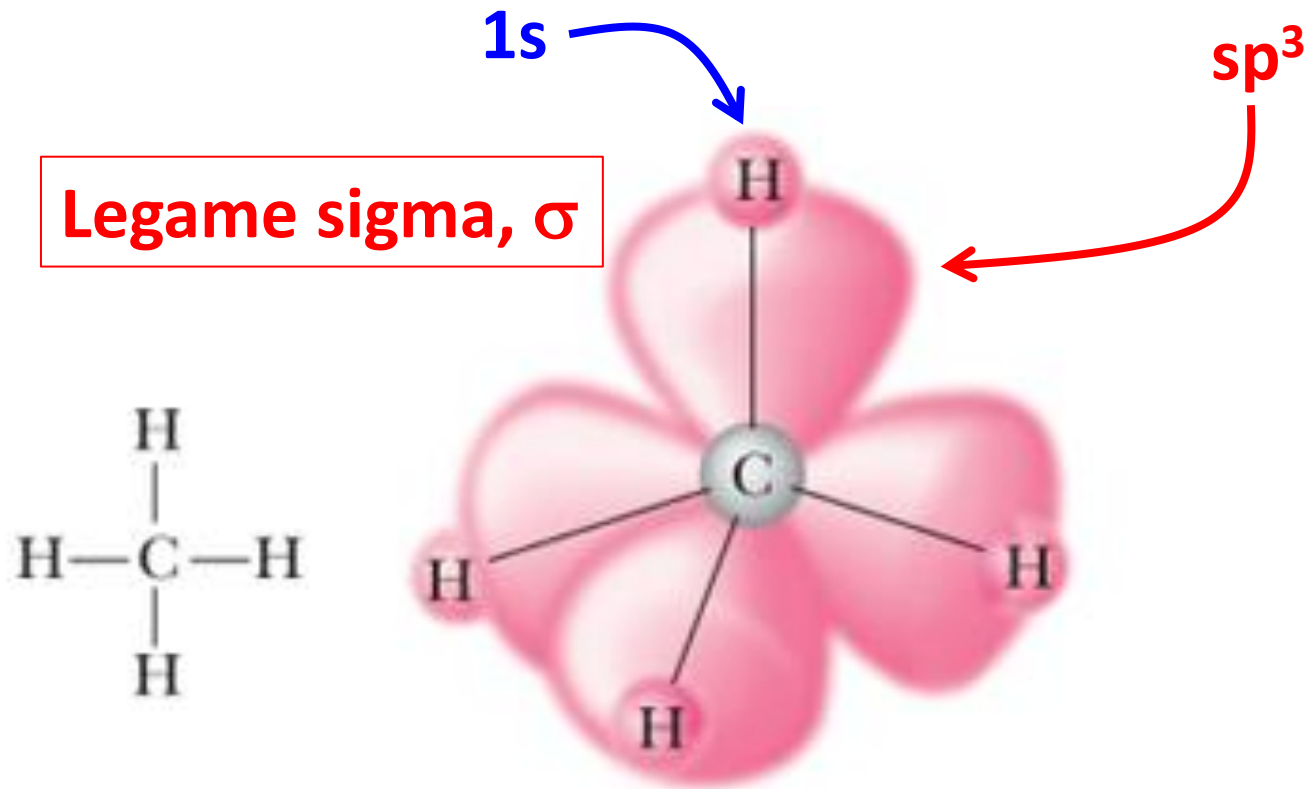
(a) Un orbitale sp^3



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

(b) Quattro orbitali tetraedrici sp^3

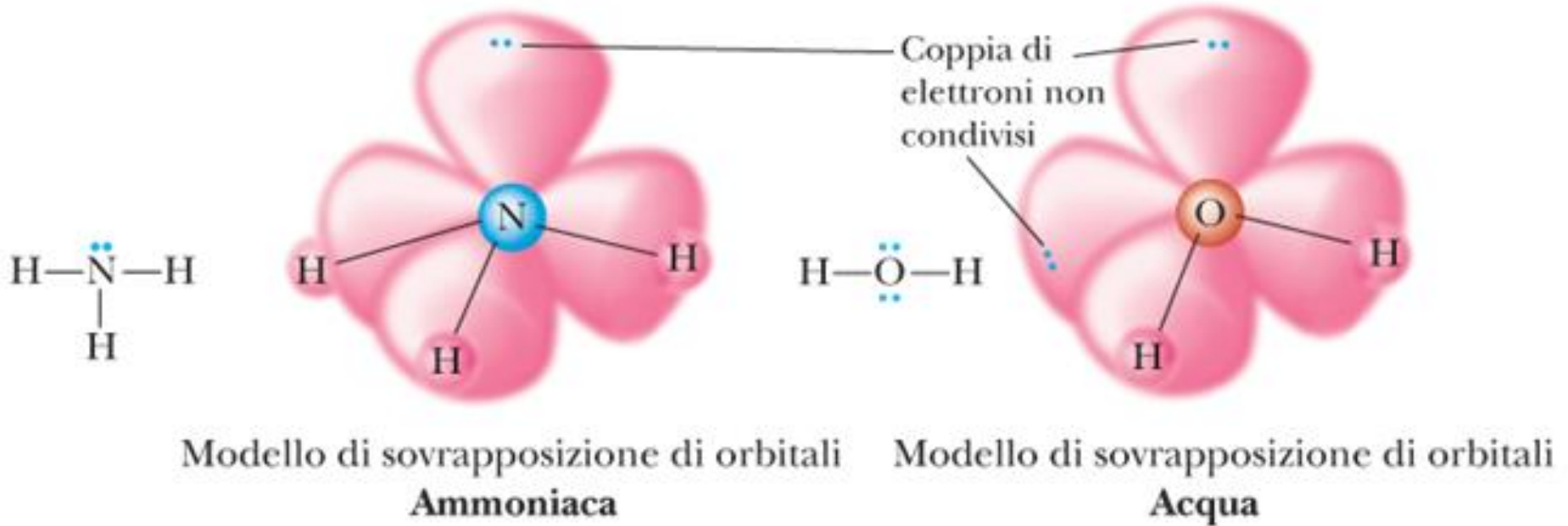
Sovrapposizione 1s – sp³



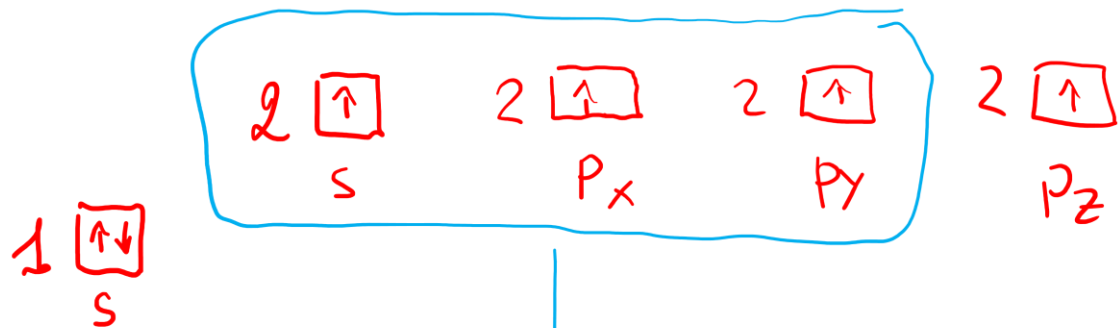
Modello di sovrapposizione di orbitali
Metano

Legame sigma, σ

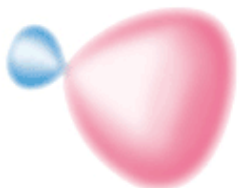
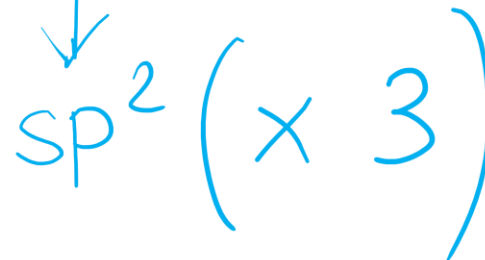
Sovrapposizione $1s - sp^3$



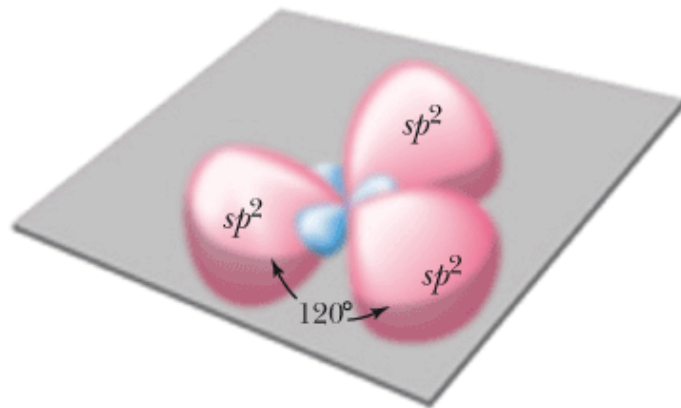
gli orbitali sp^2



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



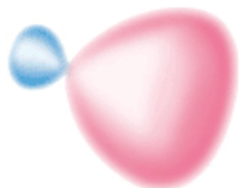
(a) Un orbitale sp^2



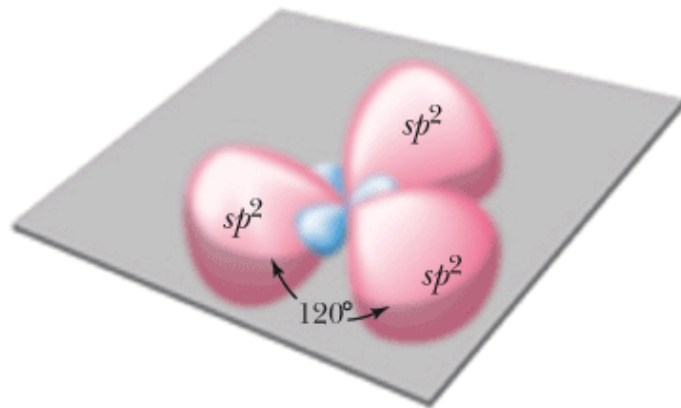
(b) Tre orbitali sp^2

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



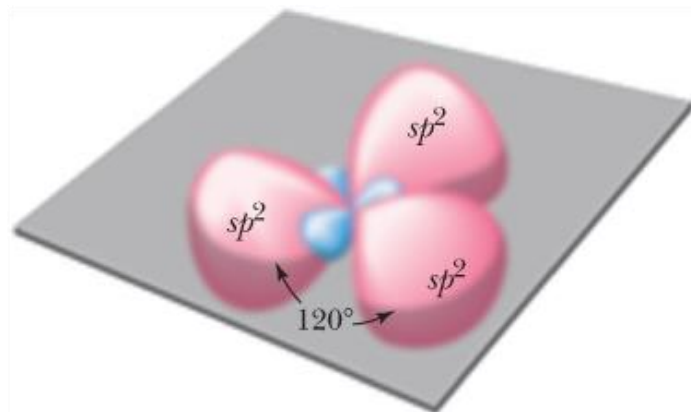
(b) Tre orbitali sp^2

E il terzo orbitale p?

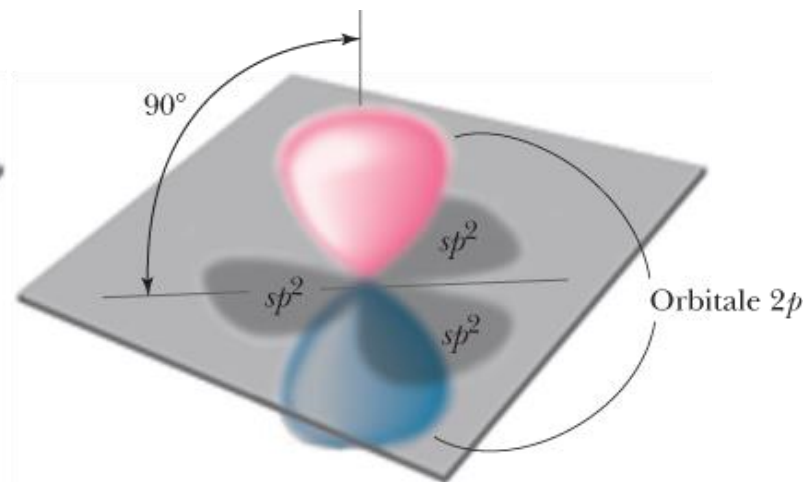
Il terzo orbitale atomico $2p$ non è coinvolto nell'ibridazione
consiste di due lobi perpendicolari al piano individuato dai tre sp^2 .



(a) Un orbitale sp^2



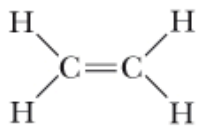
(b) Tre orbitali sp^2



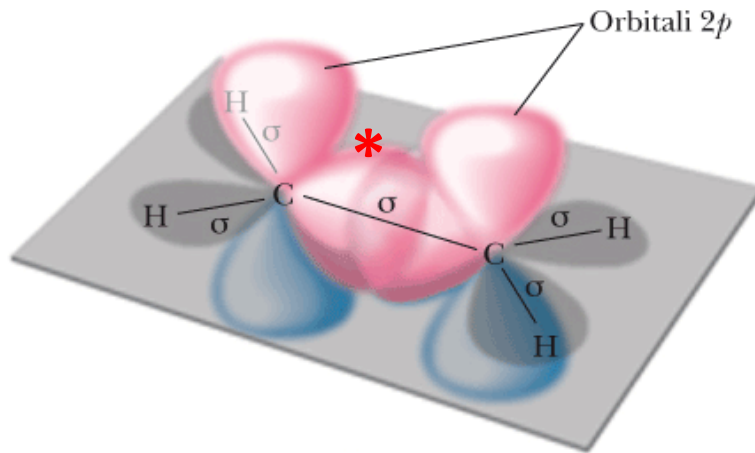
(c) Tre orbitali sp^2 e un orbitale $2p$ non ibridato

Esempio: etilene (C_2H_4).

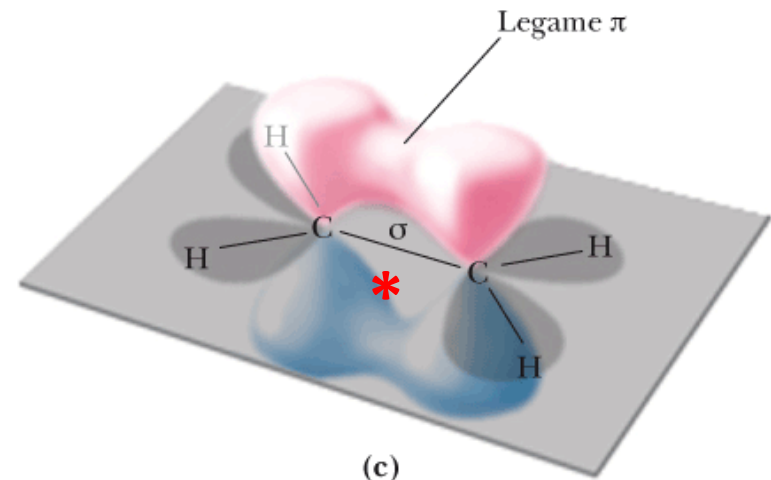
* **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione **FRONTALE** di due orbitali sp^2 .



(a)



(b)

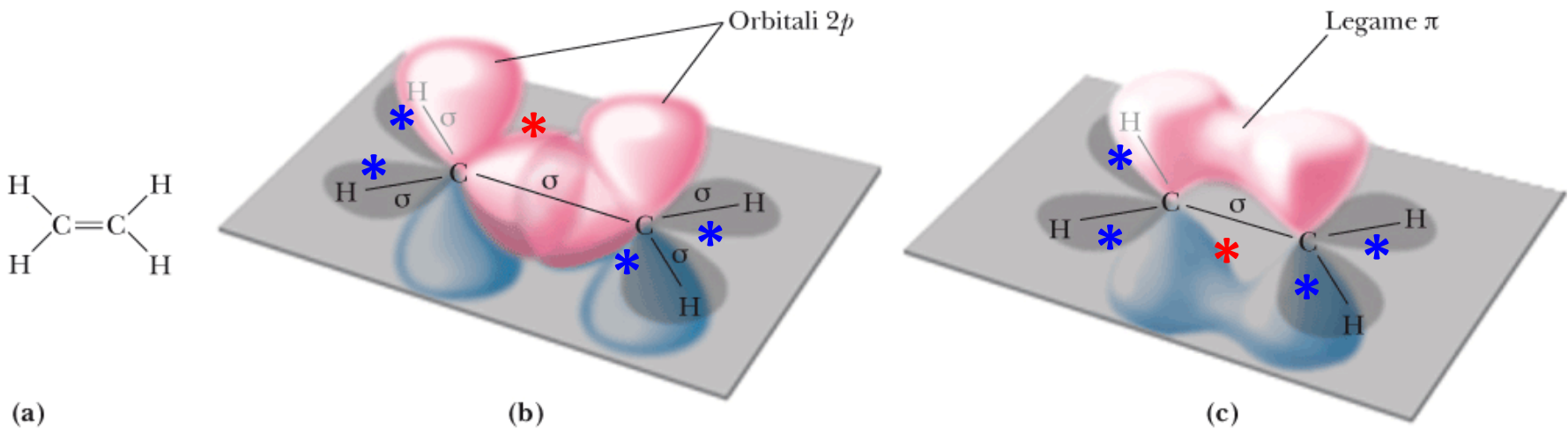


(c)

Esempio: etilene (C_2H_4).

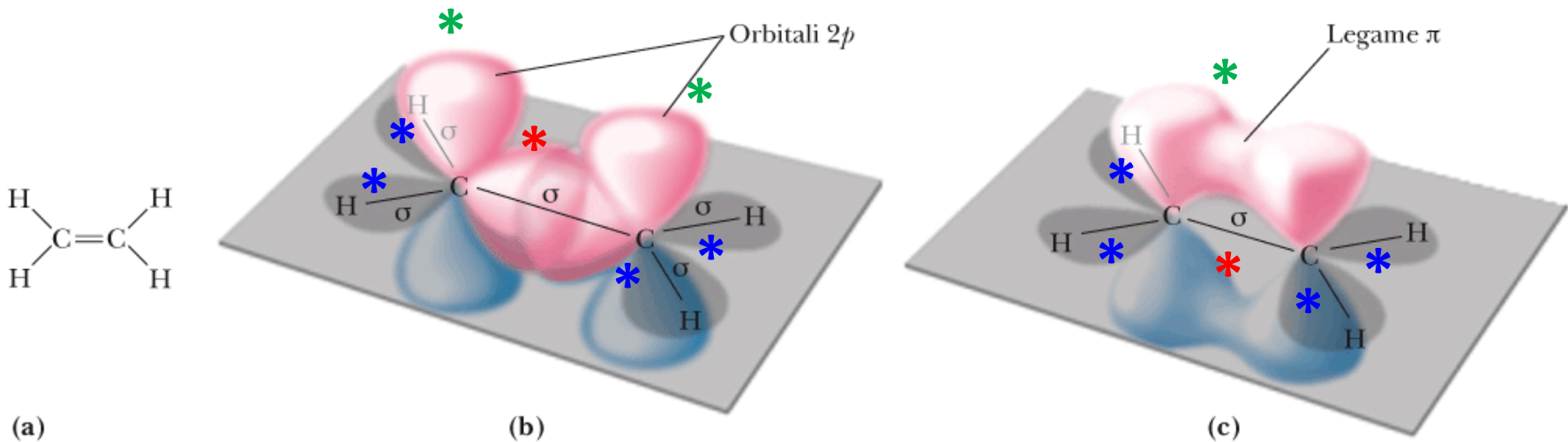
* **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione **FRONTALE** di due orbitali sp^2 .

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



Esempio: etilene (C_2H_4).

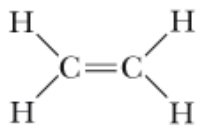
- * **1 legame σ** carbonio-carbonio: sovrapposizione **FRONTALE** di due orbitali sp^2 .
- * **4 legami σ** carbonio-idrogeno: sovrapposizione **FRONTALE** di sp^2 -s.



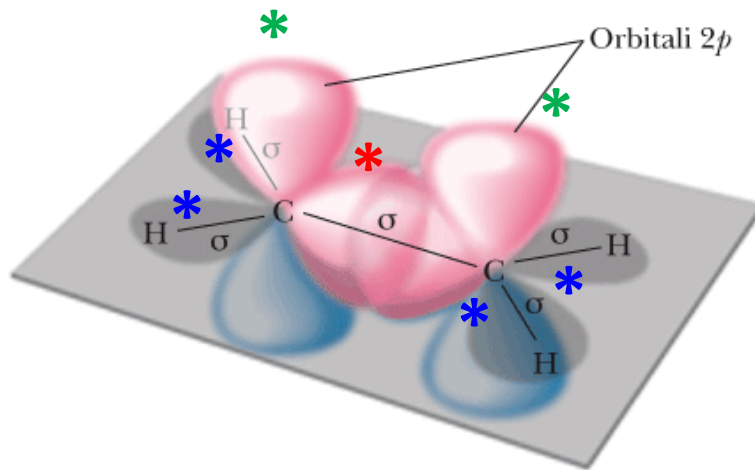
- * **1 legame π** : sovrapposizione **LATERALE** dei due orbitali 2p

Importante:

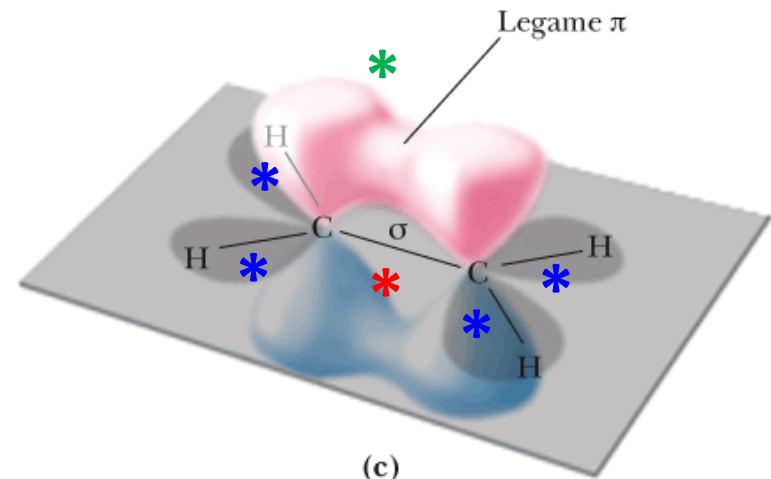
I legami σ (*, *) sono più forti dei legami π (*)



(a)

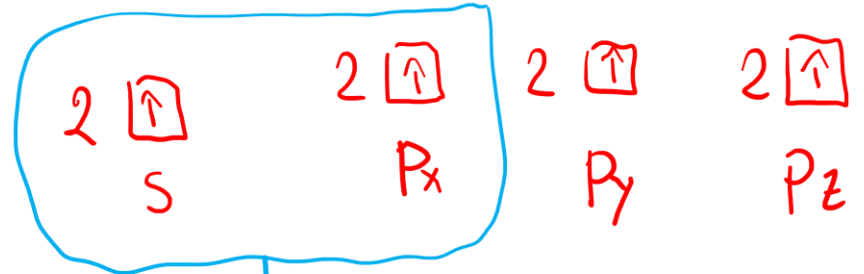


(b)



(c)

gli orbitali *sp*

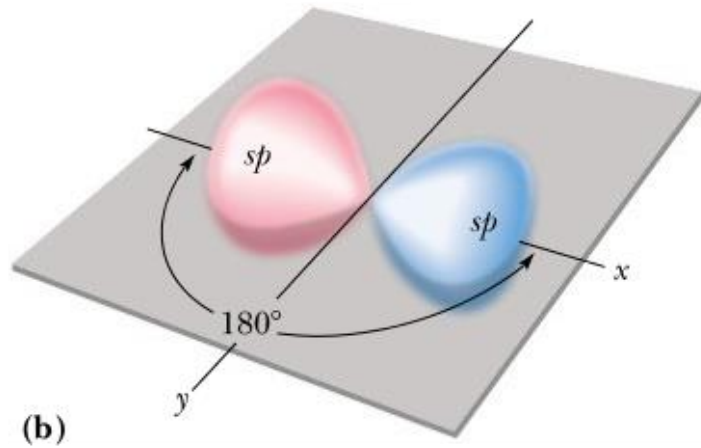


Combinazione di un orbitale atomico 2s e di un orbitale atomico 2p
Si ottengono **due orbitali ibridi *sp*** equivalenti.

sp x 2



(a)



(b)

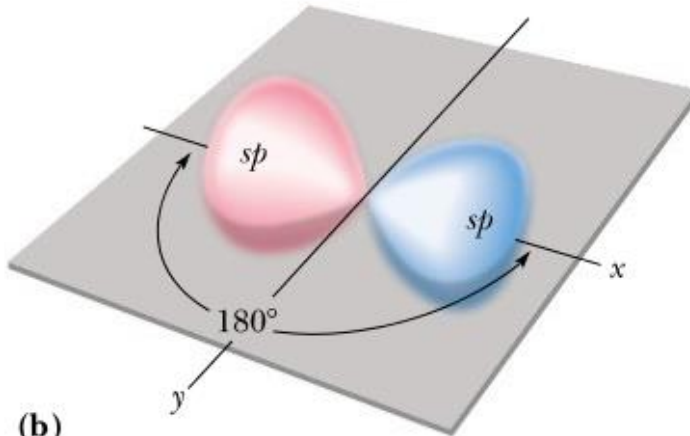
gli orbitali *sp*

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)

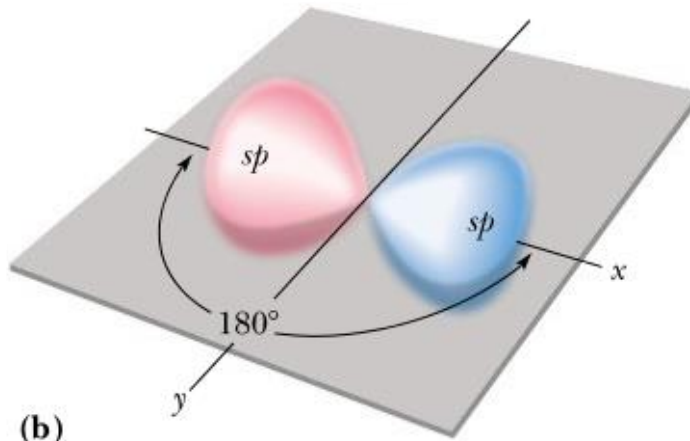
gli orbitali *sp*

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

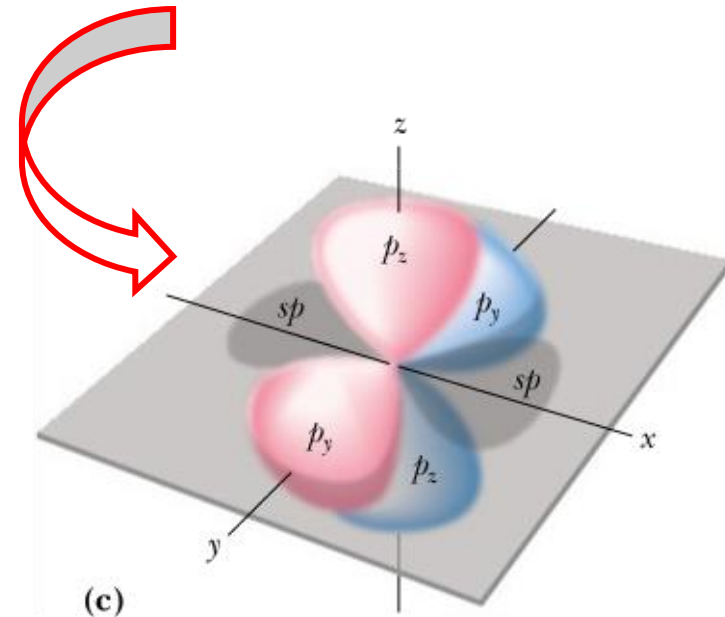
Rimangono non ibridati, perpendicolari tra loro e perpendicolari ai 2 orbitali *sp*.



(a)



(b)



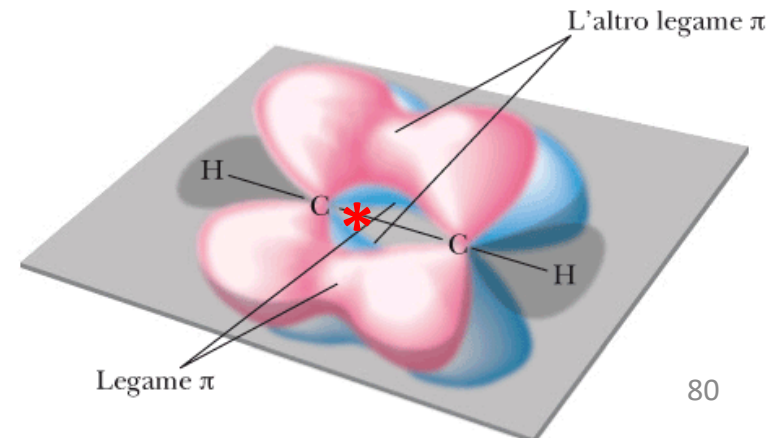
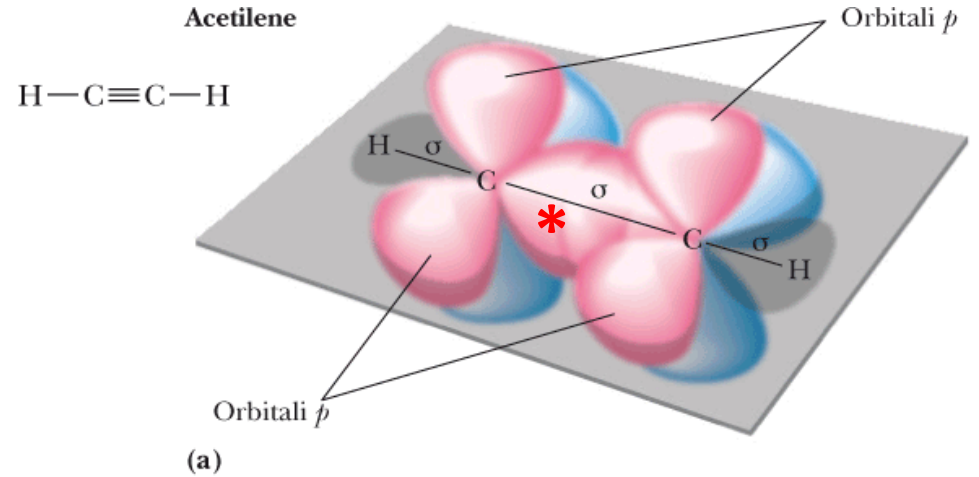
(c)

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.



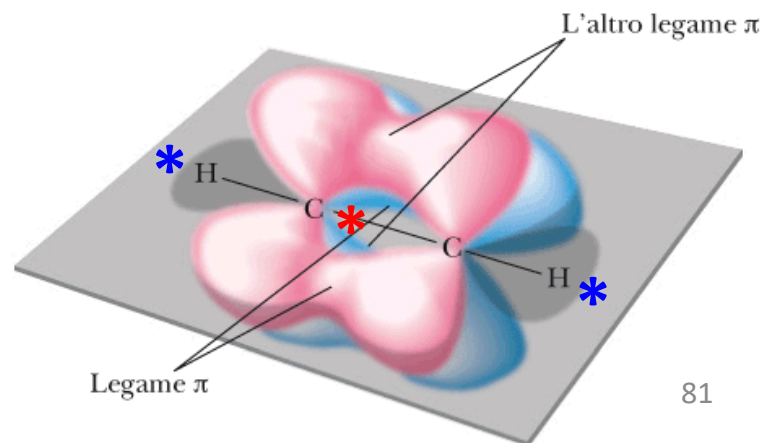
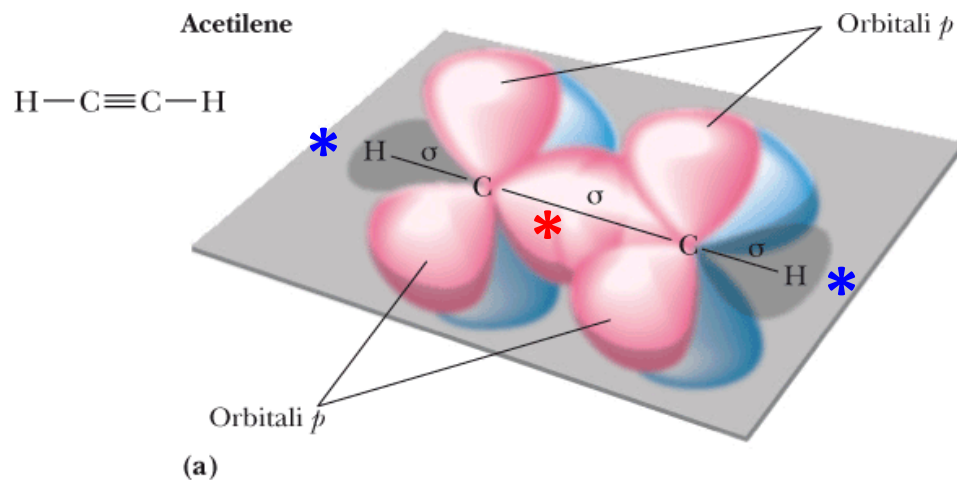
Formazione di un legame covalente per sovrapposizione di orbitali atomici

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

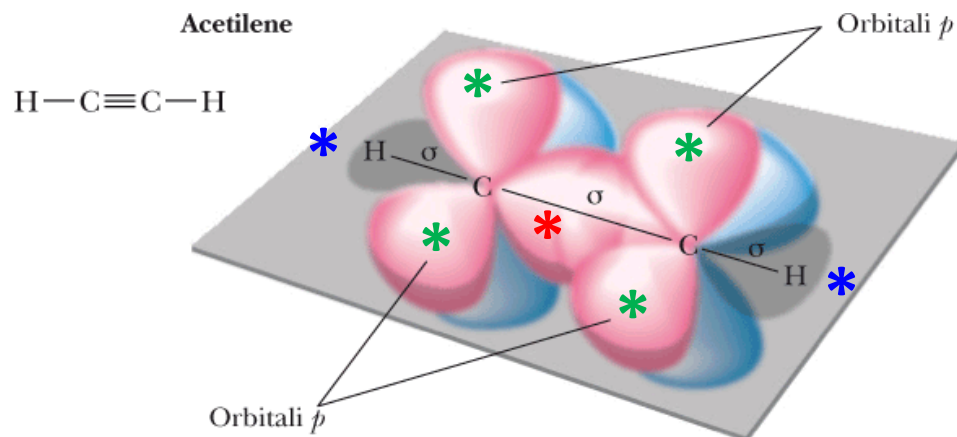
Esempio: l'acetilene (C_2H_2).

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

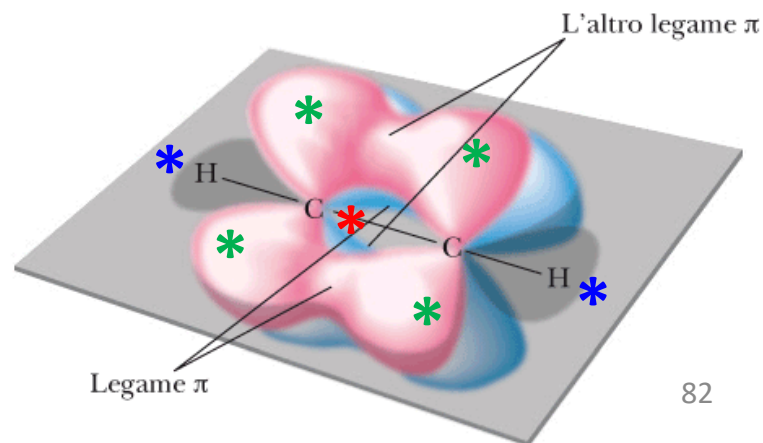
* **2 legami σ** carbonio-idrogeno: sovrapposizione $sp-s$.

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

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



(a)



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

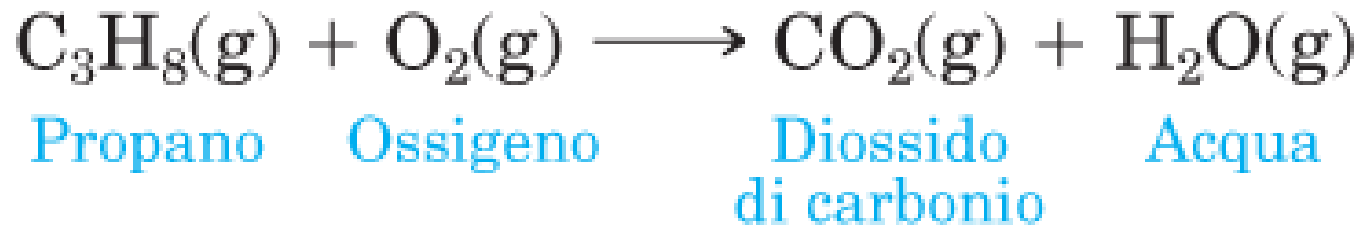
Prodotti chimici: la raffinazione del petrolio, generi alimentari, farmaci, plastiche, fibre sintetiche, fertilizzanti, esplosivi.....

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**.

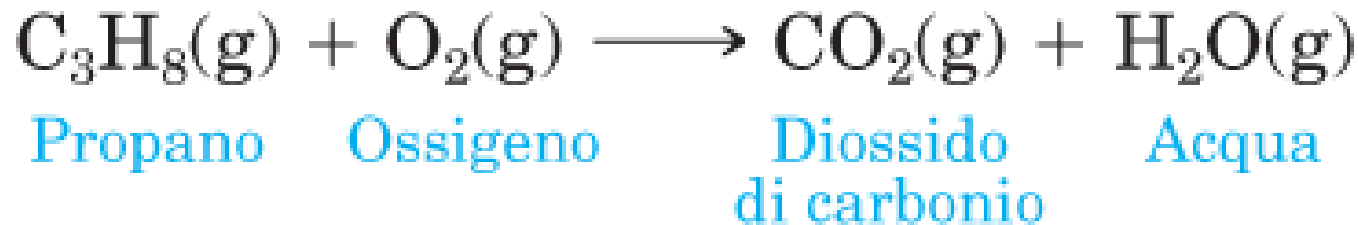


4.2

- Come si bilanciano le reazioni chimiche

Questa equazione chimica non è completa

Non è bilanciata!

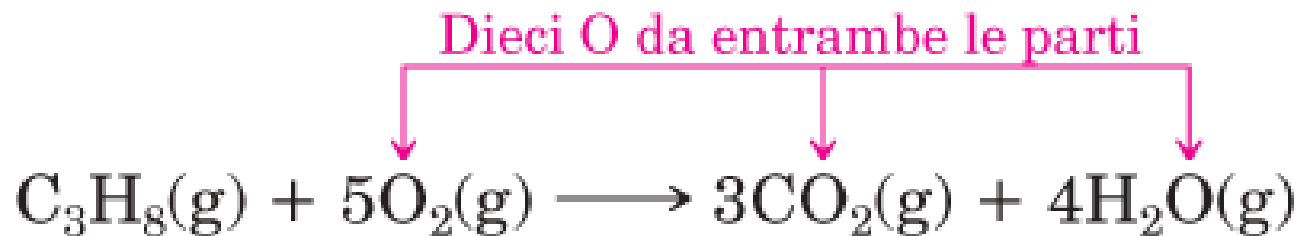


4.2

- 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



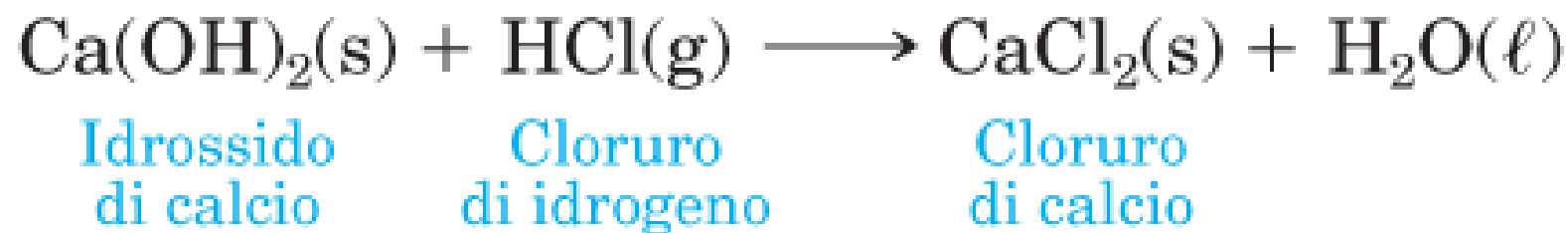


Propano

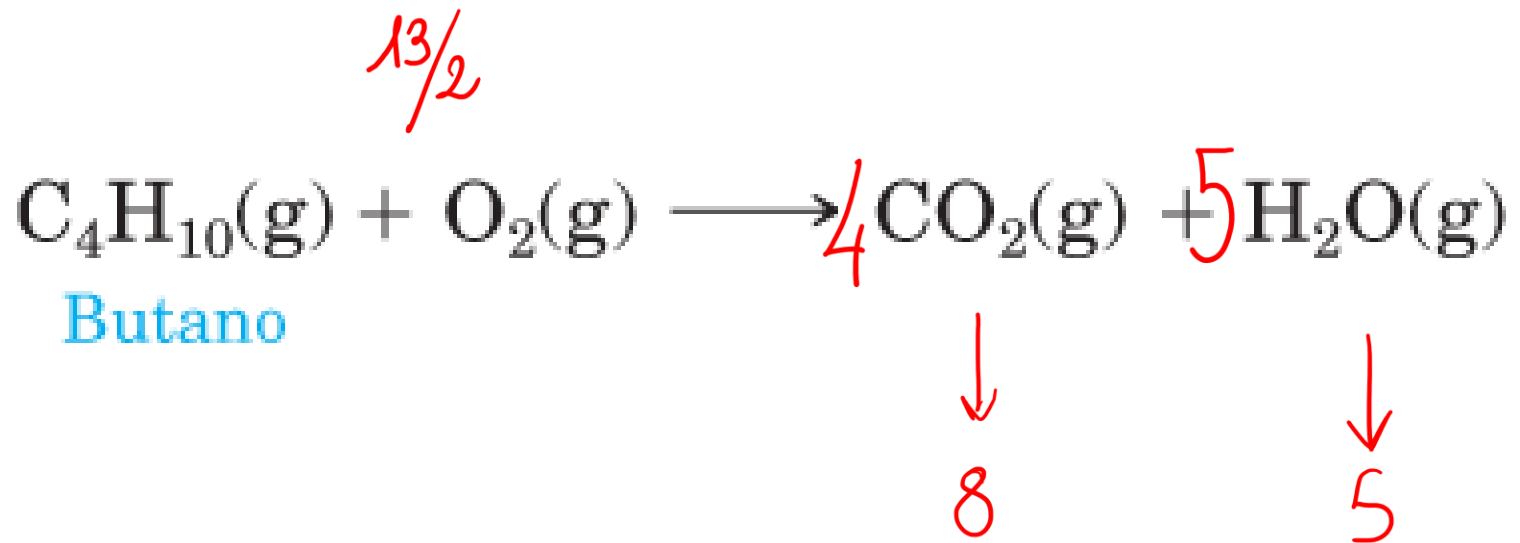


Questo bilanciamento è corretto?

Bilanciare le seguenti reazioni



Bilanciare le seguenti reazioni



Bilanciare le seguenti reazioni

